

高等学校教学参考书

固体物理学

黄昆 编著

人民教育出版社

高等学校教学参考书



固体物理学

黄昆 编著

人民教育出版社

本书是作者根据他于 1964 年以前在北京大学讲授固体物理学课程时所编的讲义修改而成, 1966 年曾由原高等教育出版社排版但未付印, 现为适应当前读者的需要, 暂按原版付印, 以供有关学校师生参考。本书着重阐述固体物理的基本理论和基本知识, 后面几章对一些重要的分支作了介绍, 但仍侧重于基础性和普遍意义较大的内容。

本书可作为综合大学和高等师范院校物理各专业“固体物理学”课程的参考书。

固 体 物 理 学

黄 昆 编 著

人民教育出版社出版(北京沙滩后街)

人民教育出版社印刷厂印装

新华书店北京发行所发行

各地新华书店经售

统一书号 13012·0220 开本 787×1092 $\frac{1}{32}$ 印张 9 $\frac{1}{2}$ /₁₆

字数 236,000 印数 0,091—85,000 定价 0.71 元

1966 年 6 月第 1 版 1979 年 1 月北京第 1 次印刷

目 录

第一章 晶体的几何	1
1-1 晶格及其周期性	1
1-2 晶向、晶面和它们的标志	10
1-3 晶体的宏观对称和点群	13
1-4 晶格的对称性	22
第二章 晶体的结合	28
2-1 晶体的基本结合形式	28
2-2 原子的负电性	34
2-3 元素和化合物晶体结合的规律性	36
2-4 结合能	39
第三章 相图	44
3-1 固体相	45
3-2 两相平衡并存的准静态相变	50
3-3 三相平衡共存与共晶和包晶转变	53
3-4 相转变过程的实例	57
3-5 固溶体的混合焓和自由能	58
3-6 有限和连续固溶体	62
3-7 高温熔化和共晶相图	64
第四章 晶体中的缺陷和扩散	66
4-1 多晶体和晶粒间界	66
4-2 位错	67
4-3 空位、间隙原子的运动和统计平衡	77
4-4 扩散和原子布朗运动	82
4-5 离子晶体中的点缺陷和离子性导电	88
第五章 晶格振动和晶体热学性质	91
5-1 简正振动和量子热容量理论	91
5-2 爱因斯坦和德拜理论	94
5-3 双原子链的振动	102
5-4 三维晶格的振动	110
5-5 晶格的状态方程和热膨胀	115
5-6 晶格的热传导	119
第六章 能带论	124

6-1	一维周期场中电子运动的近似分析	124
6-2	三维周期场中的电子运动	135
6-3	布洛赫函数和简约波矢	141
6-4	能态密度和 π 光谱	147
6-5	原子能级和能带间的联系——紧束缚近似	153
6-6	准经典运动	158
6-7	导体、绝缘体和半导体的能带论	164
第七章 金属电子论		171
7-1	费米统计和电子热容量	172
7-2	功函数和接触电势	183
7-3	分布函数和玻耳兹曼方程	187
7-4	弛豫时间近似和电导率的公式	193
7-5	各向同性弹性散射和弛豫时间	197
7-6	晶格散射和电导	201
第八章 半导体电子论		210
8-1	概述	210
8-2	半导体电子的费米统计分布	218
8-3	电导和霍尔效应	224
8-4	$p-n$ 结	227
第九章 固体的磁性		232
9-1	原子磁性	233
9-2	一般固体磁性概述	241
9-3	顺磁性的统计理论和顺磁性盐	245
9-4	铁磁性	252
9-5	反铁磁性和亚铁磁性	266
第十章 固体的介电性		271
10-1	弹性偶极子的强迫振动	271
10-2	电子极化	274
10-3	离子极化	279
10-4	介电弛豫	282
第十一章 超导电的基本现象和基本规律		287
11-1	超导体的基本电磁学性质	287
11-2	伦敦的电磁学方程	291
11-3	超导转变和热力学	296
索引		302

第一章 晶体的几何

一些天然矿物晶体，如岩盐、石英等，具有规则的几何外形，这是一般熟知的。利用这个特点来鉴别矿物资源，已发展成为重要的方法。正是由于这个缘故，在前两个世纪之中，晶体的几何规则性的研究有很大的发展。当时，已经从理论上推断，晶体的这种宏观的规则性，是晶体中原子、分子规则排列的结果。在这一世纪，X射线衍射方法的发展，直接验证了这一结论。通过几十年的工作，已经测定了大量晶体原子排列的具体形式。

原子的规则排列以及由此产生的几何规则性，是晶体物质共同的也是最基本的特点，是研究晶体的宏观性质和各种微观过程的重要基础。本章将简要地阐明晶体中原子规则排列的一些基本规律和基本概念。

1-1. 晶格及其周期性

(1) 一些晶格的实例

晶体中原子的规则排列一般称为晶体格子，或简称为晶格。这一节先介绍几个最常遇到和比较基本的实例。

把晶格设想成为原子球的规则堆积，有助于我们比较直观地理解晶格的组成。

图 1-1 (a) 表示，在一个平面内，规则排列原子球的一个最简单的形式。如果把这样的原子层叠起来，各层的球完全对应，就形成所谓简单立方晶格。没有实际的晶体采取简单立方晶格，但是更复杂的晶格可以在简单立方晶格基础上加以分析。简单立方晶格的原子球心显然形成一个三维的立方格子的结构，往往用

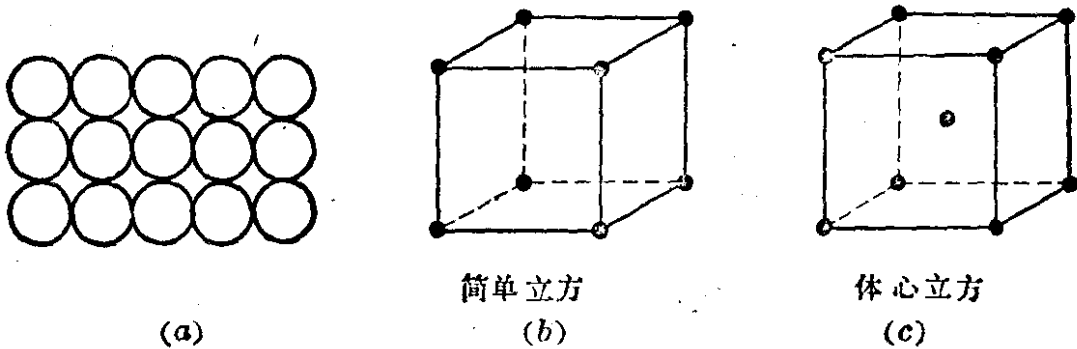


图 1-1

图 1-1 (b) 的形式表示这种晶格结构, 它表示出这个格子的一个典型单元, 整个格子可以看做这样一个单元沿着三个方向的重复排列. 按照同样的理解, 图 1-1 (c) 表示所谓体心立方晶格, 有相当多的金属, 如 Li、Na、K、Rb、Cs、Fe 等元素, 具有体心立方晶格.

图 1-2 表示原子球在一个平面内最紧密排列的方式, 常称为密排面. 把密排面迭起来可以形成原子球最紧密堆积的晶格. 为了堆积最紧密, 在堆积时应当把一层的球心对准另一层的球隙. 仔细分析就会发现, 这样实际上可以形成两种不同的最紧密的晶格

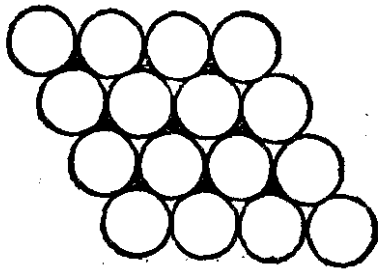


图 1-2

排列. 首先我们注意到, 密排原子层的间隙可以分成两套, 图 1-2 把它们分别涂黑和留为空白. 如称原来的密排层为 *A* 另一密排层可以对准其中任一套间隙, 我们分别称为 *B* 和 *C*. 两种密排的晶格可以表示为

$ABABAB\dots$

(六角密排),

$ABCABCABC\dots$ (立方密排, 或面心立方).

前一种晶格称为六角密排晶格, 常常用图 1-3 的六角单元表示这种结构; 后一种称为立方密排, 或面心立方晶格. 图 1-4 (a) 表示这种晶格的典型单元, 它和简单立方相似, 但在每个立方体中心有一个原子, 图 1-4 (b) 表示面心立方晶格的原子密排面. 很多金属元素具有两种密排结构之一, 例如 Cu、Ag、Au、Al 具有面心立方

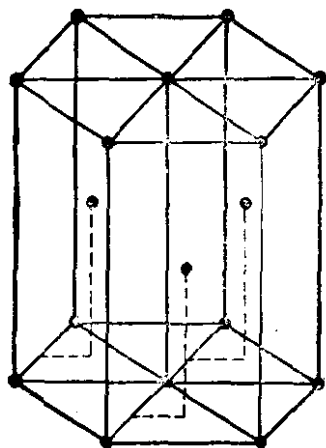
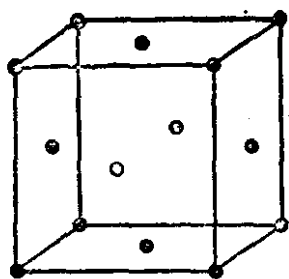
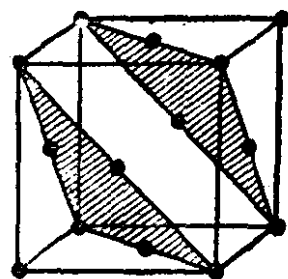


图 1-3 六角密排



(a)



(b)

图 1-4 立方密排

结构, Be、Mg、Zn、Cd 则具有六角密排的结构。

由碳原子形成的金刚石晶格是另一个重要的基本晶格结构。它的典型单元往往用图 1-5 表示。由面心立方的单元的中心到顶角引 8 条对角线, 在其中 4 条的中点上各加一原子就得到金刚石的结构。这个结构的一个重要特点是: 每个原子有 4 个最近邻, 它们正好在一个正四面体的顶角位置, 如图 1-5 所示。除金刚石外, 重要的半导体硅和锗也具有这种晶格结构。

以上所介绍的都是同一种原子组成的元素晶体。下面介绍几种化合物晶体的结构。

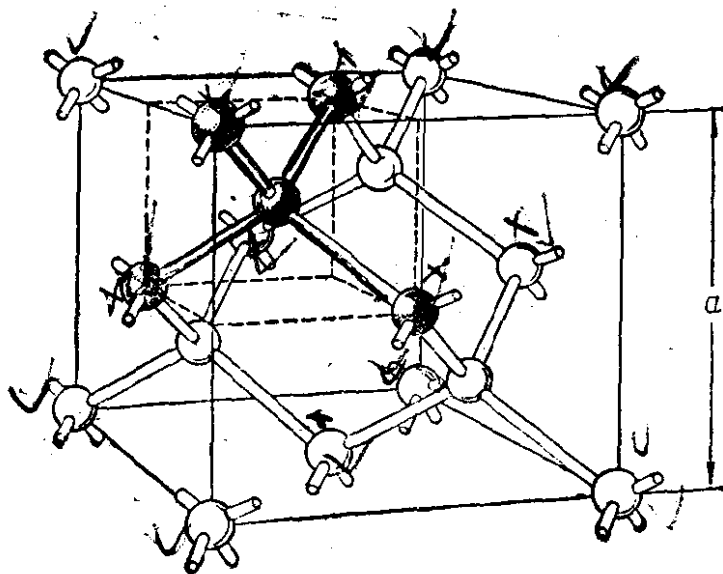


图 1-5 金刚石晶格

最熟知的是岩盐 NaCl 结构,它好像是一个简单立方晶格,但每一行上相间地排列着正的和负的离子 Na^+ 和 Cl^- ,如图 1-6 所示.碱金属 Li、Na、K、Rb 和卤族元素 F、Cl、Br、I 的化合物都具有 NaCl 结构.

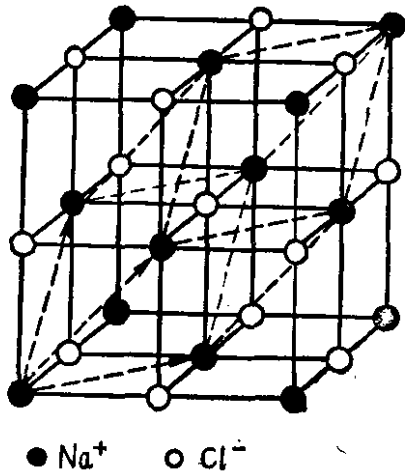


图 1-6 NaCl 的晶体结构

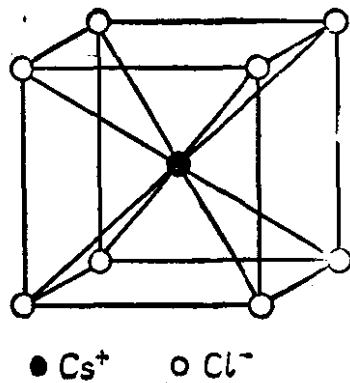


图 1-7 CsCl 晶格

另一基本的化合物晶体结构是 CsCl 晶格,如图 1-7 所示,它和体心立方相仿,只是体心位置为一种离子,顶角为另一种离子.如果把整个晶格画出来,体心的位置和顶角位置实际上完全等效,各占一半,正好容纳数目相等的正负离子.

闪锌矿 ZnS 的晶格是另一种常见的化合物晶体结构.只要在图 1-5 的金刚石立方单元的对角线位置上放一种原子,在面心立方位置上放另一种原子,就得到闪锌矿结构.

以上都是一些常见的典型晶格结构.熟悉这些结构不仅有助于了解下面的讨论,而且,在实际中也是很有用的.

(2) 原胞、基矢量、布拉伐格子

所有晶格的共同特点是具有周期性,它们都可以看做是由一个平行六面体的单元沿三个边的方向重复排列而成.以上各图用一个典型单元来表示各种结构便体现了晶格这一基本特点.

一个晶格最小的周期单元称为晶格的原胞,它的三个棱可选为描述晶格的基本矢量,用 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 表示.图 1-8 用实线表示出

简单立方、体心立方、面心立方、六角密排晶格的原胞和基矢量. 简单立方晶格的立方单元也就是最小的周期单元——原胞, 它的基矢沿三个立方边, 长短相等. 体心立方和面心立方的立方单元都不是最小的周期单元. 在体心立方晶格中, 可以由一个立方顶点到最近的三个体心得到基矢 a_1, a_2, a_3 , 以它们为棱形成的平行六面体构成原胞. 可以验证: 如果立方体边长为 a , 则原胞体积是 $\frac{1}{2}a^3$, 只有立方单元体积的一半. 在面心立方晶格中, 可以由一个立方体顶点到三个近邻的面心引基矢 a_1, a_2, a_3 , 并导出相应的原胞如图 1-8 所示, 可以验证原胞的体积为 $\frac{a^3}{4}$, 只有立方单元体积的 $\frac{1}{4}$. 六角密排晶格的原胞可以选取为图 1-8 示的菱形柱体, 基矢 a_1, a_2 在密排面内, 互成 120° 角, a_3 沿垂直方面. CsCl 晶格的原胞就可以取为图 1-7 中的立方体. NaCl 晶格的原胞在图 1-6 中由虚线描出, 形状和面心立方的原胞相似.

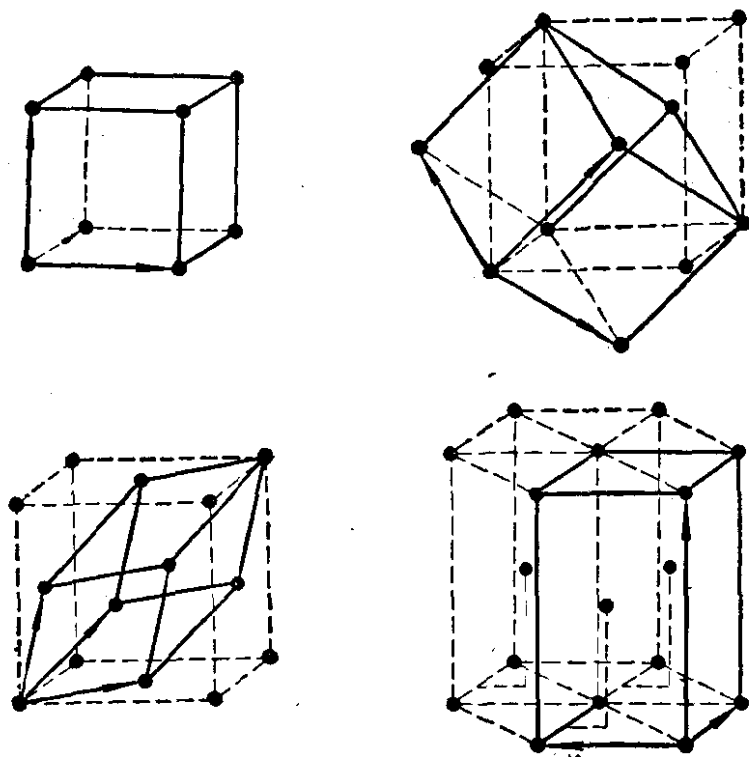


图 1-8 原胞

原胞和基矢具体概括了一个晶格结构的周期性。显然，如果把整个晶格都划分为原胞，那末，不同原胞中的情况将是完全相似的。任意两个原胞位置的差别，用基矢表示将具有下列形式：

$$l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{a}_3,$$

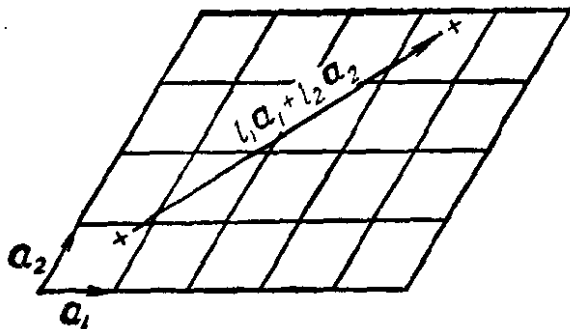


图 1-9 晶格的周期性

l_1, l_2, l_3 为整数。晶格中 \mathbf{x} 点和 $\mathbf{x} + l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{a}_3$ 点的情况将完全相同，因为它们表示两个原胞中相对应的点（见图 1-9 的二维示意图）。如 $V(\mathbf{x})$ 表示 \mathbf{x} 点某一物理量（例如静电势能，电子云密度等），则有

$$V(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x} + l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{a}_3), \quad (1-1)$$

(1-1)式表示 $V(\mathbf{x})$ 是以 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 为周期的三维周期函数。

还可用另外一个形式来概括晶格的周期性：把一个晶格平移

$$l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{a}_3 (l_1, l_2, l_3 \text{ 为任意整数}),$$

结果将与原来晶格完全重合，而没有任何改变。显然，这种描述和(1-1)式所描述的是完全一致的。从这种观点出发，晶格的这个基本特点被称为晶格的平移对称性。 $l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{a}_3$ 常称为晶体的布拉伐格子。在下面我们进一步讨论晶格的宏观对称时，就会看到，为什么要采用这种形式来概括晶格的基本特点。

按照以上所讲，布拉伐格子表征了一个晶格的周期性，或者说，它的平移对称性。根据前面对原胞的描述，CsCl 晶格和简单立方晶格具有相同的原胞、基矢和布拉伐格子，所以从周期性来讲，CsCl 晶格和简单立方晶格是完全相似的。NaCl 晶格则和面心立方晶格具有相同的布拉伐格子，也就是说它们具有完全相似的周期性。

实际晶体的晶格又可以区分为简单晶格和复式晶格。在简单

晶格中,每一个原胞有一个原子;在复式晶格中,每一个原胞包含两个或更多的原子。具有体心立方结构的碱金属和具有面心立方结构的金、银、铜晶体都是简单晶格。虽然从图上看每个原胞在八个顶角都有原子,但是每个原子为八个原胞共有,所以每个原胞平均只有一个原子。 CsCl 和 NaCl 结构则是复式晶格: CsCl 晶格可以看做是在 Cl^- 离子的简单立方原胞中心加一个 Cs^+ 离子,所以,一个原胞包含一个 Cs^+ 离子和一个 Cl^- 离子; NaCl 晶格可以看做是在 Na^+ 离子的面心立方原胞中心加一个 Cl^- 离子,所以,一个原胞包含一个 Na^+ 离子和一个 Cl^- 离子。

简单晶格中所有原子是完全“等价”的,也就是说,它们的性质相同并在晶格中处于完全相似的地位。用比较生动的比喻来说,如果我们占在一个原子上或另一个原子上将察觉不出任何差别。复式晶格实际上表示晶格包含两种或更多种等价的原子(离子)。 NaCl 晶格包含 Na^+ 和 Cl^- 两种等价离子,不同 Na^+ 离子之间是完全等价的,不同 Cl^- 离子之间也是完全等价的。原胞内有几个原子,就表明晶格由几种等价原子构成。复式晶格的结构也可以这样看:每一种等价原子形成一个按该晶格的布拉伐格子排列的简单晶格,复式晶格就是由各等价原子的晶格相互穿套而成。例如, CsCl 的布拉伐格子是简单立方,它可以看成是由一个 Cs^+ 的简单立方格子和一个 Cl^- 的简单立方格子穿套成的; NaCl 的布拉伐格子是面心立方,它可以看成是由一个 Na^+ 的面心立方格子和一个 Cl^- 的面心立方格子穿套而成的。

应当知道,即使是元素晶格,所有原子都是一样的,也可以是复式晶格,这是因为原子虽然相同,它们占据的格点在几何上可以是不等价的。例如,具有六角密排结构的 Be 、 Mg 、 Zn 或具有金刚石结构的 C 、 Si 、 Ge 都是这种情形。六角密排的原胞中,一个格点处在上述的 A 层中,另一个格点处在 B 层中, A 原子和 B 原子的几

何处境是不相同的,例如,从一个A原子来看,上下两层的原子三角形是朝一个方位,但从一个B原子来看,上下两层的原子三角形则是朝着另一个方位.金刚石结构中同样可以区分为A和B两类几何上不等价的格点,把图1-5中立方内的格子点和处在立方面上的格点分别称为A和B,则可以看出A格点的近邻四面体和B格点的近邻四面体在空间具有不同的方位.仔细考查一下,还可以看出,金刚石结构中A格点和B格点各形成一个面心立方晶格.这表明金刚石结构具有面心立方的布拉伐格子,原胞中包含两个格点,一个A格点和一个B格点.

(3) 倒矢量

根据基矢 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 可以引入三个新的矢量

$$\mathbf{b}_1 = \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}, \quad (1-2)$$

称为倒矢量(我们注意各分母是相同的,其绝对值等于原胞的体积.)以后将看到,引入倒矢量使我们能够更加简化地从理论上分析许多晶格的问题.这主要是由于它们具有下列基本性质:

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = \delta_{ij} \begin{cases} = 1, & \text{当 } i = j \\ = 0, & \text{当 } i \neq j \end{cases} \quad (i, j = 1, 2, 3), \quad (1-3)$$

[由倒矢量的定义(1-2)式可以很简单地验证上述关系式].

现在举例说明倒矢量的简单应用.

在晶格问题中,往往需要把矢量 \mathbf{x} 按基矢来表示,即写成

$$\mathbf{x} = \xi_1 \mathbf{a}_1 + \xi_2 \mathbf{a}_2 + \xi_3 \mathbf{a}_3. \quad (1-4)$$

有关的分量 ξ_1, ξ_2, ξ_3 就可以根据(1-3),简便地用倒矢量写出:

$$\xi_1 = \mathbf{x} \cdot \mathbf{b}_1, \quad \xi_2 = \mathbf{x} \cdot \mathbf{b}_2, \quad \xi_3 = \mathbf{x} \cdot \mathbf{b}_3. \quad (1-5)$$

一个具有晶格周期性的函数

$$V(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x} + l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3)$$

可以用倒矢量方便地写成福里哀级数.设想把 \mathbf{x} 按分量 ξ_1, ξ_2, ξ_3

表示, 则 V 做为 ξ_1, ξ_2, ξ_3 的函数将是周期为 1 的周期函数, 因此可以写成福里哀级数:

$$V(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \sum_{h_1 h_2 h_3} V_{h_1 h_2 h_3} e^{2\pi i (h_1 \xi_1 + h_2 \xi_2 + h_3 \xi_3)}, \quad (1-6)$$

其中系数:

$$V_{h_1 h_2 h_3} = \int_0^1 d\xi_1 \int_0^1 d\xi_2 \int_0^1 d\xi_3 e^{-2\pi i (h_1 \xi_1 + h_2 \xi_2 + h_3 \xi_3)} V(\xi_1, \xi_2, \xi_3), \quad (1-7)$$

根据(1-5), 福里哀级数可以直接用矢量 \mathbf{x} 表示出来:

$$V(\mathbf{x}) = \sum_{h_1 h_2 h_3} V_{h_1 h_2 h_3} e^{2\pi i (h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2 + h_3 \mathbf{b}_3) \cdot \mathbf{x}}, \quad (1-8)$$

系数也可以相应地写成

$$\frac{1}{|\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3|} \int_{\Omega} d\mathbf{x} e^{-2\pi i (h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2 + h_3 \mathbf{b}_3) \cdot \mathbf{x}} V(\mathbf{x}), \quad (1-9)$$

积分表示在一个原胞内的体积分.

福里哀级数中指数上的各矢量

$$h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2 + h_3 \mathbf{b}_3 \quad (h_1, h_2, h_3 = \text{整数}) \quad (1-10)$$

构成一个以 $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ 为基矢的格子, 往往称为原来晶格的倒格子.

在以后的讨论中, 我们还要用到这个概念.

(4) 晶体学的单胞和单胞的基矢量

图 1-10 的平面示意图中, 阴影的面积表示两个形状不同的原胞, 它们都是格子的最小周期单元. 显然, 可以有无穷多种方式选取原胞, 它们都同样可以概括格子的周期结构. 在一般的理论分析中, 往往并不需要具体确定如何选取原胞. 但是, 在具体研究某一种晶体时, 就

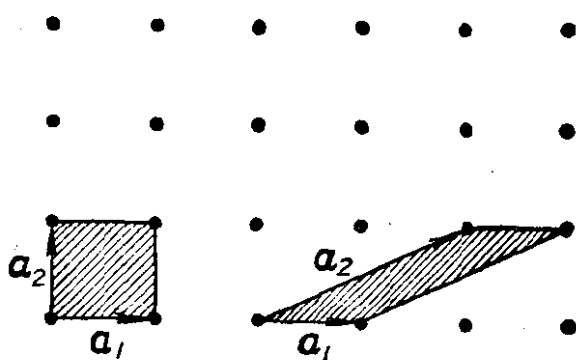


图 1-10 原胞的选取

需要把原胞和基矢规定下来。原胞选取得适当，就可以便利问题的分析，而特别重要的是，要能反映出整个格子的对称性。例如，图 1-10 中方形的原胞就能反映出格子的方形对称特点，而歪斜的原胞则不能。为了这种目的，在晶体学中，已对各种类型的布拉伐格子如何选取周期单元做了统一的规定。

有的格子，无论怎样选取原胞，都不能直接反映出整个格子的对称性。体心和面心立方格子就是这种情形，在图 1-7 中，画出的原胞已经选得尽可能对称，但并不反映整个格子的立方对称性。在这种情况下，晶体学选取的单元便是图 1-7 中的立方，也就是说，为了反映格子的对称性，选取了较大的周期单元。我们将称晶体学中选取的单元为单胞。所以单胞在有些情况下是原胞，在另一些情况下则不是原胞。沿单胞的三个棱所作的三个矢量通常称为单胞的基矢。

1-2. 晶向、晶面和它们的标志

布拉伐格子的格点可以看成分列在一系列相互平行的直线系上，

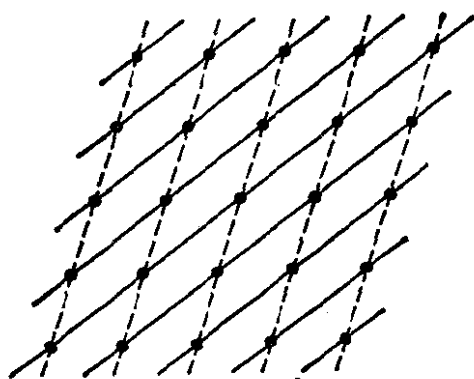


图 1-11

这些直线系称为晶列。图 1-11 用实线和虚线表示出两个不同的晶列，由此可见，同一个格子可以形成方向不同的晶列。每一个晶列定义了一个方向，称为晶向。如果从一个原子沿晶向到最近的原子的位移矢量为

$$l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{a}_3,$$

则晶向就用 l_1, l_2, l_3 来标志，写成 $[l_1l_2l_3]$ 。

布拉伐格子的格点还可以看成分列在平行等距的平面系上。这样的平面称为晶面。和晶列的情况相似，同一个格子可以有无穷多方向不同的晶面系，图 1-12 以简单立方为例画出了三个方向

不同的晶面。

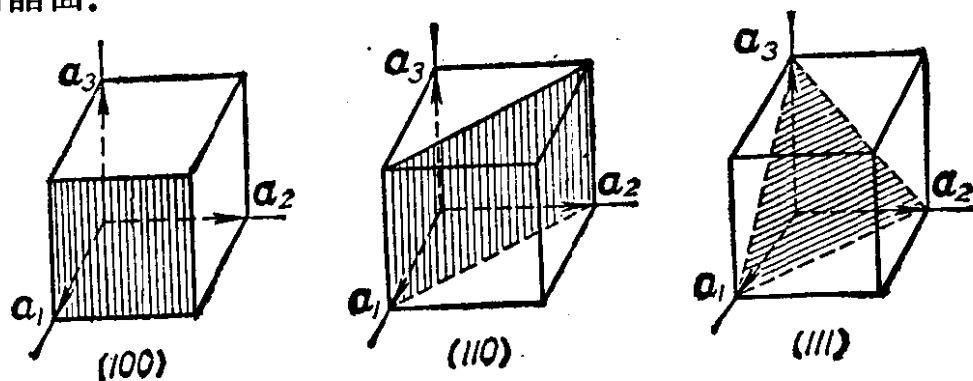


图 1-12 晶面

具体讨论晶体问题时,常常要谈到某些具体晶面,因此,需要有一定的办法标志不同的晶面。常用的是所谓密勒指数。密勒指数可以这样来确定:设想选一格点为原点并作出沿 a_1 、 a_2 、 a_3 的轴线。我们注意,所有格点都在晶面系上,所以必然有一晶面通过原点,其它晶面既然相互等距,将均匀切割各轴。如果,我们从原点顺序地考查一个个面切割第一轴的情况,显然必将遇到一个面切割在 $+a_1$ 或 $-a_1$,因为在 $\pm a_1$ 存在着格点。假使,这是从原点算起的第 h_1 个面,那末晶面系的第一个面的截距必然是 $\pm a_1$ 的分数可以写成

$$a_1/h_1,$$

h_1 为正或负的整数。同样可以论证第一个面在其它两个轴上的截距将为

$$a_2/h_2 \text{ 和 } a_3/h_3. \text{ (} h_2, h_3 \text{ 是整数).}$$

平常就是用 (h_1, h_2, h_3) 来标记这个晶面系,称为密勒指数。 $|h_1|$, $|h_2|$, $|h_3|$ 实际表明等距的晶面分别把基矢 a_1 (或 $-a_1$), a_2 (或 $-a_2$), a_3 (或 $-a_3$) 分割成多少个等份。它们也是以 $|a_1|$, $|a_2|$, $|a_3|$ 为各轴的长度单位所求得的晶面截距的倒数值。如果晶面系和某一个轴平行,截距将为 ∞ ,所以相应的指数将为 0。在图 1-12 中给出了立方晶体的几个晶面的密勒指数。

应用倒矢量可以简练地写出晶面系的方程式。下面我们验证

晶面系 (h_1, h_2, h_3) 中各晶面的方程可以写成

$$(h_1\mathbf{b}_1 + h_2\mathbf{b}_2 + h_3\mathbf{b}_3) \cdot \mathbf{x} = n \quad (1-11)$$

$$(n = -\infty, \dots, -1, 0, 1, \dots, +\infty),$$

方程的几何解释表明

$$h_1\mathbf{b}_1 + h_2\mathbf{b}_2 + h_3\mathbf{b}_3$$

是各面的共同法线方向,而且各面与原点的垂直距离为

$$\frac{|n|}{|h_1\mathbf{b}_1 + h_2\mathbf{b}_2 + h_3\mathbf{b}_3|} \quad (1-12)$$

从而知道, $|n| = 1, 2, 3, \dots$ 顺序地表示, 从通过原点的面算起的第一, 第二, 第三, ……晶面. 由(1-12)得到晶面之间的间距是

$$d = \frac{1}{|h_1\mathbf{b}_1 + h_2\mathbf{b}_2 + h_3\mathbf{b}_3|} \quad (1-13)$$

在(1-11)中, 代入

$$\mathbf{x} = \mathbf{a}_1,$$

就导出从原点画出的矢量 \mathbf{a}_1 端点处在

$$n = h_1$$

的面上. 这说明, 第 h_1 个面通过 \mathbf{a}_1 的端点, 同样论证可用于另外两轴, 可以证明, $\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 将为(1-11)中各面截为 h_2, h_3 段, 从而验证了(1-11)所描述的正是密勒指数为 (h_1, h_2, h_3) 的晶面系.

(1-13)表明, 指数小的晶面系, 晶面有较大的间距. 这样的晶面也是原子比较密集的晶面(因单位体积中原子数目是一定的, 晶面愈稀疏, 每个晶面上原子必定更多. 常见的晶面正是这样的晶面).

我们知道, 密勒指数原来是从密勒研究宏观晶体的表面的规律性中发展出来的. 宏观晶体外形的规则性是由于, 一种晶体的外表面总是由某些具有特定方位的平面形成的. 密勒发现, 如果选三个面的交线为轴, 并用另一个面在它们上面的截距 a, b, c 做为沿各轴的长度单位, 则任意其它的面在轴上的截距的倒数成简