[已提交至《推精品 促繁荣——国家精品课程建设六周年回顾》一书（在编）]

晶体点阵面间距的矢量分析与导出

齐兴义

(北京航空航天大学化学与环境学院　北京　100191；qixy@buaa.edu.cn；010-82317126)

摘要　采用矢量分析方法，建立了晶体点阵面间距（$d_{h^*k^*l^*}$）与晶轴矢量（$\underline{a}$、$\underline{b}$ 和 $\underline{c}$）和面指数 ($h^*k^*l^*$) 的关系式：$\frac{a}{h^*}\times\frac{b}{k^*}\bullet\frac{c}{l^*}=|s|d_{h^*k^*l^*}$，并由此推导出三斜晶系的 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式；结合三斜晶系的 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式和其它各晶系 (立方、六方、四方、正交和单斜晶系) 的晶格常数特征，进一步推导出相应晶系的 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式。

晶体点阵面间距（$d_{h^*k^*l^*}$）是一个重要的晶体结构参数，其表达式—$d_{h^*k^*l^*}$ 公式是以独立晶格常数 (a、b、c、α、β或γ) 和面指数 ($h^*k^*l^*$) 为自变量的函数表达式；因受限于晶系的特征对称性，不同晶系有不同的独立晶格常数和 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式。

三斜晶系 (点阵) 所属点群为 C_i，有 6 个独立晶格常数：a、b、c、α、β和γ，三斜晶系的 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式如式 (1) 所示[1]

$$\begin{aligned}d_{h^*k^*l^*} &= V/[h^{*2}b^2c^2\sin^2\alpha + k^{*2}a^2c^2\sin^2\beta + l^{*2}a^2b^2\sin^2\gamma \\ &\quad + 2h^*k^*abc^2(\cos\alpha\cos\beta-\cos\gamma) \\ &\quad + 2k^*l^*a^2bc(\cos\beta\cos\gamma-\cos\alpha) \\ &\quad + 2h^*l^*ab^2c(\cos\alpha\cos\gamma-\cos\beta)]^{1/2} \cdots\cdots(1)\end{aligned}$$

式 (1) 中的 $V=abc(1-\cos^2\alpha-\cos^2\beta-\cos^2\gamma+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma)^{1/2}$，为晶胞体积。

六方晶系 (点阵) 所属点群为 D_{6h}，有 2 个独立晶格常数：a 和 c。 此外，$a=b\neq c$，$\alpha=\beta=90^o$，$\gamma=120^o$。将上述晶格常数代入式 (1)，则得六方晶系的 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式

$$\begin{aligned}d_{h^*k^*l^*} &= aac\,(1-\cos^2 90^o-\cos^2 90^o-\cos^2 120^o+2\cos 90^o\cos 90^o\cos 120^o)^{1/2} \\ &\quad /[h^{*2}a^2c^2\sin^2 90^o+k^{*2}a^2c^2\sin^2 90^o+l^{*2}a^2a^2\sin^2 120^o \\ &\quad +2h^*k^*aac^2(\cos 90^o\cos 90^o-\cos 120^o) \\ &\quad +2k^*l^*a^2ac\,(\cos 90^o\cos 120^o-\cos 90^o) \\ &\quad +2h^*l^*aa^2c\,(\cos 90^o\cos 120^o-\cos 90^o)]^{1/2} \\ &= a/[\frac{4}{3}(h^{*2}+h^*k^*+k^{*2})+\frac{l^{*2}}{(c/a)^2}]^{1/2}\cdots\cdots(2)\end{aligned}$$

由此可见，结合式 (1) 和晶格常数特征即可推导出指定晶系的 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式。

1 $\frac{\underline{a}}{h^*}\times\frac{\underline{b}}{k^*}\bullet\frac{\underline{c}}{l^*}=|\underline{s}|d_{h^*k^*l^*}$ 关系式的建立

在晶体定向后，一组面指数为 $(h^*k^*l^*)$ 的平面点阵可表示为

$$h^*x+k^*y+l^*z=N\cdots\cdots(3)$$

式 (3) 中的 $N=0,\ \pm1,\ \pm2,\cdots\cdots$。若 $N=1$，则由式 (3) 确定的平面点阵 $M\,(h^*x+k^*y+l^*z=1)$为一离坐标系原点 O 最近的平面点阵，M 在 x、y 和 z 三个坐标轴上的截数分别为 $1/h^*$、$1/k^*$和 $1/l^*$。当此三截数与晶轴矢量 $\underline{a}$、$\underline{b}$ 和 $\underline{c}$ 依次组合时，生成三个新矢量 $\underline{a}/h^*$、$\underline{b}/k^*$和 $\underline{c}/l^*$。

由图 1 可见：① $\underline{a}/h^*$、$\underline{b}/k^*$和 $\underline{c}/l^*$围成平行六面体 H_1 (图 1-*II*)。

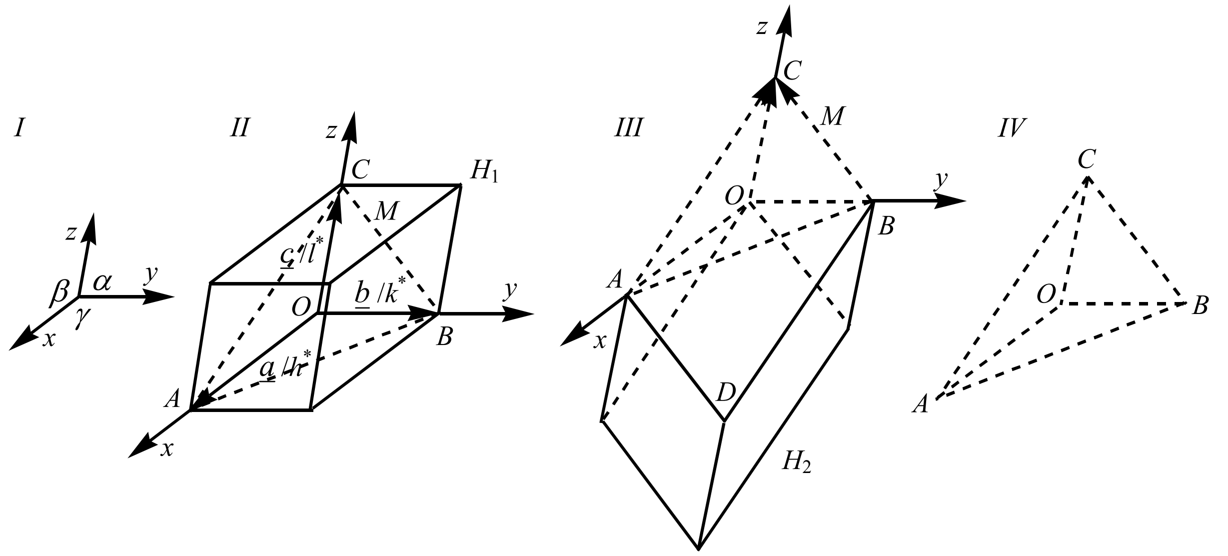

图 1　*I*：α、β 和 γ 在坐标系中的配置；*II*：$\underline{a}/h^*$、$\underline{b}/k^*$、$\underline{c}/l^*$ 和平行六面体 H_1；

II*：$\underline{AC}$、$\underline{BC}$、$\underline{OC}$ 和平行六面体 H_2；*IV*：四面体 *OABC

矢量运算结果表明 H_1 的体积 V_1 为 $\underline{a}/h^*$、$\underline{b}/k^*$和 $\underline{c}/l^*$的混积

$$V_1=\frac{\underline{a}}{h^*}\times\frac{\underline{b}}{k^*}\bullet\frac{\underline{c}}{l^*}\cdots\cdots(4)$$

② 矢量 $\underline{AC}$ ($\underline{c}/l^*$-$\underline{a}/h^*$)、$\underline{BC}$ ($\underline{c}/l^*$-$\underline{b}/k^*$) 和 $\underline{OC}$ ($\underline{c}/l^*$) 围成平行六面体 H_2 (图 1-*III*)。

H_2 的体积 V_2 为 $\underline{AC}$、$\underline{BC}$ 和 $\underline{OC}$ 的混积

$$\begin{aligned}V_2&=\underline{AC}\times\underline{BC}\bullet\underline{OC}\\&=(\frac{\underline{c}}{l^*}-\frac{\underline{a}}{h^*})\times(\frac{\underline{c}}{l^*}-\frac{\underline{b}}{k^*})\bullet\frac{\underline{c}}{l^*}\\&=(\frac{\underline{a}\times\underline{b}}{h^*k^*}+\frac{\underline{b}\times\underline{c}}{k^*l^*}+\frac{\underline{c}\times\underline{a}}{l^*h^*})\bullet\frac{\underline{c}}{l^*}\\&=|\underline{s}|d_{h^*k^*l^*}\cdots\cdots(5)\end{aligned}$$

式 (5) 中的 $\underline{s}=\frac{\underline{a}\times\underline{b}}{h^*k^*}+\frac{\underline{b}\times\underline{c}}{k^*l^*}+\frac{\underline{c}\times\underline{a}}{l^*h^*}$，$|\underline{s}|$ 为平行四边形 $ACBD$ 的面积，$d_{h^*k^*l^*}$ 为点阵面间距。

③ H_1 和 H_2 均含有四面体 $OABC$ (图 1-*II~III*)。因一平行六面体体积是其所包含四面体体积的六倍，所以 H_1 和 H_2 的体积 V_1 和 V_2 是相同的，即 $V_1=V_2$。联立式 (4) 和 (5) 得

$$\frac{\underline{a}}{h^*}\times\frac{\underline{b}}{k^*}\bullet\frac{\underline{c}}{l^*}=|\underline{s}|d_{h^*k^*l^*}\cdots\cdots(6)$$

2 三斜晶系的 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式导出

平方式 (6) 得

$$d^2_{h^*k^*l^*}=(\frac{\underline{a}}{h^*}\times\frac{\underline{b}}{k^*}\bullet\frac{\underline{c}}{l^*})^2/|\underline{s}|^2=(\frac{\underline{a}}{h^*}\times\frac{\underline{b}}{k^*}\bullet\frac{\underline{c}}{l^*})^2/\underline{s}\bullet\underline{s}\cdots\cdots(7)$$

由式 (7) 可见，$d_{h^*k^*l^*}$ 公式的确定已转化为 $(\frac{\underline{a}}{h^*}\times\frac{\underline{b}}{k^*}\bullet\frac{\underline{c}}{l^*})^2$ 和 $\underline{s}\bullet\underline{s}$ 的化简。

已知 $\underline{a}$ 、$\underline{b}$ 、$\underline{c}$ 和 $\underline{d}$ 的矢量运算有关系式

$$(\underline{a}\times\underline{b}\bullet\underline{c})^2=\begin{vmatrix}\underline{a}\bullet\underline{a} & \underline{a}\bullet\underline{b} & \underline{a}\bullet\underline{c}\\ \underline{b}\bullet\underline{a} & \underline{b}\bullet\underline{b} & \underline{b}\bullet\underline{c}\\ \underline{c}\bullet\underline{a} & \underline{c}\bullet\underline{b} & \underline{c}\bullet\underline{c}\end{vmatrix}\cdots\cdots(8)$$

$$(\underline{a}\times\underline{b})\bullet(\underline{c}\times\underline{d})=(\underline{a}\bullet\underline{c})(\underline{b}\bullet\underline{d})-(\underline{a}\bullet\underline{d})(\underline{b}\bullet\underline{c})\cdots\cdots(9)$$

依据图 1-*I~II* 及式 (8) 和 (9)，可将 $(\frac{\underline{a}}{h^*}\times\frac{\underline{b}}{k^*}\bullet\frac{\underline{c}}{l^*})^2$ 和 $\underline{s}\bullet\underline{s}$ 转化为 $\underline{a}$ 、$\underline{b}$ 和 $\underline{c}$ 的矢量点乘，进而由式 (7) 确定 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式。

$$\begin{aligned}(\frac{\underline{a}}{h^*}\times\frac{\underline{b}}{k^*}\bullet\frac{\underline{c}}{l^*})^2&=\frac{1}{(h^*k^*l^*)^2}(\underline{a}\times\underline{b}\bullet\underline{c})^2\\&=\frac{1}{(h^*k^*l^*)^2}V^2\\&=\frac{1}{(h^*k^*l^*)^2}\begin{vmatrix}\underline{a}\bullet\underline{a} & \underline{a}\bullet\underline{b} & \underline{a}\bullet\underline{c}\\ \underline{b}\bullet\underline{a} & \underline{b}\bullet\underline{b} & \underline{b}\bullet\underline{c}\\ \underline{c}\bullet\underline{a} & \underline{c}\bullet\underline{b} & \underline{c}\bullet\underline{c}\end{vmatrix}\\&=\frac{1}{(h^*k^*l^*)^2}\{\underline{a}\bullet\underline{a}[(\underline{b}\bullet\underline{b})(\underline{c}\bullet\underline{c})-(\underline{c}\bullet\underline{b})(\underline{b}\bullet\underline{c})]\\&-\underline{a}\bullet\underline{b}[(\underline{b}\bullet\underline{a})(\underline{c}\bullet\underline{c})-(\underline{c}\bullet\underline{a})(\underline{b}\bullet\underline{c})]\\&+\underline{a}\bullet\underline{c}[(\underline{b}\bullet\underline{a})(\underline{c}\bullet\underline{b})-(\underline{c}\bullet\underline{a})(\underline{b}\bullet\underline{b})]\}\end{aligned}$$

$$=\frac{1}{(h^*k^*l^*)^2}\Big[a^2(b^2c^2-b^2c^2\cos\alpha)$$

$$-ab\cos\gamma(abc^2\cos\gamma-abc^2\cos\alpha\cos\beta)$$

$$+ac\cos\beta(ab^2c\cos\alpha\cos\gamma-ab^2c\cos\beta)\ \Big]$$

$$=(\frac{abc}{h^*k^*l^*})^2(1-\cos^2\alpha-\cos^2\beta-\cos^2\gamma+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma)\cdots\cdots(10)$$

$$\underline{s}\bullet\underline{s}=(\frac{\underline{a}\times\underline{b}}{h^*k^*}+\frac{\underline{b}\times\underline{c}}{k^*l^*}+\frac{\underline{c}\times\underline{a}}{l^*h^*})\bullet(\frac{\underline{a}\times\underline{b}}{h^*k^*}+\frac{\underline{b}\times\underline{c}}{k^*l^*}+\frac{\underline{c}\times\underline{a}}{l^*h^*})$$

$$=[(\frac{\underline{a}\times\underline{b}}{h^*k^*})\bullet(\frac{\underline{a}\times\underline{b}}{h^*k^*})+(\frac{\underline{a}\times\underline{b}}{h^*k^*})\bullet(\frac{\underline{b}\times\underline{c}}{k^*l^*})+(\frac{\underline{a}\times\underline{b}}{h^*k^*})\bullet(\frac{\underline{c}\times\underline{a}}{l^*h^*})$$

$$+(\frac{\underline{b}\times\underline{c}}{k^*l^*})\bullet(\frac{\underline{b}\times\underline{c}}{k^*l^*})+(\frac{\underline{b}\times\underline{c}}{k^*l^*})\bullet(\frac{\underline{a}\times\underline{b}}{h^*k^*})+(\frac{\underline{b}\times\underline{c}}{k^*l^*})\bullet(\frac{\underline{c}\times\underline{a}}{l^*h^*})$$

$$+(\frac{\underline{c}\times\underline{a}}{l^*h^*})\bullet(\frac{\underline{c}\times\underline{a}}{l^*h^*})+(\frac{\underline{c}\times\underline{a}}{l^*h^*})\bullet(\frac{\underline{a}\times\underline{b}}{h^*k^*})+(\frac{\underline{c}\times\underline{a}}{l^*h^*})\bullet(\frac{\underline{b}\times\underline{c}}{k^*l^*})]$$

$$=[(\frac{\underline{a}\times\underline{b}}{h^*k^*})\bullet(\frac{\underline{a}\times\underline{b}}{h^*k^*})+(\frac{\underline{b}\times\underline{c}}{k^*l^*})\bullet(\frac{\underline{b}\times\underline{c}}{k^*l^*})+(\frac{\underline{c}\times\underline{a}}{l^*h^*})\bullet(\frac{\underline{c}\times\underline{a}}{l^*h^*})$$

$$+2(\frac{\underline{a}\times\underline{b}}{h^*k^*})\bullet(\frac{\underline{b}\times\underline{c}}{k^*l^*})+2(\frac{\underline{b}\times\underline{c}}{k^*l^*})\bullet(\frac{\underline{c}\times\underline{a}}{l^*h^*})+2(\frac{\underline{c}\times\underline{a}}{l^*h^*})\bullet(\frac{\underline{a}\times\underline{b}}{h^*k^*})]\cdots\cdots(11)$$

式 (11) 中的各项矢量算式可依据式 (9) 化简如下

$$(\frac{\underline{a}\times\underline{b}}{h^*k^*})\bullet(\frac{\underline{a}\times\underline{b}}{h^*k^*})=\frac{1}{(h^*k^*)^2}(\underline{a}\times\underline{b})\bullet(\underline{a}\times\underline{b})$$

$$=\frac{1}{(h^*k^*)^2}[(\underline{a}\bullet\underline{a})(\underline{b}\bullet\underline{b})-(\underline{a}\bullet\underline{b})(\underline{b}\bullet\underline{a})]$$

$$=\frac{a^2b^2}{(h^*k^*)^2}(1-\cos^2\gamma)=\frac{a^2b^2}{(h^*k^*)^2}\sin^2\gamma\cdots\cdots(12)$$

$$(\frac{\underline{b}\times\underline{c}}{k^*l^*})\bullet(\frac{\underline{b}\times\underline{c}}{k^*l^*})=\frac{1}{(k^*l^*)^2}(\underline{b}\times\underline{c})\bullet(\underline{b}\times\underline{c})$$

$$=\frac{1}{(k^*l^*)^2}[(\underline{b}\bullet\underline{b})(\underline{c}\bullet\underline{c})-(\underline{b}\bullet\underline{c})(\underline{c}\bullet\underline{b})]$$

$$=\frac{b^2c^2}{(k^*l^*)^2}(1-\cos^2\alpha)=\frac{b^2c^2}{(k^*l^*)^2}\sin^2\alpha\cdots\cdots(13)$$

$$(\frac{\underline{c}\times\underline{a}}{l^*h^*})\bullet(\frac{\underline{c}\times\underline{a}}{l^*h^*})=\frac{1}{(h^*l^*)^2}(\underline{c}\times\underline{a})\bullet(\underline{c}\times\underline{a})$$

$$=\frac{1}{(h^*l^*)^2}[(\underline{c}\bullet\underline{c})(\underline{a}\bullet\underline{a})-(\underline{c}\bullet\underline{a})(a\bullet\underline{c})]$$

$$=\frac{a^2c^2}{(h^*l^*)^2}(1-\cos^2\beta)=\frac{a^2c^2}{(h^*l^*)^2}\sin^2\beta\cdots\cdots(14)$$

$$\left(\frac{\underline{a}\times\underline{b}}{h^*k^*}\right)\bullet\left(\frac{\underline{b}\times\underline{c}}{k^*l^*}\right)=\frac{1}{h^*k^{*2}l^*}[(\underline{a}\times\underline{b})\bullet(\underline{b}\times\underline{c})]$$

$$=\frac{1}{h^*k^{*2}l^*}[(\underline{a}\bullet\underline{b})(\underline{b}\bullet\underline{c})-(\underline{a}\bullet\underline{c})(\underline{b}\bullet\underline{b})]$$

$$=\frac{ab^2c}{h^*k^{*2}l^*}(\cos\alpha\cos\gamma-\cos\beta)\cdots\cdots(15)$$

$$\left(\frac{\underline{b}\times\underline{c}}{k^*l^*}\right)\bullet\left(\frac{\underline{c}\times\underline{a}}{l^*h^*}\right)=\frac{1}{h^*k^*l^{*2}}(\underline{b}\times\underline{c})\bullet(\underline{c}\times\underline{a})$$

$$=\frac{1}{h^*k^*l^{*2}}[(\underline{b}\bullet\underline{c})(\underline{c}\bullet\underline{a})-(\underline{b}\bullet\underline{a})(\underline{c}\bullet\underline{c})]$$

$$=\frac{abc^2}{h^*k^*l^{*2}}(\cos\alpha\cos\beta-\cos\gamma)\cdots\cdots(16)$$

$$\left(\frac{\underline{c}\times\underline{a}}{l^*h^*}\right)\bullet\left(\frac{\underline{a}\times\underline{b}}{h^*k^*}\right)=\frac{1}{h^{*2}k^*l^*}(\underline{c}\times\underline{a})\bullet(\underline{a}\times\underline{b})$$

$$=\frac{1}{h^{*2}k^*l^*}[(\underline{c}\bullet\underline{a})(\underline{a}\bullet\underline{b})-(\underline{c}\bullet\underline{b})(\underline{a}\bullet\underline{a})]$$

$$=\frac{a^2bc}{h^{*2}k^*l^*}(\cos\beta\cos\gamma-\cos\alpha)\cdots\cdots(17)$$

将式 (12) ~ (17) 代入式 (11) 得

$$\underline{s}\bullet\underline{s}=\frac{b^2c^2}{(k^*l^*)^2}\sin^2\alpha+\frac{a^2c^2}{(h^*l^*)^2}\sin^2\beta+\frac{a^2b^2}{(h^*k^*)^2}\sin^2\gamma$$
$$+2\frac{ab^2c}{h^*k^{*2}l^*}(\cos\alpha\cos\gamma-\cos\beta)$$
$$+2\frac{abc^2}{h^*k^*l^{*2}}(\cos\alpha\cos\beta-\cos\gamma)$$
$$+2\frac{a^2bc}{h^{*2}k^*l^*}(\cos\beta\cos\gamma-\cos\alpha)\cdots\cdots(18)$$

将式 (10) 和 (18) 代入式 (7) 得

$$d^2_{h^*k^*l^*}=\left(\frac{\underline{a}}{h^*}\times\frac{\underline{b}}{k^*}\bullet\frac{\underline{c}}{l^*}\right)^2/\,\underline{s}\bullet\underline{s}=\frac{1}{(h^*k^*l^*)^2}V^2/|\underline{s}|^2$$
$$=V^2/[h^{*2}b^2c^2\sin^2\alpha+k^{*2}a^2c^2\sin^2\beta+l^{*2}a^2b^2\sin^2\gamma$$
$$+2h^*l^*ab^2c(\cos\alpha\cos\gamma-\cos\beta)$$
$$+2h^*k^*abc^2(\cos\alpha\cos\beta-\cos\gamma)$$
$$+2k^*l^*a^2bc(\cos\beta\cos\gamma-\cos\alpha)]\cdots\cdots(19)$$

$$V^2=(abc)^2(1-\cos^2\alpha-\cos^2\beta-\cos^2\gamma+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma)\cdots\cdots(20)$$

取式 (19) 和 (20) 的算术平方根，则得三斜晶系的 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式和 V 公式

$$\begin{aligned} d_{h^*k^*l^*} &= V/[h^{*2}b^2c^2\sin^2\alpha + k^{*2}a^2c^2\sin^2\beta + l^{*2}a^2b^2\sin^2\gamma \\ &+ 2h^*l^*ab^2c(\cos\alpha\cos\gamma - \cos\beta) \\ &+ 2h^*k^*abc^2(\cos\alpha\cos\beta - \cos\gamma) \\ &+ 2k^*l^*a^2bc(\cos\beta\cos\gamma - \cos\alpha)]^{1/2} \cdots\cdots(1) \end{aligned}$$

$$V = abc(1-\cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma)^{1/2}$$

∵ $2d_{hkl}\sin\theta_{hkl} = \lambda$ (*Bragg* 方程)，$d_{hkl} = \dfrac{d_{h^*k^*l^*}}{n}$，$h = nh^*$，$k = nk^*$，$l = nl^* \cdots\cdots(21)$

式 (21) 中的 θ_{hkl} 为 *Bragg* 角，λ 为 *X*-射线的波长，*n* 为衍射级次，(*hkl*) 为 *Laue* 方程中的衍射指标。

∴

$$\begin{aligned} d_{hkl} &= \frac{d_{h^*k^*l^*}}{n} \\ &= V/n[h^{*2}b^2c^2\sin^2\alpha + k^{*2}a^2c^2\sin^2\beta + l^{*2}a^2b^2\sin^2\gamma \\ &+ 2h^*l^*ab^2c(\cos\alpha\cos\gamma - \cos\beta) \\ &+ 2h^*k^*abc^2(\cos\alpha\cos\beta - \cos\gamma) \\ &+ 2k^*l^*a^2bc(\cos\beta\cos\gamma - \cos\alpha)]^{1/2} \\ &= V/[h^2b^2c^2\sin^2\alpha + k^2a^2c^2\sin^2\beta + l^2a^2b^2\sin^2\gamma \\ &+ 2hlab^2c(\cos\alpha\cos\gamma - \cos\beta) \\ &+ 2hkabc^2(\cos\alpha\cos\beta - \cos\gamma) \\ &+ 2kla^2bc(\cos\beta\cos\gamma - \cos\alpha)]^{1/2} \cdots\cdots(22) \end{aligned}$$

由式 (1) 和 (22) 可见，除 ($h^*k^*l^*$) 和 (hkl) 的符号差异外，$d_{h^*k^*l^*}$ 和 d_{hkl} 有相同形式的函数表达式。

3 单斜、正交、四方和立方晶系的 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式

单斜晶系 (点阵) 所属点群为 C_{2h}，有 4 个独立晶格常数：*a*、*b*、*c* 和 *β*。此外，$a \neq b \neq c$，$\beta > 90^\circ$，$\alpha = \gamma = 90^\circ$。将上述晶格常数代入式 (1)，则得单斜晶系的 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式

$$\begin{aligned} d_{h^*k^*l^*} &= abc(1-\cos^2 90^\circ - \cos^2\beta - \cos^2 90^\circ + 2\cos 90^\circ\cos\beta\cos 90^\circ)^{1/2} \\ &/[h^{*2}b^2c^2\sin^2 90^\circ + k^{*2}a^2c^2\sin^2\beta + l^{*2}a^2b^2\sin^2 90^\circ \\ &+ 2h^*l^*ab^2c(\cos 90^\circ\cos 90^\circ - \cos\beta) \\ &+ 2h^*k^*abc^2(\cos 90^\circ\cos\beta - \cos 90^\circ) \\ &+ 2k^*l^*a^2bc(\cos\beta\cos 90^\circ - \cos 90^\circ)]^{1/2} \\ &= \sin\beta/[(\frac{h^*}{a})^2 + (\frac{k^*}{b})^2\sin^2\beta + (\frac{l^*}{c})^2 - 2\frac{h^*l^*}{ac}\cos\beta]^{1/2} \cdots\cdots(23) \end{aligned}$$

正交晶系 (点阵) 所属点群为 D_{2h}，有 3 个独立晶格常数：a、b 和 c。此外，$a \neq b \neq c$，$\alpha = \beta = \gamma = 90^o$。将上述晶格常数代入式 (1) 或 (23)，均可得正交晶系的 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式，如代入式 (23) 得

$$\begin{aligned} d_{h^*k^*l^*} &= \sin 90^o / [(\frac{h^*}{a})^2 + (\frac{k^*}{b})^2 \sin^2 90^o + (\frac{l^*}{c})^2 - 2\frac{h^*l^*}{ac}\cos 90^o]^{1/2} \\ &= 1/[(\frac{h^*}{a})^2 + (\frac{k^*}{b})^2 + (\frac{l^*}{c})^2]^{1/2} \cdots\cdots(24) \end{aligned}$$

四方晶系 (点阵) 所属点群为 D_{4h}，有 2 个独立晶格常数：a 和 c ($a = b \neq c$)；立方晶系 (点阵) 所属点群为 O_h，有 1 个独立晶格常数：a ($a = b = c$)。此外，四方和立方晶系的 3 个角度晶格常数均为 90^o，即 $\alpha = \beta = \gamma = 90^o$。因此，依据式 (24) 和上述晶格常数特征，可得四方和立方晶系的 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式。

四立晶系

$$\begin{aligned} d_{h^*k^*l^*} &= 1/[(\frac{h^*}{a})^2 + (\frac{k^*}{a})^2 + (\frac{l^*}{c})^2]^{1/2} \\ &= 1/(\frac{h^{*2} + k^{*2}}{a^2} + \frac{l^{*2}}{c^2})^{1/2} \cdots\cdots(25) \end{aligned}$$

立方晶系

$$\begin{aligned} d_{h^*k^*l^*} &= 1/[(\frac{h^*}{a})^2 + (\frac{k^*}{a})^2 + (\frac{l^*}{a})^2]^{1/2} \\ &= a/(h^{*2} + k^{*2} + l^{*2})^{1/2} \cdots\cdots(26) \end{aligned}$$

需指出的是 ① 因三斜晶系有相同形式的 $d_{h^*k^*l^*}$ 和 d_{hkl} 公式，故其它各晶系亦有相同形式的 $d_{h^*k^*l^*}$ 和 d_{hkl} 公式；② 若三方晶系的正当点阵单位为简六方 (hP，点阵点群：D_{6h}) 或为含有 3 个点阵点的复格子—R 心六方 (hR，点阵点群：D_{3d})，则其 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式可表示为六方晶系的 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式；③ 若三方晶系的正当点阵单位取成含有 1 个点阵点的菱面体 (点阵点群：D_{3d})，独立晶格常数为：a 和α，且 $a = b = c$，$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^o$，则其 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式可依据式 (1) 确定为

$$\begin{aligned} d_{h^*k^*l^*} &= aaa(1 - \cos^2\alpha - \cos^2\alpha - \cos^2\alpha + 2\cos\alpha\cos\alpha\cos\alpha)^{1/2} \\ &/[h^{*2}a^2a^2\sin^2\alpha + k^{*2}a^2a^2\sin^2\alpha + l^{*2}a^2a^2\sin^2\alpha \\ &+ 2h^*l^*aa^2a(\cos\alpha\cos\alpha - \cos\alpha) \\ &+ 2h^*k^*aaa^2(\cos\alpha\cos\alpha - \cos\alpha) \\ &+ 2k^*l^*a^2aa(\cos\alpha\cos\alpha - \cos\alpha)]^{1/2} \\ &= a(1 - 3\cos^2\alpha + 2\cos^3\alpha)^{1/2} \\ &/[(h^{*2} + k^{*2} + l^{*2})\sin^2\alpha + 2(h^*l^* + h^*k^* + k^*l^*)(\cos\alpha - 1)\cos\alpha]^{1/2} \cdots\cdots(27) \end{aligned}$$

4 结束语

综上所述，$d_{h^*k^*l^*}$ 公式的导出繁杂冗长，核心问题是确定三斜晶系的 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式。对于本科生的结

构化学教学，可只列出 7 个晶系的 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式，着重阐明 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式的物理含义和在晶体结构 *X*-射线衍射分析中的应用；对于研究生的固体化学和结晶化学等课程的教学，则应针对 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式的演绎过程作适当的讲解，使学生了解与掌握 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式的来龙去脉，以便在将来的科研工作中能对 $d_{h^*k^*l^*}$ 公式运用自如。

本文得到北京航空航天大学首届研究生精品课程（固体化学）建设项目资助，特此致谢。

参 考 文 献

1 周公度, 段连运. 结构化学基础. 第四版. 北京: 北京大学出版社, 2008