

四川师范大学本科毕业论文

固体物理中布里渊区的高对称点、线、面的标注以及能带计算和分析

学生姓名	张思遥
院系名称	物理与电子工程学院
专业名称	物理学
班 级	2019 级 3 班
学 号	2019070949
指导教师	程才
完成时间	2023 年 5 月 20 日

固体物理中布里渊区的高对称点、线、面的标注以及能带计算和分析

物理学专业

学生姓名：张思遥

指导老师：程才

摘要：在倒易点阵中，以某一格点为坐标原点，作所有倒格矢的垂直平分面，倒易空间就被这些垂直平面分成了许多包含原点的多边形区域，这些区域便被称为布里渊区。布里渊区能够很好地反应晶体的对称性，因此对布里渊区中高对称点、线、面的标注和研究就显得尤为重要。不同的晶系，其对称性各不相同，高对称点便也不同。对于 14 种布拉菲格子，有固定的高对称点、线和面。本文利用 Xcrysden 软件来显示晶体结构、布里渊区、高对称点坐标以及路径。

对于 230 种空间群中的晶体材料，必然对应于 14 种布拉菲格子中的某一种。把 14 种布拉菲格子中的高对称点、线、面等嵌入一套流程化计算中，既可实现高通量计算，也可节省计算资源并迅速掌握材料的电子结构信息。本文基于第一性原理计算软件 VASP，用具体的晶体材料进行操作和演示，计算出相应的能带及态密度并进行分析。我们标注出了所有结构的布里渊区、 k 点坐标以及路径，为选择合适的高对称路径来计算能带时提供参考。

关键词：布里渊区；倒格子；能带计算；Xcrysden；VASP

Labeling of high symmetry points, lines, and surfaces in the Brillouin zone of solid-state physics, as well as band calculations and analysis

Specialty: Physics

Undergraduate: Siyao Zhang

Supervisor: Cai Cheng

ABSTRACT: In a reciprocal lattice, a certain lattice point is used as the coordinate origin to make the vertical bisector of all inverted lattice vectors, and the reciprocal space is divided into many polygon regions containing the origin by these planes, which are called Brillouin zone. The Brillouin zone can well reflect the symmetry of crystals, so it is particularly important to label and research the high symmetry points, lines, and surfaces in the Brillouin zone. Different crystal systems have different symmetry, and the high symmetry points are also different. For 14 types of Bravais lattices, there are fixed high-symmetry points, lines, and surfaces. This paper uses Xcrysden software to show the crystal structure, Brillouin zone, the coordinates of high-symmetry points, and the pathway of the band structure.

For any crystal materials in 230 space groups, it will inevitably be corresponding to one of the 14 Bravais lattices. Embedding the high-symmetry points, lines, and surface of the 14 Bravais lattices into a set of process calculations, and can achieve high-throughput calculation, save computing resources, and quickly master the electronic structure information of the material. Based on the first-principles calculations of VASP software, some specific materials are used to operate and practice, and the corresponding energy band and density of state are calculated and analyzed. We have marked all structures with Brillouin zones, coordinates of k points, and paths, which can provide a reference for choosing the appropriate path to calculate the band structure.

Keywords: Brillouin zone; Reciprocal lattice; Energy band calculation; Xcrysden; VASP

目录

摘要.....	I
ABSTRACT.....	II
1 引言.....	1
2 晶体.....	2
2.1 晶体结构.....	2
2.2 正空间和倒空间.....	2
2.3 原胞和晶胞.....	2
2.4 布里渊区中 k 点路径的选择.....	2
3 布里渊区中高对称点、线、面的标注.....	4
4 能带理论和能带计算.....	26
4.1 布洛赫定理.....	26
4.2 自由电子近似模型.....	26
4.3 紧束缚近似模型.....	26
4.4 Xcrysden 软件标注高对称点的坐标.....	27
4.5 VASP 软件计算能带.....	27
4.6 Origin 软件绘制能带图及能态密度图.....	27
5 能带分析.....	28
6 结论.....	42
参考文献.....	43
附录.....	44
致谢.....	63

固体物理中布里渊区的高对称点、线、面的标注以及能带计算和分析

1 引言

固体物理中布里渊区高对称点、线、面的标注旨在帮助简化计算，提高计算效率，为能带的计算和分析奠定基础。研究 14 种布拉菲格子的布里渊区时，对布里渊区中的高对称点、线、面进行标注。利用 Xcrysden 软件进行绘制晶体的 3D 模型，显示出布里渊区的形状和大小，辅助高对称点的标注，并读出其坐标。

在固体物理中，电子的本征态形成一系列分立的能级，电子的能级是异常密集的，形成准连续分布的能带。通过 Xcrysden 软件找到高对称点坐标便可以用来计算能带并掌握材料的能带信息。布里渊区中高对称点的标注可以为计算能带时提供方便，减少计算量。在计算能带时，利用第一性原理^[1]软件 VASP^[2]，针对具体的材料进行操作，绘制出能带以及能态密度图。在绘制能带图时，根据需要选择合适的位置坐标，并标注出高对称点，能带图与能态密度图一一对应。当需要研究具体材料时，能带的计算离不开布里渊区中高对称点的标注。虽然自然界中的材料多种多样，但布里渊区的种类是有限的，若每次研究时都重新对布里渊区中高对称点进行标注，则略显繁琐。在先前研究的基础上，对 14 种布拉菲格子的布里渊区中高对称点、线、面进行标注，并基于具体材料，给出了相应布里渊区中高对称点的标注，若有需要则可直接使用。

在对具体材料的能带进行分析时，可以从其物理性质的研究入手。根据其能带可以将材料分为导体、绝缘体和半导体。对于满带，无论是否外加电场，电子都均匀分布在布里渊区中，所以满带电子不导电；对于不满带，外加电场时，会改变电子在布里渊区中的分布，从而具有导电能力。导体具有导电能力，绝缘体没有导电能力，半导体具有介于导体和绝缘体之间的性质。计算出材料的能带并进行分析，对后续研究材料的性质显得尤为重要。

2 晶体

在固体物理中，材料是由大量的原子（或离子）组成的，每 1cm^3 体积中大约有 10^{23} 个原子。晶体中的原子按一定方式排列，被称为固体的结构。按固体的结构，大致可分为晶体和非晶体^[3]。

2.1 晶体结构

在自然界中，虽然晶体的种类很多，有成千上万种，但其实晶体结构是有限的，常见的晶体结构有简单立方结构、体心立方结构、面心立方结构。在固体物理中，晶格是用来表示原子在晶体中一定的排列规律，我们用晶格来形容晶体的结构，所以又把上述十四种晶体结构称为 14 种布拉菲格子。

2.2 正空间和倒空间

正空间和倒空间是固体物理中的相关概念。正空间就是为我们所感知的实际物体所存在的空间，是一种三维空间，处在正空间中的物体的形状大小以及其位置坐标都可以为我们所描述。在正空间中描述晶体时，我们需要建立相应的坐标系，用晶格基矢来描述，也就是原胞的边矢量，通常用 α_1 、 α_2 、 α_3 来描述。倒空间实质是正空间通过傅里叶变换的方式所得到的一种形式，引入倒格子后，可以方便地把以 α_1 、 α_2 、 α_3 为周期的函数展开为傅里叶级数，用 b_1 、 b_2 、 b_3 表示倒格子基矢，二者的关系表达式如下：

$$\begin{aligned} b_1 &= 2\pi \frac{\alpha_2 \times \alpha_3}{\Omega} \\ b_2 &= 2\pi \frac{\alpha_3 \times \alpha_1}{\Omega} \\ b_3 &= 2\pi \frac{\alpha_1 \times \alpha_2}{\Omega} \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

2.3 原胞和晶胞

原胞，顾名思义，是布拉菲格子中体积最小的周期性重复单元。晶胞则是由许多原胞所构成的，通常是最小体积的几倍，不仅能够反应晶体的对称性，还能反应晶体的周期性。在计算能带时所用到的 POSCAR 文件则需要采用原胞的 POSCAR 文件。原胞在实空间中的体积最小，倒空间中的体积最大；晶胞在实空间中的体积较大，倒空间中的体积较小。区分原胞和晶胞的相关概念有助于计算的顺利进行，能够帮助我们找到正确的 POSCAR 文件。

2.4 布里渊区中 k 点路径的选择

将布里渊区中的所有高对称点组合称为 k 点路径。 k 点路径是布里渊区空间中高对称点的坐标，反应出布里渊区的对称性。如果直线或平面包含至少一个对称点，并且直

线或平面上的所有 k 点都具有格点对称性，并且相邻点具备至少一个点对称操作，则直线或平面形成对称线或对称平面^[4]。

3 布里渊区中高对称点、线、面的标注

对布里渊区中的高对称点、线、面进行标注时^[5]，变量 $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ 表示传统晶格矢量的轴向长度和轴间角，而 $k_a, k_b, k_c, k_\alpha, k_\beta, k_\gamma$ 是原始倒数晶格矢量 b_1, b_2, b_3 的轴向长度和轴间角，对称 k 点的坐标以 b_1, b_2, b_3 的分数给出。

立方晶系(A.1;A.2;A.3)

单胞基矢的特性： $a_1 \neq a_2 \neq a_3$ ，夹角不等

A.1 简单立方

晶格（见图 3.1 和表 3.1）

$$a_1 = (a, 0, 0)$$

$$a_2 = (0, a, 0)$$

$$a_3 = (0, 0, a)$$

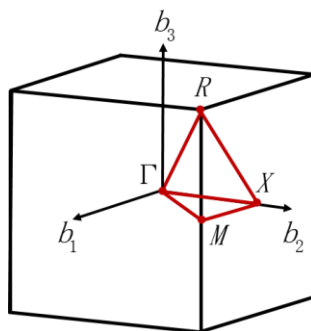


图 3.1 立方体格子的布里渊区 路径： $\Gamma-X-M-\Gamma-R-X|M-R$

表 3.1 立方体晶格的对称 k 点

$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$		$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$	
0	0	0	Γ	1/2	1/2	1/2	R
1/2	1/2	0	M	0	1/2	0	X

A.2 面心立方

(见图 3.2 和表 3.2)

传统晶格

$$a_1 = (a, 0, 0)$$

$$a_2 = (0, a, 0)$$

$$a_3 = (0, 0, a)$$

原始晶格

$$a_1 = (0, a/2, a/2)$$

$$a_2 = (a/2, 0, a/2)$$

$$a_3 = (a/2, a/2, 0)$$

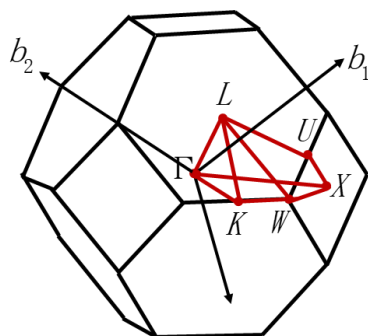


图 3.2 面心立方格子的布里渊区 路径: $\Gamma - X - W - K - \Gamma - L - U - W - L - K | U - X$

表 3.2 面心立方晶格的对称 k 点

$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$		$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$	
0	0	0	Γ	5/8	1/4	5/8	U
3/8	3/8	3/4	K	1/2	1/4	3/4	W
1/2	1/2	1/2	L	1/2	0	1/2	X

A.3 体心立方

(见图 3.3 和表 3.3)

传统晶格

$$a_1 = (a, 0, 0)$$

$$a_2 = (0, a, 0)$$

$$a_3 = (0, 0, a)$$

原始晶格

$$a_1 = (-a/2, a/2, a/2)$$

$$a_2 = (a/2, -a/2, a/2)$$

$$a_3 = (a/2, a/2, -a/2)$$

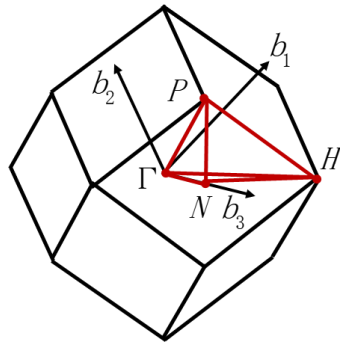


图 3.3 体心立方格子的布里渊区 路径： $\Gamma-H-N-\Gamma-P-H|P-N$

表 3.3 体心立方晶格的对称性 k 点

$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$		$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$	
0	0	0	Γ	1/4	1/4	1/4	P
1/2	-1/2	1/2	H	0	0	1/2	N

四方晶系(A.4;A.5)

单胞基矢的特征： $a_1 = a_2 \neq a_3$, $\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ$, $\neq 90^\circ$

A.4 简单四方

晶格（见图 3.4 和表 3.4）

$$a_1 = (a, 0, 0)$$

$$a_2 = (0, a, 0)$$

$$a_3 = (0, 0, c)$$

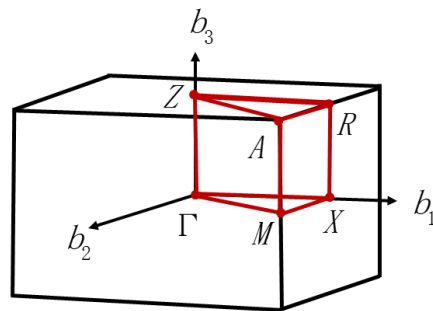


图 3.4 TET 格子的布里渊区 路径： $\Gamma-X-M-\Gamma-Z-R-A-Z|X-R|M-A$

表 3.4 TET 晶格的对称 k 点

$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$		$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$	
0	0	0	Γ	0	1/2	1/2	R
1/2	1/2	1/2	A	0	1/2	0	X
1/2	1/2	0	M	0	0	1/2	Z

A.5 体心四方

(见图 3.5、图 3.6 和表 3.5、表 3.6)

传统晶格

$$a_1 = (a, 0, 0)$$

$$a_2 = (0, a, 0)$$

$$a_3 = (0, 0, c)$$

原始晶格

$$a_1 = (-a/2, a/2, c/2)$$

$$a_2 = (a/2, -a/2, c/2)$$

$$a_3 = (a/2, a/2, -c/2)$$

变化:

$$BCT_1: c < a$$

$$BCT_2: c > a$$

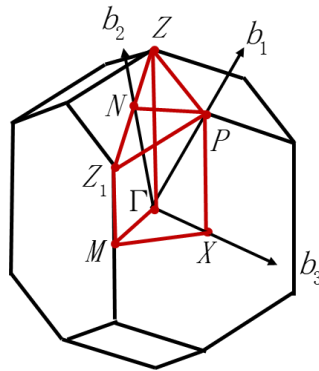


图 3.5 BCT_1 晶格的布里渊区 路径: $\Gamma-X-M-\Gamma-Z-P-N-Z_1-M|X-P$

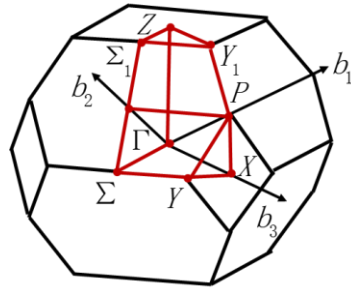


图 3.6 BCT_2 格子的布里渊区 路径： $\Gamma-X-Y-\Sigma-\Gamma-Z-\Sigma_1-N-P-Y_1-Z \mid X-P$

表 3.5 BCT_1 晶格的对称 k 点

$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$		$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$	
0	0	0	Γ	0	0	1/2	X
-1/2	1/2	1/2	M	η	η	$-\eta$	Z
0	1/2	0	N	$-\eta$	$1-\eta$	$-\eta$	Z_1
1/4	1/4	1/4	P				
$\eta = (1 + c^2 / a^2) / 4$							

表 3.6 BCT_2 晶格的对称性 k 点

$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$		$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$	
0	0	0	Γ	0	0	1/2	X
0	1/2	0	N	$-\zeta$	ζ	1/2	Y
1/4	1/4	1/4	P	1/2	1/2	$-\zeta$	Y_1
$-\eta$	η	η	Σ	1/2	1/2	-1/2	Z
η	$1-\eta$	$-\eta$	Σ_1				
$\eta = (1 + a^2 / c^2) / 4$				$\zeta = a^2 / (2c^2)$			

正交晶系(A.6;A.7;A.8;A.9)

单胞基矢的特性: $a_1 \neq a_2 \neq a_3$, a_1, a_2, a_3 , 互相垂直

A.6 简单正交

常规晶格的排序: $a < b < c$

晶格 (见图 3.7 和表 3.7)

$$a_1 = (a, 0, 0)$$

$$a_2 = (0, b, 0)$$

$$a_3 = (0, 0, c)$$

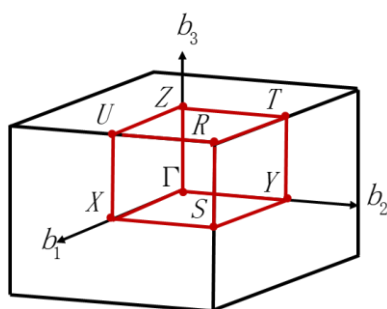


图 3.7 ORC 格子的布里渊区 路径: $\Gamma - X - S - Y - C - Z - U - R - T - Z | Y - T | U - X | S - R$

表 3.7 ORC 的对称性 k 点

$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$		$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$	
0	0	0	Γ	1/2	0	1/2	U
1/2	1/2	1/2	R	1/2	0	0	X
1/2	1/2	0	S	0	1/2	0	Y
0	1/2	1/2	T	0	0	1/2	Z

A.7 面心正交

常规晶格的排序: $a < b < c$ (见图 3.8~3.10 和表 3.8、表 3.9)

传统晶格

$$a_1 = (a, 0, 0)$$

$$a_2 = (0, b, 0)$$

$$a_3 = (0, 0, c)$$

原始晶格

$$a_1 = (0, b/2, c/2)$$

$$a_2 = (a/2, 0, c/2)$$

$$a_3 = (a/2, b/2, 0)$$

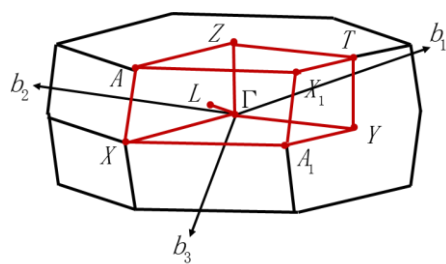


图 3.8 $ORCF_1$ 晶格的布里渊区 路径: $\Gamma-Y-T-Z-\Gamma-X-A_1-Y|T-X_1|X-A-Z|L-\Gamma$

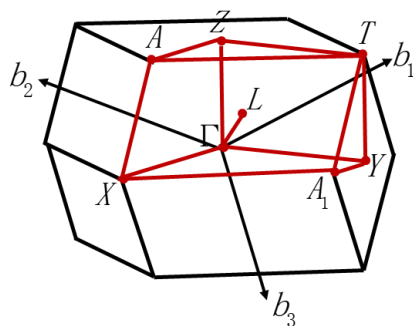


图 3.9 $ORCF_3$ 晶格的布里渊区 路径: $\Gamma-Y-T-Z-\Gamma-X-A_1-Y|X-A-Z|L-\Gamma$

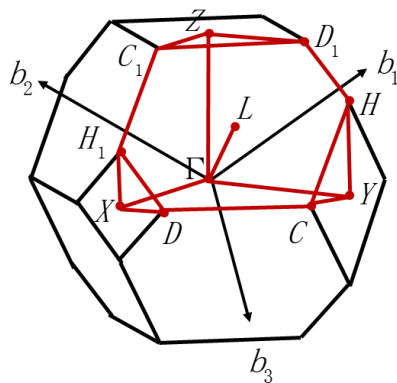


图 3.10 $ORCF_2$ 晶格的布里渊区 路径:
 $\Gamma-Y-C-D-X-\Gamma-Z-D_1-H-C|C_1-Z|X-H_1|H-Y|L-\Gamma$

表 3.8 $ORCF_1$ 和 $ORCF_3$ 的对称 k 点

$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$		$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$	
0	0	0	Γ	0	η	η	X
1/2	$1/2 + \zeta$	ζ	A	1	$1 - \eta$	$1 - \eta$	X_1
1/2	$1/2 - \zeta$	$1 - \zeta$	A_1	1/2	0	1/2	Y
1/2	1/2	1/2	L	1/2	1/2	0	Z
1	1/2	1/2	T				
$\zeta = (1 + a^2 / b^2 - a^2 / c^2) / 4$				$\eta = (1 + a^2 / b^2 + a^2 / c^2) / 4$			

 表 3.9 $ORCF_2$ 的对称性 k 点

$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$		$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$	
0	0	0	Γ	$1 - \phi$	$1/2 - \phi$	1/2	H
1/2	$1/2 - \eta$	$1 - \eta$	C	ϕ	$1/2 + \phi$	1/2	H_1
1/2	$1/2 + \eta$	η	C_1	0	1/2	1/2	X
$1/2 - \delta$	1/2	$1 - \delta$	D	1/2	0	1/2	Y
$1/2 + \delta$	1/2	δ	D_1	1/2	1/2	0	Z
1/2	1/2	1/2	L				
$\eta = (1 + a^2 / b^2 - a^2 / c^2) / 4$				$\delta = (1 + b^2 / a^2 - b^2 / c^2) / 4$			
$\phi = (1 + c^2 / b^2 - c^2 / a^2) / 4$							

变化:

$$ORCF_1: 1/a^2 > 1/b^2 + 1/c^2$$

$$ORCF_2: 1/a^2 < 1/b^2 + 1/c^2$$

$$ORCF_3: 1/a^2 = 1/b^2 + 1/c^2$$

A.8 体心正交 (见图 3.11 和表 3.10)

常规晶格的排序: $a < b < c$

传统晶格

$$a_1 = (a, 0, 0)$$

$$a_2 = (0, b, 0)$$

$$a_3 = (0, 0, c)$$

原始晶格

$$a_1 = (-a/2, b/2, c/2)$$

$$a_2 = (a/2, -b/2, c/2)$$

$$a_3 = (a/2, b/2, -c/2)$$

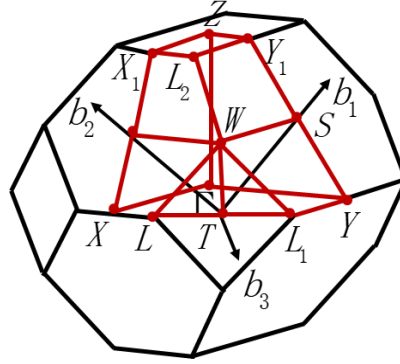


图 3.11 ORCI 格子的布里渊区 路径: $\Gamma - X - L - T - W - R - X_1 - Z - \Gamma - Y - S - W | L_1 - Y | Y_1 - Z$

表 3.10 *ORCI* 的对称 k 点

$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$		$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$	
0	0	0	Γ	1/4	1/4	1/4	W
$-\mu$	μ	$1/2 - \delta$	L	$-\zeta$	ζ	ζ	X
μ	$-\mu$	$1/2 + \delta$	L_1	ζ	$1 - \zeta$	$-\zeta$	X_1
$1/2 - \delta$	$1/2 + \delta$	$-\mu$	L_2	η	$-\eta$	η	Y
0	1/2	0	R	$1 - \eta$	η	$-\eta$	Y_1
1/2	0	0	S	1/2	1/2	-1/2	Z
0	0	1/2	T				
$\zeta = (1 + a^2 / c^2) / 4$				$\delta = (b^2 - a^2) / (4c^2)$			
$\eta = (1 + b^2 / c^2) / 4$				$\mu = (a^2 + b^2) / (4c^2)$			

A.9 底心正交

常规晶格的排序： $a < b$ （见图 3.12 和表 3.11）

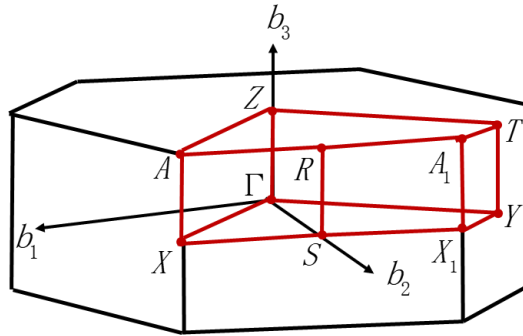


图 3.12 *ORCC* 格子的布里渊区 路径： $\Gamma - X - S - R - A - Z - \Gamma - Y - X_1 - A_1 - T - Y | Z - T$

表 3.11 *ORCC* 的对称 k 点

$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$		$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$	
0	0	0	Γ	-1/2	1/2	1/2	T
ζ	ζ	1/2	A	ζ	ζ	0	X
$-\zeta$	$1-\zeta$	1/2	A_1	$-\zeta$	$1-\zeta$	0	X_1
0	1/2	1/2	R	-1/2	1/2	0	Y
0	1/2	0	S	0	0	1/2	Z
$\zeta = (1+a^2/b^2)/4$							

传统晶格

$$a_1 = (a, 0, 0)$$

$$a_2 = (0, b, 0)$$

$$a_3 = (0, 0, c)$$

原始晶格

$$a_1 = (a/2, -b/2, 0)$$

$$a_2 = (a/2, b/2, 0)$$

$$a_3 = (0, 0, c)$$

六角晶系(A.10)

单胞基矢的特征: $a_1 = a_2 \neq a_3$, $a_3 \perp a_1$, a_2 , 夹角 120°

A.10 六角

晶格 (见图 3.13 和表 3.12)

$$a_1 = (a/2, -(a/\sqrt{3})/2, 0)$$

$$a_2 = (a/2, (a/\sqrt{3})/2, 0)$$

$$a_3 = (0, 0, c)$$

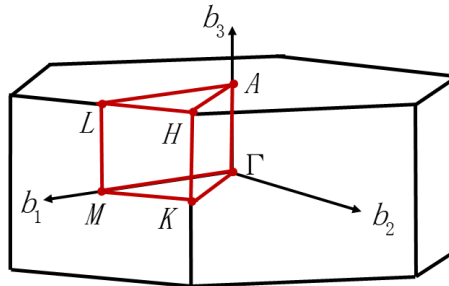


图 3.13 十六进制格子的布里渊区 路径: $\Gamma-M-K-\Gamma-A-L-H-A | L-M | K-H$

表 3.12 十六进制的对称 k 点

$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$		$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$	
0	0	0	Γ	1/3	1/3	0	K
0	0	1/2	A	1/2	0	1/2	L
1/3	1/3	1/2	H	1/2	0	0	M

三角晶系(A.11)

单胞基矢的特征: $a_1 = a_2 = a_3$, $\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ$, a_1 , a_2 , 夹角 120°

A.11 三角

晶格 (见图 3.14、图 3.15 和表 3.13、表 3.14)

$$a_1 = (a \cos(\alpha/2), -a \sin(\alpha/2), 0)$$

$$a_2 = (a \cos(\alpha/2), a \sin(\alpha/2), 0)$$

$$a_3 = (a \cos \alpha / \cos(\alpha/2), 0, a \sqrt{1 - \cos^2 \alpha / \cos^2(\alpha/2)})$$

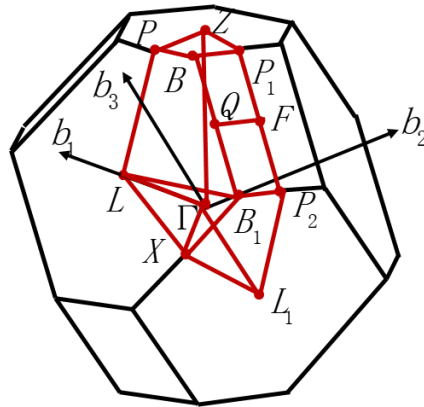


图 3.14 RHL_1 晶格的布里渊区 路径: $\Gamma-L-B_1|B-Z-C-X|Q-F-P_1-Z|L-P$

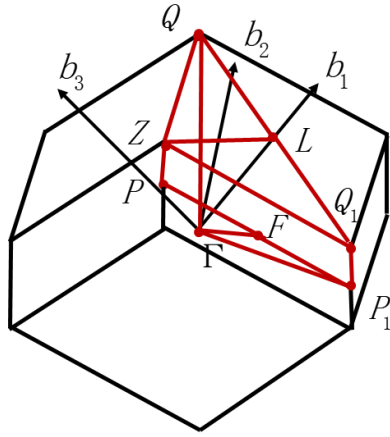


图 3.15 RHL_2 晶格的布里渊区 路径: $\Gamma - P - Z - Q - \Gamma - F - P_1 - Q_1 - L - Z$

表 3.13 RHL_1 的对称性 k 点

$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$		$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$	
0	0	0	Γ	η	ν	ν	P
η	$1/2$	$1-\eta$	B	$1-\nu$	$1-\nu$	$1-\eta$	P_1
$1/2$	$1-\eta$	$\eta-1$	B_1	ν	ν	$\eta-1$	P_2
$1/2$	$1/2$	0	F	$1-\nu$	ν	0	Q
$1/2$	0	0	L	ν	0	$-\nu$	X
0	0	$-1/2$	L_1	$1/2$	$1/2$	$1/2$	Z
$\eta = (1 + 4\cos\alpha) / (2 + 4\cos\alpha)$							
$\nu = 3/4 - \eta/2$							

表 3.14 RHL_2 的对称性 k 点

$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$		$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$	
0	0	0	Γ	ν	$\nu-1$	$\nu-1$	P_1
1/2	-1/2	0	F	η	η	η	Q
1/2	0	0	L	$1-\eta$	$-\eta$	$-\eta$	Q_1
$1-\nu$	$-\nu$		P	1/2	-1/2	1/2	Z
$\eta = 1 / (2 \tan^2(\alpha / 2))$				$\nu = 3 / 4 - \eta / 2$			

变化:

$RHL_1: \alpha < 90^\circ$

$RHL_2: \alpha > 90^\circ$

单斜晶系(A.11;A.12)

单胞基矢的特性: $a_1 \neq a_2 \neq a_3$, $a_2 \perp a_3$, a_3

A.12 简单单斜

晶格的排序: $a, b \leq c, \alpha < 90^\circ, \beta = \gamma = 90^\circ$, 晶格 (见图 3.16 和表 3.15)

$$a_1 = (a, 0, 0)$$

$$a_2 = (0, b, 0)$$

$$a_3 = (0, c \cos \alpha, c \sin \alpha)$$

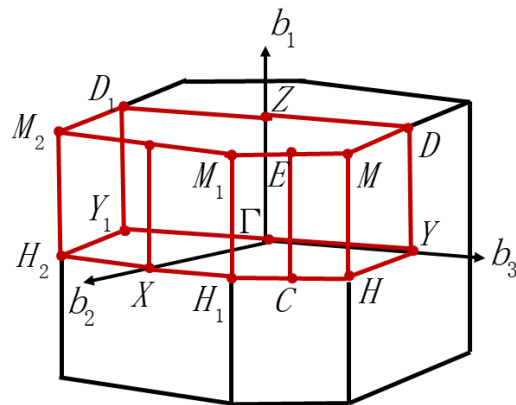


图 3.16 MCL 格子的布里渊区 路径: $\Gamma - Y - H - C - E - M_1 - A - X - H_1 | M - D - Z | Y - D$

表 3.15 MCL 的对称性 k 点

$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$		$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$	
0	0	0	Γ	0	η	$-\nu$	H_2
1	1/2	0	A	1/2	η	$1-\nu$	M
0	1/2	1/2	C	1/2	$1-\eta$	ν	M_1
1/2	0	1/2	D	1/2	η	$-\nu$	M_2
1/2	0	-1/2	D_1	0	1/2	0	X
1/2	1/2	1/2	E	0	0	1/2	Y
0	η	$1-\nu$	H	0	0	-1/2	Y_1
0	$1-\eta$	ν	H_1	1/2	0	$0-\nu$	Z
$\eta = (1 - b \cos \alpha / c) / (2 \sin^2 \alpha)$							
$\nu = 1/2 - \eta c \cos \alpha / b$							

A.13 底心单斜

常规晶格的排序： $a, b \leq c, \alpha < 90^\circ, \beta = \gamma = 90^\circ$ （见图 3.17~3.21 和表 3.16~3.18）

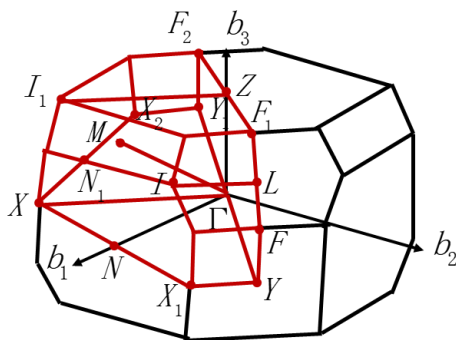


图 3.17 $MCLC_1$ 晶格的布里渊区 路径： $\Gamma - Y - F - L - I \mid I_1 - Z - F_1 \mid Y - X_1 \mid X - \Gamma - N \mid M - \Gamma$

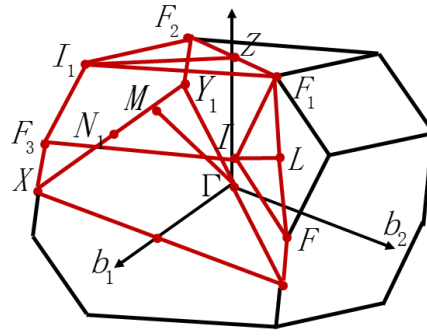


图 3.18 $MCLC_2$ 晶格的布里渊区 路径: $\Gamma-Y-F-L-I|I_1-Z-F_1|N-\Gamma-M$

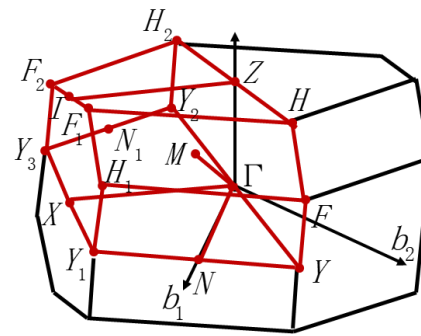


图 3.19 $MCLC_3$ 晶格的布里渊区 路径: $\Gamma-Y-F-H-Z-I-F_1|H_1-Y_1-X-\Gamma-N|M-\Gamma$

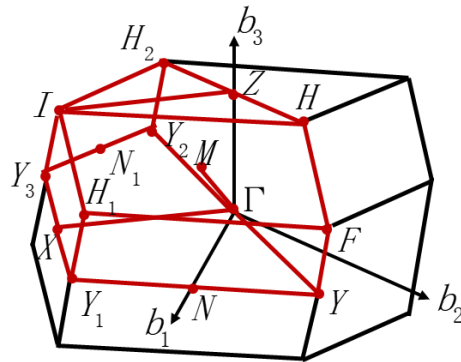


图 3.20 $MCLC_4$ 晶格的布里渊区 路径: $\Gamma-Y-F-H-Z-I|H_1-Y_1-X-\Gamma-N|M-\Gamma$

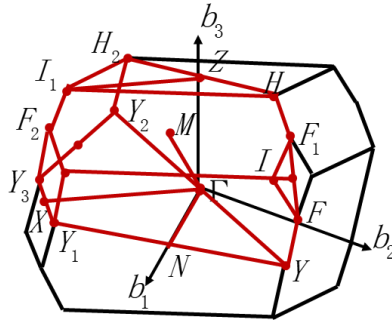


图 3.21 $MCLC_5$ 晶格的布里渊区 路径： $\Gamma-Y-F-L-I \mid I_1-Z-H-F_1 \mid H_1-Y_1-X-\Gamma$

表 3.16 $MCLC_1$ 和 $MCLC_2$ 的对称性 k 点

$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$		$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$	
0	0	0	Γ	1/2	1/2	1/2	L
1/2	0	0	N	1/2	0	1/2	M
0	-1/2	0	N_1	$1-\psi$	$\psi-1$	0	X
$1-\zeta$	$1-\zeta$	$1-\eta$	F	ψ	$1-\psi$	0	X_1
ζ	ζ	η	F_1	$\psi-1$	$-\psi$	0	X_2
$-\zeta$	$-\zeta$	$1-\eta$	F_2	1/2	1/2	0	Y
$1-\zeta$	$-\zeta$	$1-\eta$	F_3	-1/2	-1/2	0	Y_1
ϕ	$1-\phi$	1/2	I	0	0	1/2	Z
$1-\phi$	$\phi-1$	1/2	I_1				
$\zeta = (2 - b \cos \alpha / c) / (4 \sin^2 \alpha)$							
$\eta = 1/2 + 2\zeta \cos \alpha / b$							
$\psi = 3/4 - a^2 / (4b^2 \sin^2 \alpha)$							
$\phi = \psi + (3/4 - \psi)b \cos \alpha / c$							

表 3.17 $MCLC_3$ 和 $MCLC_4$ 的对称性 k 点

$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$		$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$	
0	0	0	Γ	1/2	0	0	N
$1-\phi$	$1-\phi$	$1-\psi$	F	0	-1/2	0	N_1
ϕ	$\phi-1$		F_1	1/2	-1/2	0	X
$1-\phi$	$-\phi$	$1-\psi$	F_2	1/2	-1/2	0	Y
ζ	ζ		H	μ	μ	δ	Y_1
$1-\zeta$	$-\zeta$	$1-\eta$	H_1	$1-\mu$	$-\mu$	$-\delta$	Y_2
$-\zeta$	$-\zeta$	$1-\eta$	H_2	$-\mu$	$\mu-1$	δ	Y_3
1/2	-1/2	1/2	I	0	0	1/2	Z
1/2	0	1/2	M				
$\mu = (1+b^2/a^2)/4$							
$\delta = bc \cos \alpha / (2a^2)$							
$\zeta = \mu - 1/4 + (1 - b \cos \alpha / c) / (4 \sin^2 \alpha)$							
$\eta = 1/2 + 2\zeta c \cos \alpha / b$							
$\phi = 1 + \zeta - 2\mu$							
$\psi = \eta - 2\delta$							

表 3.18 $MCLC_5$ 的对称性 k 点

$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$		$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$	
0	0	0	Γ	1/2	0	1/2	M
ν	ν	ω	F	1/2	0	0	N
$1-\nu$	$1-\nu$	$1-\omega$	F_1	0	-1/2	0	N_1
ν	$\nu-1$	ω	F_2	1/2	-1/2	0	X
ζ	ζ	η	H	μ	μ	δ	Y
$1-\zeta$	$-\zeta$	$1-\eta$	H_1	$1-\mu$	$-\mu$	$-\delta$	Y_1
$-\zeta$	$-\zeta$	$1-\eta$	H_2	$-\mu$	$-\mu$	$-\delta$	Y_2
ρ	$1-\rho$	1/2	I	μ	$\mu-1$	δ	Y_3
$1-\rho$	$\rho-1$	1/2	I_1	0	0	1/2	Z
1/2	1/2	1/2	L				
$\zeta = (b^2 / a^2 + (1 - b \cos \alpha / c) / \sin^2 \alpha) / 4$							
$\mu = \eta / 2 + b^2 / (4a^2) - bc \cos \alpha / (2a^2)$							
$\omega = (4\nu - 1 - b^2 \sin 2\alpha / a^2) c / (2b \cos \alpha)$							
$\eta = 1 / 2 + 2\zeta c \cos \alpha / b$				$\nu = 2\mu - \zeta$			
$\delta = \zeta c \cos \alpha / b + \omega / 2 - 1 / 4$				$\rho = 1 - \zeta a^2 / b^2$			

传统晶格

$$a_1 = (a, 0, 0)$$

$$a_2 = (0, b, 0)$$

$$a_3 = (0, c \cos \alpha, c \sin \alpha)$$

原始晶格

$$a_1 = (a / 2, b / 2, 0)$$

$$a_2 = (-a / 2, b / 2, 0)$$

$$a_3 = (0, c \cos \alpha, c \sin \alpha)$$

变化:

$$MCLC_1: k_y > 90^\circ$$

$$MCLC_2: k_y = 90^\circ$$

$$MCLC_3: k_y < 90^\circ, b \cos \alpha / c + b^2 \sin^2 \alpha / a^2 < 1$$

$$MCLC_4: k_y > 90^\circ, b \cos \alpha / c + b^2 \sin^2 \alpha / a^2 = 1$$

$$MCLC_5: k_y > 90^\circ, b \cos \alpha / c + b^2 \sin^2 \alpha / a^2 > 1$$

三斜晶系(A.14)

单胞基矢的特性: $a_1 \neq a_2 \neq a_3$, 夹角不等

A.14 三斜 (见图 3.22~3.25 和表 3.19、表 3.20)

晶格

$$a_1 = (a, 0, 0)$$

$$a_2 = (b \cos \gamma, b \sin \gamma, 0)$$

$$a_3 = (c \cos \gamma, \frac{c}{\sin \gamma} [\cos \alpha - \cos \beta \cos \gamma], \frac{c}{\sin \gamma} \sqrt{\sin^2 \gamma - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma})$$

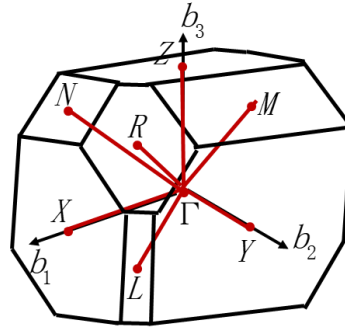


图 3.22 TRI_{1a} 格子的布里渊区 路径: $X-\Gamma-Y|L-\Gamma-Z|N-\Gamma-M|R-\Gamma$

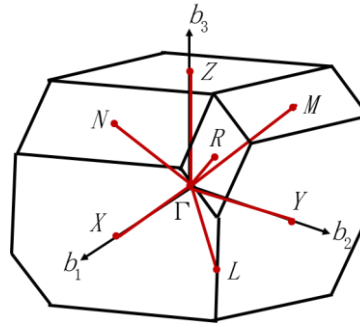


图 3.23 TRI_{2a} 格子的布里渊区 路径: $X-\Gamma-Y|L-\Gamma-Z|N-\Gamma-M|R-\Gamma$

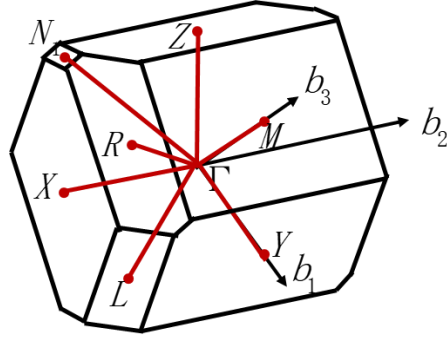


图 3.24 TRI_{1b} 格子的布里渊区 路径: $X-\Gamma-Y|L-\Gamma-Z|N-\Gamma-M|R-\Gamma$

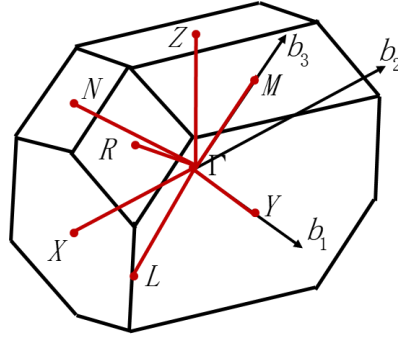


图 3.25 TRI_{2b} 格子的布里渊区 路径: $X-\Gamma-Y|L-\Gamma-Z|N-\Gamma-M|R-\Gamma$

表 3.19 TRI_{1a} 和 TRI_{2a} 的对称 k 点

$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$		$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$	
0	0	0	Γ	1/2	1/2	1/2	R
1/2	1/2	0	L	1/2	0	0	X
0	1/2	1/2	M	0	1/2	0	Y
1/2	0	1/2	N	0	0	1/2	Z

表 3.20 TRL_{1b} 和 TRL_{2b} 的对称 k 点

$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$		$\times b_1$	$\times b_2$	$\times b_3$	
0	0	0	Γ	0	-1/2	1/2	R
1/2	-1/2	0	L	0	-1/2	0	X
0	0	1/2	M	1/2	0	0	Y
-1/2	-1/2	1/2	N	-1/2	0	1/2	Z

变化:

$$TRL_{1a} : k_\alpha > 90^\circ, k_\beta > 90^\circ, k_\gamma > 90^\circ, k_\gamma = \min \{k_\alpha, k_\beta, k_\gamma\}$$

$$TRL_{1b} : k_\alpha < 90^\circ, k_\beta < 90^\circ, k_\gamma < 90^\circ, k_\gamma = \max \{k_\alpha, k_\beta, k_\gamma\}$$

$$TRL_{1a} : k_\alpha > 90^\circ, k_\beta > 90^\circ, k_\gamma > 90^\circ, k_\gamma = \min \{k_\alpha, k_\beta, k_\gamma\}$$

$$TRL_{2a} : k_\alpha > 90^\circ, k_\beta > 90^\circ, k_\gamma > 90^\circ$$

$$TRL_{2b} : k_\alpha < 90^\circ, k_\beta < 90^\circ, k_\gamma < 90^\circ$$

4 能带理论和能带计算

能带理论实质是研究固体材料中的电子运动情况的基础理论，可以定性地描述晶体中电子运动的普遍特点。能带理论可以解释金属材料、半导体材料以及绝缘体材料的导电性能。能带理论的根本出发点是认为固体中的电子不再为某个原子所独有，而是不仅受到该原子核的束缚，同时也要受到其它原子的影响，从而把电子的运动看作是在整个固体中作共有化运动。

4.1 布洛赫定理

布洛赫定理——势场 $V(r)$ 具有晶格周期性时，电子波函数所满足的薛定谔方程：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(r) = E \psi(r) \quad (4.1.1)$$

方程所具有的形式：

$$\psi(r + R_n) = e^{ik \cdot R_n} \psi(r) \quad (4.1.2)$$

于是便把上式称为布洛赫函数，其中 k 为一矢量，当平移晶格矢量 R_n 时，波函数只增加了相位因子 $e^{ik \cdot R_n}$ 。

4.2 自由电子近似模型

金属在周期势场中作用，用势场的平均值代替离子产生的势场： $\bar{V} = V(\vec{r})$ ，周期性势场的起伏量 $V(\vec{r}) - \bar{V} = \Delta V$ 作为微扰来处理。当两个相互自由的矩阵元状态 \vec{k} 和 $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}_n$ 的零级能量相等时，第一、二级能量修正非常大，能量会在布里渊区的边界发生突变，能级展宽为一系列的能带。

4.3 紧束缚近似模型

紧束缚近似模型的思想就是认为电子在一个原子格点的附近时，主要受到该原子势场的作用，而将其它原子势场的作用看作是微扰，将晶体中电子的波函数近似看成原子轨道波函数的线性组合，这样可以得到原子能级和晶体中能带之间的关系^[6]。

电子在格矢 $R_m = m_1 a_1 + m_2 a_2 + m_3 a_3$ 处原子附近运动，则第 m 个原子中电子的第 i 个束缚态波函数 $\varphi_i(r - R_m)$ ，该波函数满足薛定谔方程：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r - R_m) \right] \varphi_i(r - R_m) = E \varphi_i(r - R_m) \quad (4.3.1)$$

其中 $V(r - R_m)$ 表示 R_m 格点的原子在 \vec{r} 处的势场， ε_i 表示第 i 个束缚态的能级。

4.4 Xcrysden 软件标注高对称点的坐标

第一步，首先确定要研究的晶体种类，在材料数据库中找到该晶体，并进行能带及布里渊区中高对称点等相关参数的对比，以确保所找的结构与所需要的结构相一致，从而能在能带计算时得到正确的结果。

第二步，保存找到的每种晶体的 cif 格式，在此时若得到的是超胞，超胞与原胞不同，会影响计算的结果，所以需要导入 materials project 软件中进行处理，给晶体建立对称性，将超胞转换为原胞。

第三步，将转换后的原胞导入 vesta 软件中进行处理，保存每种晶体的图像及.vasp 文件，然后将.vasp 文件转化为.qe 文件并生成 pw.in 文件。

第四步，将准备好的 cif 文件、.vasp 文件和 pw.in 文件上传，在 Linux 系统中利用 Xcrysden 软件进行操作，找到每个晶体的布里渊区，对布里渊区中的高对称点进行标注，记录每个高对称点的位置坐标，保留四位小数，为在计算能带时所需要的 KPOINTS 文件做准备。

4.5 VASP 软件计算能带

第一步，在用 VASP 软件计算能带时，首先要对具体材料进行自洽计算，自洽计算需要找到四个文件，INCAR 文件则是根据实际情况和需要对一些参数进行设置；KPOINTS 文件则需要满足晶格参数的条件；POSCAR 文件是将找到的 cif 格式导入 vesta 软件中所生成的；POTCAR 文件则是在赝势库中生成，在生成时要注意按照晶体的原子排列顺序，以便得到正确的 POSCAR 文件，脚本提交，便可得到自洽的结果。

第二步，能带的计算要基于自洽计算的结果，POSCAR 文件和 POTCAR 文件与自洽计算的结果相同。不同的是，能带计算时所需的 KPOINTS 文件则是根据不同晶体的布里渊区用 Xcrysden 软件对高对称点进行标注所得到的，记录下每个高对称点的相应坐标所生成。

第三步，找到 INCAR、KPOINTS、POSCAR、POTCAR 四个文件后，利用第一性原理软件 VASP 计算出所需要的能带以及能带密度。

4.6 Origin 软件绘制能带图及能态密度图

将计算能带时所得到的 vasprun 文件导入 p4vasp 中，点击展示能带图及能带密度图，并保存为数据，将保存好的数据导入 origin 软件中进行处理，选择折线图，绘制出能带图及能态密度图。在绘图时应该选择合适的坐标，对于端点坐标，要采用计算所得数据的首尾两个点，以便使得到的图像更加准确和清晰地展示出来。

5 能带分析

能带是在形成分子的过程中，原子轨道构成具有分离能级的分子轨道。晶体是由大量的原子有序堆积而成的^[7]。由原子轨道所构成的分子轨道数量非常之大，在原子外运动的电子不仅受到该原子的作用，还受到其他原子的束缚力作用，便把电子运动看作共有化运动。电子作共有化运动的轨道被看作是连续的，许许多多的连续的轨道便形成了能带。下面将从两个方面对不同晶体的能带进行分析：

一、物理性质

能带可以划分为最外层电子所处的价带，具有导电能力的导带，导带与价带之间的禁带。以禁带宽度大小来划分材料类别。若计算出材料的禁带宽度为 0，则可判断该材料为导体；若计算出材料的禁带宽度大于 4.5eV ，则可判断该材料为绝缘体；若计算出材料的禁带宽度在 0 到 4.5eV 之间，则可判断该材料为半导体。

二、直接带隙和间接带隙

直接带隙指的是晶体能带中的价带最大值和导带最小值位于 k 空间中的同一位置，间接带隙指的是晶体能带中的价带最大值和导带最小值不位于 k 空间中的同一位置。通过能带图，若材料的价带顶和导带底位于布里渊区中的同一点，则判断该材料为直接带隙材料；若二者位于布里渊区中的不同点，则判断该材料为间接带隙材料。

对如下结构的能带及能态密度进行计算和分析：

1. SrSnO_3 (A.1 简单立方)

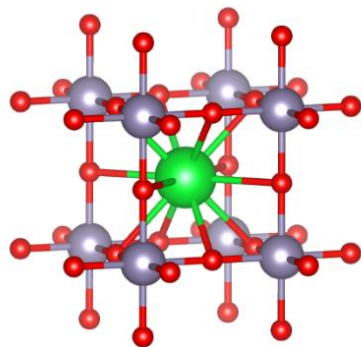


图 5.1.1 SrSnO_3 的晶体结构

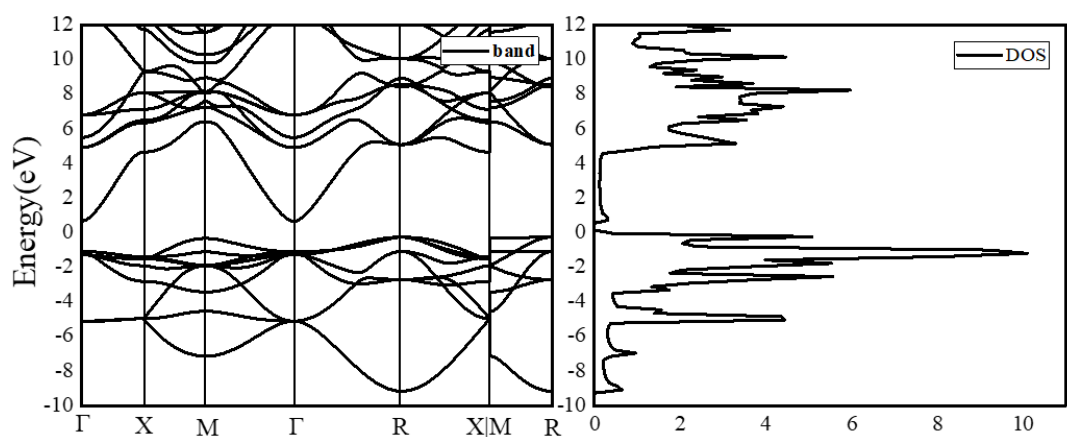


图 5.1.2 $SrSnO_3$ 的能带结构及能态密度

能带分析： $SrSnO_3$ 是一种钙钛矿结构，其晶体的禁带宽度约为 0.6eV ，属于半导体化合物（禁带宽度为 0 到 4.5eV 之间）；价带顶位于 M 点，而导带底位于 Γ 点，两者位于不同点，所以属于一种间接带隙半导体材料。

2. CdS (A.2 面心立方)

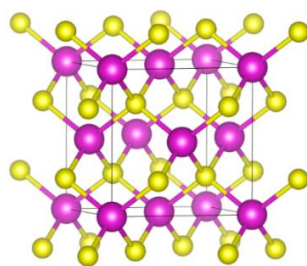


图 5.2.1 CdS 的晶体结构

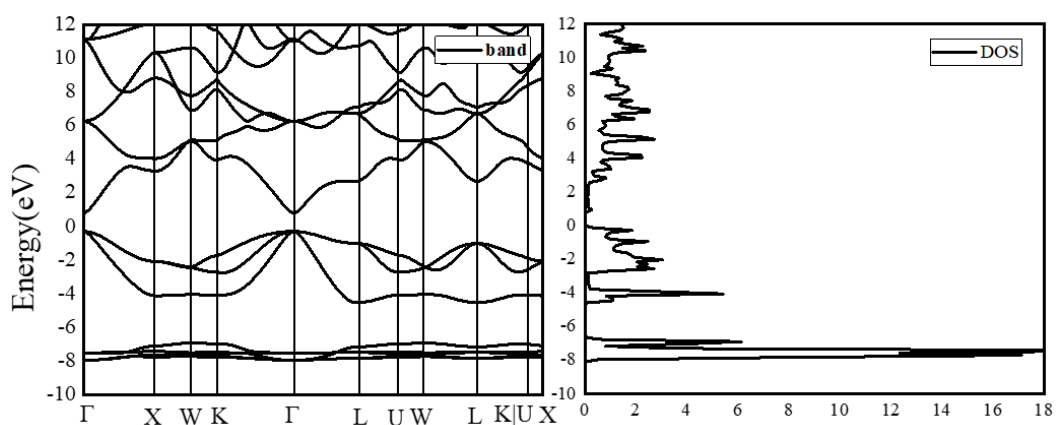


图 5.2.2 CdS 的能带结构及能态密度

能带分析： CdS 晶体的禁带宽度约为 $1eV$ ，是一种典型的半导体化合物，具有优异的光电转换特性。导带的最低点和价带的最高点都位于同一点 Γ 点上，则 CdS 属于直接带隙材料^[8]。

3. GeF_4 (A.3 体心立方)

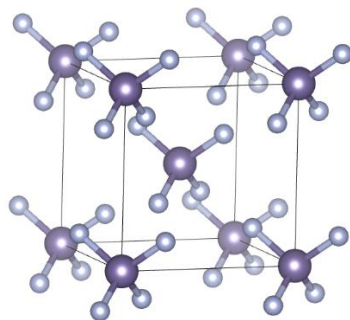


图 5.3.1 GeF_4 的晶体结构

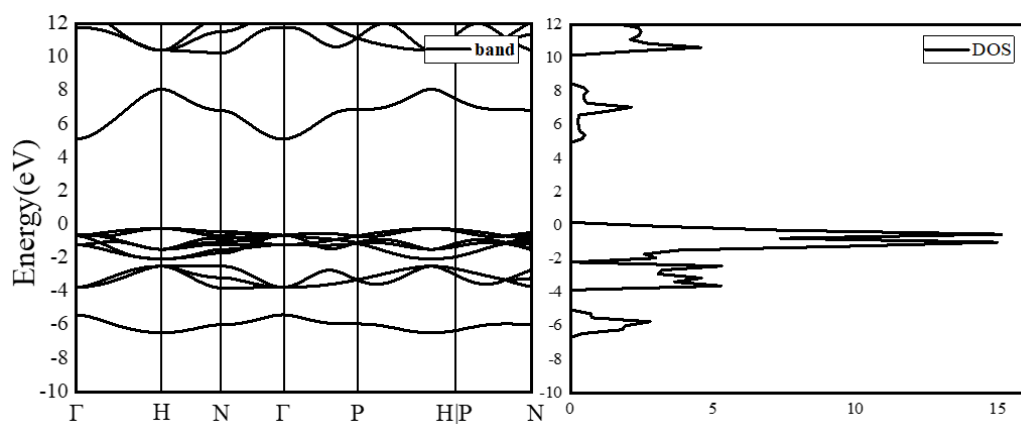


图 5.3.2 GeF_4 的能带结构及能态密度

能带分析： GeF_4 晶体的禁带宽度约为 $5eV$ ，是一种绝缘体。价带顶位于 H 点，而导带底位于 Γ 点，两者不位于同一点上，则 GeF_4 是一种间接带隙材料。

4. SnO_2 (A.4 简单四方)

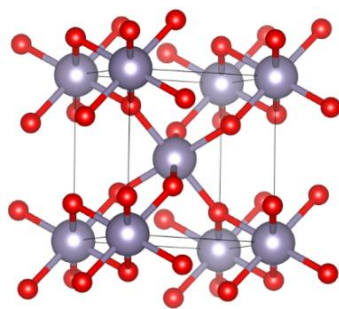


图 5.4.1 SnO_2 的晶体结构

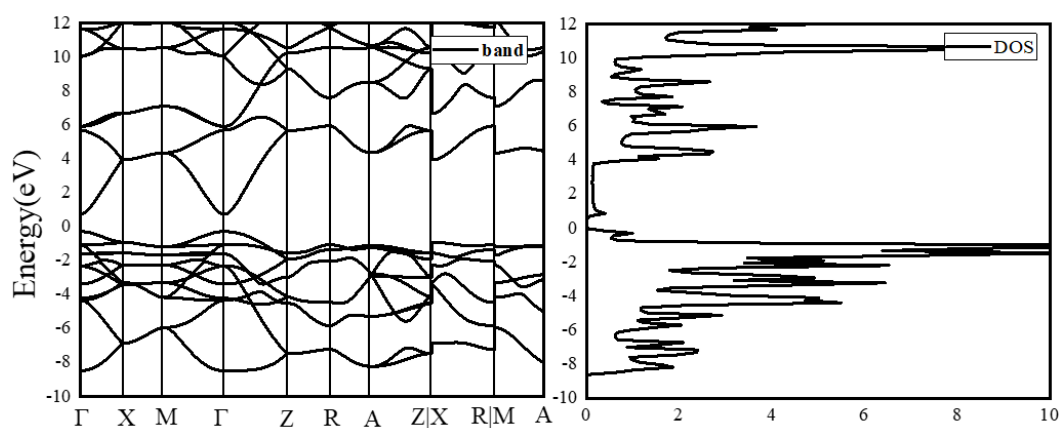


图 5.4.2 SnO_2 的能带结构以能态密度

能带分析： SnO_2 晶体的禁带宽度约为 0.6eV ，是一种半导体化合物，可以从能带结构中得出价带的最大值和导带的最小值均位于布里渊区中的 Γ 点，所以 SnO_2 是一种直接带隙的半导体。

5. Zn_2SiO_4 (A.5 体心四方)

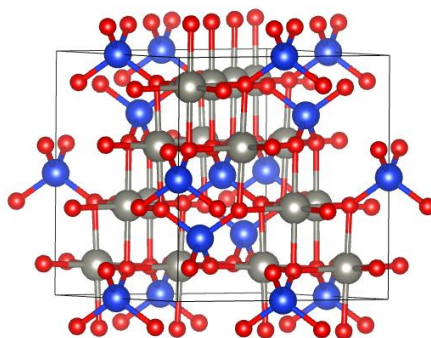


图 5.5.1 Zn_2SiO_4 的晶体结构

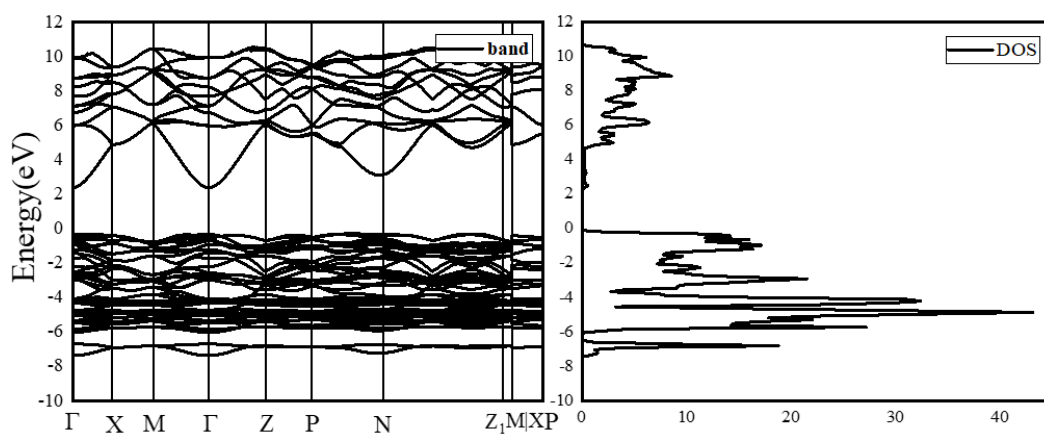


图 5.5.2 Zn_2SiO_4 的能带结构及能态密度

能带分析： Zn_2SiO_4 晶体的禁带宽度约为 $2eV$ ，是一种半导体材料，导带的最低点和价带的最高点都位于同一点 Γ 点上，所以 Zn_2SiO_4 是属于一种直接带隙材料，具有较好的光学性质。

6. $CaIn_2O_4$ (A.5 体心四方)

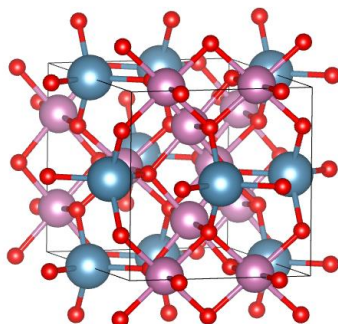


图 5.6.1 $CaIn_2O_4$ 的晶体结构

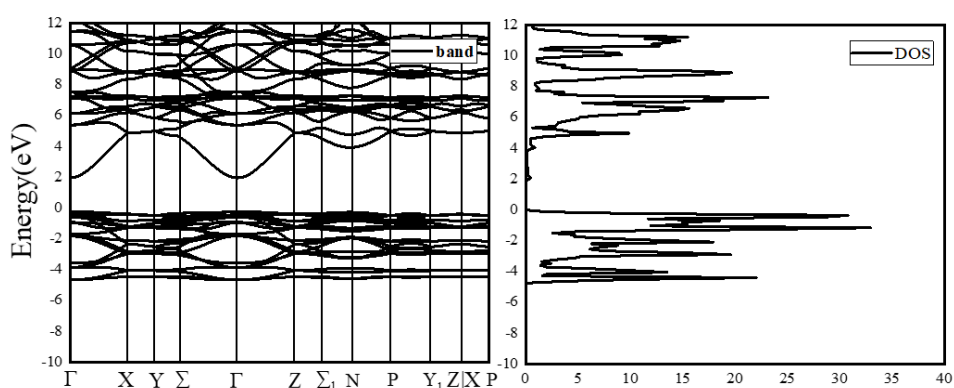


图 5.6.2 CaIn_2O_4 的能带结构及能态密度

能带分析： CaIn_2O_4 晶体的禁带宽度约为 2eV ，是一种半导体材料，导带的最低点和价带的最高点都位于同一点 Γ 点上，是一种直接带隙材料。

7. BiF_3 (A.6 简单正交)

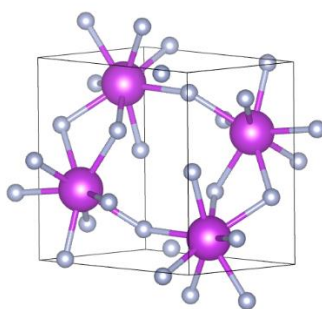


图 5.7.1 BiF_3 的晶体结构

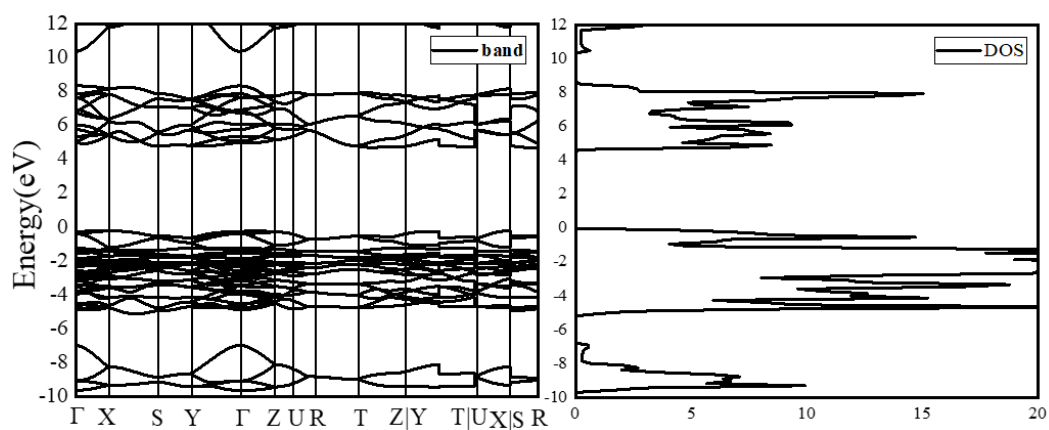


图 5.7.2 BiF_3 的能带结构及能态密度

能带分析： BiF_3 晶体的禁带宽度约为 $4.2eV$ ，是一种半导体材料。导带的最低点和价带的最高点并不在同一点，是一种间接带隙材料。

8. Cd_2SiO_4 (A.7 面心正交)

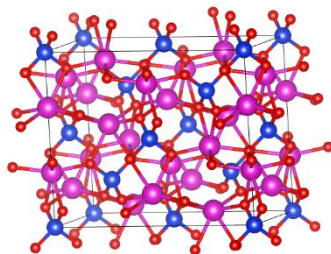


图 5.8.1 Cd_2SiO_4 的晶体结构

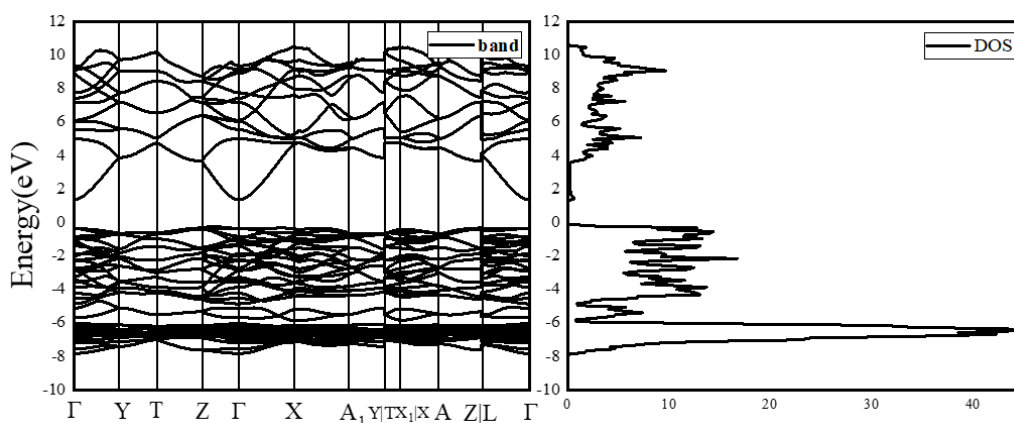


图 5.8.2 Cd_2SiO_4 的能带结构及能态密度

能带分析： Cd_2SiO_4 晶体的禁带宽度约为 $1.8eV$ ，是一种典型的半导体材料，其价带顶和导带底均位于同一个点 Γ 点，是一种直接带隙半导体。

9. $SiSe_2$ (A.8 体心正交)

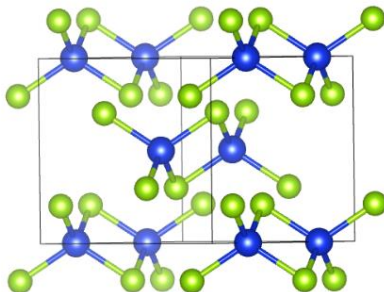


图 5.9.1 $SiSe_2$ 的晶体结构

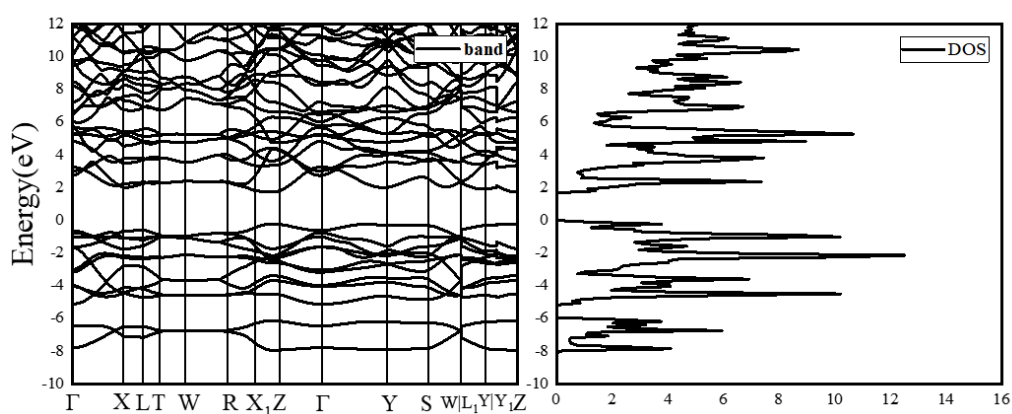


图 5.9.2 SiSe_2 的能带结构及能态密度

能带分析： TiF 晶体的禁带宽度约为 2eV ，是一种半导体材料，价带的最高点和导带的最低点都位于 Z 点，所以该材料是一种直接带隙材料。

10. TlI (A.9 底心正交)

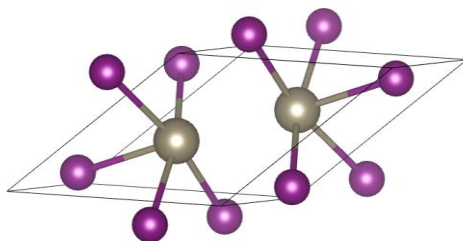


图 5.10.1 TlI 的晶体结构

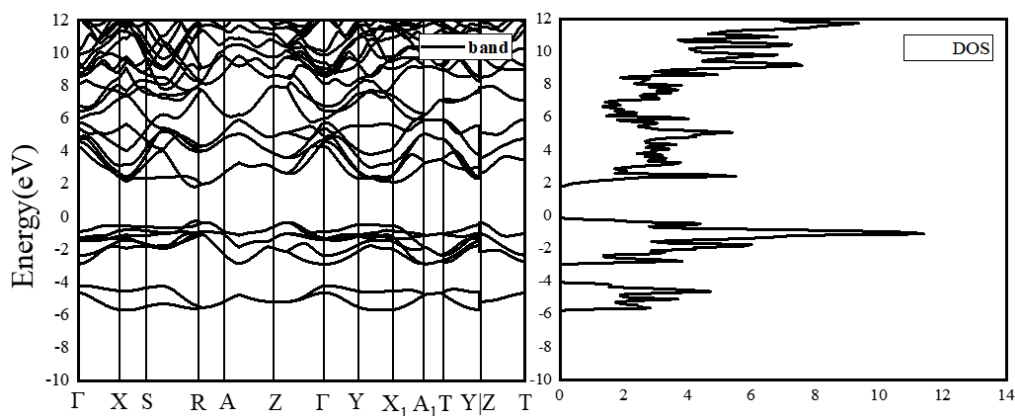


图 5.10.2 TlI 的能带结构及能态密度

能带分析： TiI 晶体的禁带宽度约为 $2eV$ ，是一种半导体材料，价带的最高点和导带的最低点位于 R 点，是一直直接带隙材料。

11. BiI_3 (A.10 六角)

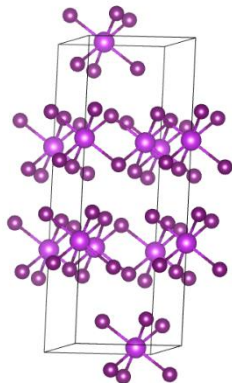


图 5.11.1 BiI_3 的晶体结构

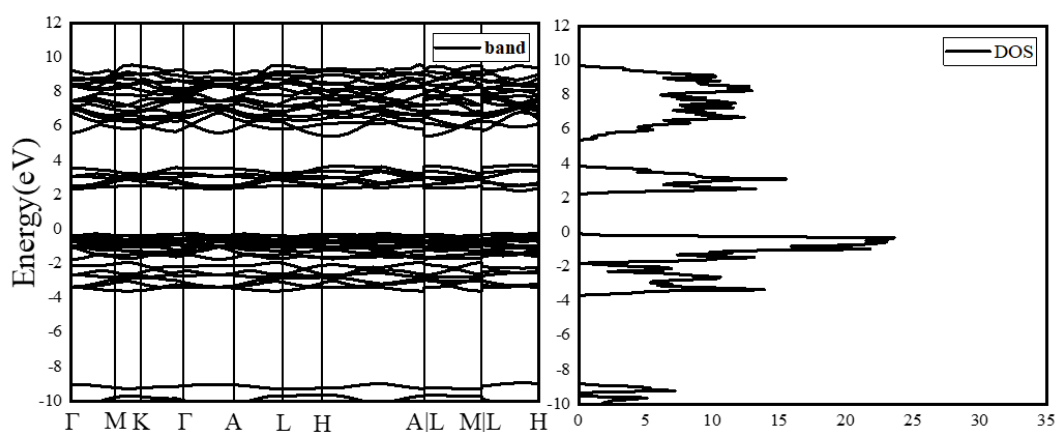


图 5.11.2 BiI_3 的能带结构及能态密度

能带分析： BiI_3 晶体的禁带宽度约为 $2eV$ ，是一种半导体材料。

12. $AlBiO_3$ (A.11 三方)

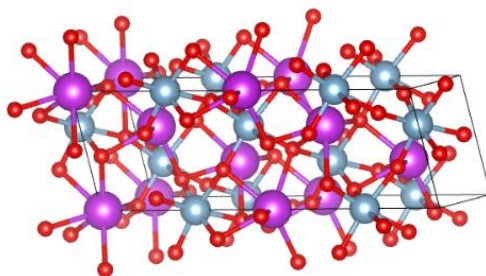


图 5.12.1 $AlBiO_3$ 的晶体结构

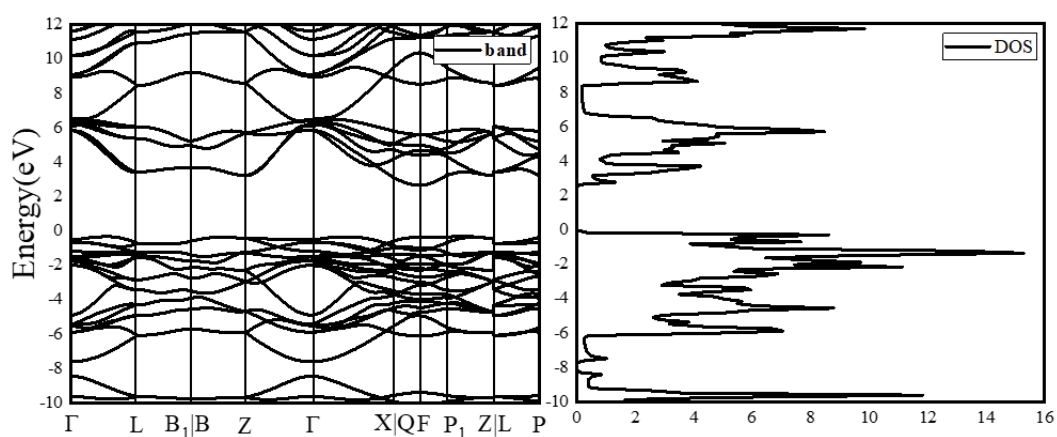


图 5.12.2 $AlBiO_3$ 的能带结构及能态密度

能带分析： $AlBiO_3$ 晶体的禁带宽度约为 $3eV$ ，是一种半导体材料。导带的最低点在 F 点，价带最高点在 Z 点，是一种间接带隙材料。

13. $BiBO_3$ (A.12 简单单斜)

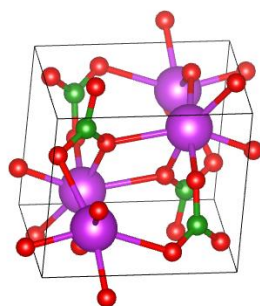


图 5.13.1 $BiBO_3$ 的晶体结构

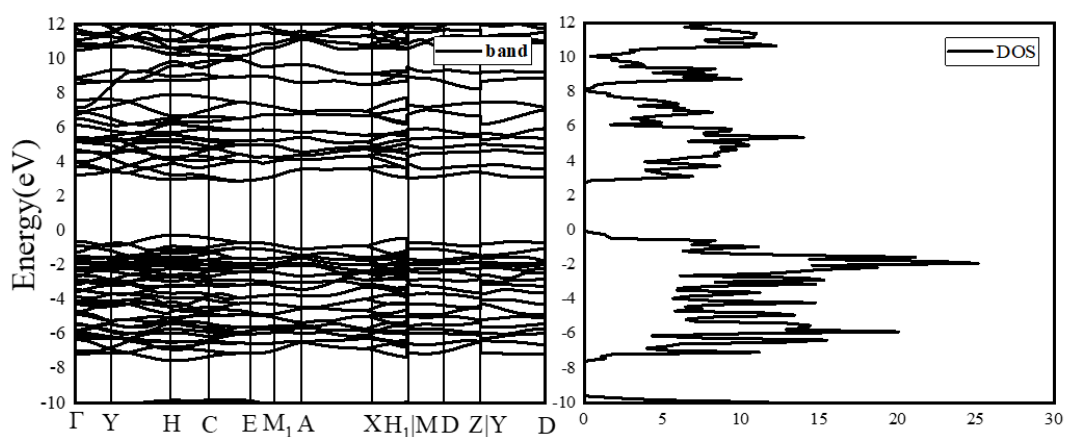


图 5.13.2 $BiBO_3$ 的能带结构及能态密度

能带分析： BiBO_3 晶体的禁带宽度约为 3eV ，是一种半导体材料，价带的最高点和导带的最低点位于 H 点，该材料是一种直接带隙材料。

14. BaNaBO_3 (A.13 底心单斜)

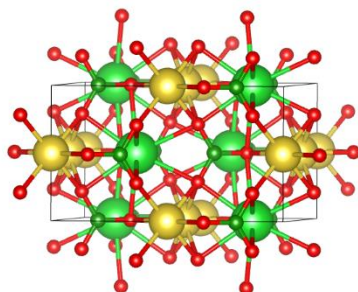


图 5.14.1 BaNaBO_3 的晶体结构

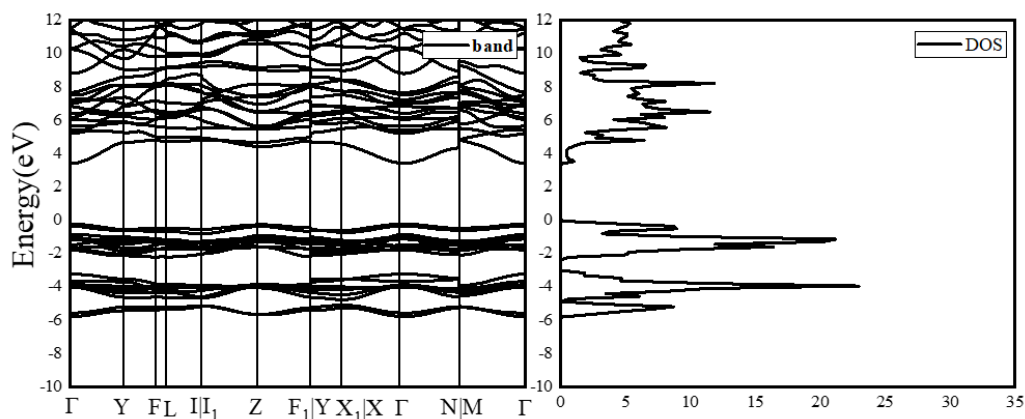


图 5.14.2 BaNaBO_3 的能带结构及能态密度

能带分析： BaNaBO_3 晶体的禁带宽度约为 3.8eV ，是一种半导体材料，价带的最高点和导带的最低点位于同一点 Γ 点上，是一种直接带隙材料。

15. InBr_3 (A.13 底心单斜)

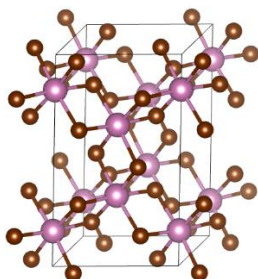


图 5.15.1 InBr_3 的晶体结构

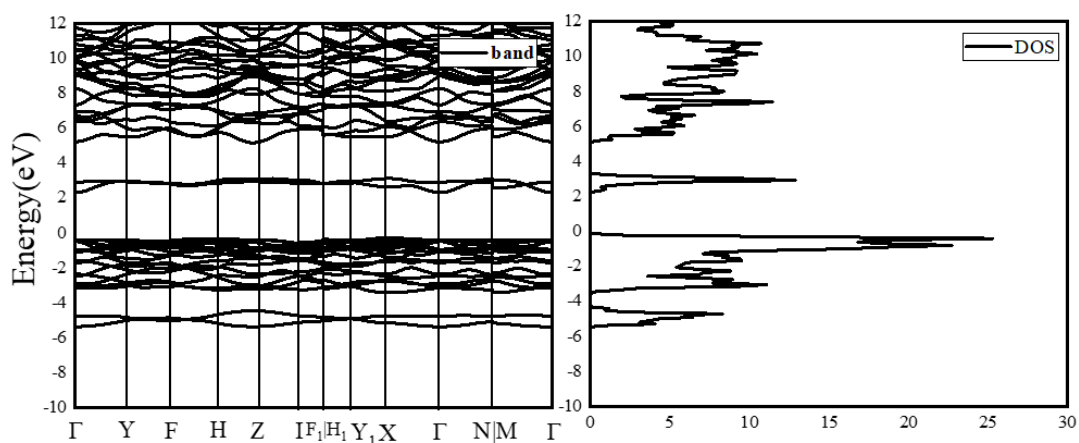


图 5.15.2 $InBr_3$ 的能带结构及能态密度

能带分析: $InBr_3$ 晶体的禁带宽度约为 $2eV$ ，是一种半导体材料。

16. Na_2CdSnS_4 (A.13 底心单斜)

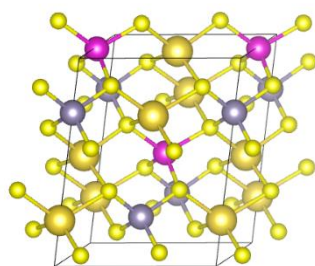


图 5.16.1 Na_2CdSnS_4 的晶体结构

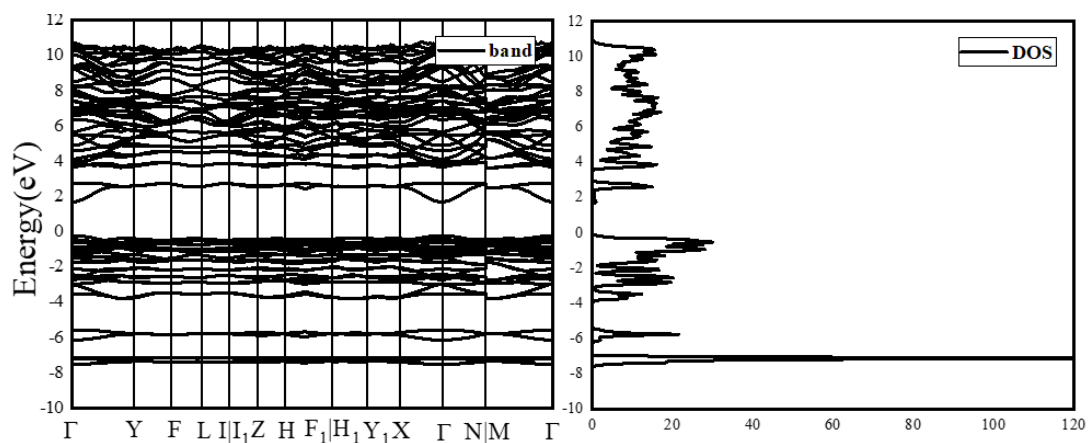


图 5.16.2 Na_2CdSnS_4 的能带结构及能态密度

能带分析: Na_2CdSnS_4 晶体的禁带宽度约为 $2eV$ ，是一种半导体材料。

17. LiCdBO_3 (A.14 三斜)

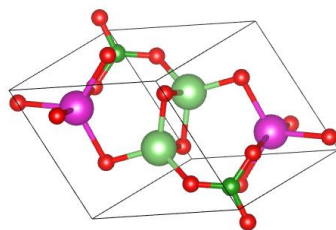


图 5.17.1 LiCdBO_3 的晶体结构

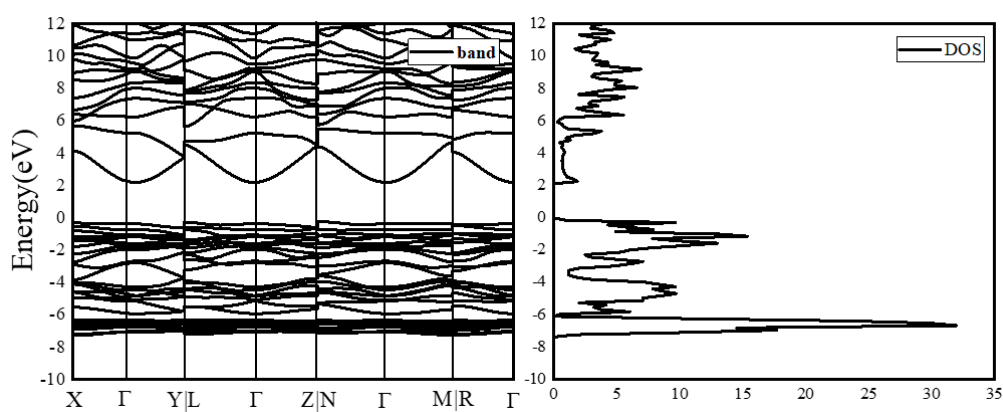


图 5.17.2 LiCdBO_3 的能带结构及能态密度

能带分析： LiCdBO_3 晶体的禁带宽度约为 2eV ，是一种半导体材料，价带顶和导带低位于同一点 Γ 点上，是一种直接带隙材料。

18. $\text{Cd}_2\text{B}_2\text{O}_5$ (A.14 三斜)

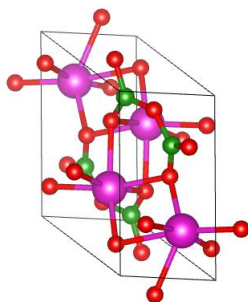


图 5.18.1 $\text{Cd}_2\text{B}_2\text{O}_5$ 的晶体结构

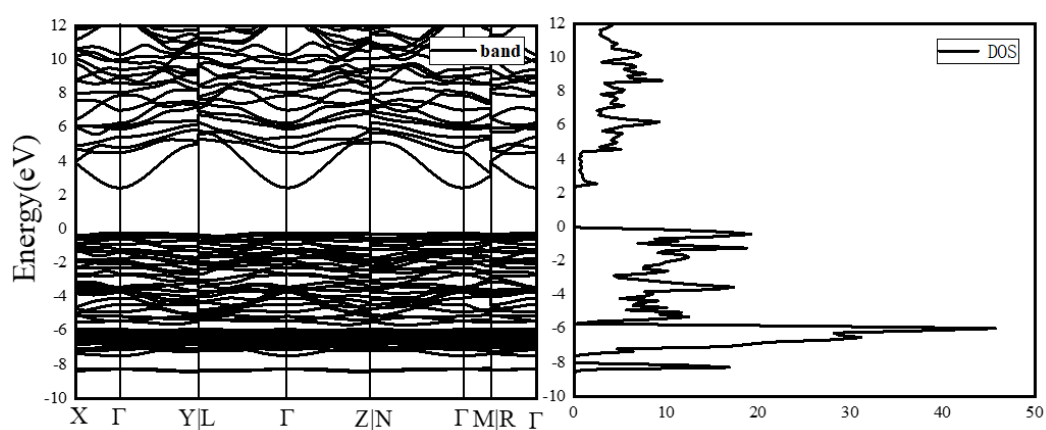


图 5.18.2 $Cd_2B_2O_5$ 的能带结构及能态密度

能带分析： $Cd_2B_2O_5$ 晶体的禁带宽度约为 $2.4eV$ ，是一种半导体材料，价带顶和导带底位于同一点 Γ 点上，是一种直接带隙材料。

6 结论

本文介绍了正空间和倒空间及布里渊区的基本概念，使用 `mathematica` 软件写出了正空间和倒空间之间关系的程序，清晰地展示正空间和倒空间之间的关系。利用 `Xcrysden` 软件对 14 种布拉菲格子的布里渊区高对称点、线、面进行了标注，读出高对称点的坐标以及显示高对称路径。结合第一性原理软件 `VASP` 对能带及能态密度进行计算，并将计算所得数据导入 `origin` 软件中，绘制出了能带图和能态密度图，再对每种具体材料的能带图和能态密度图进行分析，如绝缘体、半导体和金属的分类；直接带隙或者间接带隙等。

在布里渊区中，只需要知道约化布里渊区的信息便可以得到整个布里渊区的信息。相应地，对应于能带，只需要知道布里渊区中高对称点的坐标，整个布里渊区的能带信息便可知，因此研究高对称点、线、面就有很重要的意义。

对于 230 种空间群，只有 14 种布拉菲格子，布拉菲格子中的布里渊区有确定的高对称点、线、面。布洛赫定理存在周期性边界条件，于是定义倒空间方便理解。14 种布拉菲格子有 14 种倒空间的形状，便可以找到并罗列 14 种高对称点，同时可作为高通量计算的依据。任何固体材料必然属于 230 种空间群中的一种，必然属于 14 种布拉菲格子中的一种，每个布拉菲格子都有确定的高对称点，利用此高对称点便可计算出能带。

本文旨在提供 14 种布拉菲格子中布里渊区的高对称点的坐标，为后续需要查找不同布拉菲格子的布里渊区高对称点坐标及路径，用于计算能带提供了方便。同时绘制出了不同布里渊区的图像，并对其路径进行标注，有利于读者的阅读，也给出了一些常见具体材料计算所得的晶体结构、能带图及能态密度图，可作为参考。

参考文献

- [1]杨红,黄勇刚,邓科,王小云.第一性原理计算在固体物理中应用[J].中国西部科技,2015,14(06):3-4.
- [2]<https://www.vasp.at/>
- [3]黄昆.固体物理学[M].高等教育出版社,1998:82-85.
- [4]孔蔺春. 基于第一性原理的新型 SiC 输运性质及各向异性等的研究[D].西安电子科技大学,2021.
- [5]Wahyu Setyawan, Stefano Curtarolo, High-throughput electronic band structure calculations: Challenges and tools, Computational Materials Science, 49 (2010) 299-312.
- [6]王艳. 表面与低维纳米材料的能带结构研究[D].湖南大学,2010.
- [7]苏雪. 多晶 SrTiO_3 的制备及离子束辐照效应研究[D].兰州大学,2014.
- [8]倪利红,刘涌,宋晨路,徐刚,韩高荣.第一性原理方法研究 CdS 能带结构[J].稀有金属材料与工程,2008,37(S2):623-625.

附录

1. Mathematica, 辅助验证正空间与倒空间的关系

$$a1 = \{-a/2, b/2, c/2\}$$

$$a2 = \{a/2, -b/2, c/2\}$$

$$a3 = \{a/2, b/2, -c/2\}$$

$$b1 = 2*\text{Pi} * (a2 \backslash [\text{Cross}] a3) / (a1.a2 \backslash [\text{Cross}] a3)$$

$$b2 = 2*\text{Pi} * (a3 \backslash [\text{Cross}] a1) / (a1.a2 \backslash [\text{Cross}] a3)$$

$$b3 = 2*\text{Pi} * (a1 \backslash [\text{Cross}] a2) / (a1.a2 \backslash [\text{Cross}] a3)$$

2. VASP 相关参数

(1) 以 SrSnO_3 为例:

① 自洽计算 (scf)

INCAR:

SYSTEM = SrSnO3

#Startparameter for this run:

PREC = Accurate

ISTART = 0

ICHARG = 2

LREAL = .FALSE.

#Ionic Relaxation

IBRION = 2

ISIF = 2

NSW = 0

#EDIFFG = -1.0E-2

POTIM = 0.25

#Electronic Relaxation

EDIFF = 1.0E-05

ENCUT = 500

ALGO = Fast

#DOS related values

ISMEAR = 0

SIGMA = 0.05

#Writing items

LWAVE = .FALSE.

LCHARG = .TRUE.

LVTOT = .FALSE.

KPOINTS:

Automatic mesh

0

Monkhorst-Pack

6 6 6

0 0 0

POTCAR:

PAW_PBE Sr_sv 07Sep2000

10.0000000000000000

parameters from PSCTR are:

VRHFIN =Sr: 4s4p5s

LEXCH = PE

EATOM = 842.4562 eV, 61.9188 Ry

②能带计算 (band)

INCAR:

SYSTEM = SrSnO3

#Startparameter for this run:

PREC = Accurate

ISTART = 0

ICHARG = 11

LREAL = .FALSE.

#Ionic Relaxation

IBRION = 2

ISIF = 2

```

NSW = 0
#EDIFFG = -1.0E-2
POTIM = 0.25
#Electronic Relaxation
EDIFF = 1.0E-05
ENCUT = 500
ALGO = Fast
#LORBIT = 11
NBANDS = 32 ! revised
#DOS related values
ISMEAR = 0
SIGMA = 0.05
#Writing items
LWAVE = .FALSE.
LCHARG = .FALSE.
LVTOT = .FALSE.

KPOINTS:
k-points along high symmetry lines
50 !50 intersections
Line-mode
rec
0.0000 0.0000 0.0000 ! gamma
0.0000 0.5000 0.0000 ! X

0.0000 0.5000 0.0000 ! X
0.5000 0.5000 0.0000 ! M

0.5000 0.5000 0.0000 ! M
0.0000 0.0000 0.0000 ! gamma

0.0000 0.0000 0.0000 ! gamma

```

0.5000 0.5000 0.5000 ! R

0.5000 0.5000 0.5000 ! R

0.0000 0.5000 0.0000 ! X

0.5000 0.5000 0.0000 ! M

0.5000 0.5000 0.5000 ! R

(2) 本篇论文中每种结构的 POSCAR 文件及布里渊区中高对称点坐标:

1. Sr Sn O₃

1.0

4.1148591042	0.0000000000	0.0000000000
0.0000000000	4.1148591042	0.0000000000
0.0000000000	0.0000000000	4.1148591042

Sr Sn O

1 1 3

Direct

0.5000000000	0.5000000000	0.5000000000
0.0000000000	0.0000000000	0.0000000000
0.5000000000	0.0000000000	0.0000000000
0.0000000000	0.0000000000	0.5000000000
0.0000000000	0.5000000000	0.0000000000

布里渊区中高对称点坐标:

Γ (0,0,0)

X(0,0.5,0)

M(0.5,0.5,0)

R(0.5,0.5,0.5)

2. CdS

1.0

4.1620001793	0.0000000000	0.0000000000
2.0810000896	3.6043978858	0.0000000000
2.0810000896	1.2014659619	3.3982589162

Cd S

1	1		
Direct			
0.000000000	0.000000000	0.000000000	
0.250000000	0.250000000	0.250000000	
布里渊区中高对称点坐标:			
$\Gamma(0,0,0)$			
$X(0.5,0.5,0.5)$			
$W(0.5,0.25,0.75)$			
$K(0.375,0.375,0.75)$			
$L(0.5,0.5,0.5)$			
$U(0.625,0.25,0.625)$			
3.GeF ₄			
1.0			
4.6002998352	0.0000000000	0.0000000000	
-1.5334316434	4.3372048567	0.0000000000	
-1.5334316434	-2.1685989600	3.7561315898	
Ge	F		
1	4		
Direct			
0.000000000	0.000000000	0.000000000	
0.000000000	0.630579948	0.000000000	
0.630579948	0.000000000	0.000000000	
0.369420052	0.369420052	0.369420052	
0.000000000	0.000000000	0.630579948	
布里渊区中高对称点坐标:			
$\Gamma(0,0,0)$			
$H(0.5,-0.5,0.5)$			
$N(0,0,0.5)$			
$P(0.25,0.25,0.25)$			
4.SnO ₂			
1.0			
4.7648000717	0.0000000000	0.0000000000	

	0.0000000000	4.7648000717	0.0000000000
	0.0000000000	0.0000000000	3.2074999809
Sn	O		
2	4		
Direct			
	0.5000000000	0.5000000000	0.5000000000
	0.0000000000	0.0000000000	0.0000000000
	0.805970013	0.194030002	0.5000000000
	0.194029987	0.805970013	0.5000000000
	0.305970013	0.305970013	0.0000000000
	0.694029987	0.694029987	0.0000000000
布里渊区中高对称点坐标:			
Γ (0,0,0)			
A(0.5,0.5,0.5)			
M(0.5,0.5,0)			
R(0,0.5,0.5)			
X(0,0.5,0)			
Z(0,0,0.5)			
5.Zn ₂ SiO ₄			
1.0			
	5.9924001694	0.0000000000	0.0000000000
	-2.4104325317	5.4862259159	0.0000000000
	-1.7909838926	-2.7431130709	5.0176256503
O	Zn	Si	
8	4	2	
Direct			
	0.621879995	0.916050017	0.318969965
	0.597080052	0.302910030	0.681030035
	0.083949983	0.402919948	0.705829978
	0.697089970	0.378120005	0.294170022
	0.152919948	0.333949983	0.205829978
	0.128120005	0.947089970	0.794170022

0.052910030	0.847080052	0.181030035
0.666050017	0.871879995	0.818969965
0.375000000	0.467260003	0.592260003
0.875000000	0.782739997	0.407739997
0.532739997	0.125000000	0.907739997
0.217260003	0.625000000	0.092260003
0.000000000	0.000000000	0.000000000
0.750000000	0.250000000	0.500000000

布里渊区中高对称点坐标:

$\Gamma(0,0,0)$

$X(0,0,0.5)$

$M(-0.5,0.5,0.5)$

$Z(0.4631,0.4631,-0.4631)$

$P(0.25,0.25,0.25)$

$P(0.25,0.25,0.25)$

$N(0,0.5,0)$

$Z_1(-0.4631,0.5368,0.4631)$

$6.CaIn_2O_4$

1.0

6.5762000084	0.0000000000	0.0000000000
3.2881000042	5.6951562676	0.0000000000
3.2881000042	1.8983854225	5.3694448223

Ca In O

2 4 8

Direct

0.750000000	0.750000000	0.750000000
0.500000000	0.500000000	0.500000000
0.625000000	0.125000000	0.125000000
0.125000000	0.625000000	0.125000000
0.125000000	0.125000000	0.625000000
0.125000000	0.125000000	0.125000000
0.360889971	0.360890001	0.917330027

0.360890001	0.360889971	0.360890001
0.917330027	0.360890001	0.360889971
0.360890001	0.917330027	0.360890001
0.889110029	0.889109969	0.889109969
0.889109969	0.889110029	0.332669973
0.332669973	0.889109969	0.889109969
0.889109969	0.332669973	0.889110029

布里渊区中高对称点坐标：

$\Gamma(0,0,0)$

$X(0.5,0,0.5)$

$Y(0.25,-0.25,0.5)$

$\Sigma(0,-0.375,0.375)$

$Z(0,0.5,0.5)$

$\Sigma_1(0,0.375,0.625)$

$N(0,0,0.5)$

7.Bi₄ F₁₂

1.0

4.6748228073	0.0000000000	0.0000000000
0.0000000000	6.5476474762	0.0000000000
0.0000000000	0.0000000000	7.0683398247

Bi F

4 12

Direct

0.956249237	0.635337055	0.750000000
0.456249207	0.864662945	0.250000000
0.543750763	0.135337040	0.750000000
0.043750782	0.364662945	0.250000000
0.368532151	0.165542260	0.438703448
0.868532121	0.334457725	0.561296582
0.131467849	0.665542245	0.061296560
0.631467879	0.834457755	0.938703418
0.608152986	0.529921472	0.250000000

0.108152971	0.970078528	0.750000000
0.891847014	0.029921500	0.250000000
0.391847044	0.470078498	0.750000000
0.368532151	0.165542260	0.061296560
0.868532121	0.334457725	0.938703418
0.131467849	0.665542245	0.438703448
0.631467879	0.834457755	0.561296582

布里渊区中高对称点坐标：

$\Gamma(0,0,0)$

$X(0,0,0.5)$

$S(0.5,0,0.5)$

$Y(0.5,0,0)$

$Z(0,0.5,0)$

$U(0,0.5,0.5)$

$R(0.5,0.5,0.5)$

$T(0.5,0.5,0)$

8.Cd₂SiO₄

1.0

7.7283000946	0.0000000000	0.0000000000
4.5983230829	4.8420827484	0.0000000000
3.1299101271	-1.1026012829	4.7148784422

O	Cd	Si
8	4	2

Direct

0.771780014	0.875540018	0.935829997
0.875540018	0.771780014	0.416849971
0.935829997	0.416849971	0.771780014
0.416849971	0.935829997	0.875540018
0.478219986	0.374459982	0.314170003
0.374459982	0.478219986	0.833150029
0.314170003	0.833150029	0.478219986
0.833150029	0.314170003	0.374459982

0.065779984	0.434219956	0.065780044
0.434219956	0.065779984	0.434220016
0.184220016	0.815780044	0.184219956
0.815780044	0.184220016	0.815779984
0.750000000	0.750000000	0.750000000
0.500000000	0.500000000	0.500000000

布里渊区中高对称点坐标：

$\Gamma(0,0,0)$

$Y(0.5,0,0.5)$

$T(1,0.5,0.5)$

$Z(0.5,0.5,0)$

$X(0,0.4072,0.4072)$

$A_1(0.5,0.2201,0.7201)$

$X_1(1.0.5972,0.5972)$

$A(0.5,0.7798,0.2798)$

$L(0.4,0.4814,0.4814)$

9.SiSe₂

1.0

6.5123000145	0.0000000000	0.0000000000
-3.8451645868	5.2559262532	0.0000000000
0.3952977800	-3.5052848225	5.4741912149

Si Se

2 4

Direct

0.250000000	0.250000000	0.000000000
0.750000000	0.750000000	0.000000000
0.373640001	0.310729980	0.684369981
0.626359999	0.689270020	0.315630019
0.873640001	0.189270020	0.062910020
0.126359999	0.810729980	0.937089980

布里渊区中高对称点坐标：

$\Gamma(0,0,0)$

X(0.336,0.336,-0.336)

L(0.182,0.49,-0.182)

T(0,0.5,0)

W(0.25,0.25,0.25)

R(0.5,0,0)

X₁(0.664,-0.336,0.336)

Z(0.5,-0.5,0.5)

Y(-0.346,0.346,0.346)

S(0,0,0.5)

10.TII

1.0

6.9491000175	0.0000000000	0.0000000000
5.3762251477	4.4029756091	0.0000000000
0.0000000000	0.0000000000	5.2437000275

TI I

2 2

Direct

0.608460009	0.608460009	0.250000000
0.391539991	0.391539991	0.750000000
0.863990009	0.863990009	0.250000000
0.136009991	0.136009991	0.750000000

布里渊区中高对称点坐标:

Γ (0,0,0)

X(0.7818,0.2819,0)

L(0.182,0.49,-0.182)

T(0,0.5,0)

W(0.25,0.25,0.25)

R(0.5,0,0)

X₁(0.664,-0.336,0.336)

Z(0.5,-0.5,0.5)

Y(-0.346,0.346,0.346)

S(0,0,0.5)

11. BiI₃

1.0

8.4647998810	0.0000000000	0.0000000000
4.9866772350	6.8400209926	0.0000000000
4.9866772350	2.5357049398	6.3526441454

I Bi
6 2

Direct

0.916970015	0.260479987	0.571470022
0.083029985	0.739520013	0.428530008
0.571470022	0.916970015	0.260479987
0.428530008	0.083029985	0.739520013
0.260479987	0.571470022	0.916970015
0.739520013	0.428530008	0.083029985
0.666666687	0.666666687	0.666666687
0.333333313	0.333333313	0.333333313

布里渊区中高对称点坐标:

Γ (0,0,0)

A(0,0,0.5)

H(0.333,0.333,0.5)

K(0.333,0.333,0)

L(0.5,0,0.5)

M(0.5,0,0)

12. AlBiO₃

1.0

5.4600000381	0.0000000000	0.0000000000
2.7746811842	4.7024190309	0.0000000000
2.7746811842	1.5844831455	4.4274324280

O Al Bi
6 2 2

Direct

0.549920022	0.084430002	0.985099971
-------------	-------------	-------------

0.985099971	0.549920022	0.084430002
0.084430002	0.985099971	0.549920022
0.584429979	0.049920022	0.485100001
0.049920022	0.485100001	0.584429979
0.485100001	0.584429979	0.049920022
0.278659999	0.278659999	0.278659999
0.778659999	0.778659999	0.778659999
0.005630000	0.005630000	0.005630000
0.505630016	0.505630016	0.505630016

布里渊区中高对称点坐标:

$\Gamma(0,0,0)$

$L(0,0,0.5)$

$B_1(0.2479,-0.2479,0.5)$

$B(0.5,0.2479,0.7520)$

$Z(0.5,0.5,0.5)$

$X(0,-0.3739,0.3739)$

$Q(0.3739,0,0.626)$

$F(0.5,0,0.5)$

$P_1(0.6260,0.2479,0.6260)$

$P(0.3739,0.3739,0.7520)$

13.Bi₄ B₄ O₁₂

1.0

6.5850062370	0.0000000000	0.0000000000
0.0000000000	5.0360155106	0.0000000000
-2.8019699130	0.0000000000	7.8204019221

Bi B O

4 4 12

Direct

0.739419639	0.744879842	0.623407543
0.260580391	0.244879827	0.876592457
0.260580391	0.255120188	0.376592427
0.739419639	0.755120158	0.123407558

0.211333573	0.753988028	0.611651003
0.788666427	0.253987998	0.888348997
0.788666427	0.246011987	0.388349026
0.211333573	0.746011972	0.111650981
0.237207964	0.474409431	0.133893102
0.762792051	0.974409401	0.366106898
0.762792051	0.525590599	0.866106927
0.237207964	0.025590580	0.633893073
0.072577037	0.884474099	0.173252180
0.927422941	0.384474099	0.326747835
0.927422941	0.115525886	0.826747835
0.072577037	0.615525901	0.673252165
0.337372243	0.876545072	0.034397859
0.662627757	0.376545072	0.465602130
0.662627757	0.123454943	0.965602160
0.337372243	0.623454928	0.534397840

布里渊区中高对称点坐标:

$\Gamma(0,0,0)$

$Y(0.5,0,-0.5)$

$H(0.5866,0,-0.3241)$

$C(0.5,0,0)$

$E(0.5,0.5,0)$

$M_1(0.4133,0.5,0.3241)$

$A(0,0.5,0.5)$

$X(0,0,0.5)$

$H_1(0.4133,0,0.3241)$

$M(0.5866,0.5,-0.3241)$

$D(0.5,0.5,-0.5)$

$Z(0,0.5,0)$

14.BaNaBO₃

1.0

5.6051998138

0.0000000000

0.0000000000

	2.7734729601	4.8709457698	0.0000000000
	-0.8485919902	-0.4933293944	6.1921842042
O	Ba	B	Na
6	2	2	2
Direct			
	0.111210003	0.684449971	0.209309995
	0.315550029	0.888790011	0.790690005
	0.888790011	0.315550029	0.790690005
	0.684449971	0.111210003	0.209309995
	0.295850009	0.295850009	0.677420020
	0.704149961	0.704149961	0.322579980
	0.167370006	0.167370006	0.242280006
	0.832629979	0.832629979	0.757719994
	0.166920006	0.166920006	0.751250029
	0.833079994	0.833079994	0.248749971
	0.500000000	0.500000000	0.500000000
	0.500000000	0.500000000	0.000000000
布里渊区中高对称点坐标:			
Γ (0,0,0)			
Y(0.5,0.5,0)			
F(0.5494,0.5494,-0.4087)			
L(0.5,0.5,-0.5)			
I(0.3156,0.6843,-0.5)			
I_1 (-0.3156,0.3156,-0.5)			
Z(0,0,-0.5)			
F_1 (0.4505,0.4505,-0.5912)			
X_1 (0.3361,0.3361,0)			
N(0,0.5,0)			
M(0,0.5,-0.5)			
15.InBr ₃			
1.0			
	6.8092999458	0.0000000000	0.0000000000

	-3.4027251767	5.8981375979	0.0000000000
	-1.0951866216	-1.8962042014	6.5514346547
Br	In		
6	2		
Direct			
	0.927119970	0.576179981	0.236059994
	0.423820019	0.072880000	0.763939977
	0.072880000	0.423820019	0.763939977
	0.576179981	0.927119970	0.236059994
	0.775669992	0.775669992	0.762440026
	0.224330008	0.224330008	0.237559974
	0.833400011	0.166599989	0.000000000
	0.166600004	0.833400011	0.000000000
布里渊区中高对称点坐标:			
Γ (0,0,0)			
Y(-0.3334,-0.3334,0.0536)			
F(-0.3923,-0.3923,0.4307)			
H(-0.2744,-0.2744,0.6764)			
Z(0,0,0.5)			
I(-0.5,0.5,0.5)			
F1(-0.6076,0.3923,0.5692)			
H1(-0.7255,0.2744,0.3235)			
Y1(-0.6666,0.3334,-0.0536)			
X(-0.5,0.5,0)			
N(-0.5,0,0)			
M(-0.5,0,0.5)			
16.Na ₂ CdSnS ₄			
1.0			
	6.9152002335	0.0000000000	0.0000000000
	-1.0538484480	6.8344273877	0.0000000000
	-2.9135539968	-3.3972492968	4.6677735817
S	Na	Cd	Sn

4	2	1	1
Direct			
0.347229987	0.075860023	0.971949995	
0.924139977	0.652770042	0.028050005	
0.154060006	0.386729985	0.559650004	
0.613270044	0.845939994	0.440349996	
0.523980021	0.476020008	0.500000000	
0.777700007	0.222299993	0.000000000	
0.011240000	0.988759995	0.500000000	
0.261339992	0.738659978	0.000000000	
布里渊区中高对称点坐标:			
$\Gamma(0,0,0)$			
Y(-0.7624,-0.0362,0.3999)			
F(-0.7264,-0.2737,0.5)			
L(-0.5,-0.5,0.5)			
I(-0.4990,-0.4990,0.6779)			
I1(0.4990,-0.5009,0.3220)			
Z(0.5,-0.5,0)			
H(0.2013,0.2013,0.5)			
F1(0.2737,0.2737,0.3999)			
H1(-0.2013,-0.2013,0.7001)			
Y1(-0.2737,0.2737,0.5)			
X(-0.0362,0.2375,0.3999)			
N(-0.5,0,0.5)			
M(0,-0.5,0.5)			
17.LiCdBO ₃			
1.0			
5.2740998268	0.0000000000	0.0000000000	
-2.5694645393	4.6437294649	0.0000000000	
-2.3234071268	-1.2964234819	5.6660091487	
Li	Cd	B	O
2	2	2	6

Direct

0.568099976	0.636470020	0.336010009
0.431900024	0.363529980	0.663990021
0.842069983	0.256810009	0.230199993
0.157930017	0.743189991	0.769800007
0.802129984	0.067919999	0.731769979
0.197870016	0.932080030	0.268230021
0.627780020	0.140489995	0.816049993
0.372219980	0.859510005	0.183950007
0.958620012	0.712939978	0.319610000
0.041379988	0.287060022	0.680390000
0.727880001	0.778670013	0.693650007
0.272119999	0.221329987	0.306349993

布里渊区中高对称点坐标:

X(-0.5,0.5,0)

Γ (0,0,0)

Y(0,0,0.5)

L(-0.5,0.5,0.5)

Z(0.5,0,-0.5)

N(0,0.5,-0.5)

M(0.5,0,0)

R(0,0.5,0)

18.Cd₂B₂O₅

1.0

3.4523999691	0.0000000000	0.0000000000
-0.2031178946	6.3862708347	0.0000000000
-0.1139971382	-2.6930164396	9.6151372608

Cd B O

4 4 10

Direct

0.750970006	0.221650004	0.873929977
0.249029994	0.778349996	0.126070023

0.773699999	0.652170002	0.407299995
0.226300001	0.347829998	0.592700005
0.675450027	0.126130000	0.319379985
0.324549973	0.873870015	0.680620015
0.673690021	0.672839999	0.844049990
0.326309979	0.327160001	0.155950010
0.473769993	0.153540000	0.201079994
0.526229978	0.846459985	0.798920035
0.271160007	0.704569995	0.564320028
0.728839993	0.295430005	0.435679972
0.203510001	0.079329997	0.697380006
0.796490014	0.920670033	0.302619994
0.256099999	0.290320009	0.017770000
0.743900001	0.709679961	0.982230008
0.271200001	0.523949981	0.248720005
0.728799999	0.476050019	0.751280010

布里渊区中高对称点坐标:

X(0,0.5,0)

Γ (0,0,0)

Y(0.5,0,0)

L(0.5,-0.5,0)

Z(-0.5,0,0.5)

N(-0.5,-0.5,0.5)

M(0,0,0.5)

R(0,-0.5,0.5)

致谢

行文至此，我的本科学习生涯即将结束，始于 2019 年夏末，终于 2023 年盛夏。四年的时光仿佛弹指一挥间，四年的学习使我受益匪浅，经历近半年的磨砺，毕业论文最后完稿，在论文的整个完成过程中，我得到了许许多多的关怀和帮助，此刻要向他们表示最诚挚的谢意。

首先，我要特别感谢我的导师程才老师。从论文的开题报告到最终的定稿，程老师都给予我极大的关怀和鼓励。在论文的写作阶段，程老师耐心地为讲解论文的重点和难点，并为我提供许多相关的资料。每当我有疑问时，程老师都会不厌其烦地为我解答，并对我的论文提出宝贵的修改意见。从程老师身上学到了严谨认真的学术态度和对事业的孜孜追求，他对我的关心和教诲将激励我的一生。不管是对于这个课题，还是对于人生的态度，我将奋力拼搏，脚踏实地，超越自我。

其次，感谢物理与电子工程学院的任课老师以及其他学院的任课老师，正是有了他们的教导，我才能在这四年的学习中汲取专业知识并提升自己的能力。

同时，感谢家人对我学业的支持和鼓励，他们是我十多年来求学路上的坚强后盾，是在我面临人生迷茫之际为我排忧解难的前进动力。感谢同学和朋友的陪伴，也感谢一直努力向前的自己。

最后，感谢我的母校——四川师范大学四年来对我的栽培，感谢学校一次又一次为我提供锻炼自己的机会和平台，无论是在学生工作还是在学科竞赛中，我都学到了许许多多的知识以及增强了自己团队合作意识，这都将让我终身受益！