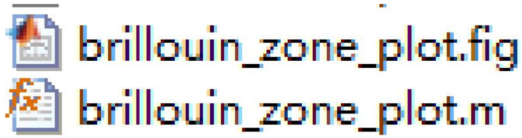
# Brillouin Zone Plot



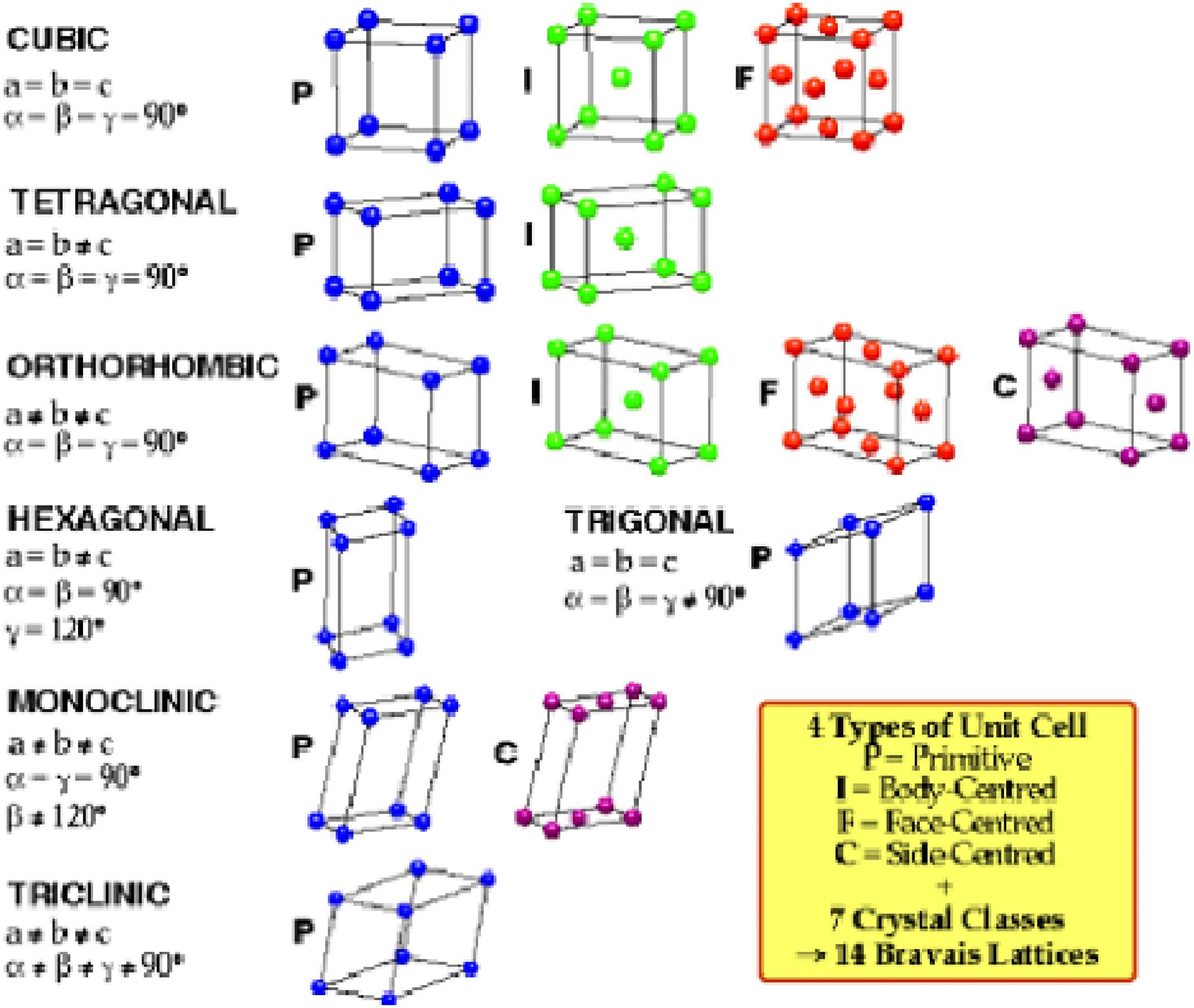

Generate and cut both real space lattice and corresponding
Brillouin zone of 14 basic Bravais lattices

Contributors:
1. Yuan Cao, caoyuan@mit.edu, 01/Oct./2013, generate and cut first BZ
2. Shuzhan Sun, sunshu@mail.ustc.edu.cn, 27/Aug./2015, modification

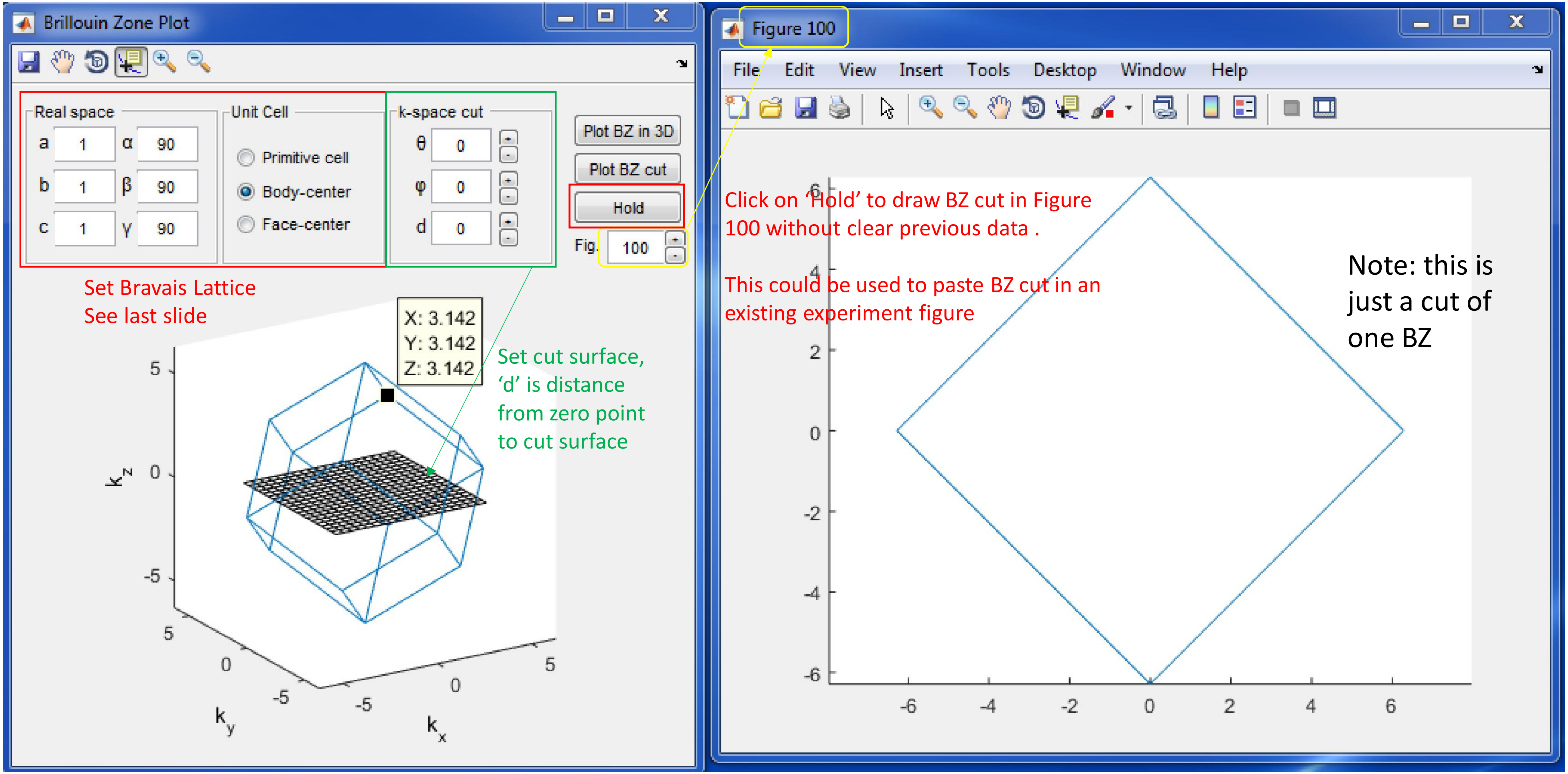
Guidebook by Shuzhan Sun, 27/Aug./2015

14 basic
Bravais lattices

Side center has
not been coded

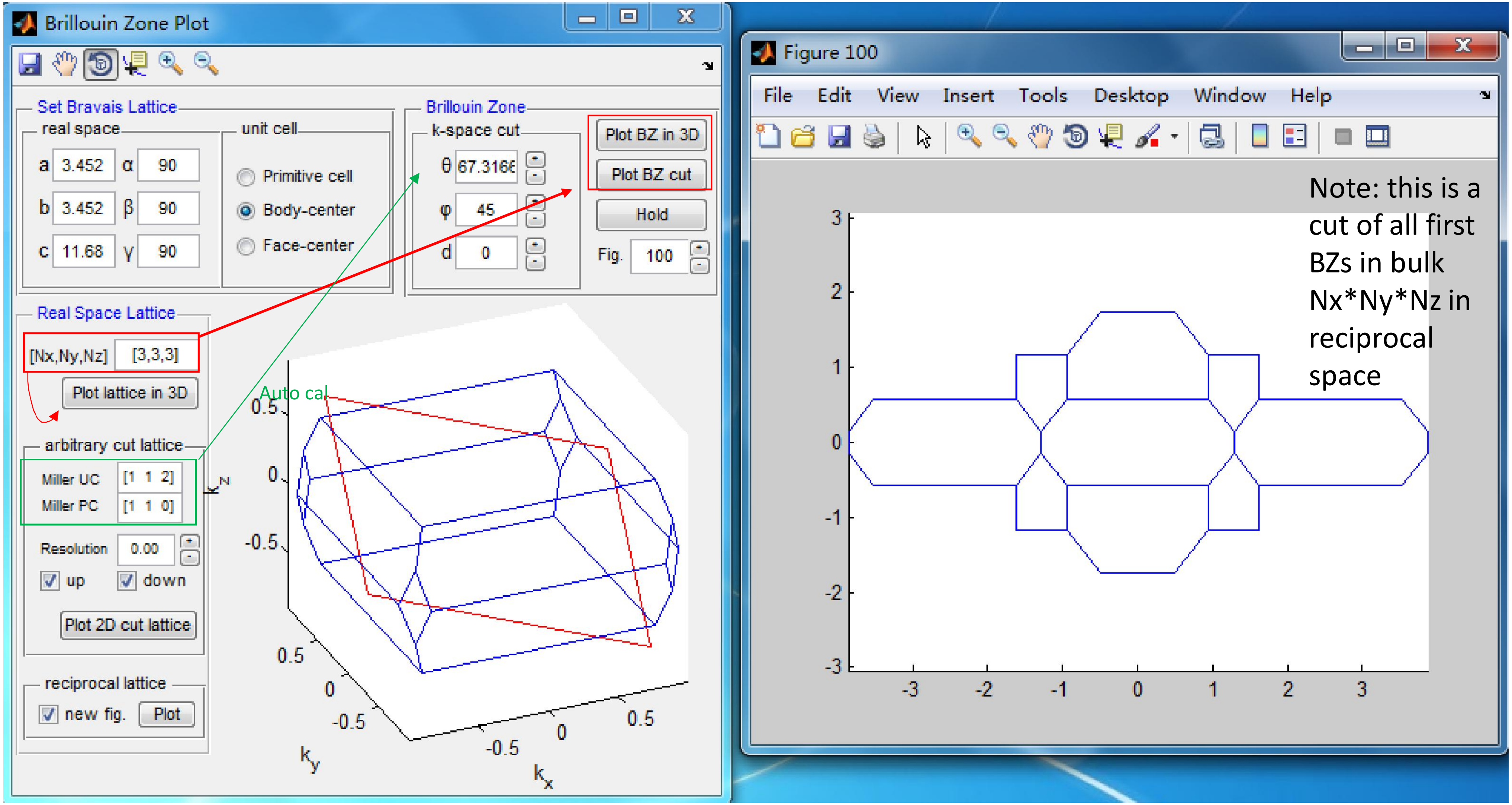


GUI: brillouin_zoon_plot.m (first version) by Yuan Cao

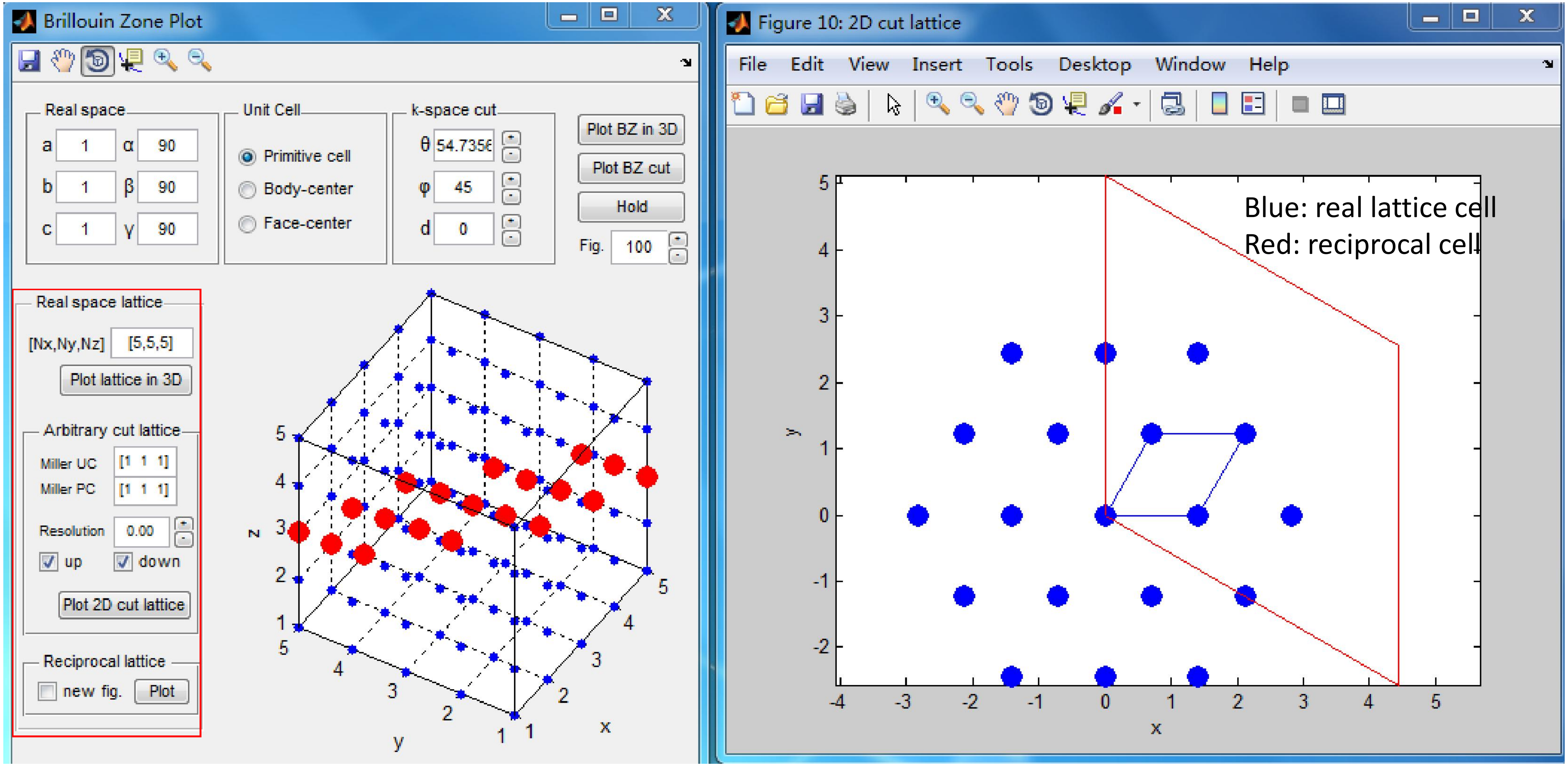


GUI: brillouin_zoon_plot.m (modified version) by Shuzhan Sun

## 1. Generate and cut BZ



2. Generate and cut real space lattice



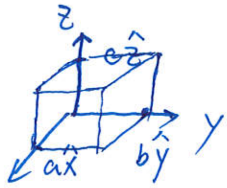

Resolution: for lattice point near the cut plane and the distance < Resolution, this GUI projects the point to the cut surface

Theoretical calculation in this GUI

1) Relation between Miller UC (Unit Cell) and Miller PC (Primitive Cell) (Page 7)

2) Real space cut surface Miller PC and corresponding cut surface of BZ (Page 8-end)

generally, a series of real space surfaces with Miller(h1,h2,h3) only correspond to a vector h*b in reciprocal lattice, but for ARPES, we can do such treatment




$\begin{matrix} a & \alpha \\ b & \beta \\ c & \gamma \end{matrix}$ 确定正空间格矢：$\vec{x}=a\hat{x}$，$\vec{y}=b\hat{y}$，$\vec{z}=c\hat{z}$；
(UC)

UC倒格子为：

$$\begin{cases} \vec{r_x} = 2\pi\dfrac{b\hat{y}\times c\hat{z}}{a\hat{x}\cdot(b\hat{y}\times c\hat{z})} = \dfrac{2\pi}{a}\dfrac{\hat{y}\times\hat{z}}{\hat{x}\cdot(\hat{y}\times\hat{z})} \\ \vec{r_y} = \dfrac{2\pi\cdot c\hat{z}\times a\hat{x}}{a\hat{x}\cdot(b\hat{y}\times c\hat{z})} = \dfrac{2\pi}{b}\dfrac{\hat{z}\times\hat{x}}{\hat{x}\cdot(\hat{y}\times\hat{z})} \\ \vec{r_z} = \cdots\cdots = \dfrac{2\pi}{c}\dfrac{\hat{x}\times\hat{y}}{\hat{x}\cdot(\hat{y}\times\hat{z})} \end{cases}$$

UC中晶面$(u_1,u_2,u_3)$，面的法向量为 $\vec{u}=u_1\vec{r_x}+u_2\vec{r_y}+u_3\vec{r_z}$

$$= \frac{2\pi}{\hat{x}\cdot(\hat{y}\times\hat{z})}\left[\frac{u_1}{a}\hat{y}\times\hat{z}+\frac{u_2}{b}\hat{z}\times\hat{x}+\frac{u_3}{c}\hat{x}\times\hat{y}\right]$$

① UC为 body centered，其PC的基矢：

$$\begin{cases} \vec{a_1} = -\frac{a}{2}\hat{x}+\frac{b}{2}\hat{y}+\frac{c}{2}\hat{z} \\ \vec{a_2} = \frac{a}{2}\hat{x}-\frac{b}{2}\hat{y}+\frac{c}{2}\hat{z} \\ \vec{a_3} = \frac{a}{2}\hat{x}+\frac{b}{2}\hat{y}-\frac{c}{2}\hat{z} \end{cases}$$

UC中$(u_1,u_2,u_3)$面
↓
PC中$(p_1,p_2,p_3)$面。
截距 $\frac{\vec{a_1}}{p_1}$，$\frac{\vec{a_2}}{p_2}$，$\frac{\vec{a_3}}{p_3}$

$$\begin{cases} \left(\frac{\vec{a_1}}{p_1}-\frac{\vec{a_2}}{p_2}\right)\cdot\vec{u}=0 \\ \left(\frac{\vec{a_1}}{p_1}-\frac{\vec{a_3}}{p_3}\right)\cdot\vec{u}=0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} p_1 = u_3+u_2-u_1 \\ p_2 = u_3-u_2+u_1 \\ p_3 = -u_3+u_2+u_1 \end{cases}$$

② UC为 face centered，其PC基矢：

$$\begin{cases} \vec{a_1} = \frac{1}{2}(b\hat{y}+c\hat{z}) \\ \vec{a_2} = \frac{1}{2}(c\hat{z}+a\hat{x}) \\ \vec{a_3} = \frac{1}{2}(a\hat{x}+b\hat{y}) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \left(\frac{\vec{a_1}}{p_1}-\frac{\vec{a_2}}{p_2}\right)\cdot\vec{u}=0 \\ \left(\frac{\vec{a_1}}{p_1}-\frac{\vec{a_3}}{p_3}\right)\cdot\vec{u}=0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} p_1 = u_2+u_3 \\ p_2 = u_1+u_3 \\ p_3 = u_1+u_2 \end{cases}$$

结论：对于14种基本 Bravais Lattice $\left\{\begin{matrix} a & \alpha \\ b & \beta \\ c & \gamma \end{matrix}\right.$ + $\left\{\begin{matrix} \text{primitive} \\ \text{body centered} \\ \text{face centered} \\ \text{side centered} \end{matrix}\right.$ 确定

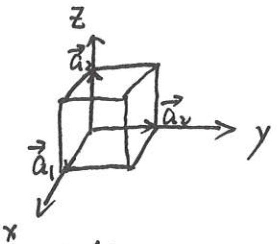
Unit Cell中晶面 $(u_1,u_2,u_3)$ ⟶ Primitive Cell中晶面 $(p_1,p_2,p_3)$

$$= \begin{cases} (u_1,u_2,u_3) & \text{primitive cell} \\ (u_3+u_2-u_1,\ u_3-u_2+u_1,\ -u_3+u_2+u_1) & \text{Body-centered} \\ (u_2+u_3,\ u_1+u_3,\ u_1+u_2) & \text{face-centered} \end{cases}$$

中国科学技术大学
University of Science and Technology of China
地址：中国 安徽 合肥市金寨路96号　邮编：230026
电话：0551－63602184 传真：0551－63631760 Http://www.ustc.edu.cn

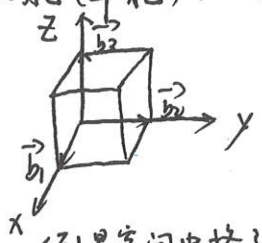
# 实空间与倒易空间的对应关系

这里仅讨论特殊的正交晶系，这里仅看惯用晶胞（单胞），先不考虑原胞和BZ.




实空间单胞.
晶格常数 $a_1, a_2, a_3$
x.y.z方向单位长度一致.

由 $\vec{a_i}\cdot\vec{b_j}=2\pi\delta_{ij}$ $\Longrightarrow$

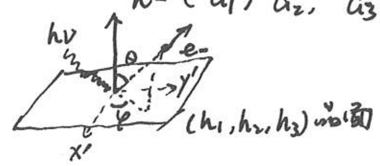



倒易空间中格子.
$b_i=\frac{2\pi}{a_i}$，$\vec{b_i}\parallel\vec{a_i}$　$i=1,2,3$

实空间中 $(h_1,h_2,h_3)$ 晶面，注意是在 $\vec{a_1},\vec{a_2},\vec{a_3}$ 方向上最近原点截面的截距分别为 $\frac{a_1}{h_1},\frac{a_2}{h_2},\frac{a_3}{h_3}$.
故平面族在 xyz 坐标系下的法向量为.
$\vec{h}=(\frac{h_1}{a_1},\frac{h_2}{a_2},\frac{h_3}{a_3})=\frac{h_1}{a_1}\hat{x}+\frac{h_2}{a_2}\hat{y}+\frac{h_3}{a_3}\hat{z}$.

$(h_1,h_2,h_3)$面的ARPES $\longrightarrow$

$\vec{h}=(\frac{h_1}{a_1},\frac{h_2}{a_2},\frac{h_3}{a_3})$ 法向量




由 $\begin{cases}E_B=h\nu-E_{kin}-\Phi\\ K_{\parallel}=\frac{(2m_e E_{kin})^{1/2}}{\hbar}\sin\theta+G\end{cases}$

但是：得到的 $K\sim E$ 关系中 $k_x, k_y$ 是 $(h_1,h_2,h_3)$ 晶面上与晶面平行方向的 $K_{\parallel}$

$\longleftarrow$ 引理1.

引理1：实空间中晶面族 $(h_1,h_2,h_3)$ 与倒易点阵中格矢 $\vec{G}_{h_1h_2h_3}=h_1\vec{b_1}+h_2\vec{b_2}+h_3\vec{b_3}$ 垂直
（证明附后面）

$\Downarrow$

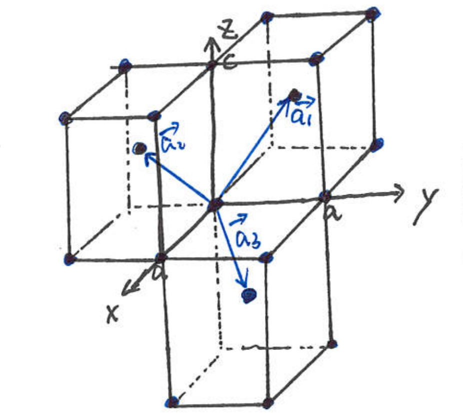
一般性结论：实空间中 $(h_1,h_2,h_3)$ 面测得的ARPES能带数据 $E(k_x,k_y)$
对应倒易空间中：与格矢 $\vec{G}_{h_1h_2h_3}=h_1\vec{b_1}+h_2\vec{b_2}+h_3\vec{b_3}$ 垂直的切面的能带关系

对正交晶系而言，$\vec{G}_{h_1h_2h_3}=2\pi\vec{h}$

$\vec{G}_{h_1h_2h_3}$ 确定一族切面，不同的切点~~对应~~对应观测上 $k_z$ 方向的不同，其中沿 $\vec{G}_{h_1h_2h_3}$ 方向的BZ的Γ点和BZ边界是实验上比较常见的切面。

中国科学技术大学
University of Science and Technology of China
地址：中国 安徽 合肥市金寨路96号 邮编：230026
电话：0551－63602184 传真：0551－63631760 Http://www.ustc.edu.cn

NbAs. (bCT)




$a = 3.45\ \text{Å}$

$c = 11.68\ \text{Å}$

$$\begin{cases}\vec{a}_1 = -\frac{a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y} + \frac{c}{2}\hat{z} \\ \vec{a}_2 = \frac{a}{2}\hat{x} - \frac{a}{2}\hat{y} + \frac{c}{2}\hat{z} \\ \vec{a}_3 = \frac{a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y} - \frac{c}{2}\hat{z}\end{cases} \Rightarrow \begin{cases}\vec{b}_1 = +\frac{2\pi}{a}\hat{y} + \frac{2\pi}{c}\hat{z} \\ \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\hat{x} + \frac{2\pi}{c}\hat{z} \\ \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\hat{x} + \frac{2\pi}{a}\hat{y}\end{cases}$$

原胞基矢　　　　BZ基矢.

1) 惯用晶胞(单胞)中晶面指数$(h_1,h_2,h_3)$对应的面，法向量 $\vec{h} = \frac{h_1}{a}\hat{x} + \frac{h_2}{a}\hat{y} + \frac{h_3}{c}\hat{z}$

换作 $\vec{a}_1,\vec{a}_2,\vec{a}_3$ 为基矢的坐标系下的晶面指数为 $(l_1,l_2,l_3)$.

note: $(l_1.l_2.l_3)$意味着面在 $\vec{a}_1,\vec{a}_2,\vec{a}_3$ 方向的截距为: $\frac{a_1}{l_1}, \frac{a_2}{l_2}, \frac{a_3}{l_3}$, 所以可以:

$$\begin{cases}\left(\frac{\vec{a}_1}{l_1} - \frac{\vec{a}_2}{l_2}\right)\cdot\vec{h} = 0 \\ \left(\frac{\vec{a}_1}{l_1} - \frac{\vec{a}_3}{l_3}\right)\cdot\vec{h} = 0\end{cases} \Rightarrow (h_1,h_2,h_3)\text{到}(l_1,l_2,l_3)\text{关系为:} \begin{cases} l_2 = \frac{h_3-h_2+h_1}{h_3+h_2-h_1}\, l_1 \\ l_3 = \frac{-h_3+h_2+h_1}{h_3+h_2-h_1}\, l_1 \end{cases}$$

$\Rightarrow$ ~~得出~~的$(l_1,l_2,l_3)$全化为整数 不可约分

2) 再由引理1，可知 $\vec{a}_1,\vec{a}_2,\vec{a}_3$ 基矢下的晶面$(l_1,l_2,l_3)$，与相应倒空间中格矢$\vec{G}_l = l_1\vec{b}_1 + l_2\vec{b}_2 + l_3\vec{b}_3$垂直。

延用上页推理 $\Rightarrow$ $(h_1,h_2,h_3)$面ARPES数据，是倒易空间中垂直于$\vec{G}_l$的切面数据，且$\vec{G}_l$充当ARPES测量中的$\vec{k}_z$

3) 进一步，确定$\vec{G}_l$方向BZ的周期性，来找到ARPES测量时设定的$\vec{k}_z$方向的T点和BZ边界Γ点。

对于 $l_1.l_2.l_3$ 为不可约分的整数而言，可以较为简单得出结果。eg.取 $\begin{cases} l_1 = h_3+h_2-h_1 \\ l_2 = h_3-h_2+h_1 \\ l_3 = -h_3+h_2+h_1 \end{cases}$

因为每一个$\vec{b}_i$及其整数倍的格矢均存在一个格点，所以对 $l_1.l_2.l_3$ 不可约分下得到的格矢 $\vec{G}_l = l_1\vec{b}_1 + l_2\vec{b}_2 + l_3\vec{b}_3$ 与$(0,0,0)$连线上并不存在其它格点，所以一个$|\vec{G}_l|$就是$\vec{G}_l$方向的周期。

$-\vec{G}_l$　$0$ (Γ)　T　$\vec{G}_l$ (Γ)　$2\vec{G}_l$

，所以T点在 $\frac{1}{2}\vec{G}_l$ 处，Γ点就在原点和$n\vec{G}_l$处

另注：$|\vec{G}_l| = \frac{2\pi}{d}$，其中$d$为实空间中$(h_1,h_2,h_3)$晶面的面间距。

$\boxed{\text{结论}}$: 对于bCT，其$(h_1,h_2,h_3)$面测得的ARPES数据$E(k_x,k_y)$，对应于理论计算的四维能带中，是垂直于$\vec{G}_l = l_1\vec{b}_1 + l_2\vec{b}_2 + l_3\vec{b}_3$格矢的一簇切面。

而过$\frac{1}{2}\vec{G}_l$点的切面是实验中$\vec{k}_z$方向取T点的结果，过$n\vec{G}_l$点的切面是实验中$\vec{k}_z$方向取BZ边界Γ点的结果。

## 二. 倒易点阵和晶体点阵之间的关系：

倒易点阵是从晶体点阵（以后简称正点阵）中定义出的，可以方便地证明它和正点阵之间有如下关系：

1. 两个点阵的基矢之间：

$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, i = j \\ 0, i \neq j \end{cases}$$

2. 两个点阵的格矢之积是 $2\pi$ 的整数倍：

$$\vec{G}_h \cdot \vec{R}_n = 2\pi m$$

$$\vec{R}_n \cdot \vec{G}_{hkl} = (n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3) \cdot (h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3)$$

$$= 2\pi(n_1 h + n_2 k + n_3 l) = 2\pi m$$ （m 为整数）

3. 两个点阵原胞体积之间的关系是：

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

习题1.13

4. 正点阵晶面族 $(h_1,h_2,h_3)$与倒易点阵格矢 $\vec{G}_{h_1h_2h_3}$相互垂直，

$\vec{G}_{h_1h_2h_3} = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3$ 且有：

$$d_{h_1h_2h_3} = \frac{2\pi}{\left|\vec{G}_{h_1h_2h_3}\right|}$$

证明：先证明倒格矢 $\vec{G}_{h_1,h_2,h_3} = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3$

与正格子的晶面系 $(h_1h_2h_3)$ 正交。

如图所示，晶面系 $(h_1h_2h_3)$ 中最靠近原点的晶面（ABC）

在正格子基矢 $\vec{a}_1,\vec{a}_2,\vec{a}_3$ 的截距分别为：$\frac{\vec{a}_1}{h_1},\frac{\vec{a}_2}{h_2},\frac{\vec{a}_3}{h_3}$

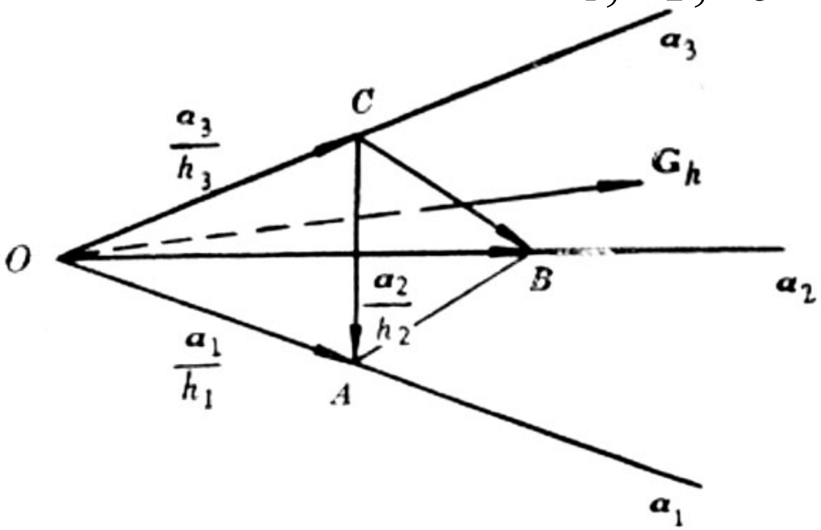



图1-18 晶面与倒易点阵位矢关系示意图

于是：

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

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

$$\because \overrightarrow{G}_{h_1h_2h_3}\cdot\overrightarrow{CA}=$$

$$(h_1\vec{b}_1+h_2\vec{b}_2+h_3\vec{b}_3)\cdot(\frac{\vec{a}_1}{h_1}-\frac{\vec{a}_3}{h_3})$$

$$=2\pi-2\pi=0$$

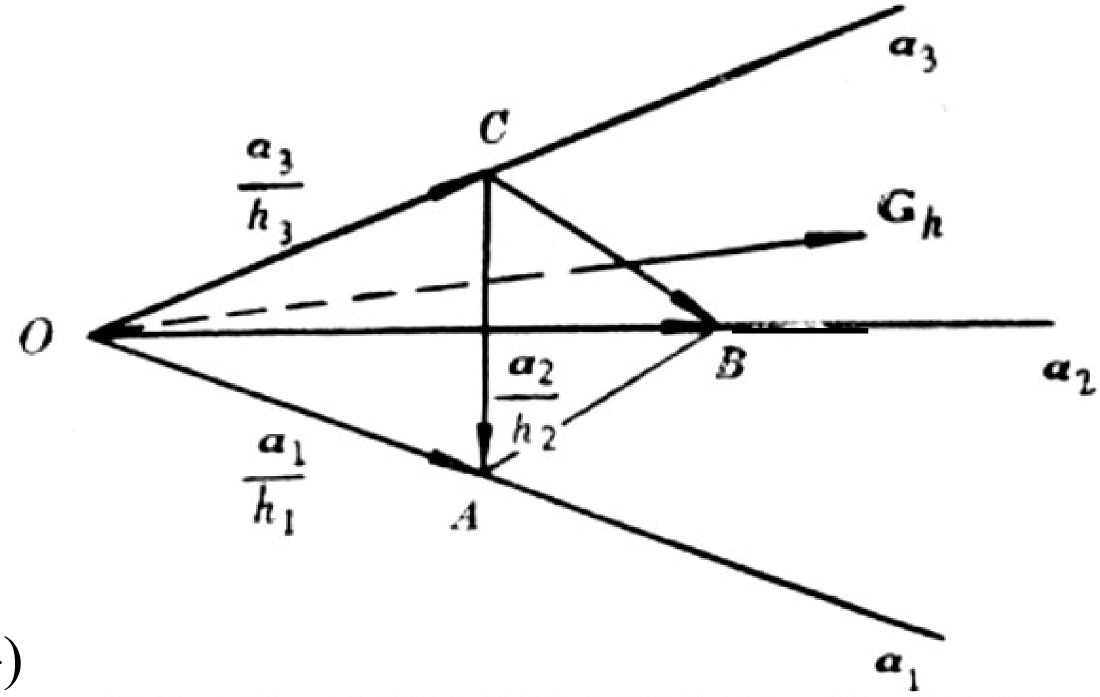



图1-18 晶面与倒易点阵位矢关系示意图

同理 $\overrightarrow{G}_{h_1h_2h_3}\cdot\overrightarrow{CB}=0$ 而且 $\overrightarrow{CA},\overrightarrow{CB}$ 都在（ABC)面上，

所以 $\overrightarrow{G}_{h_1h_2h_3}$ 与晶面系（$h_1h_2h_3$）正交。

晶面系的面间距就是原点到ABC面的距离，由于 $\vec{G}_{h_1h_2h_3} \perp (ABC)$

$$d_{h_1h_2h_3} = \overline{OA} \cdot \frac{\vec{G}_{h_1h_2h_3}}{\left|\vec{G}_{h_1h_2h_3}\right|} = \frac{\vec{a}_1}{h_1} \cdot \frac{(h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3)}{\left|\vec{G}_{h_1h_2h_3}\right|} = \frac{2\pi}{\left|\vec{G}_{h_1h_2h_3}\right|}$$

由此我们得出结论：**倒易点阵的一个基矢是和正点阵晶格中的一族晶面相对应的，它的方向是该族晶面的法线方向，而它的大小是该族晶面面间距倒数的2π倍**。又因为倒易点阵基矢对应一个阵点，因而可以说：**晶体点阵中的晶面取向和晶面面间距这 2 个参量在倒易点阵里只用一个点阵矢量（或说阵点）就能综合地表达出来。**