

第一章

晶体结构

绪 论

物质一般有固、液、气三态（等离子体）
原子组成固体。大致密度 $10^{23}/\text{cm}^3$ ，总是
以一定方式排列——固体结构。

固体物理研究对象：

晶体、非晶体与准晶体等固相物质

固体

晶体：有固定熔点，金属、岩盐、石英、金刚石

非晶体：没有固定熔点，橡胶、塑料、玻璃、蜡

晶体：**长程有序**（分子排列在微米量级范围是有序的。）

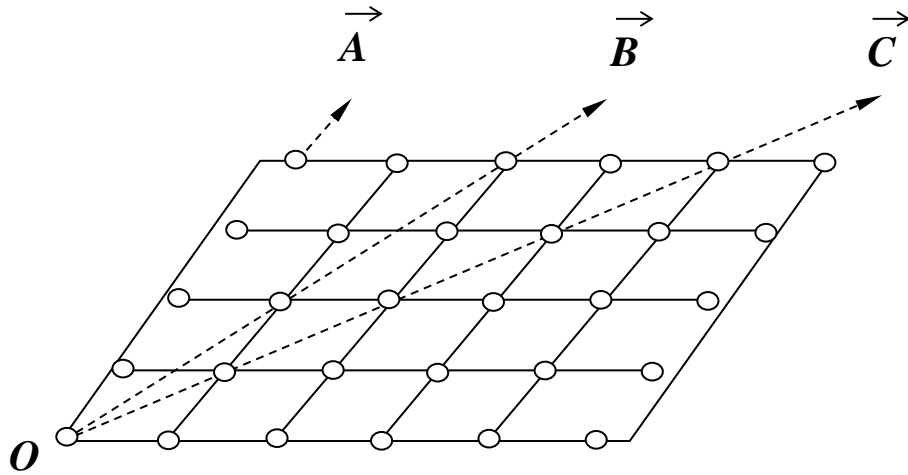
非晶体：无规则的，或称其为**短程有序**的。

晶体、非晶体的特点

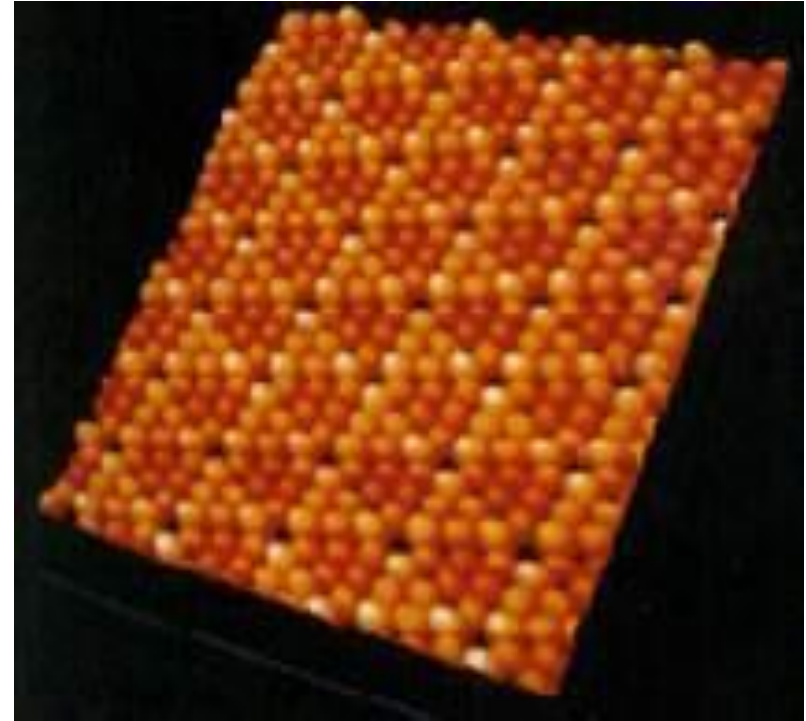
晶体：

有规则外形（天然）、各向异性、固定熔点





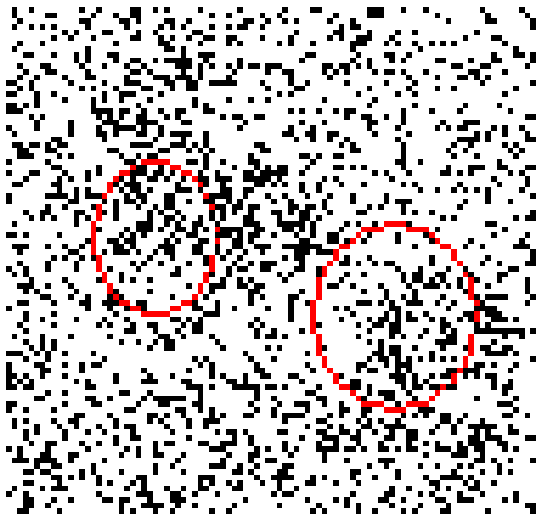
理想晶体中原子排列
是十分规则的，主要
体现是原子排列具有
周期性



Si

非晶体：

无规则外形、各向同性、无固定熔点



在非晶体中原子排列也不是杂乱无章、完全无序的，仍然保留有原子排列的短程序。

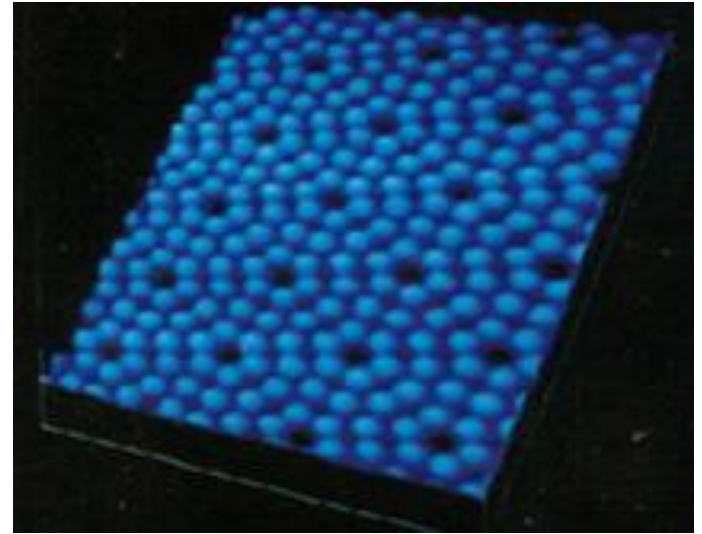
晶体

单晶：一个核心生长
(Si、Ge)

多晶：多个核心生长
(金属材料、Cu、Fe、
Al)

每个晶粒各向异性，但位向不同，多个晶粒使得多晶体不显示：

规则外形和各向异性，但仍然具有固定熔点。



非晶体与晶体在一定条件下可以转化

非晶体 $\xrightarrow{\text{长期高温下}}$ 晶体

非晶体 $\xleftarrow{\text{快冷}}$ 晶体 (液体)

如:

铁 $\xrightarrow{\text{高温熔化}}$ 液态 $\xrightarrow{\text{缓慢冷却}}$ 晶体
铁 $\xrightarrow{\text{高温熔化}}$ 液态 $\xrightarrow{\text{快冷}}$ 非晶体

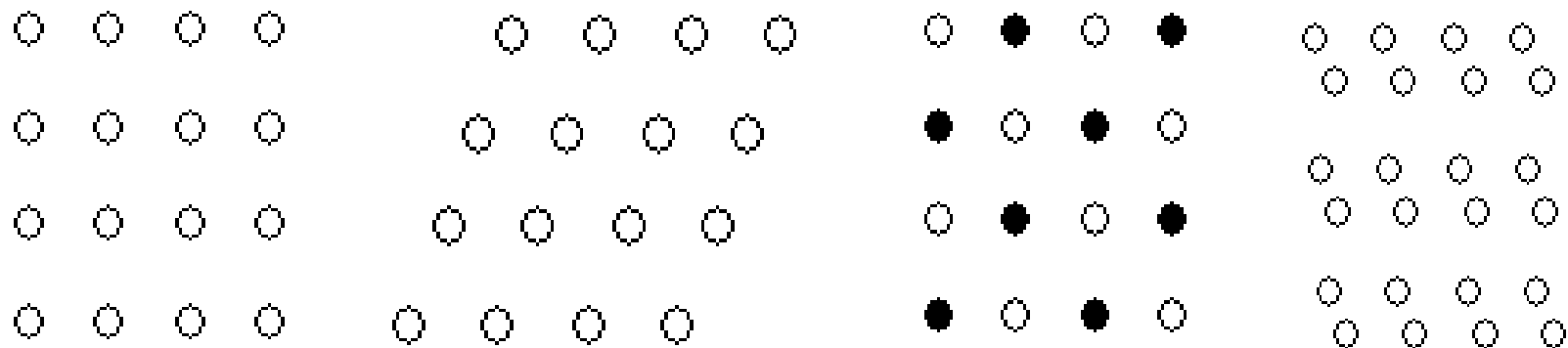
1984年，实验发现一类和晶体、非晶体都不相同的固体，在这类固体中发现了已经证明在晶体中不可能存在的五重对称轴，使人们想到介于晶体和非晶体之间的固体，称为准晶体

第一节 晶体结构的周期性

一、基本概念

1、晶格

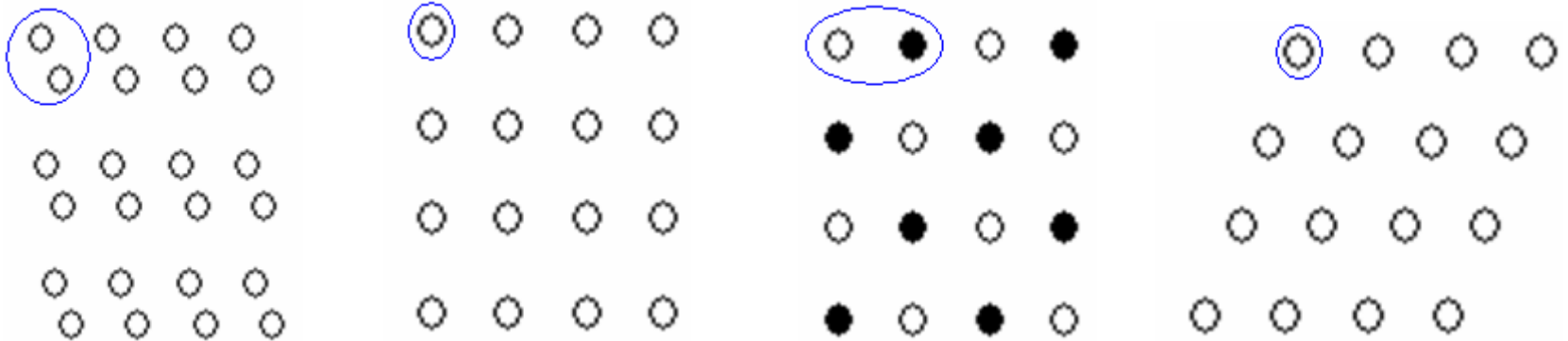
晶体中原子排列的具体形式称为晶体格子，简称晶格。



2、格点

晶格中原子与原子团被抽象的点称为格点。

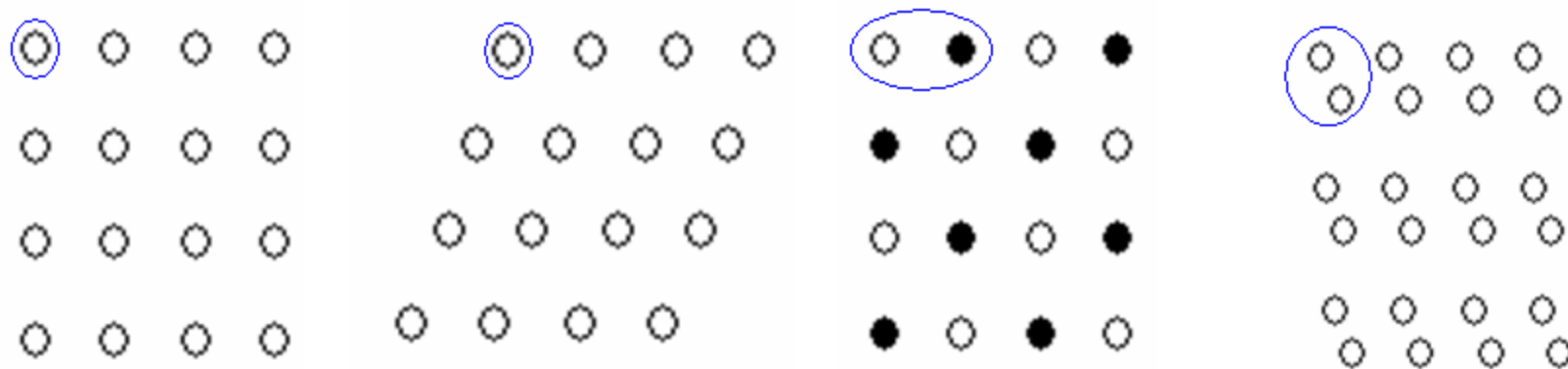
周围环境完全一样



3、基元

格点并非一个原子，可能是多个原子，两个同类原子或异类原子、原子团等

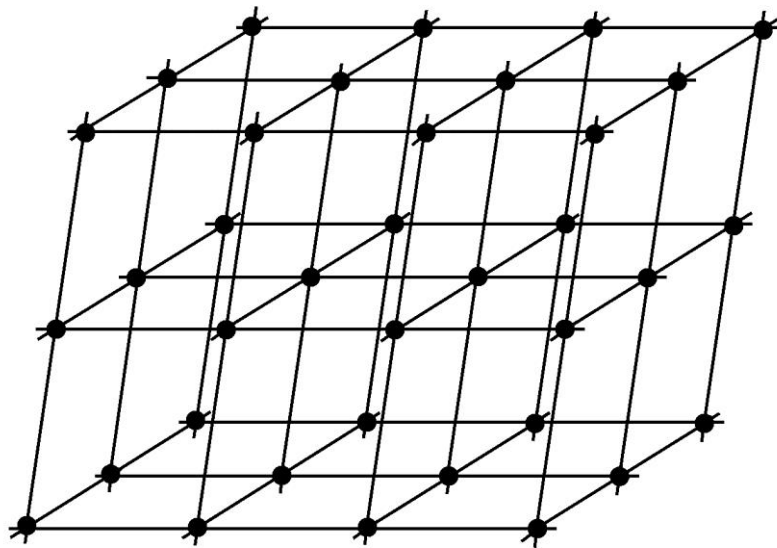
格点所代表的原子与原子团叫基元



4、空间点阵

格点的总体叫空间点阵（点阵）

加上基元组成不同，形成成千上万的晶格

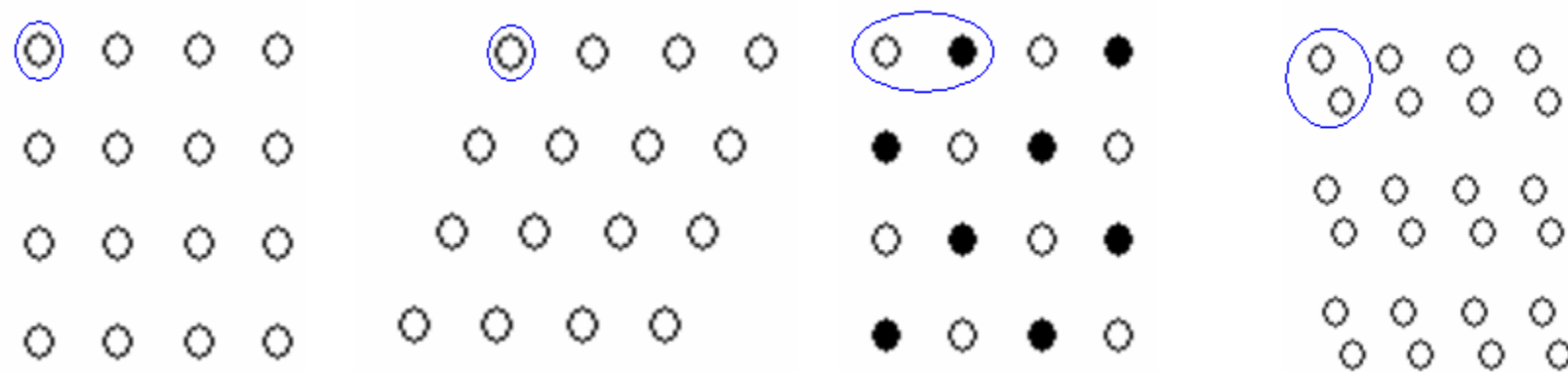


二、简单格子与复式格子

简单格子：基元只含有一个原子

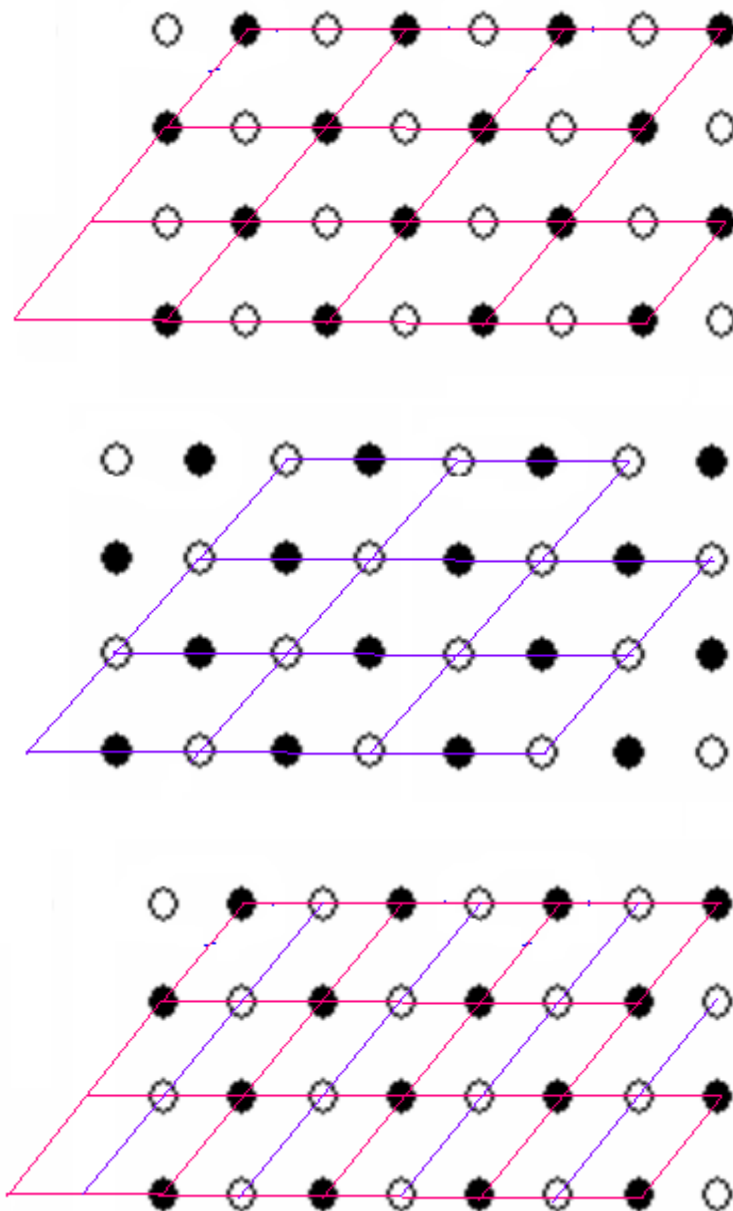
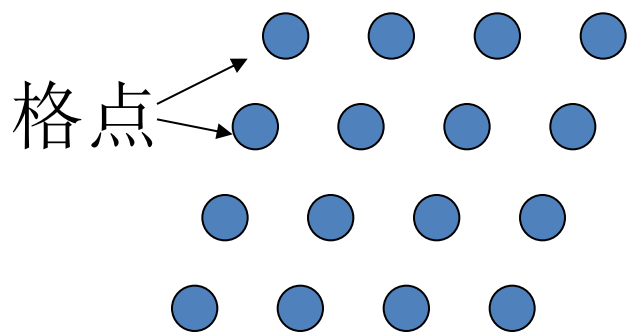
复式格子：基元含有两个或两个以上原子的晶格（可是同类、异类）

布拉菲格子：格点



复式格子特点：

- 每种原子形成一个简单格子
- 不同原子形成的简单格子是相同的
- 由简单格子套构

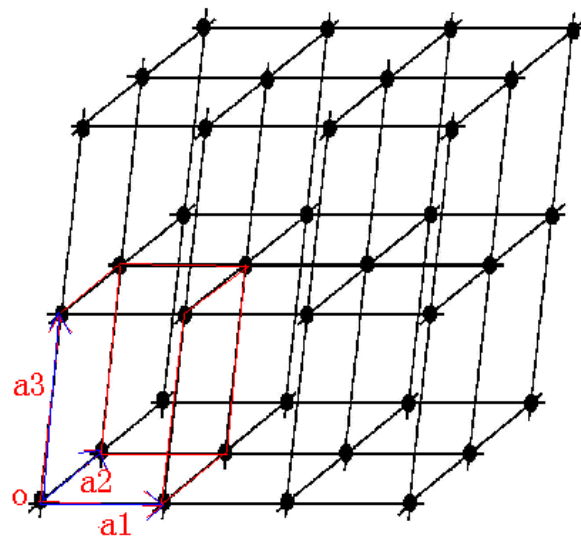


三、原胞和晶胞

1、原胞

格点在三维方向平移形成晶格，平移一步的距离可称为周期，不同方向周期不一定同。

以一格点为原点，按平移方向和长度取三矢量（平移矢量），构成平行六面体，推成整个晶体



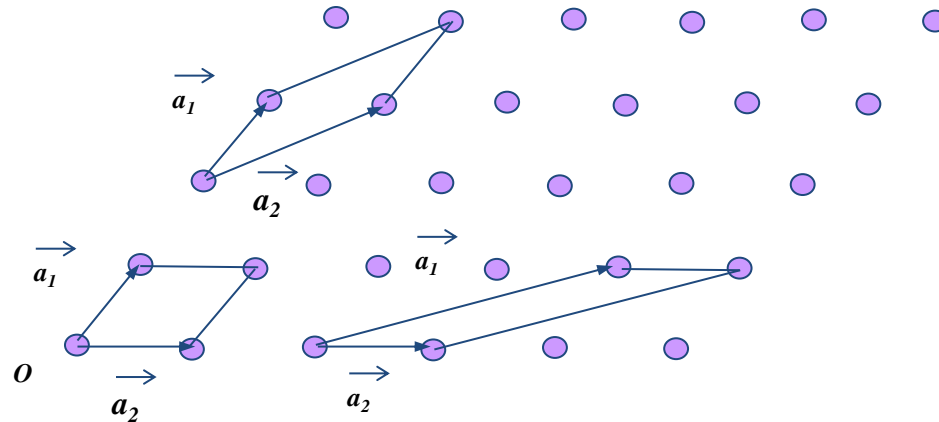
定义：体积最小的周期性平行六面体单元

特点：选取不唯一（体积相同）

只含有一个格点（简单、复式）

基矢

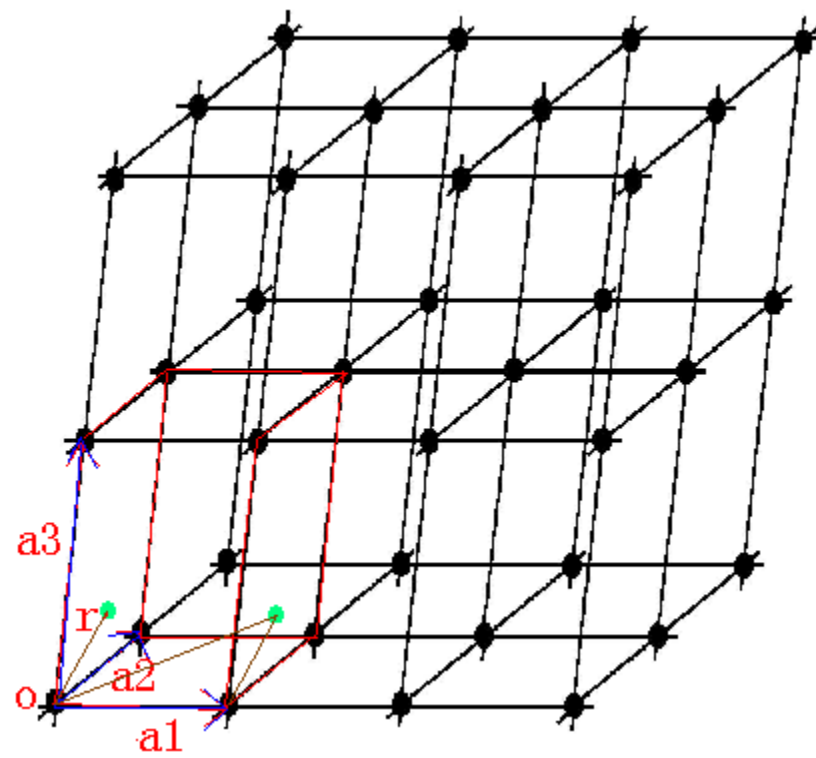
不同原胞中相对应位置物理性质相同



晶格中的任意一格点的位置矢量 \vec{R} ，则可以用基矢 \vec{a}_1 、 \vec{a}_2 、 \vec{a}_3 来表示：

$$\vec{R}(\vec{r}) = (l_1\vec{a}_1 + l_2\vec{a}_2 + l_3\vec{a}_3)$$

$$Q(\vec{r}) = Q(\vec{r} + n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3)$$



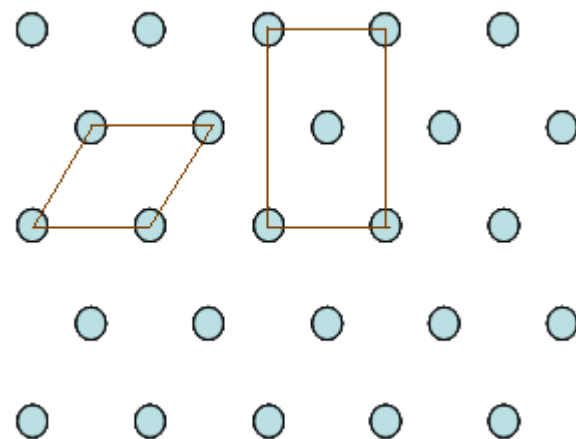
二、晶胞

定义：既考虑了周期性又考虑了对称性所选取的重复单元

特点：体积不一定最小，选取不唯一

体心或面心上可能有格点
基矢

不同原胞中相对应位置物理性质相同



晶格常数：晶轴上布拉菲格子相邻格点的距离

三、威格纳-赛兹原胞

原胞-体积最小，晶胞-对称性好

体积最小的对称周期单元

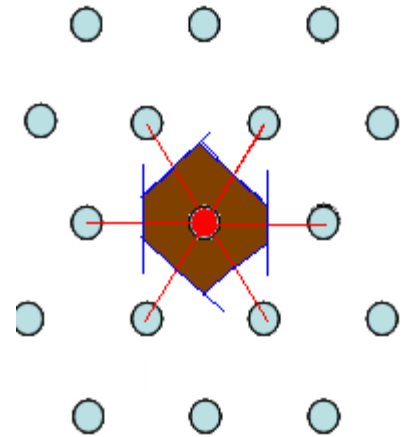
方法：一格点为中点

相邻格点连线

中垂面围成的最小多面体

特点：体积最小

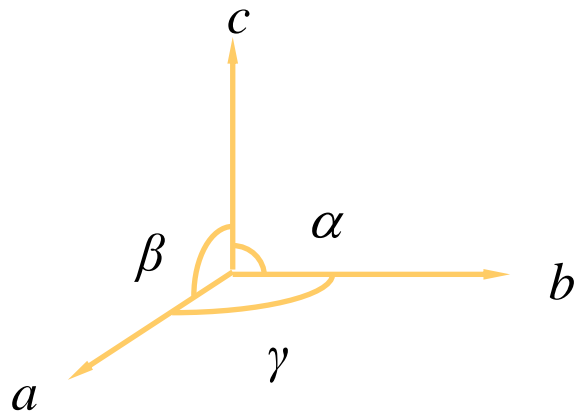
具有全部对称性



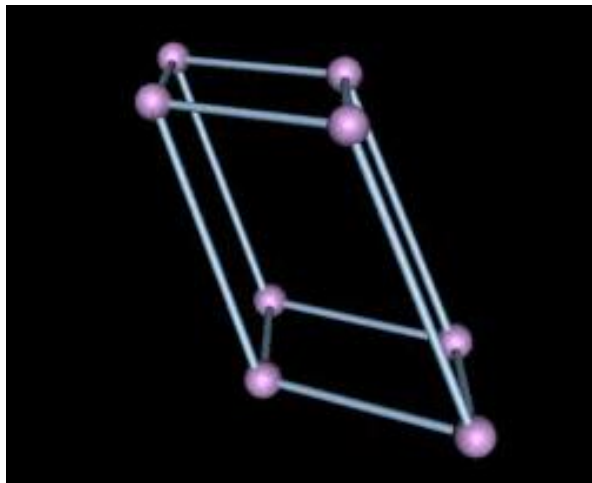
第二节 常见晶体结构

一、晶系

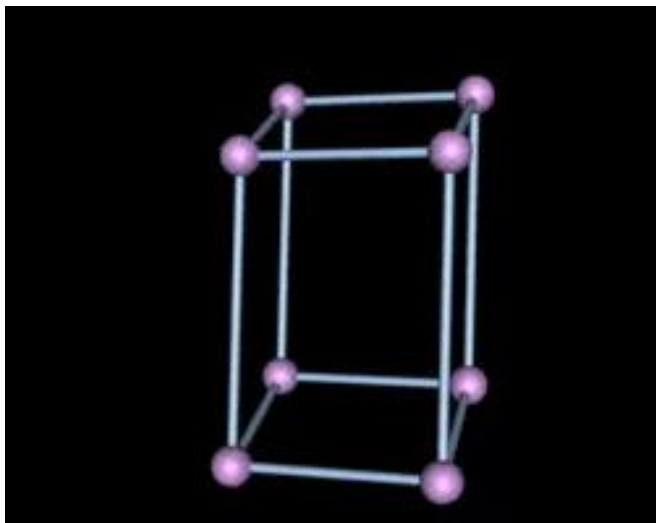
晶胞的形状：晶轴间夹角，棱边长度
七种晶系，**14**中点阵



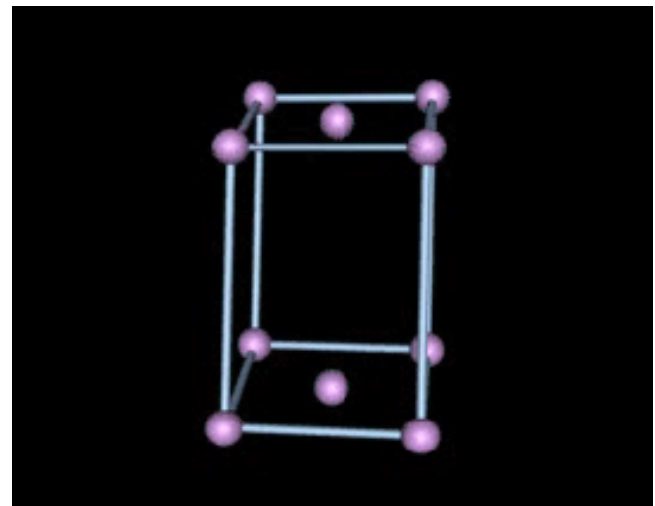
晶系	布拉菲点阵	晶系	布拉菲点阵
三斜 Triclinic $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma$	简单 <u>三斜</u>	六方 Hexagonal $a_1 = a_2 = a_3 \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	<u>简单六方</u>
单斜 Monoclinic $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	简单单斜 <u>底心单斜</u>	菱方 Rhombohedral $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	<u>简单菱方</u>
正交 $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	<u>简单正交</u> <u>底心正交</u> <u>体心正交</u> <u>面心正交</u>	四方（正方） Tetragonal $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ 立方 Cubic $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	<u>简单四方</u> <u>体心四方</u> <u>简单立方</u> <u>体心立方</u> <u>面心立方</u>



简单三斜



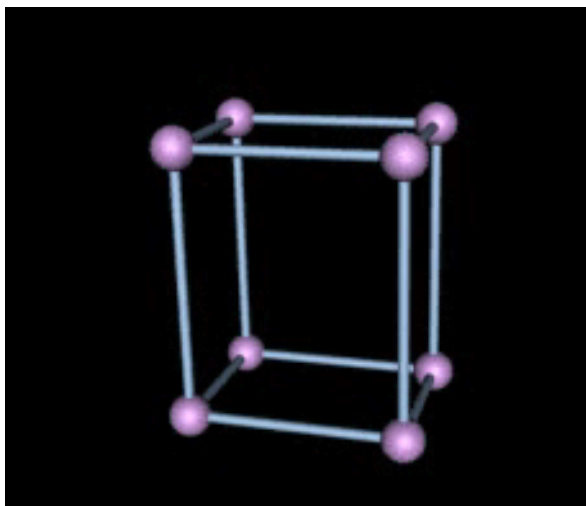
简单单斜



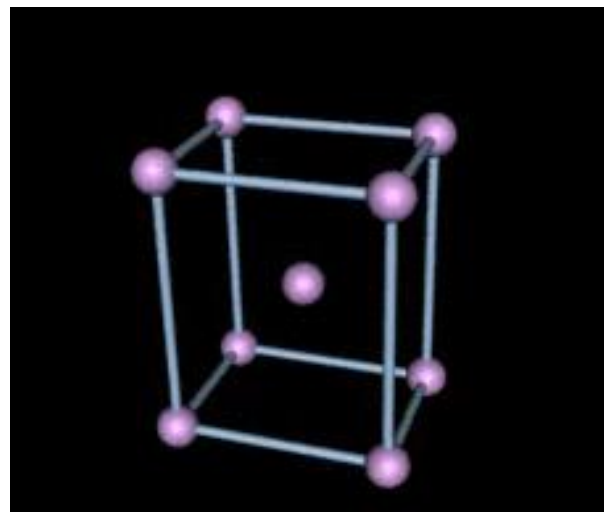
底心单斜

[返回](#)

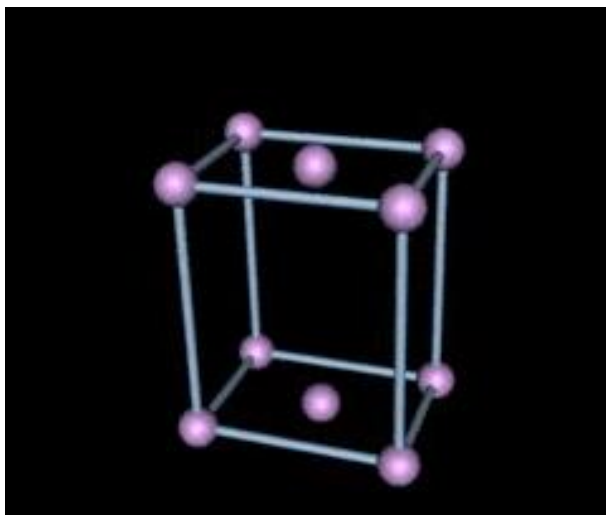
晶系	布拉菲点阵	晶系	布拉菲点阵
三斜 Triclinic $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma$	简单 <u>三斜</u>	六方 Hexagonal $a_1 = a_2 = a_3 \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	<u>简单六方</u>
单斜 Monoclinic $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	简单单斜 <u>底心单斜</u>	菱方 Rhombohedral $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	<u>简单菱方</u>
正交 $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	<u>简单正交</u> <u>底心正交</u> <u>体心正交</u> <u>面心正交</u>	四方（正方） Tetragonal $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ 立方 Cubic $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	<u>简单四方</u> <u>体心四方</u> <u>简单立方</u> <u>体心立方</u> <u>面心立方</u>



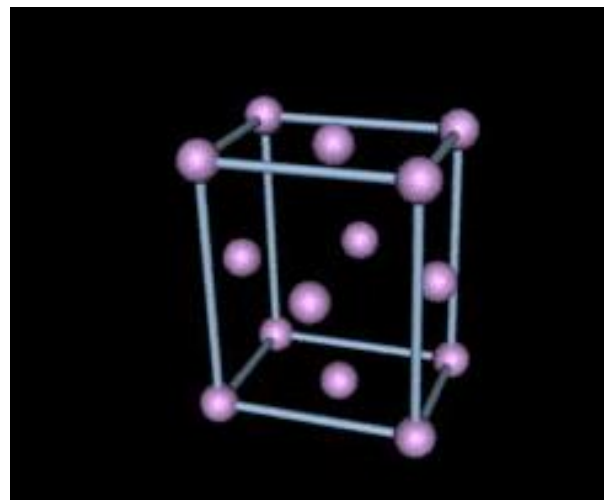
简单正交



体心正交



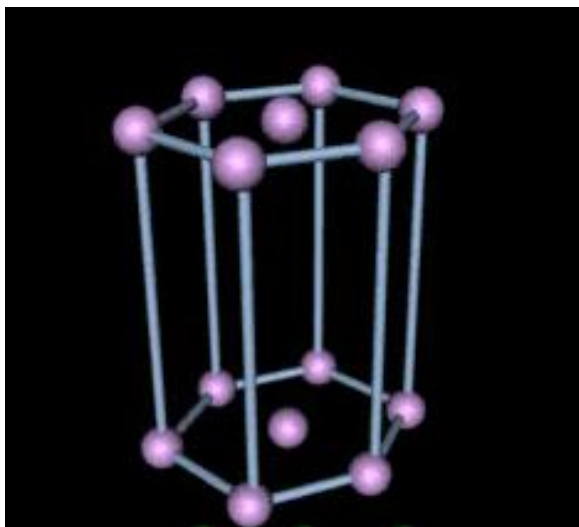
底心正交



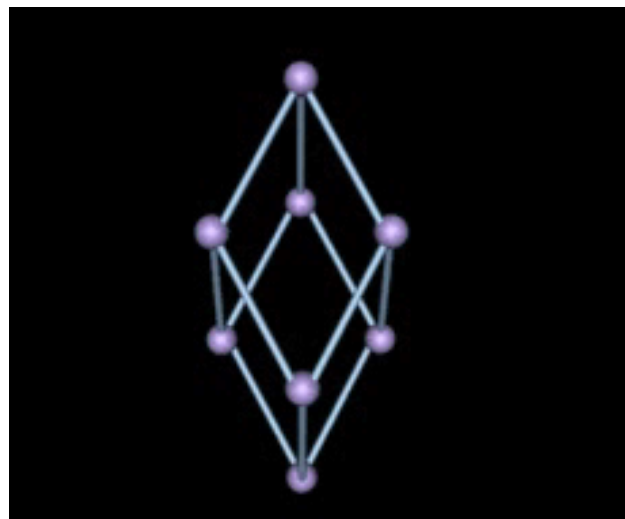
面心正交

[返回](#)

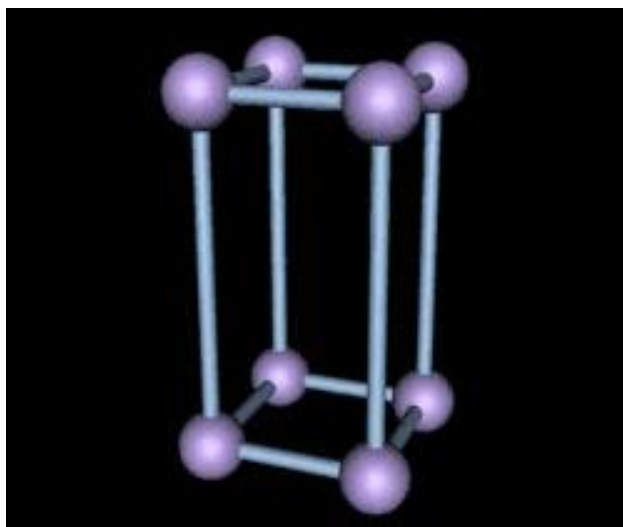
晶系	布拉菲点阵	晶系	布拉菲点阵
三斜 Triclinic $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma$	简单 <u>三斜</u>	六方 Hexagonal $a_1 = a_2 = a_3 \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	<u>简单六方</u>
单斜 Monoclinic $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	简单单斜 <u>底心单斜</u>	菱方 Rhombohedral $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	<u>简单菱方</u>
正交 $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	<u>简单正交</u> <u>底心正交</u> <u>体心正交</u> <u>面心正交</u>	四方（正方） Tetragonal $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ 立方 Cubic $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	<u>简单四方</u> <u>体心四方</u> <u>简单立方</u> <u>体心立方</u> <u>面心立方</u>



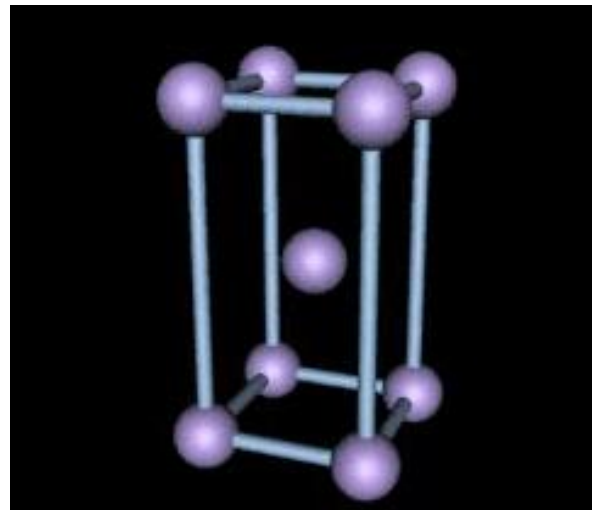
简单六方



简单菱方



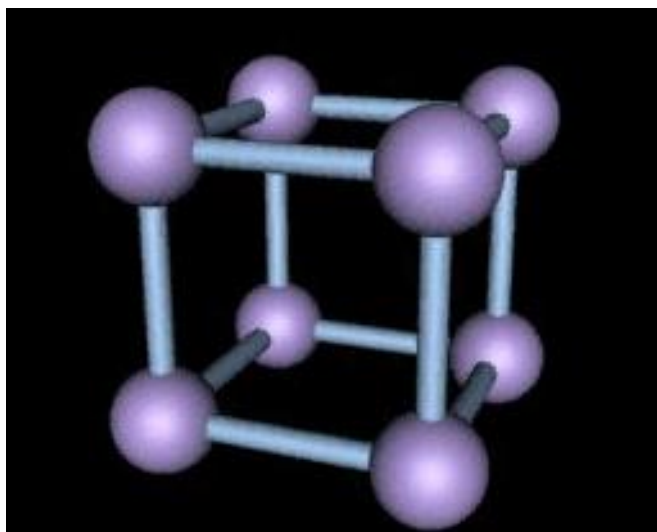
简单四方



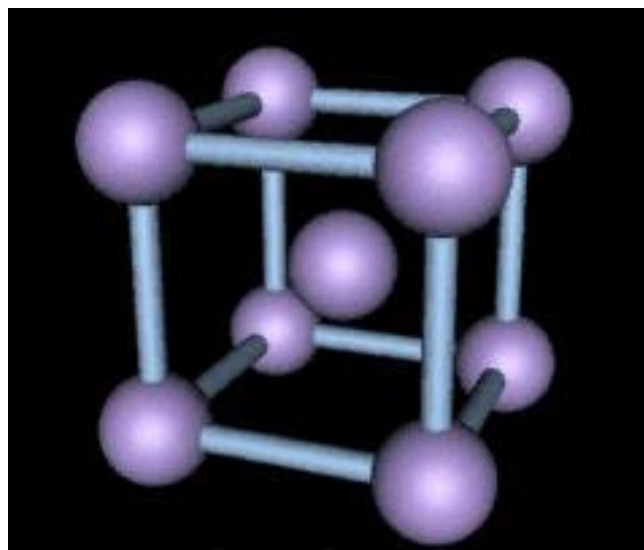
体心四方

[返回](#)

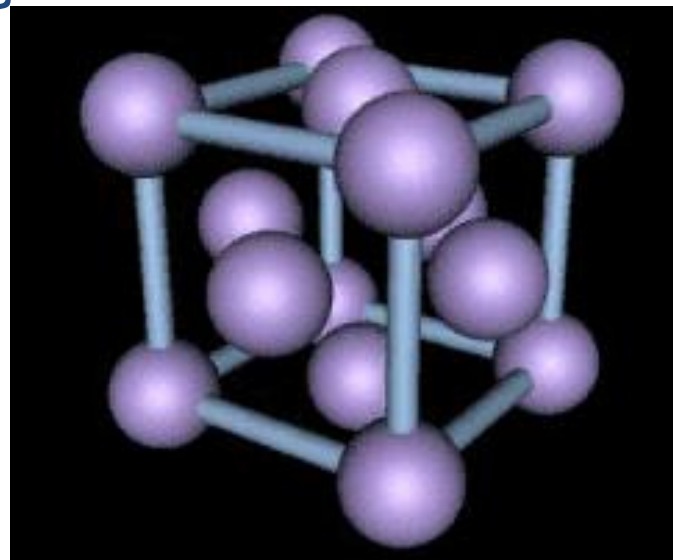
晶系	布拉菲点阵	晶系	布拉菲点阵
三斜 Triclinic $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma$	简单 <u>三斜</u>	六方 Hexagonal $a_1 = a_2 = a_3 \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	<u>简单六方</u>
单斜 Monoclinic $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	简单单斜 <u>底心单斜</u>	菱方 Rhombohedral $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	<u>简单菱方</u>
正交 $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	<u>简单正交</u> <u>底心正交</u> <u>体心正交</u> <u>面心正交</u>	四方（正方） Tetragonal $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ 立方 Cubic $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	<u>简单四方</u> <u>体心四方</u> <u>简单立方</u> <u>体心立方</u> <u>面心立方</u>



简单立方



体心立方



面心立方

[返回](#)

二、常见晶体结构

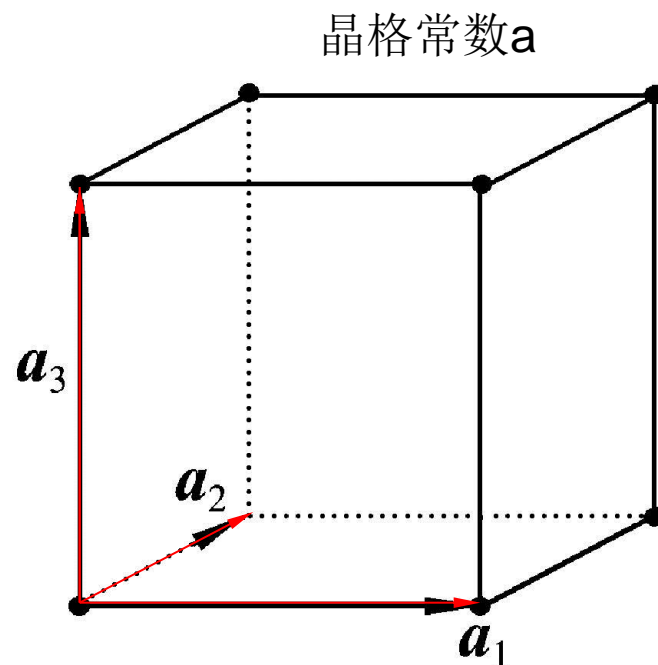
1、简单立方

特点：**8**顶点有格点，

晶胞含**1**个格点，

晶胞=原胞

$$a=b=c \quad \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$$



晶胞基矢

$$\vec{a} = ia$$

$$\vec{b} = ja$$

$$\vec{c} = ka$$

原胞基矢

$$\vec{a}_1 = \vec{a} = ia$$

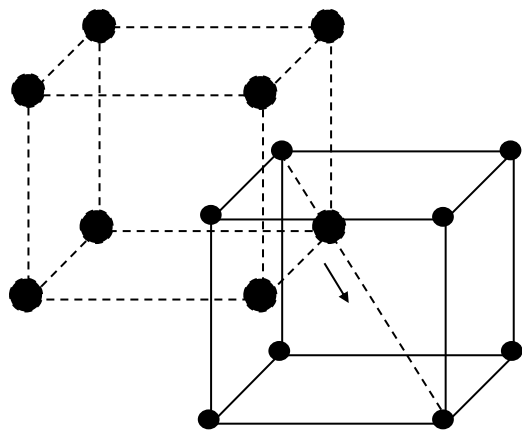
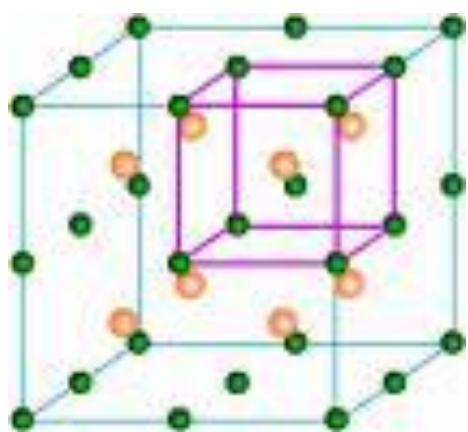
$$\vec{a}_2 = \vec{b} = ja$$

$$\vec{a}_3 = \vec{c} = ka$$

体积：

晶胞体积=原胞体积= $\vec{a}_1 \cdot [\vec{a}_2 \times \vec{a}_3] = a^3$

实例：CsCl晶体结构



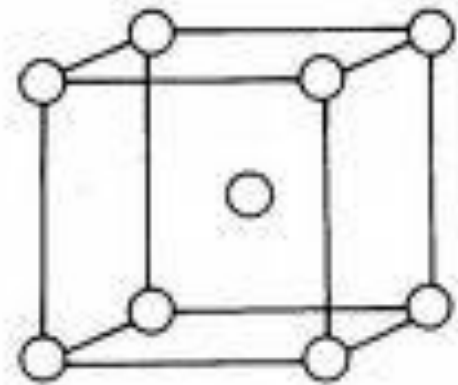
两种简单立方
沿体对角线位
移**1/2**套构而
成复式格子

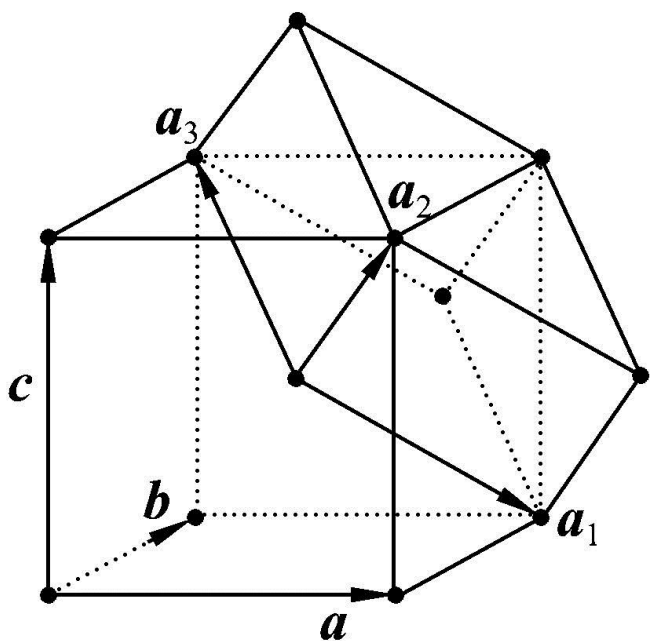
CsBr、CsI、TiCl、TiBr、TiI等

2、体心立方

特点：顶点和体心有格点，
晶胞含**2**个格点，

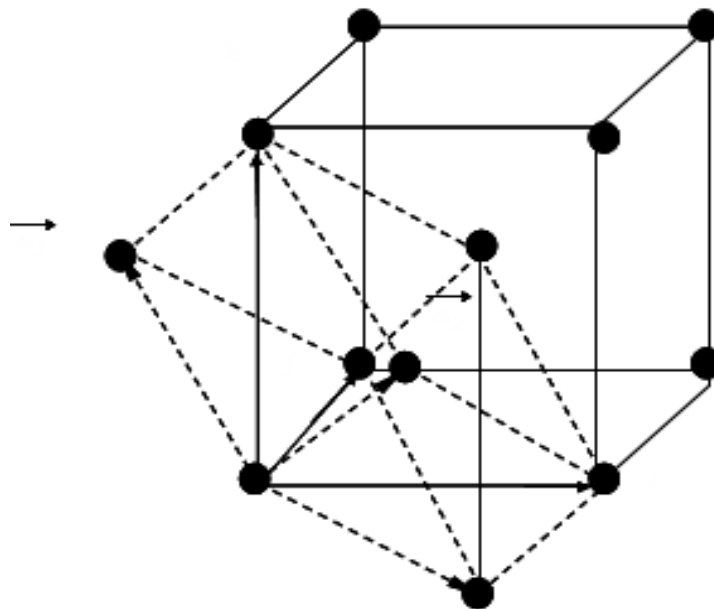
$$a=b=c \quad \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$$





晶胞基矢

$$\begin{aligned}\vec{a} &= ia \\ \vec{b} &= ja \\ \vec{c} &= ka\end{aligned}$$



原胞基矢

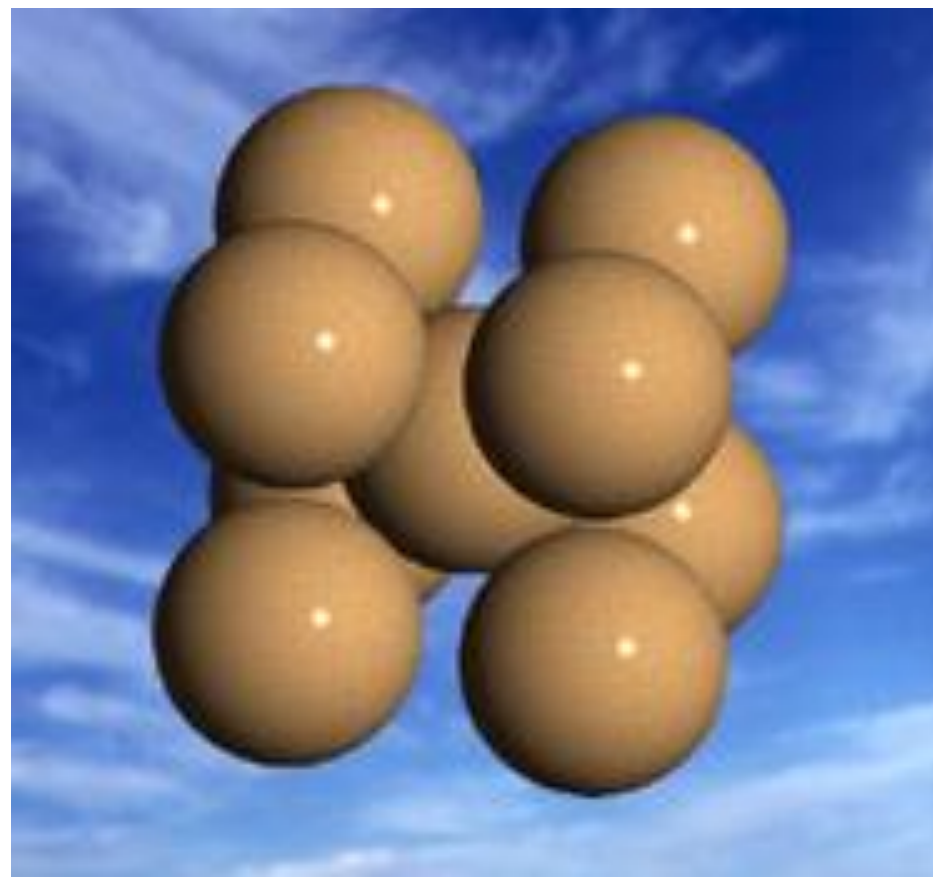
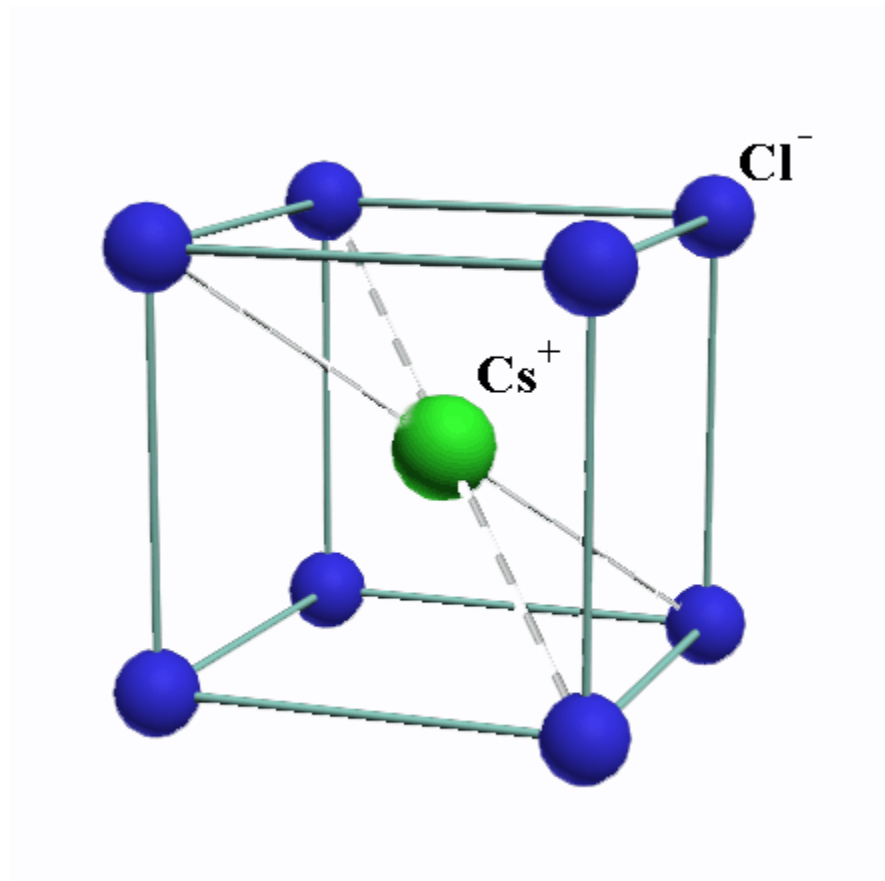
$$\left. \begin{aligned}\vec{a}_1 &= \frac{a}{2}(-i + j + k) \\ \vec{a}_2 &= \frac{a}{2}(i - j + k) \\ \vec{a}_3 &= \frac{a}{2}(i + j - k)\end{aligned}\right\}$$

体积

晶胞: $\Omega = a^3$

原胞? 晶胞**2**个格点, 原胞**1**个格点

$$\Omega = \vec{a}_1 \cdot \left(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 \right) = \frac{a^3}{8} \begin{vmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{vmatrix} = \frac{1}{2} a^3$$

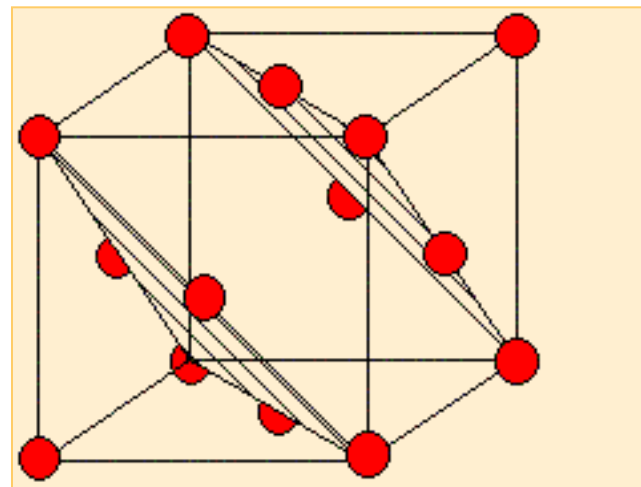


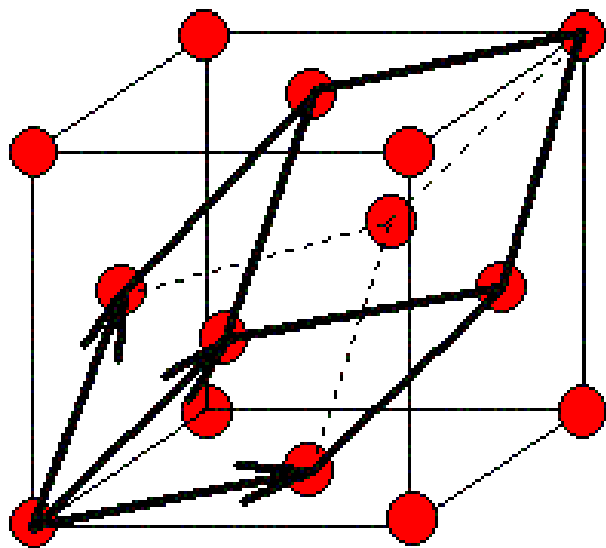
有何不同？

3、面心立方

特点：顶点和面心有格点，
晶胞含4个格点，

$$a=b=c \quad \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$$



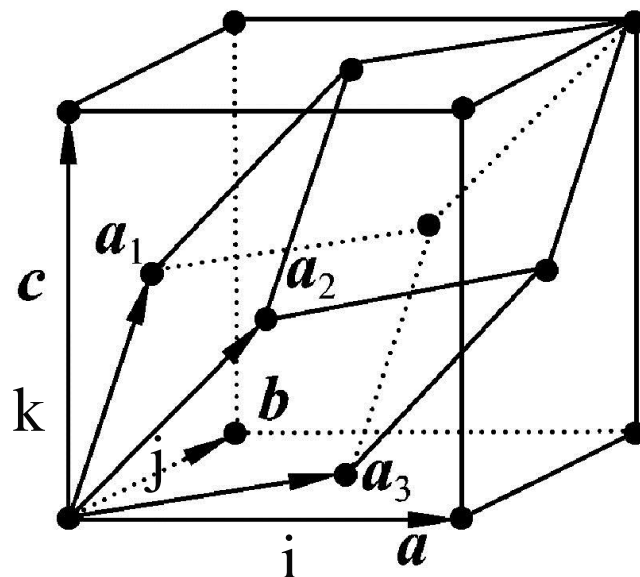


晶胞基矢

$$\vec{a} = ia$$

$$\vec{b} = ja$$

$$\vec{c} = ka$$



原胞基矢

$$\left. \begin{aligned} \vec{a}_1 &= \frac{a}{2}(j + k) \\ \vec{a}_2 &= \frac{a}{2}(k + i) \\ \vec{a}_3 &= \frac{a}{2}(i + j) \end{aligned} \right\}$$

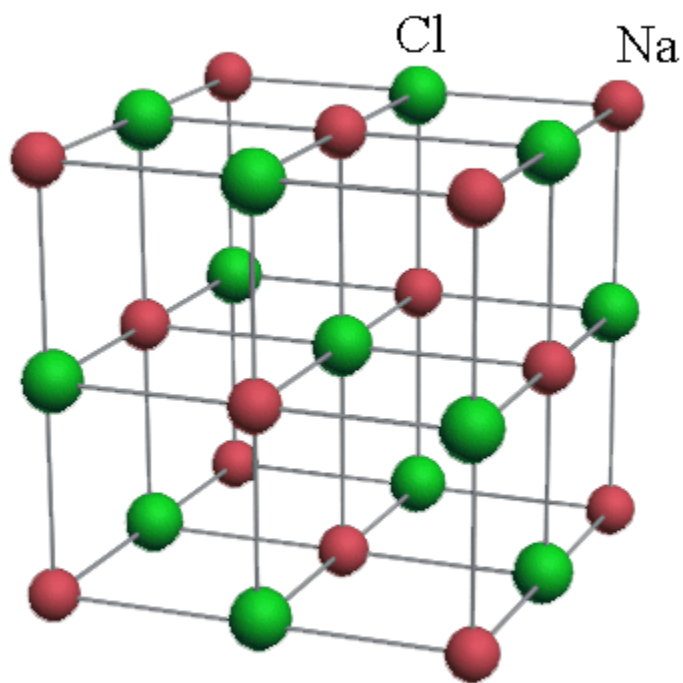
体积

晶胞: $\Omega = a^3$

原胞: 晶胞体积4个格点, 原胞1。

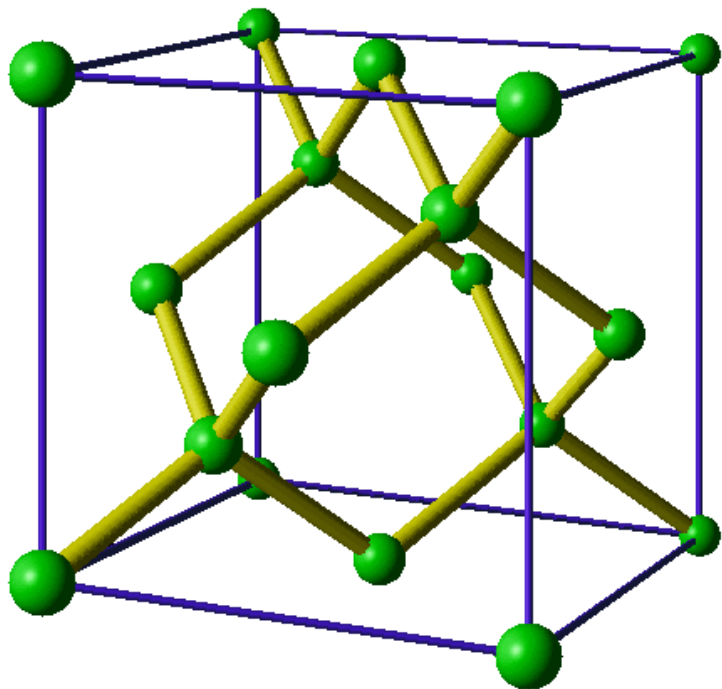
$$\Omega = \vec{a}_1 \cdot \left(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 \right) = \frac{a^3}{8} \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = \frac{1}{4} a^3$$

4、实例



NaCl结构

两面心立方
沿基矢位移
1/2套构而成
复式格子



金刚石结构

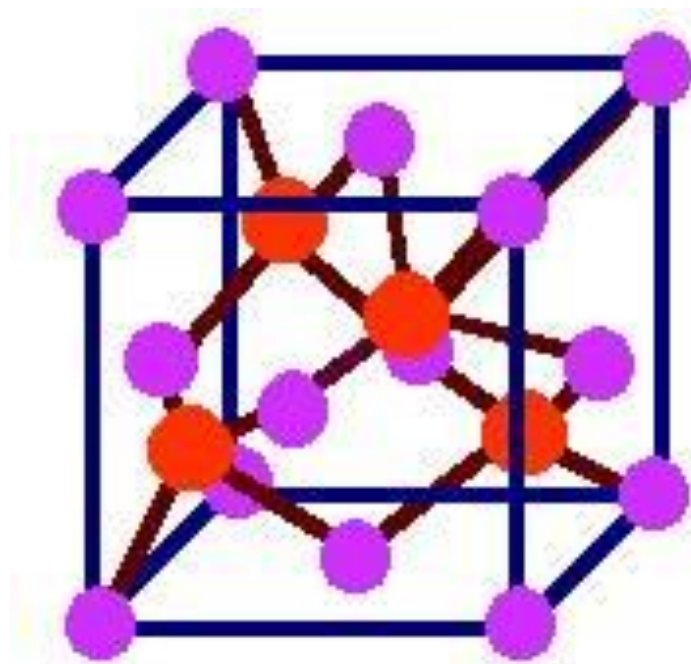
两个面心立方
沿立方体体对
角线位移 $\frac{1}{4}$ 套
购而成。
碳原子组成，
复式格子
Si、Ge

闪锌矿 **ZnS** 结构

与金刚石类似。

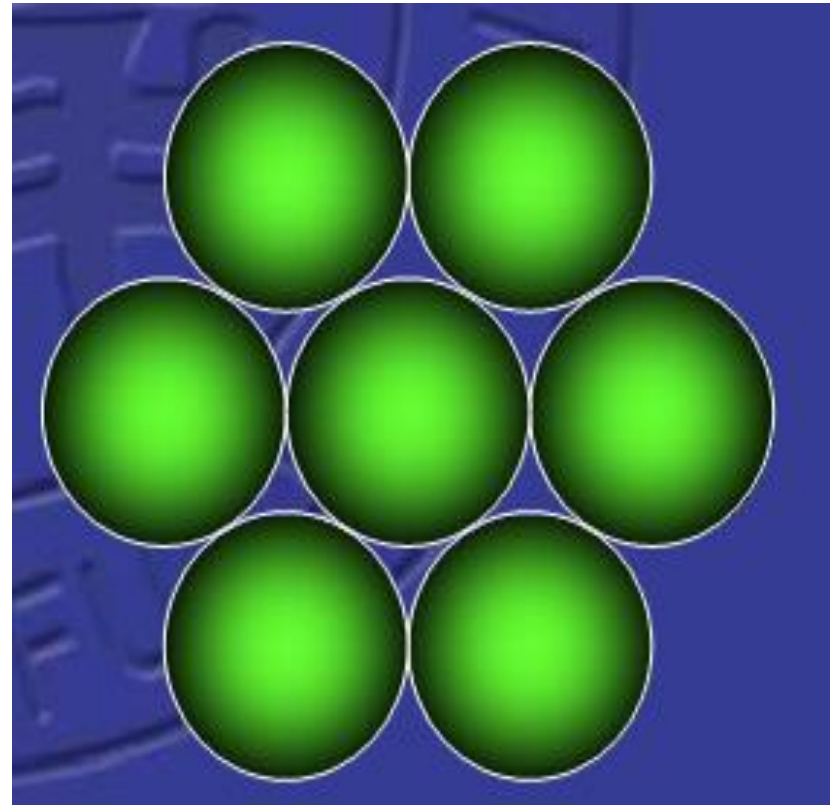
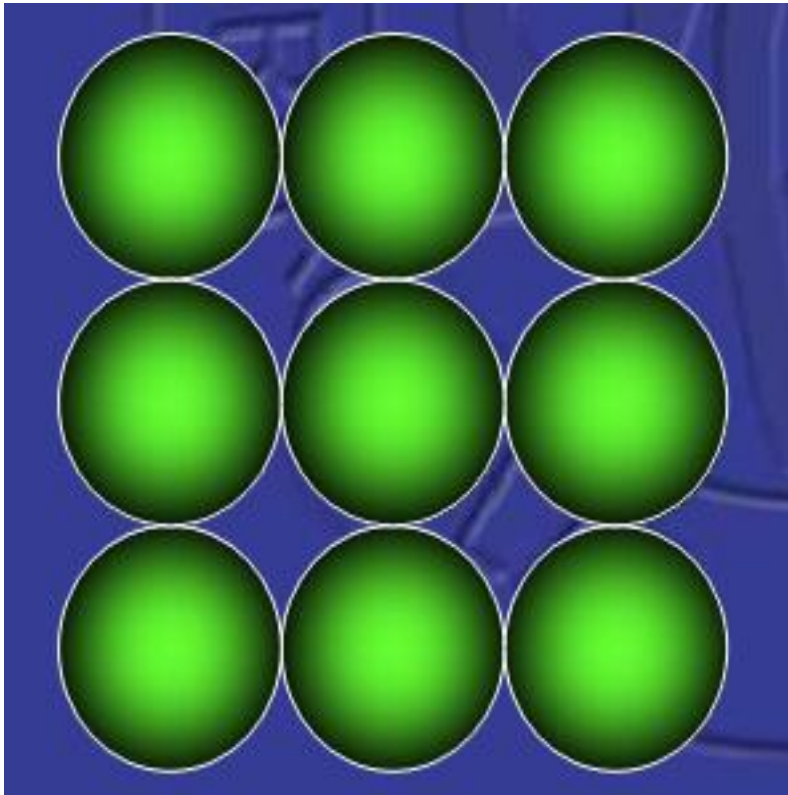
两个面心立方的
元素一个是 **S**，
一个是 **Zn**。

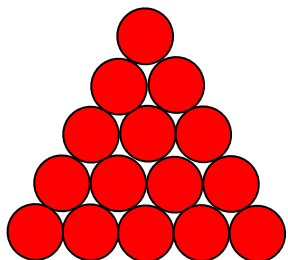
GaAs、InP、InSb



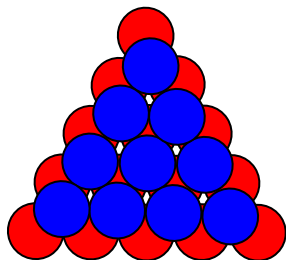
5、密堆积

原子看作硬球堆积起来，孔隙最小堆垛方式

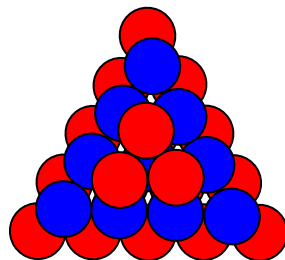




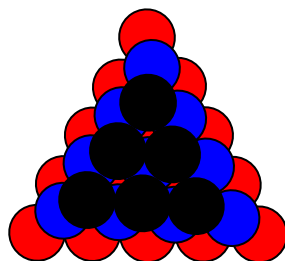
A



AB



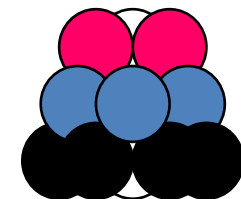
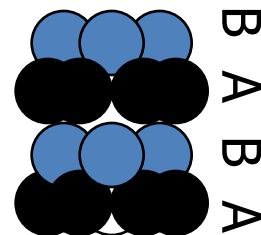
ABA



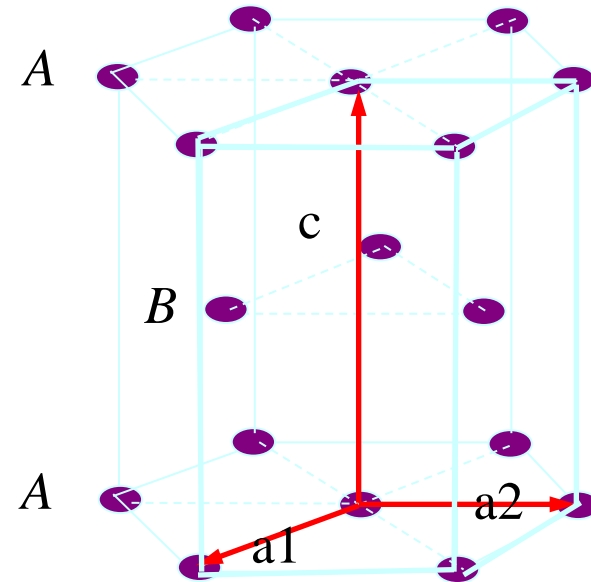
ABC

面心立方

密积六方



C B A



密积六方

两简单六方，套构而成复式格子，
相互位移

$$\frac{1}{3} \vec{a}_1 + \frac{1}{3} \vec{a}_2 + \frac{1}{2} \vec{c}$$

配位数

一个原子与周围最近邻的原子数

密堆积: 12

CsCl: 8

NaCl: 6

金刚石: 4

第五节 晶体的对称性

1、对称性

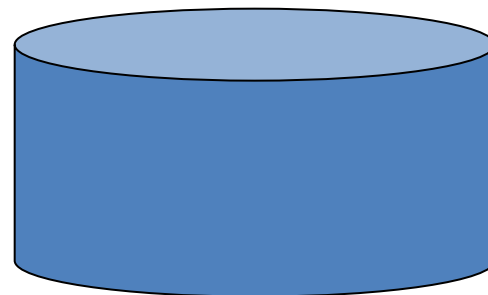
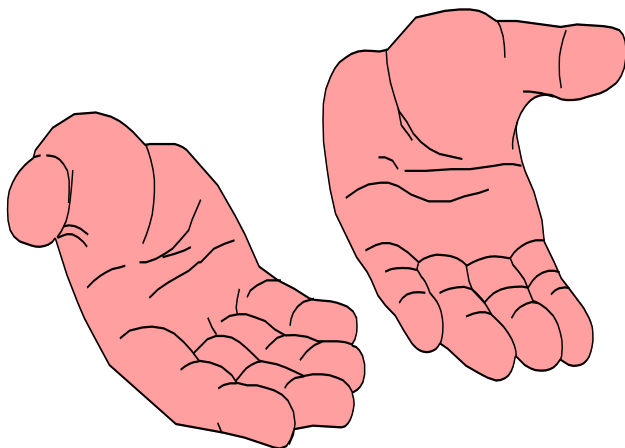
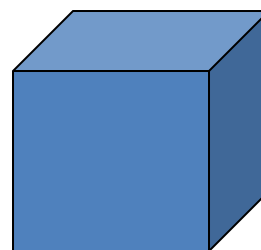
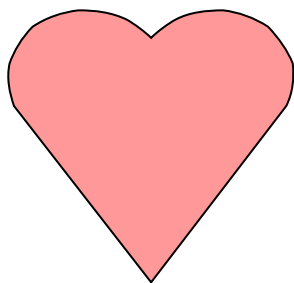
对称操作：使几何图形保持不变的动作

对称要素
进行对称操作
所借助的元素

宏观对称要素：
旋转、反映、倒反、
象转和旋转-倒反

微观对称要素：
平移、转动+平移

例子

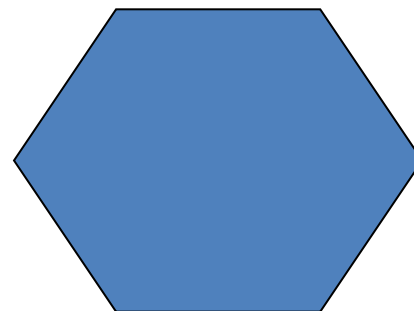
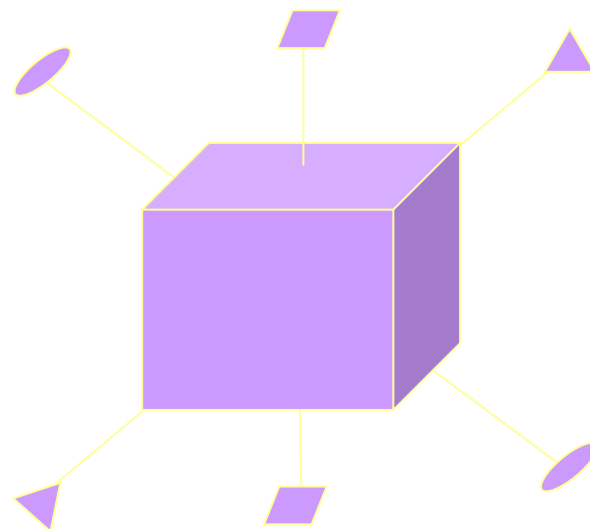


2、宏观对称要素

旋转 C_n

当晶体绕某一轴 u
旋转 θ 后，
又与自身重合。
具有旋转对称性。

$$\theta = \frac{2\pi}{n}$$

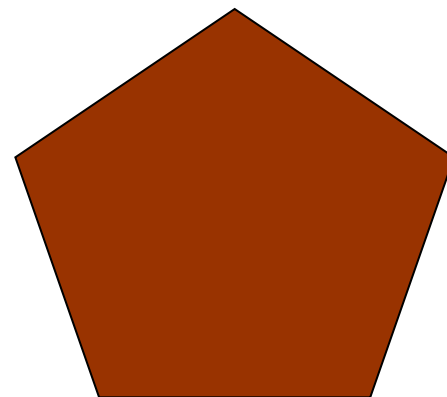


C_n: 回转一周晶体能复原几次,
几次对称轴。

n=1、2、3、4、6

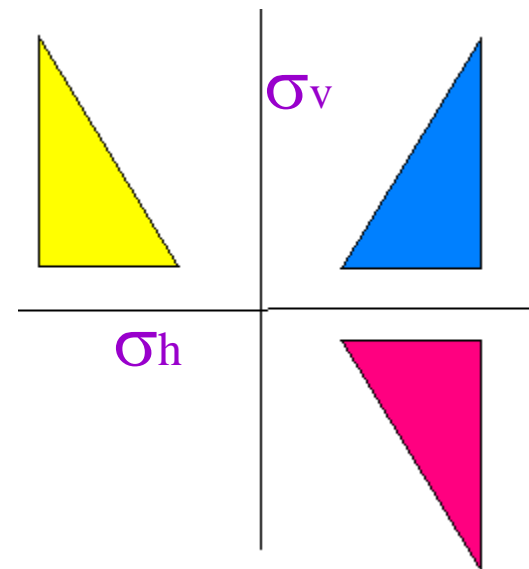


为什么没有**5**次
和大于**6**次的呢?



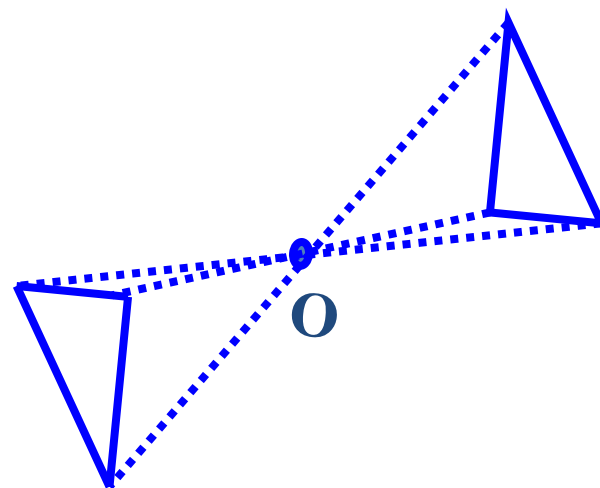
反映 σ

通过晶体作一平面，
对应点 (\mathbf{x} , \mathbf{y} , \mathbf{z}) 变成
($-\mathbf{x}$, \mathbf{y} , \mathbf{z}) 操作后，
又与自身重合。
镜面对称性



倒反 i

O点为原点，
点 $(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ 变
成 $(-\mathbf{x}, -\mathbf{y}, -\mathbf{z})$ 后，
与自身重合

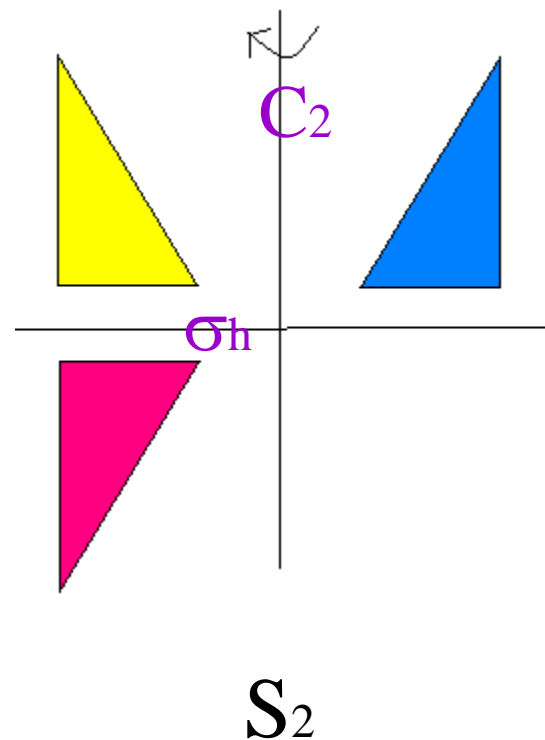


象转 S_n

绕固定轴u旋转 θ 后，
再以垂直于u轴的镜面
进行镜面反映。
旋转与反映的复合操作

$$S_n = C_n \sigma_h = \sigma_h C_n$$

$$\theta = \frac{2\pi}{n}$$



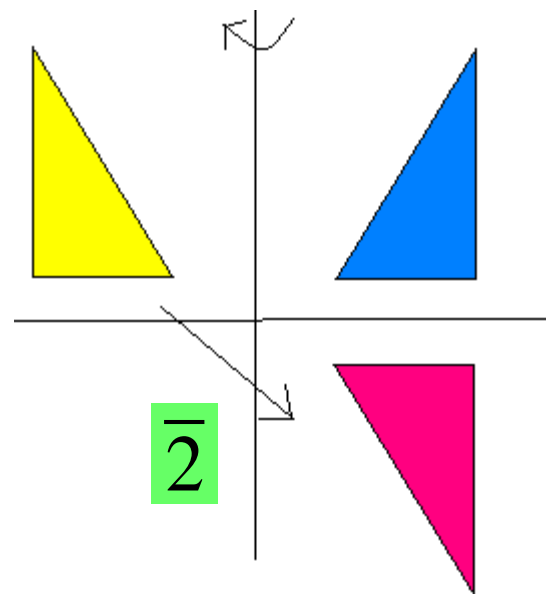
旋转—倒反 \bar{n}

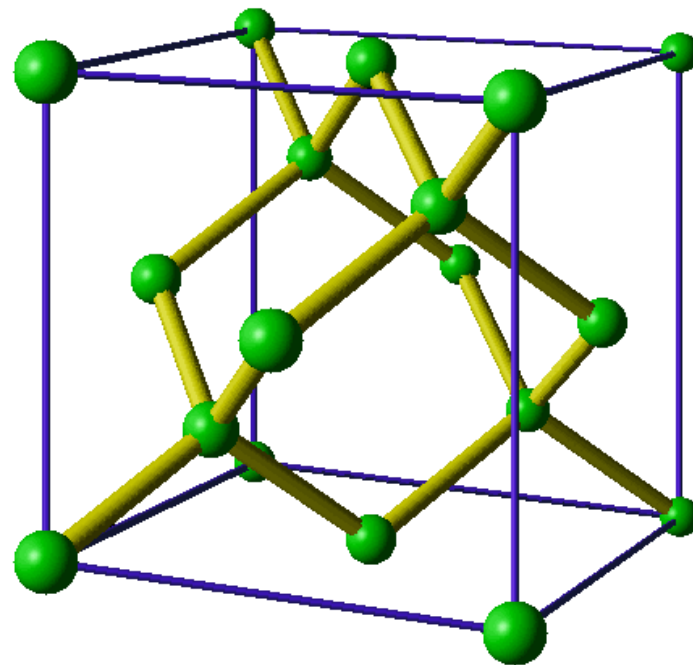
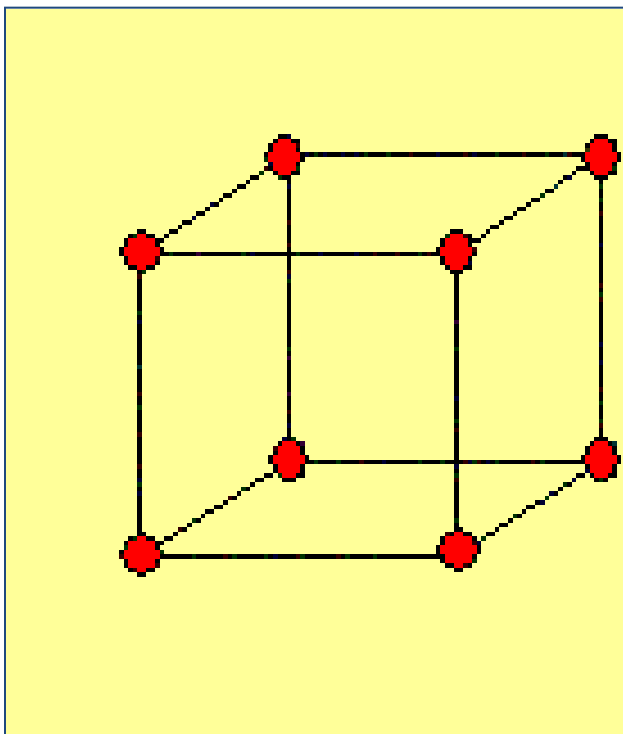
晶体绕某轴u旋转 θ 后，
进行倒反操作能复原

$$\theta = \frac{2\pi}{n}$$

$$\begin{aligned}\bar{1} &= S_2 = i, \bar{2} = S_1 = \sigma, \\ \bar{3} &= S_6, \bar{4} = S_4, \bar{6} = S_3\end{aligned}$$

关系





对称操作多少可衡量晶体对称性高低，
对研究晶体结构十分有用。

3、点群及空间群

宏观对称元素中，
独立的有 C_1 、 C_2 、 C_3 、 C_4 、 C_6 、 σ 、 i 和 S_4

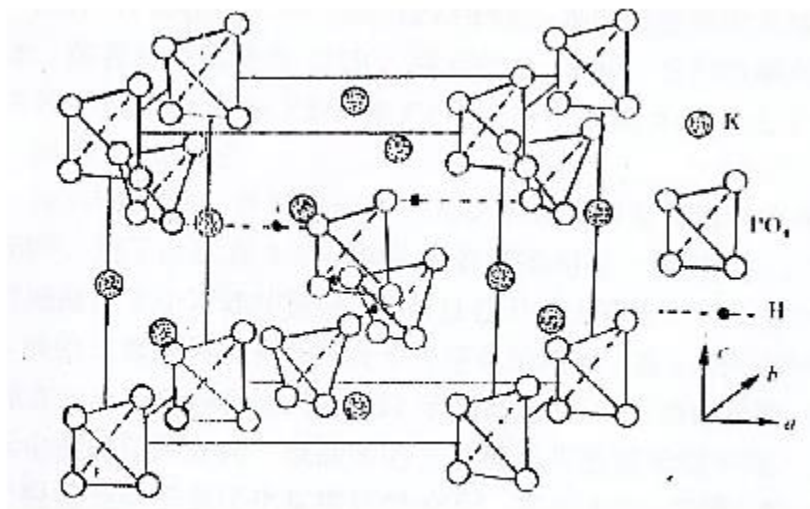
点群

描述晶体宏观对称要素的所有可能组合，
一种组合代表了晶体的一种宏观对称性。
由于晶体具有周期性，只有 **32** 种组合。

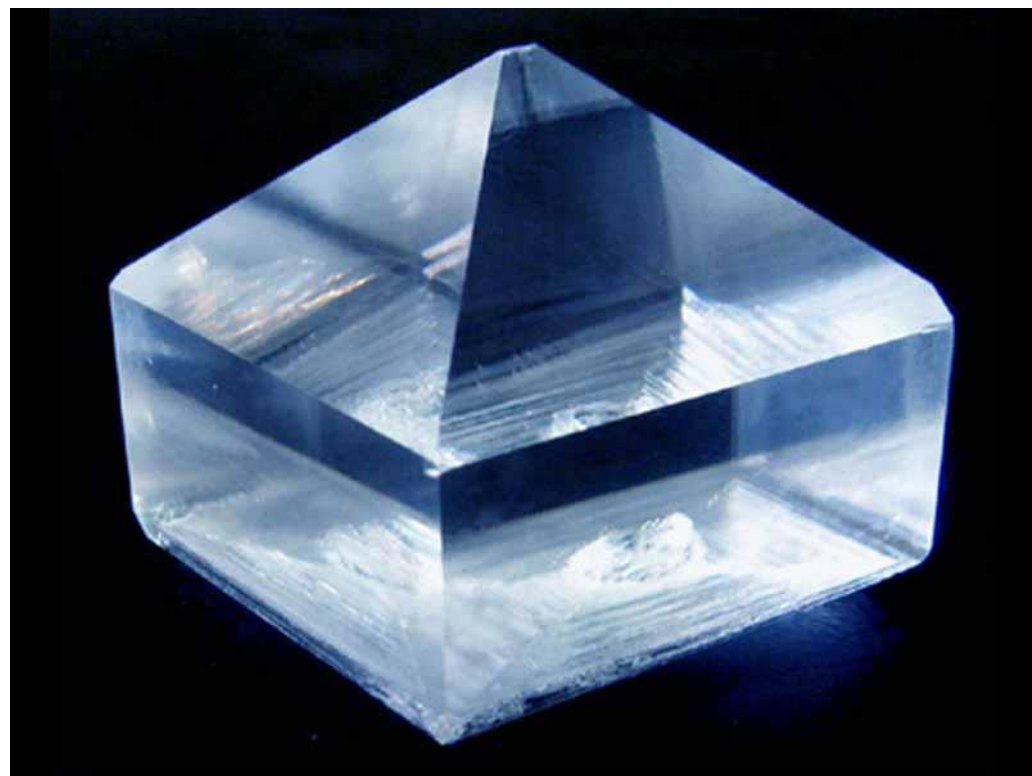
空间群

描述晶体宏观对称要素和微观对称要素的
所有可能组合，共有 **230** 种空间群。

磷酸二氢钾(KDP)晶体是一种最早受到人们重视的功能晶体，人工生长KDP晶体已有半个多世纪的历史，是经久不衰的水溶性晶体之一。KDP晶体的透光波段为 $178\text{nm}\sim 1.45\mu\text{m}$ ，是负光性单轴晶，其非线性光学系数 $d_{36}(1.064\mu\text{m})=0.39\text{pm/V}$ ，常常作为标准来比较其他晶体非线性效应的大小，可以实现 I 类和 II 类位相匹配，并且可以通过温度调谐来实现非临界位相[匹配](#)(包括四倍频和和频)。



四方晶系

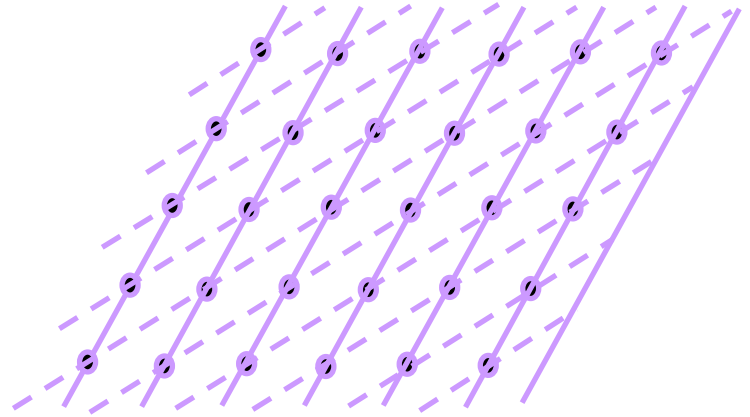


属于四方晶系，点群D4h，无色透明。世纪50年代，作为性能优良的压电晶体材料，被应用于制造声纳和民用压电换能器。60年代，随着激光技术出现，由于KDP晶体具有较大的非线性光学系数和较高的激光损伤阈值，而且晶体从近红外到紫外波段都有很高的透过率，可对1.064 μm 激光实现二倍频，同时是性能优良的电光晶体材料。在高功率激光系统受控热核反应、核爆模拟等重大技术上更显现出它的应用前景，对特大尺寸的KDP优质光学晶体的研究，在国内外一直受到研究者的极大关注。

第六节 晶向与晶面

晶列

晶体中任意两格点连线，
其上包含无数多个格点



晶列特点

同平面同族晶列相互平行，间距相等
同族晶列上格点分布同周期
一族晶列包含所有格点
不同族晶列间距不一定相同

晶向-晶列的方向

表示方法：位移矢量 $m'\vec{a} + n'\vec{b} + p'\vec{c}$

系数互质数 **m**、**n**、**p**，晶向指数 **[m n p]**

确定方法

A: 晶轴为坐标轴，晶格常数为坐标轴长度单位。

B: 从原点 **O** 沿所指方向的直线取最近一阵点坐标。

C: 将坐标值化为互质的整数 **m**、**n**、**p**，加上方括号。

表示所

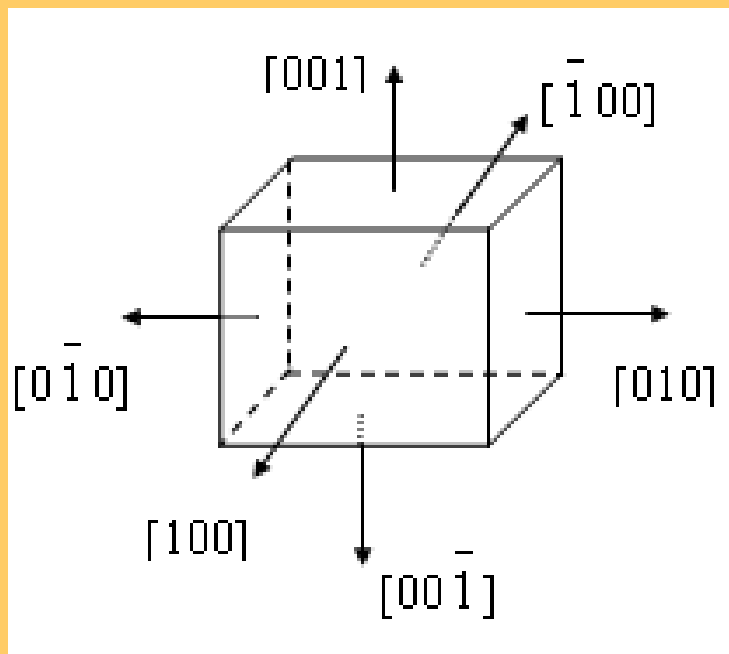
数字相同

互相平行但具有不同间距

指数小的晶向上原子密度大，晶列间距大。

如何画晶列？

$\langle 100 \rangle$

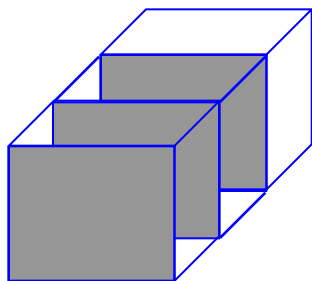


说明：如果所求晶向起点不在原点：平移晶列直线到原点；或将坐标平移。

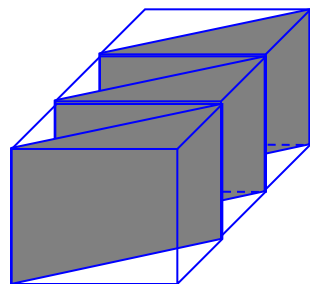
m 、 n 、 p 可为正、负整数、0，为负记在头顶。

容易犯的错误：坐标系，互质数， $[a\ 2b\ c]$ 括号， $[1, 2, 3]$

晶 面



(100)



(110)

晶面

格点所在一系列平行等距平面

特点

同族晶面相互平行，间距相等。

同族晶面上格点同周期。

一族晶面包含所有格点。

异族晶面间距不一定相同，

格点周期不一定相等。

晶面指数(密勒)表示晶面方向
密勒指数确定晶面在三晶轴上截距的
互质数来表示 (**h k l**)

方法

- A:** 晶轴为坐标轴，晶格常数单位长度。
- B:** 求晶面在晶轴上截距，与晶轴平行 ∞ 。
- C:** 取倒数， ∞ 倒数取 **0**。
- D:** 化为互质整数，加圆括号。

说明：可平移面和坐标轴
可为正、负、**0**
过原点向外平移

容易犯的错误：坐标系，不求倒数，互质数，**(a 2b c)**，括号，**(1, 2, 3)**

晶面指数的特点

- 表示所有互相平行、方向一致的晶面
- 数字相同，符号相反，则晶面中心对称
- 晶胞具有旋转对称性后，具有等同条件而只是空间位相不同的各组晶面是等价的。
晶面族，用 $\{hkl\}$ 表示
- 晶面指数简单的面，原子密度较大，晶面间距也较大

要求：已知晶向、晶面求指数

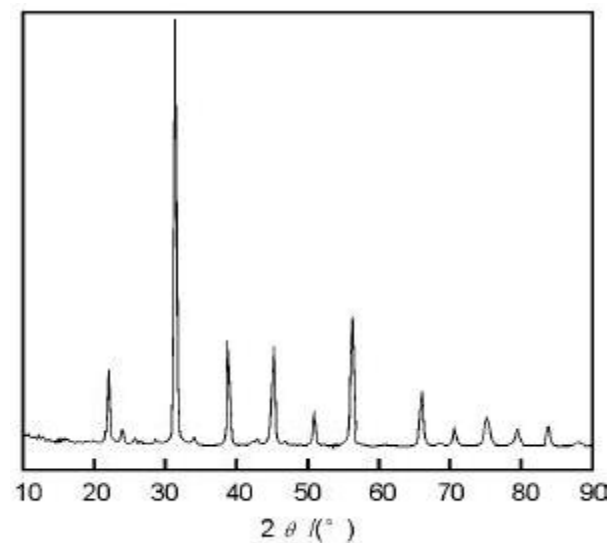
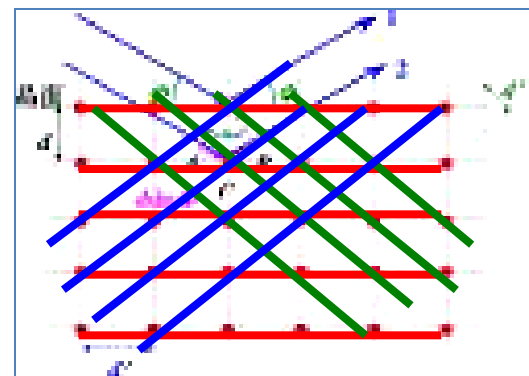
已知晶向、晶面指数画晶向、晶面

第七节 倒格子与布里渊区

1、倒格子

为便于数学分析，引入一种新的格子——倒格子。是周期性结构另一种表示，波矢空间的数学表示。

$$2d\sin\theta=n\lambda$$

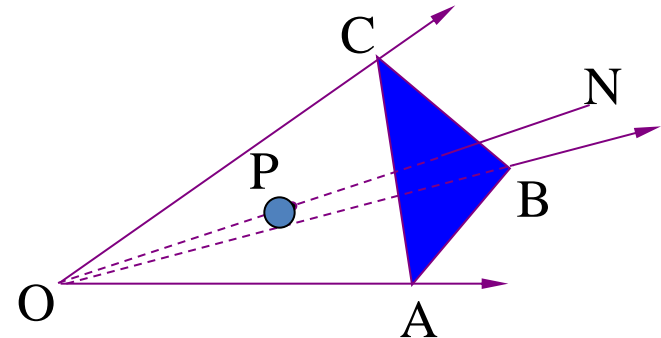


1) 倒格子与正格子的几何关系
与晶面族对应格点的方法来构造新格子

ON为晶面族**ABC**的法线

OP= ρ , $\rho d=2\pi$, **d**是面间距

平移**P**点得新点阵-倒格子



2) 倒格子基矢定义

正格子原胞的基矢为 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

对应的倒格子原胞基矢为 $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$

应满足

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

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

为原胞体积

另有

$$b_i \cdot a_j = 2\pi\delta_{ij} = \begin{cases} 2\pi & \text{当 } i = j \\ 0 & \text{当 } i \neq j \end{cases}$$

$i, j=1, 2, 3$

说明：可计算倒格矢
倒格子与正格子有互换性
倒格子矢量量纲为长度倒数

3) 倒格子的性质

(1) 原胞体积

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

$$\Omega^* = [\vec{a}_2 \times \vec{a}_3] \cdot ([\vec{a}_3 \times \vec{a}_1] \times [\vec{a}_1 \times \vec{a}_2])$$

利用

$$\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) \mathbf{B} - (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) \mathbf{C}$$

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

(2)

$$\vec{K}_h = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3 \perp (h_1 h_2 h_3)$$

(3)

$\vec{K}_h = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$ 长度是 $(h_1 h_2 h_3)$
晶面间距倒数的 **2π** 倍

(4)

倒格矢与正格矢的点乘等于一个整数的 **2π** 倍

(5)

一物理量在倒格子与正格子中互为傅立叶变换

2、布里渊区

原点出发作所有倒格点的位置矢量的垂直平分面。

第一布里渊区：包含原点的区域

第二布里渊区：原点出发只跨过一个垂直平分面的所有点的集合



威格纳—赛兹原胞

布区特点：

每个布区体积等于一个倒格子原胞体积

每个布区各部分，经过平移，一个布区与另一个布区重合

每个布区都是以原点为中心对称分布

(3) 典型格子的布里渊区

二维正方格子

晶格基矢

$$\vec{a}_1 = ai$$

$$\vec{a}_2 = aj$$

倒格子基矢

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

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

距原点最近的四个倒格点坐标

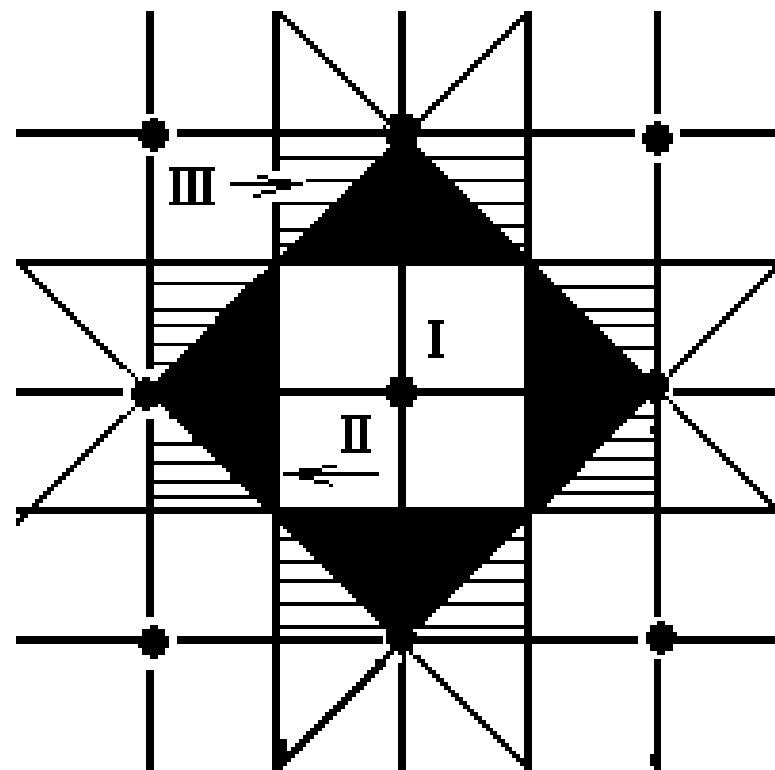
$$\frac{2\pi}{a}(\pm 1, 0)$$

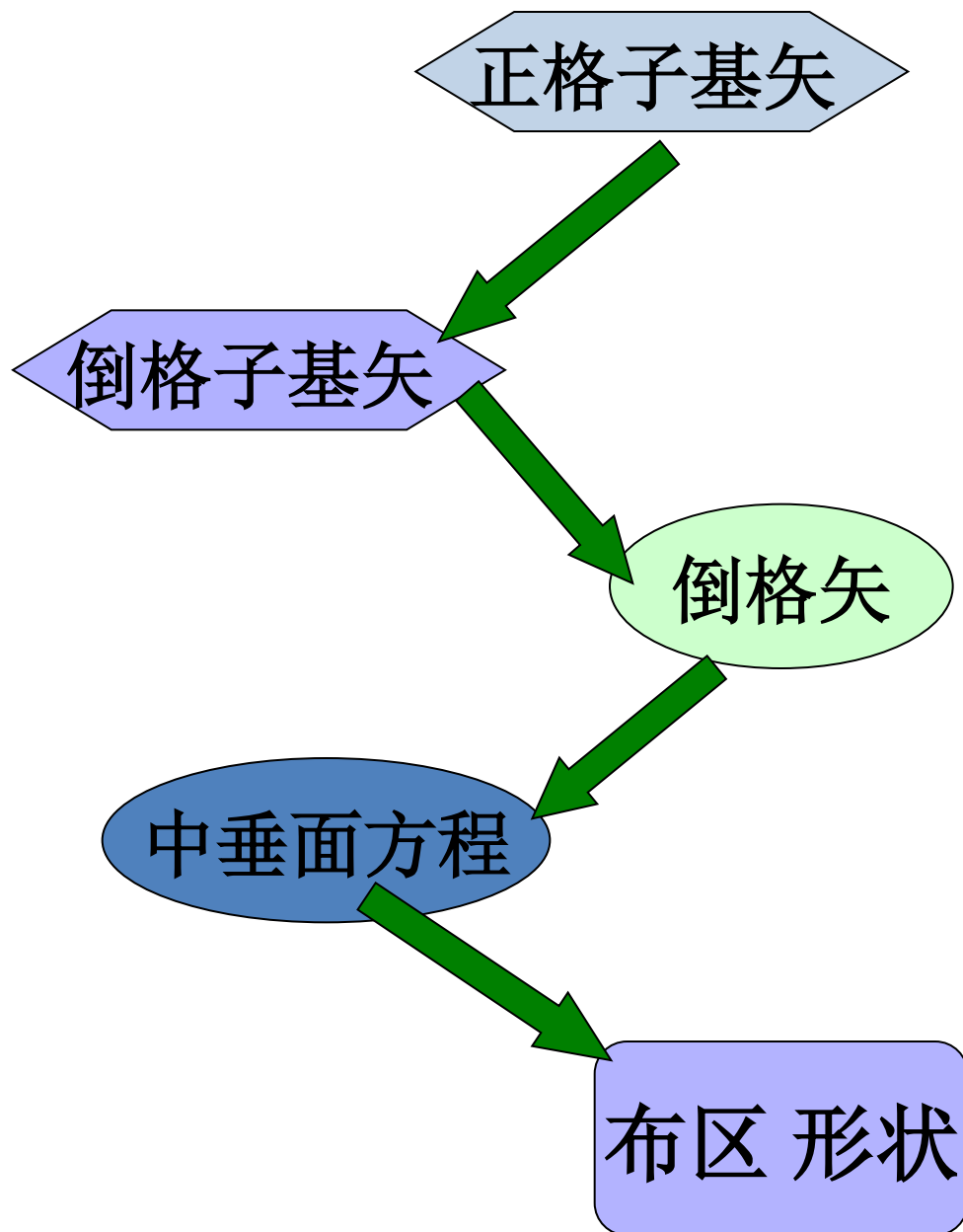
$$\frac{2\pi}{a}(0, \pm 1)$$

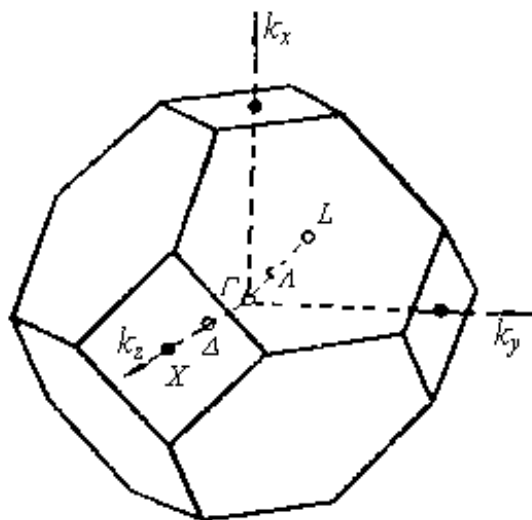
四条中垂线方程

$$k_x = \pm \frac{\pi}{a}$$

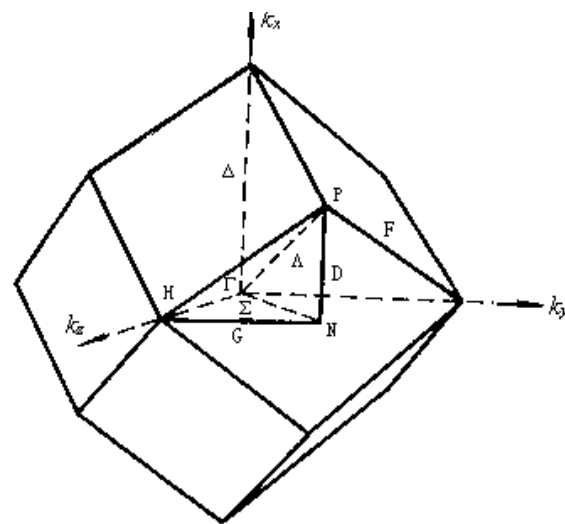
$$k_y = \pm \frac{\pi}{a}$$







正格子：面心立方
第一布区：截角八面体



正格子：体心立方
第一布区：十二面体