倒　　格

学习内容:

1.4.1 倒格定义

1.4.2 倒格与正格的关系

1.4.3 倒格与傅里叶变换

§1.4 倒格

晶体结构=晶格+基元

一个晶体结构有两个格子，一个是正格，另一个为倒格。

正格

正格基矢 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

正格（点位）矢：

$$\vec{R}_n = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$$

倒格

倒格基矢 $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$

倒格（点位）矢：

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

1.4.1 倒格定义

倒格基矢定义为：

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

其中 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 是正格基矢，

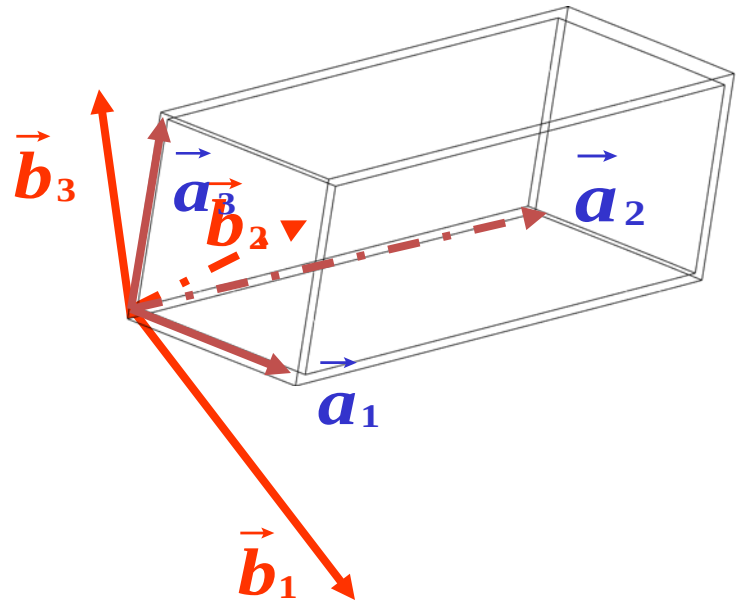
$$\Omega = \vec{a}_1 \cdot \left(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3\right)$$

是固体物理学原胞体积

与 $\vec{K}_n = h_1'\vec{b}_1 + h_2'\vec{b}_2 + h_3'\vec{b}_3$ $(h_1', h_2', h_3'$为整数$)$所联系的各点的列阵即为倒格。

倒格基矢的方向和长度如何呢？

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



$$\left|\vec{b}_1\right| = 2\pi\frac{\left|\vec{a}_2 \times \vec{a}_3\right|}{\Omega} = \frac{2\pi}{d_1} \qquad \left|\vec{b}_2\right| = \frac{2\pi}{d_2} \qquad \left|\vec{b}_3\right| = \frac{2\pi}{d_3}$$

一个倒格基矢是和正格原胞中一组晶面相对应的，它的方向是该晶面的法线方向，它的大小则为该晶面族面间距倒数的2π倍。

1.4.2 倒格与正格的关系

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

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

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{b}_2 = \vec{a}_1 \cdot \frac{2\pi\left(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1\right)}{\Omega} = 0$$

2. $$\vec{R}_{l'} \cdot \vec{K}_{h'} = 2\pi\mu$$ （μ为整数）

其中$\vec{R}_{l'}$和$\vec{K}_{h'}$分别为正格点位矢和倒格点位矢。

$$\vec{R}_{l'} = l_1'\vec{a}_1 + l_2'\vec{a}_2 + l_3'\vec{a}_3 \qquad \vec{K}_{h'} = h_1'\vec{b}_1 + h_2'\vec{b}_2 + h_3'\vec{b}_3$$

$$\vec{R}_{l'}\cdot\vec{K}_{h'}=(l_1'\vec{a}_1+l_2'\vec{a}_2+l_3'\vec{a}_3)\cdot(h_1'\vec{b}_1+h_2'\vec{b}_2+h_3'\vec{b}_3)$$

$$=2\pi(l_1'h_1'+l_2'h_2'+l_3'h_3')$$

$$=2\pi\mu$$

3. $\Omega^*=\dfrac{(2\pi)^3}{\Omega}$ (其中Ω和Ω^*分别为正、倒格原胞体积)

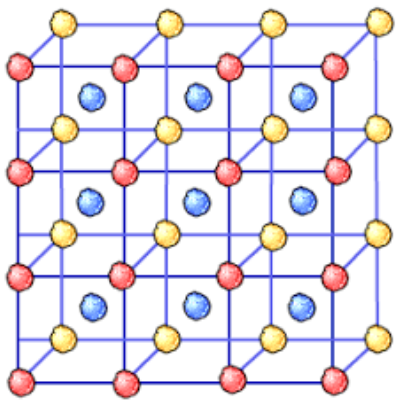
$$\Omega^*=\vec{b}_1\cdot\left(\vec{b}_2\times\vec{b}_3\right)$$

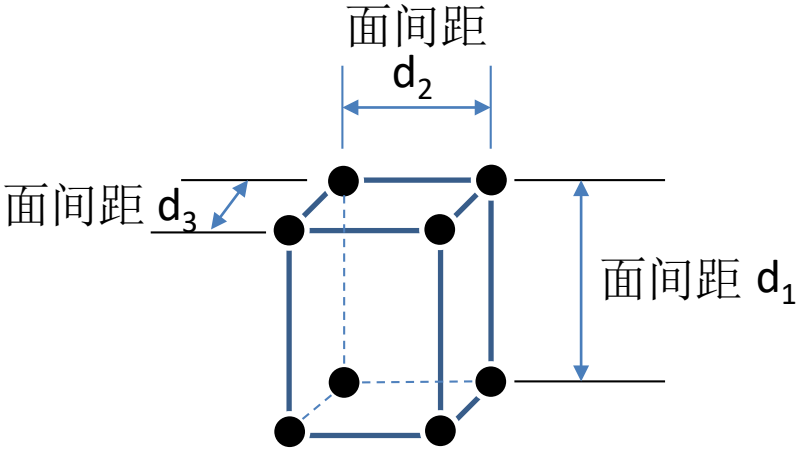
$$=\left(\frac{2\pi}{\Omega}\right)^3\left(\vec{a}_2\times\vec{a}_3\right)\cdot\left[\left(\vec{a}_3\times\vec{a}_1\right)\times\left(\vec{a}_1\times\vec{a}_2\right)\right]$$

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

上节课程内容回顾

1.4.1 倒格





倒格基矢

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

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

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

其中$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$是正格基矢，

$\Omega = \vec{a}_1 \cdot \left(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3\right)$是固体物理学原胞体积

与 $\vec{K}_n = h_1'\vec{b}_1 + h_2'\vec{b}_2 + h_3'\vec{b}_3$ (h_1', h_2', h_3'为整数)

所联系的各点的列阵即为倒格。

一个倒格基矢是和正格原胞中一组晶面相对应的，它的方向是该晶面的法线方向，它的大小则为该晶面族面间距倒数的2π倍。

1.4.2. 倒格和正格的关系

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

(2) $\vec{R}_{l'} \cdot \vec{K}_{h'} = 2\pi\mu$ （μ为整数）

其中$\vec{R}_{l'}$和$\vec{K}_{h'}$分别为正格点位矢和倒格点位矢。

$\vec{R}_{l'} = l_1'\vec{a}_1 + l_2'\vec{a}_2 + l_3'\vec{a}_3$ $\quad$ $\vec{K}_{h'} = h_1'\vec{b}_1 + h_2'\vec{b}_2 + h_3'\vec{b}_3$

(3) $\Omega^* = \dfrac{(2\pi)^3}{\Omega}$ (其中Ω和Ω^*分别为正、倒格原胞体积)

(3) $\Omega^* = \dfrac{(2\pi)^3}{\Omega}$ (其中Ω和Ω^*分别为正、倒格原胞体积)

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

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

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

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

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

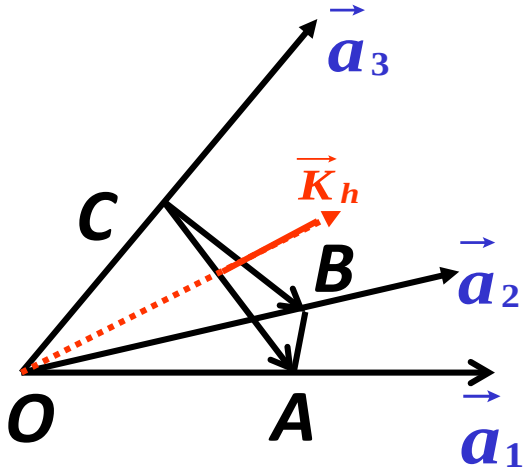
$$\Omega^* = \left(\frac{2\pi}{\Omega}\right)^3 \left(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3\right) \cdot \Omega \vec{a}_1 = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}$$

(4) 倒格矢 $\vec{K}_h = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3$ 与正格中晶面族$(h_1h_2h_3)$正交，且其长度为 $\dfrac{2\pi}{d_{h_1h_2h_3}}$。

1) 证明 $\vec{K}_h = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3$ 与晶面族$(h_1h_2h_3)$正交。

设ABC为晶面族$(h_1h_2h_3)$中离原点最近的晶面，

ABC在基矢$\vec{a}_1,\vec{a}_2,\vec{a}_3$上的截距分别为 $\dfrac{a_1}{h_1},\dfrac{a_2}{h_2},\dfrac{a_3}{h_3}$。



由图可知：

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

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

$$\vec{K}_h \cdot \overrightarrow{CA} = (h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3)\cdot\left(\frac{\vec{a}_1}{h_1} - \frac{\vec{a}_2}{h_2}\right) = 0$$

$$\vec{K}_h \cdot \overrightarrow{CB} = (h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3)\cdot\left(\frac{\vec{a}_2}{h_2} - \frac{\vec{a}_3}{h_3}\right) = 0$$

所以

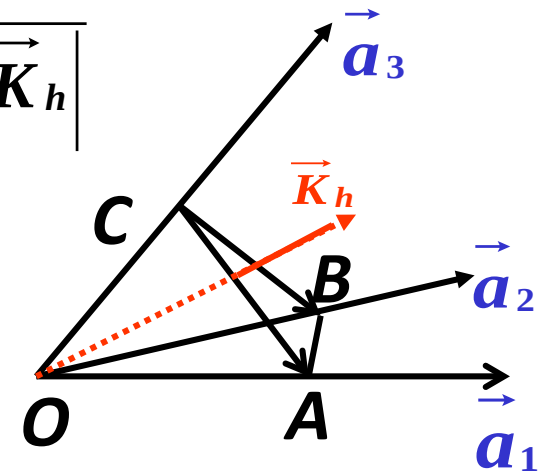
$\vec{K}_h = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3$

与晶面族$(h_1h_2h_3)$正交。

2) 证明 $\vec{K}_h = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3$ 的长度等于 $\dfrac{2\pi}{d_{h_1h_2h_3}}$ 。

由平面方程： $\vec{X}\cdot\vec{n} = \mu d$ 得：

$$d_{h_1h_2h_3} = \frac{\vec{a}_1}{h_1}\cdot\frac{\vec{K}_h}{\left|\vec{K}_h\right|} = \frac{\vec{a}_1}{h_1}\cdot\frac{h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3}{\left|\vec{K}_h\right|} = \frac{2\pi}{\left|\vec{K}_h\right|}$$



在晶胞坐标系 $\vec{a},\vec{b},\vec{c}$ 中，

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{\Omega}\left(\vec{b}\times\vec{c}\right) \qquad \Omega = (\vec{a}\times\vec{b})\cdot\vec{c}$$

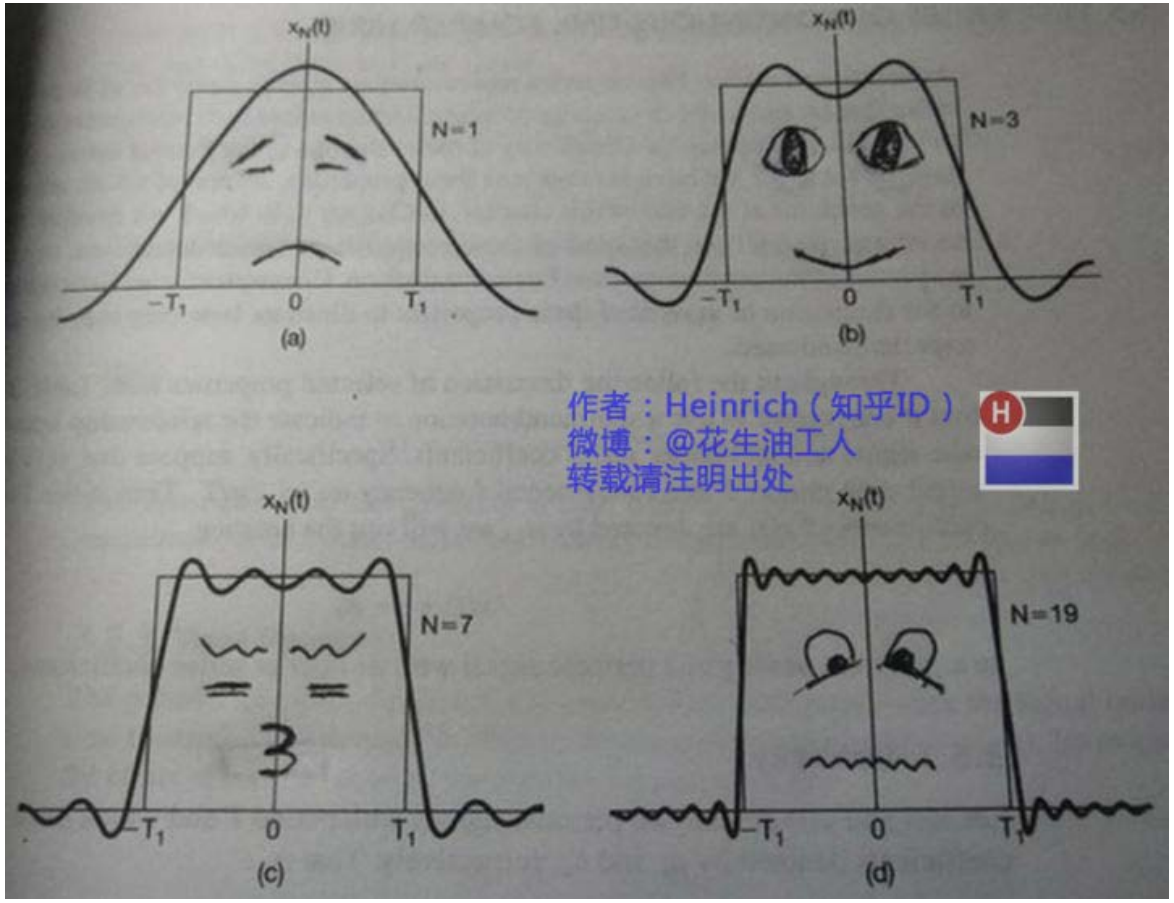
$$\vec{b}^* = \frac{2\pi}{\Omega}\left(\vec{c}\times\vec{a}\right) \qquad \vec{K}_{h'k'l'} = h'\vec{a}^* + k'\vec{b}^* + l'\vec{c}^*$$

$$\vec{c}^* = \frac{2\pi}{\Omega}\left(\vec{a}\times\vec{b}\right)$$

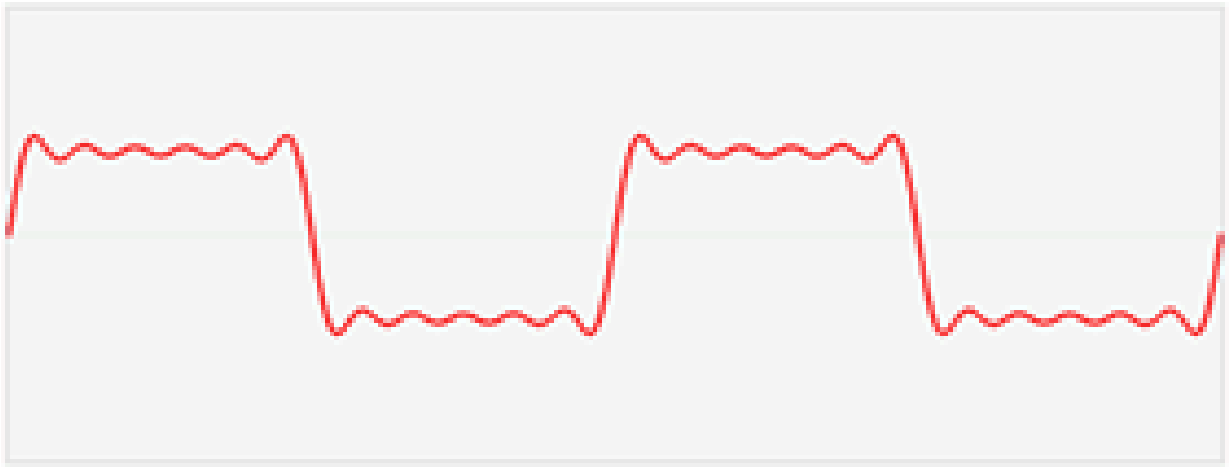
傅里叶变换

任何周期函数，都可以看作是不同振幅，不同相位正弦波的叠加。

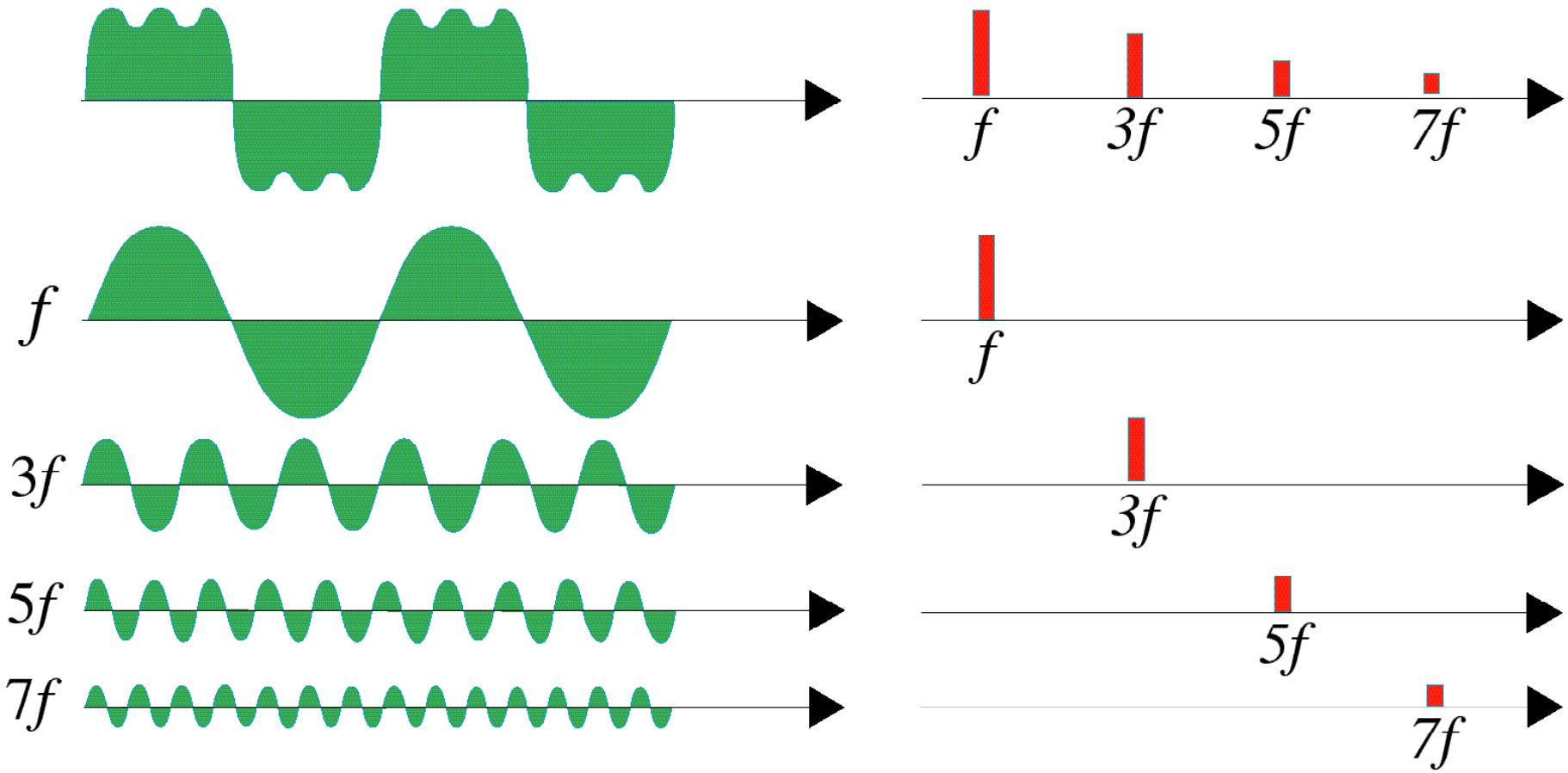
举例：正弦曲线波可以叠加出一个带有90度角的矩形波。



傅里叶变换



复杂周期信号波形



a. Time domain　　b. Frequency domain

时域（T）　　频域（1/T）

正格（L）　　倒格（1/L）

傅里叶分析

在 $T = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ 的任何平移操作下，

晶体保持不变性。

晶格的周期性-> 物理性质的周期性

$$\Gamma(\vec{r} + \vec{T}) = \Gamma(\vec{r})$$

首先考虑一维周期函数，x方向的一维周期函数 $\Gamma(x)$，周期为a：

$$\Gamma(x) = \Gamma_0 + \sum_p [C_p cos\left(\frac{2\pi p}{a}x\right) + S_p \sin\left(\frac{2\pi p}{a}x\right)]$$

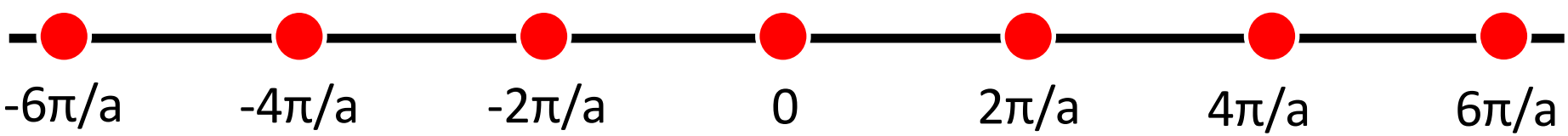
p为整数，Cp和Sp为实常量，$\frac{2\pi}{a}$保证 $\Gamma(x)$ 具有周期a。

$$\Gamma(x+a) = \Gamma_0 + \sum_p [C_p cos\left(\frac{2\pi p}{a}x + \frac{2\pi p}{a}a\right) + S_p \sin\left(\frac{2\pi p}{a}x + \frac{2\pi p}{a}a\right)]$$

$$= \Gamma_0 + \sum_p [C_p cos\left(\frac{2\pi p}{a}x + 2\pi p\right) + S_p \sin\left(\frac{2\pi p}{a}x + 2\pi p\right)]$$

$$= \Gamma_0 + \sum_p [C_p cos\left(\frac{2\pi p}{a}x\right) + S_p \sin\left(\frac{2\pi p}{a}x\right)] = \Gamma(x)$$

因此，$\frac{2\pi p}{a}$ 就是傅里叶空间或着这里的晶体倒格子（倒易空间晶格）中的一个点。



$$\Gamma(x) = \Gamma_0 + \sum_p [C_p cos\left(\frac{2\pi p}{a}x\right) + S_p \sin\left(\frac{2\pi p}{a}x\right)]$$

$$\Downarrow$$

$$\Gamma(x) = \sum_p \Gamma_p \exp\left(i\frac{2\pi p}{a}x\right)$$

求和遍及所有的p的整数取值(正整数，负整数，零)

系数 Γ_p 是复数，为了保证 $\Gamma(x)$ 为实函数，则要求下式成立：

$$\Gamma_{-p}^* = \Gamma_p$$

则p项和-p项之和是实数。

$$\Gamma(x) = \sum_p \Gamma_p \exp\left(i\frac{2\pi p}{a}x\right) \qquad \varphi = \frac{2\pi p}{a}x$$

则p项和-p项之和为：

$$\Gamma_p(cos\varphi + isin\varphi) + \Gamma_{-p}(cos\varphi - isin\varphi)$$

$$= (\Gamma_p + \Gamma_{-p})cos\varphi + \mathrm{i}(\Gamma_p - \Gamma_{-p})sin\varphi$$

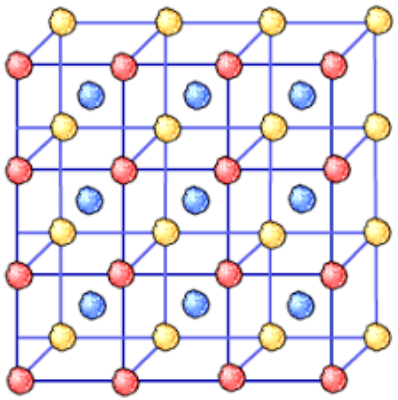
$$\Downarrow$$

$$2\mathrm{Re}\{\Gamma_p\}cos\varphi - 2\mathrm{Im}\{\Gamma_p\}\sin\varphi$$

一维 $$\Gamma(x) = \sum_{p} \Gamma_p \exp\left(i\frac{2\pi p}{a}x\right)$$

三维 $$\Gamma(\vec{r}) = \sum_{h} \Gamma(\vec{K}_h)\exp\left(i\vec{K}_h \cdot \vec{r}\right)$$

1.4.3 倒格与傅里叶变换



在任意两个原胞的相对应点上，晶体的物理性质相同。

$\Gamma\left(\vec{r}+\vec{R}_l\right)=\Gamma\left(\vec{r}\right)$ $\vec{R}_l$ 是正格矢。

上式两边分别按傅里叶级数展开：

$$\left.\begin{aligned}\Gamma\left(\vec{r}\right)&=\sum_h \Gamma(\vec{K}_h)\ \mathrm{e}^{i\vec{K}_h\cdot\vec{r}}\\ \Gamma\left(\vec{r}+\vec{R}_l\right)&=\sum_h \Gamma\left(\vec{K}_h\right)\mathrm{e}^{i\vec{K}_h\cdot\left(\vec{r}+\vec{R}_l\right)}\end{aligned}\right\}\Longrightarrow \vec{K}_h\cdot\vec{R}_l=2\pi\mu$$

$\vec{K}_h$ 一定是倒格矢。

晶体结构

正格

1. $\vec{R}_n = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$

2.与晶体中原子位置相对应；

3.是真实空间中点的周期性排列；

4.线度量纲为[长度]

倒格

1. $\vec{K}_n = h_1'\vec{b}_1 + h_2'\vec{b}_2 + h_3'\vec{b}_3$

2.与晶体中一族晶面相对应；

3.是与真实空间相联系的傅里叶空间中点的周期性排列；

4.线度量纲为[长度]$^{-1}$

已知晶体结构如何求其倒格呢？

晶体结构 → 正格 → 正格基矢 → 倒格基矢 → 倒格

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

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

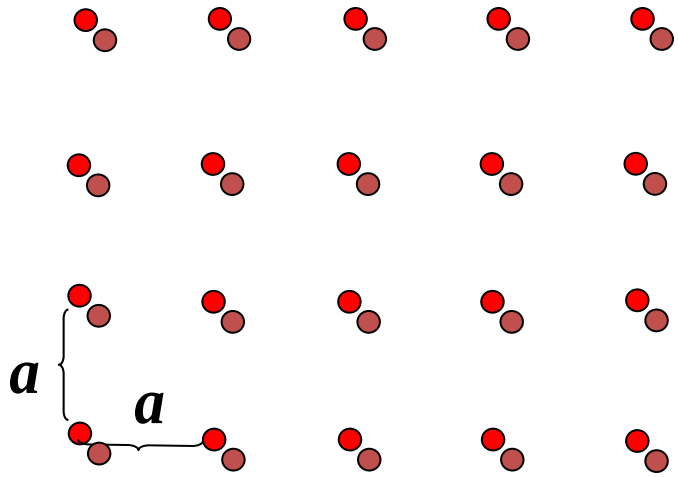
$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{\Omega}\left(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2\right)$$

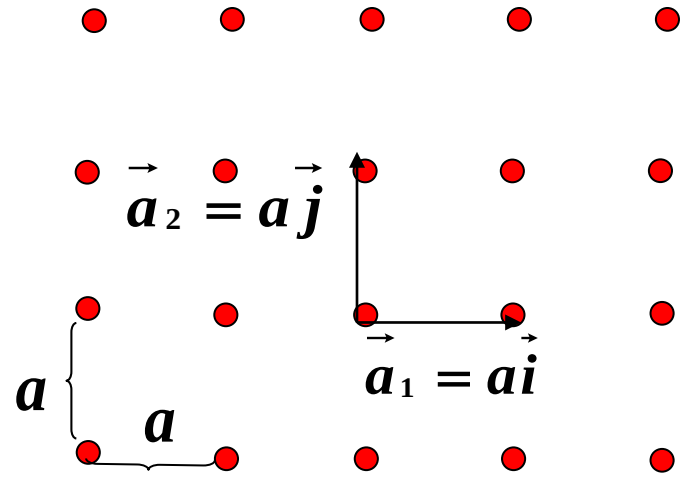
$$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3 \qquad \vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$$

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

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

例1：下图是一个二维晶体结构图，试画出其倒格点的排列。





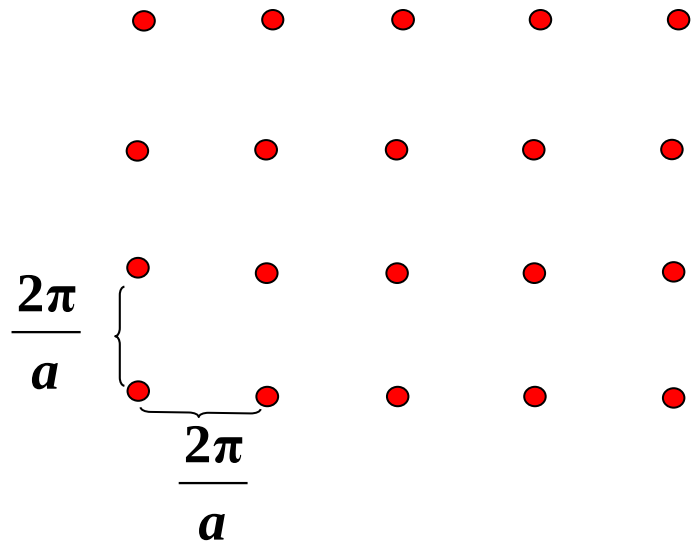
$$\begin{cases} \vec{a}_1 = a\vec{i} \\ \vec{a}_2 = a\vec{j} \end{cases}$$

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

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = a\vec{i} \\ \vec{a}_2 = a\vec{j} \end{cases}$$

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

$$\begin{cases} \vec{a}_1 \cdot \vec{b}_1 = 2\pi \\ \vec{a}_1 \cdot \vec{b}_2 = 0 \\ \vec{a}_2 \cdot \vec{b}_1 = 0 \\ \vec{a}_2 \cdot \vec{b}_2 = 2\pi \end{cases}$$



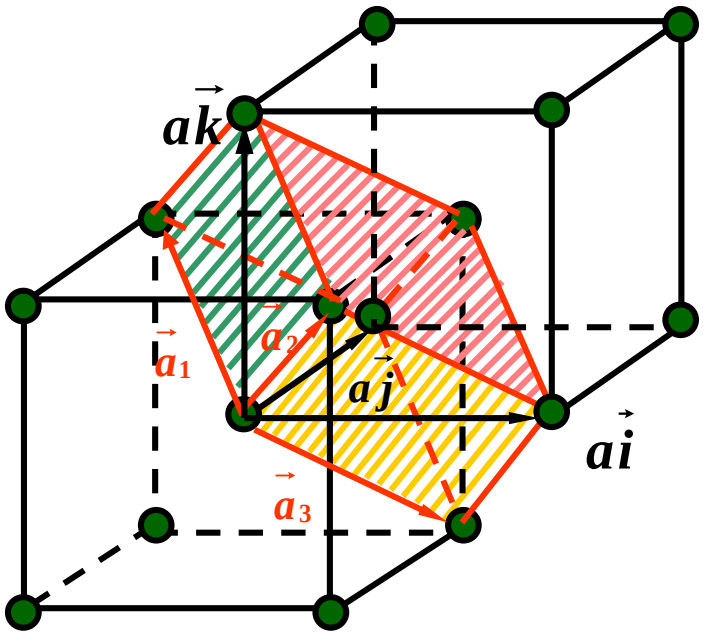
$$\begin{cases} \vec{b}_1 = \dfrac{2\pi}{a}\vec{i} \\ \vec{b}_2 = \dfrac{2\pi}{a}\vec{j} \end{cases}$$

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

倒格是边长为 $\dfrac{2\pi}{a}$ 的正方形格子。

例2：证明体心立方的倒格是面心立方。

体心立方

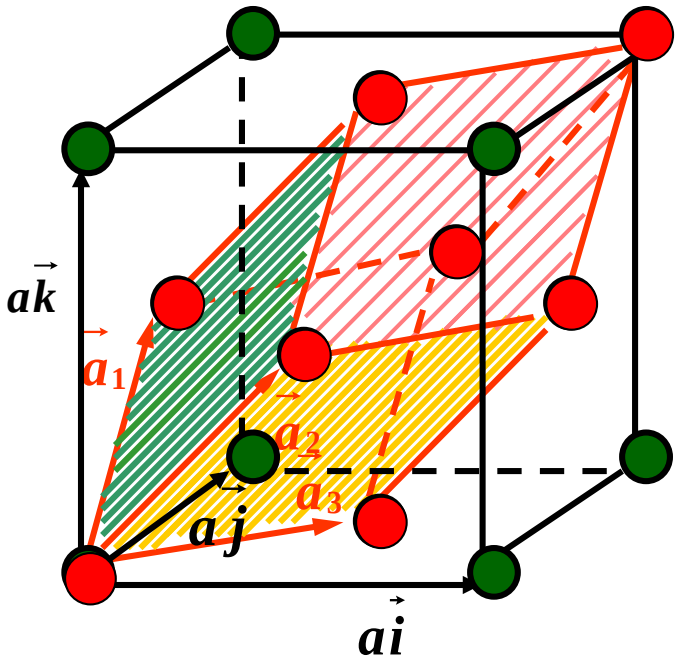


$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \dfrac{a}{2}\left(-\vec{i}+\vec{j}+\vec{k}\right) \\ \vec{a}_2 = \dfrac{a}{2}\left(\vec{i}-\vec{j}+\vec{k}\right) \\ \vec{a}_3 = \dfrac{a}{2}\left(\vec{i}+\vec{j}-\vec{k}\right) \end{cases}$$

平均每个布拉维原胞包含**2**个格点。

固体物理学原胞的体积 $\Omega = \vec{a}_1 \cdot \left(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3\right) = \dfrac{1}{2}a^3$

面心立方



$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \dfrac{a}{2}\left(\vec{j} + \vec{k}\right) \\ \vec{a}_2 = \dfrac{a}{2}\left(\vec{i} + \vec{k}\right) \\ \vec{a}_3 = \dfrac{a}{2}\left(\vec{i} + \vec{j}\right) \end{cases}$$

平均每个布拉维原胞包含4个格点。

固体物理学原胞的体积 $\Omega = \vec{a}_1 \cdot \left(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3\right) = \dfrac{1}{4}a^3$

例2：证明体心立方的倒格是面心立方。

解：体心立方的原胞基矢：

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \dfrac{a}{2}\left(-\vec{i}+\vec{j}+\vec{k}\right) \\ \vec{a}_2 = \dfrac{a}{2}\left(\vec{i}-\vec{j}+\vec{k}\right) \\ \vec{a}_3 = \dfrac{a}{2}\left(\vec{i}+\vec{j}-\vec{k}\right) \end{cases}$$

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

$$\Omega = \vec{a}_1\cdot\left(\vec{a}_2\times\vec{a}_3\right) = \frac{1}{2}a^3$$

$$\vec{a}_2\times\vec{a}_3 = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} \end{vmatrix} = \vec{i}\begin{vmatrix} -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} \end{vmatrix} + \vec{j}\begin{vmatrix} \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{vmatrix} + \vec{k}\begin{vmatrix} \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{vmatrix}$$

$$= \frac{a^2}{2}\vec{j} + \frac{a^2}{2}\vec{k}$$

$$\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = \frac{a^2}{2}\vec{j} + \frac{a^2}{2}\vec{k}$$

$$\Omega = \vec{a}_1 \cdot \left(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3\right) = \frac{1}{2}a^3$$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega}\left(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3\right) = \frac{2\pi}{a^3/2}\frac{a^2}{2}\left(\vec{j} + \vec{k}\right) = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{j} + \vec{k}\right)$$

同理得：

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

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

倒格矢：

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = \dfrac{2\pi}{a}\left(\vec{j} + \vec{k}\right) \\ \vec{b}_2 = \dfrac{2\pi}{a}\left(\vec{i} + \vec{k}\right) \\ \vec{b}_3 = \dfrac{2\pi}{a}\left(\vec{i} + \vec{j}\right) \end{cases}$$

体心立方的倒格是边长为$4\pi/a$的面心立方 。