

Индексы Миллера атомных плоскостей

- Ориентация плоскости описывается путем задания вектора нормали к этой плоскости.
- Поскольку мы знаем, что для всякого семейства атомных плоскостей существуют нормальные к нему векторы обратной решетки, то естественно выбрать в качестве нормали такой вектор обратной решетки.
- Чтобы сделать этот выбор однозначным, выбирают наименьший из указанных векторов. Таким путем мы определяем **индексы Миллера** данной плоскости.
- Индексы Миллера некоторой атомной плоскости — это координаты наименьшего вектора обратной решетки, перпендикулярного данной плоскости, в системе координат, заданной основными векторами обратной решетки.

Плоскость, имеющая индексы Миллера h, k, l , перпендикулярна вектору обратной решетки $hb_1 + kb_2 + lb_3$.

Определенные подобным образом индексы Миллера должны быть целыми числами, поскольку любой вектор обратной решетки представляет собой линейную комбинацию трех основных векторов, взятых с целыми коэффициентами. Для задания нормали к поверхности используется наименьший перпендикулярный вектор обратной решетки, поэтому, индексы h, k, l не могут иметь общего множителя и зависят от выбора основных векторов.

В простой кубической решетке Бравэ обратная решетка является простой кубической и индексы Миллера служат координатами вектора нормали к плоскости, взятыми в в кубической координатной системе.

- Г. ц. к. и о. ц. к. решетки Бравэ обычно описывают с помощью условной кубической ячейки, как простые кубические решетки с базисами. Поскольку каждая атомная плоскость в г. ц. к. и о. ц. к. решетках представляет собой атомную плоскость соответствующей простой кубической решетки, для обозначения атомных плоскостей можно воспользоваться тем же способом задания индексов, что и в простой кубической решетке.

Существует одна геометрическая интерпретация индексов Миллера для прямой решетки, которую иногда используют в качестве альтернативного способа их определения. Поскольку плоскость решетки с индексами Миллера h, k, l перпендикулярна вектору обратной решетки $\mathbf{K} = hb_1 + kb_2 + lb_3$, то при определенном выборе постоянной A она будет содержаться в геометрической плоскости, определяемой уравнением $\mathbf{K} \cdot \mathbf{r} = A$.

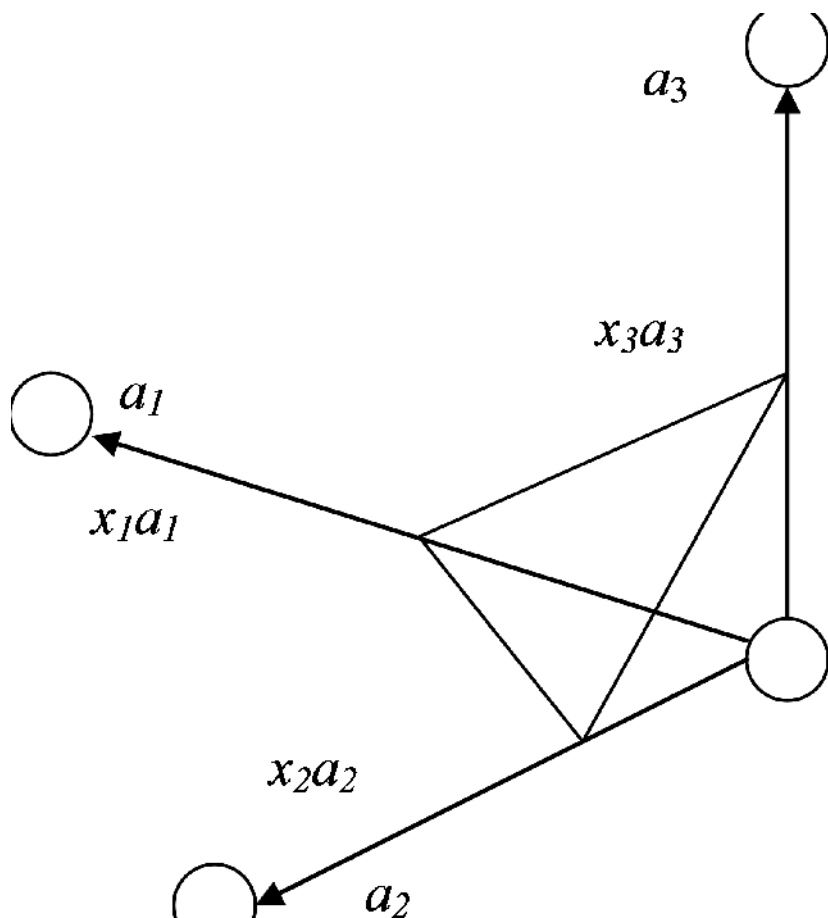
Эта плоскость пересекает оси, направленные по основным векторам \mathbf{a}_i прямой решетки, в некоторых точках $x_1\mathbf{a}_1$, $x_2\mathbf{a}_2$, $x_3\mathbf{a}_3$, где x_i определяются требованием того, что величина $x_i\mathbf{a}_i$ удовлетворяла уравнению плоскости: $\mathbf{K} \cdot (x_i\mathbf{a}_i) = A$. Так как $\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_1 = 2\pi h$, $\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_2 = 2\pi k$ и $\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_3 = 2\pi l$, получаем

$$x_1 = \frac{A}{2\pi h}, \quad x_2 = \frac{A}{2\pi k}, \quad x_3 = \frac{A}{2\pi l}.$$

Следовательно, отрезки, отсекаемые на осях кристалла атомной плоскостью, обратно пропорциональны индексам Миллера этой плоскостью.

Кристаллографы переворачивают всю проблему с ног на голову и определяют индексы Миллера как набор не имеющих общего множителя целых чисел, которые обратно пропорциональны длинам отрезков, отсекаемых кристаллической плоскостью на осях кристалла:

$$h : k : l = \frac{1}{x_1} : \frac{1}{x_2} : \frac{1}{x_3}.$$



Кристаллографическое определение инд
 Миллера атомных плоскостей.
 Плоскость - часть
 атомной плоскости
 Индексы Миллера обратно пропорцио-
 нальны x_i .

правила обозначения направлений

Атомные плоскости обычно обозначают, указывая в скобках их индексы Миллера (h , k , l). Например, в кубической системе плоскость с нормалью $(4, -2, 1)$ или с кристаллографической точки зрения плоскость, отсекающую отрезки $(1, -2, 4)$ на осях куба] называют плоскостью $(4, -2, 1)$. Запятые опускают и, чтобы не возникало путаницы, записывают n вместо $-n$, получая тем самым более простое обозначение (421) . Чтобы такие символы можно было однозначно интерпретировать, необходимо знать, как выбраны используемые оси. Когда кристалл имеет кубическую симметрию, всегда принято использовать оси простой кубической ячейки.

Для направлений применяют квадратные, а не круглые скобки. Так, пространственная диагональ простой кубической решетки имеет направление $[111]$, а в общем случае радиус-вектор $n_1a_1 + n_2a_2 + n_3a_3$ имеет направление $[n_1n_2n_3]$ по отношению к началу отсчета.

Обозначение всех других семейств, которые эквивалентны в силу симметрии кристалла. Например, в кубическом кристалле плоскости (100) , (010) и (001) эквивалентны. В совокупности их обозначают как плоскости $\{100\}$; в общем случае для обозначения плоскостей (hkl) и всех других плоскостей, эквивалентных им в силу симметрии кристалла, пользуются символом $\{hkl\}$. Сходное правило применяют и в отношении направлений: направления $[100]$, $[010]$, $[001]$, $[\bar{1}00]$, $[0\bar{1}0]$ и $[00\bar{1}]$ в кубическом кристалле называют направлениями $\langle 100 \rangle$.

