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 решетке $K = hb_1+kb_2+lb_3$,то при определенном выборе постоянной A она будет содержаться в геометрической плоскости, определяемой уравнением $\mathbf{K \cdot r = A}$.

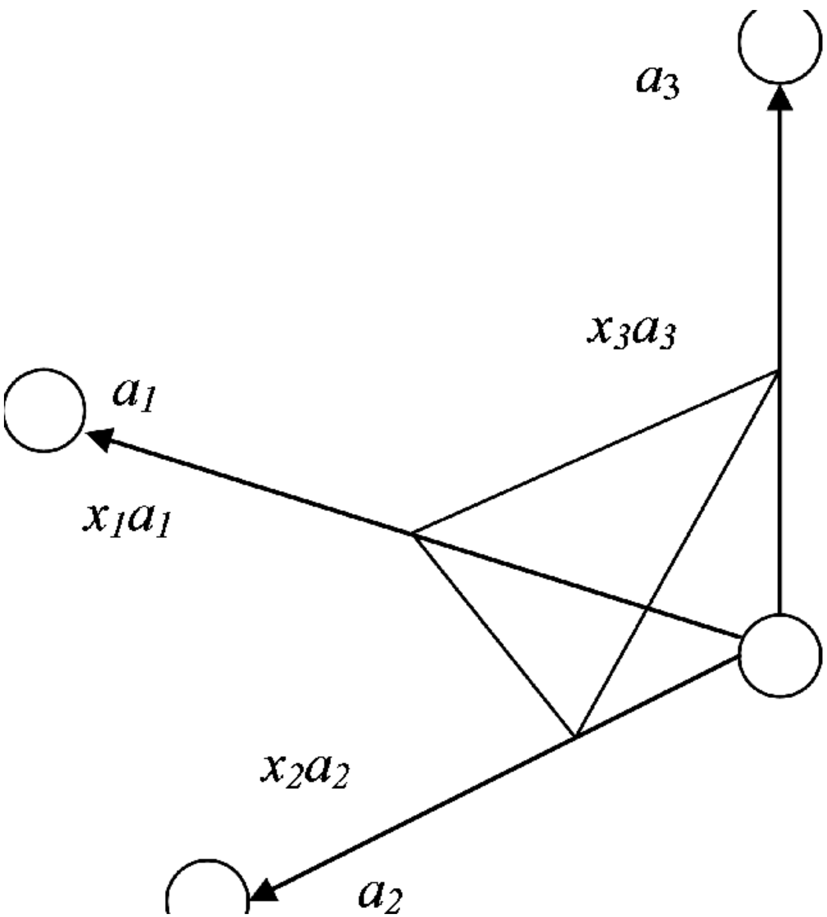
Эта плоскость пересекает оси, направленные по основным векторам $\mathbf{a}_i$ прямой решетки, в некоторых точках x_1a_1, x_2a_2, x_3a_3, где x_i определяются требованием того, что величина $x_i a_i$ удовлетворяла уравнению плоскости : $\mathbf{K}\cdot(x_i a_i) = \mathbf{A}$. Так как $\mathbf{K}\cdot \mathbf{a}_1 = 2\pi \mathbf{h}$, $\mathbf{K}\cdot \mathbf{a}_2 = 2\pi \mathbf{k}$ и $\mathbf{K}\cdot \mathbf{a}_3 = 2\pi \mathbf{l}$, получаем

$$X_1 = \frac{A}{2\pi h}, \qquad X_2 = \frac{A}{2\pi k}, \qquad X_3 = \frac{A}{2\pi l}.$$

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:

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

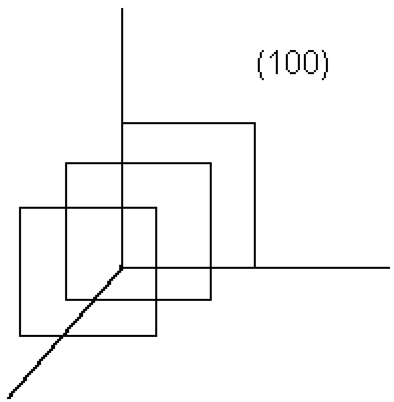


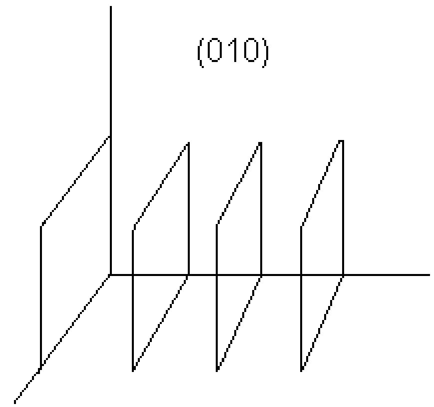
Кристаллографическое определение инд
Миллера атомных плоскостей.
Плоскость - часть
атомной плоскости
Индексы Миллера обратно пропорцио-
нальны x_i.

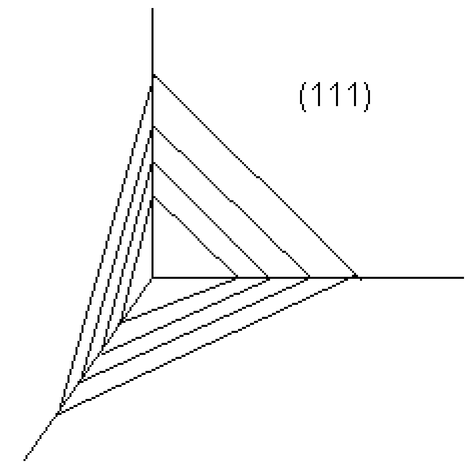
правила обозначения направлений

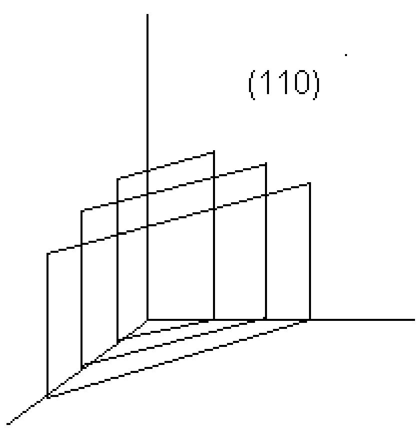
Атомные плоскости обычно обозначают, указывая в скобках их индексы Миллера (h, k, l). Например, в кубической системе плоскость с нормалью (4, - 2, 1) или с кристаллографической точки зрения плоскость, отсекающую отрезки (1, -2, 4) на осях куба] называют плоскостью(4,-2, 1). Запятые опускают и, чтобы 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.

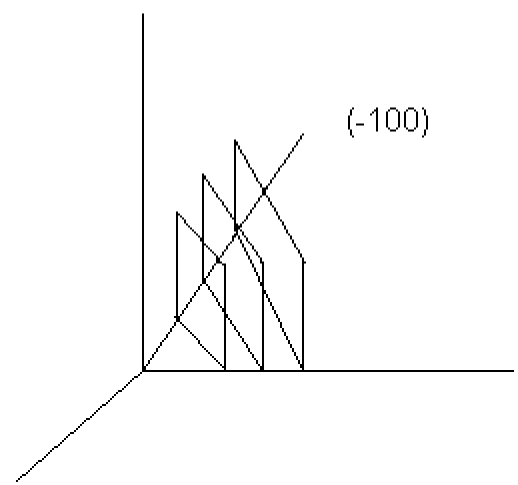
Для направлений применяют квадратные, а не круглые скобки. Так, пространственная диагональ простой кубической решетки имеет направление [111], а в общем случае радиус-вектор $n_1a_1 + n_2a_2 + n_3a_3$ имеет направление $[n_1n_2n_3]$ по отношению к началу отсчета.
Обозначение всех других семейств, которые 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], $[\bar{1}00]$ $[\bar{0}10]$и $[00\bar{1}]$ в кубическом кристалле называют направлениями < 100>.

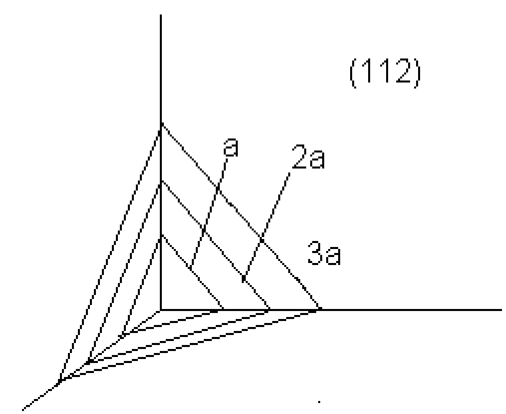

(100)


(010)


(111)


(110)


(-100)


(112)
a
2a
3a