

1.4 倒易点阵和布里渊区 (Reciprocal lattice; Brillouin zones)

- 一. 起源与定义
- 二. 倒易点阵和晶体点阵的关系
- 三. 倒易点阵实例
- 四. 布里渊区
- 五. 玻恩-卡门条件

固体物理的研究对象将主要针对具有
平移对称性的晶体
以及
近似完整的晶体

倒易空间与布里渊区

有人（Hall）比喻：
倒易空间和布里渊区是固体物理的
Maxwell方程

倒易点阵与布里渊区 (reciprocal lattice and Brillouin zone)

自然界波的种类？

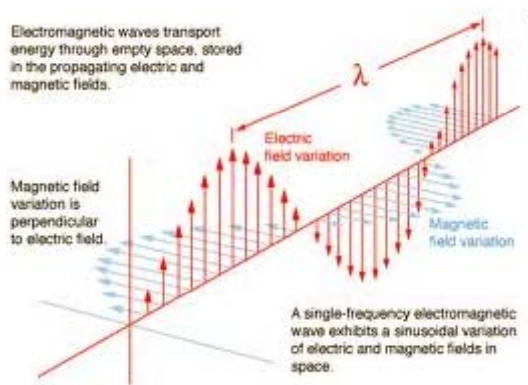
用什么理论来描述？

机械波 mechanical waves



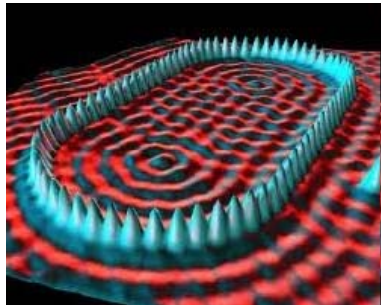
用经典力学及分析力学来描述

电磁波 electromagnetic waves



用Maxwell方程来描述

物质波 matter wave



由L.V. de Broglie提出，由Schrodinger方程来描述

$$E = h \nu$$

固体物理的第一个范式，也是我们这学期课程的主要内容：
周期结构中波的传播问题

机械波：如原子振动波－固体的热性质和声学性质

电磁波：例如晶体衍射学的X射线，对理解固体结构很有帮助

物质波：电子的物质波在固体电子理论中是一个中心概念；
中子的物质波可以用来分析声子能谱，磁振子能谱等准粒子能谱。

该理论体系研究的主要成果：

振动波在周期势场中的传播——晶格动力学；

X射线在周期势场中的传播——X射线衍射学；

电子在周期势场中的传播——能带论；

倒易空间 — 实空间的傅立叶变换，相当于坐标空间与波矢空间的变换，充分利用了晶格的平移对称性，使得波的传播问题得到简化

量子力学中坐标空间与动量空间的变换？

平面波 (plane wave) 的基本数学形式？

Fourier 变换:

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \varphi(\vec{k}) \exp[i\vec{k} \bullet \vec{r}] d^3\vec{k}$$

逆变换:

$$\varphi(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi(\vec{r}) \exp[-i\vec{k} \bullet \vec{r}] d^3\vec{r}$$

Fourier变换的本质: 物质波的波函数可以展开成一系列平面波的叠加

$$\exp[-i\vec{k} \bullet \vec{r}]$$

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \varphi(\vec{k}) \exp[i\vec{k} \bullet \vec{r}] d^3\vec{k}$$

让我们想象一个三维波矢空间，当然，并不是所有的 \mathbf{k} 都满足晶体的平移对称性：

$$\psi(\vec{r} + \vec{R}) = \psi(\vec{r})$$

\mathbf{R} 为晶格基矢

然而有一些特殊的 \mathbf{K} 是满足的：

$$e^{i\vec{K} \bullet (\vec{r} + \vec{R})} = e^{i\vec{K} \bullet (\vec{r})}$$

$$e^{i\vec{K} \bullet \vec{R}} = 1$$

这些 \mathbf{K} 点在波矢空间内构成的点阵被称为倒易点阵。

倒易点阵、倒格子 (Reciprocal Lattice)

$$\vec{K} \bullet \vec{R} = 2\pi m \quad m \text{是整数}$$

将晶体中的物质波展开成一系列平面波，在动量空间内这些满足周期性的平面波的动量也形成一系列点阵，即为倒易点阵，或倒格子，相应晶体的实空间点阵被称为正点阵。

在固体物理中，习惯用 \vec{G} 代表倒易空间的格矢

$$\vec{G} \bullet \vec{R} = 2\pi m$$

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad \text{正格矢}$$

$$\vec{G} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3 \quad \text{倒格矢}$$

$$\vec{G} \bullet \vec{R} = 2\pi m$$

↓

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

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

$$\vec{G} \bullet \vec{R} = 2\pi(n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3) = 2\pi m$$

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

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

三维周期性体系:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$

?

倒易点阵的原胞体积:

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

请作为作业习题来证明

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

$$\begin{aligned}b_1 &= 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\Omega} \\ b_2 &= 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\Omega} \\ b_3 &= 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\Omega}\end{aligned}$$

正格子中的大单胞，对应倒格子中的小单胞

正点阵和倒易点阵是互易的： 由正点阵 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 给出倒易点阵 $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ 现假定 $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ 为正点阵，则其倒易点阵根据定义为：

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

利用三重矢积公式： $\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = \vec{B}(\vec{A} \cdot \vec{C}) - \vec{C}(\vec{A} \cdot \vec{B})$

可以得到： $\vec{b}_2 \times \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \times \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) = \frac{(2\pi)^2}{\Omega} \vec{a}_1$

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

所以： $\vec{c}_1 = \frac{2\pi}{\Omega^*} \frac{(2\pi)^2}{\Omega} \vec{a}_1 = \vec{a}_1$

同样可以证明： $\vec{c}_2 = \vec{a}_2, \vec{c}_3 = \vec{a}_3,$

倒易空间

实空间的任意波函数都可以通过傅立叶变换变换为倒易空间中一组平面波的展开：

$$F(\vec{k}) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d^3r.$$

倒格子是倒易空间中一组具有周期性排列的点，倒易空间与量子力学中的动量空间具有同样的物理意义，由于晶体的周期性条件使得在动量空间中形成了这样一系列具有平移对称性的倒格子。

正格子的量纲是长度 l ，称作坐标空间，倒格子的量纲是长度的倒数 l^{-1} ，称作波矢空间。例如：正点阵取 cm ，倒易点阵是 cm^{-1} ，下面我们将看到：

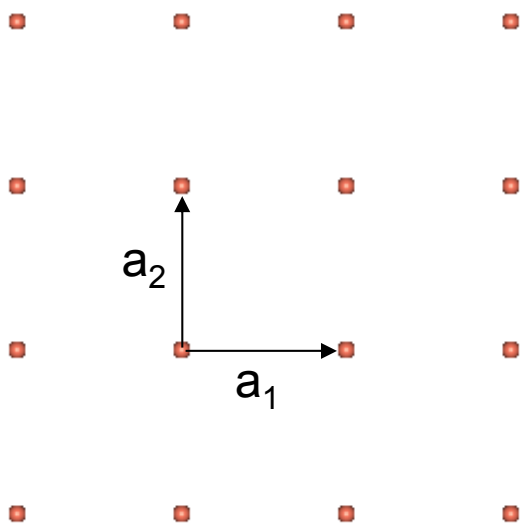
晶体的显微图像是真实晶体结构在坐标空间的映像。
晶体的衍射图像则是晶体倒易点阵的映像

倒易空间实例

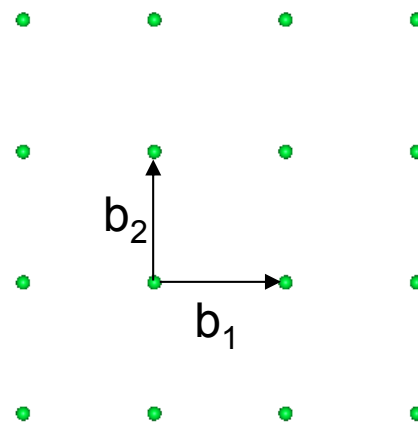
$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$$
$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, i = j \\ 0, i \neq j \end{cases}$$

二维倒易格子： \vec{b}_1 与 \vec{a}_2 垂直， \vec{b}_2 与 \vec{a}_1 垂直

正方格子

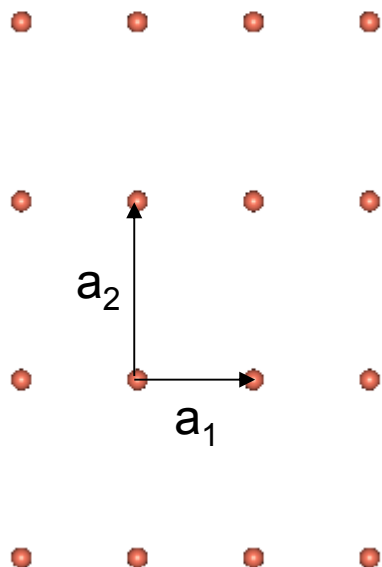


正格子

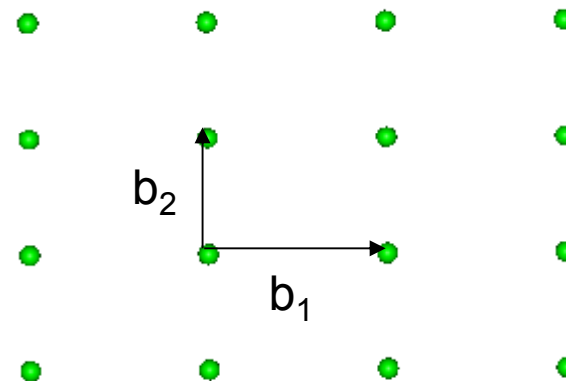


倒格子

长方格子



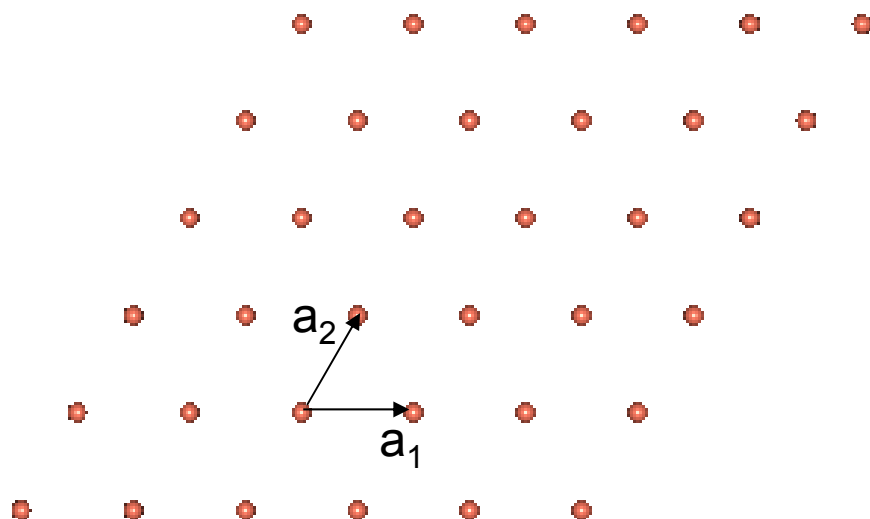
正格子



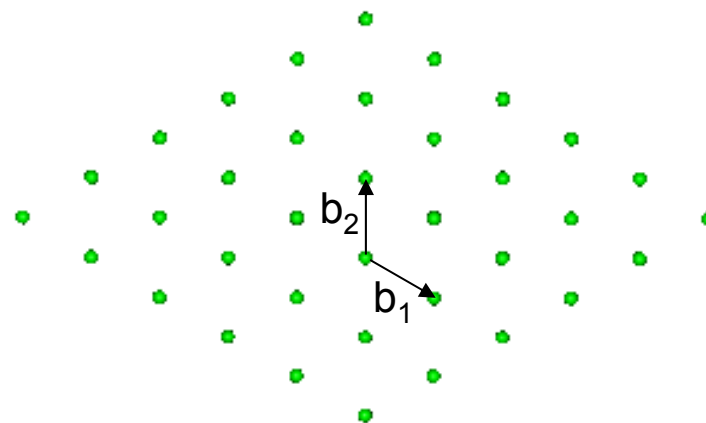
倒格子

正格子中的长基矢对应倒格子中的短基矢

六角格子



正格子



倒格子

倒格子亦为六角格子（旋转了30度）


三维倒易格子：

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$


$$\vec{b}_1 \perp \vec{a}_2, \vec{a}_3, \vec{b}_2 \perp \vec{a}_3, \vec{a}_1, \\ \vec{b}_3 \perp \vec{a}_1, \vec{a}_2,$$

简立方点阵:  倒易点阵仍是简立方点阵:

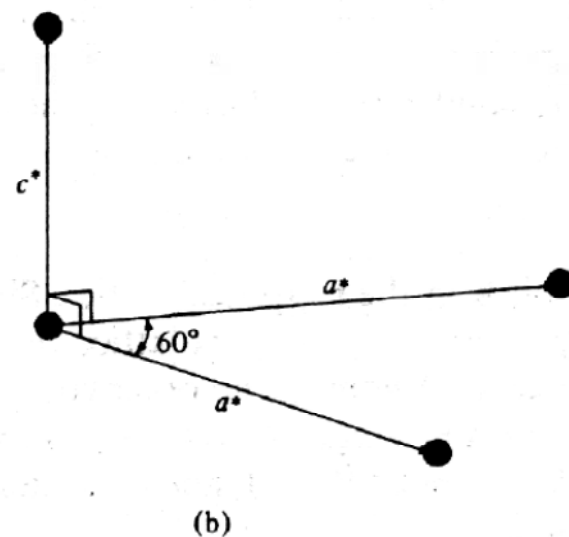
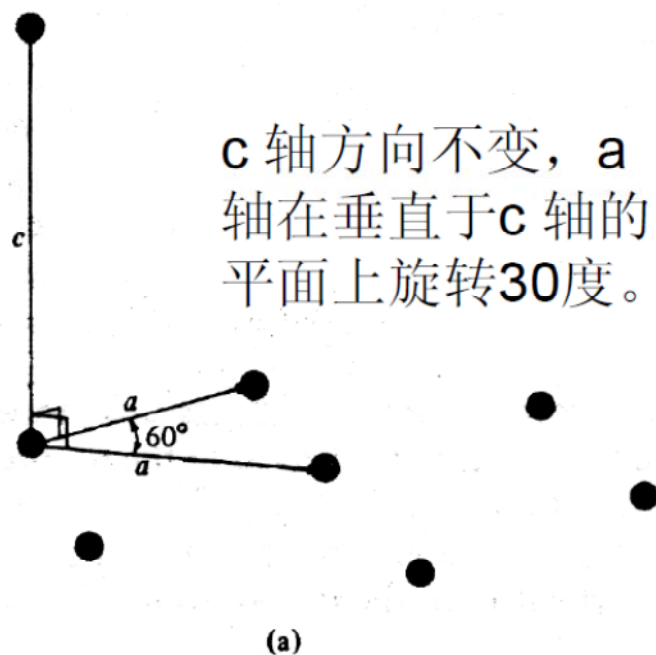
$$a_1 = a\vec{i}, a_2 = a\vec{j}, a_3 = a\vec{k}$$

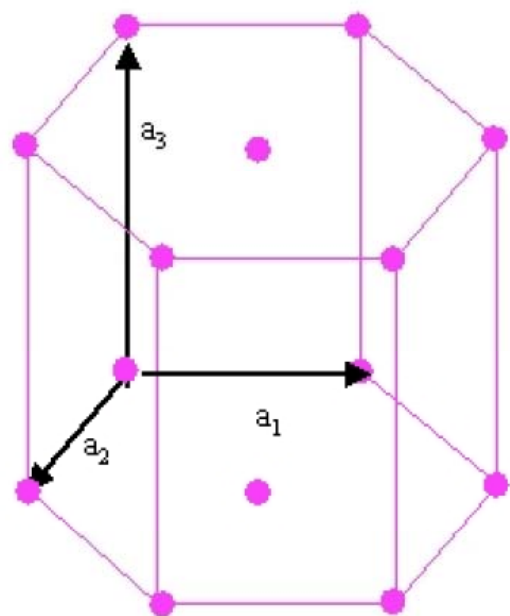
$$b_1 = \frac{2\pi}{a}\vec{i}, b_2 = \frac{2\pi}{a}\vec{j}, b_3 = \frac{2\pi}{a}\vec{k},$$

所以倒格子也是布拉菲格子。

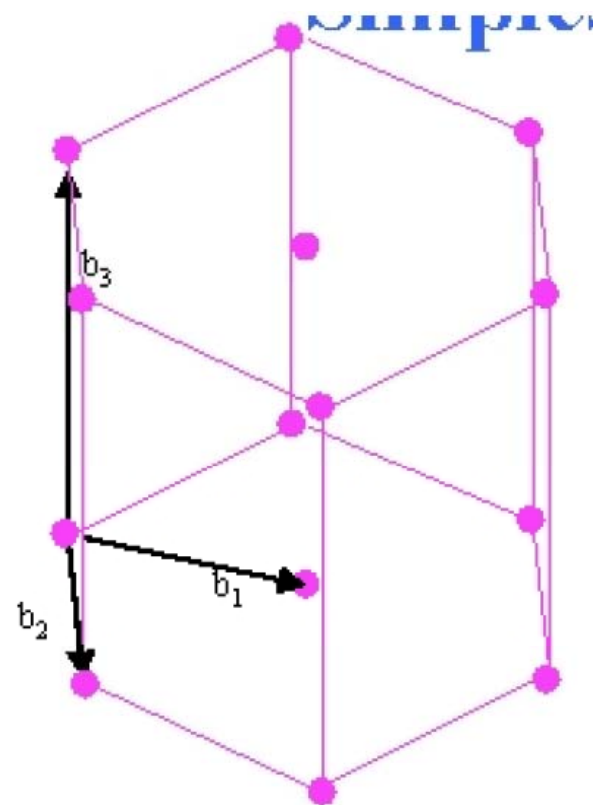
六角点阵:  六角点阵的倒易点阵:

见Ashcroft p88





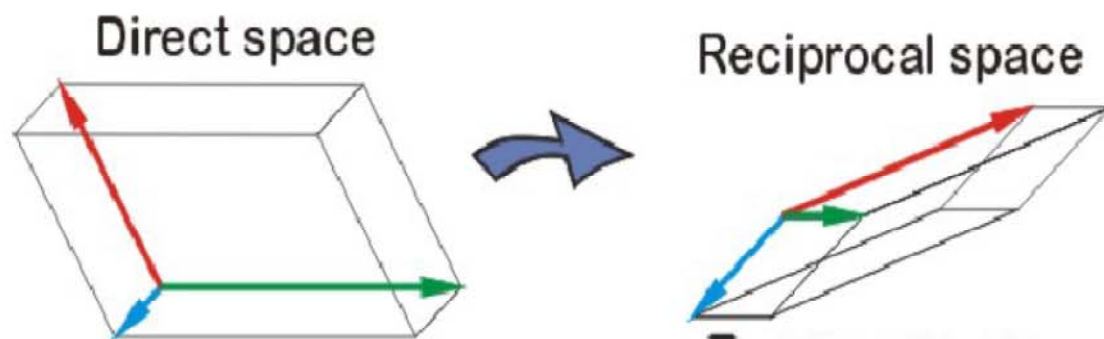
Hexagonal Bravais Lattice



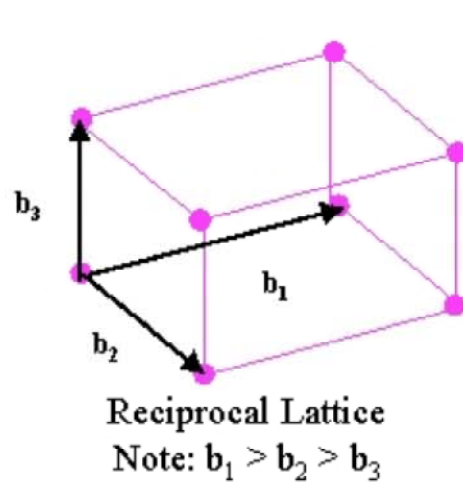
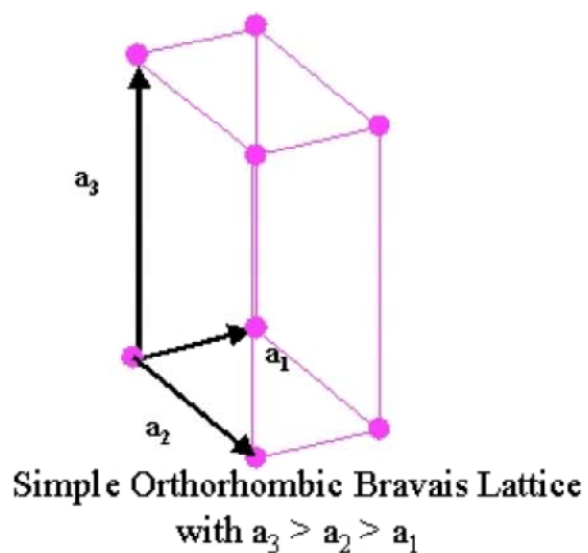
Reciprocal Lattice

正格子空间六方结构，在倒格子空间亦为六方结构。不过其基矢尺寸关系发生变化，基矢方向也转了一个角度。

三维例子:

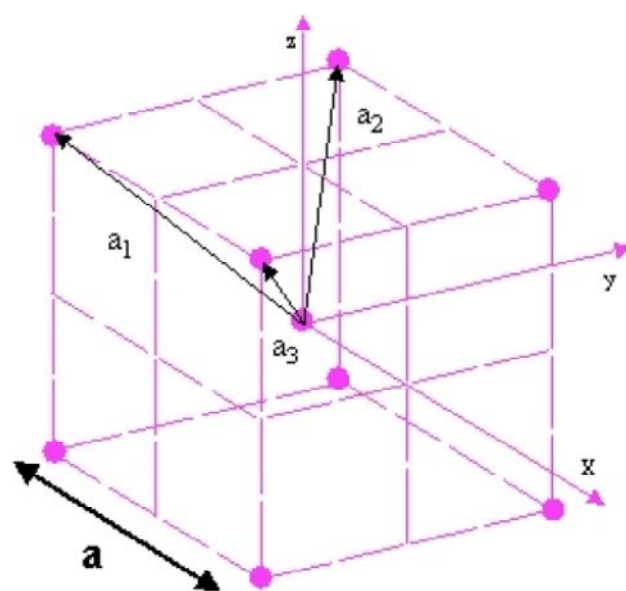


正点阵为简单点阵，倒易点阵也是简单点阵。

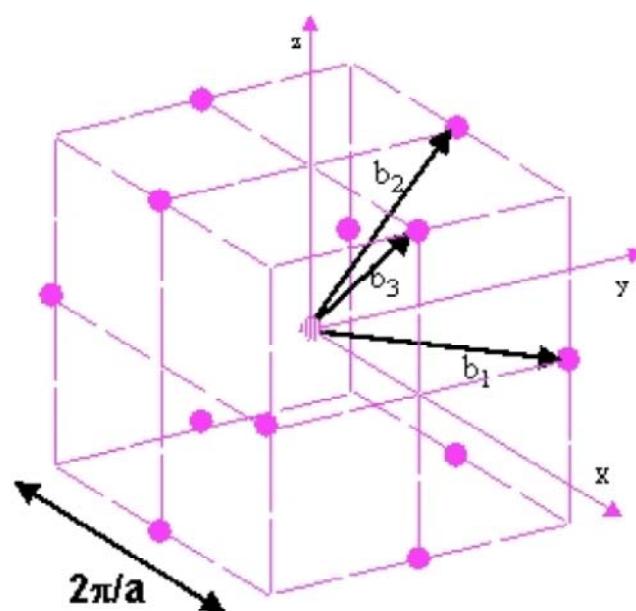


正格子空间中长的基矢 \mathbf{a}_3 对应于倒格子空间短的基矢 \mathbf{b}_3 ，反之亦然。推广，正格子空间长的线条对应于倒格子空间短的线条。

正点阵为有心点阵时，倒易点阵也是有心点阵，
但有心类型可能不同，例如：**体心立方点阵的倒格子
为面心立方点阵。**

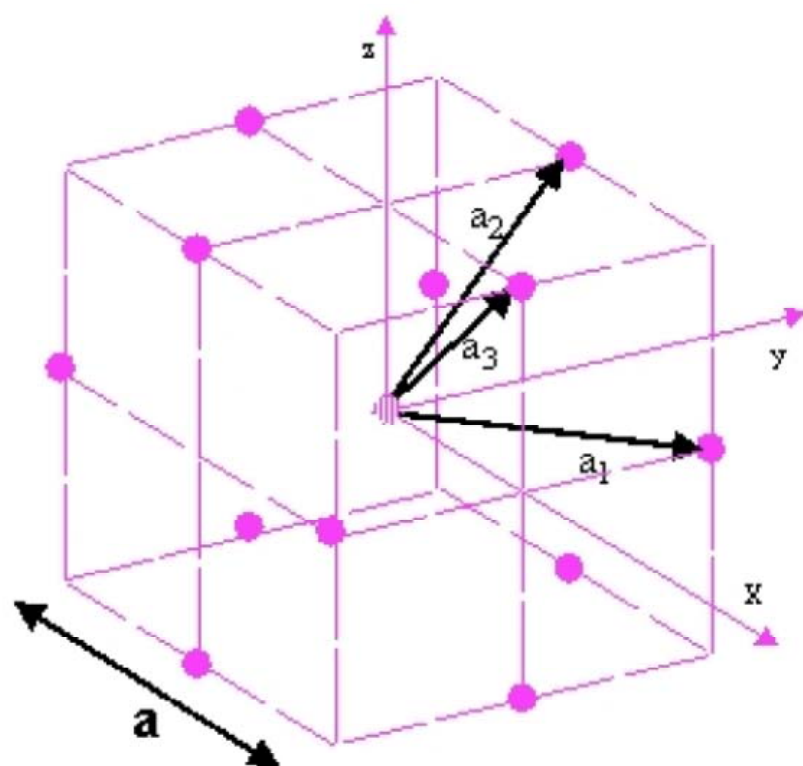


Primitive vectors and the
conventional cell of bcc lattice

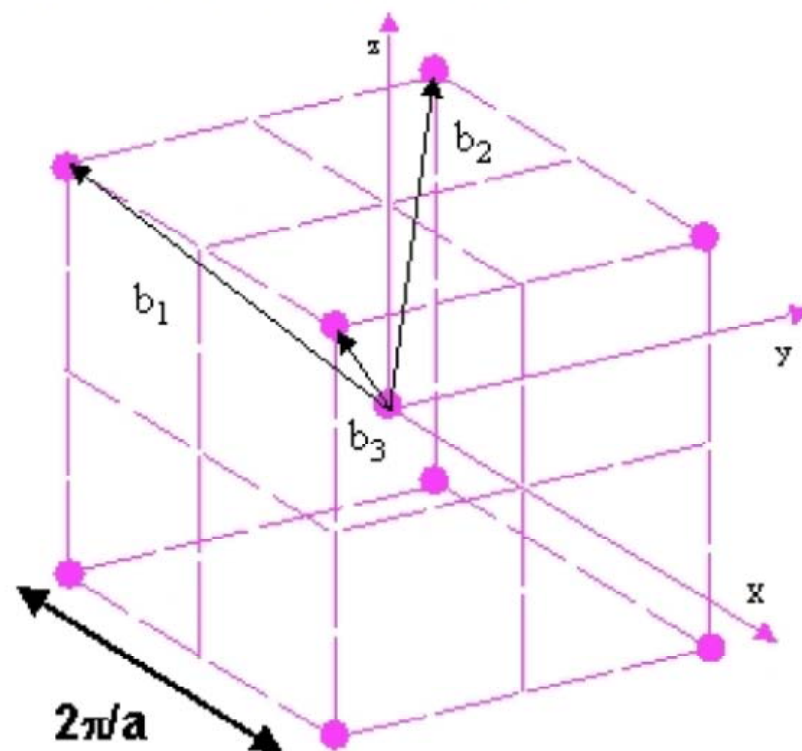


Reciprocal lattice is
Face Centered Cubic

而面心立方点阵的倒格子为体心立方点阵。



Primitive vectors and the
conventional cell of fcc lattice



Reciprocal lattice is
Body Centered Cubic

请作为作业进行证明！

每个倒格矢与一组正格晶面垂直

$K_h = h_1 b_1 + h_2 b_2 + h_3 b_3$ 与晶面 (h, k, l) 垂直

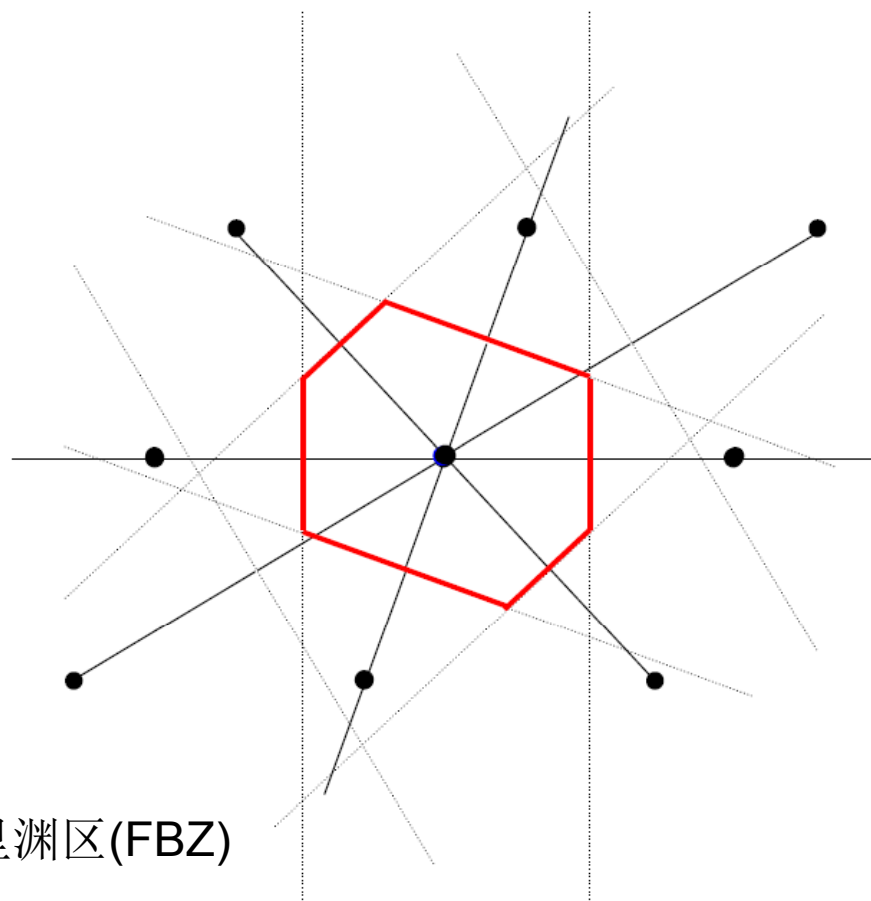
K_h 为法线方向

晶面间距:
$$d = \frac{2\pi}{|\vec{K}_h|}$$

倒格子中的原胞？

布里渊区 (Brillouin zone)

第一布里渊区的确定：取法和正点阵中Wigner-Seitz原胞取法相同。它是倒易点阵的原胞。



第一布里渊区(FBZ)

Léon Nicolas Brillouin (August 7, 1889 – October 4, 1969) was a French physicist. He made contributions to quantum mechanics, radio wave propagation in the atmosphere, solid state physics, and information theory.

[Wentzel–Kramers–Brillouin approximation](#), also known as the *WKB method* （电子在外场中的运动问题）

1930年，他在研究电子在晶体中的运动时，发现电子几率波矢 \mathbf{k} 在越过倒易空间格矢 \mathbf{G} 的中垂面时，电子本证能量 $E(\mathbf{k})$ 有个能隙。为了更好地描述能带，他提出以同一原点出发的倒格矢 \mathbf{G} 的中垂面为准，将倒易空间分割成不同的区域(zone)，称为Brillouin zone.



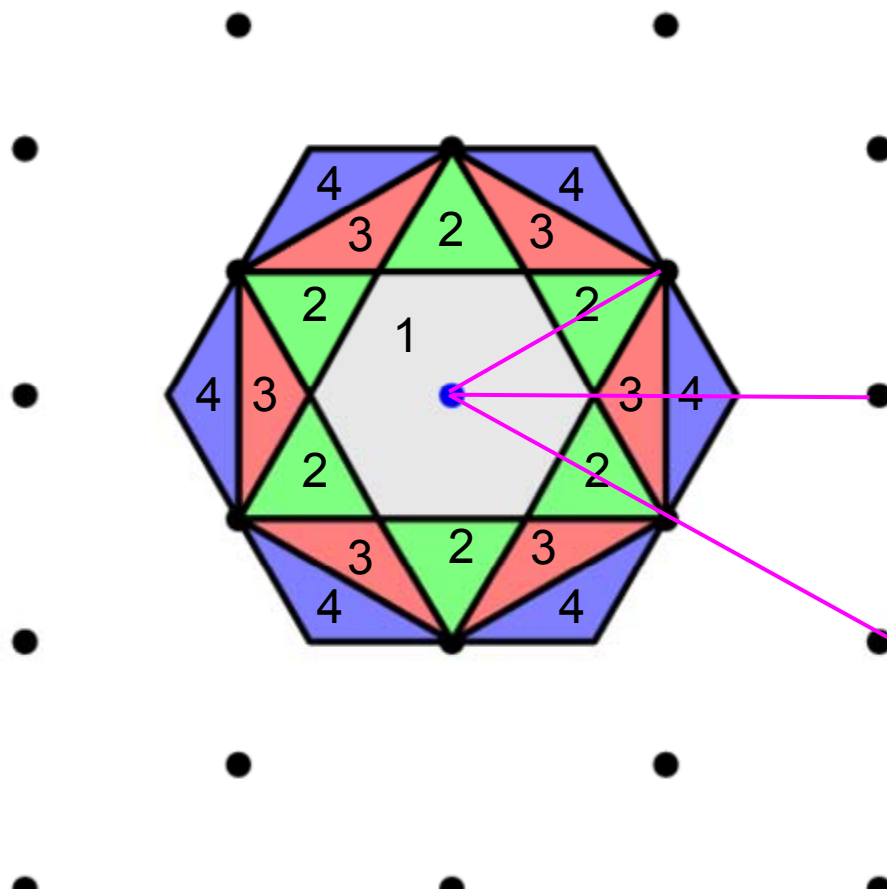
Léon Nicolas Brillouin
(1889–1969)

布里渊区定义：在倒易点阵中，以某一格点为坐标原点，做**所有**倒格矢的垂直平分面，倒易空间被这些平面分成许多包围原点的多面体区域，这些区域称作布里渊区，其中最靠近原点的平面所围成的区域称作第一布里渊区，第一布里渊区界面与次远垂直平分面所围成的区域称作第二布里渊区，依次类推。

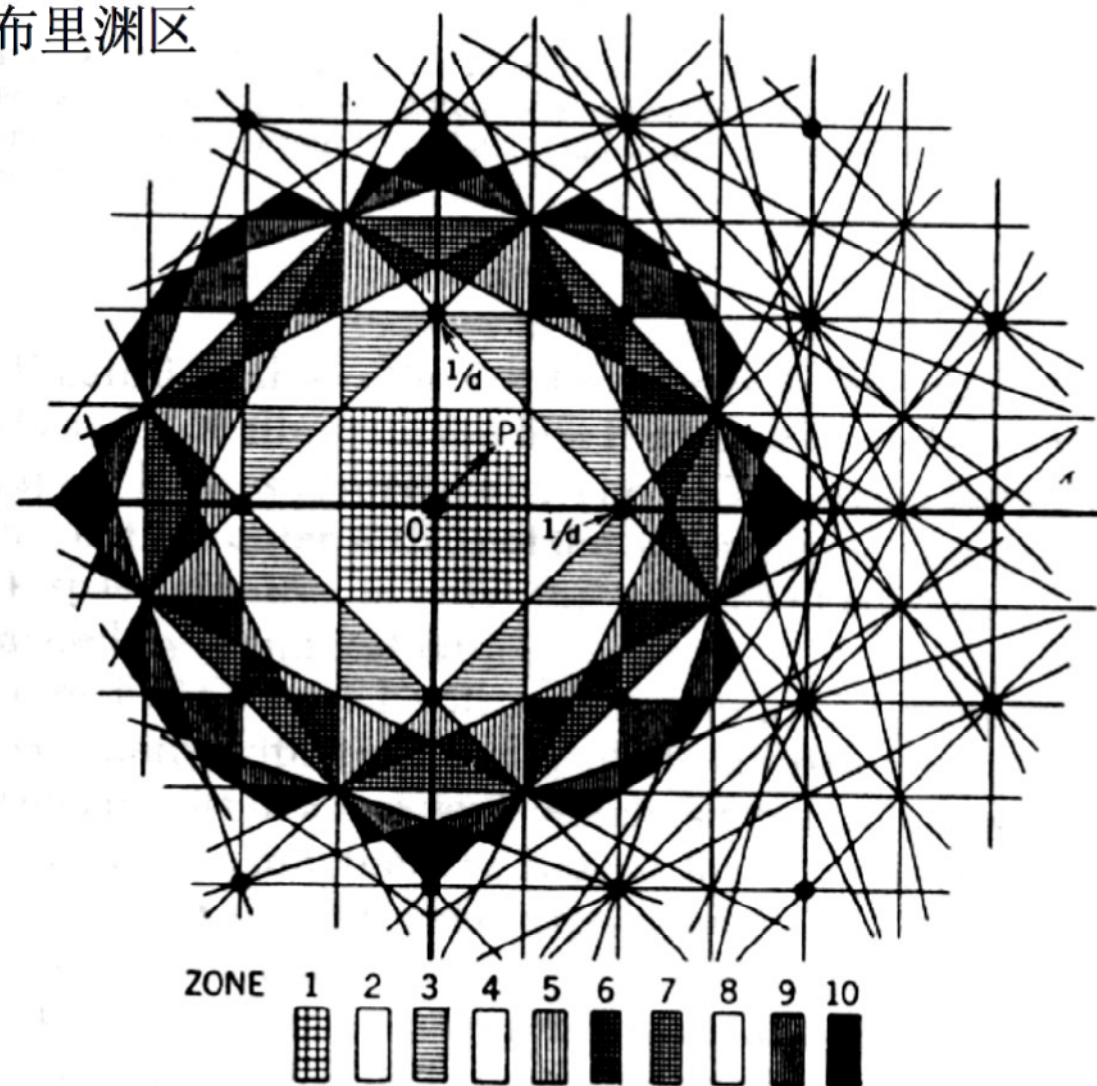
由于布里渊区界面是某倒格矢 \vec{G} 的垂直平分面，如果用 \vec{k} 表示从原点出发、端点落在布里渊区界面上的倒易空间矢量，它必然满足方程：
$$\vec{k} \cdot \vec{G} = \frac{1}{2} G^2$$

该方程称作布里渊区的界面方程

二维六角晶系的布里渊区



正方点阵布里渊区



第二到第九Brillouin区约化到第一布里渊区

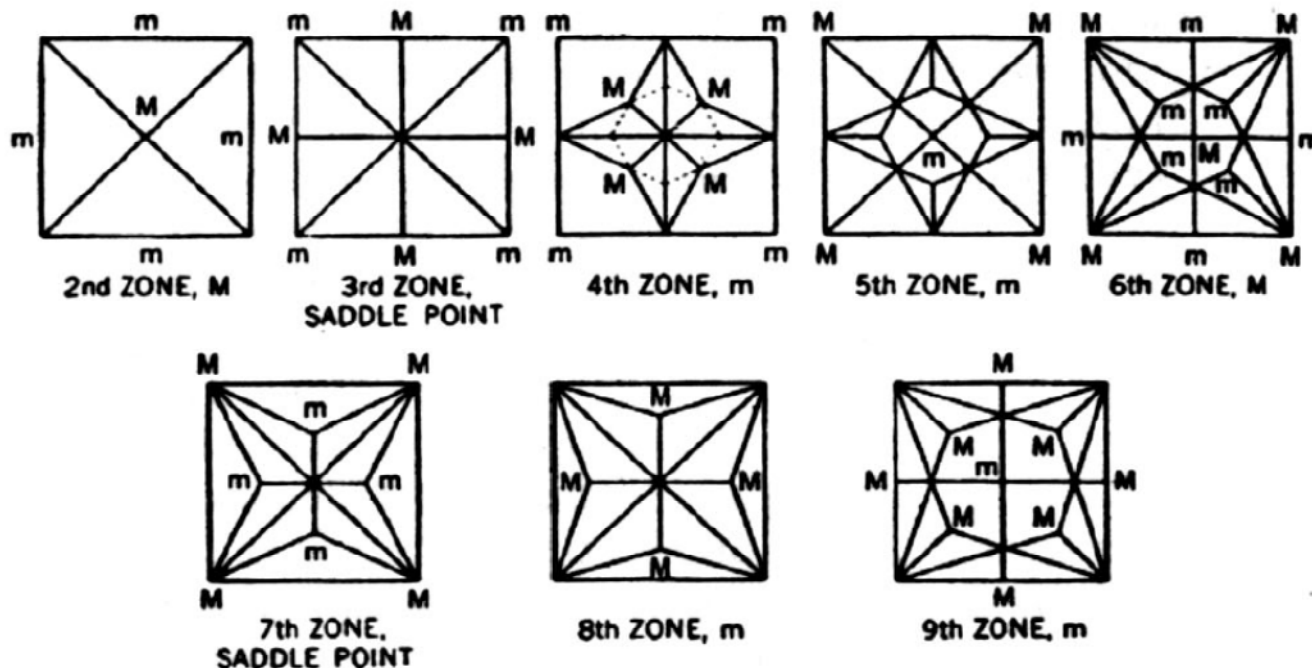


Figure 3-31 Reduction into the first zone for the second through ninth zones of the two-dimensional square lattice. From L. Brillouin, *Wave Propagation in Periodic Structures* (Dover, 2nd edition, 1953).

各布里渊区的形状，不管被分成多少部分，对原点都是对称的

为什么布里渊区可以约化？

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}} = e^{i(\vec{k}'+\vec{G})\cdot\vec{a}}$$

$$\left|\vec{G}_n\right| = n \frac{2\pi}{a}$$

可以认为倒格矢 \mathbf{G} 是波矢空间的单位矢量。

见黄昆书图4-24
(p194)

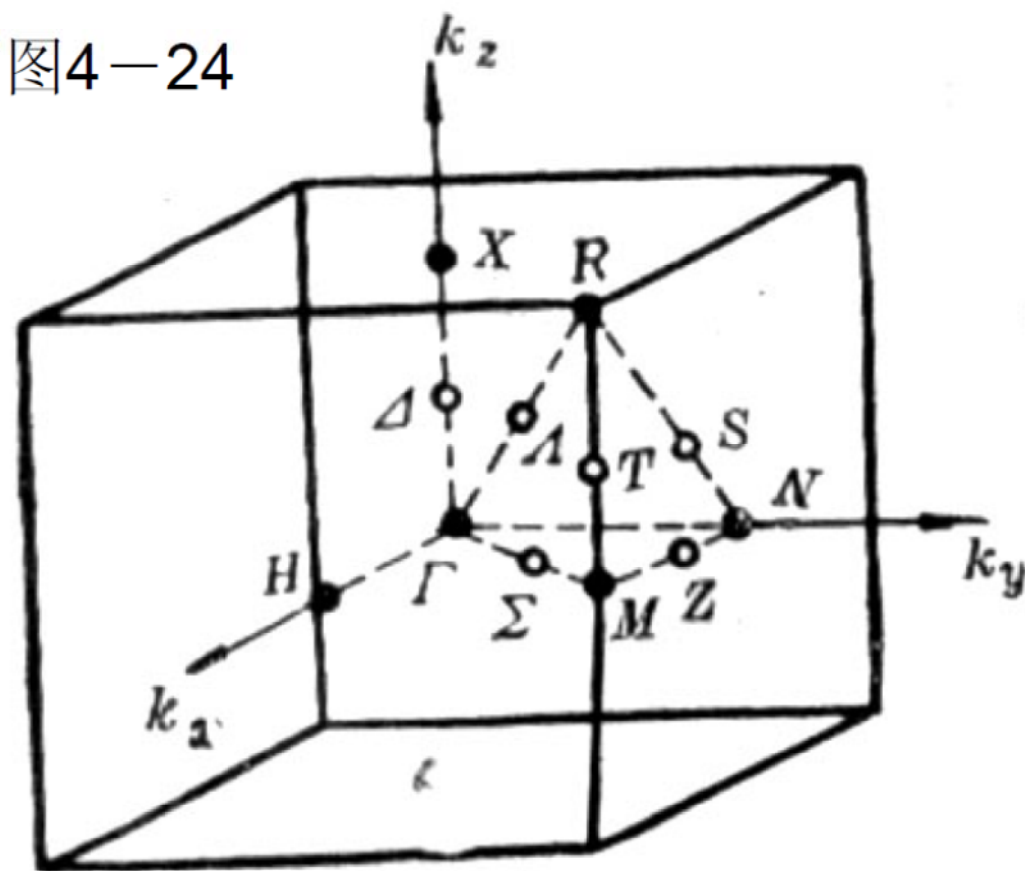
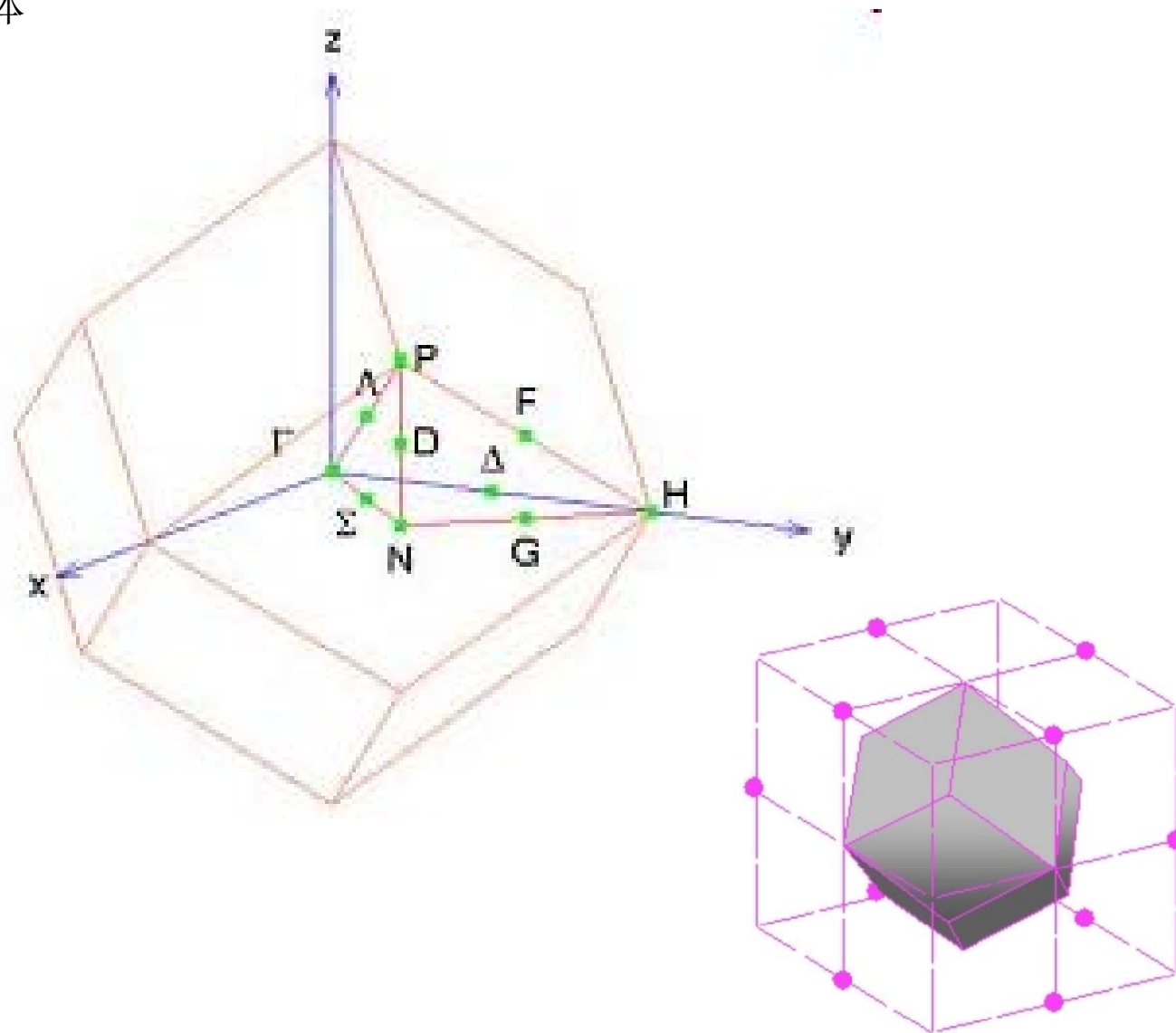


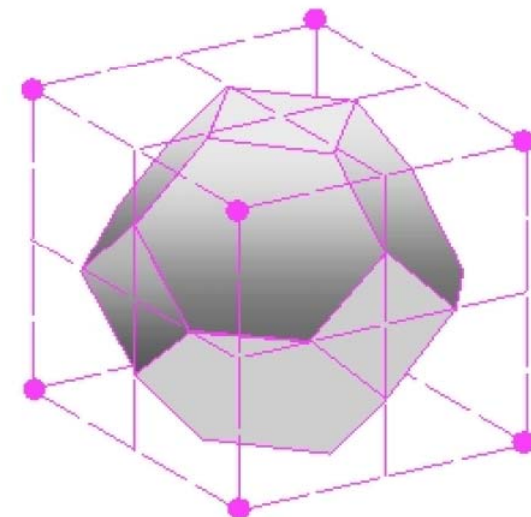
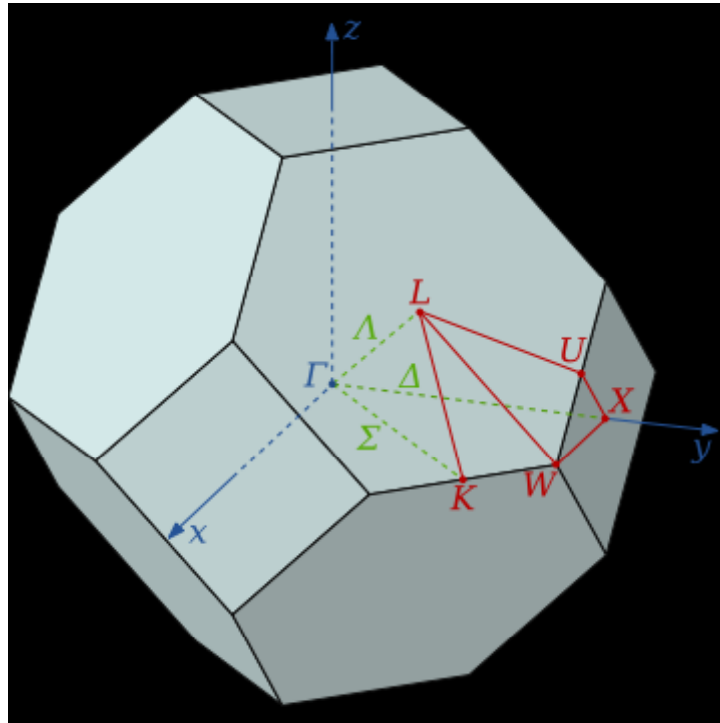
图6-9 简单立方布里渊区

Brillouin zone of bcc lattice
正菱形12面体



Wigner-Seitz primitive cell of fcc

Brillouin zone of fcc lattice
截角八面体



Wigner-Seitz primitive cell of bcc

Born-Karman condition 玻恩-卡门条件

固体中的波具有晶体总尺度的周期边界条件。

假设真实空间中整个晶体具有平行六面体 ($L_1\mathbf{a}_1, L_2\mathbf{a}_2, L_3\mathbf{a}_3$) 的形状, 其中 L_1, L_2, L_3 是沿三个波矢 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 方向的晶胞数。这样总晶胞数 $N_L = L_1 \times L_2 \times L_3$, 假如固体中某个准粒子波函数满足玻恩-卡门条件:

$$\Psi(r) = \Psi(r + L_j \mathbf{a}_j) (j = 1, 2, 3)$$

$$\exp(ik \bullet L_j \mathbf{a}_j) = 1$$

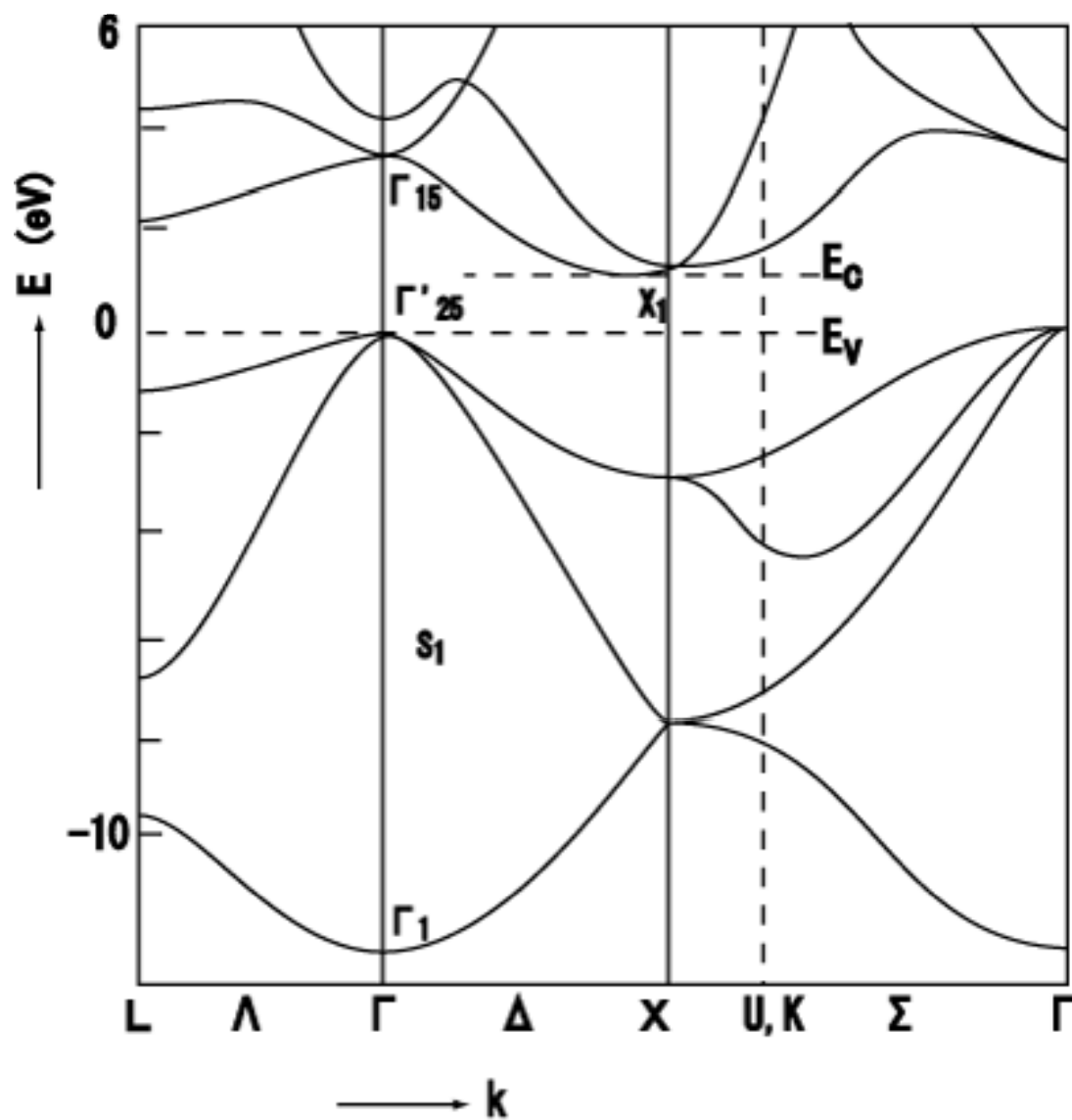
$$\mathbf{k} = \frac{l_1}{L_1} \mathbf{b}_1 + \frac{l_2}{L_2} \mathbf{b}_2 + \frac{l_3}{L_3} \mathbf{b}_3$$

其中 l_1, l_2, l_3 是任意整数。

在有限大晶体内, 倒易空间中波矢取值是分立的, 如果 N_L 为接近无穷大, 那么可以近似看成是连续的。 N_L 经常是与阿伏加德罗常数相同的量级。

作为第一布里渊区, \mathbf{k} 在三个方向的取值在 $(-\mathbf{b}_i/2, \mathbf{b}_i/2)$ 之间, 波矢取值总数 = $N_L = L_1 \times L_2 \times L_3$, 这是一个重要的结论。在原子振动谱的讨论中, 它对应于声子的数目, 在能带论中, 对应着电子量子态数目的2倍。

第一布里渊区是常用的能谱表达空间



$$|\vec{G}_n| = n \frac{2\pi}{a}$$

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}} = e^{i(\vec{k}' + \vec{G}) \cdot \vec{a}}$$

倒易点阵和**14种**晶体点阵是一一对应的，因此也**只有14种类型的倒易点阵和14种不同形状的第一布里渊区**。第一布里渊区的形状只与晶体的布拉菲点阵的几何性质有关，与晶体的化学成分、晶胞中的原子数目无关。

布里渊区是一个对称性原胞，它保留了相应的布拉菲点阵的点群对称性。因此第一布里渊区里依然可以划分为几个完全等同的区域。

对一种晶体来说，它的所有布里渊区都有同样大小的体积，利用平移对称性可以找出第一布里渊区和所有较高的布里渊区之间的全等性。

画出六角密排hcp结构的倒格子，并写出倒格矢 \mathbf{b}_1 ， \mathbf{b}_2 ， \mathbf{b}_3 的晶格常数大小。

习题

- 1、（黄昆书 1.3）：证明体心立方的倒格子是面心立方，面心立方的倒格子是体心立方
- 2、（黄昆书1.4）：证明倒格子原胞的体积为 $(2\pi)^3/\Omega$, Ω 为正格子原胞体积
- 3、（黄昆书1.5）：证明倒格子矢量 $\mathbf{G} = h_1\mathbf{b}_1 + h_2\mathbf{b}_2 + h_3\mathbf{b}_3$ 垂直于密勒指数为 (h_1, h_2, h_3) 的晶面系
- 4、一个单斜晶体的原胞几何描述为 $a=4\text{\AA}$, $b=6\text{\AA}$, $c=8\text{\AA}$, $\alpha=\beta=90^\circ$, $\gamma=120^\circ$ 。计算 (110) 晶面系间距，倒格子基矢，倒易原胞体积。