课程信息

- **作业提交时间：**3月11日（周五）23:59，线上提交
- **第一章作业：**

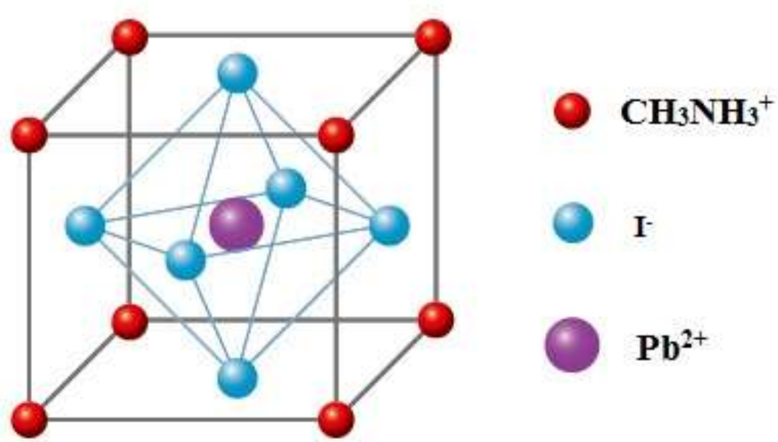
1.（20分）阅读黄昆《固体物理学》第一章1-1至1-7小节、胡老师讲义第一章《晶体结构》后，解释以下重要概念：晶格、布拉伐格子、晶向、晶面、倒格子。

2.（20分）画出体心立方、面心立方、六角密排与金刚石晶格结构；

3.（20分）书后习题1.3，1.7；

4.（20分）（2019年期末考试题）

甲基胺碘化铅是近年来发现的一种新型卤化物钙钛矿半导体材料，其晶格结构属于立方晶系，如下图所示。其中，甲基胺离子（$CH_3NH_3^+$）位于立方体的顶角，碘离子（I^-）位于立方体的面心，铅离子（Pb^{2+}）位于立方体的体心。



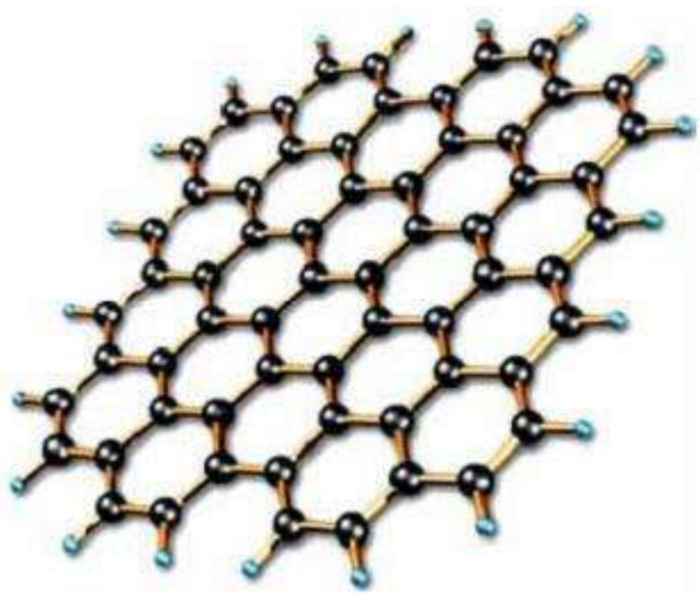
1）在如图所示的甲基胺碘化铅晶胞中，分别包含几个甲基胺离子、碘离子和铅离子？由此写出甲基胺碘化铅的化学式

2）为满足理想的立方晶格结构，甲基胺离子、碘离子和铅离子的半径需要满足怎样的关系？

3）试写出此晶格的布拉伐格子数学表达式。

5.（20分）（2020年期末考试题）

石墨烯可由机械剥离石墨制备，是一种由碳原子组成的二维材料，厚度仅为一个原子层。石墨烯的晶体结构如下图所示，其原子成六角蜂窝状排布，相邻原子间距为a。

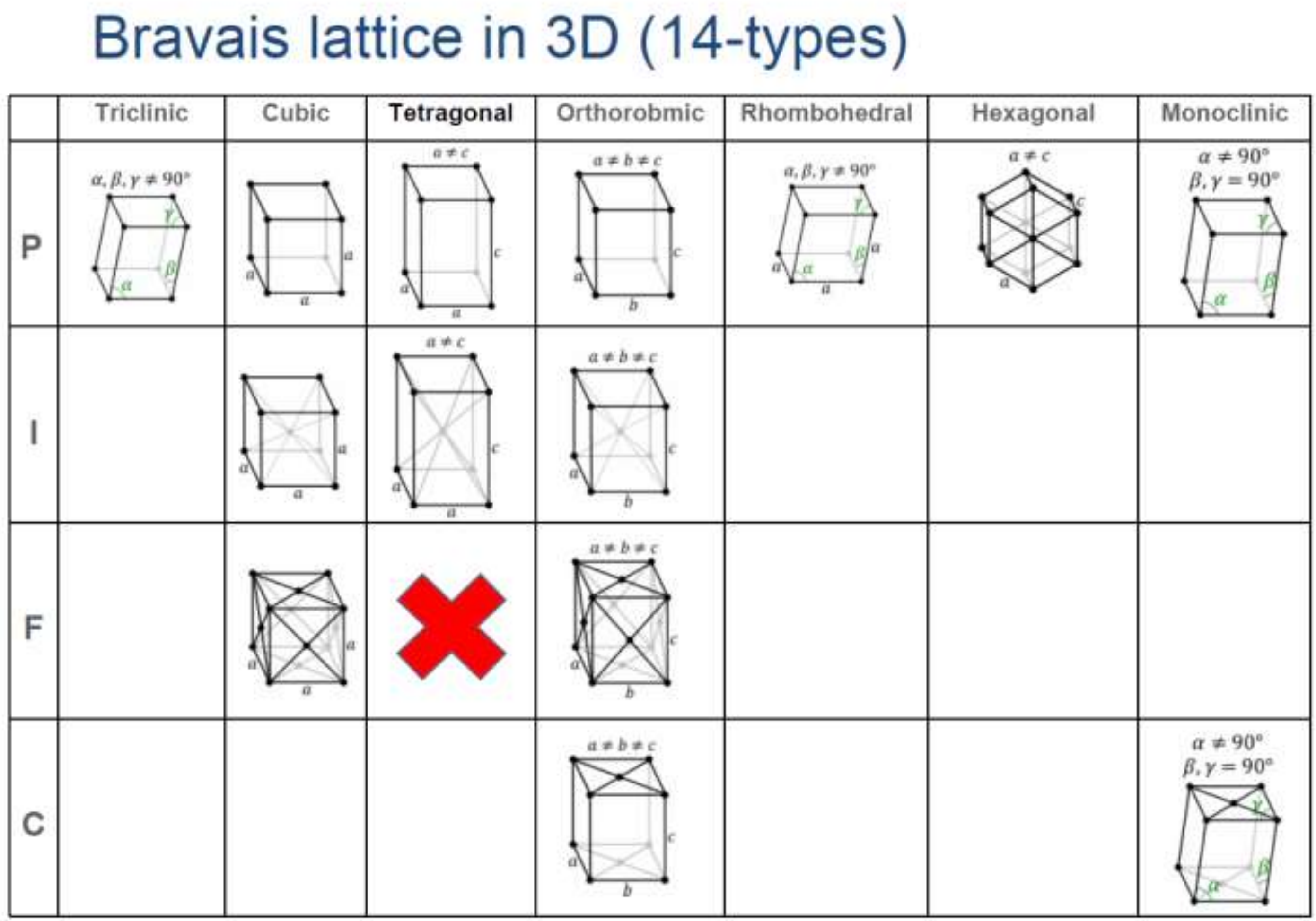


1）画出石墨烯的一个**原胞**，并写出其对应的基矢表达式。注意：一个石墨烯的原胞中包含几个原子？

2）试找出石墨烯**晶体**的所有对称操作。

6. （10分） 附加题

试通过画图说明，为什么十四种布拉伐格子中没有面心四角晶格？



晶体 = （ 晶格 ） + 原子

晶体 = （ 布拉伐格子 ） + 基元

举例：金刚石晶格

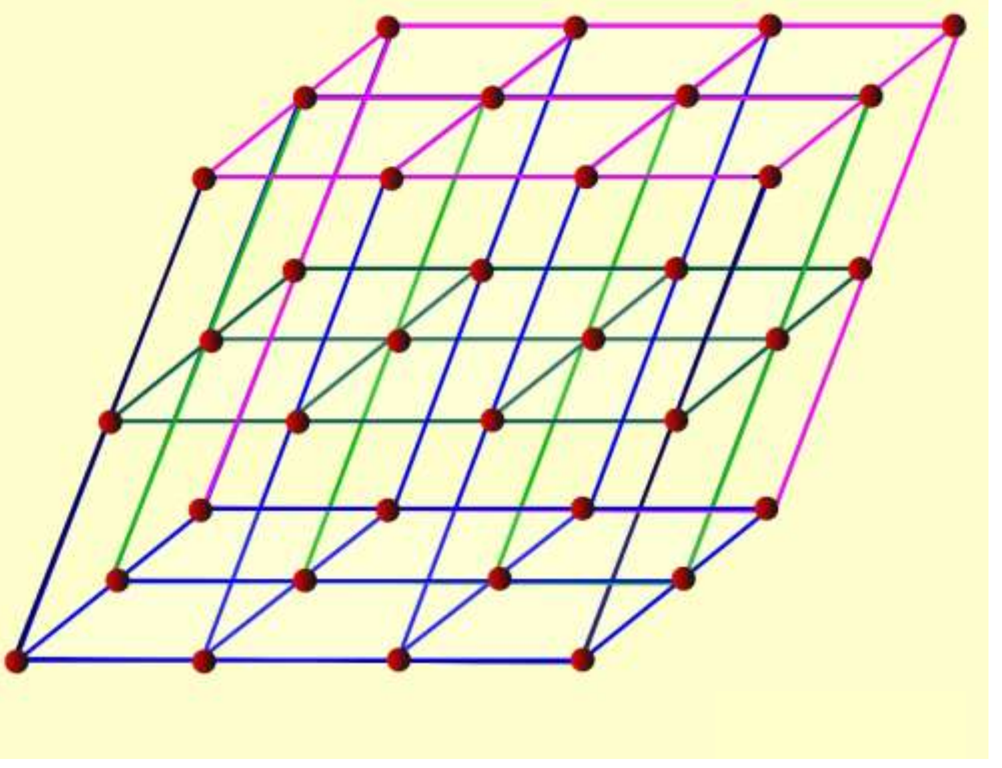
第一章

晶体结构（二）

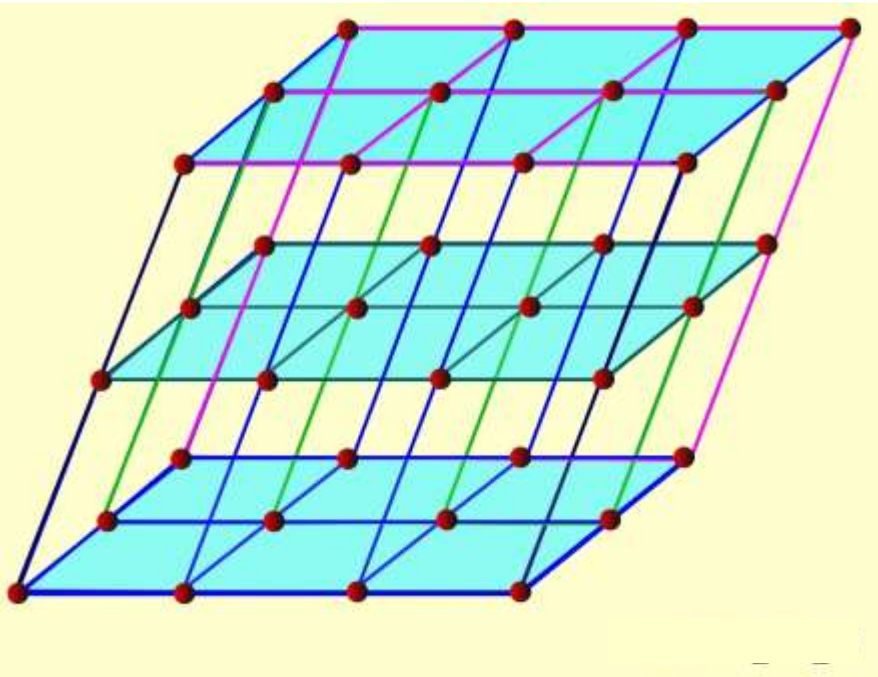
晶面的标志

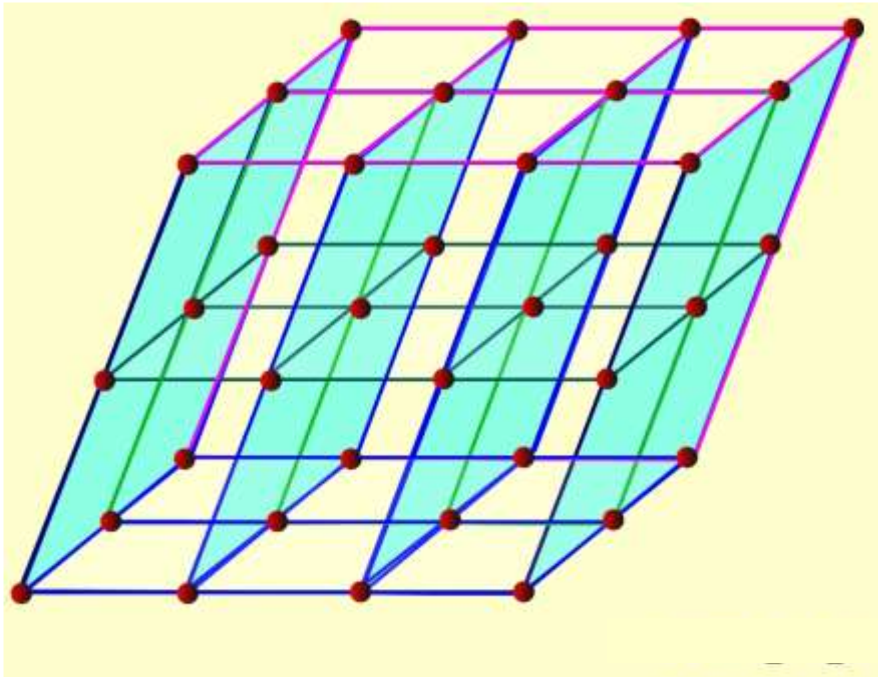
晶体的晶面 —— 在布拉伐格子中作一簇平行的平面，这些相互平行、等间距的平面可以将所有的格点包括无遗

—— 这些相互平行的平面称为晶体的晶面



同一个格子，两组不同的晶面族



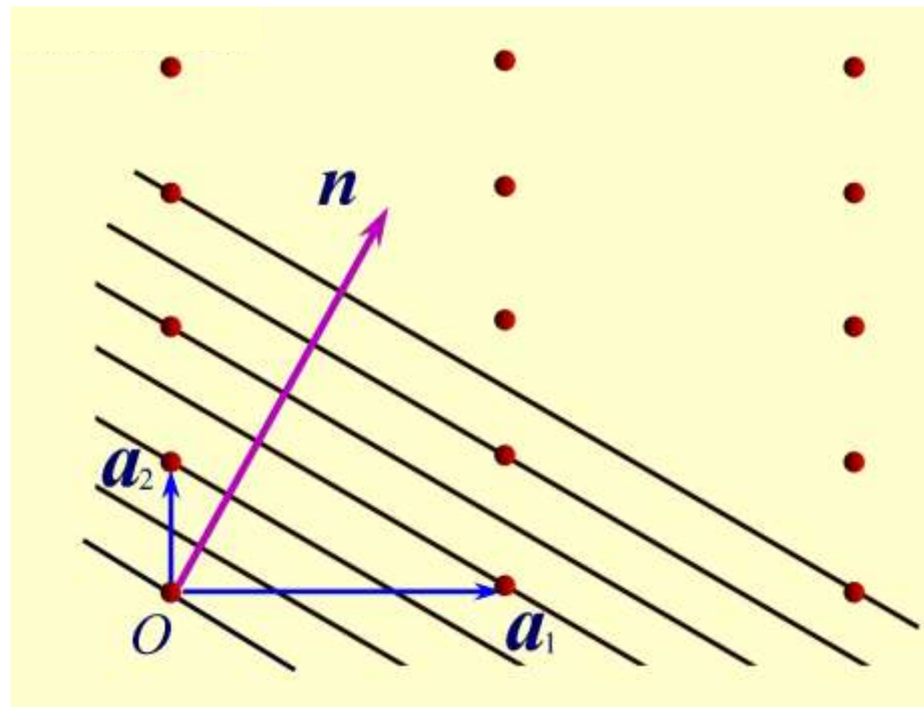


取某一原子为原点*O*，原胞的三个基矢 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

为坐标系的三个轴，不一定相互正交

—— 晶格中一族的晶面
不仅平行，并且等距

—— 一族晶面必包含了
所有格点而无遗漏



设 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 末端上的格点分别落在离原点的距离

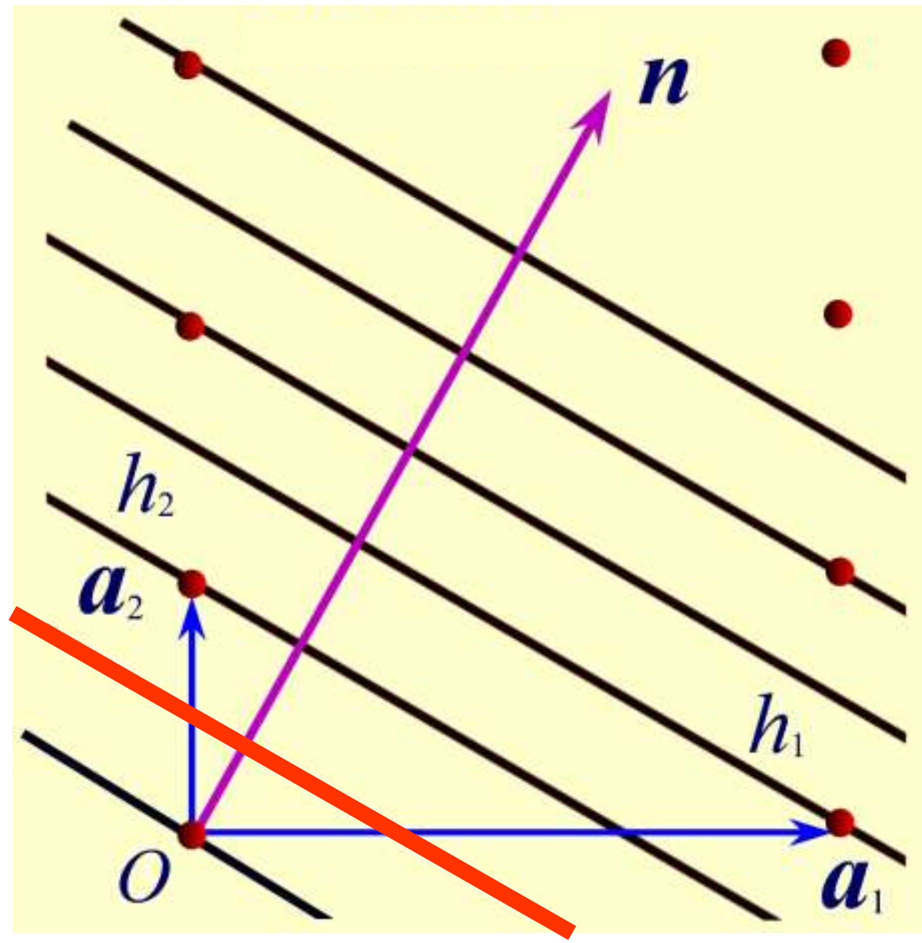
$h_1 d, h_2 d, h_3 d$ 的晶面上

h_1, h_2, h_3 —— 整数

d —— 晶面间距

—— 最靠近原点的晶面在坐标轴上的截距

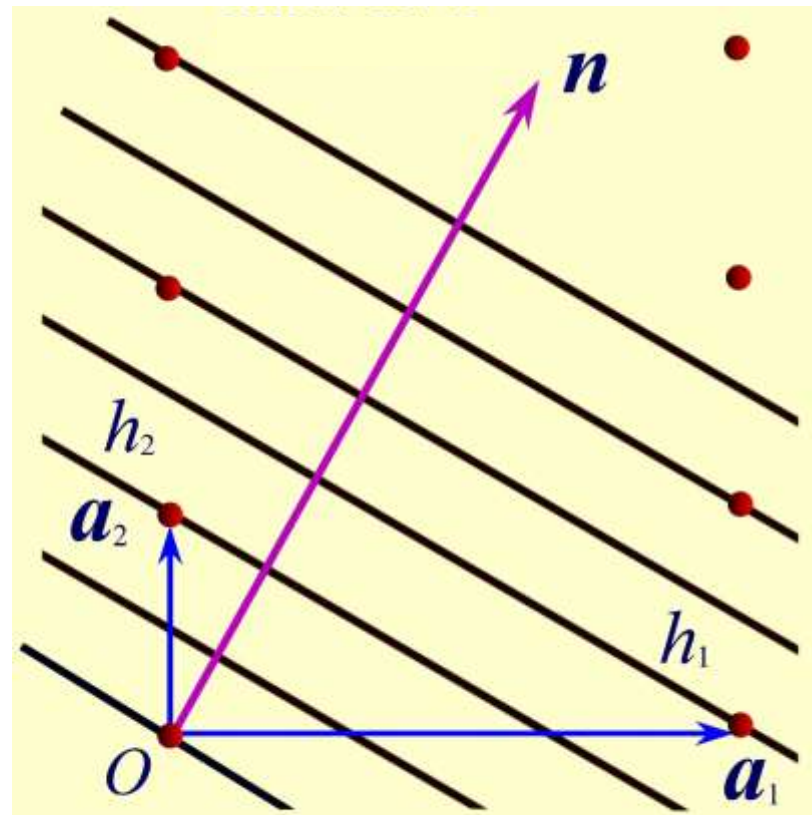
$$\frac{a_1}{h_1}, \frac{a_2}{h_2}, \frac{a_3}{h_3}$$



—— 同族中其它晶面的截距是 $\frac{a_1}{h_1}, \frac{a_2}{h_2}, \frac{a_3}{h_3}$ 的整数倍

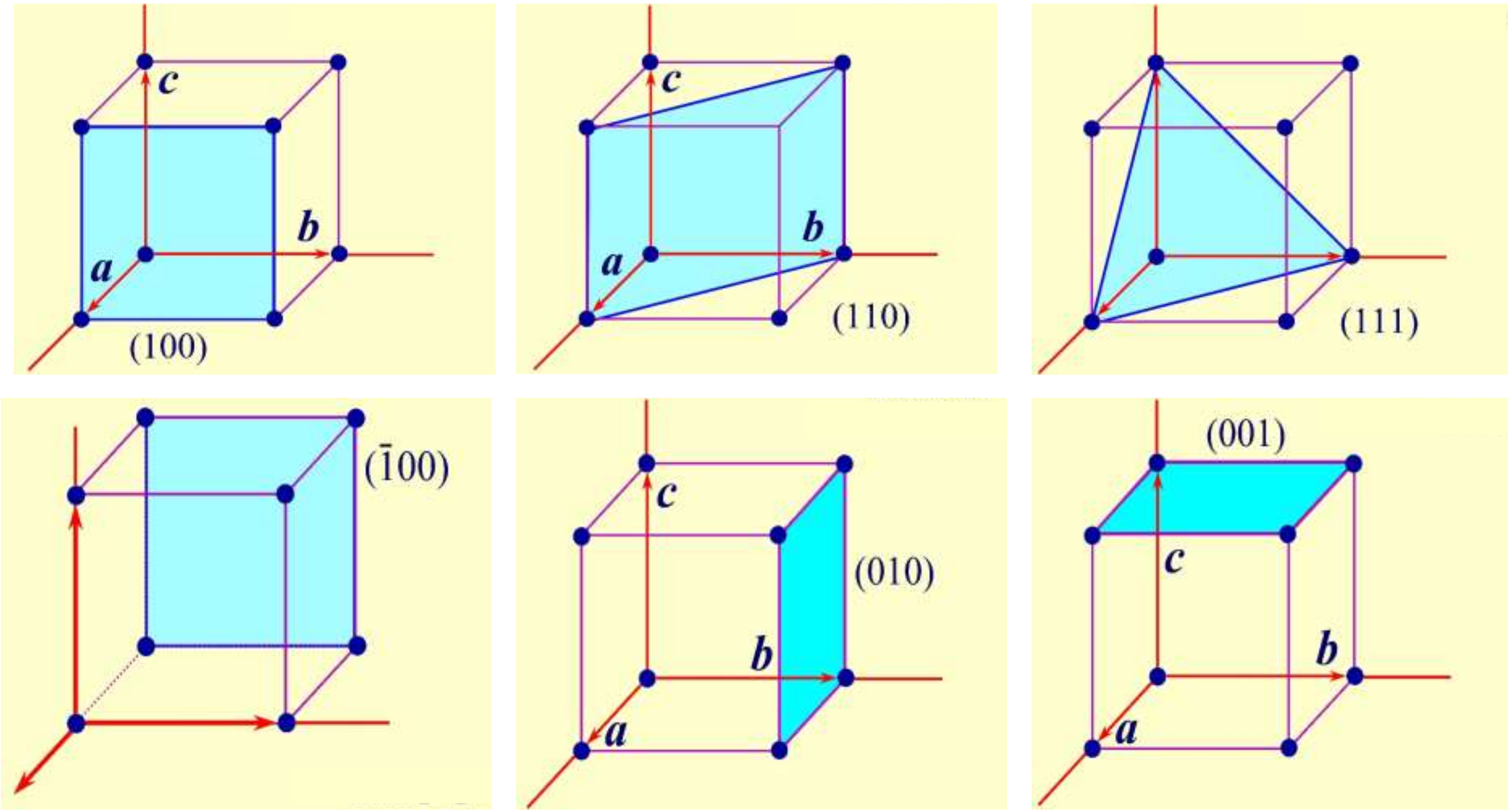
密勒指数 —— $(h_1h_2h_3)$

标记这个晶面系



—— 以单胞的基矢为参考，所得出的晶列指数和晶面的密勒指数，有着重要的意义

立方晶格的几种主要晶面标记

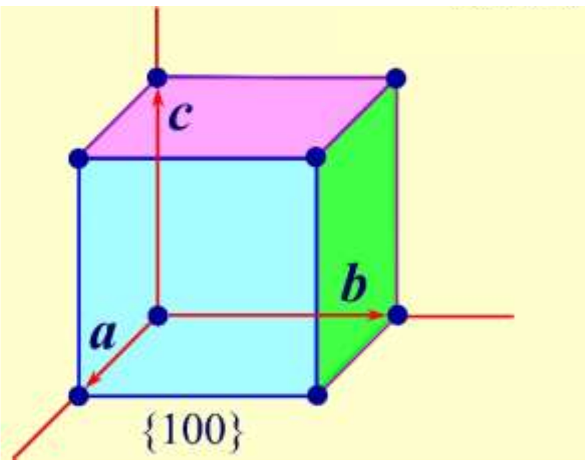


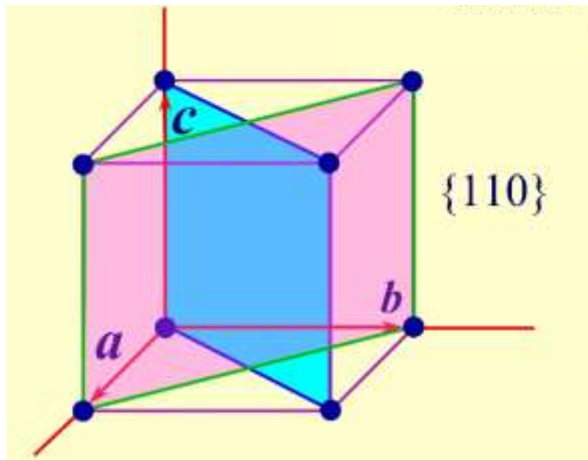
晶面密勒指数和晶面法线的晶向指数完全相同

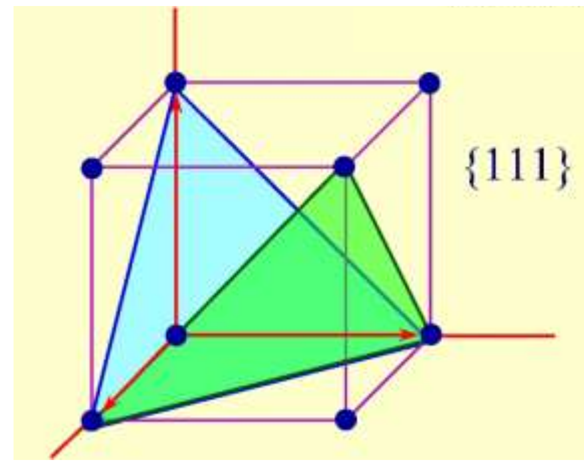
(100) 面等效的晶面数分别为：**3**个　表示为　{100}

(110) 面等效的晶面数分别为：**6**个　表示为　{110}

(111) 面等效的晶面数分别为：**4**个　表示为　{111}







—— 符号相反的晶面指数只是在区别晶体的外表面时才有意义, 在晶体内部这些面都是等效的

§ 1.4 晶体的对称性

对称操作 —— 一个物体在某一个正交变换下保持不变

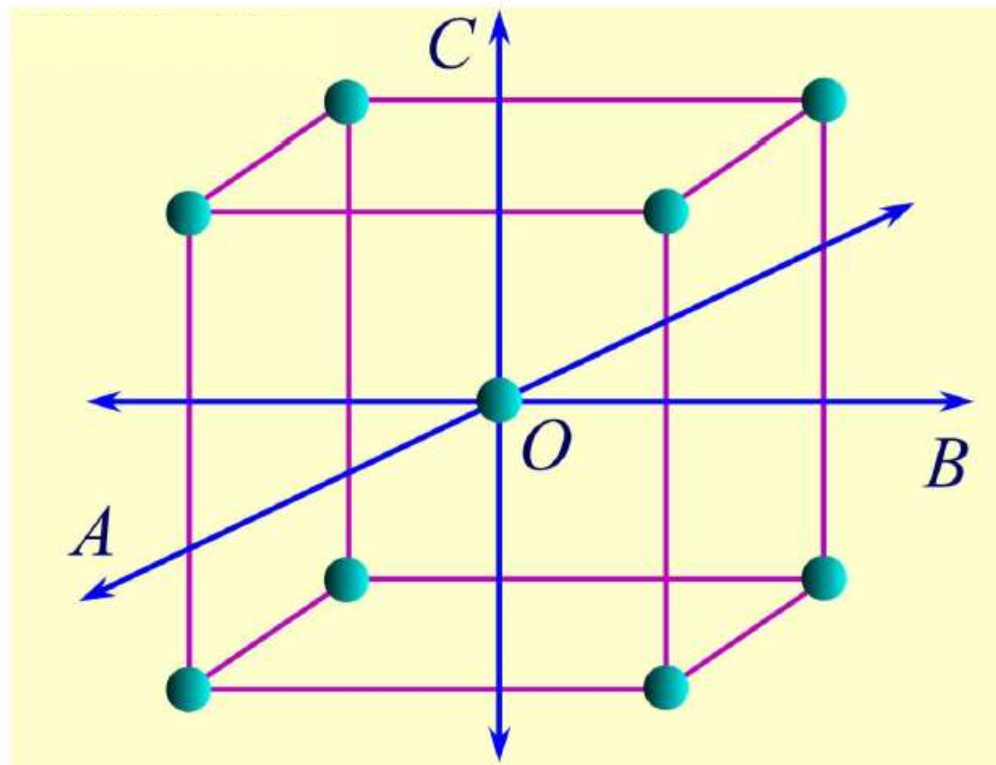
—— 物体的对称操作越多，其对称性越高

1. 立方体的对称操作

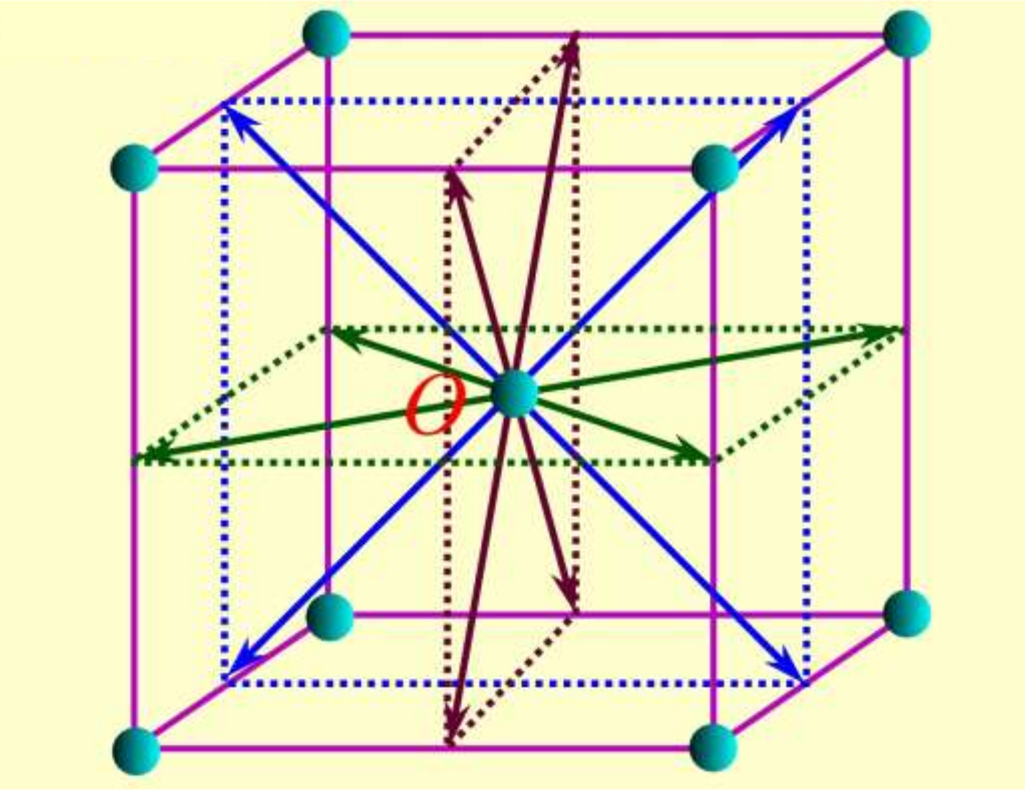
1) 绕三个立方轴转动

$$\frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}$$

—— 9个对称操作



2) 绕6条面对角线轴转动 π —— 共有6个对称操作

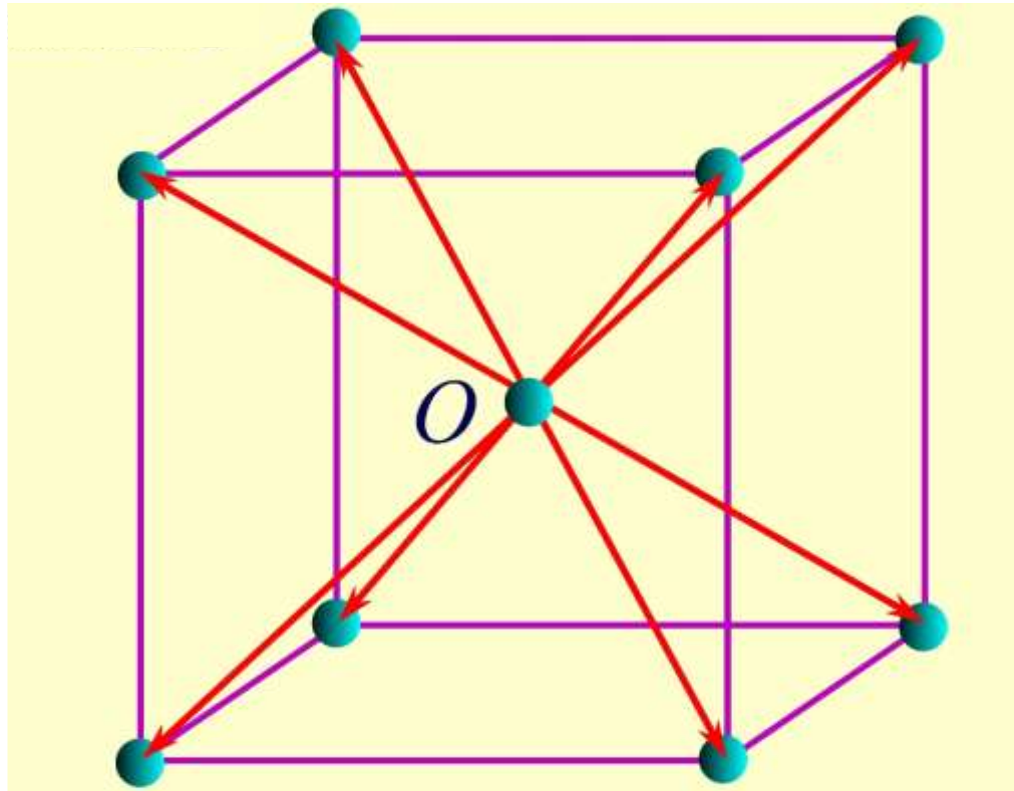


3) 绕**4**个立方体对角线轴转动 $\dfrac{2\pi}{3}, \dfrac{4\pi}{3}$

—— **8**个对称操作

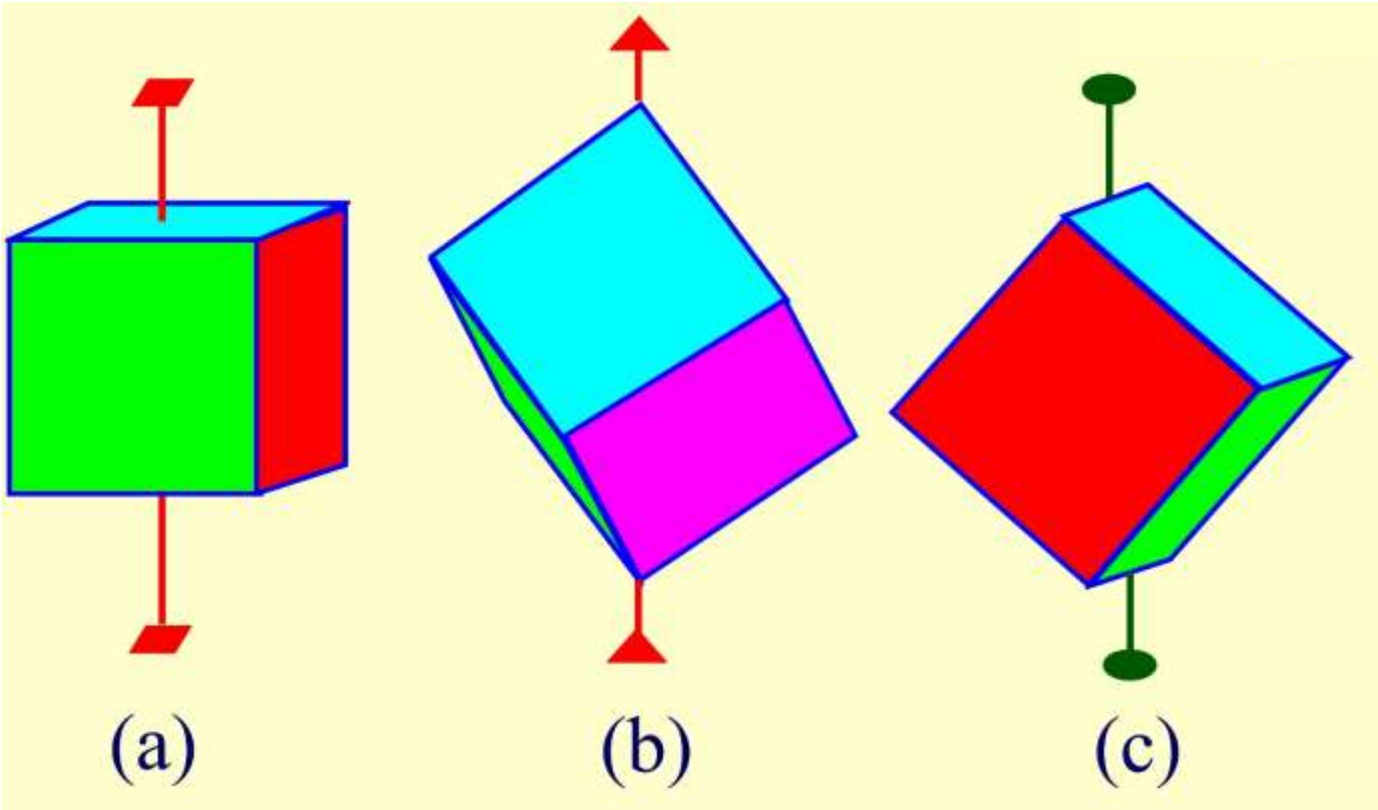
4) 不变操作

—— **1**个对称操作



5) 以上24个对称操作加中心反演仍是对称操作

—— 立方体的对称操作共有48个



取中心为原点，将晶体中任一点（ x_1， x_2， x_3 ）变成（ $-x_1$， $-x_2$， $-x_3$ ）

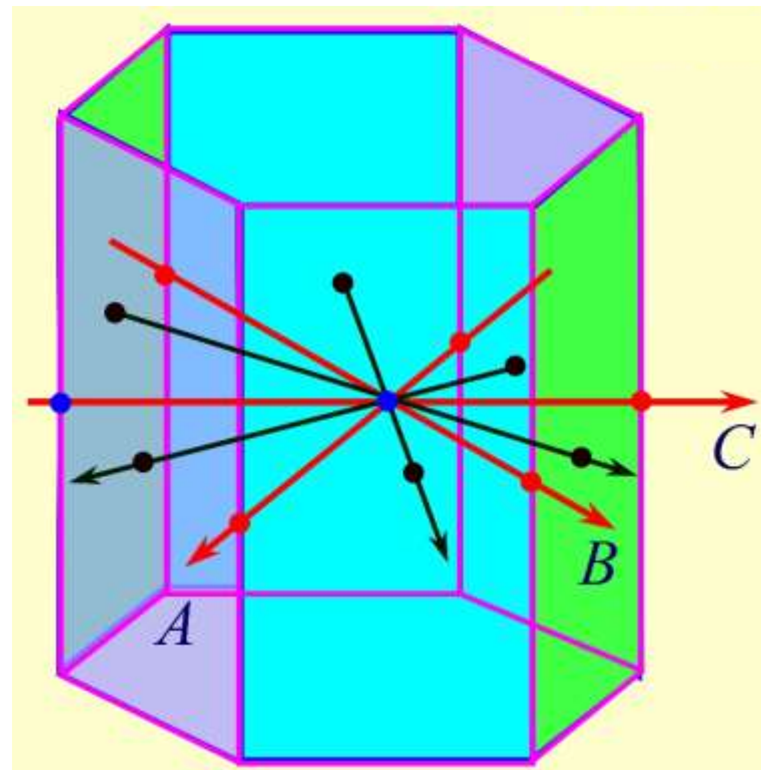
2 正六面柱的对称操作

1) 绕中心轴线转动 $\frac{\pi}{3}, \frac{2\pi}{3}, \pi, \frac{4\pi}{3}, \frac{5\pi}{3}$ —— 5个

2) 绕对棱中点连线转动 π —— 3个

3) 绕相对面中心连线转动 π

—— 3个



4) 不变操作 —— 1个

5) 以上12个对称操作加中心反演仍是对称操作

—— 正六面柱的对称操作有24个

3 对称素

"对称素"——简洁明了地概括一个物体的对称性

对称素 —— 一个物体的旋转轴、旋转－反演轴

一个物体绕某一个转轴转动 $2\pi/n$ ，以及其倍数不变时

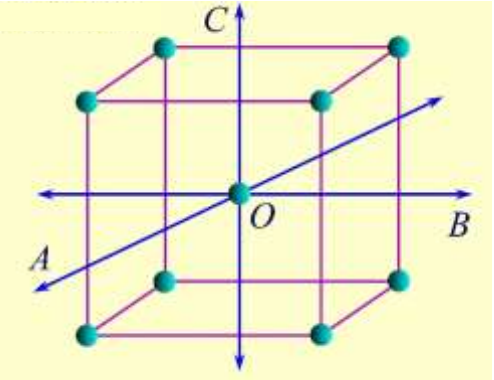
—— 该轴为物体**n重旋转轴**，计为 n

一个物体绕某一个转轴转动 $2\pi/n$ 加上中心反演的联合操作，以及其联合操作的倍数不变时

—— 该轴为物体**n重旋转－反演轴**，计为 $\bar{n}$

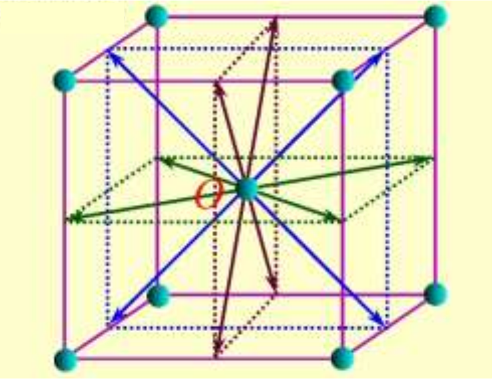
立方体

立方轴 $(\frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2})$ 为**4**重轴，计为**4**



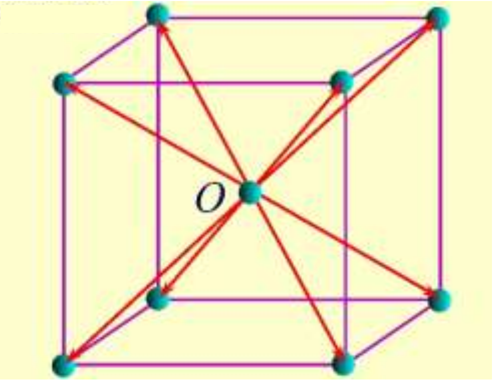
同时也是**4**重旋转－反演轴，计为 $\bar{4}$

面对角线 (π) 为**2**重轴，计为**2**



同时也是**2**重旋转－反演轴，计为 $\bar{2}$

体对角线轴 $(\frac{2\pi}{3}, \frac{4\pi}{3})$ 为**3**重轴，计为**3**



同时也是**2**重旋转－反演轴，计为 $\bar{3}$

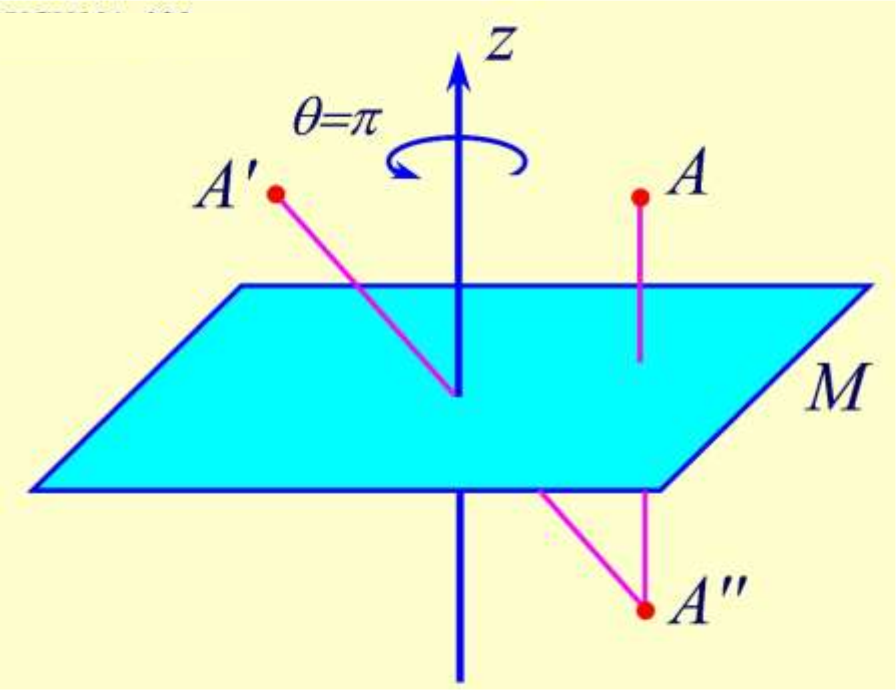
对称素 $\bar{2}$ 的含义

—— 先绕轴转动，再作中心反演

A”点实际上是A点在通过中心垂直于转轴的平面M的镜像，

表明对称素 $\bar{2}$ 存在一个对称面M

—— 对称素为镜面



一个物体的全部对称操作构成一个对称操作群

4 群的概念

—— 群代表一组“元素”的集合，$G \equiv \{E, A, B, C, D \ldots\ldots\}$

这些“元素”被赋予一定的“乘法法则”，满足下列性质:

1) 集合G中任意两个元素的“乘积”仍为集合内的元素

—— 若 $A, B \in G$, 则 $AB=C \in G$. 叫作群的封闭性

2) 存在单位元素E, 使得所有元素满足：$AE = A$

3) 对于任意元素A, 存在逆元素A^{-1}, 有：$AA^{-1}=E$

4) 元素间的“乘法运算”满足结合律：$A(BC)=(AB)C$

单位元素 —— 不动操作

任意元素的逆元素 —— 绕转轴角度θ，其逆操作为绕转轴角度－θ；中心反演的逆操作仍是中心反演；

连续进行A和B操作

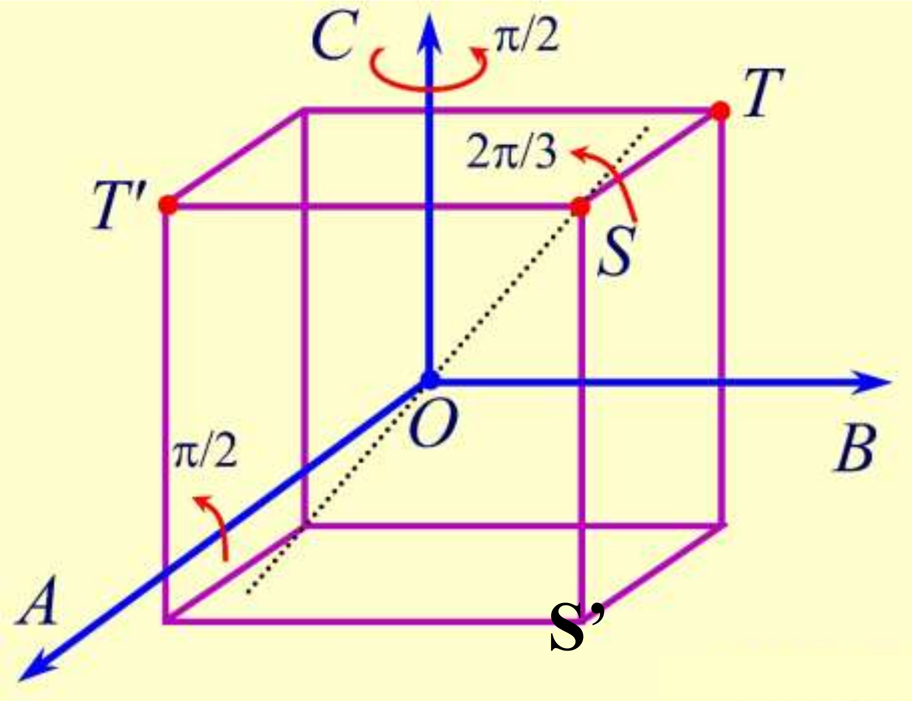
—— 相当于C操作

A 操作 —— 绕OA轴转动π/2

—— S点转到T’点

B 操作 —— 绕OC轴转动π/2

—— T’点转到S点



上述操作中S和O没动，而T点转动到T’点

—— 相当于一个操作C：绕OS轴转动2π/3

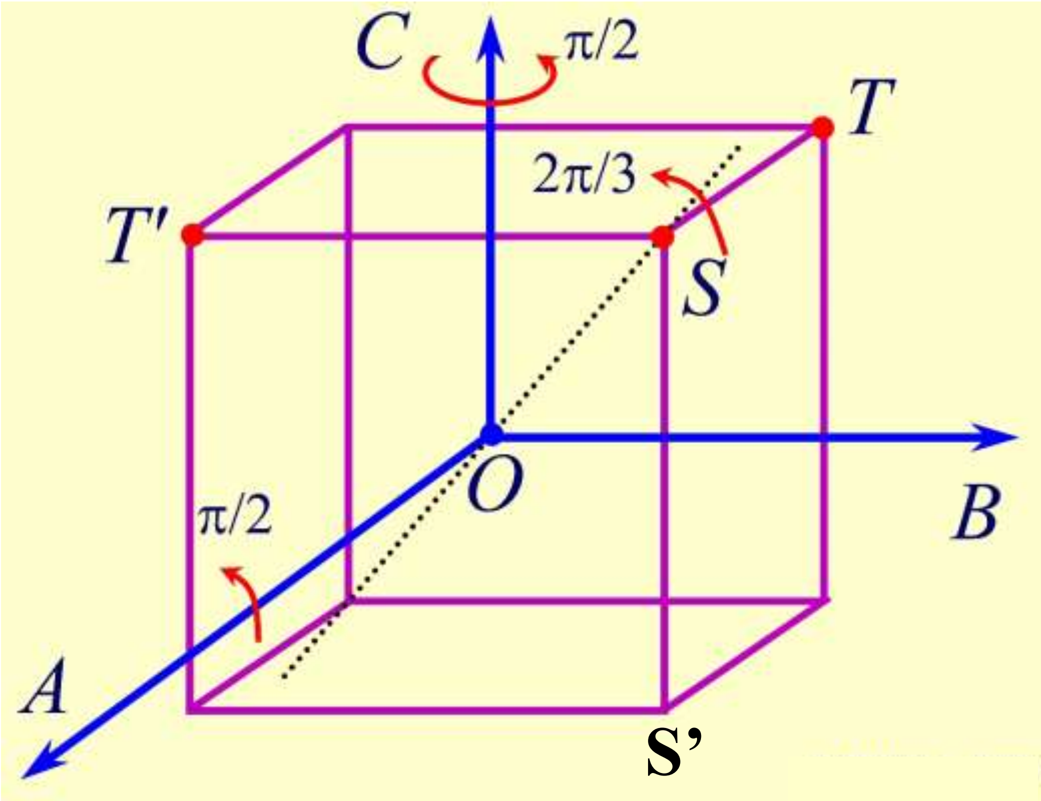
表示为 $C = BA$

—— 群的封闭性

可以证明

$$A(BC) = (AB)C$$

—— 满足结合律



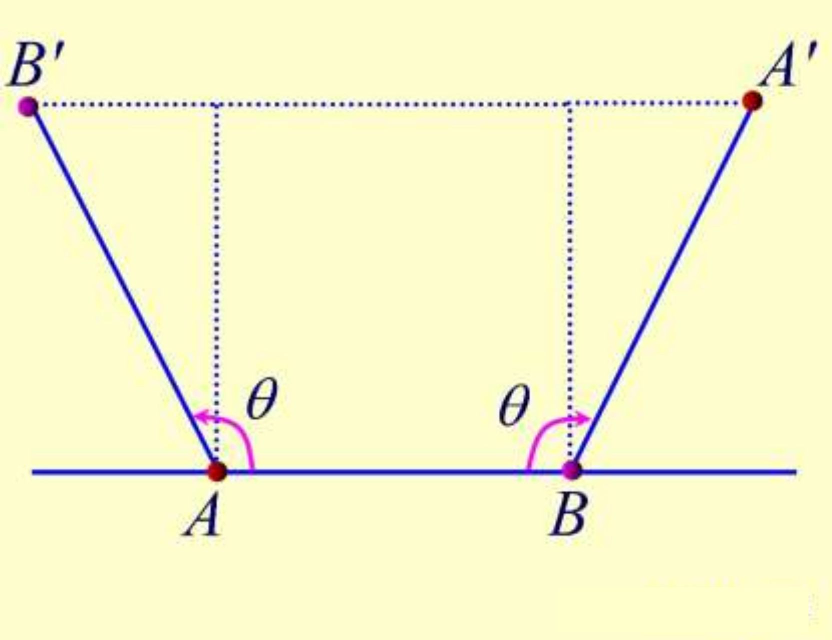
晶体中存在多少个多重轴？

设想有一个对称轴垂直于平面，平面内晶面的格点可以用 $l_1\vec{a}_1 + l_2\vec{a}_2$ 来描述

—— 绕通过**A**的转轴的任意对称操作，转过角度**θ**

B点转到**B'**点 —— **B'**点必有一个格点

A和**B**两点等价——以通过**B**点的轴顺时针转过**θ**



A点转到**A'**点

—— **A'**点必有一个格点

且有 $\overline{B'A'} = n\overline{AB}$ — **n**为整数

$$\overline{B'A'} = n\overline{AB}$$

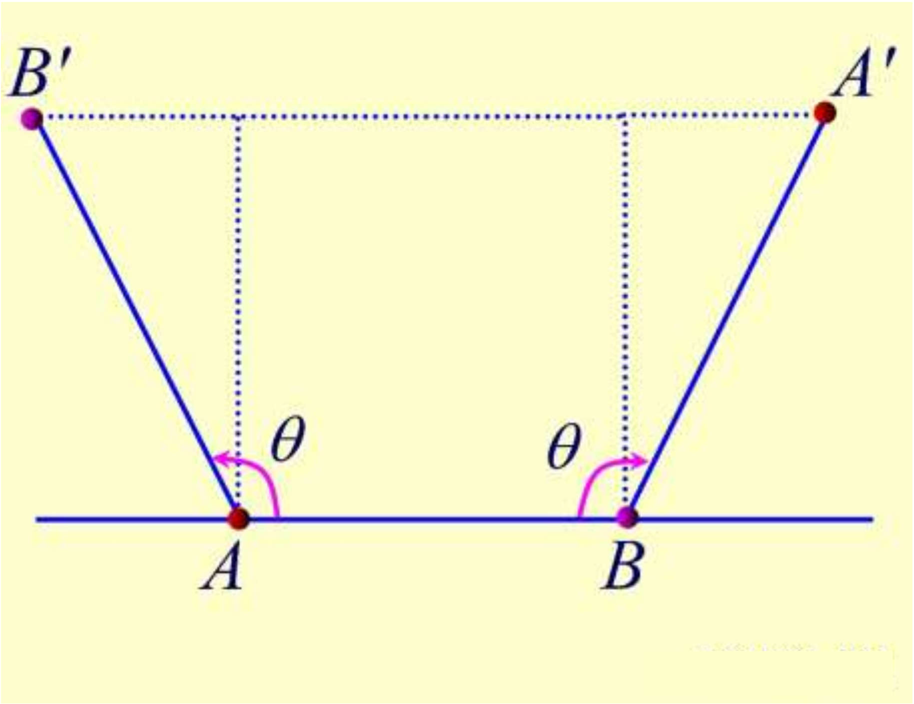
$$\overline{B'A'} = \overline{AB}(1-2\cos\theta)$$

$$1-2\cos\theta = n$$

$$\cos\theta : -1 \sim +1$$

$$n = -1,\quad 0,\quad 1,\quad 2,\quad 3$$

$$\theta = 0^0,\ 60^0,\ 90^0,\ 120^0,\ 180^0$$



——任何晶体的宏观对称性只能有以下十种对称素

$1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 6$

$\bar{1},\ \bar{2},\ \bar{3},\ \bar{4},\ \bar{6}$

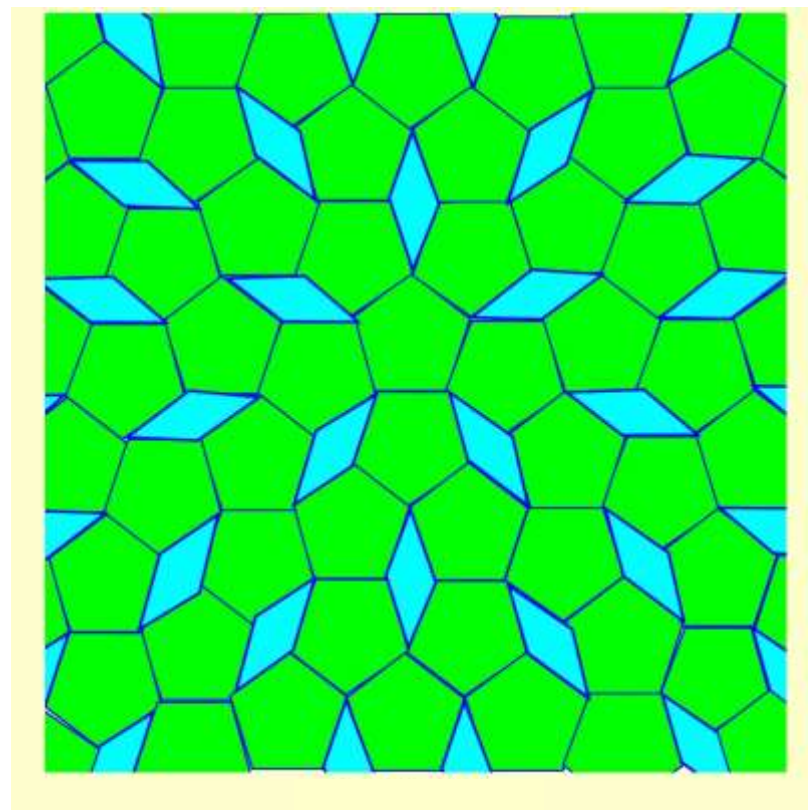
点群 —— 以10种对称素为基础组成的对称操作群

十种对称素 1, 2, 3, 4, 6

$\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$

—— 长方形、正三角形、正方形和正六方形可以在平面内周期性重复排列

—— 正五边形及其它正n边形则不能作周期性重复排列



理论证明由10种对称素只能组成32种不同的点群

—— 晶体的宏观对称只有32个不同类型

C_1

—— 不动操作，只含一个元素，表示没有任何对称性的晶体

回转群 C_n

只包含一个旋转轴的点群 C_2，C_3，C_4，C_6 —— **4**个

—— 下标表示是几重旋转轴

双面群 D_n

包含一个**n**重旋转轴和**n**个与之对应的二重轴的点群

D_2，D_3，D_4，D_6 —— **4**个

O_h 群 —— 立方点群, 含有48个对称操作

T_d 群 —— 正四面体点群, 含有24个对称操作

O 群 —— 立方点群 O_h 的24个纯转动操作

T 群 —— 正四面体点群 T_d 的12个纯转动操作

T_h 群 T 群加上中心反演

点对称操作加上平移操作构成空间群。全部晶体构有230种空间群，即有230种对称类型。

§ 1.7 晶格的对称性

—— 32种点群描述的晶体对称性

—— 对应的只有14种布拉伐格子

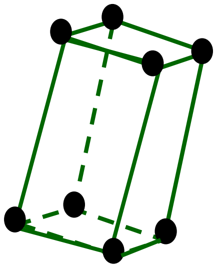
—— 分为7个晶系

—— 单胞的三个基矢 $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ 沿晶体的对称轴或对称面的法向，在一般情况下，它们构成斜坐标系

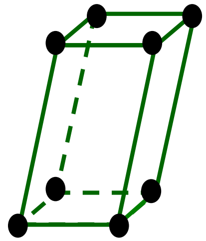
三个晶轴之间的夹角

$$\begin{cases} \angle(\vec{b}, \vec{c}) = \alpha \\ \angle(\vec{c}, \vec{a}) = \beta \\ \angle(\vec{a}, \vec{b}) = \gamma \end{cases}$$

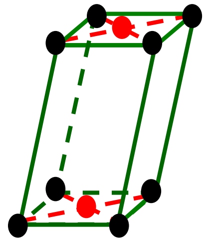
1.三斜晶系：	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma$	简单三斜(1)
2.单斜晶系：	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^0 \neq \beta$	简单单斜(2)　底心单斜(3)
3.三角晶系：	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^0 < 120^0$	三角(4)
4.正交晶系：	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$	简单正交(5)，底心正交(6) 体心正交(7)，面心正交(8)
5.四角系： (正方晶系)	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$	简单四角(9)，体心四角(10)
6.六角晶系：	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^0 \quad \gamma = 120^0$	六角(11)
7.立方晶系：	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$	简立方(12)，体心立方(13)， 面心立方(14)



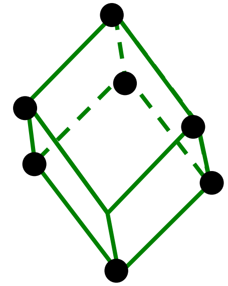
简单三斜
(1)



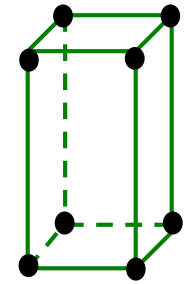
简单单斜
(2)



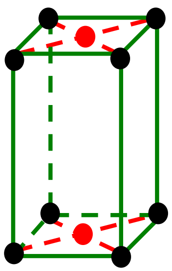
底心单斜
(3)



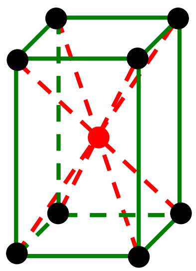
三角
(4)



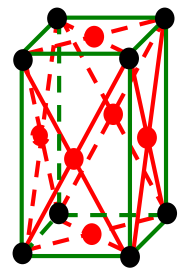
简单正交
(5)



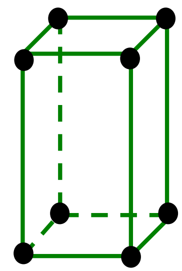
底心正交
(6)



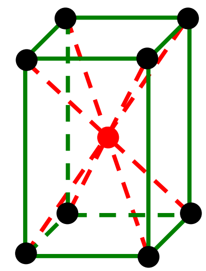
体心正交
(7)



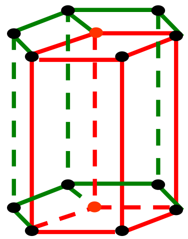
面心正交
(8)



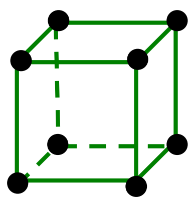
简单四角
(9)



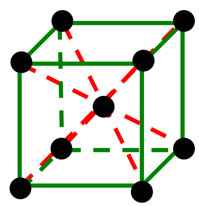
体心四角
(10)



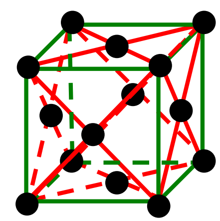
六角
(11)



简立方
(12)

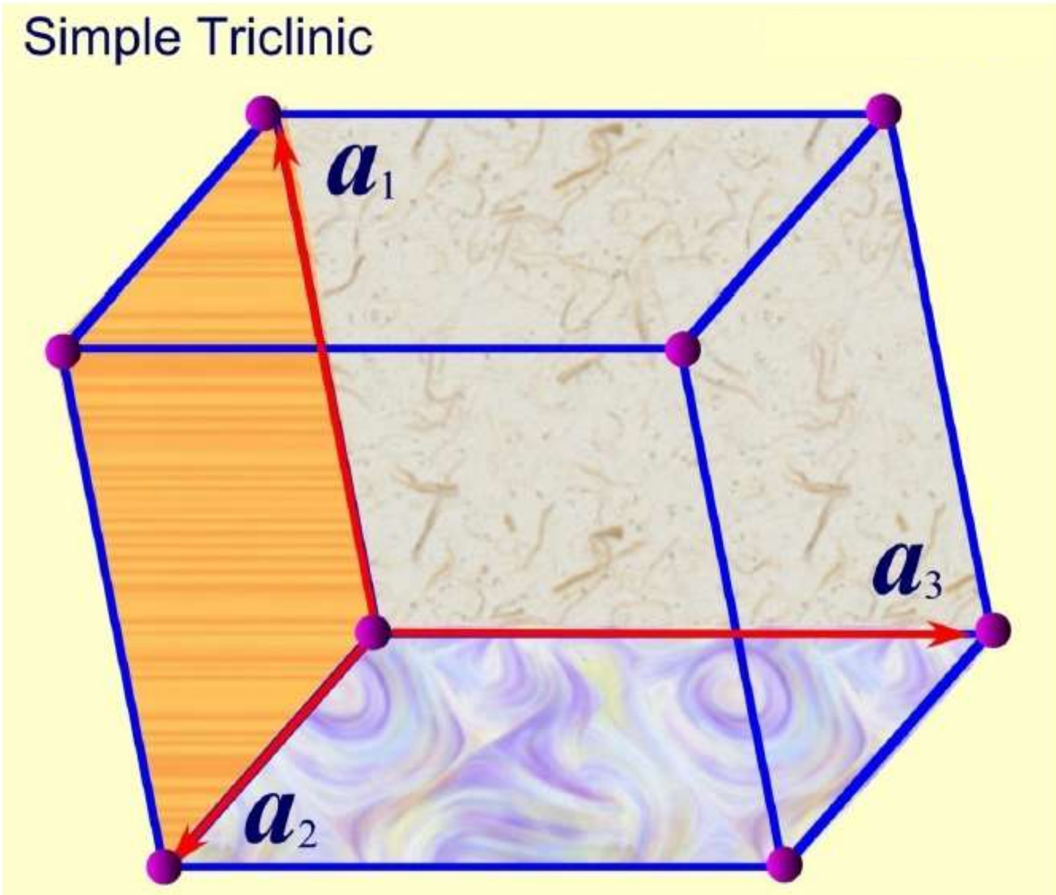


体心立方
(13)



面心立方
(14)

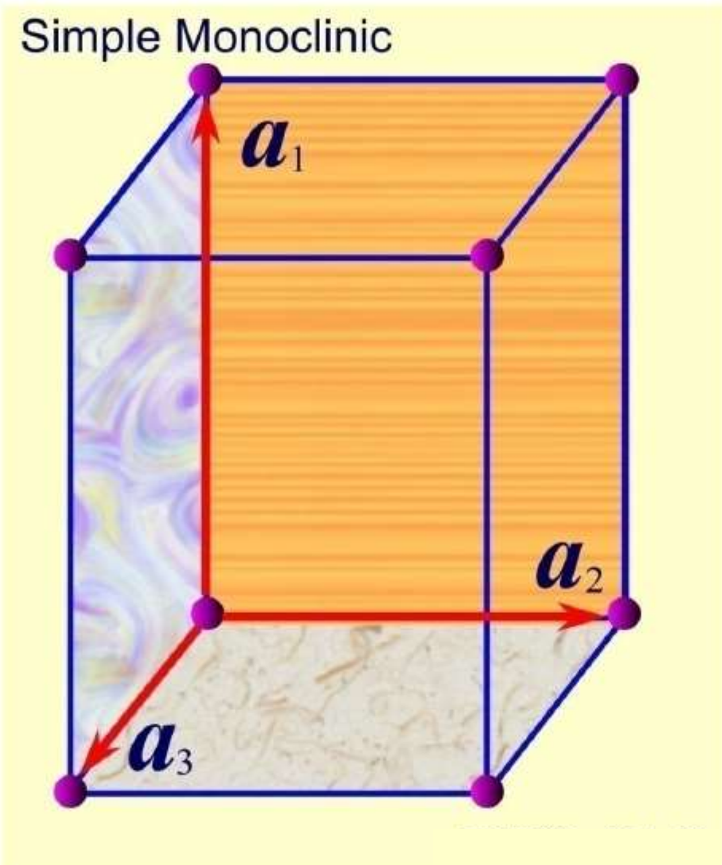
1) 简单三斜 $a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$

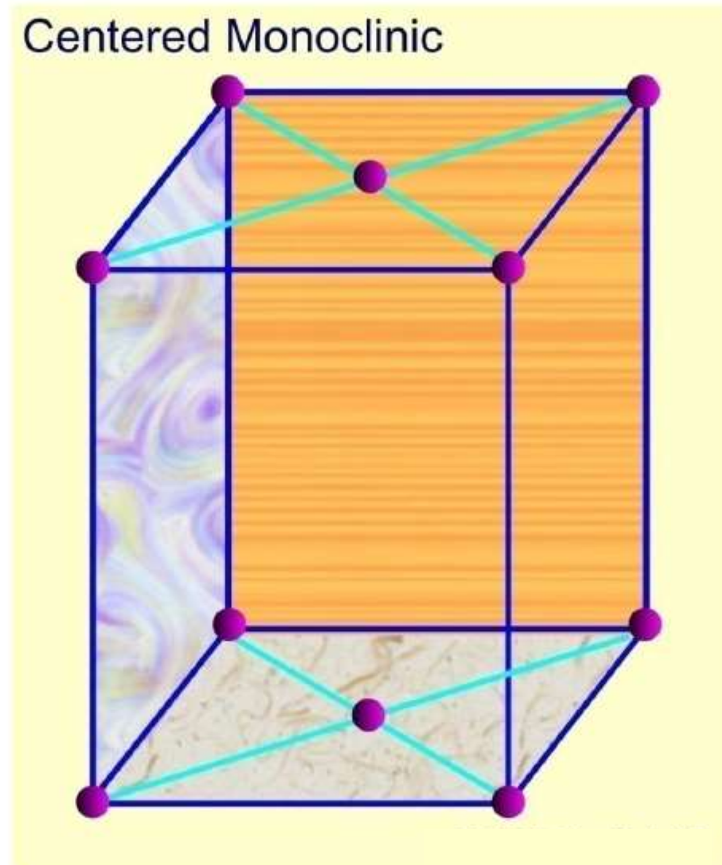


C_1, C_s

2) 简单单斜　$a_2 \perp a_1, \ a_3$

3) 底心单斜　$a_1 \neq a_2 \neq a_3$　　$C_2, \ C_s, \ C_{2h}$





4) 简单正交

5) 底心正交

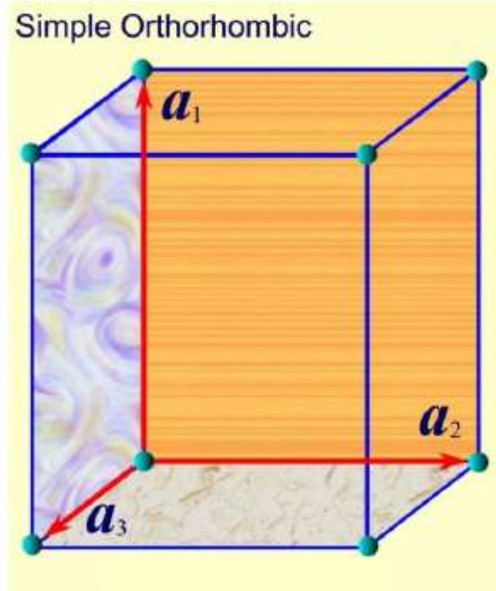
6) 体心正交

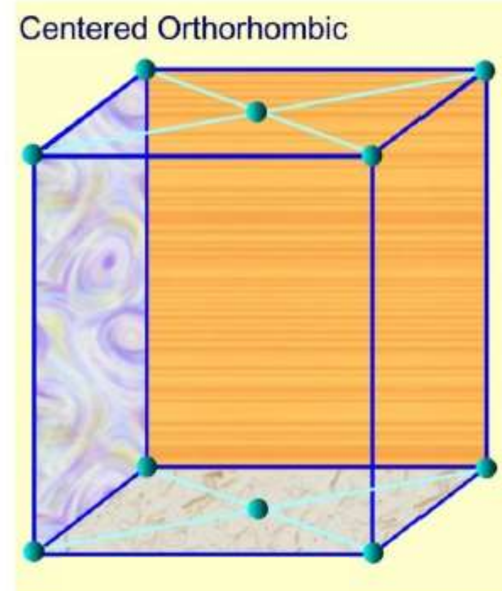
7) 面心正交

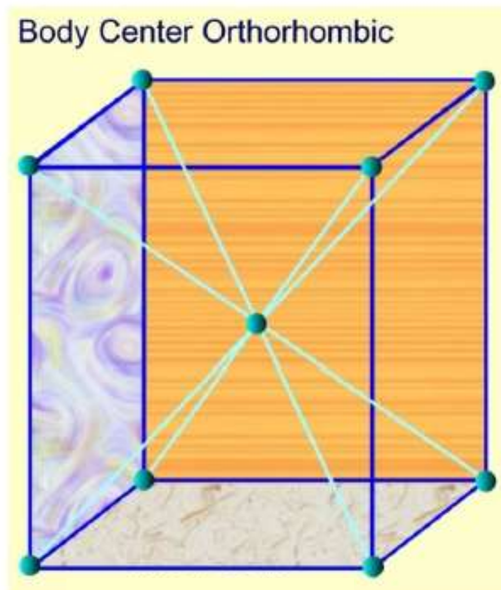
$$a_1 \neq a_2 \neq a_3$$

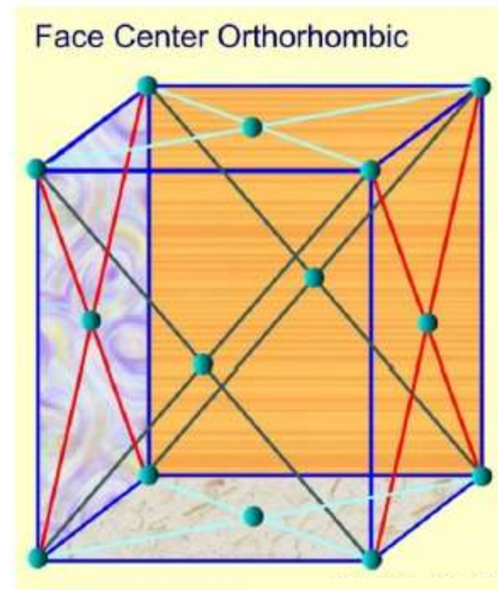
$$a_1 \perp a_2 \perp a_3$$

$$D_2, C_{2v}, D_{2h}$$







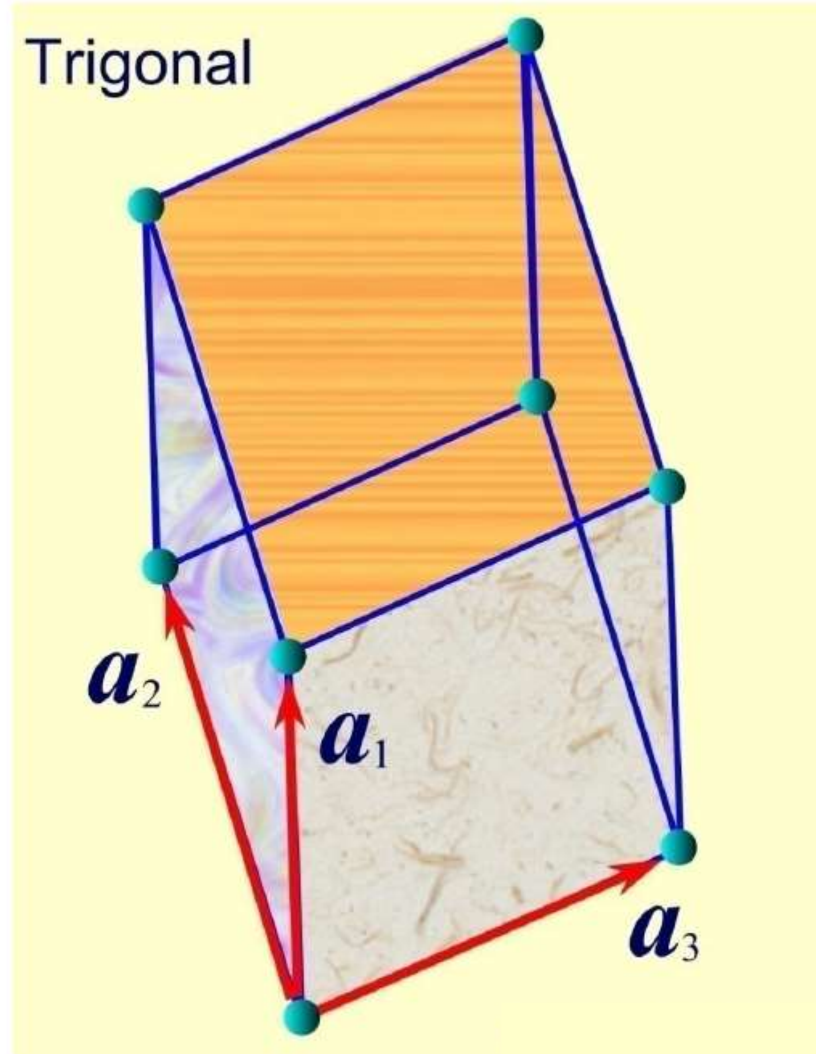


8) 三角

$$a_1 = a_2 = a_3$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^0 < 120^0$$

C_3，S_6，D_3，C_{3v}， D_{3d}



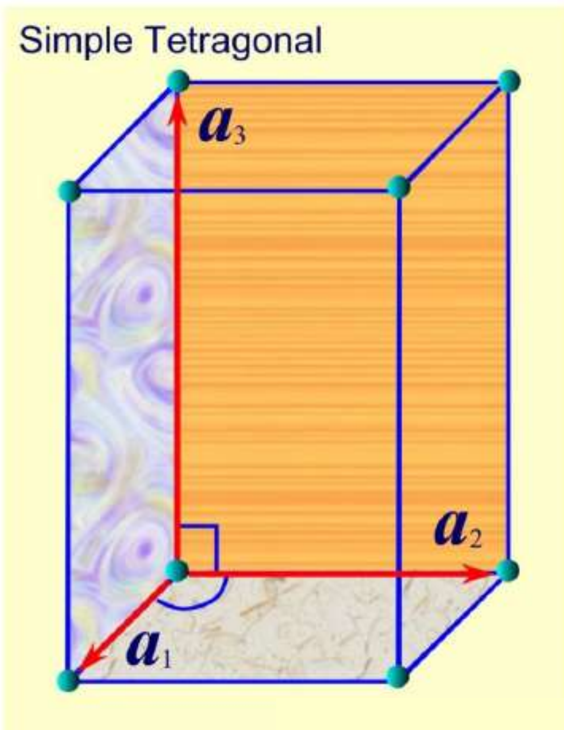
9) 简单四方（四角）

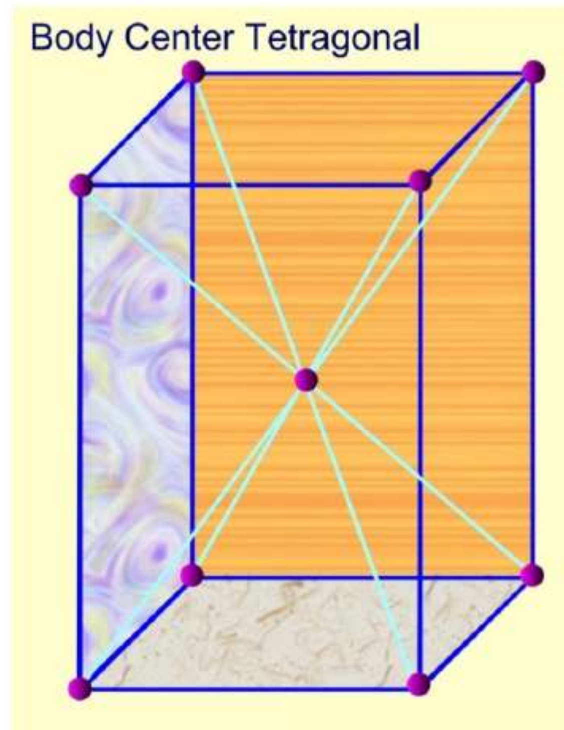
10) 体心四方（四角）

$$a_1 = a_2 \neq a_3$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^0$$

$$C_4, \ C_{4h}, \ D_4, \ C_{4v}, \ D_{4h}, \ S_4, \ D_{2d}$$





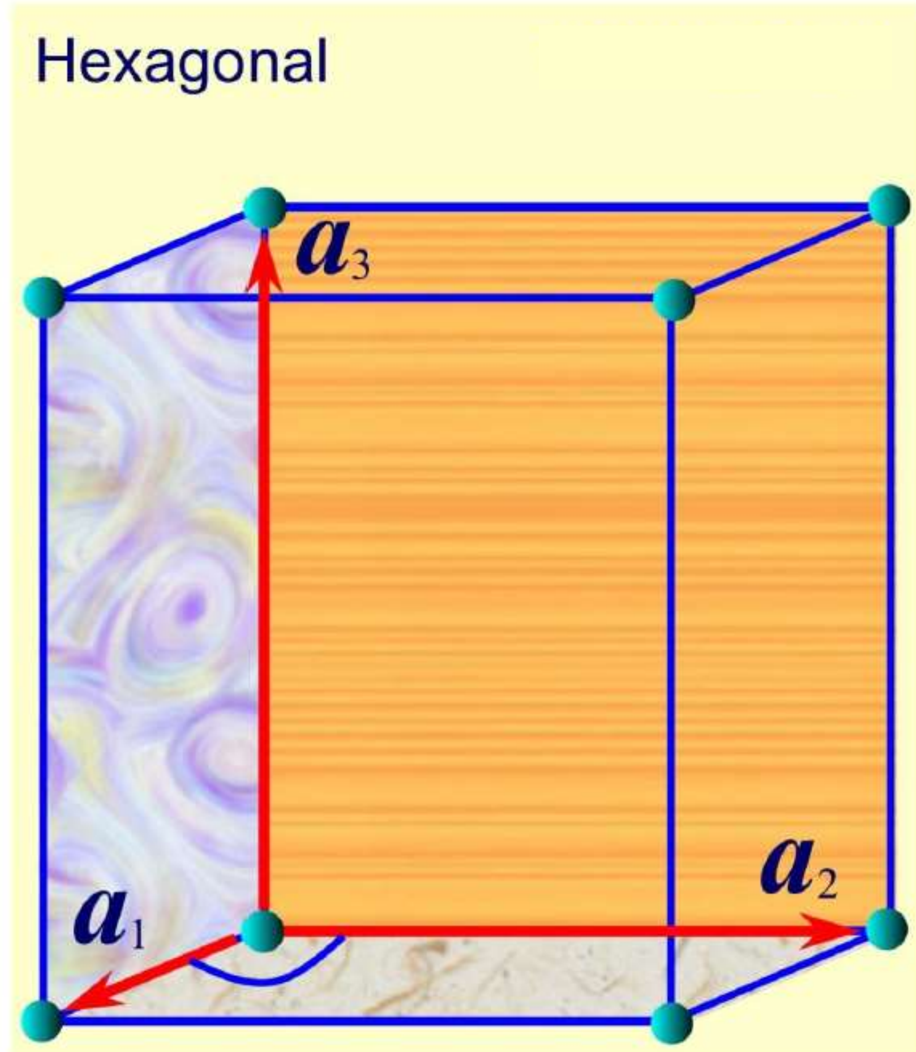
11）六角

$a_1 = a_2 \neq a_3$

$a_3 \perp a_1, \ a_2$

$\angle a_1 a_2 = 120^0$

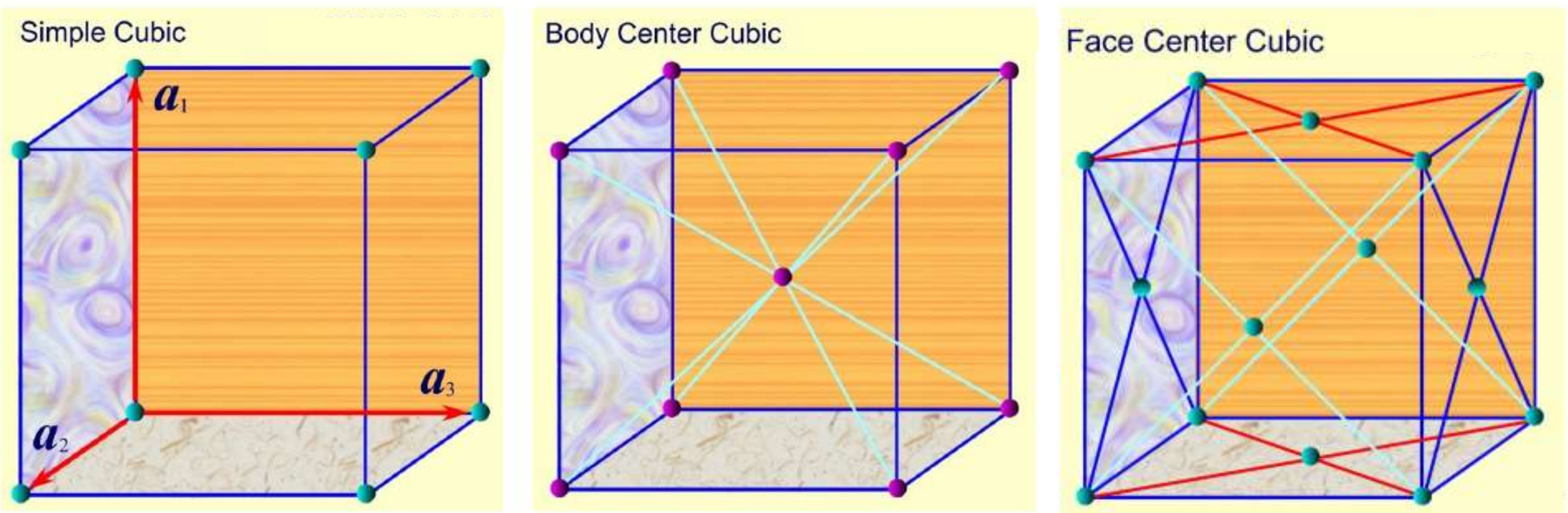
$C_6, \ C_{6h}, \ D_6, \ C_{3v}$
$D_{6h}, \ C_{3h}, \ D_{2h}$



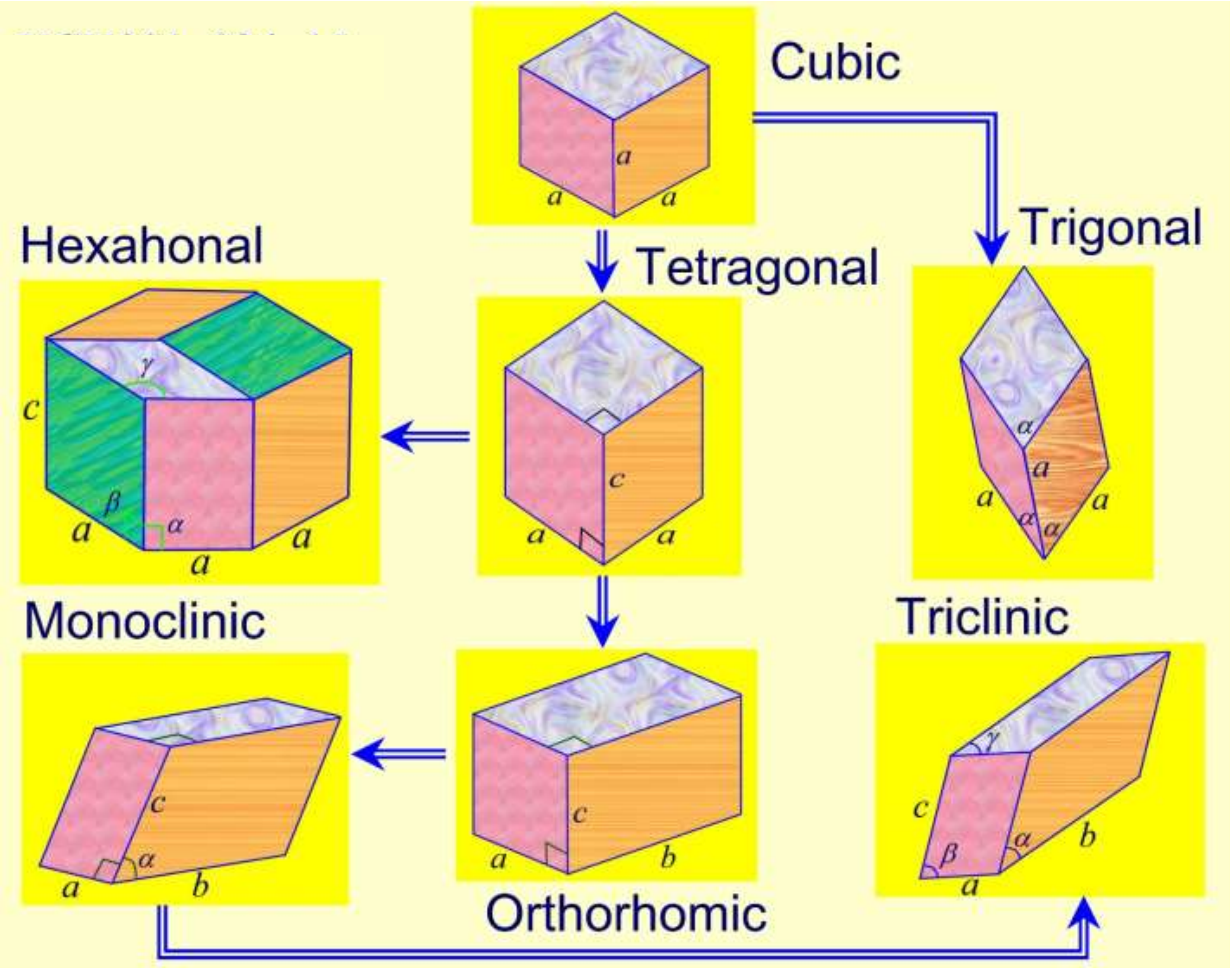
12) 简立方　　$a_1 = a_2 = a_3$

13) 体心立方　　$\alpha = \beta = \gamma = 90^0$

14) 面心立方　　$T,\ T_h,\ T_d,\ O,\ O_h$



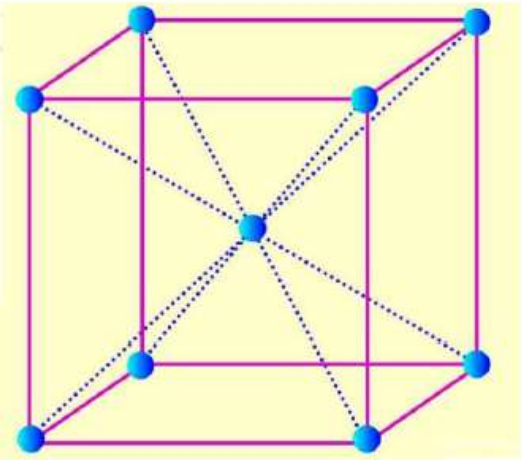
7大晶系的形成和转化



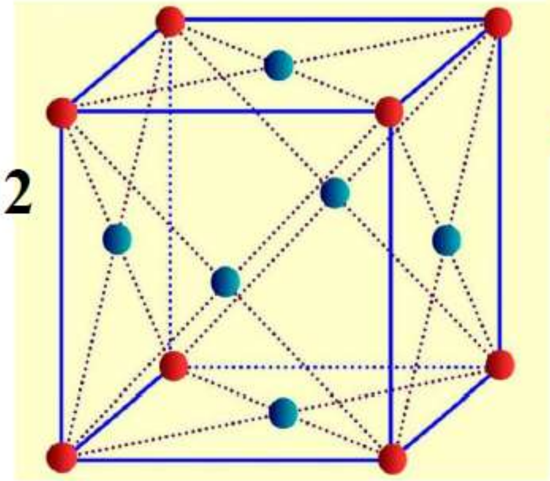
Cubic
a
a
a
Trigonal
Hexahonal
Tetragonal
γ
c
β
α
a
a
a
c
a
a
α
a
a
a
α
α
Monoclinic
Triclinic
c
α
a
b
c
a
b
γ
c
β
α
a
b
Orthorhomic

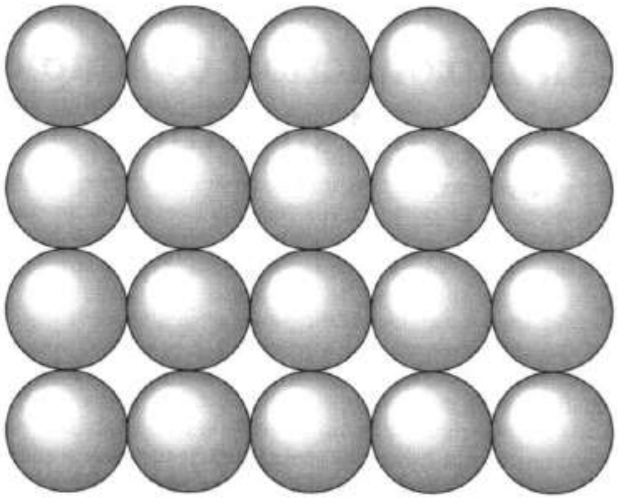
配位数(CN)---注意是针对原子而不是格点而言

- 最近邻：离某一原子最近的原子，称为该原子的最近邻
- 配位数：晶体中一个原子的最近邻原子数
- 体心立方：配位数是 8

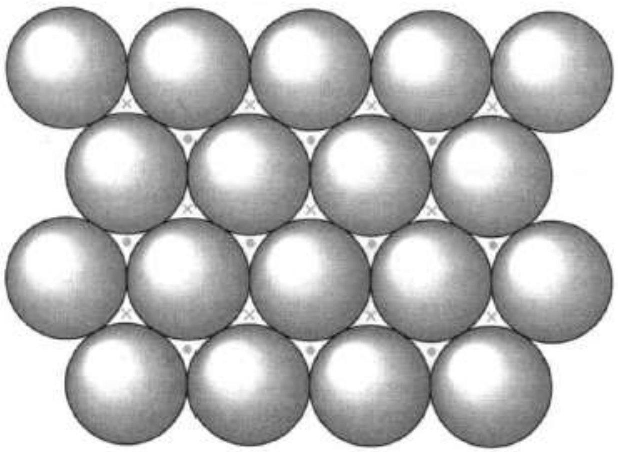


- 面心立方：配位数是 12



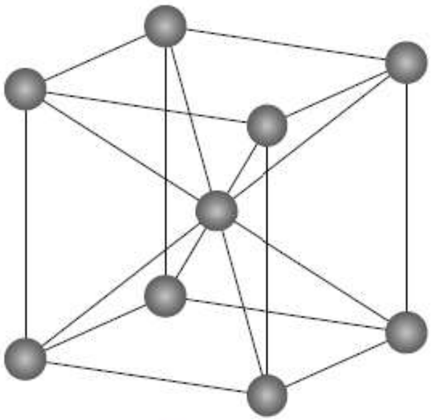


配位数是 4



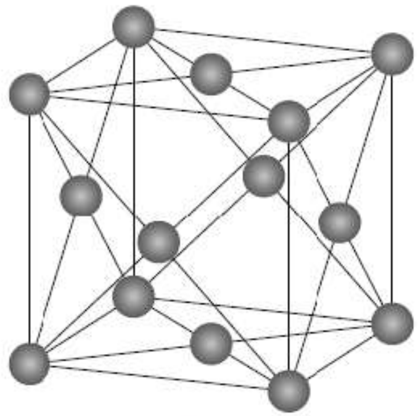
配位数是 6

二维体系最大的堆积方式



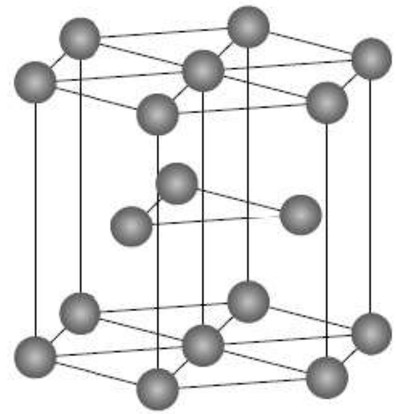
bcc

CN=8



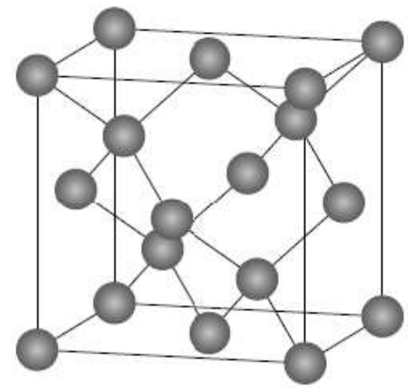
fcc

CN=12



hcp

CN=12



Diamond

CN=4

- 最大配位数：12(密堆积)

  * 每个原子与同层六个原子相切；

  上下两层各与三个原子相切

- 不可能的配位数：11、10、9、7、5(因对称)

  * 因此，可能的配位数是12、8、6、4、3、2

配位数为8：体心，氯化铯型结构

配位数为6：氯化钠型结构

配位数为4：四面体结构

配位数为3：层状结构

配位数为2：链状结构

§ 1.5 晶体的X射线衍射与倒格子

- X射线衍射是研究晶体结构最有效的手段。

- 除了X射线衍射外，还有电子衍射（适合薄膜）、中子衍射（研究氢、碳在晶体中的位置）等。

- 共同特点：波长和晶格常数是同量级（零点几个纳米）

X射线是由被高电压U加速了的电子，打击在“靶极”物质上而产生的一种电磁波。

$$h\gamma_{\max} = eU \qquad h\frac{c}{\lambda_{\min}} = eU$$

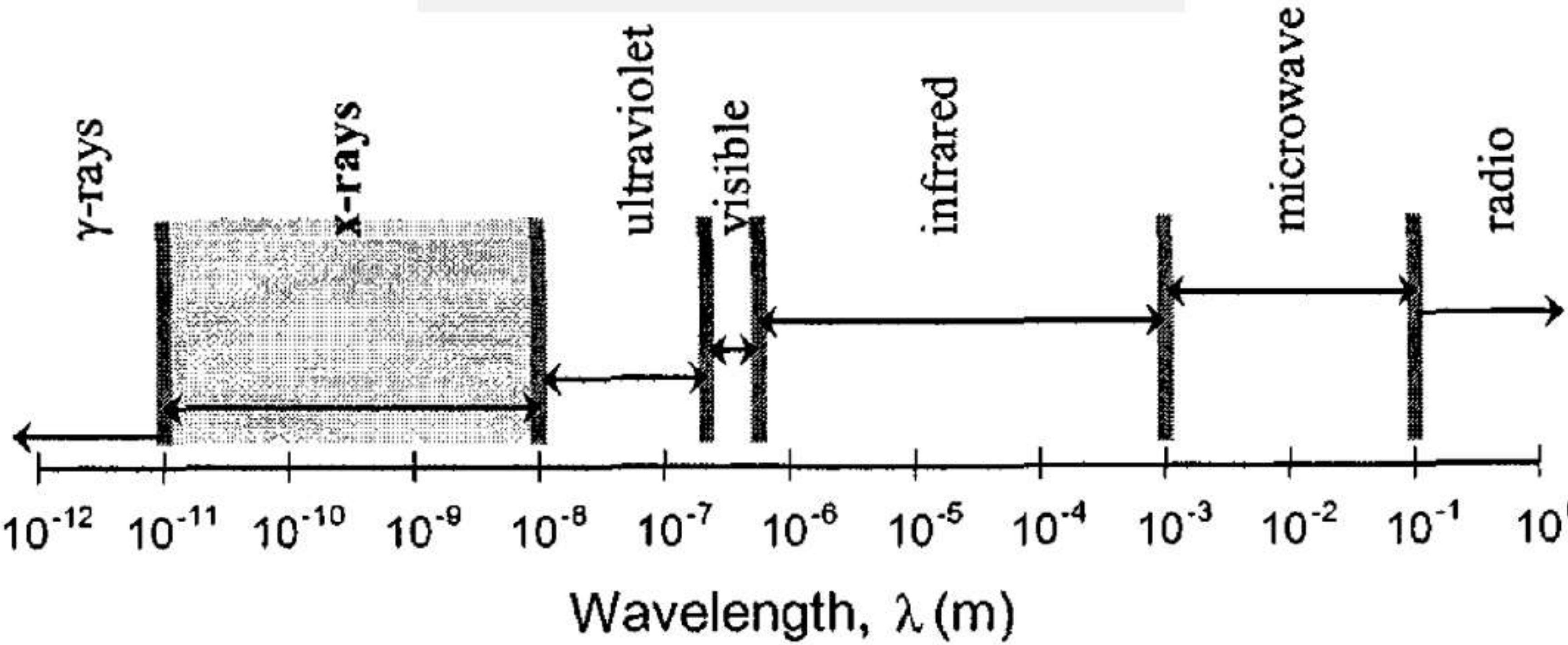
$$\lambda_{\min} = \frac{hc}{eU} \approx \frac{1.2\times10^3}{\mathrm{U}}\ (\mathrm{nm})$$

$$h \approx 6.62\times10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s} \qquad c = 3\times10^8\,\mathrm{m/s} \qquad e \approx 1.6\times10^{-19}\,\mathrm{C}$$

$$\mathrm{U} = 10^4\,\mathrm{V},\quad \lambda \sim 0.1\,\mathrm{nm}$$

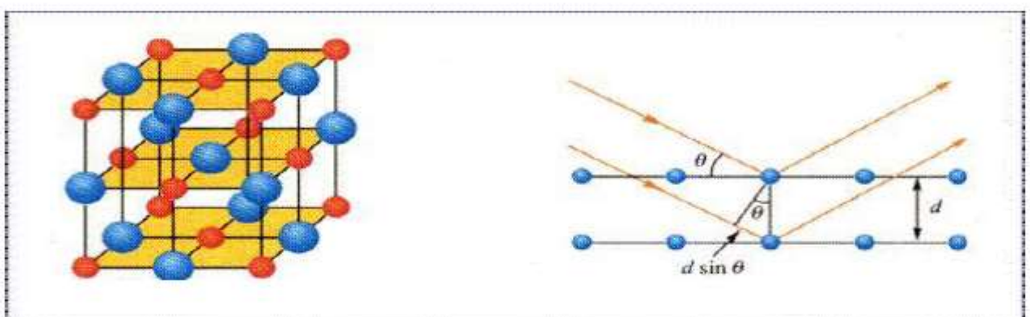
在晶体衍射中，常取U--40千伏，所以λ--0.03nm 。

电磁波的能量和波长



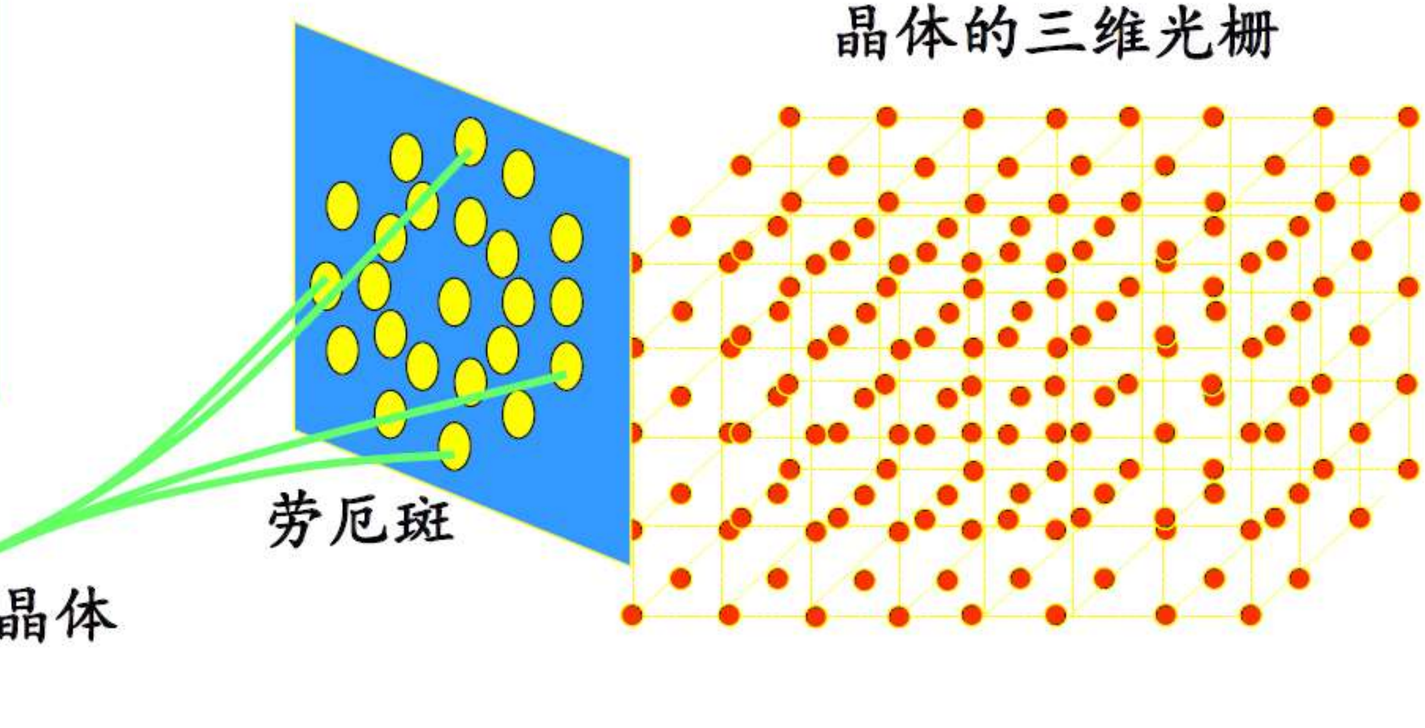
$$E = h\nu = \hbar\frac{c}{\lambda} \cong \frac{1240}{\lambda}\,\text{eV (}\lambda\text{ in unit of nm)}$$

- X射线？通过光栅观察衍射现象？ ✕
- X射线的波长太短，只有一埃（1Å）
- 光栅$d=3\times10^4$Å（每mm333条刻痕）,无法分辨的
- 晶体有规范的原子排列，且原子间距也在埃的数量级，是天然的三维光栅



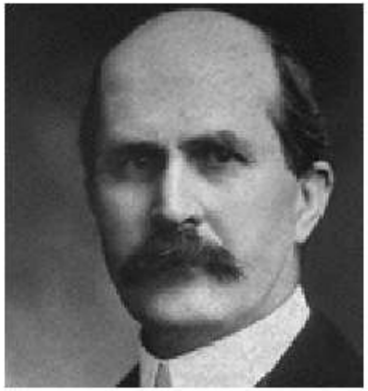
1912年德国物理学家劳厄想到了这一点，索末菲的助教W.弗里德里奇和伦琴的博士研究生P.克尼平做出了X射线的衍射实验。

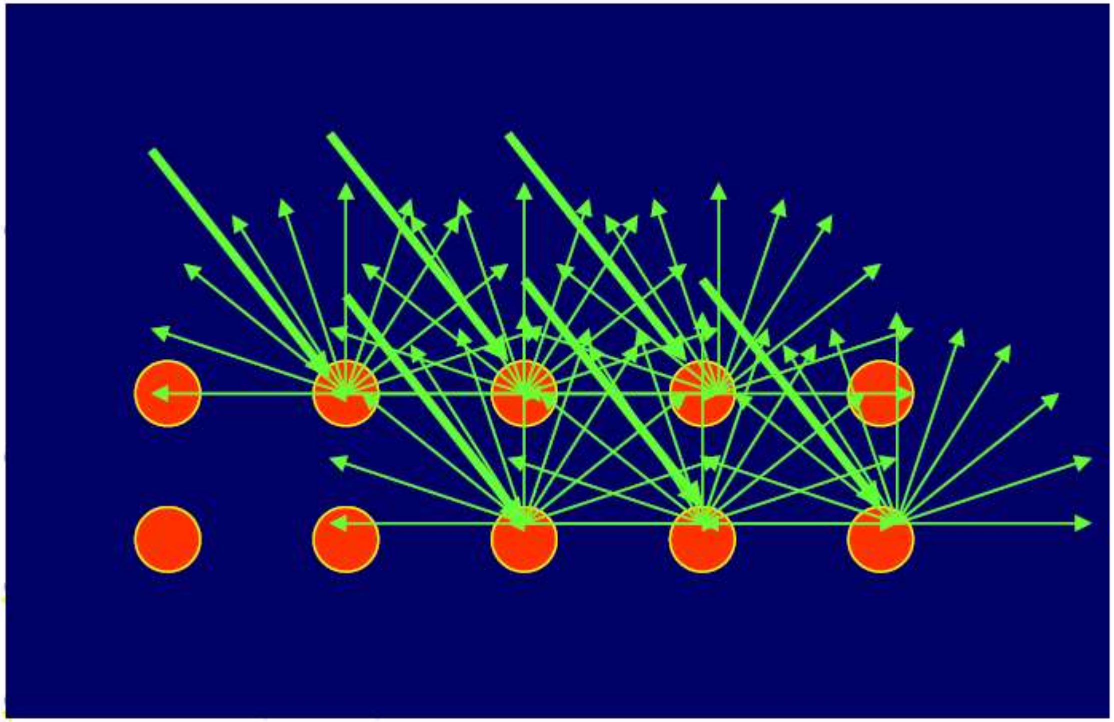
劳厄，M.von



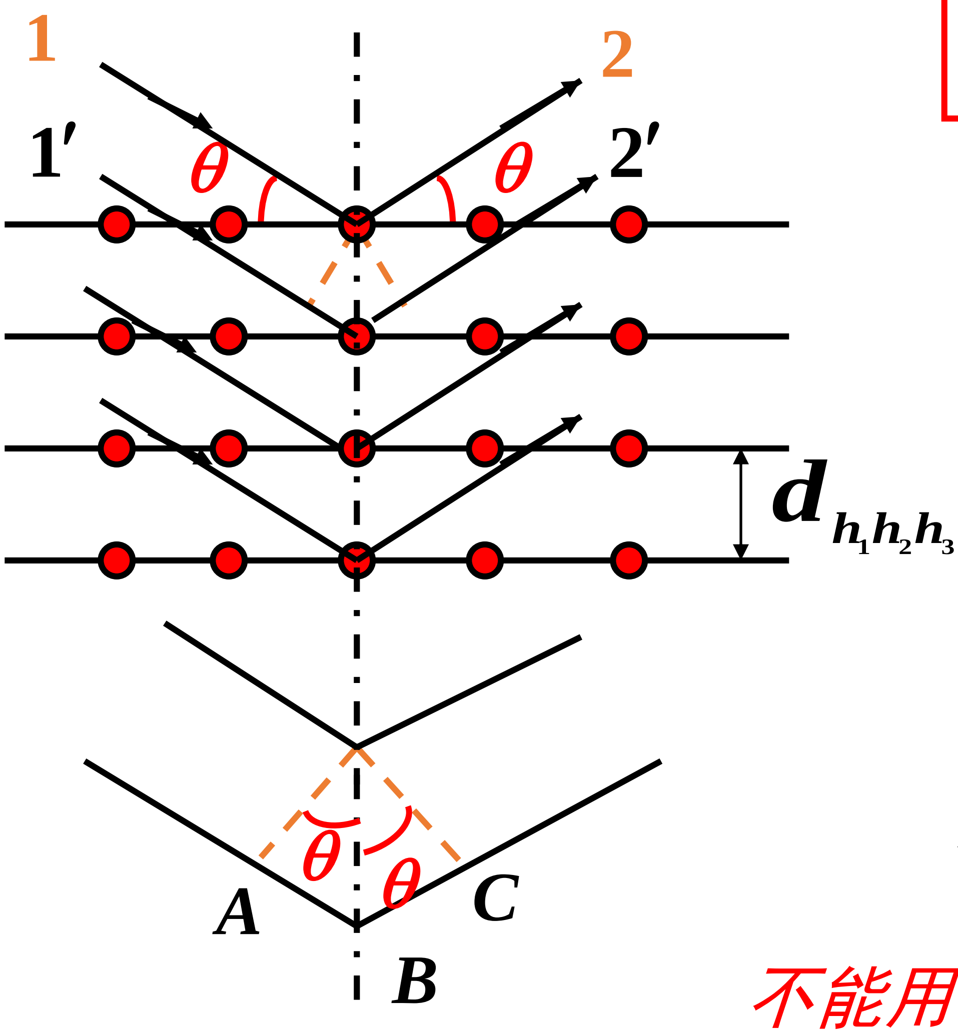
劳厄斑证明了X射线的波动性

1913年英国布拉格父子建立了一个公式:布拉格公式------不但能解释劳厄斑点，而且能用于对晶体结构的研究





劳厄斑正是散射的电磁波的叠加



衍射加强的条件：

$$\boxed{2d_{h_1h_2h_3}\sin\theta = n\lambda}$$

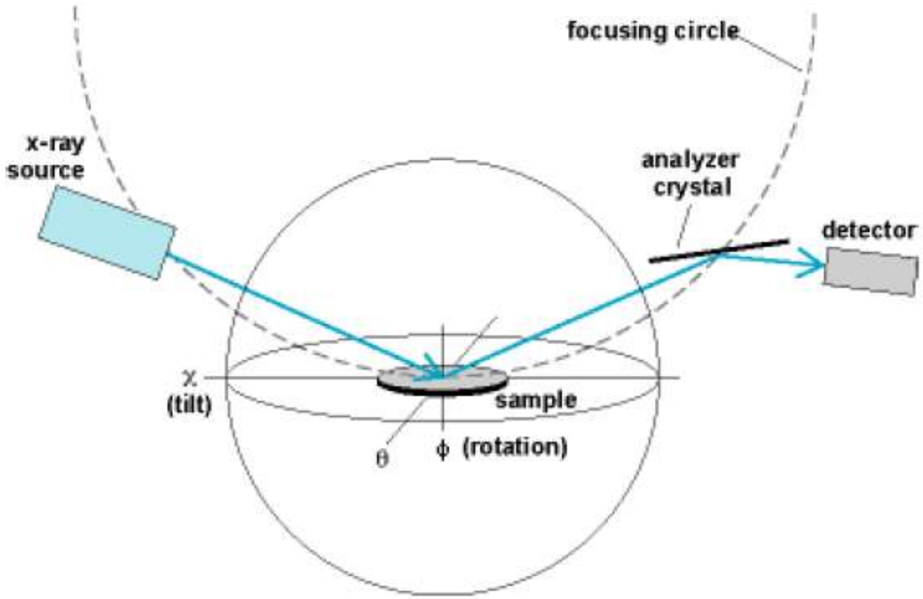
—— 布拉格反射公式

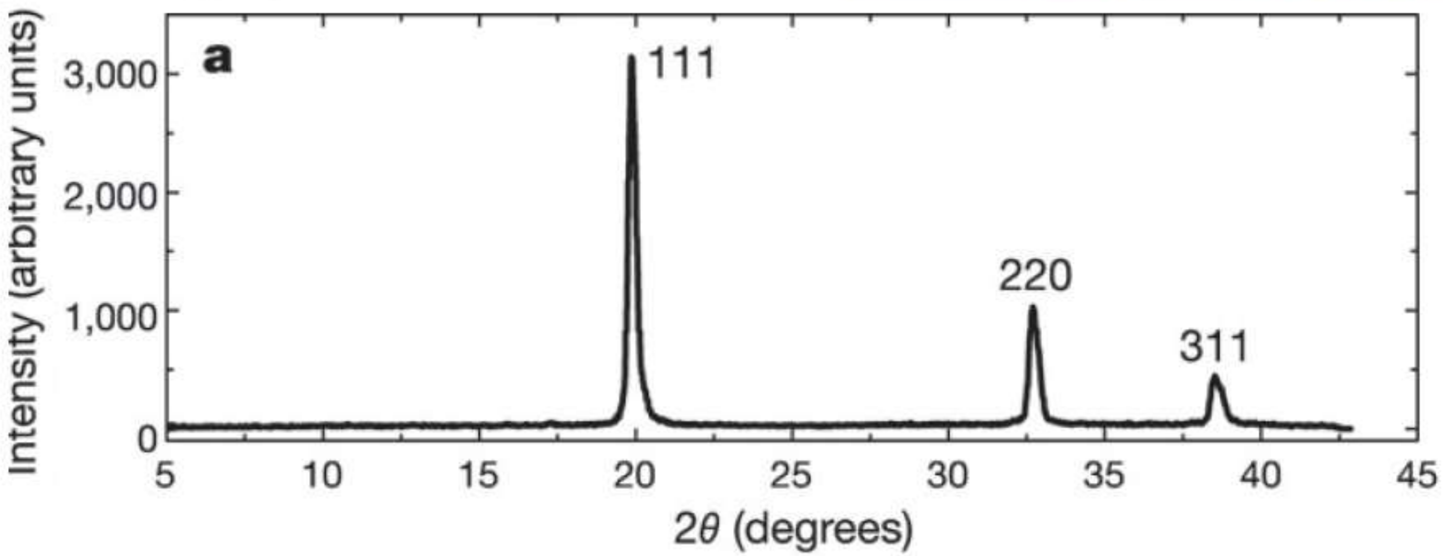
n为整数，称为衍射级数。

由上式可以看出：

$$\lambda \le \frac{2d}{n} \qquad \lambda \le 2d$$

不能用可见光进行晶体衍射。





B掺杂金刚石的X射线衍射图

- 引入一个新的概念:倒格子
- 引入设想：如果晶格的基矢未知，只有一些周期性分布的点，这些点与晶格中的每族晶面对应，通过对应关系求出未知晶格的基矢，那么这些点组成的格子就是倒格子
- 倒格子并非物理上的格子，只是一种数学处理方法，它在分析与晶体周期性有关的各种问题中起着重要作用

假设晶格的原胞基为 $\vec{a}_1$、$\vec{a}_2$、$\vec{a}_3$
原胞体积为 $\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$

建立一个空间，
其基矢为：

$$\boxed{\begin{aligned}\vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{\Omega}(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)\\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{\Omega}(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)\\ \vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{\Omega}(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)\end{aligned}}$$

由这组基矢构成的格子称为对应于以 $\vec{a}_1$、$\vec{a}_2$、$\vec{a}_3$ 为基矢的正格子的倒易格子（简称倒格子），$\vec{b}_1$、$\vec{b}_2$、$\vec{b}_3$ 称为倒格子基矢。

例1：简立方格子的倒格子

简立方的基矢：$\bar{a}_1 = a\vec{i}$，$\bar{a}_2 = a\vec{j}$，$\bar{a}_3 = a\vec{k}$

简立方倒格子的基矢：$\vec{b}_1 = \dfrac{2\pi}{a}\vec{i}, \vec{b}_2 = \dfrac{2\pi}{a}\vec{j}, \vec{b}_3 = \dfrac{2\pi}{a}\vec{k}$

例2：二维四方格子，

其基矢为：$\bar{a}_1 = a\vec{i}$　　$\bar{a}_2 = 2a\bar{j}$

此时可假设一个垂直于平面的单位矢量$\bar{a}_3 = \bar{k}$

再计算：$\bar{b}_1$　$\bar{b}_2$

1、正格子基矢和倒格子基矢的关系：

$$a_i \cdot b_j = 2\pi\delta_{ij} \begin{cases} = 2\pi & (i=j) \\ = 0 & (i \neq j) \end{cases}$$

证明如下： $a_1 \cdot b_1 = 2\pi\, a_1 \cdot (a_2 \times a_3) \,/\, a_1 \cdot (a_2 \times a_3) = 2\pi$

因为倒格子基矢与不同下脚标的正格子基矢垂直，有：

$$a_2 \cdot b_1 = 0 \qquad a_3 \cdot b_1 = 0$$

2、倒格子原胞体积是正格子原胞体积倒数的 $(2\pi)^3$ 倍

$$\boxed{\Omega^* = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}}$$

（ $\Omega^* = \vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3)$ 为倒格子原胞体积

证明：

$$\Omega^* = \vec{b}_1 \bullet [\vec{b}_2 \times \vec{b}_3] = \frac{(2\pi)^3}{\Omega^3}[\vec{a}_2 \times \vec{a}_3] \bullet [\vec{a}_3 \times \vec{a}_1] \times [\vec{a}_1 \times \vec{a}_2]$$

利用： $\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = (\vec{A} \bullet \vec{C})\vec{B} - (\vec{A} \bullet \vec{B})\vec{C}$

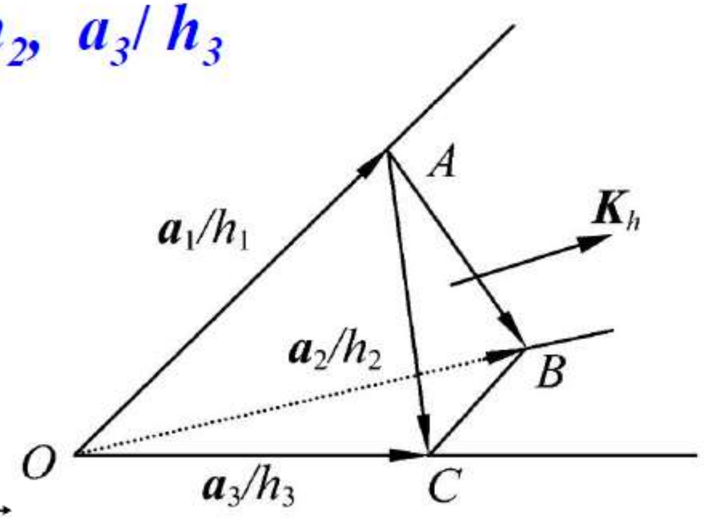
$$[\vec{a}_3 \times \vec{a}_1] \times [\vec{a}_1 \times \vec{a}_2] = \{[\vec{a}_3 \times \vec{a}_1] \bullet \vec{a}_2\}\vec{a}_1 - \{[\vec{a}_3 \times \vec{a}_1] \bullet \vec{a}_1\}\vec{a}_2 = \Omega \vec{a}_1$$

所以：

$$\Omega^* = \frac{(2\pi)^3}{\Omega^2}[\vec{a}_2 \times \vec{a}_3] \bullet \Omega \vec{a}_1 = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}[\vec{a}_2 \times \vec{a}_3] \bullet \vec{a}_1 = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}$$

3、倒格矢 $\vec{K}_h$ 是晶面指数为 (h_1, h_2, h_3) 所对应的晶面族的法线

证明： 晶面族 (h_1, h_2, h_3) 最靠近原点 O 的晶面 ABC 在基矢 $\boldsymbol{a_1}, \boldsymbol{a_2}, \boldsymbol{a_3}$ 上的截距：$\boldsymbol{a_1}/h_1$, $\boldsymbol{a_2}/h_2$, $\boldsymbol{a_3}/h_3$



矢量：

$$\overrightarrow{AC} = \overrightarrow{OC} - \overrightarrow{OA} = \frac{\vec{a}_3}{h_3} - \frac{\vec{a}_1}{h_1}$$

$$\overrightarrow{AB} = \overrightarrow{OB} - \overrightarrow{OA} = \frac{\vec{a}_2}{h_2} - \frac{\vec{a}_1}{h_1}$$

$$\overrightarrow{K_h} \bullet \overrightarrow{AC} = (h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3) \bullet (\frac{\vec{a}_3}{h_3} - \frac{\vec{a}_1}{h_1}) = 2\pi - 2\pi = 0$$

同理： $\overrightarrow{K_h} \bullet \overrightarrow{AB} = 0$

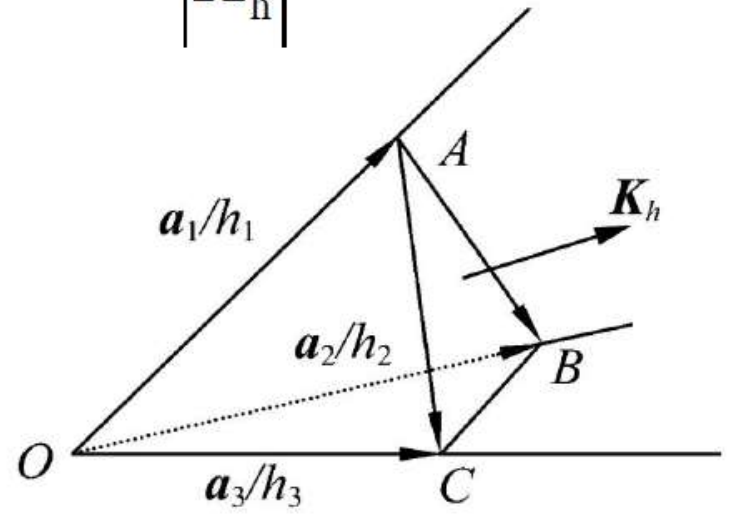
得证！

4、倒格矢$\vec{K}_h$与晶面间距$d_{h_1h_2h_3}$关系为 $d_{h_1h_2h_3}=\dfrac{2\pi}{\left|\vec{K}_h\right|}$

证明：

因为K_h垂直于ABC面，所以面间距：

$$\mathrm{d}=\overrightarrow{\mathrm{OA}}\frac{\overrightarrow{\mathrm{K}_\mathrm{h}}}{\left|\overrightarrow{\mathrm{K}_\mathrm{h}}\right|}=\frac{\vec{a}_1}{h_1}\bullet\frac{\overrightarrow{h_1b_1}+\overrightarrow{h_2b_2}+\overrightarrow{h_3b_3}}{\left|\overrightarrow{\mathrm{K}_\mathrm{h}}\right|}=\frac{2\pi}{\left|\overrightarrow{\mathrm{K}_\mathrm{h}}\right|}$$



5、正格矢 $\vec{R}_l$ 与倒格矢 $\vec{K}_h$ 的关 $\vec{R}_l \cdot \vec{K}_h = 2\pi \cdot \mu$ （μ为整数）

证明：

晶面族（$h_1h_2h_3$）中离原点距离为μd_h的晶面方程：

$$\vec{x} \cdot \frac{\vec{K}_h}{\left|\vec{K}_h\right|} = \mu d_h$$

X是晶面上任意点的位矢，对于格点其位移矢为：

$$\overrightarrow{R_l} = l_1\overrightarrow{a_1} + l_2\overrightarrow{a_2} + l_3\overrightarrow{a_3}$$

$$\overrightarrow{R_l} \bullet \overrightarrow{K_h} = 2\pi\mu \quad （\mu为整数）$$

推论：

1、如果有一矢量与正格矢点乘后等于2π的整数倍，这个矢量一定是倒格矢。

2、如果有一矢量与正格矢点乘后为一个没有量纲的数，这个矢量一定能在倒空间中表示出来。

- $\vec{K}_{hkl}$ 是密勒指数为（h，k，l）所对应的晶面族的法线

- $$\left|\vec{K}_{hkl}\right| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

- $$\vec{R}_l \cdot \vec{K}_{hkl} = 2\pi \cdot \mu$$

  其中 $\vec{R}_l = m\vec{a} + n\vec{b} + l\vec{c}$

  所以倒格矢$\vec{K}_{hkl}$可以代表（h，k，l）晶面

晶体结构

正格

1. $\vec{R}_n = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$

2.与晶体中原子位置相对应；

3.是真实空间中点的周期性排列；

4.线度量纲为[长度]

倒格

1. $\vec{K}_n = h_1'\vec{b}_1 + h_2'\vec{b}_2 + h_3'\vec{b}_3$

2.与晶体中一族晶面相对应；

3.是与真实空间相联系的傅里叶空间中点的周期性排列；

4.线度量纲为[长度]$^{-1}$

任选一倒格点为原点，从原点向它的第一、第二、第三……近邻倒格点画出倒格矢，并作这些倒格矢的中垂面，这些中垂面绕原点所围成的多面体称第一布里渊区，其“体积”为倒格子原胞体积 $\Omega^{*}=b_1\cdot(b_2\times b_3)$