第七节 倒格子

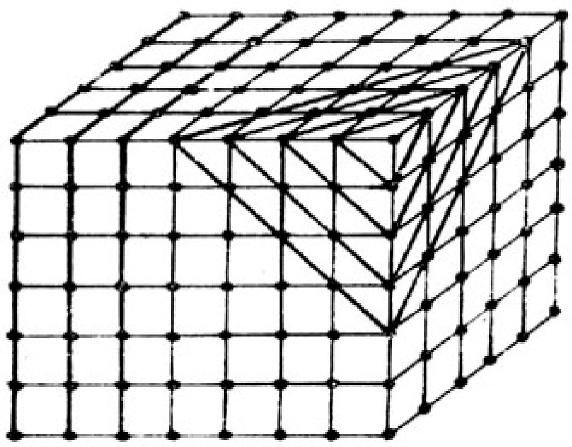
- 晶面的特征：

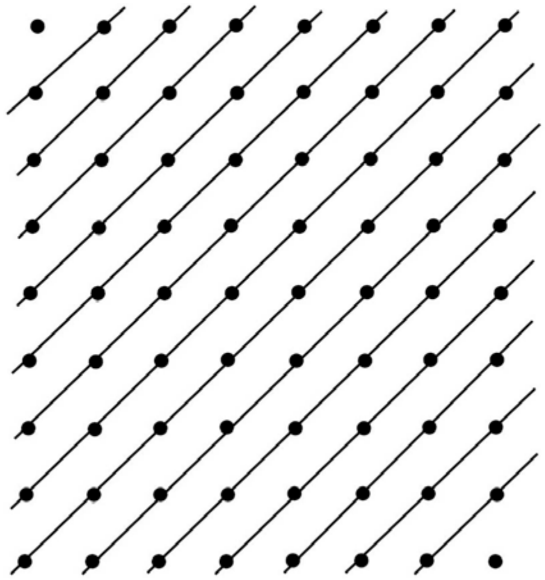
$$\cos\alpha, \cos\beta, \cos\gamma$$

$$\Downarrow$$

$$r, s, t$$

- 晶面法线方向





- 晶面间距

- 引入一个矢量表征晶面族的特征

- 矢量的**方向**代表晶面族的法线方向

- 矢量的**模量**正比于晶面族面间距的倒数

- 该矢量称为该晶面族对应的
  倒易矢量

- 倒易矢量的端点称为该晶面族对应的
  倒易点

- 当坐标原点一定，
  倒易点就表征了晶面族的特征。

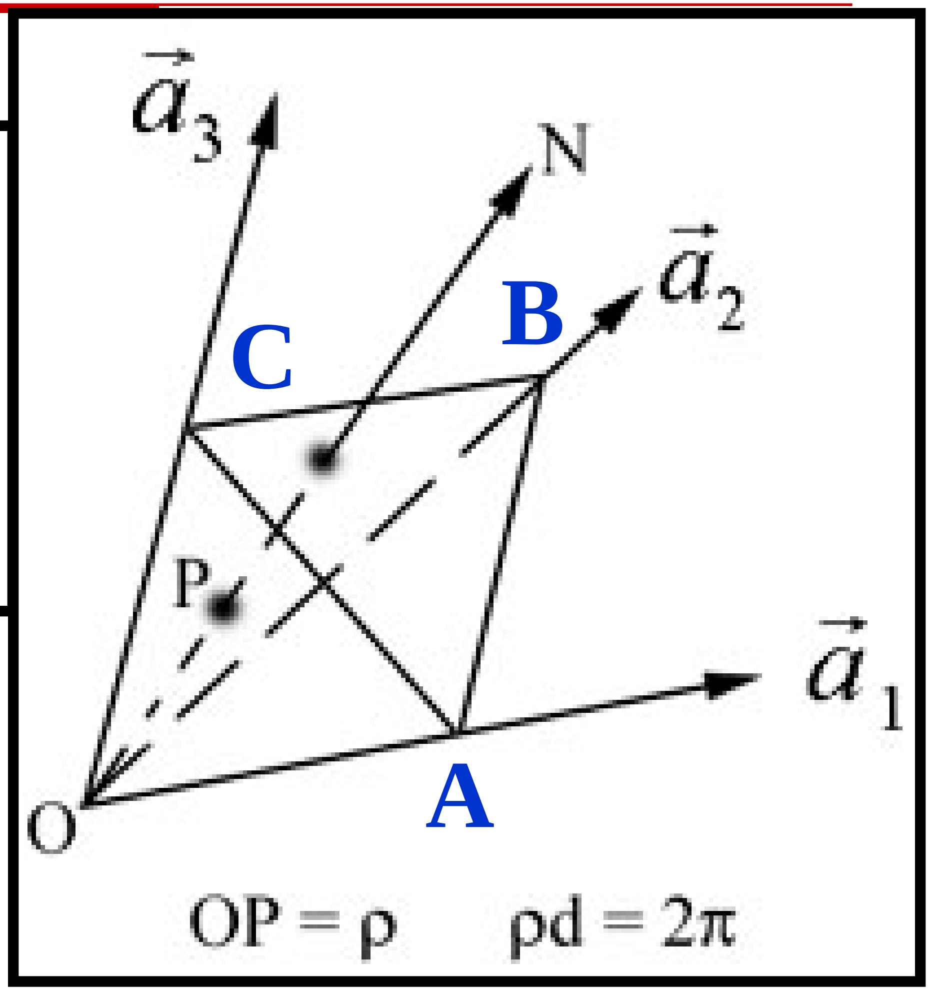
- 将所有晶面族对应的倒易点在空间无限地周期性平移，就得到**倒易点阵**。

- 将倒易点阵连接成网格状，就成了**倒格子**。

1. 倒格子的引入

从 O 做晶面ABC的法线ON, 在法线上取OP=ρ, 使

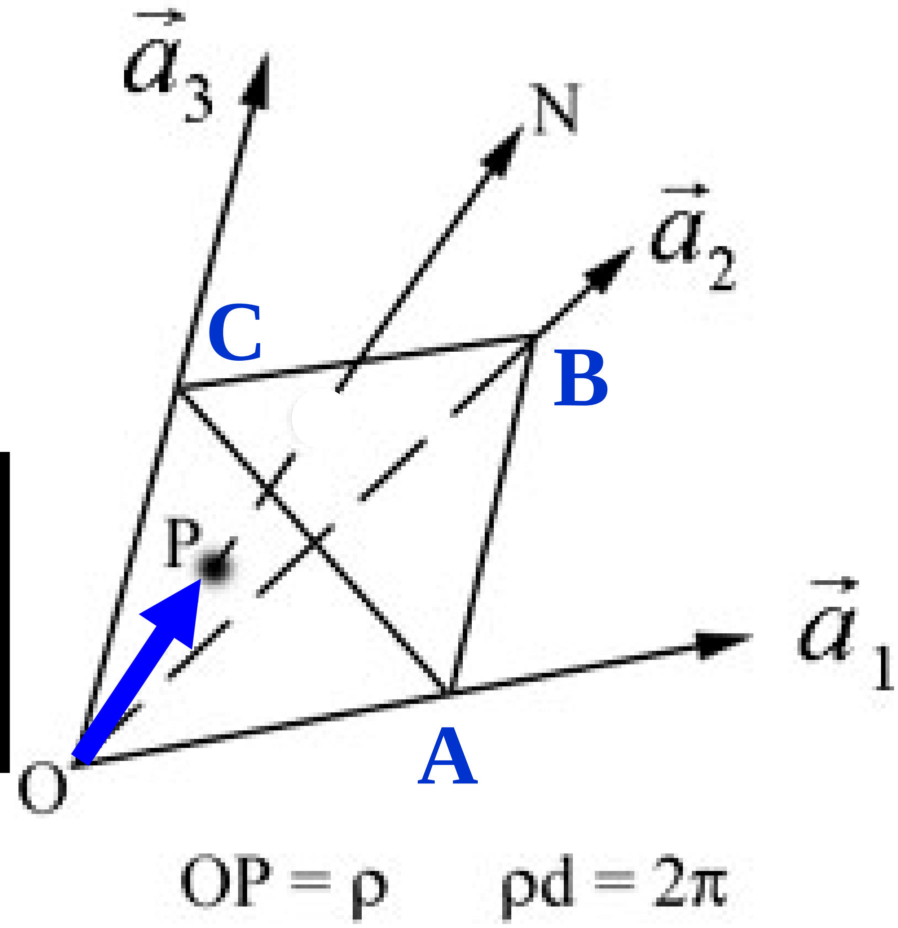
$$\rho \times d = 2\pi$$



d 为晶面族ABC的面间距

矢量 $\vec{OP}$：

- **方向**代表了晶面族法线方向



- **模量**正比于晶面族面间距的倒数

$\vec{OP}$ ---- 晶面族

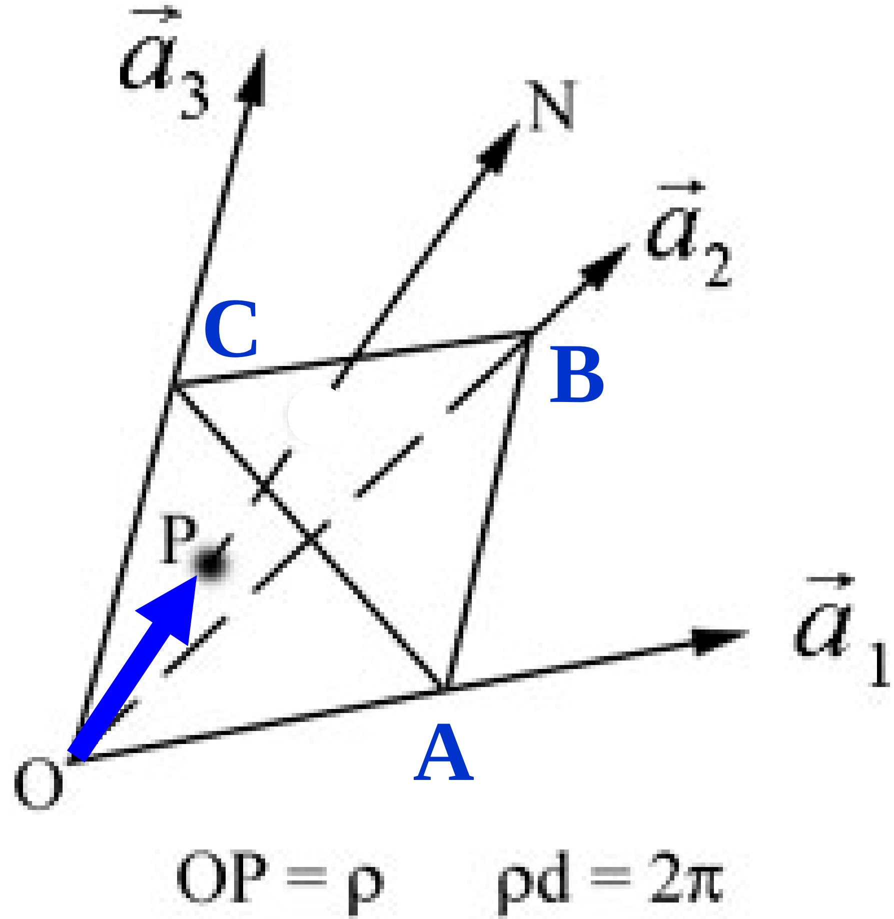
ABC对应

倒易矢量

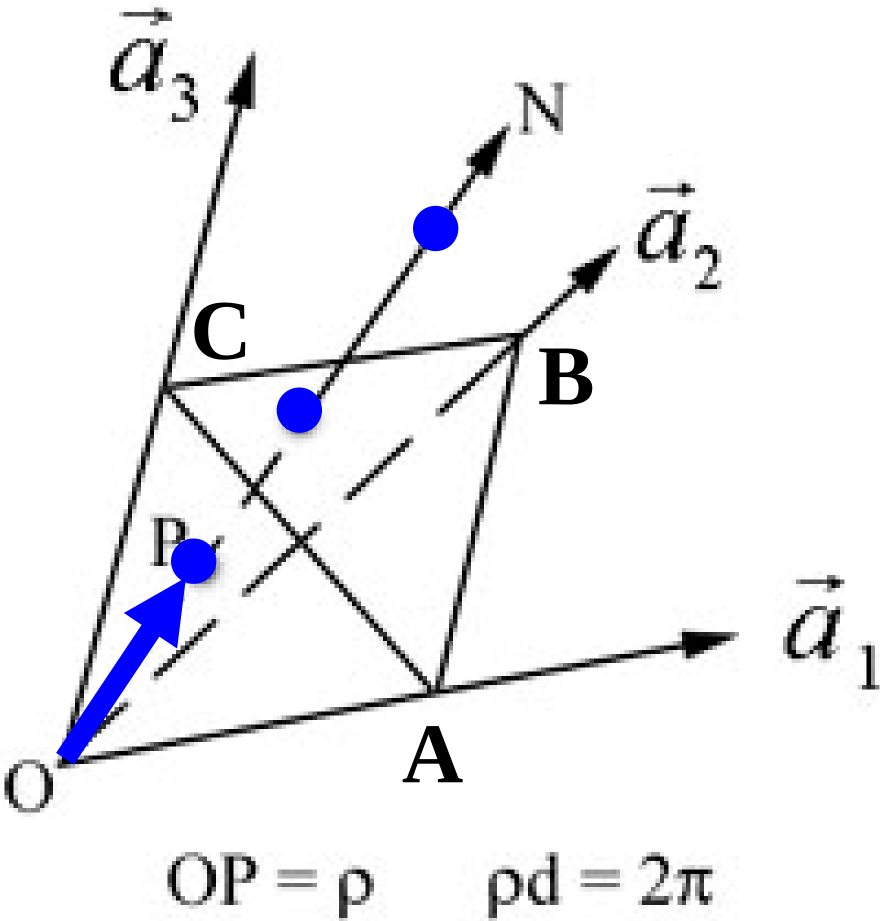
P ---- 晶面族

ABC对应

的倒易点



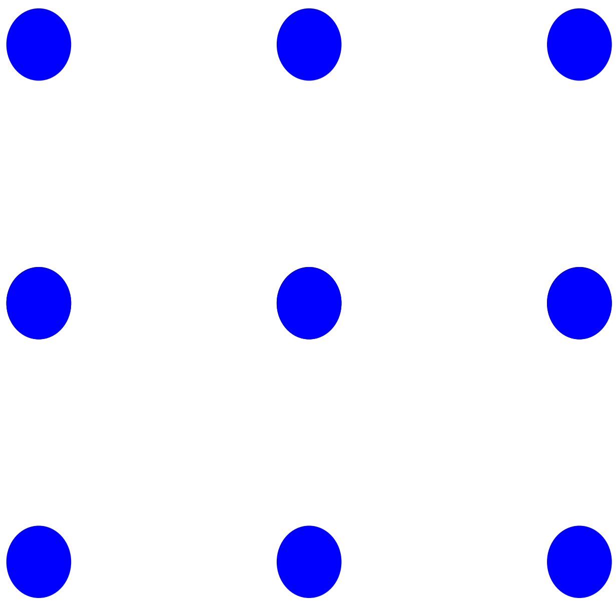
以 $\left|\overrightarrow{OP}\right|$ 为周期，沿 $\overrightarrow{OP}$ 方向无限平移，得到一系列新点子



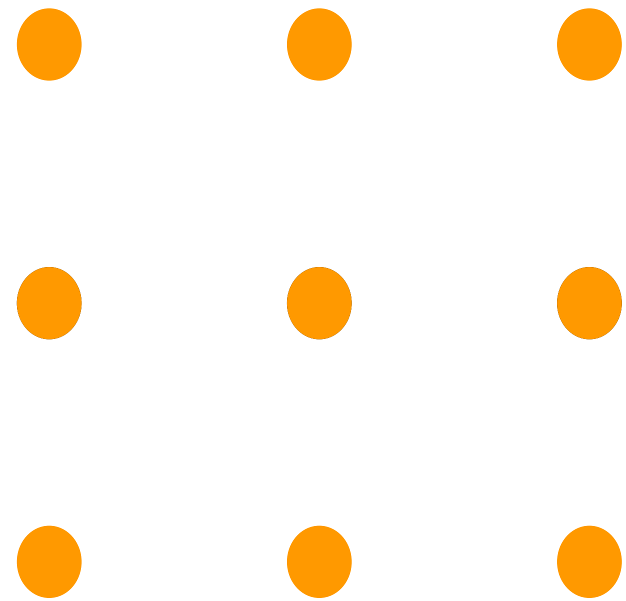
- 对每一族晶面，都能做出一系列倒易点，得到一个新点阵 —— 倒易点阵

- 倒易点阵连成的格子为倒格子。
- 结点连成的晶格为正格子。

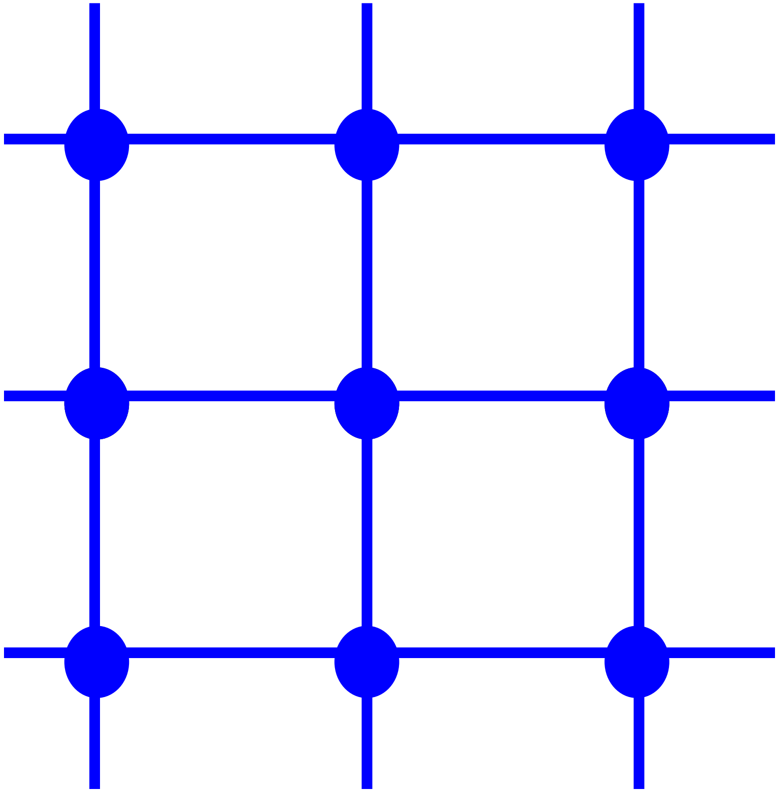
正点阵



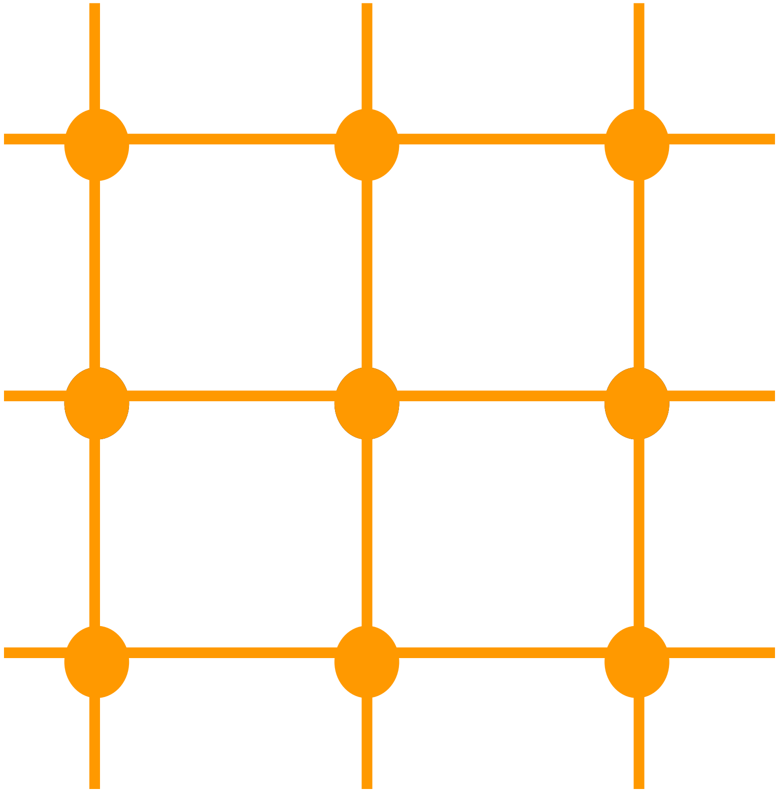
倒易点阵



正格子



倒格子



2. 倒格子基矢

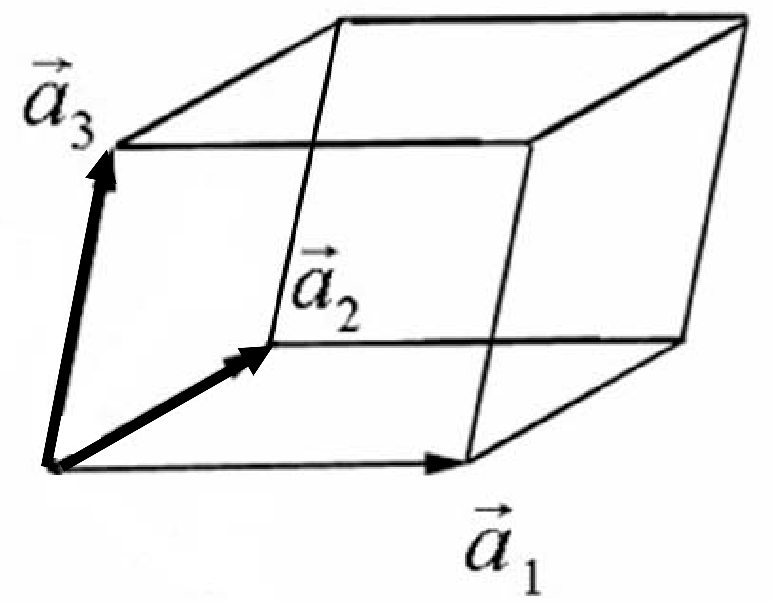
取正格子基矢为 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

在正格子原胞中，

a_1a_2、a_2a_3、a_3a_1

面各自都有对应

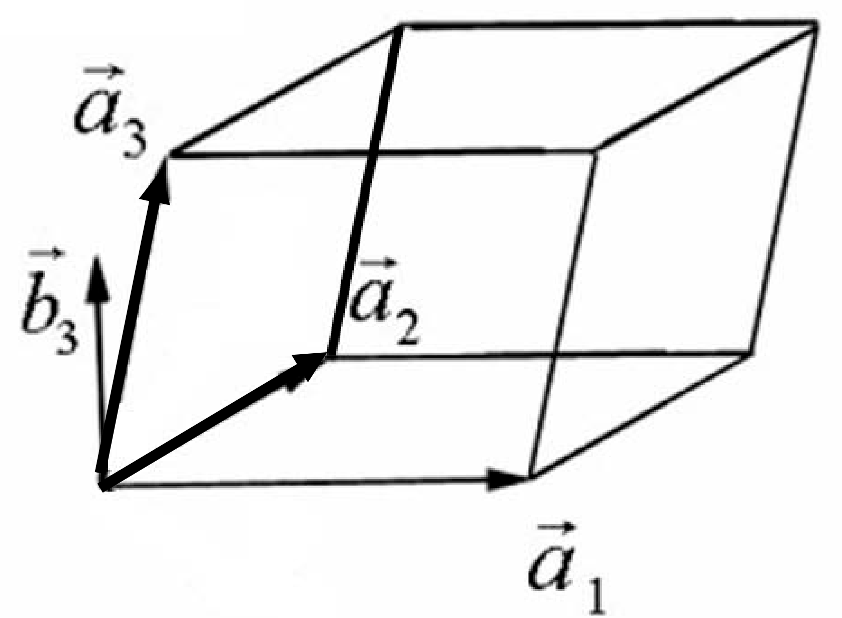
的晶面族。



设a_1a_2晶面族的面间距为 d_3

做 $\vec{b}_3 \perp a_1a_2$

使 $\left|\vec{b}_3\right| = 2\pi / d_3$

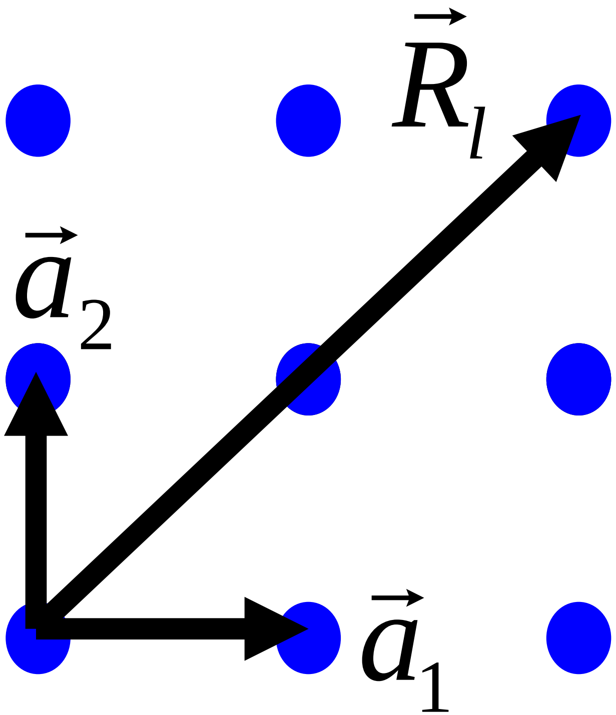


对**a$_2$a$_3$**面，有 $\left|\vec{b}_1\right| = 2\pi / d_1$

对**a$_3$a$_1$**面，有 $\left|\vec{b}_2\right| = 2\pi / d_2$

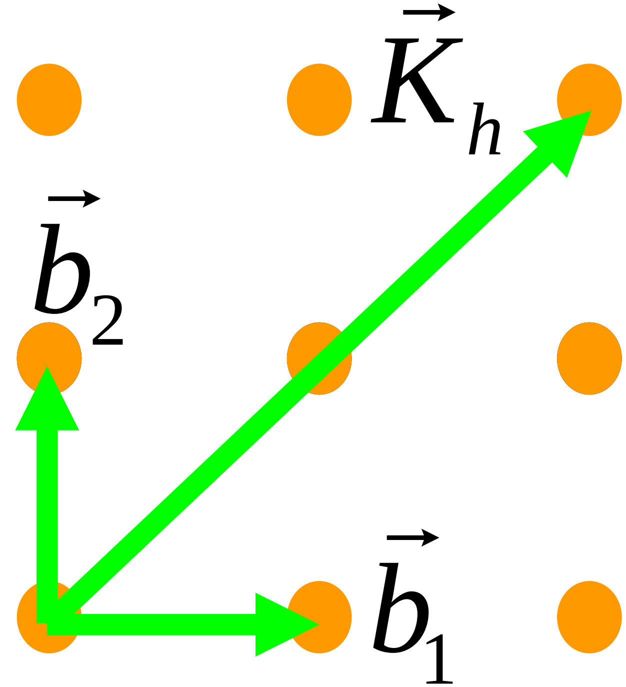
$\vec{b}_1 \quad \vec{b}_2 \quad \vec{b}_3$ 为倒格子基矢

正格矢



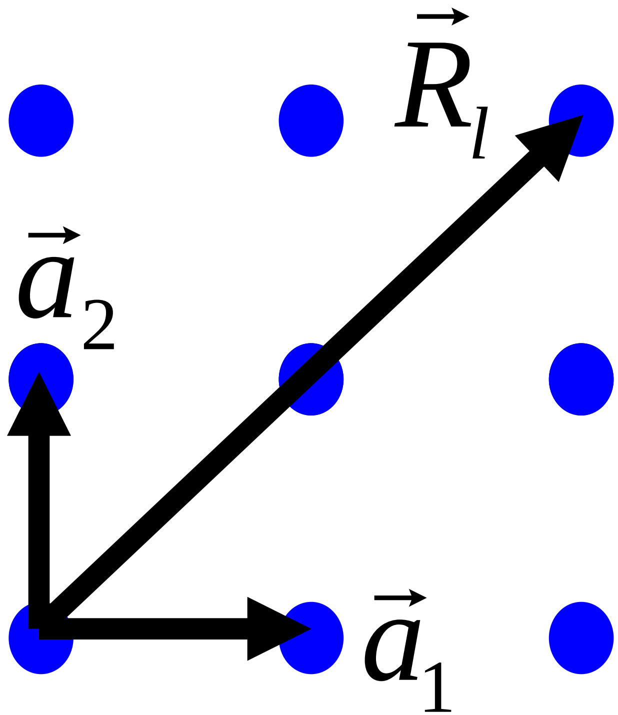
$$\vec{R}_l = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2 + p\vec{a}_3$$

倒格矢



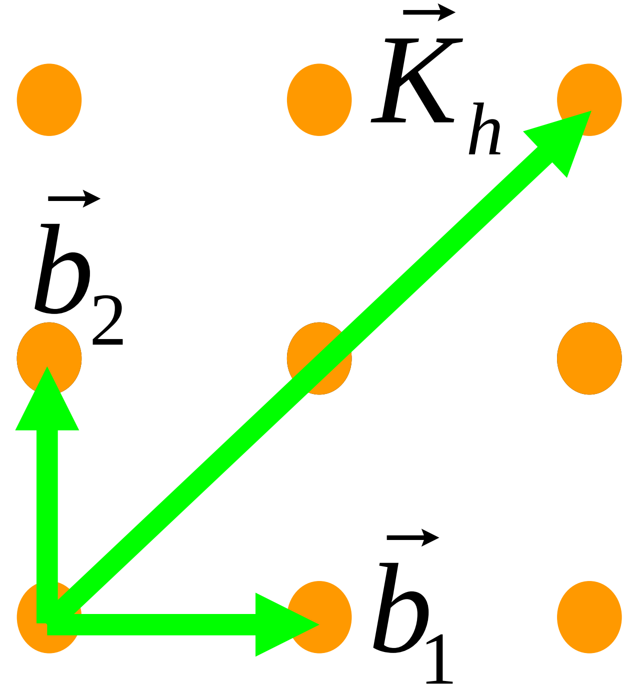
$$\vec{K}_h = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3$$

正格矢



$$\vec{R}_l = 2\vec{a}_1 + 2\vec{a}_2 + 0\vec{a}_3$$

倒格矢



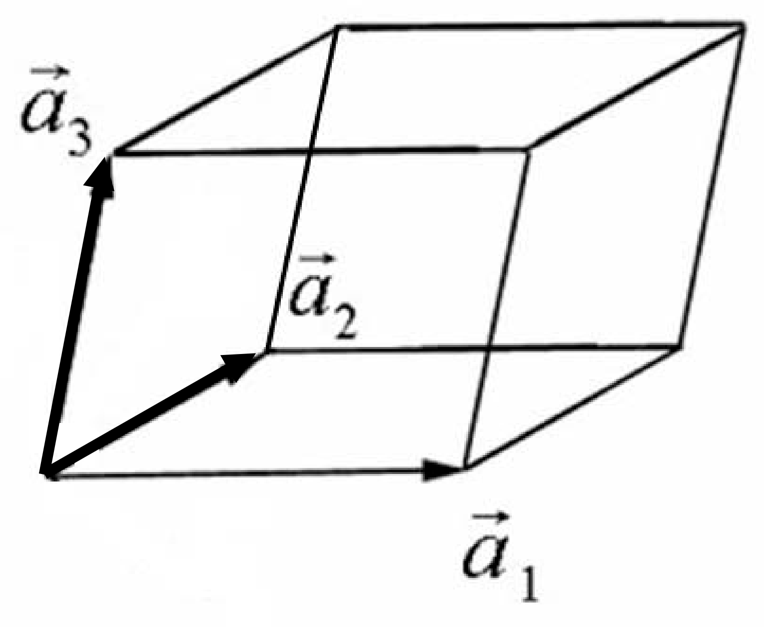
$$\vec{K}_{220} = 2\vec{b}_1 + 2\vec{b}_2 + 0\vec{b}_3$$

3、倒格子基矢与正格子基矢的解析关系

正格子原胞体积为： $\Omega = S_{a_a a_2} h$

$S_{a_1 a_2}$ 为平行六面体的底面积

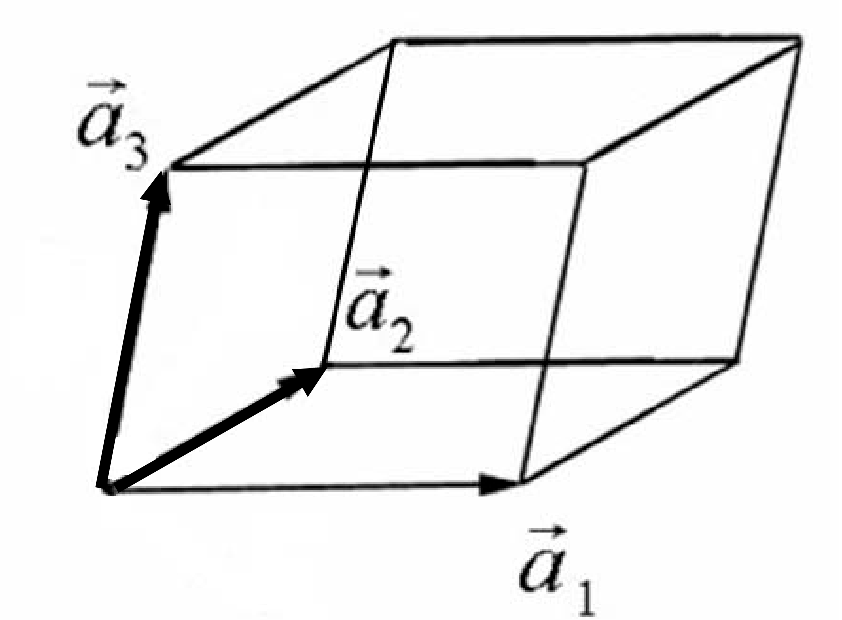
h 为平行六面体的高



高 h 等于晶面族$\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2$的面间距 d_3

底面积：

$$S_{a_1a_2} = \left|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2\right|$$



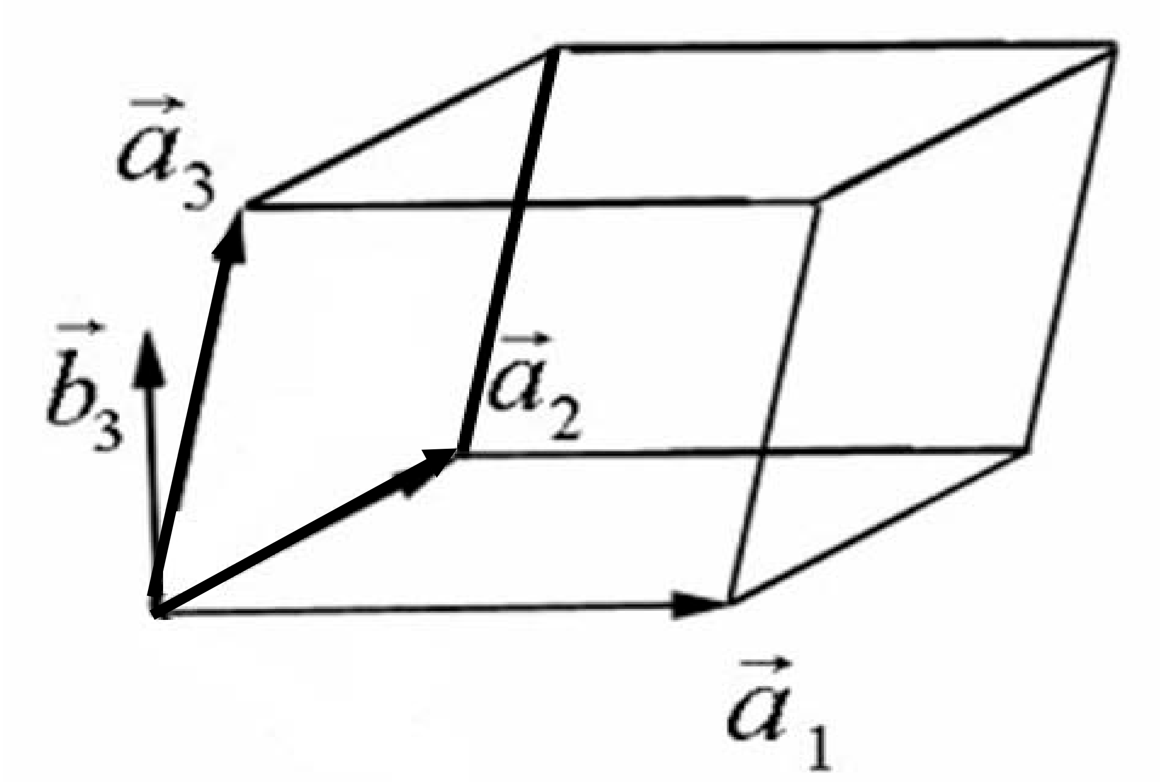
所以 $$\Omega = d_3\left|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2\right|$$

$$\longrightarrow \quad \frac{1}{d_3} = \frac{\left|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2\right|}{\Omega}$$

根据定义 $\left|\vec{b}_3\right| = 2\pi / d_3$

$$\longrightarrow \left|\vec{b}_3\right| = \frac{2\pi\left|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2\right|}{\Omega}$$

由于$\vec{b}_3$ 的方向与 $\vec{a}_1 \times \vec{a}_2$的方向一致



由于 $\vec{b}_3$ 的方向与 $\vec{a}_1 \times \vec{a}_2$ 的方向一致

所以

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

同样可得：

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

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

倒格子基矢与正格子基矢的解析关系

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

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

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

很容易证明：

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

4. 倒格子的性质

(1). 倒易点阵与正点阵互为倒易关系

(2). 正格子原胞体积Ω与倒格子原胞体积Ω*之间满足关系:

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

- 证明:

正格子原胞体积 Ω 与倒格子原胞体积

Ω*之间满足关系:

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

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

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

$$\boxed{\vec{A}\times\left(\vec{B}\times\vec{C}\right)=\left(A\cdot C\right)\cdot B-\left(A\cdot B\right)\cdot C}$$

$$\left(\vec{a}_3\times\vec{a}_1\right)\times\left(\vec{a}_1\times\vec{a}_2\right)$$
$$=\left[\left(\vec{a}_3\times\vec{a}_1\right)\cdot\vec{a}_2\right]\cdot\vec{a}_1-\left[\left(\vec{a}_3\times\vec{a}_1\right)\cdot\vec{a}_1\right]\cdot\vec{a}_2$$
$$=\Omega\vec{a}_1$$

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

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

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

得证！

(3). 正格子晶面族 $(h_1h_2h_3)$ 和 倒格矢

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

正交。

这表明：

($h_1h_2h_3$)晶面的法线适量为：

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

- **证明:**

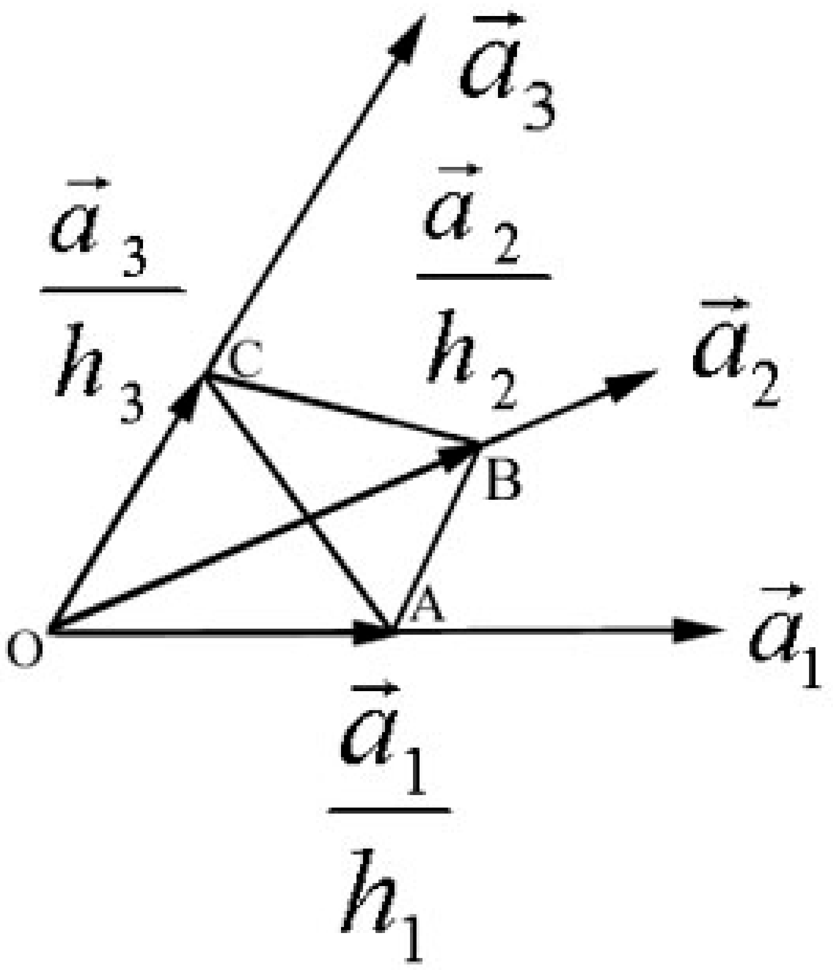
正格子晶面族 ($h_1h_2h_3$) 和 倒格矢

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

正交。

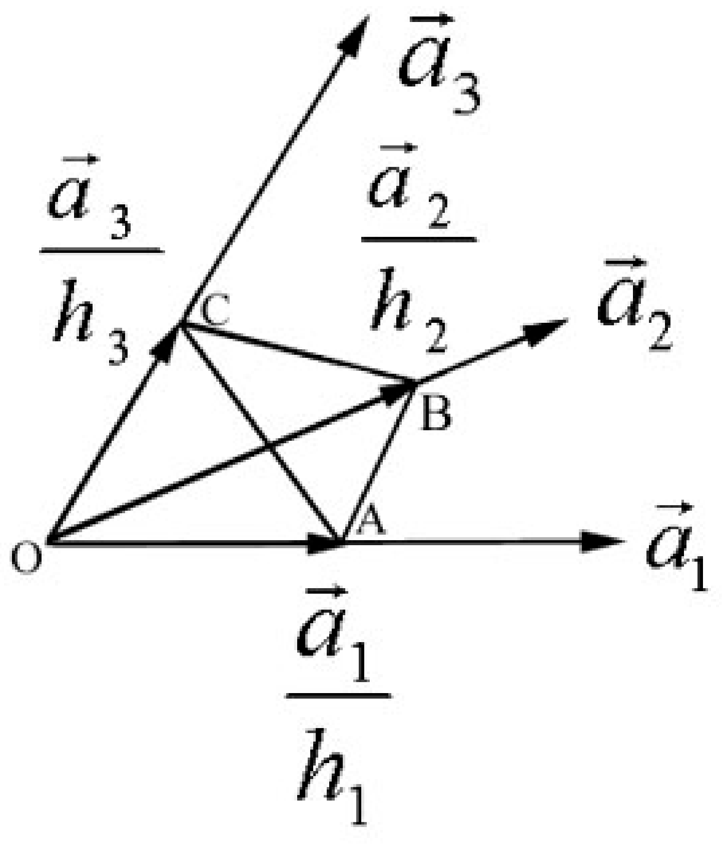
晶面族($h_1h_2h_3$) 中最靠近原点的晶面ABC在基矢上的截距为:

$$\frac{\vec{a}_1}{h_1},\frac{\vec{a}_2}{h_2},\frac{\vec{a}_3}{h_3}$$



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

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

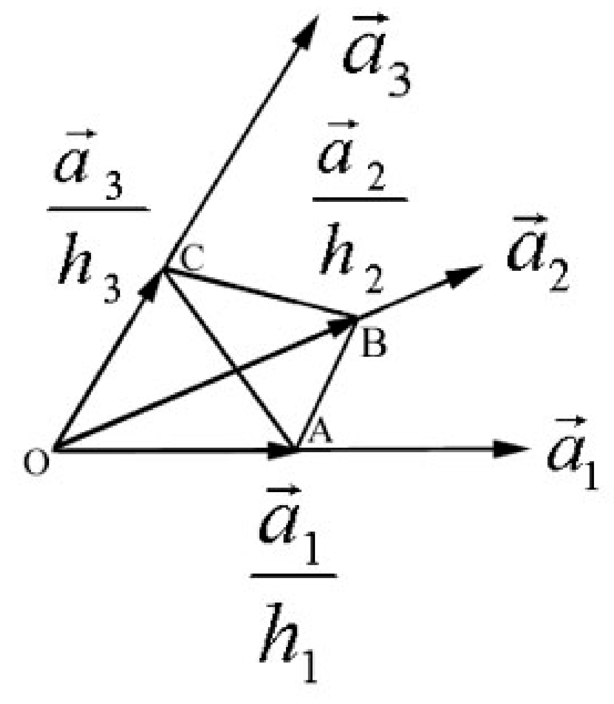


矢量 $\vec{CA}$ 和 $\vec{CB}$ 在ABC平面内

要证明 $\vec{K}_h$ 与晶面族 $(h_1h_2h_3)$正交

只需证明：

$$\vec{K}_h \cdot \vec{CA} = \vec{K}_h \cdot \vec{CB} = 0$$



利用 $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$ ，很容易证明：

$$\vec{K}_h \cdot \vec{CA} =$$

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

$$= \vec{b}_1 \cdot \vec{a}_1 - \vec{b}_3 \cdot \vec{a}_3 = 0$$

$$\vec{K}_h \cdot \vec{CB} =$$

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

$$= \vec{b}_2 \cdot \vec{a}_2 - \vec{b}_3 \cdot \vec{a}_3 = 0$$

$$\vec{K}_h \cdot \vec{CA} = \vec{K}_h \cdot \vec{CB} = 0$$

$\vec{CA}$和$\vec{CB}$ **在($h_1h_2h_3$)面内，不平行**

$\vec{K}_h$ **与晶面族($h_1h_2h_3$)正交**

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

与晶面族 $(\mathbf{h_1 h_2 h_3})$ 正交

倒格矢 $\vec{K}_h = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3$

就是晶面族$(\mathbf{h_1 h_2 h_3})$的法线

得证！

(4). 倒格矢 $\vec{K}_h = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3$

的模量正比于晶面族$(h_1h_2h_3)$面间距的倒数。

($h_1h_2h_3$)晶面的面间距：

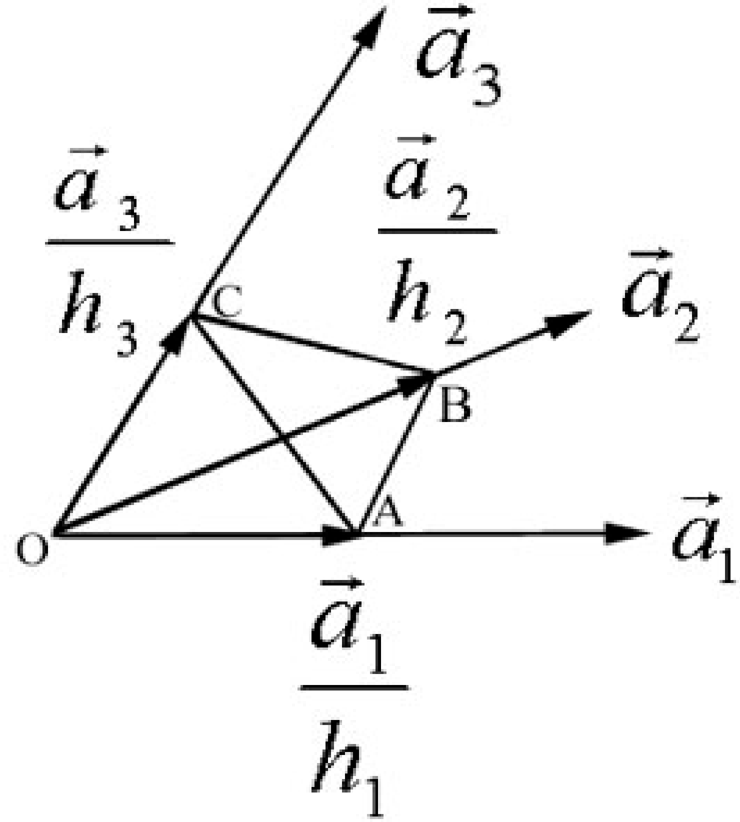
$$d_{h_1h_2h_3} = \frac{2\pi}{\left|\overrightarrow{K}_{h_1h_2h_3}\right|}$$

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

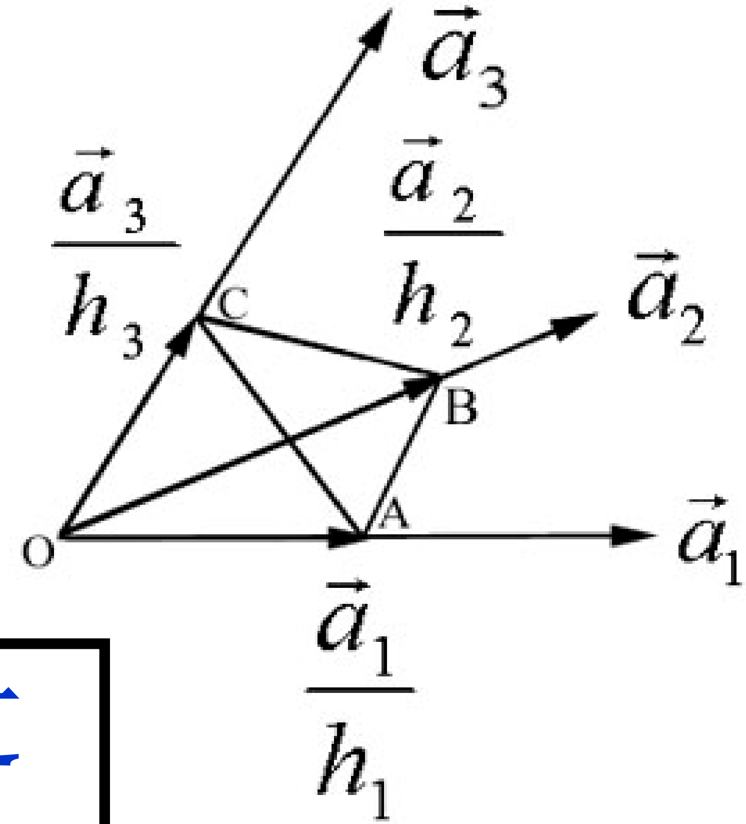
- **证明:**

倒格矢 $\vec{K}_h = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3$

的模量正比于晶面族$(h_1h_2h_3)$面间距的倒数。

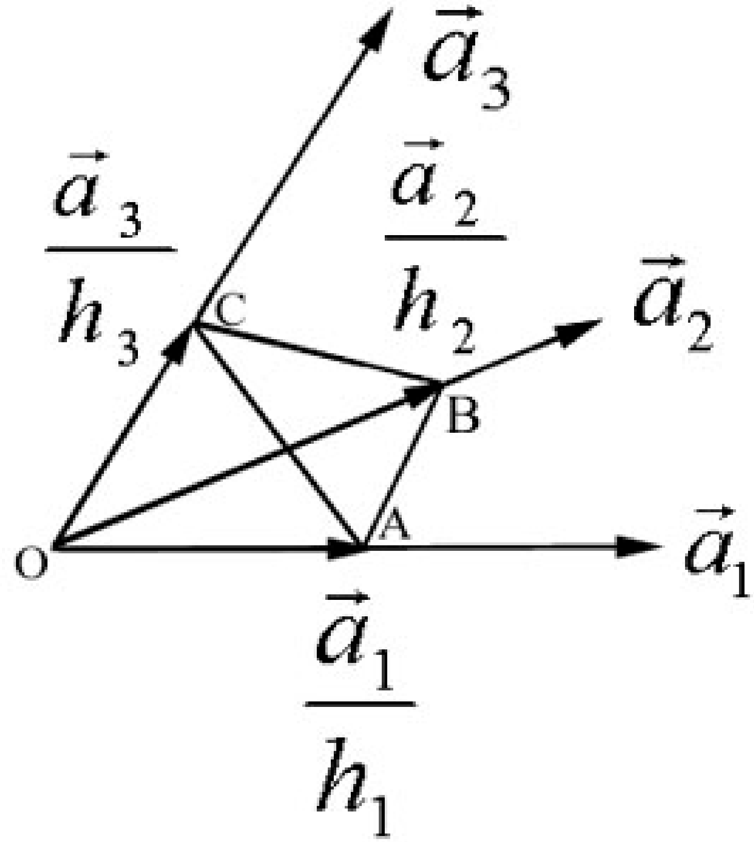


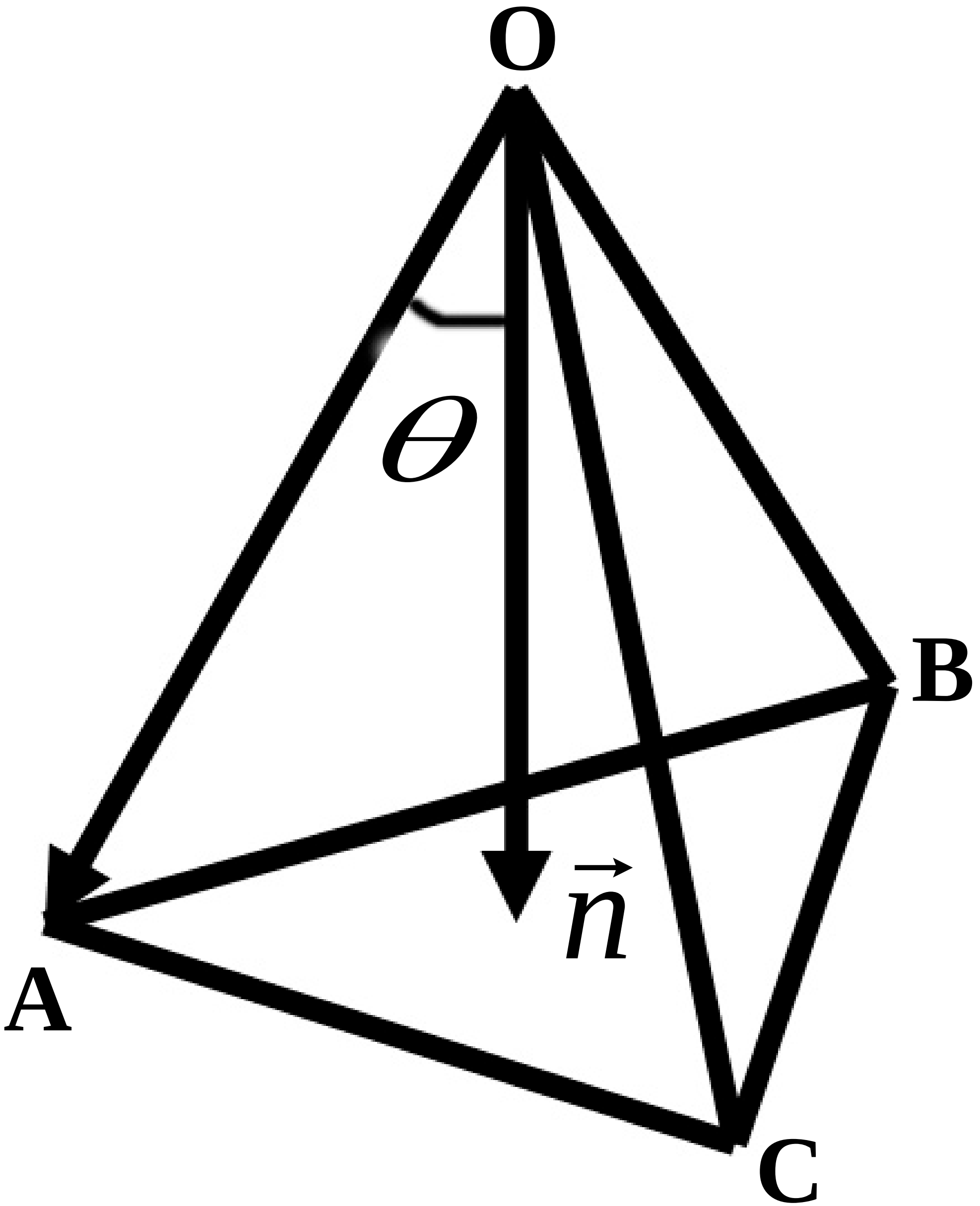
ABC面是晶面族($h_1h_2h_3$)中距离原点最近的晶面



原点O也是格点，过原点O也存在一个晶面与ABC面平行

晶面族的面间距 d_{h1h2h3}等于坐标原点O到ABC面的垂直距离。





$$h=\left|\overrightarrow{OA}\right|\cos\theta$$

$$=\overrightarrow{OA}\cdot\vec{n}$$

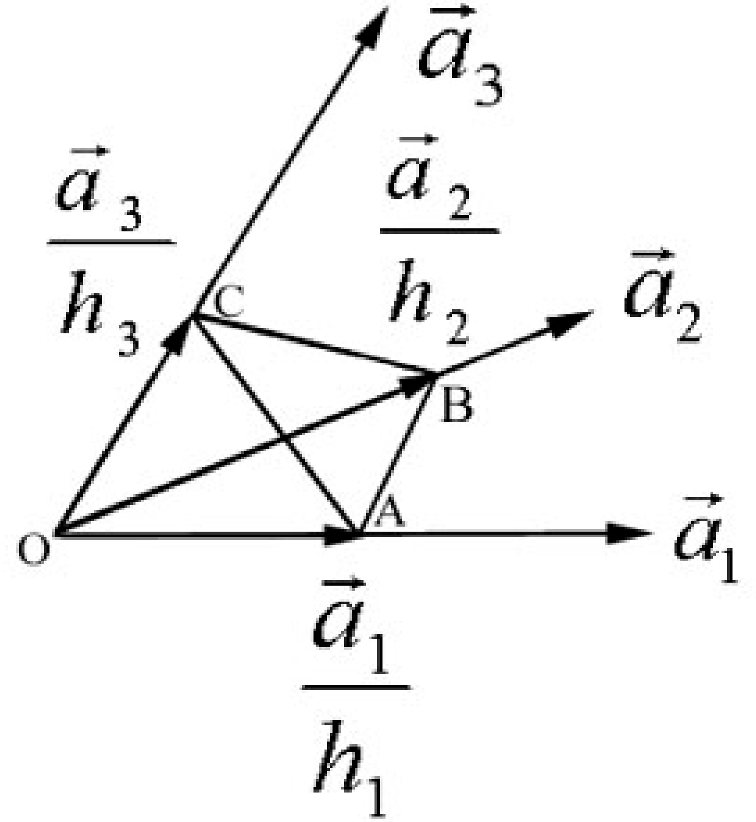
$\vec{n}$ 为ABC面法线的单位矢量

晶面族($h_1h_2h_3$) 法线为

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

晶面族($h_1h_2h_3$) 法线的单位矢量为

$$\vec{n} = \frac{\vec{K}_h}{\left|\vec{K}_h\right|}$$



晶面族的面间距:

$$d_{h_1h_2h_3} = \frac{\vec{a}_1}{h_1} \bullet \frac{\vec{K}_h}{\left|\vec{K}_h\right|}$$

$$d_{h_1h_2h_3} = \frac{\vec{a}_1}{h_1} \cdot \frac{(h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3)}{\left|\vec{K}_h\right|}$$

$$= \frac{2\pi}{\left|\vec{K}_h\right|}$$

倒格矢 $\vec{K}_h$ 的模量正比于晶面族($h_1h_2h_3$)面间距的倒数。

得证！

(5). 倒格矢 $\vec{K}_h$ 与正格矢 $\vec{R}_l$ 恒满足

$$\vec{R}_l \cdot \vec{K}_h = 2\pi\mu$$

$$(\mu = 0, \pm 1, \pm 2 \cdots\cdots)$$

$$\vec{R}_l \cdot \vec{K}_h = 2\pi\mu$$

$$(\mu = 0, \pm 1, \pm 2 \cdots\cdots)$$

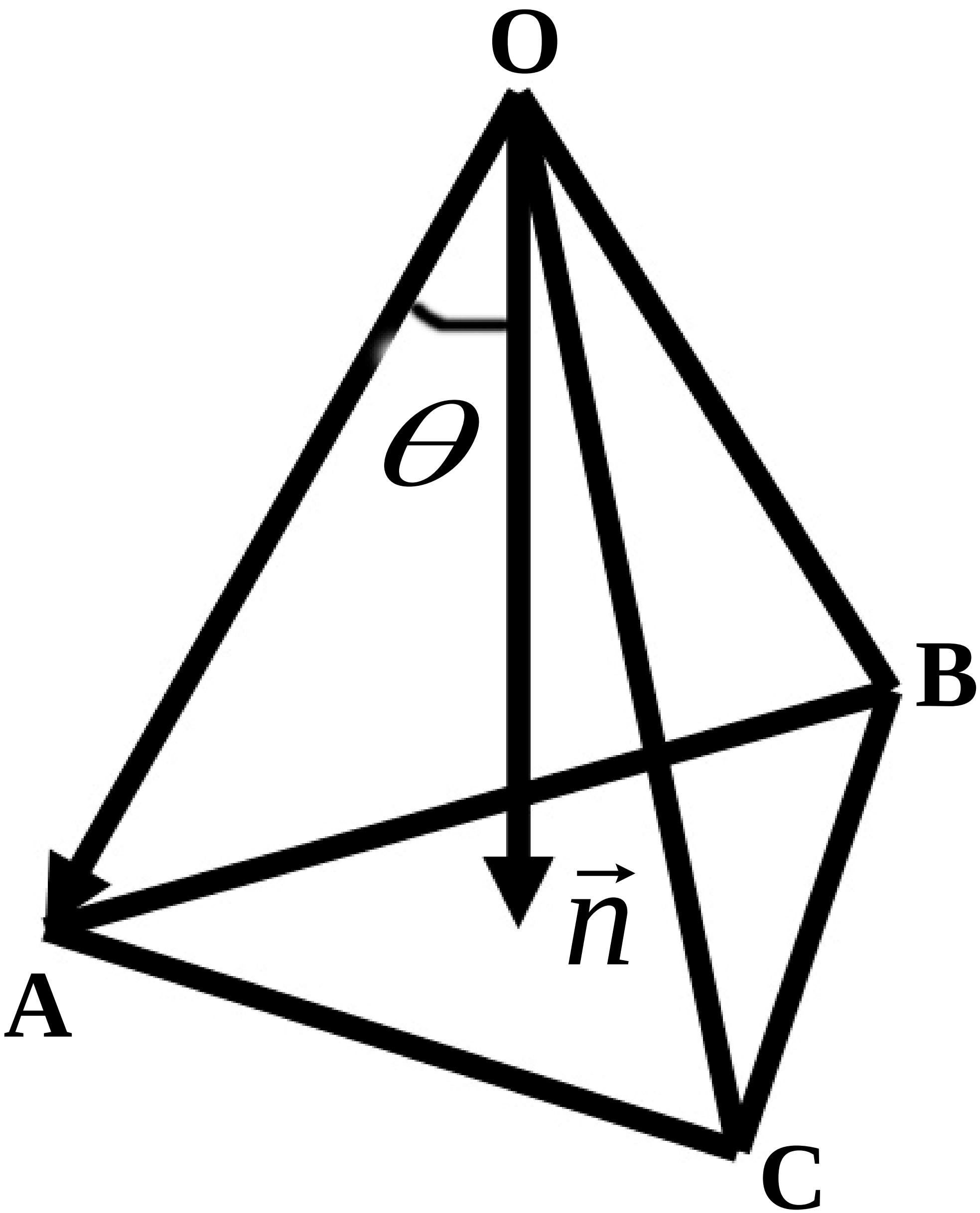
反过来，若两个矢量恒满足该关系，其中一个是正格矢，另一个必定为倒格矢。

- 证明:

倒格矢 $\vec{K}_h$ 与正格矢 $\vec{R}_l$ 恒满足

$$\vec{R}_l \cdot \vec{K}_h = 2\pi\mu$$

$$(\mu = 0, \pm 1, \pm 2 \cdots\cdots)$$



$$h = \left|\vec{OA}\right| \cos\theta$$

$$= \vec{OA} \cdot \vec{n}$$

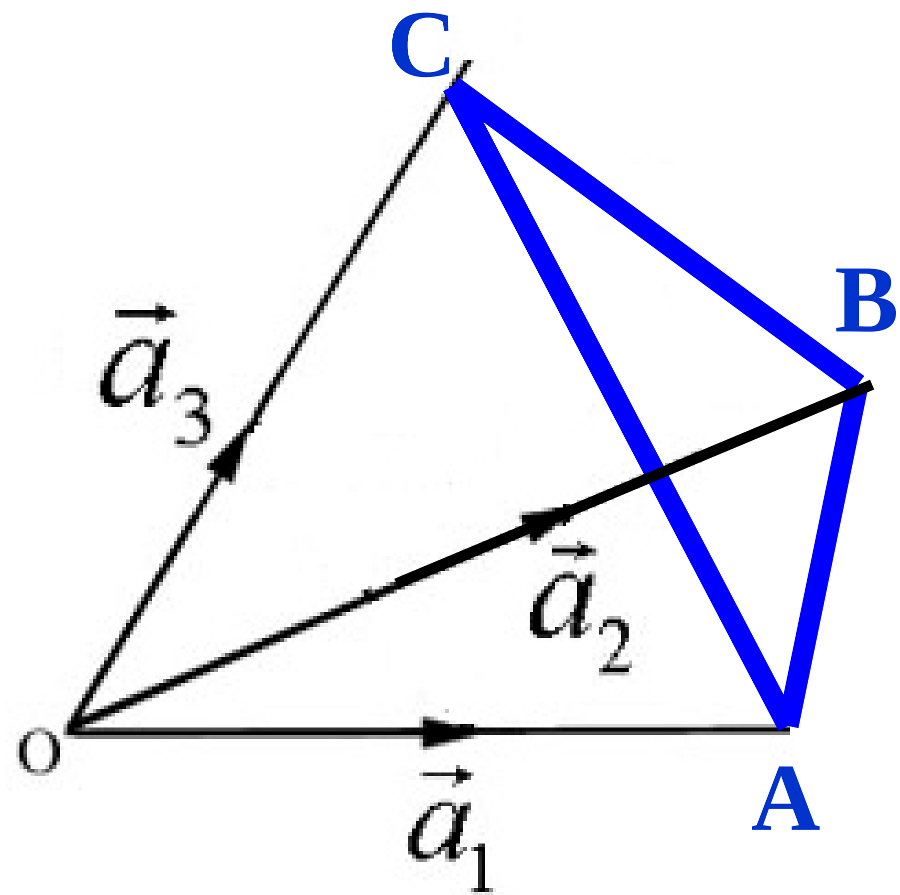
$\vec{n}$ 为ABC面法线的单位矢量

在晶面族$(h_1h_2h_3)$

中，若晶面ABC

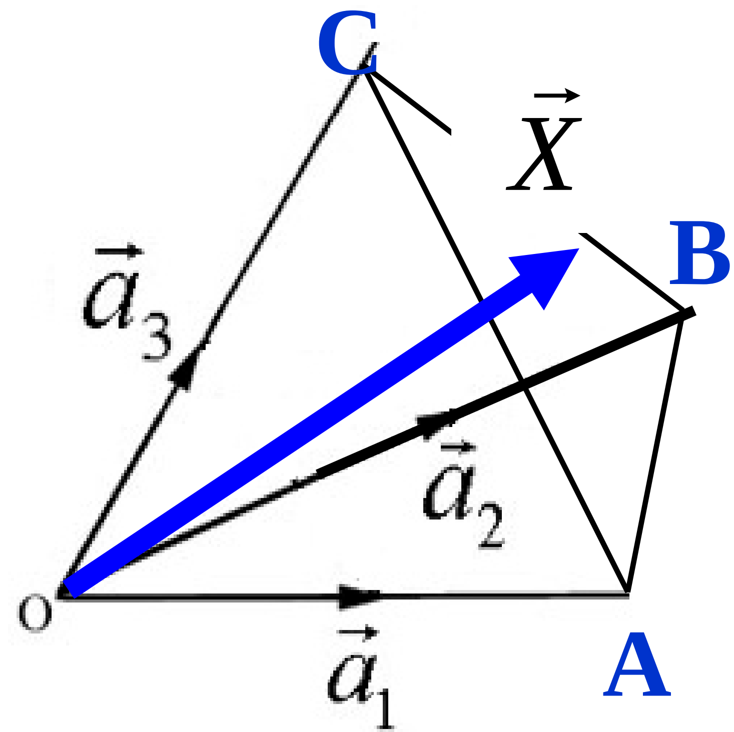
到原点的距离为

$\mu d_{h_1h_2h_3}$



晶面ABC的方程为:

$$\vec{X} \cdot \frac{\vec{K}_h}{\left|\vec{K}_h\right|} = \mu d_{h_1 h_2 h_3}$$



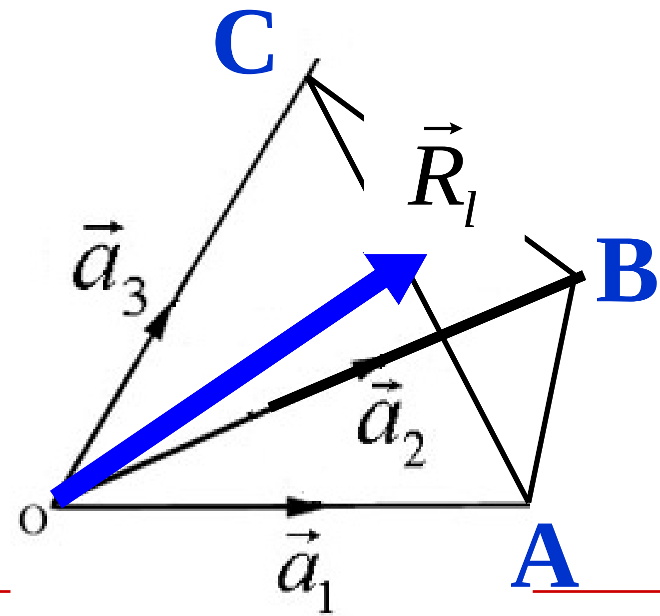
$$(\mu = 0, \pm, \pm 2, \ldots\ldots)$$

$\vec{X}$ 为晶面上任一点的位矢

对于该晶面上的格矢

$$\vec{R}_l = l_1\vec{a}_1 + l_2\vec{a}_2 + l_3\vec{a}_3$$

关系也成立



$$\vec{R}_l \bullet \frac{\vec{K}_h}{\left|\vec{K}_h\right|} = \mu d_{h_1 h_2 h_3}$$

$$(\mu = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots\ldots)$$

而 $$d_{h_1h_2h_3} = \frac{2\pi}{\left|\vec{K}_h\right|}$$

$$\Downarrow$$

$$\vec{R}_l \cdot \frac{\vec{K}_h}{\left|\vec{K}_h\right|} = \mu d_{h_1h_2h_3} = \mu \frac{2\pi}{\left|\vec{K}_h\right|}$$

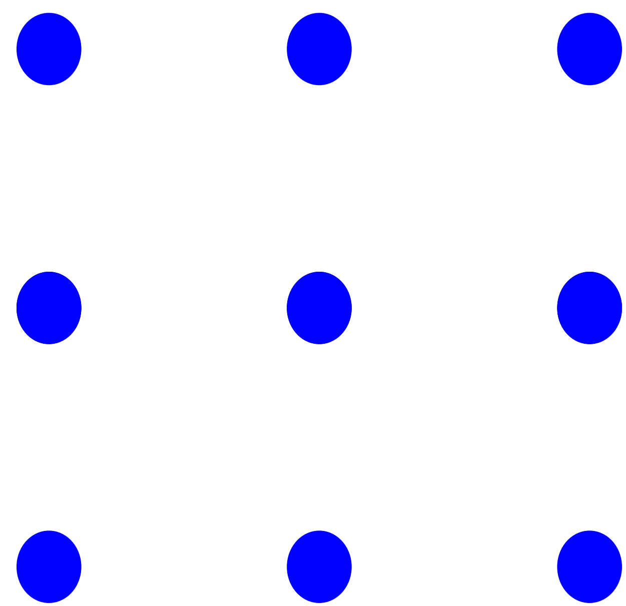
$$\vec{R}_l \cdot \vec{K}_h = 2\pi\mu$$

$$(\mu = 0, \pm 1, \pm 2 \cdots\cdots)$$

反过来，若两个矢量恒满足该关系，其中一个是正格矢，另一个必定为倒格矢。

5．倒格子所反映的物理本质

由于晶体周期性，晶体中任何一点 $\vec{r}$ 的物理量 $\Gamma\left(\vec{r}\right)$ 也具有周期性



其数学表达式为：

$$\Gamma\left(\vec{r}+\vec{R}_l\right)=\Gamma\left(\vec{r}\right)$$

$\vec{R}_l = l_1\vec{a}_1 + l_2\vec{a}_2 + l_3\vec{a}_3$ 为正格矢，

代表了晶体的周期性.

将 $\Gamma(\vec{r})$ 和 $\Gamma(\vec{r}+\vec{R}_l)$ 展成Fourier级数

$$\Gamma(\vec{r}) = \sum_{h_1 h_2 h_3} \Gamma(\vec{K}_h) e^{i\vec{K}_h \cdot \vec{r}}$$

$$\Gamma(\vec{r}+\vec{R}_l) = \sum_{h_1 h_2 h_3} \Gamma(\vec{K}_h) e^{i\vec{K} \cdot (\vec{R}_l + \vec{r})}$$

$$\Gamma\left(\vec{r}+\vec{R}_l\right)=\Gamma\left(\vec{r}\right)$$

$$\Downarrow$$

$$e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}_l}=1 \longrightarrow \vec{K}_l\cdot\vec{R}_l=2\pi\mu$$

$\boxed{\text{由于 } \vec{R}_l \text{ 为正格矢，所以 } \vec{K}_h \text{ 为倒格矢}}$

同一个物理量在正格子中的表述和在倒格子中的表述之间遵守Fourier变换关系。正格子与倒格子之间通过Fourier变换关系联系起来。

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

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

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

倒格子空间中基矢模量的量纲为 m^{-1}

倒格矢 $\vec{K}_h$ 模量的量纲为 m^{-1}

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

倒格矢与波矢的量纲相同，倒格矢 $\vec{K}_h$ 也可以理解为波矢。

波矢空间常被称为状态空间，倒格子空间常被理解为状态空间($\vec{K}$ 空间)

正格子是晶体在坐标空间的体现，倒格子是晶体在状态空间的化身。

6．布里渊区

在倒格子空间中，做某倒格点到它最近邻和次近邻倒格点连线的垂直平分面，由这些**垂直平分面**所围成的**多面体**，该多面体所围成的区域称为**第一布里渊区**

- 除第一布里渊区外，还有第二布里渊区、第三布里渊区以及更高阶的布里渊区。

- 每个布里渊区的体积都等于倒格子原胞的体积。

- 第二、第三布里渊区可平移倒格矢整数倍至第一布里渊区。

- 在各阶布里渊区中再没有其它倒格矢的垂直平分面通过。

(1)、二维正方格子的布里渊区

二维正方格子的原胞基矢为：

$$\vec{a}_1 = a\vec{i} \qquad \vec{a}_2 = a\vec{j}$$

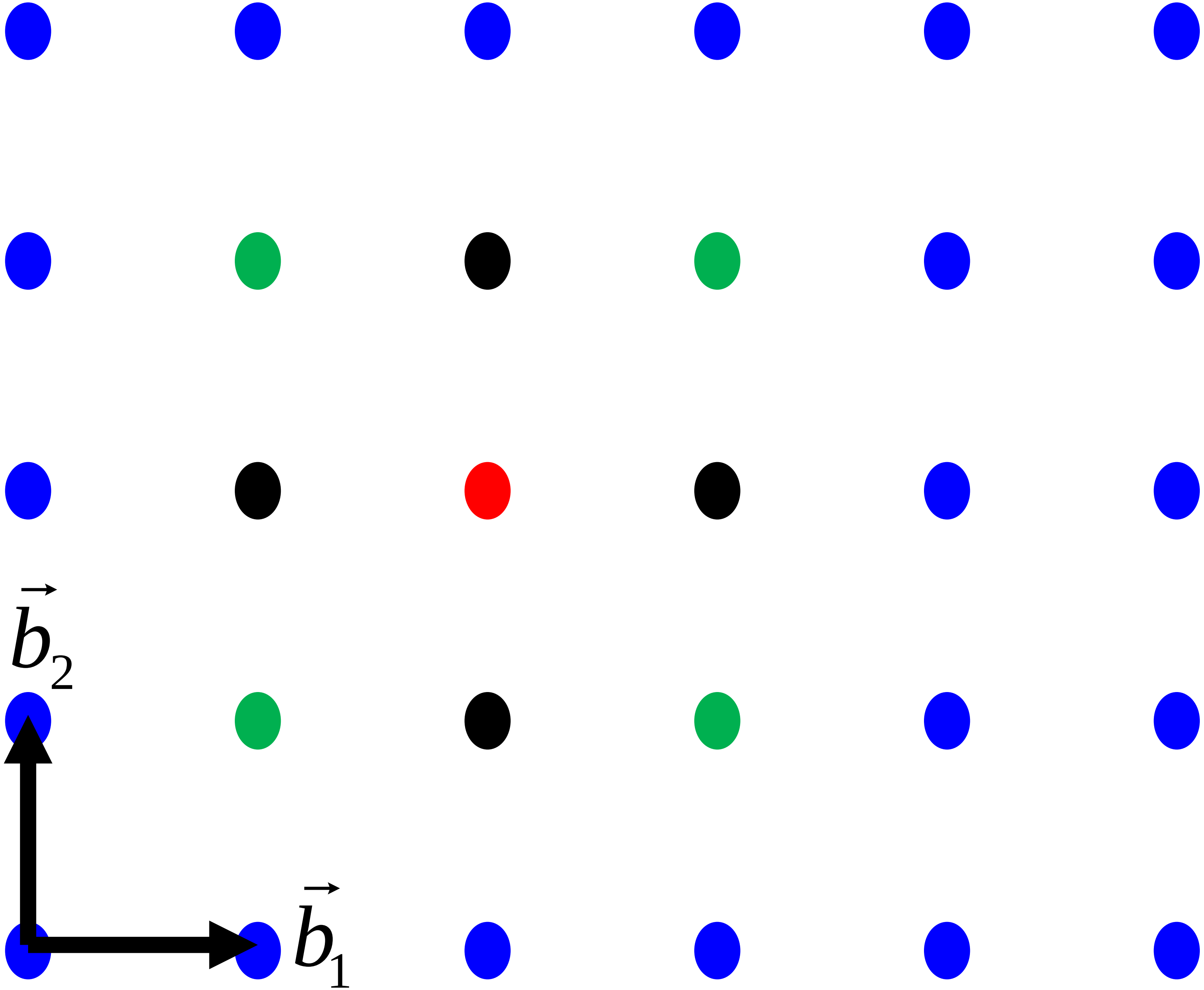
引入：

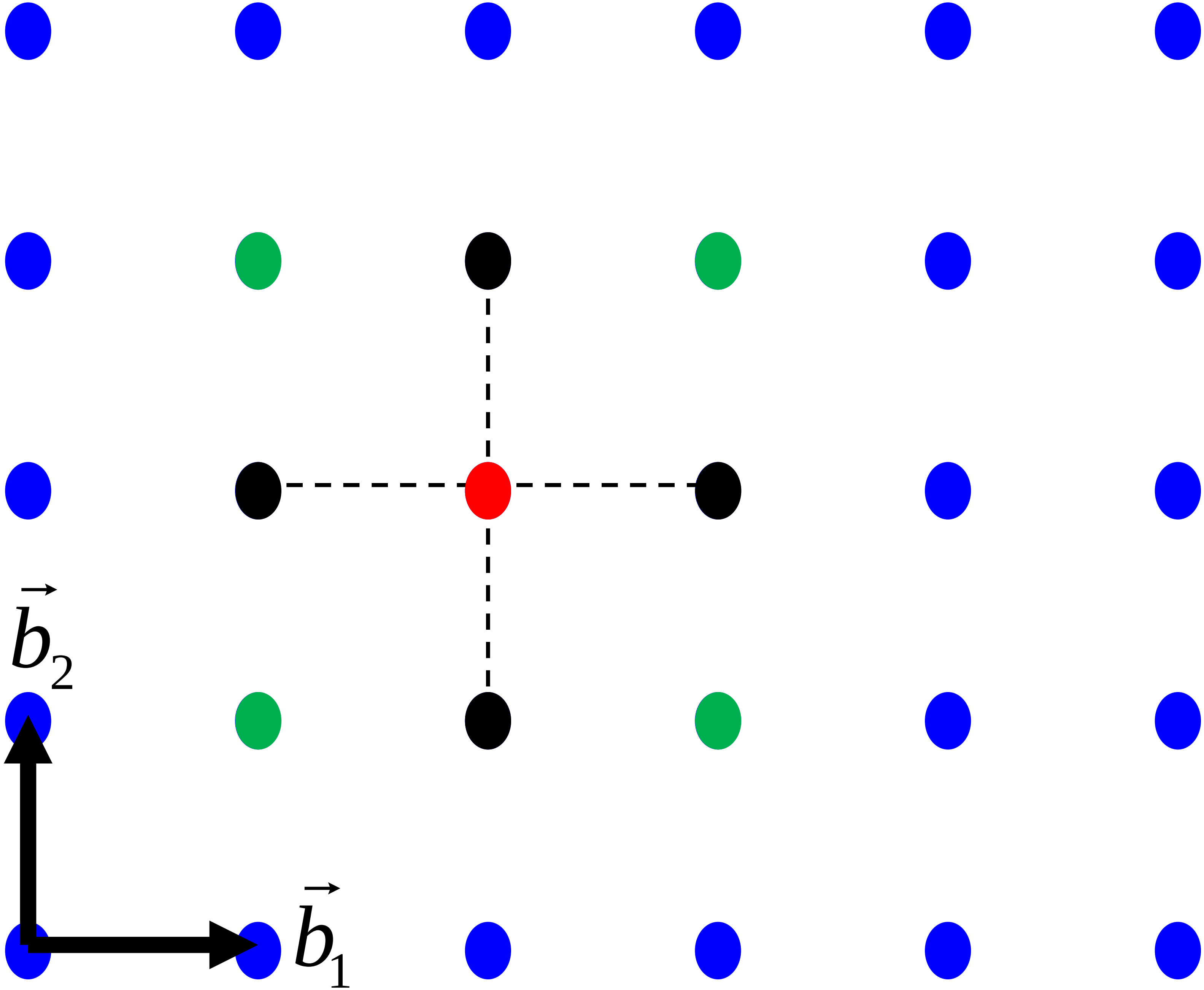
$$\vec{a}_3 = c\vec{k}$$

$$\vec{a}_1 = a\vec{i} \qquad \vec{a}_2 = a\vec{j} \qquad \vec{a}_3 = c\vec{k}$$

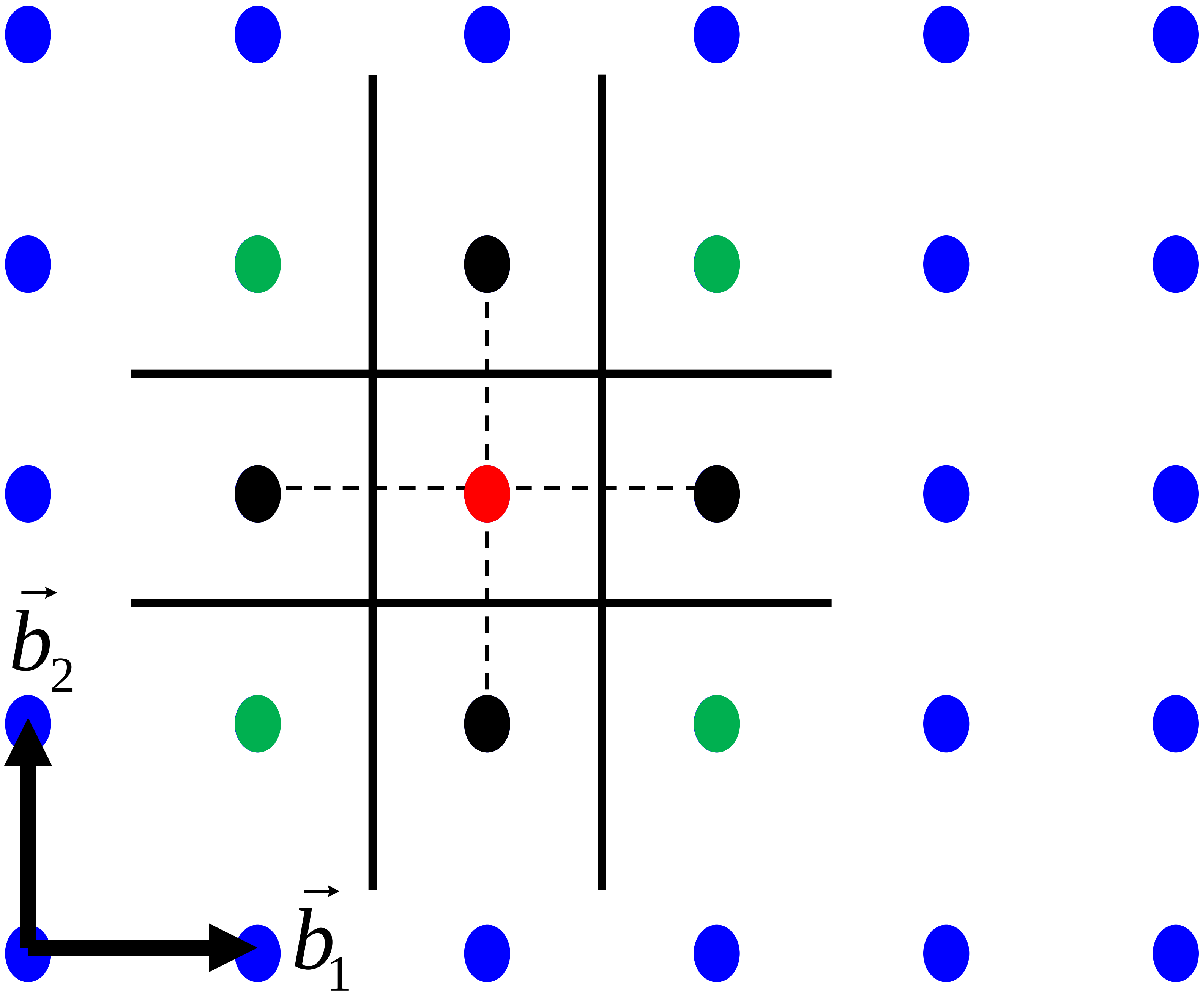
其相应的倒格子原胞基矢为：

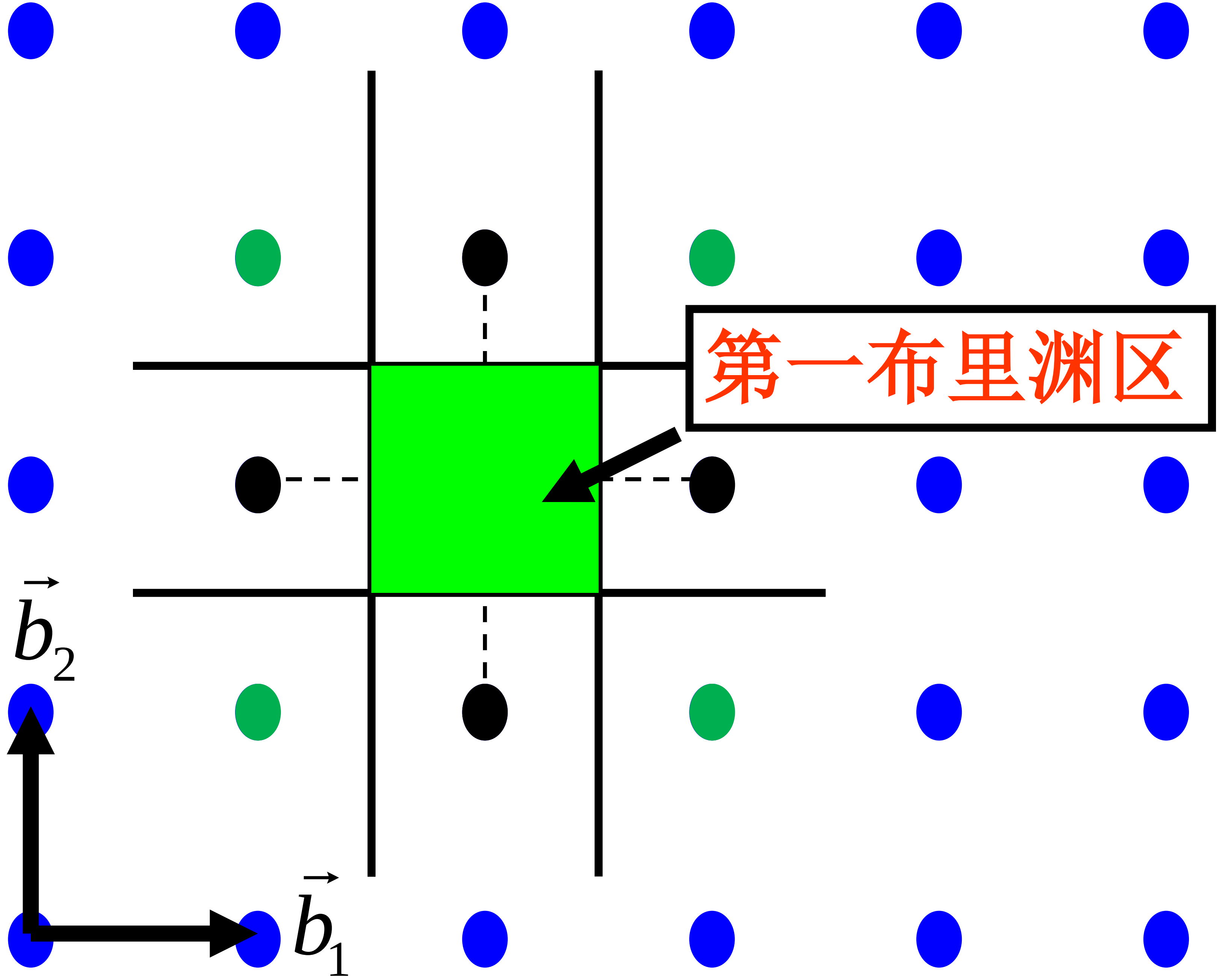
$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\vec{i} \qquad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\vec{j}$$


$\vec{b}_2$
$\vec{b}_1$

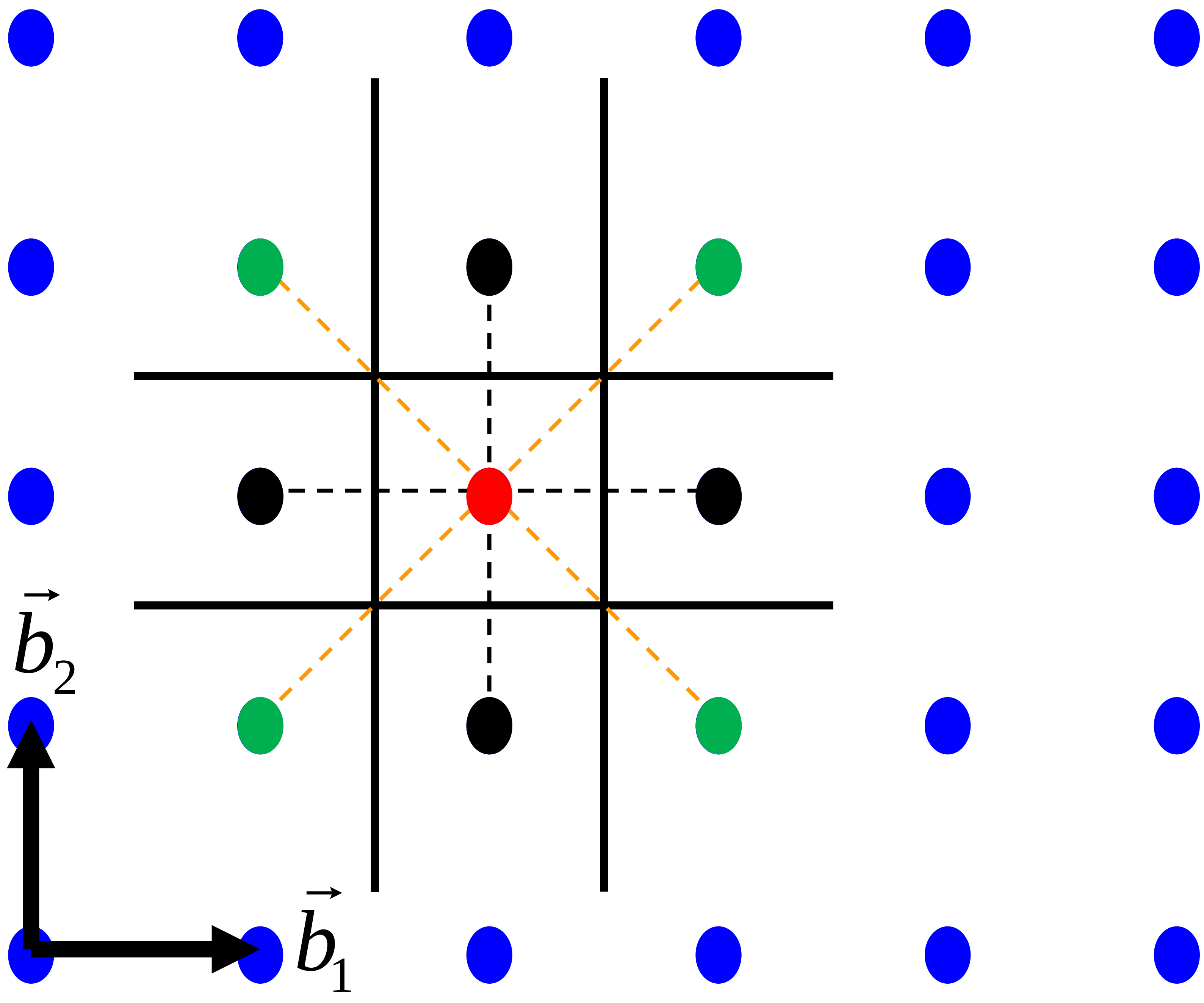


$\vec{b}_2$
$\vec{b}_1$

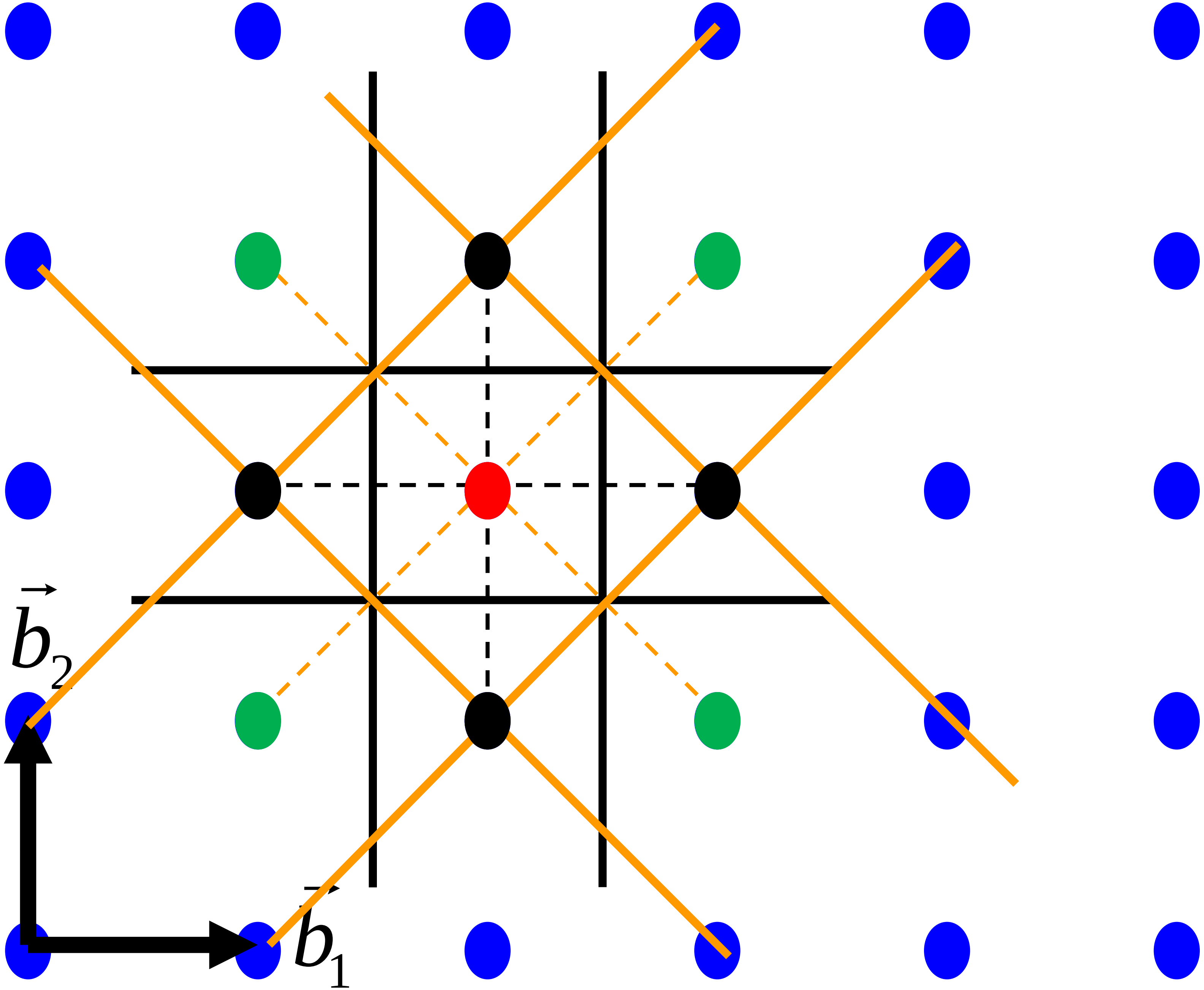

$\vec{b}_2$
$\vec{b}_1$

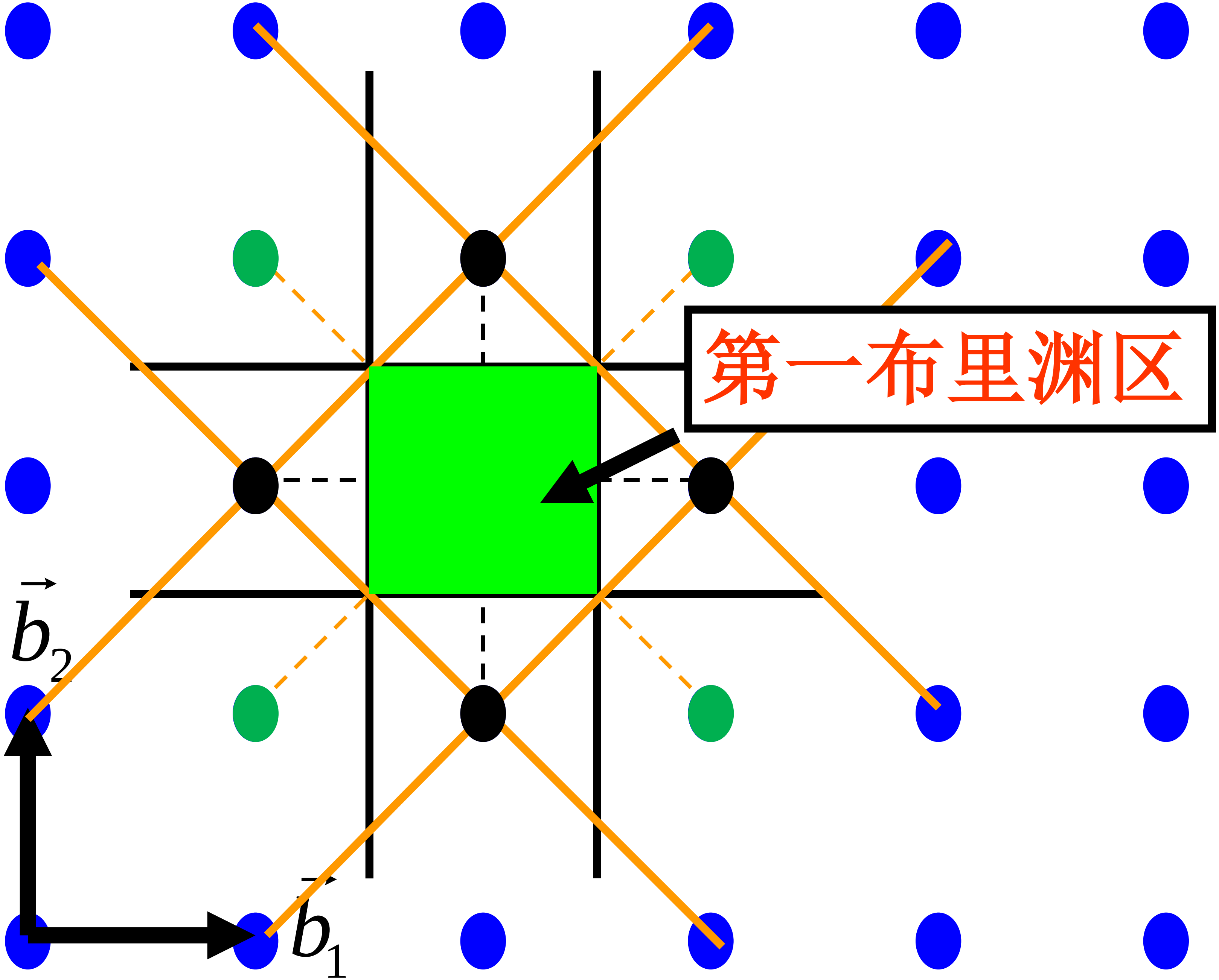


第一布里渊区
$\vec{b}_2$
$\vec{b}_1$

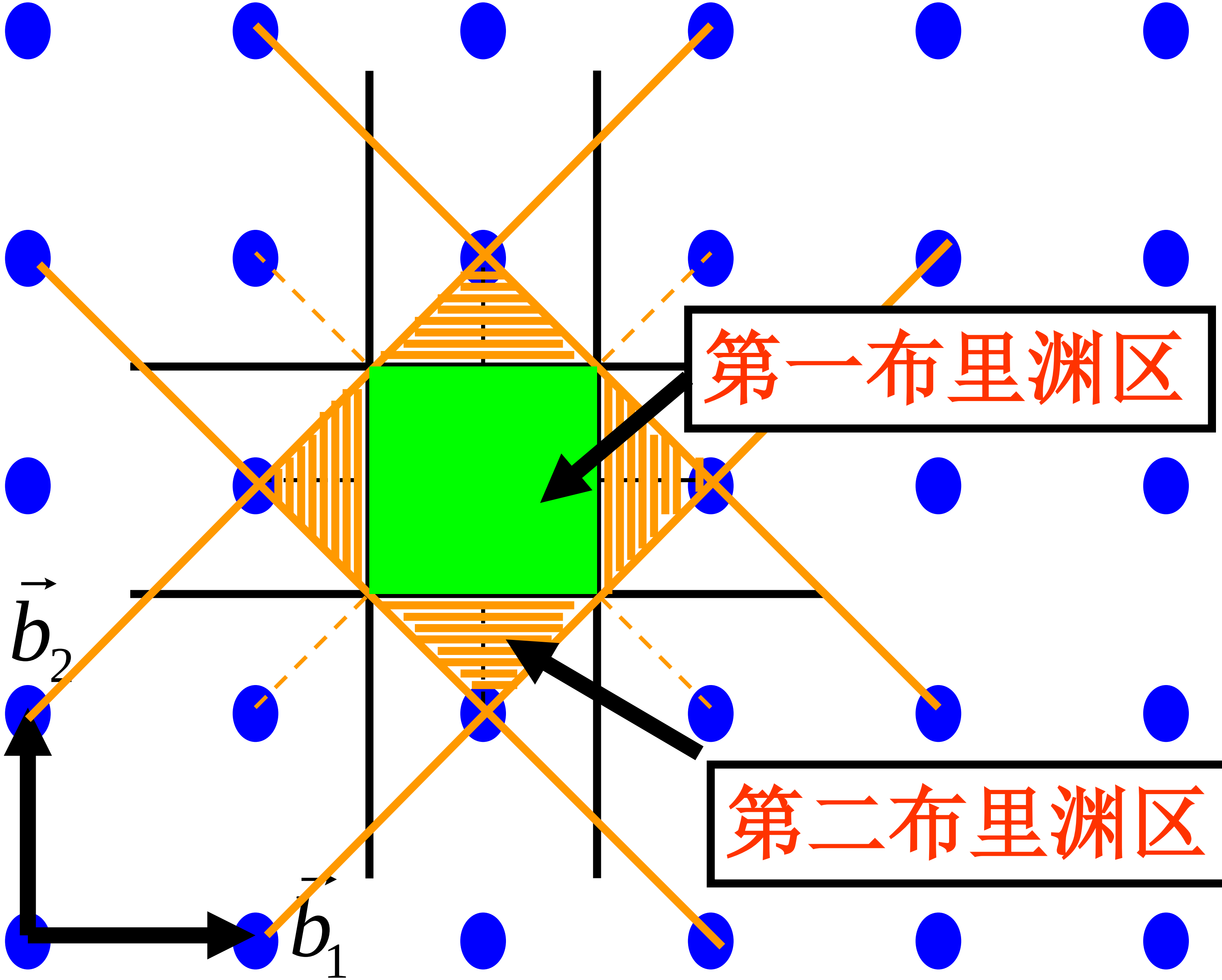


$\vec{b}_2$
$\vec{b}_1$

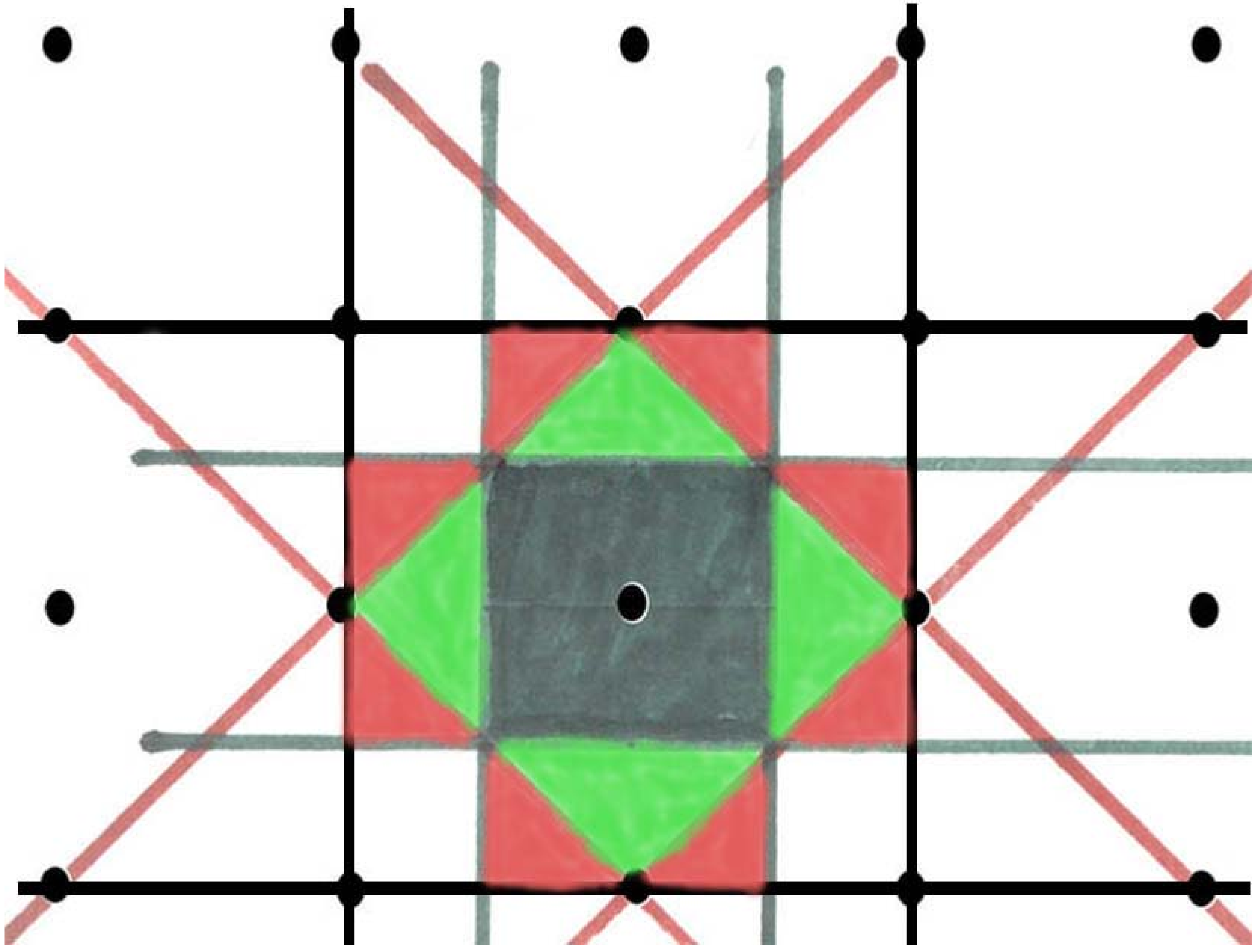

$\vec{b}_2$
$\vec{b}_1$



第一布里渊区
$\vec{b}_2$
$\vec{b}_1$



第一布里渊区
第二布里渊区
$\vec{b}_2$
$\vec{b}_1$



(2)、体心立方格子的布里渊区

体心立方正格子固体物理学原胞基矢：

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k})$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})$$

其倒格子原胞基矢为:

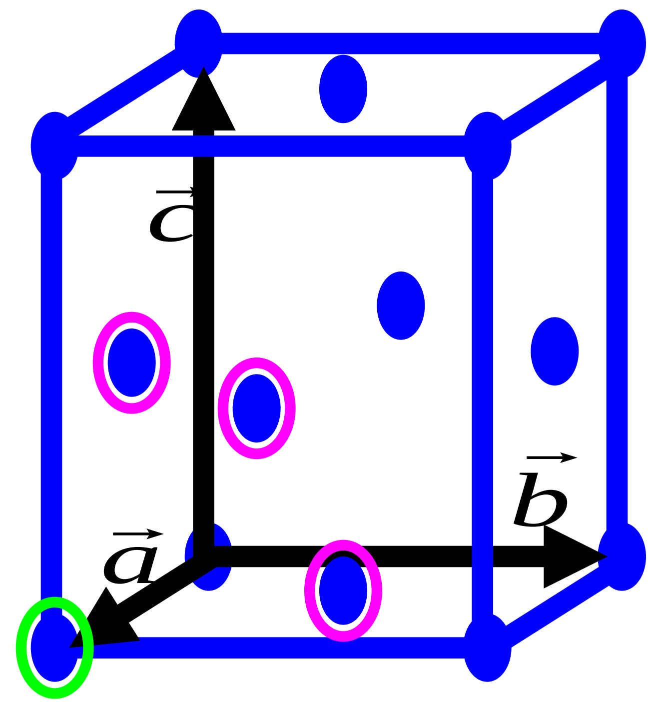
$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\vec{j} + \vec{k})$$

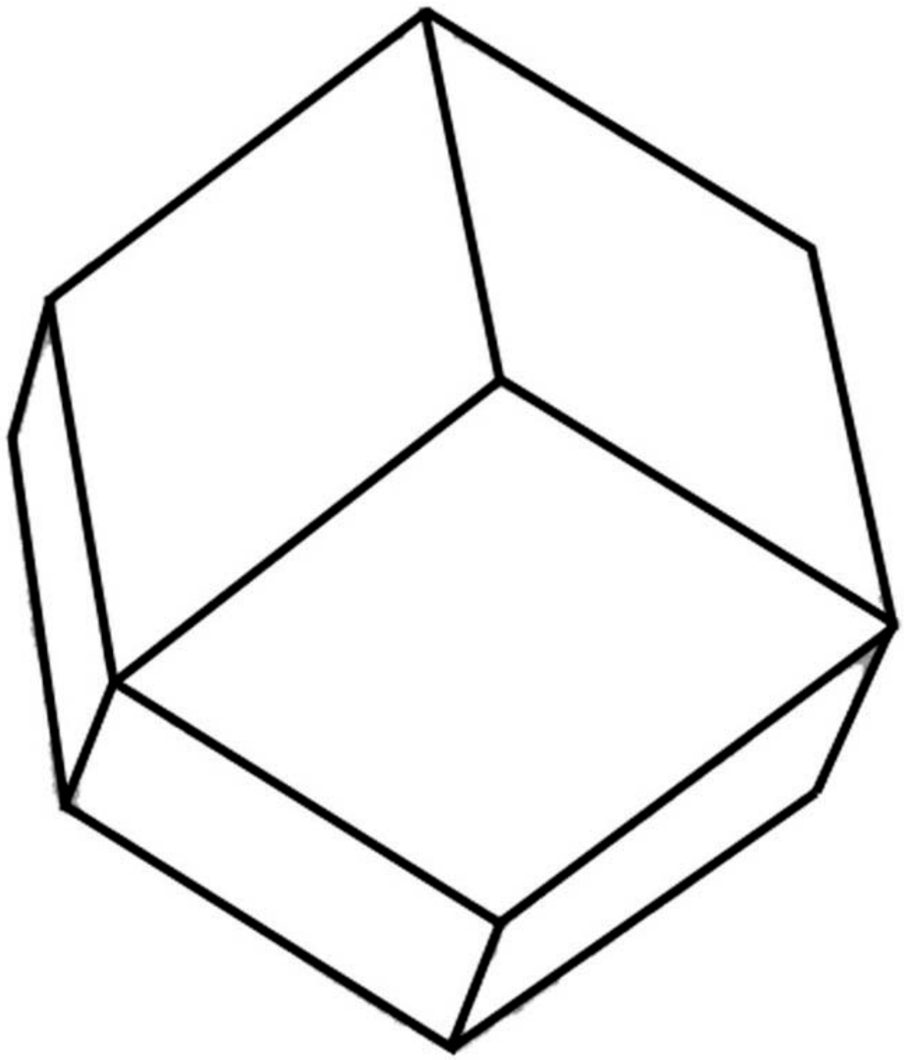
$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \vec{k})$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \vec{j})$$

- 体心立方正格子的倒格子具有面心立方特征

- 面心立方顶点有12个最近邻点





体心立方正格子的第一布里渊区----

菱形十二面体。

(3)、面心立方正格子的布里渊区

面心立方正格子固体物理学原胞基矢

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{j} + \vec{k})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{k})$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j})$$

其倒格子原胞基矢为：

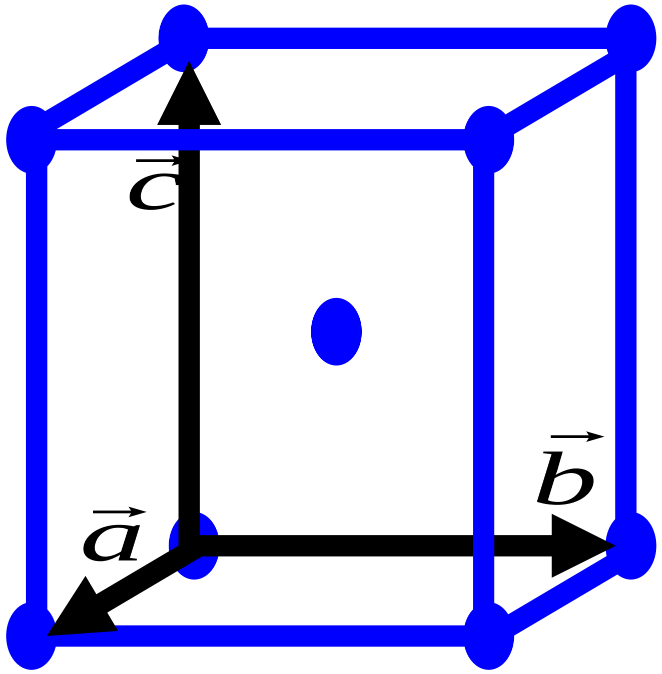
$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k})$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k})$$

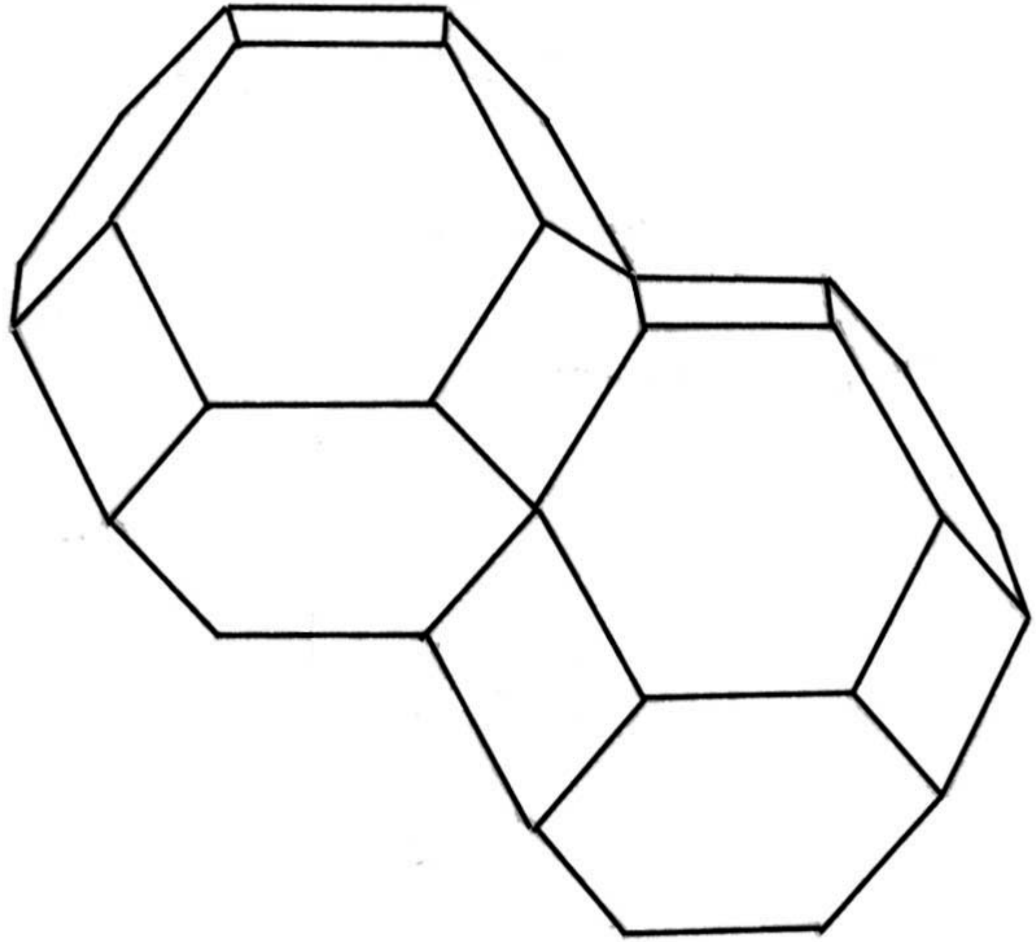
$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})$$

- 面心立方正格子的倒格子具有体心立方特征

- 体心立方顶点有
  8 个最近邻点，
  6 个次近邻



面心立方正格子的简约布里渊区是一个截角八面体(十四面体)

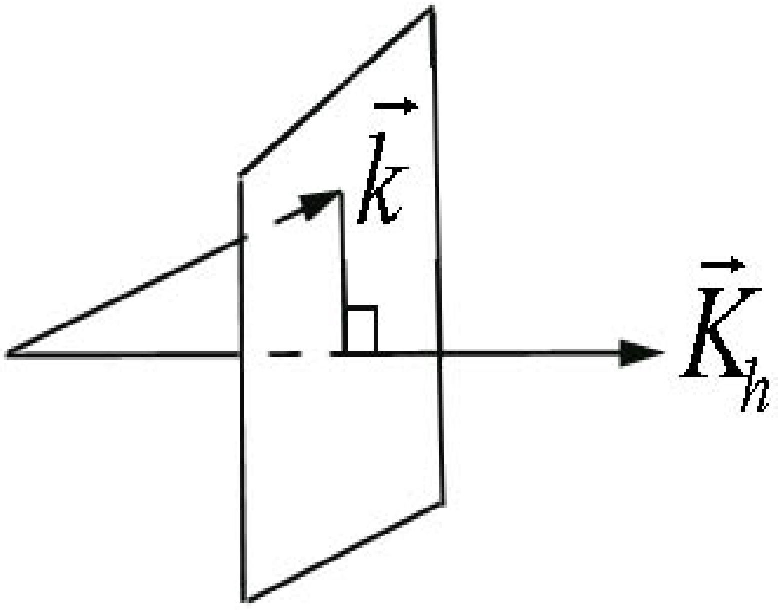


7、布里渊区界面方程：

布里渊区边界所满足的数学方程

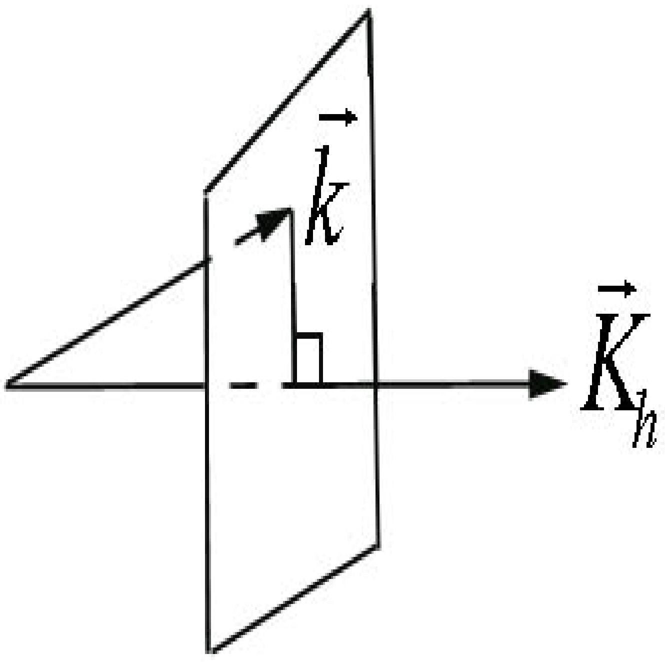
------布里渊区边界方程。

布里渊区是由倒格矢 $\vec{K}_h$ 的垂直平分面围成的



布区边界方程： $\vec{k} \cdot \vec{n} = \frac{1}{2}\left|\vec{K}_h\right|$

$$\vec{n} = \frac{\vec{K}_h}{\left|\vec{K}_h\right|}$$



$$\vec{k} \cdot \vec{n} = \frac{1}{2}\left|\vec{K}_h\right|$$

$$\vec{k} \cdot \frac{1}{2}\vec{K}_h = \left|\frac{1}{2}\vec{K}_h\right|^2$$

布区边界方程：

$$\vec{k}\cdot\frac{1}{2}\vec{K}_h=\left|\frac{1}{2}\vec{K}_h\right|^2$$

* 只能说：布里渊区边界方程为

$$\vec{k}\cdot\frac{1}{2}\vec{K}_h=\left|\frac{1}{2}\vec{K}_h\right|^2$$

不能说：满足该方程的平面是

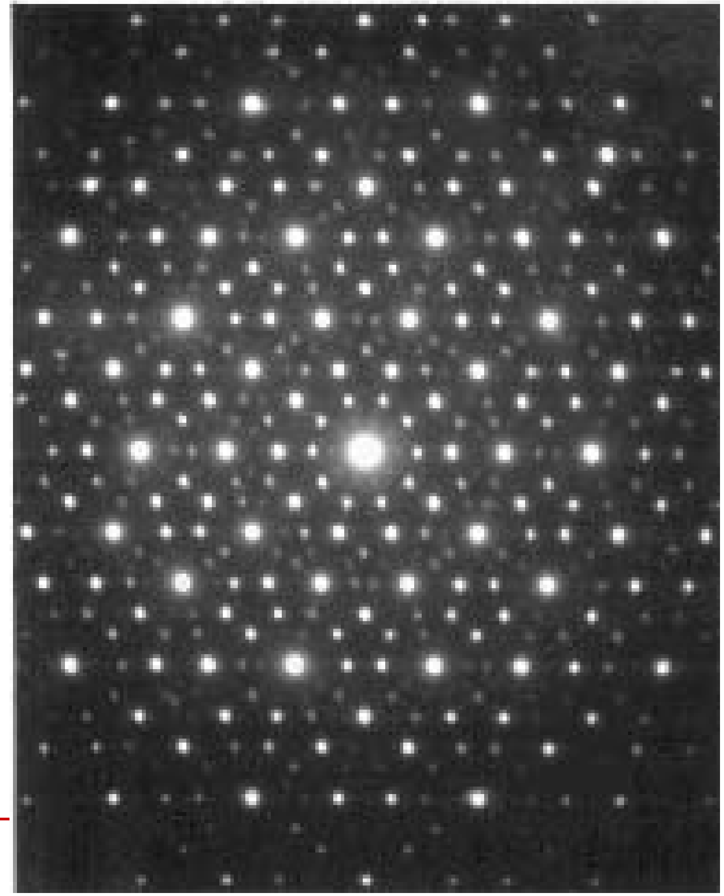
布里渊区边界

应掌握的知识点

1、倒易点、倒易点阵、倒格子、倒格子基矢、倒格矢、倒格子原胞等概念

2、倒格子的性质

3、倒格子的物理本质



应掌握的基本技能

1、已知正格子原胞基矢，能求出相应的倒格子原胞基矢

2、能求出某给定晶面族的法线

3、能求出某给定晶面族的面间距

4、能画出二维平面点阵的前两阶布里渊区

课堂练习

1、二维长方晶体正格子原胞基矢为

$$\vec{a}_1 = a\vec{i}, \vec{a}_2 = b\vec{j}$$

求其相应的倒格子基矢，并画出倒易点阵、倒格子原胞、第一及第二布里渊区

2、设某面心立方晶体晶格常数为a，求下列晶面指数晶面的法线和面间距

$$(100),(110),(111),(211),(\bar{1}31),(234)$$

3、设某面心立方晶体晶格常数为a，求下列Miller指数晶面的法线和面间距

$$(100),(110),(111),(211),(\bar{1}31),(234)$$