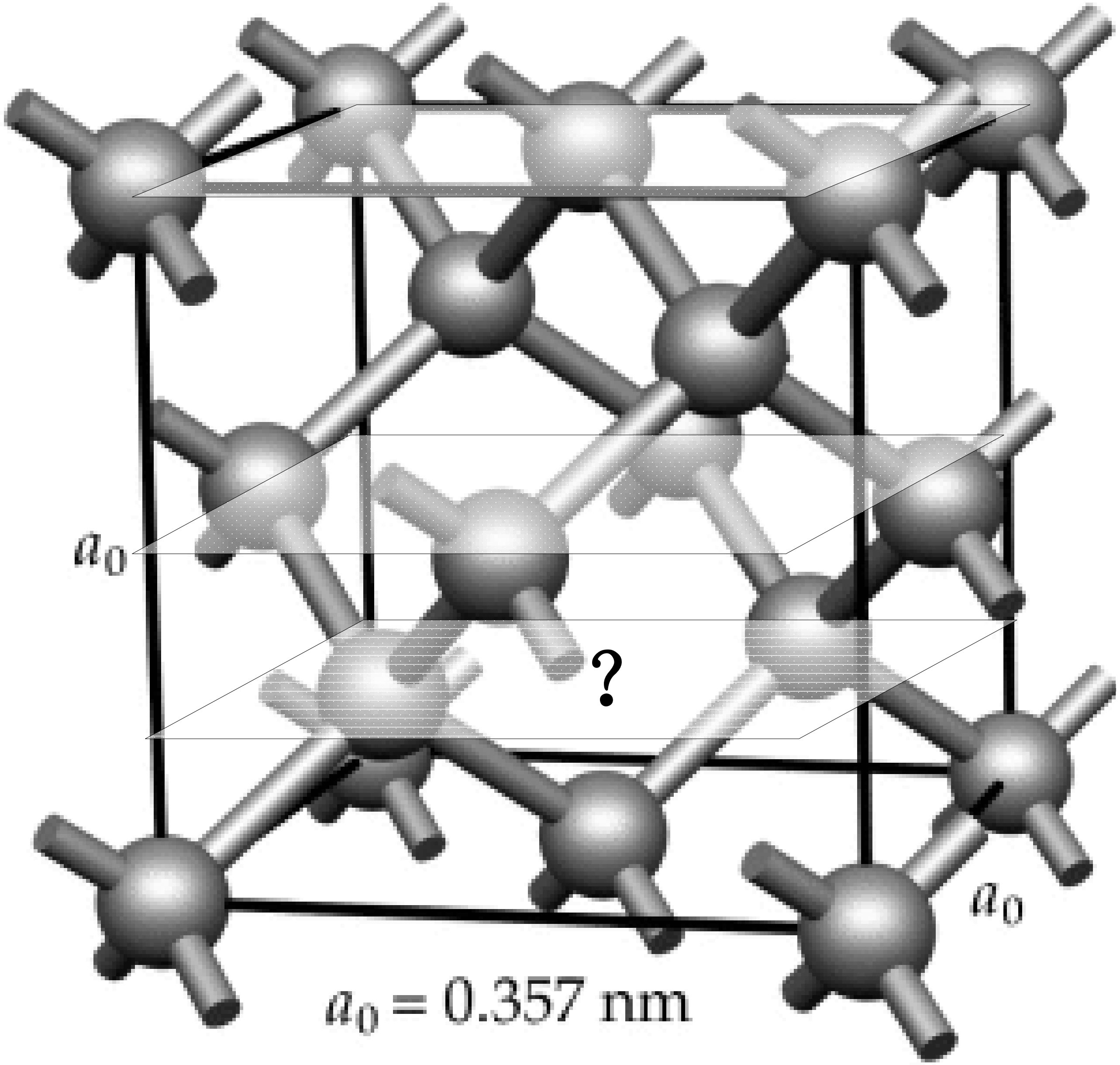
上讲回顾：晶体结构的其他性质

- 晶列，晶向指数
- 晶面，晶面指数
- 晶体的宏观对称性(操作)
  - * 平移对称性对宏观对称操作的一些限制
  - * 要点
    1. 晶列、晶面、操作等，都是对晶格(不是原子)而言；
    2. 在宏观对称操作如转动、反演、镜面、螺旋、滑移等中，至少保持一个点、轴、面等保持不动

特别强调：晶面指的是格点所在平面

- 右图是金刚石的原子排列结构：即图中的球是原子，而不是格点
- 问：(001)晶面族最靠近原点的是哪个晶面?



10.107.0.68/~jgche/

本讲目的：引入倒空间的有关概念

1. 为什么要倒(动量)空间？
2. 晶格的平移周期性，在动量空间如何描写？

第9讲、倒格子和第一Brillouin区

1. 晶格的Fourier变换
2. 倒格子
3. 正、倒格子对应的几何关系
4. 重要的例子
5. 第一Brillouin区

为什么要倒(k)空间？

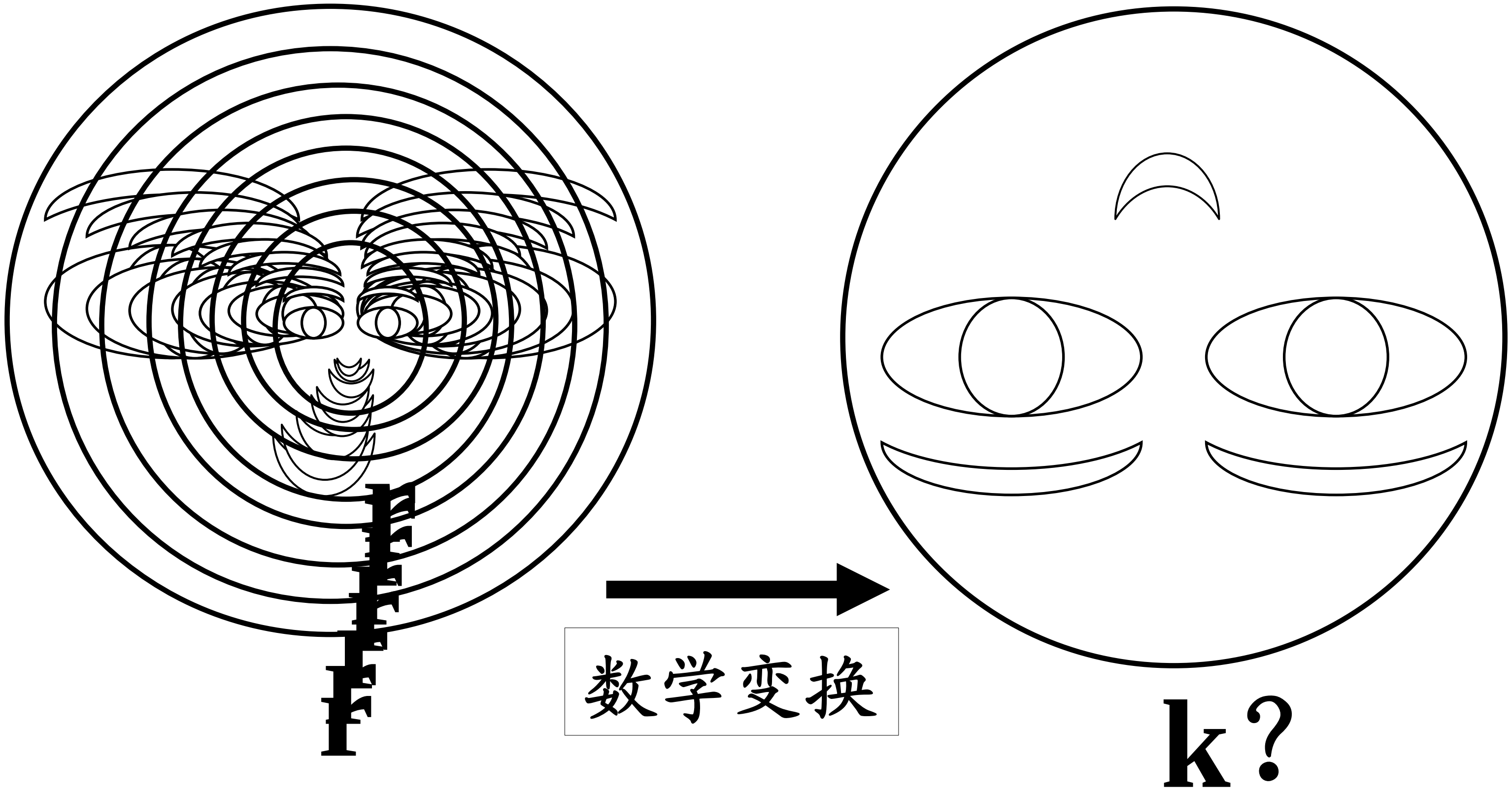
1、晶格的Fourier变换

- 一个物理问题，既可以在正(坐标)空间描写，也可以在倒(动量)空间描写
  - ＊ 坐标表象**r**，动量表象**k**
- 为什么选择不同的表象？为什么动量空间？
  - ＊ 适当地选取一个表象，可使问题简化、容易处理
    - # 如电子在均匀空间(特例=自由电子)运动，虽然坐标一直变化，但**k**守衡，这时在坐标表象当然不如在动量表象简单
  - ＊ 衍射实验的理论基础
    - # 在量纲上，坐标空间和动量空间互为倒数，因此也把坐标和动量空间分别称为正、倒空间；其他也沿用这种称谓

正(坐标)空间 ⟺ 周期性 ⟺ 倒(动量)空间

- 数学：**(正)**格子
- 观察：显微镜**?**

- 观察： **X**射线衍射
- 数学：倒格子



坐标空间中用格矢(R_l)描写晶体平移周期性；那么，在动量空间呢？

$$V(\mathbf{r})=\sum_l V_{\text{atom}}\left(\mathbf{r}-\mathbf{R}_l\right)$$

只是一个数学变换

$$\rho(\mathbf{r})=\sum_l \rho_{\text{atom}}\left(\mathbf{r}-\mathbf{R}_l\right)$$

- 势能、电荷密度等满足迭加原理的物理量

$$F(\mathbf{r})=\sum_l f\left(\mathbf{r}-\mathbf{R}_l\right)$$

- 如果晶体具有平移周期性 $\mathbf{R}_l=\mathbf{R}_m+\mathbf{R}_n$
  - * 则是$\mathbf{R}_\mathbf{l}$的周期函数 $F(\mathbf{r}+\mathbf{R}_l)=F(\mathbf{r})$
- 可对其作Fourier展开 $F(\mathbf{r})=\sum_h F_{\mathbf{K}_h}e^{i\mathbf{K}_h\bullet\mathbf{r}}$
- $F_{\mathbf{Kh}}$称为Fourier系数
  - * 两边乘共轭因子 $e^{-i\mathbf{K}_h\bullet\mathbf{r}}$ 后积分可得这个系数

$$\frac{1}{V}\int F(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{K}_h\bullet\mathbf{r}}d\mathbf{r}=\sum_{h'}F_{\mathbf{K}_{h'}}\frac{1}{V}\int e^{i\left(\mathbf{K}_{h'}-\mathbf{K}_h\right)\bullet\mathbf{r}}d\mathbf{r}$$

$$\frac{1}{V}\int F(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{K}_h\bullet\mathbf{r}}d\mathbf{r}=F_{\mathbf{K}_h}$$

仅当$\mathbf{K}_{\mathbf{h}'}=\mathbf{K}_\mathbf{h}$时，这个积分不为零，且等于**V**

- 因为$\boldsymbol{F}(\mathbf{r})=\boldsymbol{F}(\mathbf{r}+\mathbf{R}_l)$，就有

$$F_{\mathbf{K}_h}=\frac{1}{V}\int F(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{K}_h\bullet\mathbf{r}}d\mathbf{r}=\frac{1}{V}\int F(\mathbf{r}+\mathbf{R}_l)e^{-i\mathbf{K}_h\bullet\mathbf{r}}d\mathbf{r}$$

- 作变量替换，$\mathbf{r}'=\mathbf{r}+\mathbf{R}_l$，就有

$$F_{\mathbf{K}_h}=\frac{1}{V}\int F(\mathbf{r}')e^{-i(\mathbf{K}_h\bullet\mathbf{r}'-\mathbf{K}_h\bullet\mathbf{R}_l)}d\mathbf{r}'$$

$$=\left[\frac{1}{V}\int F(\mathbf{r}')e^{-i\mathbf{K}_h\bullet\mathbf{r}'}d\mathbf{r}'\right]e^{i\mathbf{K}_h\bullet\mathbf{R}_l}=F_{\mathbf{K}_h}e^{i\mathbf{K}_h\bullet\mathbf{R}_l}$$

- 即 $$F_{\mathbf{K}_h}(1-e^{i\mathbf{K}_h\bullet\mathbf{R}_l})=0$$

$$F_{\mathbf{K}_h}\neq 0 \Longrightarrow e^{i\mathbf{K}_h\bullet\mathbf{R}_l}=1$$

$\mathbf{K}_h\bullet\mathbf{R}_l=2\pi m$，$m$整数

- 即如有平移周期性，那么一定在**Fourier**空间存在$\mathbf{K}_h$矢量满足这个关系

问题是：这个$\mathbf{K}_h$矢量有什么意义？

看格点的Fourier变换？

- 数学上如何用一个函数来描写格点？

  * δ 函数！ $$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}_l} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)$$

- 这是周期函数，因此，可对其进行**Fourier**变换

$$\rho_{\mathbf{k}} = \int \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\bullet\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \sum_{\mathbf{R}_l} \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) e^{-i\mathbf{k}\bullet\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \sum_{\mathbf{R}_l} e^{-i\mathbf{k}\bullet\mathbf{R}_l}$$

- 格点满足平移周期性，则有$\mathbf{K_h}$满足

$$\mathbf{K}_h \bullet \mathbf{R}_l = 2\pi m$$

- 那么乘上不变因子 $$\rho_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{R}_l} e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{K}_h)\bullet\mathbf{R}_l}$$

- 利用**Poisson**求和公式，即可得

$$\rho_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{R}_l} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{K}_h)\bullet\mathbf{R}_l} = \sum_{\mathbf{K}_h} \delta(\mathbf{k}-\mathbf{K}_h)$$

- 即当矢量$\mathbf{K_h}$与$\mathbf{R_l}$乘积是**2**π的整数倍时，在坐标空间$\mathbf{R_l}$处的δ函数的**Fourier**变换为在动量空间以$\mathbf{K_h}$为中心的δ函数！
- 这告诉了我们什么信息，$\mathbf{K_h}$对应什么？
  - * 坐标空间里，**δ(r-R$_\mathbf{l}$)**函数表示在$\mathbf{R_l}$的格点，当满足上述条件时，其**Fourier**变换也是**δ(k-K$_\mathbf{h}$)**函数，表示坐标空间几何点的**Fourier**变换也是几何点！
  - * 或者说前面$\mathbf{K_h}$与$\mathbf{R_l}$的关系定义了倒空间矢量，$\mathbf{K_h}$的量纲为$\mathbf{R_l}$的倒数

在正空间，格矢$\mathbf{R}_l$端点(格点)的集合就是格子；那么，矢量$\mathbf{K}_h$端点的集合呢？

2、倒格子(reciprocal lattice)

- 定义：对Bravais格子中所有的格矢$\mathbf{R}_l$，有一系列动量空间矢量$\mathbf{K}_h$，满足 $e^{i\mathbf{K}_h \bullet \mathbf{R}_l} = 1$

$$\mathbf{K}_h \bullet \mathbf{R}_l = 2\pi m, \qquad m\text{为整数}$$

  的全部端点$\mathbf{K}_h$的集合，构成该Bravais格子的倒格子，这些点称为倒格点， $\mathbf{K}_h$称为倒格矢
- 因此，Bravais格子也称为正格子(direct lattice)
- 等价关系：知道$\mathbf{K}_h$，就知道$\mathbf{R}_l$；反过来也一样
- 它们满足Fourier变换关系，因此，倒空间也称Fourier空间

倒格子基矢？

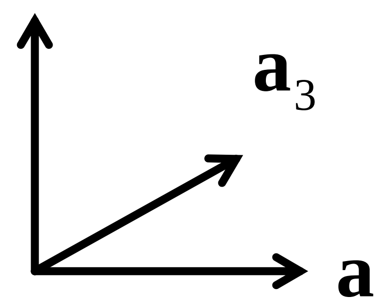
- 对正格子 $\mathbf{R}_l = l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{a}_3$
- 代入 $\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{R}_l = l_1\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{a}_3 = 2\pi m$
- 如果选择一组**b**，使 $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$
- 那么矢量**K**就可由**b**组成 $\mathbf{K}_h = h_1\mathbf{b}_1 + h_2\mathbf{b}_2 + h_3\mathbf{b}_3$
- 这就定义了倒格子基矢，它可以满足正、倒格矢之间的**K*R=2\pi m**的关系

  * 这样形式上与正格矢一样，$\mathbf{K}_h$也具有平移对称性

  → 可用基矢和整数表示的平移周期性

  → $\mathbf{K}_h$定义了倒空间的**Bravais**格子， $\mathbf{b}_i$就是倒格子基矢

- $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$ 表示什么？



- 是正交关系！即$\mathbf{b_1}$与$\mathbf{a_2}$和$\mathbf{a_3}$正交！
- 看$\mathbf{a_2}$和$\mathbf{a_3}$确定的平面，即$\mathbf{a_2} \times \mathbf{a_3}$矢量垂直于该平面

  * $\mathbf{b_1}$与$\mathbf{a_2}$和$\mathbf{a_3}$分别正交！
- 即矢量$\mathbf{b_1}$与矢量$\mathbf{a_2} \times \mathbf{a_3}$平行！因此，可设

$$\mathbf{b}_1 = \eta(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$$

- 确定 η 可利用正交关系，就有

$$\mathbf{a}_1 \bullet \mathbf{b}_1 = \eta \mathbf{a}_1 \bullet (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) = 2\pi$$

$$\eta = \frac{2\pi}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = \frac{2\pi}{\Omega} \qquad \mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega}(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) \qquad \Omega = |\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)|$$

- 类似地，就可以得到

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \bullet (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \qquad \mathbf{a}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3}{\mathbf{b}_1 \bullet (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)}$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \bullet (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad \Longleftrightarrow \quad \mathbf{a}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{b}_3 \times \mathbf{b}_1}{\mathbf{b}_1 \bullet (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)}$$

$$\mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \bullet (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \qquad \mathbf{a}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{b}_1 \times \mathbf{b}_2}{\mathbf{b}_1 \bullet (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)}$$

- 有些教科书也将这个关系作为倒格子基矢定义，即由这三个矢量可以定义倒格矢，倒格矢给出的端点集合构成倒格子
- 互为倒正，即正格子也可看作倒格子的倒格子

K_h端点的集合构成倒空间中的Bravais格子

- 倒格矢 $\mathbf{K}_h = h_1\mathbf{b}_1 + h_2\mathbf{b}_2 + h_3\mathbf{b}_3$

- 满足平移对称 $\mathbf{K}_h = \mathbf{K}_{h'} + \mathbf{K}_{h''}$

- 倒格子原胞体积，是正格子原胞体积的倒数，可得

$$\Omega^* = \left|\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)\right| = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}$$

二维倒格子

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \hat{\mathbf{k}}}{\hat{\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}$$

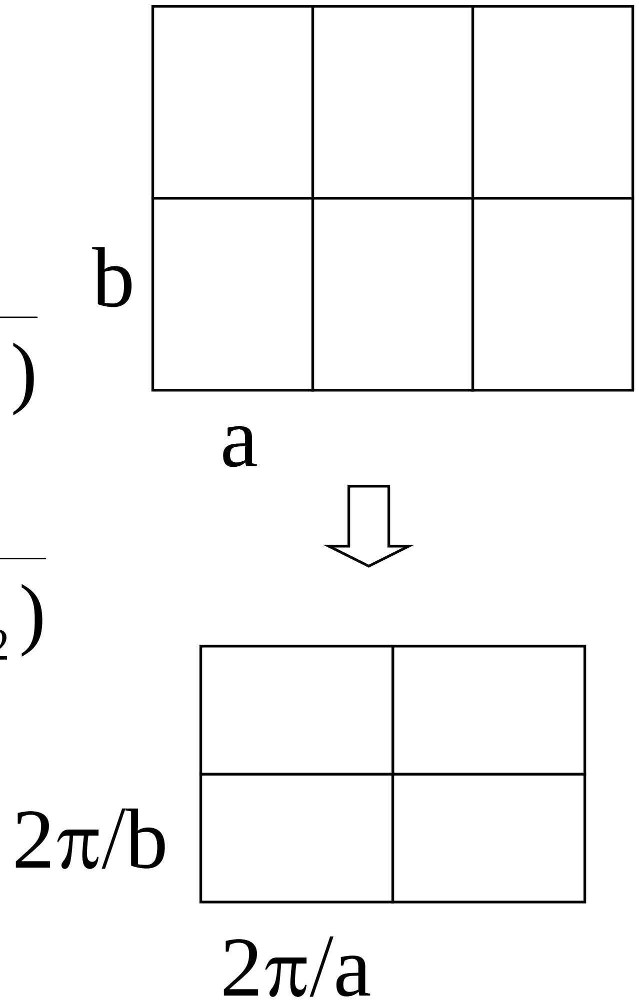
$$\mathbf{a}_3 = \hat{\mathbf{k}}$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{a}_1}{\hat{\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}$$

倒格子：二维

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \hat{\mathbf{k}}}{\hat{\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{a}_1}{\hat{\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}$$



$$\mathbf{a}_1 = a\hat{\mathbf{i}}$$

$$\mathbf{a}_2 = b\hat{\mathbf{j}}$$

$$\Downarrow$$

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{\mathbf{i}}$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{b}\hat{\mathbf{j}}$$

→视野拓展→
正格子和倒格子之间的关系

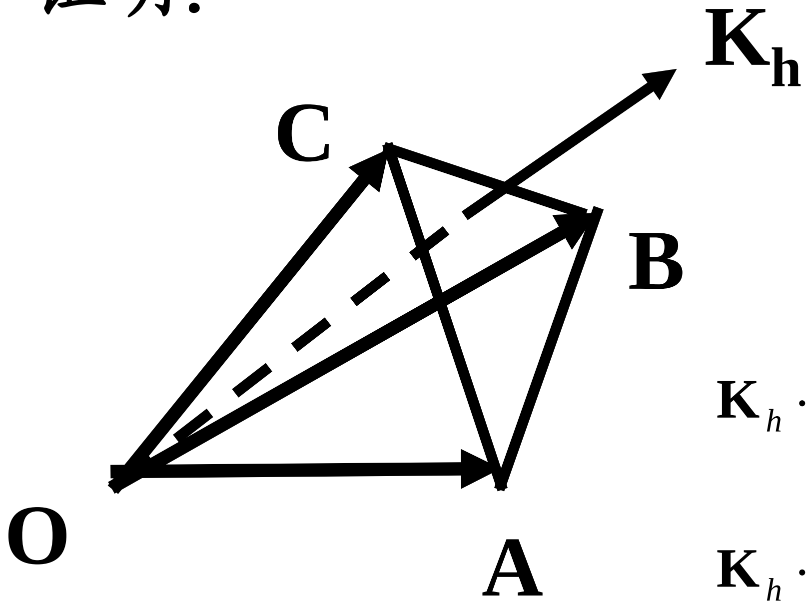
3、正、倒格子对应的几何关系

- 不同空间描写晶体的对称性

r空间		k空间
Bravais格子	$\Longleftrightarrow$	倒格子
W-S原胞	$\Longleftrightarrow$	第一**Brillouin**区

$\mathbf{K_h}=h_1\mathbf{b}_1+h_2\mathbf{b}_2+h_3\mathbf{b}_3$与晶面$(h_1h_2h_3)$正交

- 注意不是密勒指数(hkl)，晶面指数$(h_1h_2h_3)$。即该晶面族最靠近原点晶面的截距分别为$\mathbf{a}_1/h_1$, $\mathbf{a}_2/h_2$, $\mathbf{a}_3/h_3$
- 证明:



$$\mathbf{CA}=\mathbf{OA}-\mathbf{OC}=\frac{\mathbf{a}_1}{h_1}-\frac{\mathbf{a}_3}{h_3}$$

$$\mathbf{CB}=\mathbf{OB}-\mathbf{OC}=\frac{\mathbf{a}_2}{h_2}-\frac{\mathbf{a}_3}{h_3}$$

$$\mathbf{K}_h\cdot\mathbf{CA}=\left(h_1\mathbf{b}_1+h_2\mathbf{b}_2+h_3\mathbf{b}_3\right)\cdot\left(\frac{\mathbf{a}_1}{h_1}-\frac{\mathbf{a}_3}{h_3}\right)=0$$

$$\mathbf{K}_h\cdot\mathbf{CB}=\left(h_1\mathbf{b}_1+h_2\mathbf{b}_2+h_3\mathbf{b}_3\right)\cdot\left(\frac{\mathbf{a}_2}{h_2}-\frac{\mathbf{a}_3}{h_3}\right)=0$$

倒格矢的长度与面间距

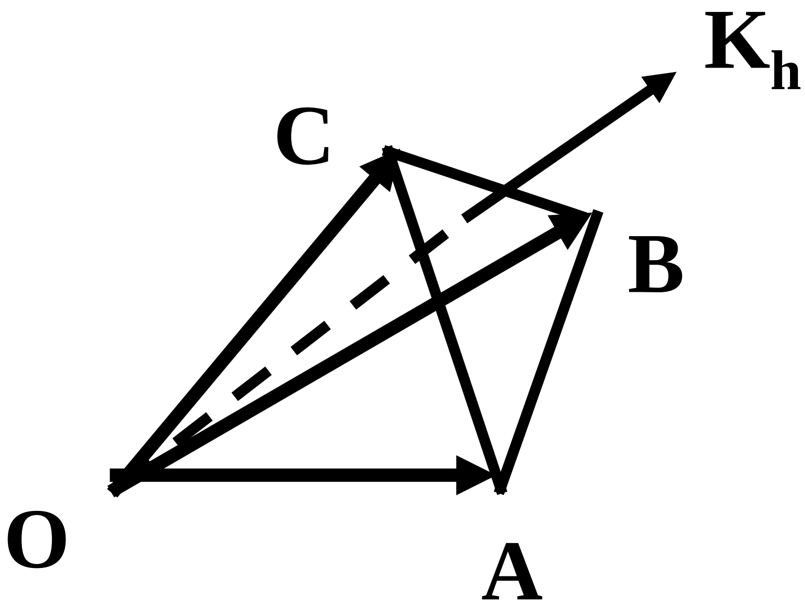
- 设晶面$(h_1h_2h_3)$的面间距为d
- 则最靠近原点的晶面到原点的距离即OA在面方向上的投影

$$d = \frac{\mathbf{a}_1}{h_1} \cdot \frac{\mathbf{K}_h}{\left|\mathbf{K}_h\right|}$$

$$= \frac{\mathbf{a}_1 \cdot \left(h_1\mathbf{b}_1 + h_2\mathbf{b}_2 + h_3\mathbf{b}_3\right)}{h_1\left|h_1\mathbf{b}_1 + h_2\mathbf{b}_2 + h_3\mathbf{b}_3\right|}$$

$$= \frac{2\pi}{\left|\mathbf{K}_h\right|}$$

$$\left|\mathbf{K}_h\right| = \frac{2\pi}{d_h}$$

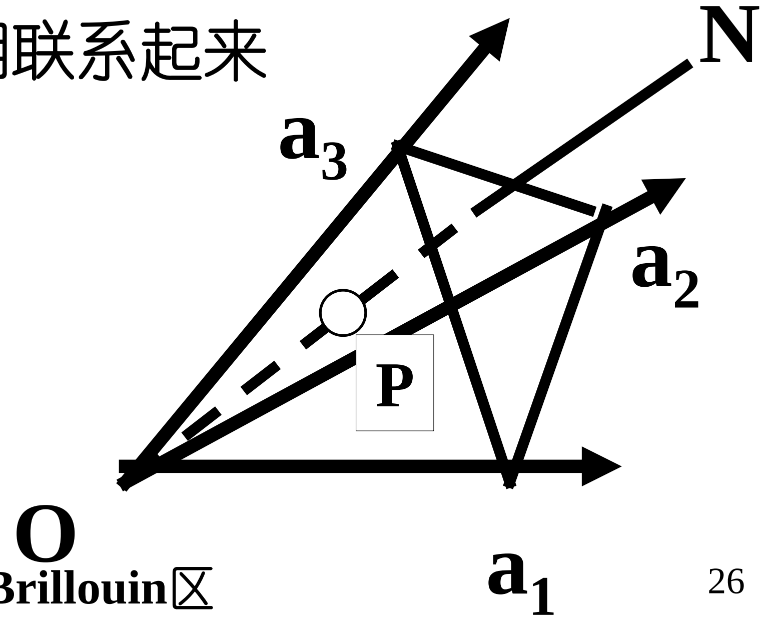


$$\mathbf{K}_h = \frac{2\pi}{d_h}\hat{\mathbf{n}}_h$$

注意，面间距是与晶面指数而不是密勒指数相关

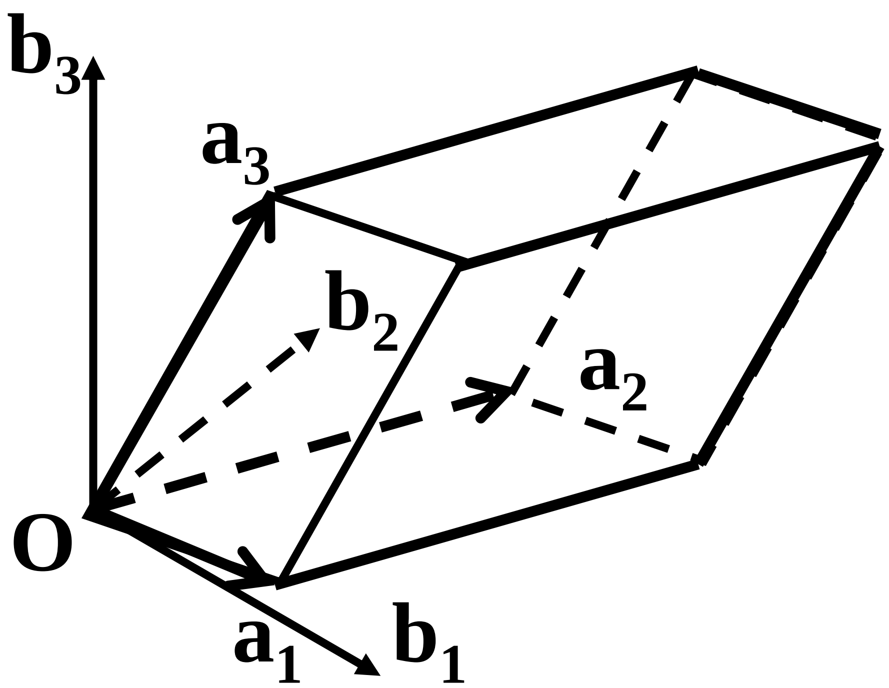
倒格子与Bravais格子的几何关系

- 由倒格矢与晶面面间距的关系
  - ＊ 可得晶面与倒格点的关系
- 自原点**O**引晶面族法线**N**，截取**P**使 $OP = 2\pi / d$
  - ＊ **P**点即倒格点，沿**N**平移**OP**，形成格子，即倒格子
  - ＊ 晶面←→倒格点
  - ＊ 衍射极大就这样与晶面相联系起来



倒格子基矢与正格子基矢的关系

- 正格子基矢组成$\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3$, $\mathbf{a}_3\mathbf{a}_1$坐标面，各有对应晶面，面间距分别是$\mathbf{d}_1$, $\mathbf{d}_2$, $\mathbf{d}_3$。
  - * 可作**OP**垂直于$\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2$晶面，
    取长度为$\mathbf{b}_3=2\pi/\mathbf{d}_3$
    同理，得$\mathbf{b}_2$, $\mathbf{b}_3$



4、重要的例子

- 简单立方结构：**sc**
- 面心立方结构：**fcc**
- 体心立方结构：**bcc**
- 简单六角结构：**sh**

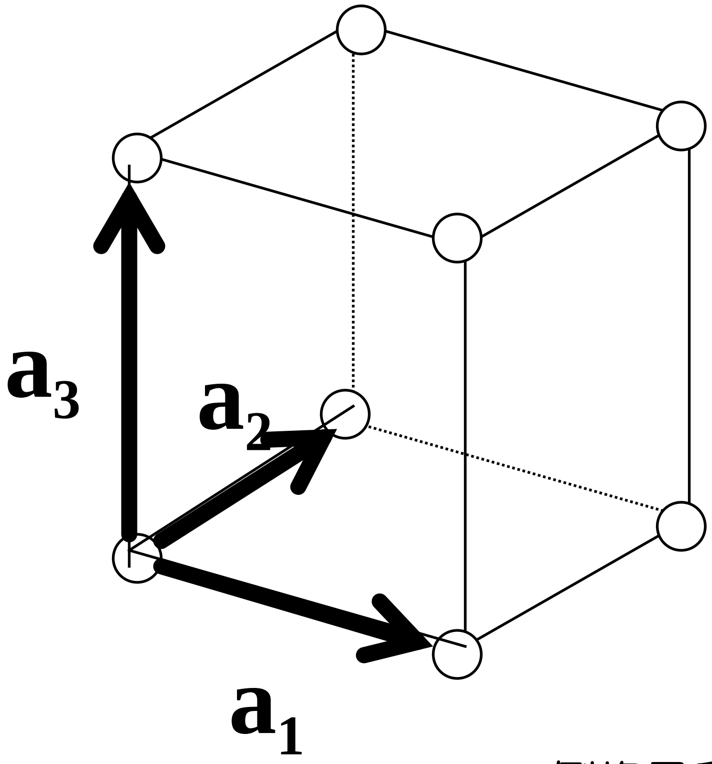
简单立方：Simple cubic (sc)

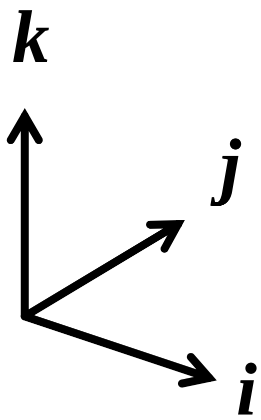
- 简立方格子的倒格子仍然是简立方格子

$$\mathbf{a}_1 = a\hat{\mathbf{i}}$$

$$\mathbf{a}_2 = a\hat{\mathbf{j}}$$

$$\mathbf{a}_3 = a\hat{\mathbf{k}}$$





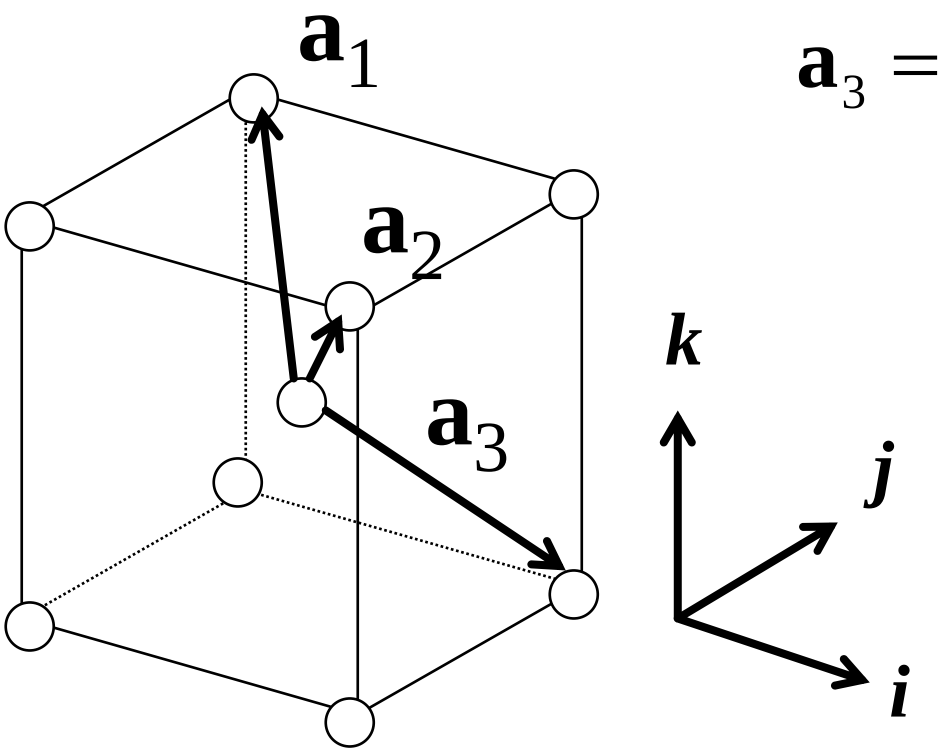
$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{\mathbf{i}}$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\hat{\mathbf{j}}$$

$$\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\hat{\mathbf{k}}$$

体心立方

- 体心立方格子的倒格子是面心立方格子



$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(-\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}})$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(+\hat{\mathbf{i}} - \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}})$$

$$\mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(+\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}} - \hat{\mathbf{k}})$$

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}})$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(+\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{k}})$$

$$\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(+\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}})$$

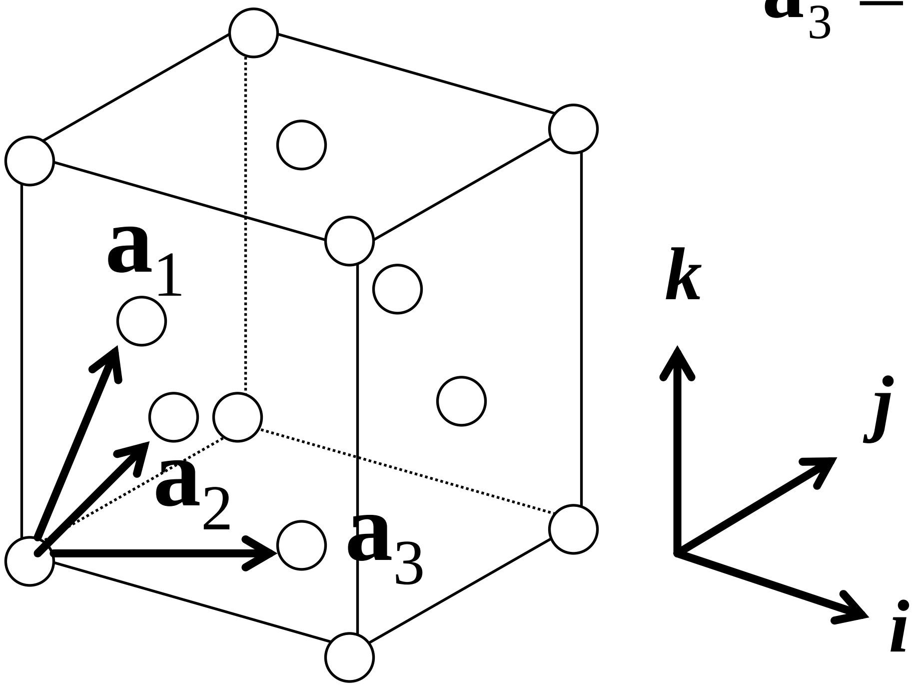
面心立方

- 面心立方格子的倒格子是体心立方格子

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}})$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{k}} + \hat{\mathbf{i}})$$

$$\mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}})$$

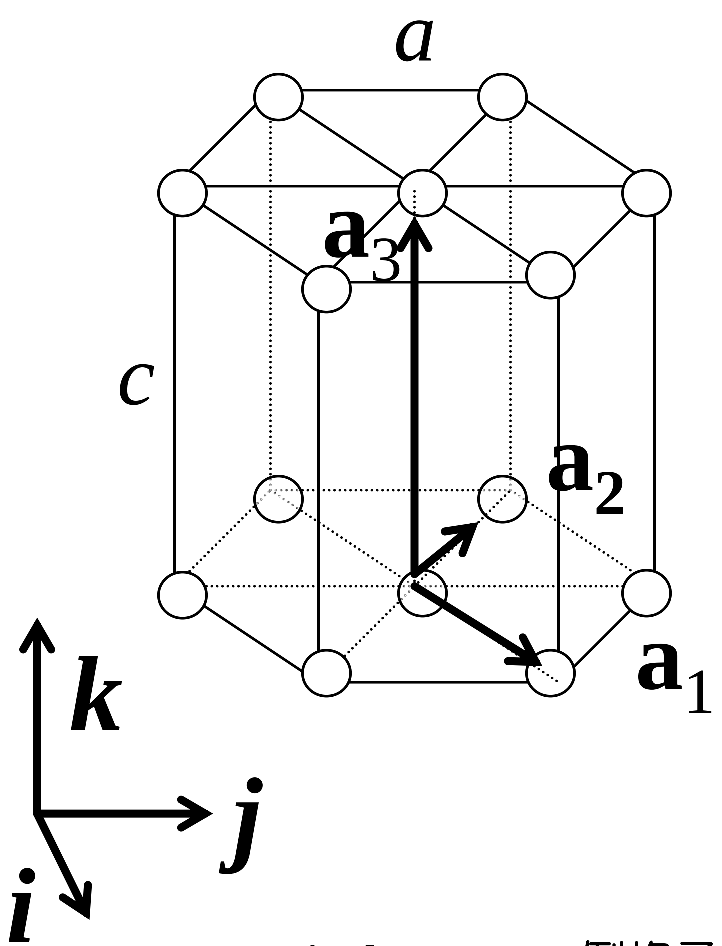


$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(-\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}})$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\hat{\mathbf{i}} - \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}})$$

$$\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}} - \hat{\mathbf{k}})$$

简单六角: simple hexagon (sh)



$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}})$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}})$$

$$\mathbf{a}_3 = c\hat{\mathbf{k}}$$

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(\hat{\mathbf{i}} + \sqrt{3}\hat{\mathbf{j}})$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(-\hat{\mathbf{i}} + \sqrt{3}\hat{\mathbf{j}})$$

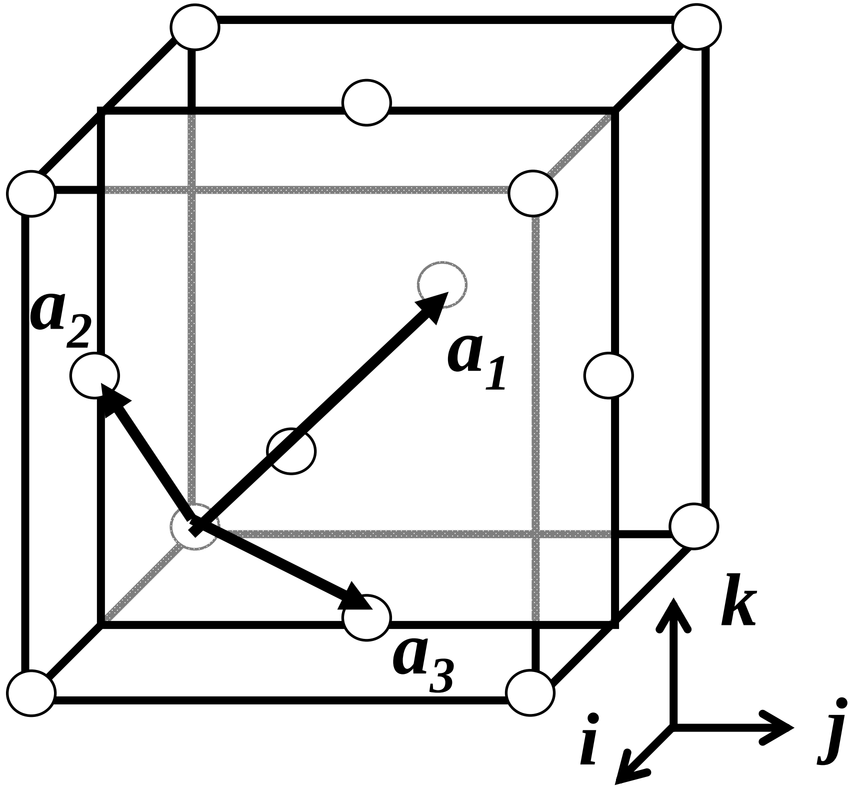
$$\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{c}\hat{\mathbf{k}}$$

Real lattice	$\Longleftrightarrow$	**Reciprocal lattice**
sc	$\Longleftrightarrow$	**sc**
fcc	$\Longleftrightarrow$	**bcc**
bcc	$\Longleftrightarrow$	**fcc**

思考题：倒格子是否保持其对应正格子的宏观对称性？

例：晶面的面间距？

- 该晶面的密勒指数？
  - **(100)！**
- 但以原胞基矢为单位，这个晶面截取的是？
  - **∞ , 1, 1**
  - 其倒数互质成最小整数则为**(011)**
  - 它是决定面间距的指数
  - 计算某一晶面族面间距时，用最靠近原点的晶面，用原胞基矢得到



$$d=\frac{2\pi}{\left|\mathbf{K}_h\right|}=\frac{2\pi}{\left|\mathbf{b}_2+\mathbf{b}_3\right|}=\frac{2\pi}{\left|\frac{2\pi}{a}\left[\left(+\hat{\mathbf{i}}-\hat{\mathbf{j}}+\hat{\mathbf{k}}\right)+\left(+\hat{\mathbf{i}}+\hat{\mathbf{j}}-\hat{\mathbf{k}}\right)\right]\right|}=\frac{\mathrm{a}}{2}$$

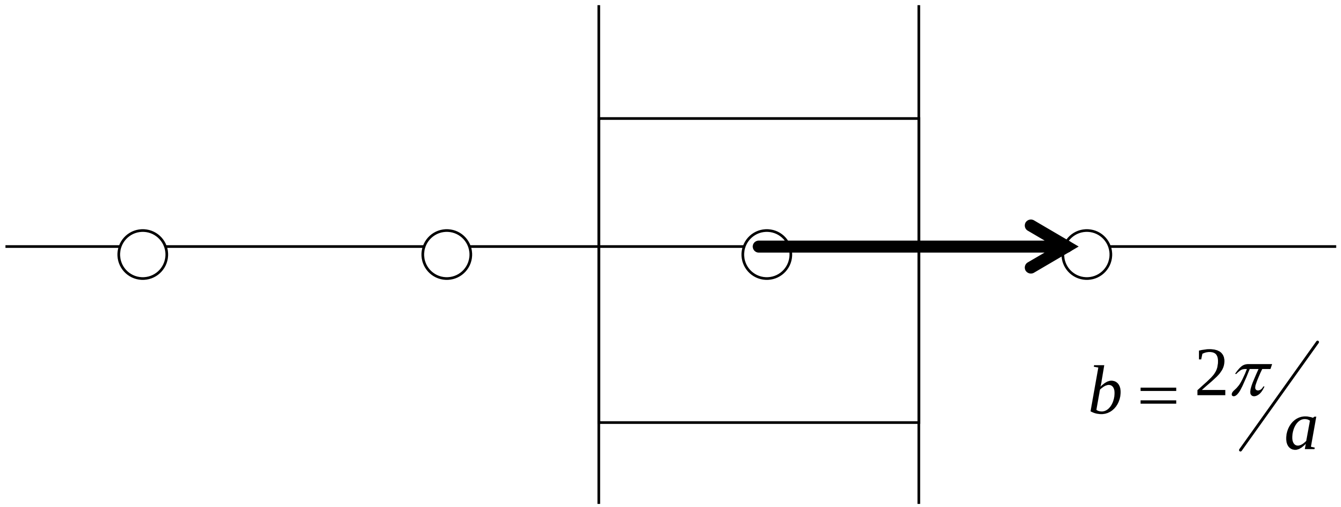
倒格子也是**Bravais**格子，那么，有无对应的倒空间原胞？

- 倒空间常用的是**Brillouin**区，而不是倒空间原胞
  - * 常把倒空间的第一**Brillouin**区俗称为倒空间的**Wigner-Seitz**原胞
    - \# 与正格子原胞不同，另有重要意义

5、 Brillouin区

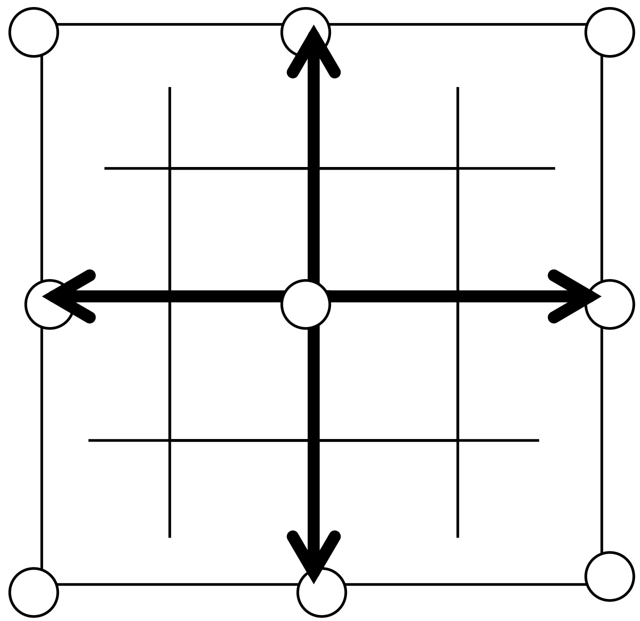
- 倒空间原胞?
  - * 正格子中每个格点代表一个基元，倒格子无这种对应，故倒格子原胞不常用，倒空间常用**Brillouin**区
- **Brillouin**区
  - * 以坐标空间取**Wigner-Seitz**原胞的方式，即取倒格矢中垂面将空间划分成一个个不同阶**Brillouin**区
    - # 这样划分的中垂面都具有高对称性，都将导致衍射极大→称为**Bragg**面
  - * 含原点不经任何中垂面的区域为第一**Brillouin**区
  - * 其余为第二、三… 等不同阶的**Brillouin**区**(**以后讲解**)**
- 倒空间常用**Brillouin**区，而不是倒空间原胞
  - * 把第一**Brillouin**区俗称为倒空间的**Wigner-Seitz**原胞，但高阶**Brillouin**区也有意义
    - # 边界面有高度对称性，在能带结构中有重要意义

例：1D第一Brillouin区

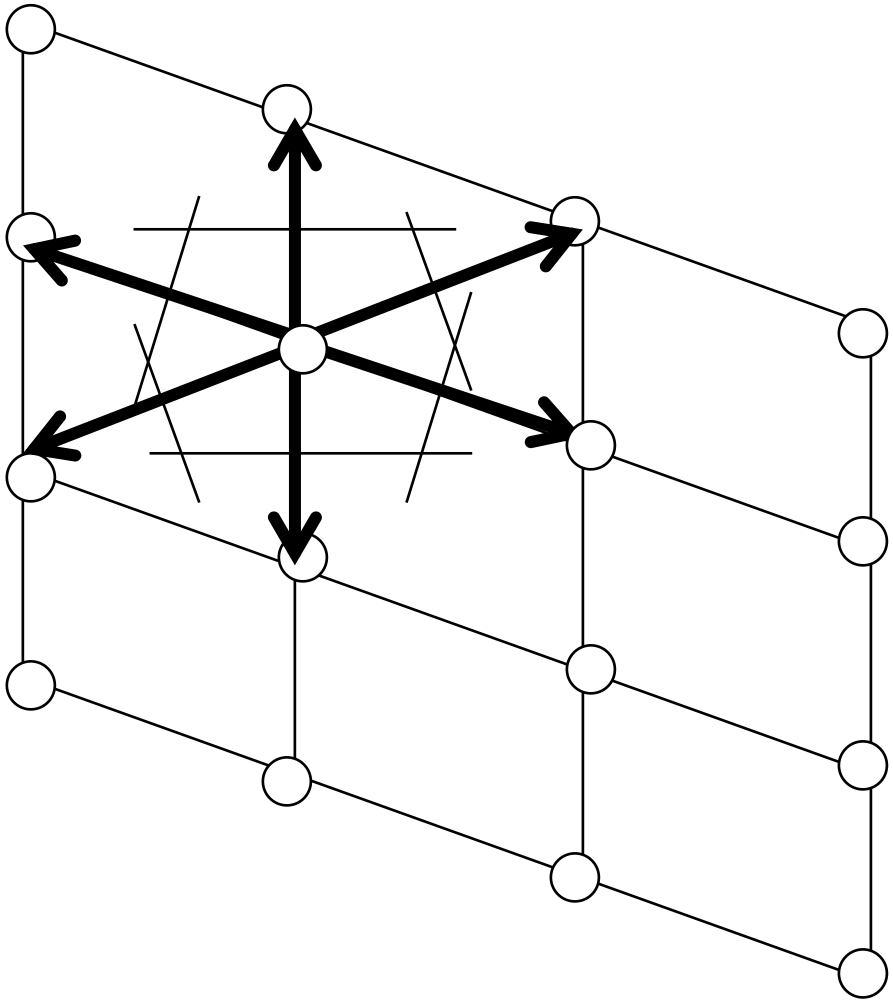


$$b = {}^{2\pi}/_{a}$$

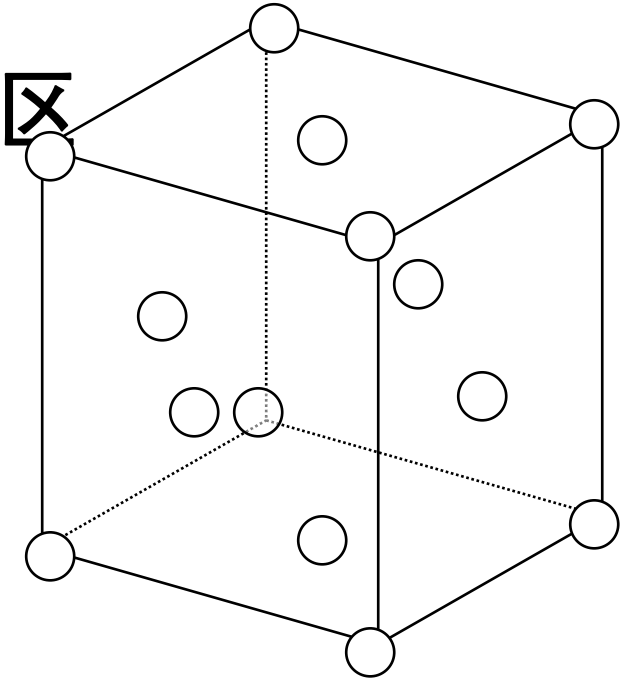
例：2D第一Brillouin区



例：2D第一Brillouin区



例：体心立方的第一Brillouin区

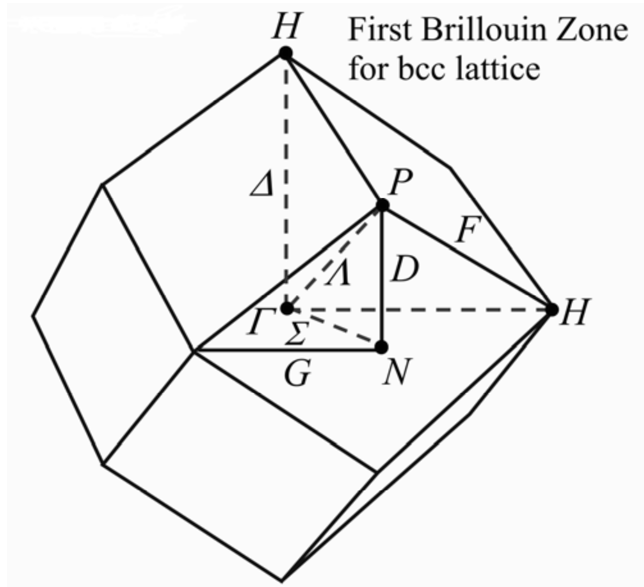


- 倒格子是面心立方格子
  - * 对顶角的倒格点来说，最近邻的倒格点即12个面心格点，所以最短的倒格矢显然是指向12个面心格点的矢量，它们的中垂面截成正十二面体，正好是倒空间原胞的体积
  - * 高对称轴和点如图所示

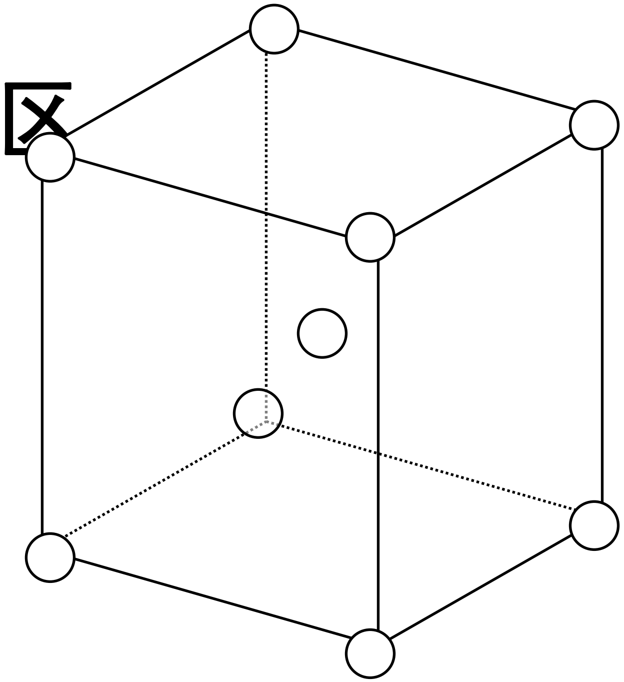
    P=(0.5,0.5,0.5) 2\pi/a

    H=(1,0,0) 2\pi/a

    N=(0.5,0.5,0) 2\pi/a



例：面心立方的第一Brillouin区

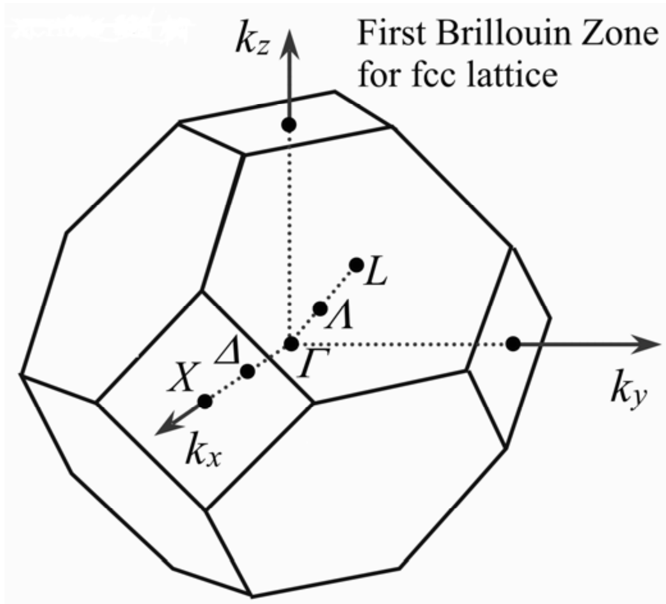


- 倒格子是体心立方格子
  - * 对中心倒格点来说，最近邻的倒格点即**8**个顶角，所以最短的倒格矢显然是体心指向**8**个顶角的矢量，它们的中垂面截成八面体
  - * 但是体积太大，还需截。次近邻的到格点显然是临近的晶胞的体心，在轴上，有**6**个中垂面，截**kx, ky**和**kz**轴
    - \# →第一**Brillouin**区不一定是最近邻倒格点的中垂面所围
  - * 高对称轴和点如图所示

    L=(0.5,0.5,0.5) 2\pi/a

    X=(1,0,0) 2\pi/a

    K=(0.75,0.75,0) 2\pi/



本讲要点：兼答本讲目的所提问题

1. 衍射实验的理论准备
   * 简化→倒格子是正格子的一个**Fourier**变换
2. 倒格子
   * 倒格子基矢，倒格矢
   * **Brillouin**区**(**倒空间的**Weigner-Seitz**原胞**)**
3. 正格子和倒格子之间的关系
   * 互为正、倒
   * 倒格矢与晶面正交
   * 几何关系：倒格点←→晶面

新引入概念

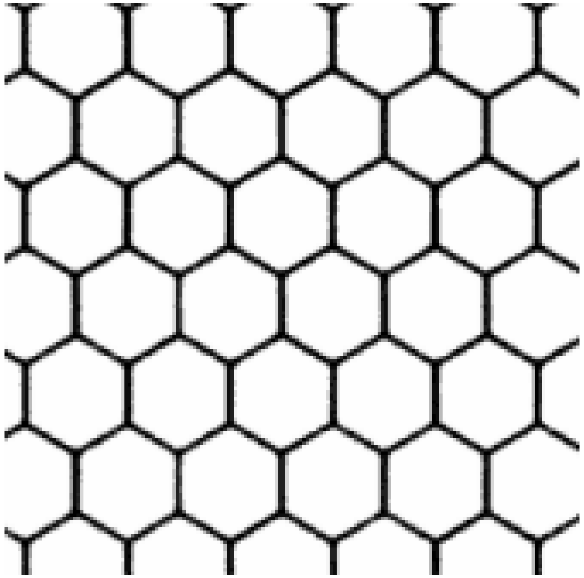
- 倒格子
  - * 也是一种**Bravias**格子
    - \# 基矢，原胞**(**第一**Brillouin**区**)**

思考题

- 倒格子是否保持其正格子的宏观对称性？

习题

9. 原子排列成二维蜂窝结构，交点是原子所在位置。试确定它的倒格子基矢，并作它的**Brillouin**区(即**Wigner-Seitz**原胞)。



课堂讨论题

1. 一给定的正格子是否只有一唯一的倒格子与之对应？
2. 给定的正格子基矢是否只有唯一的倒格子基矢与之对应？
3. 一正格矢$\mathbf{R}_l$是否只有一唯一的倒格矢$\mathbf{K}_h$与之对应？