第 29 卷 第 8 期 物 理 学 报 Vol. 29, No. 8
1980 年 8 月 ACTA PHYSICA SINICA Aug., 1980

点 阵 平 面 几 何 学

杨奇斌 叶恒强
(中国科学院金属研究所)

1979 年 10 月 5 日收到

提 要

本文用欧几里得算法，给出求解基矢变换对应矩阵的解析表达式. 分析了点阵平面及复合点阵平面的画法，并指出其应用范围.

一、引 言

许多晶体学问题都涉及到点阵平面的分析，如晶界及表面结构，外延生长及相界面上原子及阵点匹配，马氏体相变中惯析面的分析，形变孪生中的原子运动，刃型位错的结构分析等. 另一方面，电子衍射图的分析实际上就是倒易空间中二维点阵平面的分析，因此，点阵平面几何学一直受到人们的重视. Jaswon 和 Dove[1], Bevis[2], Nicholas[3,4] 及 Gruber[5] 等人曾对此进行研究，方法虽在不断改进，但直到目前为止仍采取尝试法求解，似嫌繁琐. 本文将初等数论中的欧几里得算法用于点阵平面分析. Bonnet[6] 曾指出用欧几里得算法求亚点阵基矢，但未曾有人将此算法用于点阵平面分析. 本文在欧几里得算法的基础上，将线性不定方程的解法改造成为手算方便并适于电子计算机用迭代法求解的计算过程，并用 FORTRAN 语言编成电子计算机的计算程序，给出了求解基矢变换对应矩阵的解析表达式，因而避免了尝试法. 本文仅涉及点阵平面几何学，对其应用不作专门分析.

二、点阵平面的画法

一个点阵平面由二基矢线性组合而成，故画二维点阵平面只要求出二基矢的长度及夹角即可，一般要求基矢为约化矢. 画法可按下述步骤进行.

1. 基矢变换

点阵平面基矢与空间点阵基矢密切相关. 设任意空间点阵基矢为 $\boldsymbol{a}_1^{(1)}$, $\boldsymbol{a}_2^{(1)}$, $\boldsymbol{a}_3^{(1)}$, 将其变换为另一组基矢 $\boldsymbol{a}_1^{(2)}$, $\boldsymbol{a}_2^{(2)}$, $\boldsymbol{a}_3^{(2)}$, 使得 $\boldsymbol{a}_1^{(2)}$, $\boldsymbol{a}_2^{(2)}$ 处于零级 $(h_1h_2h_3)$ 点阵平面上，$\boldsymbol{a}_3^{(2)}$ 的端点处于一级 $(h_1h_2h_3)$ 点阵平面上，如图 1 所示. 令

$$\boldsymbol{a}_i^{(2)} = \sum_{j=1}^{3} b_{ij}\boldsymbol{a}_j^{(1)}. \tag{1}$$

写成矩阵的形式:

$$A^{(2)} = BA^{(1)}. \tag{2}$$

根据 Gruber[5] 的分析,要求 B 的矩阵元满足下列诸式:

$$b_{11}h_1 + b_{12}h_2 + b_{13}h_3 = 0, \tag{3.1}$$

$$b_{21}h_1 + b_{22}h_2 + b_{23}h_3 = 0, \tag{3.2}$$

$$b_{31}h_1 + b_{32}h_2 + b_{33}h_3 = 1, \tag{3.3}$$

以及

$$\begin{vmatrix} b_{12} & b_{13} \\ b_{22} & b_{23} \end{vmatrix} = h_1, \quad \begin{vmatrix} b_{13} & b_{11} \\ b_{23} & b_{21} \end{vmatrix} = h_2, \quad \begin{vmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{vmatrix} = h_3, \tag{3.4}$$

但 (3.4) 式中的三式任取一式即可.

h_i 为给定的已知数, b_{ij} 为未知数. 一共九个未知数只要求满足 (3.1) 至 (3.4) 四个方程,故 (3.1) 至 (3.4) 式为不定方程式组,可用欧几里得算法求解.

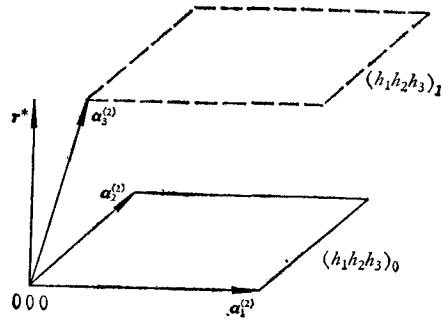

图 1 基矢变换示意图

按辗转相除法求 h_2, h_3 的最大公约数 (h_2, h_3)[7,8], 得不完全的商数 $q_1, q_2, \cdots, q_s, \cdots, q_n$($q_s$ 为整数)及余数 $r_1, r_2, \cdots, r_s, \cdots, r_n$ (r_n 为整数),直至 r_n 为零. 其中

$$r_{s-2} = q_s r_{s-1} + r_s,$$

$$r_{n-1} = (h_2, h_3),$$

而 h_3 相当于 r_0, h_2 相当于 r_{-1}. 令 $g_{n-1} = 0$, $g_{n-2} = 1$ 及

$$g_{s-2} = q_s g_{s-1} + g_s, \tag{3.5}$$

令

$$c_s = \begin{vmatrix} r_s & r_{s-1} \\ g_s & g_{s-1} \end{vmatrix},$$

则得 $c_0 = (-1)c_1 = (-1)^2 c_2 = \cdots = (-1)^{n-1}c_{n-1}$.

而

$$c_{n-1} = \begin{vmatrix} r_{n-1} & r_{n-2} \\ g_{n-1} & g_{n-2} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} r_{n-1} & r_{n-2} \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = r_{n-1}, \text{ 故得 } c_0/r_{n-1} = (-1)^{n-1},$$

及

$$c_0/r_{n-1} = \begin{vmatrix} r_0/r_{n-1} & r_{-1}/r_{n-1} \\ g_0 & g_{-1} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} h_3/r_{n-1} & h_2/r_{n-1} \\ g_0 & g_{-1} \end{vmatrix} = (-1)^{n-1}. \tag{3.6}$$

令 $b_{11} = 0$, $b_{12} = -h_3/r_{n-1}$, $b_{13} = h_2/r_{n-1}$, 则 b_{11}, b_{12}, b_{13} 满足 (3.1) 式. 将 b_{12}, b_{13} 的值代入 (3.6) 式,得

$$\begin{vmatrix} -b_{12} & b_{13} \\ g_0 & g_{-1} \end{vmatrix} = (-1)^{n-1} \text{ 或 } \begin{vmatrix} b_{12} & b_{13} \\ (-1)^{n-1}h_1 g_0 & (-1)^{n-1}h_1 g_{-1} \end{vmatrix} = h_1.$$

将上式与 (3.4) 式的第 1 式对比,得

$$b_{22} = (-1)^{n-1}h_1 g_0, \quad b_{23} = (-1)^n h_1 g_{-1}.$$

令 $b_{21} = r_{n-1}$, 则 b_{21}, b_{22}, b_{23} 满足 (3.2) 式.

如只要画出零级点阵平面，就只需求 $\boldsymbol{\alpha}_1^{(2)}$, $\boldsymbol{\alpha}_2^{(2)}$ 二基矢即可. 如要画出高级点阵平面在零级点阵平面上的投影，还要求第三基矢 $\boldsymbol{\alpha}_3^{(2)}$.

用对 h_2, h_3 同样的办法对 h_1, r_{n-1} 进行辗转相除和其他一系列运算可得 n' 及 g'_0, g'_{-1}. 同样有

$$c'_0 = \begin{vmatrix} r_{n-1} & h_1 \\ g'_0 & g'_{-1} \end{vmatrix} = (-1)^{n'-1}. \tag{3.7}$$

将 b_{2i} 的值代入 (3.2) 式，可得

$$r_{n-1} = (-1)^n g_0 h_2 + (-1)^{n-1} g_{-1} h_3.$$

将上式代入 (3.7) 式，得

$$(-1)^{n'} g'_0 h_1 + (-1)^{n+n'-1} g_0 g'_{-1} h_2 + (-1)^{n+n'} g_{-1} g'_{-1} h_3 = 1.$$

将上式与(3.3)式对比，得

$$b_{31} = g'_0 (-1)^{n'}, \tag{3.8}$$

$$b_{32} = (-1)^{n+n'-1} g_0 g'_{-1}, \tag{3.9}$$

$$b_{33} = (-1)^{n+n'} g_{-1} g'_{-1}. \tag{3.10}$$

最后得矩阵 B 的解析表达式为

$$\mathrm{B} = \begin{bmatrix} 0 & -h_3/r_{n-1} & h_2/r_{n-1} \\ r_{n-1} & (-1)^{n-1} h_1 g_0 & (-1)^n h_1 g_{-1} \\ (-1)^{n'} g'_0 & (-1)^{n+n'-1} g_0 g'_{-1} & (-1)^{n+n'} g_{-1} g'_{-1} \end{bmatrix}.$$

顺便指出

1) 对 h_2, h_3 进行辗转相除时，h_2, h_3 的相对大小和符号可不予考虑.

2) 当 $h_2 = 0$ 时，$r_{n-1} = h_3$，当 $h_3 = 0$ 时，$r_{n-1} = h_2$. 当 $h_2 = h_3 = 0$ 时，则属于 (100) 面的情况可特殊处理.

应用举例：

将二基矢变换到 (8 35 20) 点阵平面，求基矢变换对应矩阵 B.

1) 对 35, 20 进行辗转相除：

$$\begin{array}{rl|l} & 20 & 35 \\ (q_1) & 1 & 20 \\ \hline & (r_1)\ 15 & 20 \\ & (q_2)\ 1 & 15 \\ \hline & (r_2)\ 5 & 15 \\ & (q_3)\ 3 & 15 \\ \hline & (r_3) & 0 \end{array}$$

表 1　g_s 的求法

S	3	2	1	0	−1
q_s	3	1	1		
g_s		0	1	1	2

2) 由 q_s 及 g_{n-1}, g_{n-2}, 并根据 (3.5) 式计算出 g_s 诸值，如表 1 所示. 显然 $n = 3$, $g_0 = 1$, $g_{-1} = 2$, $r_{n-1} = r_2 = 5$, 由此得出

$$b_{11} = 0,\ b_{12} = -4,\ b_{13} = 7,\ b_{21} = 5,\ b_{22} = 8,\ b_{23} = -16.$$

3) 用同样的办法对 8, 5 进行辗转相除，得 $n' = 4$, $g'_0 = 2$, $g'_{-1} = 3$. 代入 (3.8) 等三式，得 $b_{31} = 2$, $b_{32} = 3$, $b_{33} = -6$, 故得

$$B=\begin{bmatrix}0 & -4 & 7\\ 5 & 8 & -16\\ 2 & 3 & -6\end{bmatrix}.$$

上述解法的优点是可以从给出的 $(h_1h_2h_3)$ 三指数直接求解，手算方便，并可作为电子计算机程序设计的数学模型. 比 Gruber[5] 等的尝试法减少计算次数 (h_i 值愈大，效果愈明显).

2. 将 $\boldsymbol{\alpha}_1^{(2)}$, $\boldsymbol{\alpha}_2^{(2)}$ 进行约化，求出点阵平面的二约化矢(参阅文献[9]).

3. 求二基矢的长度及夹角[2,5].

4. 按二约化矢的长度及夹角画出点阵平面.

5. 求出 $\boldsymbol{\alpha}_3^{(2)}$ 在 $(h_1h_2h_3)$ 点阵平面的投影坐标:

令
$$\boldsymbol{\alpha}_3^{(2)}=u_1\boldsymbol{\alpha}_1^{(2)}+u_2\boldsymbol{\alpha}_2^{(2)}+u_3\boldsymbol{r}^*,$$

其中
$$\boldsymbol{r}^*+\boldsymbol{\alpha}_1^{(2)},\quad \boldsymbol{r}^*+\boldsymbol{\alpha}_2^{(2)},$$

则得
$$\boldsymbol{\alpha}_3^{(2)}\boldsymbol{\alpha}_1^{(2)}=u_1\boldsymbol{\alpha}_1^{(2)}\boldsymbol{\alpha}_1^{(2)}+u_2\boldsymbol{\alpha}_1^{(2)}\boldsymbol{\alpha}_2^{(2)},$$
$$\boldsymbol{\alpha}_3^{(2)}\boldsymbol{\alpha}_2^{(2)}=u_1\boldsymbol{\alpha}_2^{(2)}\boldsymbol{\alpha}_1^{(2)}+u_2\boldsymbol{\alpha}_2^{(2)}\boldsymbol{\alpha}_2^{(2)},$$
$$\begin{bmatrix}u_1\\ u_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\alpha}_1^{(2)}\boldsymbol{\alpha}_1^{(2)} & \boldsymbol{\alpha}_1^{(2)}\boldsymbol{\alpha}_2^{(2)}\\ \boldsymbol{\alpha}_2^{(2)}\boldsymbol{\alpha}_1^{(2)} & \boldsymbol{\alpha}_2^{(2)}\boldsymbol{\alpha}_2^{(2)}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{\alpha}_3^{(2)}\boldsymbol{\alpha}_1^{(2)}\\ \boldsymbol{\alpha}_3^{(2)}\boldsymbol{\alpha}_2^{(2)}\end{bmatrix}. \tag{3.11}$$

令
$$G^{(1)}=A^{(1)}\tilde{A}^{(1)},\quad G^{(2)}=A^{(2)}\tilde{A}^{(2)}. \tag{3.12}$$

根据上式得
$$G^{(2)}=BG^{(1)}\tilde{B}. \tag{3.13}$$

$G^{(1)}$ 为三行三列的方阵，其矩阵元为正点阵基矢的标量积，也称为度量张量[2,10]. $G^{(2)}$ 与 $G^{(1)}$ 有同样的性质，只不过矩阵元有所区别.

根据 (3.12) 式和 (3.13) 式，得
$$g_{ij}^{(1)}=\boldsymbol{\alpha}_i\boldsymbol{\alpha}_j,\quad g_{ij}^{(2)}=\sum_{k=1}^{3}\sum_{l=1}^{3}b_{ik}g_{kl}^{(1)}b_{jl}.$$

将 $G^{(2)}$ 的矩阵元代入 (3.11) 式，得
$$\begin{bmatrix}u_1\\ u_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}g_{11}^{(2)} & g_{12}^{(2)}\\ g_{21}^{(2)} & g_{22}^{(2)}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}g_{31}^{(2)}\\ g_{32}^{(2)}\end{bmatrix}.$$

u_1, u_2 即为 $\boldsymbol{\alpha}_3^{(2)}$ 在 $(h_1h_2h_3)$ 点阵平面的投影坐标.

6. 按 $\boldsymbol{\alpha}_3^{(2)}$ 的投影坐标 u_1, u_2 画出高级点阵平面在零级点阵平面的投影图.

只要将 $\boldsymbol{\alpha}_i^{(1)}(i=1,2,3)$ 换成 $\boldsymbol{\alpha}_i^{(1)*}$ 即可按上述步骤画出 $(u_1u_2u_3)^*$ 倒易面来.

有心点阵的处理办法可参阅文献 [2, 4, 5].

正点阵平面的画法可用于晶体表面结构分析，马氏体相变中惯析面的分析，形变孪生的原子运动及刃型位错结构分析等. 倒易点阵平面的画法可用于电子衍射图的指数标定.

三、有取向关系两相的复合点阵平面的画法

复合点阵平面的画法可按如下步骤进行:

1. 求二点阵平面约化矢对应矩阵：

设有二任意点阵 L_1, L_2, 其基矢分别为 $\boldsymbol{a}_i^{(1)}$, $\boldsymbol{a}_i^{(2)}(i=1,2,3)$, 对应矩阵为 S,

$$\mathrm{A}^{(2)}=\mathrm{SA}^{(1)}, \tag{4}$$

$\mathrm{A}^{(1)}$, $\mathrm{A}^{(2)}$ 为 L_1, L_2 的基矢列矩阵. S 一般不是有理矩阵[1],如为有理矩阵，则存在复合点阵平面,其二点阵平面的基矢对应矩阵的求法如下：

设 L_1 的 $(h_1^{(1)}h_2^{(1)}h_3^{(1)})$ 点阵平面二约化矢为 $\boldsymbol{t}_1^{(1)}$, $\boldsymbol{t}_2^{(1)}$, L_2 的相应的 $(h_1^{(2)}h_2^{(2)}h_3^{(2)})$ 点阵平面二约化矢为 $\boldsymbol{t}_1^{(2)}$, $\boldsymbol{t}_2^{(2)}$, 令

$$\mathrm{T}^{(1)}=\mathrm{VA}^{(1)}, \tag{5}$$

$$\mathrm{T}^{(2)}=\mathrm{UA}^{(2)}, \tag{6}$$

V, U 为二行三列的整数矩阵,令

$$\mathrm{T}^{(2)}=\Omega\mathrm{T}^{(1)}, \tag{7}$$

求对应矩阵 Ω.

$$\Omega\equiv\begin{vmatrix}\omega_{11} & \omega_{12}\\ \omega_{21} & \omega_{22}\end{vmatrix},$$

Ω 一般为有理矩阵(有时为整数矩阵).

将 (5), (6) 式代入 (7) 式,得

$$\mathrm{UA}^{(2)}=\Omega\mathrm{VA}^{(1)}. \tag{8}$$

将 (4) 式代入 (8) 式,得

$$\mathrm{US}=\Omega\mathrm{V}=\mathrm{D},$$

D 为二行三列的有理矩阵(有时为整数矩阵).

$$d_{ij}=\sum_{k=1}^{3}u_{ik}S_{kj}=\sum_{l=1}^{2}\omega_{il}v_{lj}\qquad i=1,2,\quad j=1,2,3.$$

取 d_{11}, d_{12}, d_{21}, d_{22} 四个矩阵元,得

$$\begin{bmatrix}d_{11} & d_{12}\\ d_{21} & d_{22}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}u_{11}s_{11}+u_{12}s_{21}+u_{13}s_{31} & u_{11}s_{12}+u_{12}s_{22}+u_{13}s_{32}\\ u_{21}s_{11}+u_{22}s_{21}+u_{23}s_{31} & u_{21}s_{12}+u_{22}s_{22}+u_{23}s_{32}\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}\omega_{11}v_{11}+\omega_{12}v_{21} & \omega_{11}v_{12}+\omega_{12}v_{22}\\ \omega_{21}v_{11}+\omega_{22}v_{21} & \omega_{21}v_{12}+\omega_{22}v_{22}\end{bmatrix}. \tag{9}$$

由 (9) 式得

$$\Omega=\begin{bmatrix}u_{11} & u_{12} & u_{13}\\ u_{21} & u_{22} & u_{23}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}s_{11} & s_{12}\\ s_{21} & s_{22}\\ s_{31} & s_{32}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}v_{11} & v_{12}\\ v_{21} & v_{22}\end{bmatrix}. \tag{10}$$

取 d_{11}, d_{12}, d_{31}, d_{32} 及 d_{21}, d_{22}, d_{31}, d_{32}, 还可得到 Ω 的另外两种表达式. 三种表达式可总结为

$$\Omega=\begin{bmatrix}u_{11} & u_{12} & u_{13}\\ u_{21} & u_{22} & u_{23}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}s_{1i} & s_{1j}\\ s_{2i} & s_{2j}\\ s_{3i} & s_{3j}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}v_{1i} & v_{1j}\\ v_{2i} & v_{2j}\end{bmatrix}^{-1}, \tag{11}$$

$$i,j=1,2,3,\quad i>j,$$

1) 其矩阵元为有理数的矩阵为有理矩阵.

i, j 取不同值所得结果相同.

矩阵 Ω 的计算步骤如下:

1) 给出 L_1, L_2 的基矢对应矩阵 S 及 L_1 的 $(h_1^{(1)}h_2^{(1)}h_3^{(1)})$ 点阵平面.

2) 根据 (4) 式得

$$\mathrm{H}^{(2)} = \mathrm{S}\mathrm{H}^{(1)},$$

其中

$$\mathrm{H}^{(1)} = \begin{bmatrix} h_1^{(1)} \\ h_2^{(1)} \\ h_3^{(1)} \end{bmatrix}, \quad \mathrm{H}^{(2)} = \begin{bmatrix} h_1^{(2)} \\ h_2^{(2)} \\ h_3^{(2)} \end{bmatrix},$$

$h_i^{(1)}(i = 1, 2, 3)$ 为 L_1 的倒易阵点的坐标值, $h_i^{(1)}$ 为整数, $h_i^{(2)}$ 为该倒易阵点在 L_2 的倒易点阵中的坐标值. 由于 S 为有理矩阵,故 $h_i^{(2)}$ 一般不是整数,此时可乘以它们的分母的最小公倍数,将 $h_i^{(2)}$ 化为三个互素的整数 $h_1^{(2)\prime}$, $h_2^{(2)\prime}$, $h_3^{(2)\prime}$.

3) 按第二节所给方法求出非约化的 $(h_1^{(1)}h_2^{(1)}h_3^{(1)})$ 及 $(h_1^{(2)\prime}h_2^{(2)\prime}h_3^{(2)\prime})$ 点阵平面基矢来.

4) 将二对非约化矢约化为二对约化矢,得 (5) 式和 (6) 式.

5) 将所求的 u_{ij}, v_{ij} 诸值代入 (10) 式或 (11) 式求解 Ω.

2. 按第二节的步骤画出 L_1 的 $(h_1^{(1)}h_2^{(1)}h_3^{(1)})$ 点阵平面.

3. 按 $\mathrm{T}^{(2)} = \Omega\mathrm{T}^{(1)}$ 即可画出复合点阵平面来.

复合倒易点阵平面的画法亦可照此办理.

正空间复合点阵平面的画法可用于晶界及相界面的研究, 倒易复合点阵平面的画法可用于有取向关系两相电子衍射图的分析.

参 考 文 献

[1] M. A. Jaswon, D. B. Dove, *Acta Cryst.*, **8**(1955), 88.
[2] M. Bevis, *Acta Cryst.*, **A25** (1969), 370.
[3] J. F. Nicholas, *Acta Cryst.*, **A26** (1970), 470.
[4] J. F. Nicholas, An Atlas of Models of Crystal Surface, New York, Gorden & Breach (1965).
[5] B. Gruber, *Acta Cryst.*, **A26** (1970), 622.
[6] R. Bonnet, F. Durand, *Scripta Met.* **9** (1975), 935.
[7] 华罗庚,数论导引,科学出版社, 1 页 (1957).
[8] 维诺格拉陀夫,数论基础,高等教育出版社, 13 页 (1957).
[9] 郭可信,物理学报, **27** (1978), 547.
[10] 李春志,物理学报, **28** (1979), 314.

THE GEOMETRY OF LATTICE PLANES

YANG JI-BING YE HENG-QIAN

(*Institute of Metal Research, Academia Sinica*)

ABSTRACT

An analytical method to find correspondence matrix for basic vector transformation is given by using elementary theory of numbers. Methods for drawing of a lattice plane and of a composite lattice plane of two place lattices as well as their applications are discussed.