

底心正交晶体性质小论文

王启骅 PB20020580

2022 年 10 月 7 日

1 结构

文章将会讨论底心正交晶体的一些结构与性质。首先底心正交晶体布拉维格子的结构如图 1 所示，设定三边分别为 a_1, a_2, a_3 ，且根据定义， $a_1 \neq a_2 \neq a_3$ ，三边相互垂直。假设 $a_1 < a_2 < a_3$ 。

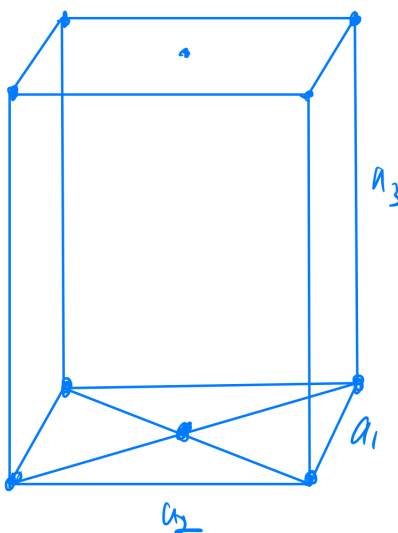


图 1: 底心正交晶体布拉维格子

通过底心点到最近点（底面另不共线两点与上底心）的连线，可以得到原胞结构如图 2，实际上该原胞其与单斜晶体唯一的不同就是底面的两边相等。可得原胞基矢为

$$\begin{cases} \vec{\alpha}_1 = \frac{a_1}{2} \hat{x} + \frac{a_2}{2} \hat{y} \\ \vec{\alpha}_2 = -\frac{a_1}{2} \hat{x} + \frac{a_2}{2} \hat{y} \\ \vec{\alpha}_3 = a_3 \hat{z} \end{cases} \quad (1)$$

也可以得到底心正交晶系的 Wigner-Seitz 原胞。首先绘制布拉维格子的俯视图如图 3(a)，将底心点与周围最近点的连线作垂直平分线后划分出的区域。可得由于底心正交晶格的底面为不等边的矩形，故底心与最

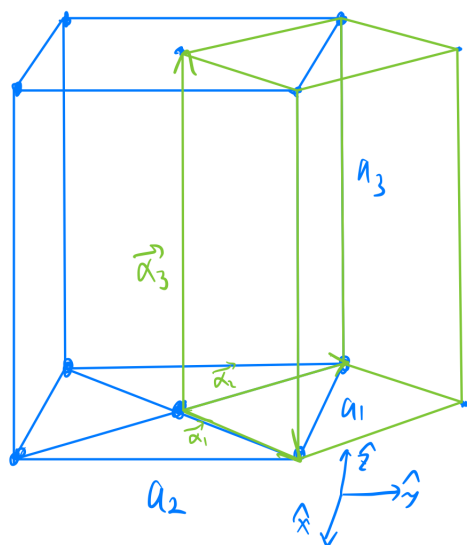


图 2: 底心正交晶体原胞

近各点的连线的中垂线必定会在矩形较长边切出一条边，形成一个六边形。之后再扩展到三维，将与上下底心连线的中垂面做出，即可得到其 WS 原胞为一个六边形柱体。

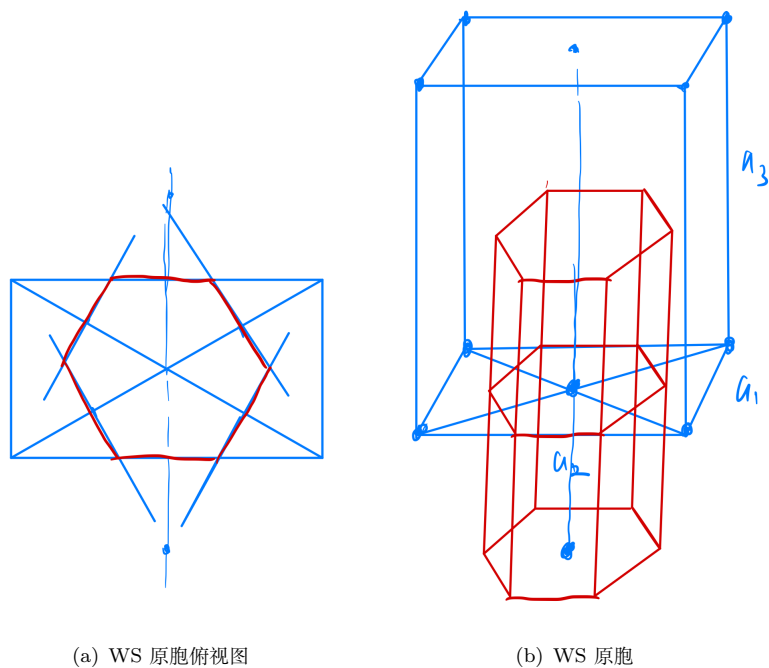


图 3: Wigner-Seitz 原胞

2 对称性

首先该底心正交晶体满足相对于六面体心反演对称。

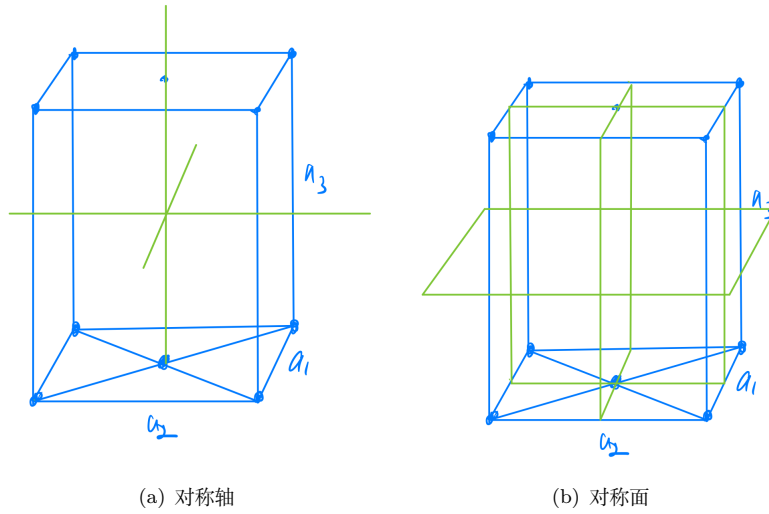


图 4: 对称性

底心正交晶体的对称轴如图 4(a) 所示，上下底心的连线为一个二次旋转对称轴，垂直于该二次旋转对称轴有两个沿 x 、 y 方向的二次旋转对称轴。由此说明晶格属于 D_2 群。

同时如图 4(b) 可得上下底心连线的中垂面，和法向量沿 x 、 y 的两个面都为该晶格的反映面。其中一个面垂直于二重轴，两个面包含二重轴。由此可得晶格也属于 C_{2v} 与 D_{2h} 群。

3 倒易点阵与布里渊区

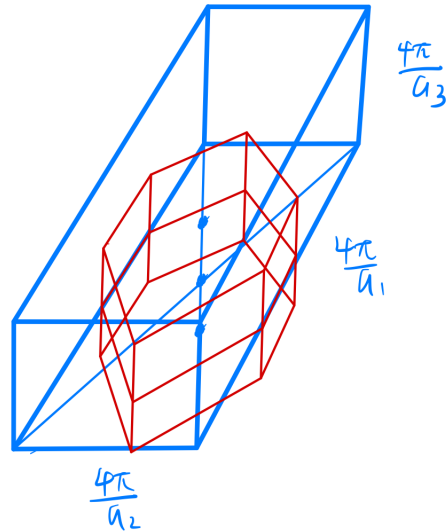


图 5: 底心正交晶体布里渊区

以下计算底心正交晶体的倒易点阵基矢。首先有

$$\vec{\alpha}_1 \cdot [\vec{\alpha}_2 \times \vec{\alpha}_3] = \frac{a_1 a_2 a_3}{2} \quad (2)$$

则

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{\alpha}_2 \times \vec{\alpha}_3}{\vec{\alpha}_1 \cdot [\vec{\alpha}_2 \times \vec{\alpha}_3]} = \frac{2\pi}{a_1 a_2} (a_2 \hat{x} + a_1 \hat{y}) \\ \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{\alpha}_3 \times \vec{\alpha}_1}{\vec{\alpha}_2 \cdot [\vec{\alpha}_2 \times \vec{\alpha}_3]} = \frac{2\pi}{a_1 a_2} (-a_2 \hat{x} + a_1 \hat{y}) \\ \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{\alpha}_1 \times \vec{\alpha}_2}{\vec{\alpha}_3 \cdot [\vec{\alpha}_2 \times \vec{\alpha}_3]} = \frac{2\pi}{a_3} \hat{z} \end{cases} \quad (3)$$

由此可见，底心正交晶体的倒格子仍为底心正交点阵，三边边长分别变为 $a_1 \rightarrow \frac{4\pi}{a_1}, a_2 \rightarrow \frac{4\pi}{a_2}, a_3 \rightarrow \frac{4\pi}{a_3}$ 。绘制出其倒格子，并按照相同的方法绘制出了布里渊区如图 5。由于三边再倒格子后相对长度相反，则在倒格子的 WS 原胞中，六边形所截的边为原来较短边 a_1 所对应的边。

4 总结

文章讨论了底心正交晶体的一些结构、原胞、对称性、倒易点阵与布里渊区等性质。由于各个边相互垂直，该晶格有一定较好的性质与对称性，但是由于各边长度的不相等，其对称性等又稍逊于四方、立方等晶系。