

## 1.4 倒易点阵和布里渊区

(Reciprocal lattice; Brillouin zones)

- 一. 定义
- 二. 倒易点阵和晶体点阵的关系
- 三. 倒易点阵的物理意义
- 四. 倒易点阵实例
- 五. 布里渊区

一. 定义：假设  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  是一个晶格的基矢，该点阵的格矢为： $\vec{R}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$  原胞体积是： $\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$

现在定义另一晶格的3个基矢： $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ ，它们与  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  的关系满足：

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij} = \begin{cases} 2\pi, i = j \\ 0, i \neq j \end{cases} \quad i, j = 1, 2, 3$$

则称这两种格子互为正倒格子。若基矢  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  的格子为正格子，则  $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$  的格子就是倒格子。反之亦然。

位移矢量  $\vec{G}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$  就构成了倒易点阵。

上面变换公式中出现的  $2\pi$  因子，对于晶体学家来说并没有多大用处，但对于固体物理研究却带来了极大的方便。倒易点阵的概念是Ewald 1921年在处理晶体X射线衍射问题时首先引入的，对我们理解衍射问题极有帮助，更是整个固体物理的核心概念。

证明:

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

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

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

倒格子的另一种定义

$$\vec{b}_1 \perp \vec{a}_2, \vec{b}_1 \perp \vec{a}_3 \implies \vec{b}_1 = c \vec{a}_2 \times \vec{a}_3$$

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

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

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

同理

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

## 二. 倒易点阵和晶体点阵之间的关系:

倒易点阵是从晶体点阵（以后简称正点阵）中定义出的，可以方便地证明它和正点阵之间有如下关系：

1. 两个点阵的基矢之间：

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

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

2. 两个点阵的格矢之积是  $2\pi$  的整数倍：

$$\vec{G}_h \cdot \vec{R}_n = 2\pi m$$

$$\vec{R}_n \cdot \vec{G}_{hkl} = (n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3) \cdot (h \vec{b}_1 + k \vec{b}_2 + l \vec{b}_3)$$

$$= 2\pi(n_1 h + n_2 k + n_3 l) = 2\pi m \quad (m \text{ 为整数})$$

3. 两个点阵原胞体积之间的关系是：

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

4. 正点阵晶面族  $(h_1, h_2, h_3)$  与倒易点阵格矢  $\vec{G}_{h_1 h_2 h_3}$  相互垂直，

$$\vec{G}_{h_1 h_2 h_3} = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3 \quad \text{且有:}$$

$$d_{h_1 h_2 h_3} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{h_1 h_2 h_3}|}$$

证明：先证明倒格矢  $\vec{G}_{h_1, h_2, h_3} = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$

与正格子的晶面系  $(h_1 h_2 h_3)$  正交。

如图所示，晶面系  $(h_1 h_2 h_3)$  中最靠近原点的晶面（ABC）

在正格子基矢  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  的截距分别为： $\frac{\vec{a}_1}{h_1}, \frac{\vec{a}_2}{h_2}, \frac{\vec{a}_3}{h_3}$

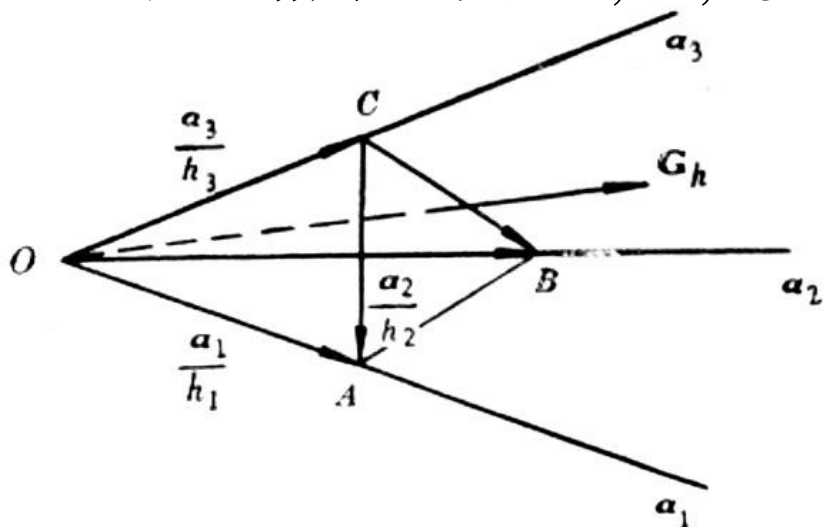


图1-18 晶面与倒易点阵位矢关系示意图

于是：

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

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

$$\therefore \vec{G}_{h_1 h_2 h_3} \cdot \overrightarrow{CA} =$$

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

$$= 2\pi - 2\pi = 0$$

同理  $\vec{G}_{h_1 h_2 h_3} \cdot \overrightarrow{CB} = 0$  而且  $\overrightarrow{CA}, \overrightarrow{CB}$  都在 (ABC)面上，

所以  $\vec{G}_{h_1 h_2 h_3}$  与晶面系  $(h_1 h_2 h_3)$  正交。

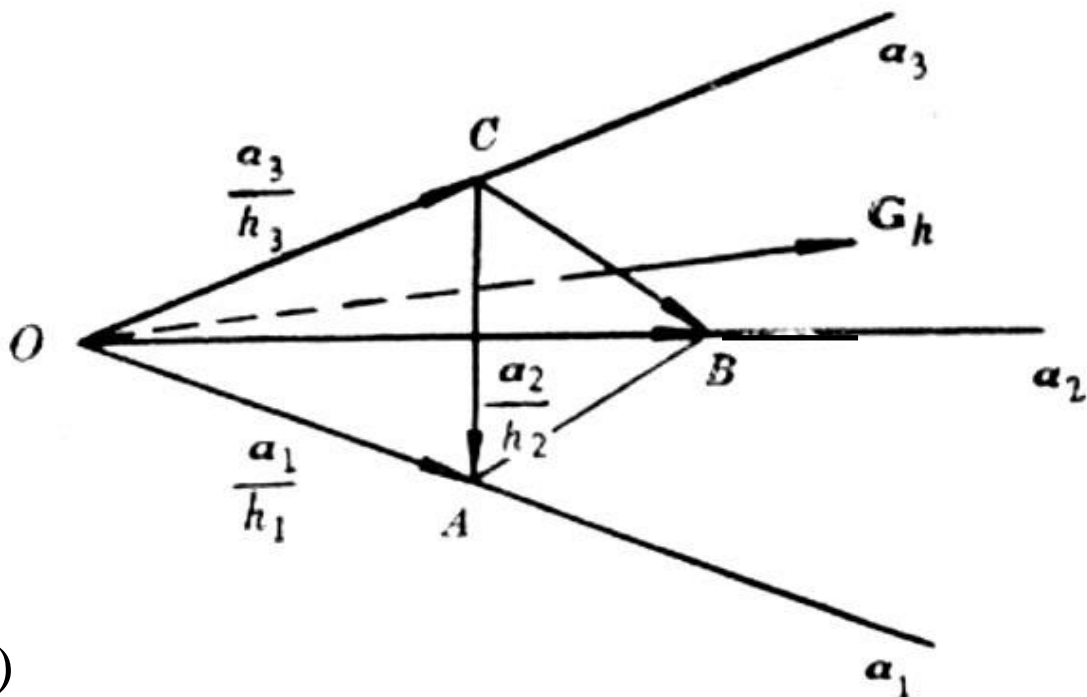


图1-18 晶面与倒易点阵位矢关系示意图

晶面系的面间距就是原点到ABC面的距离，由于  $\vec{G}_{h_1h_2h_3} \perp (ABC)$

$$d_{h_1h_2h_3} = \vec{OA} \cdot \frac{\vec{G}_{h_1h_2h_3}}{|\vec{G}_{h_1h_2h_3}|} = \frac{\vec{a}_1 \cdot (h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3)}{h_1 |\vec{G}_{h_1h_2h_3}|} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{h_1h_2h_3}|}$$

由此我们得出结论：**倒易点阵的一个基矢是和正点阵晶格中的一族晶面对应的，它的方向是该族晶面的法线方向，而它的大小是该族晶面面间距倒数的 $2\pi$ 倍。**又因为倒易点阵基矢对应一个阵点，因而可以说：**晶体点阵中的晶面取向和晶面面间距这 2 个参量在倒易点阵里只用一个点阵矢量（或说阵点）就能综合地表达出来。**

$$d_{h_1h_2h_3} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{h_1h_2h_3}|} = \frac{2\pi}{|h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3|}$$

利用这一公式可以非常方便地计算面间距

对于立方格子： $\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}x, \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}y, \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\hat{z}$   $a$ 为晶格常数

$$d_{h_1h_2h_3} = \frac{a}{\sqrt{h_1^2 + h_2^2 + h_3^2}}$$

比如： $d_{111} = \frac{a}{\sqrt{3}}$

指数小的晶面系，面间距较大

立方晶系:

$$d_{\text{HKL}} = \frac{a}{\sqrt{H^2 + K^2 + L^2}} \quad a = b = c$$

四方晶系:

$$d_{\text{HKL}} = \frac{1}{\sqrt{\frac{H^2 + K^2}{a^2} + \frac{L^2}{c^2}}}$$

六角晶系:

$$d_{\text{HKL}} = \frac{a}{\sqrt{\frac{3}{4}(H^2 + HK + K^2) + \left(\frac{a}{c}\right)^2 L^2}}, a = b \neq c$$

习题1.14

正交晶系:

$$d_{\text{HKL}} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{H}{a}\right)^2 + \left(\frac{K}{b}\right)^2 + \left(\frac{L}{c}\right)^2}}, a \neq b \neq c$$

5. 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

$$\text{倒易点阵根据定义为: } c_1 = \frac{2\pi}{\Omega^*} (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3) \quad \begin{aligned} \Omega^* &= \vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3) \\ \Omega &= \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \end{aligned}$$

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

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

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

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

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

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

## 6. 同一晶格的正格子和倒格子有相同的点群对称性

设 $\alpha$ 为正格子的一个点群对称操作，即当 $R_n$ 为一正格矢时， $\alpha R_n$ 也为正格矢，同样 $\alpha^{-1}R_n$ 也是正格矢。

由于  $G_h \cdot R_n = 2\pi m$

$\longrightarrow G_h \cdot \alpha^{-1}R_n = 2\pi m$

由于点对称操作是正交变换，即保持空间两点距离不变的变换，两矢量受同一点群对称操作作用，其点乘保持不变，即：

$$\alpha G_h \cdot \alpha \alpha^{-1} R_n = \alpha G_h \cdot R_n = 2\pi m$$

这样，对群中任一操作 $\alpha$ ， $\alpha G_h$ 和 $\alpha^{-1}G_h$ 也是倒格矢。这表明正格子和倒格子有相同的点群对称性。

**正空间中WS原胞是布拉维格子的对称化原胞，具有布拉维格子的全部点群对称性。因此，倒空间中的WS原胞（第1布里渊区）也具有晶格点群的全部对称性**

### 三. 倒易点阵 (Reciprocal lattice) 的物理意义:

倒易点阵的物理意义和在分析周期性结构和相应物性中作为基本工具的作用, 需要我们在使用中逐步理解。

当一个点阵具有位移矢量  $\vec{R}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$  时, 考虑到周期性特点, 一个物理量在  $\vec{r}$  点的数值  $F(\vec{r})$

也应该具有周期性:  $F(\vec{r}) = F(\vec{r} + \vec{R}_n)$   
将  $F(\vec{r})$  展开成 Fourier 级数, 有:

$F(\vec{r})$  可以是: 格点密度, 质量密度, 电子云密度, 离子实势场

$$F(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} A(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad \text{其中 } A(\vec{k}) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} F(\vec{r}) \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}) d\vec{r}$$

$$\text{显然: } A(\vec{k}) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} F(\vec{r} + \vec{R}_n) \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}) d\vec{r}$$

$$\text{引入 } \vec{r}' = \vec{r} + \vec{R}_n$$

$$A(\vec{k}) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} F(\vec{r}') \exp(-i\vec{k} \cdot (\vec{r}' - \vec{R}_n)) d\vec{r}' = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} F(\vec{r}') \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}') d\vec{r}' \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_n)$$

$$= A(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_n)$$

$$A(\vec{k})(1 - \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_n)) = 0$$

$A(\vec{k}) = 0$  相当于  $F(\vec{r}) = 0$  不是我们所要的结果

或者  $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_n) = 1$

→  $\vec{k} \cdot \vec{R}_n = 2\pi m, m$ 为整数

→  $\vec{k} = \vec{G}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3, h, k, l$ 为整数

与布拉维格子有相同平移对称性的物理量的**Fourier**展开中，只存在波矢为倒格矢的分量，而其它分量系数为**0**。或者说，同一物理量在正点阵中的表述和在倒易点阵中的表述之间服从**Fourier**变换关系。

$$F(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}_{hkl}} A(\vec{G}_{hkl}) \exp(i\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{r})$$
$$A(\vec{G}_{hkl}) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} F(\vec{r}) \exp(-i\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{r}) d\vec{r}$$

实际上，晶体结构本身就是一个具有晶格周期性的物理量，所以也可以说：**倒易点阵是晶体点阵的Fourier变换**，晶体点阵则是倒易点阵的Fourier逆变换。因此，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  $\text{cm}$ ，倒易点阵是  $\text{cm}^{-1}$ ，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。**

倒易点阵是在晶体点阵（布拉菲格子）的基础上定义的，所以**每一种晶体结构，都有 2 个点阵与其相联系，一个是晶体点阵，反映了构成原子在三维空间做周期排列的图像；另一个是倒易点阵，反映了周期结构物理性质的基本特征。**

## 四. 倒易点阵实例:

倒格子基矢是从点阵基矢引出的，它们之间的联系需要通过具体实例来理解：根据定义，

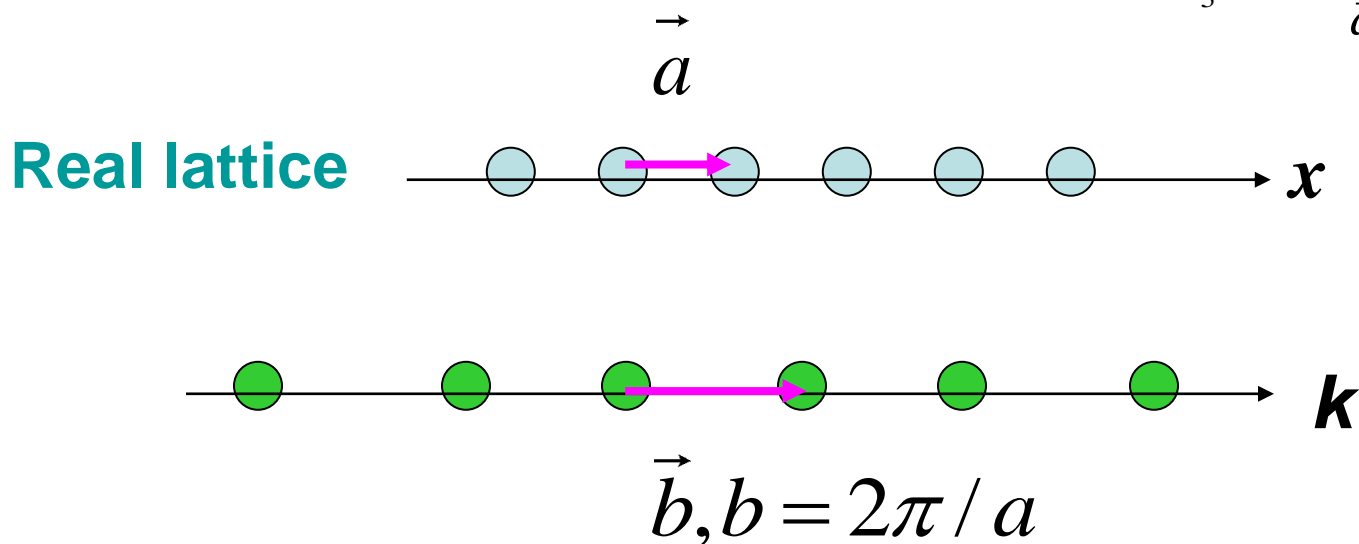
$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij} = \begin{cases} 2\pi, i = j \\ 0, i \neq j \end{cases} \quad i, j = 1, 2, 3 \quad \text{或者}$$

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

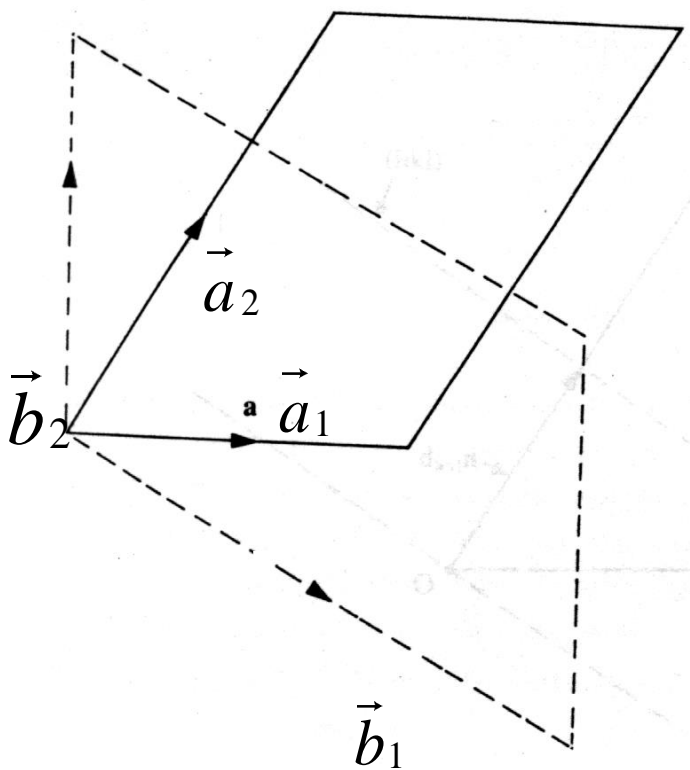
$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

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

1维



## 2维



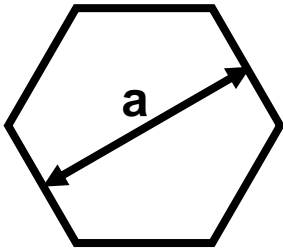
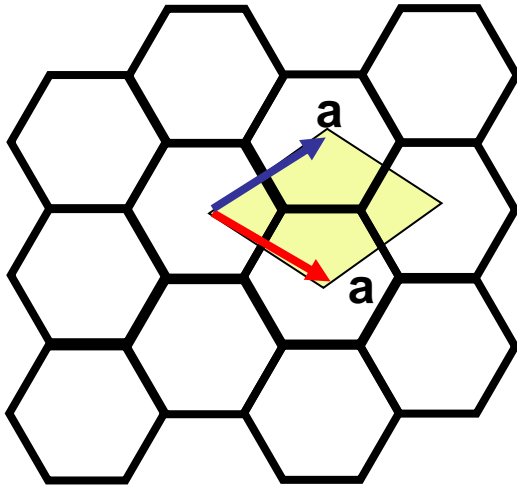
左图是一个二维斜方点阵和它的倒易点阵， $\vec{b}_1 \perp \vec{a}_2, \vec{b}_2 \perp \vec{a}_1$ ,

$$\vec{b}_2 \cdot \vec{a}_2 = \vec{a}_1 \cdot \vec{b}_1 = 2\pi$$

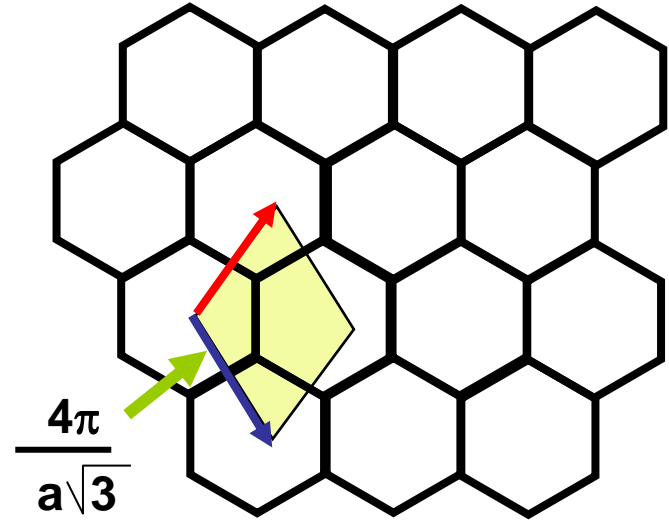
$$\vec{b}_1 \cdot \vec{a}_2 = \vec{b}_2 \cdot \vec{a}_1 = 0$$

# “Graphene”

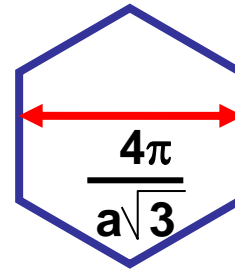
Real space



Reciprocal space




$$\frac{4\pi}{a\sqrt{3}}$$

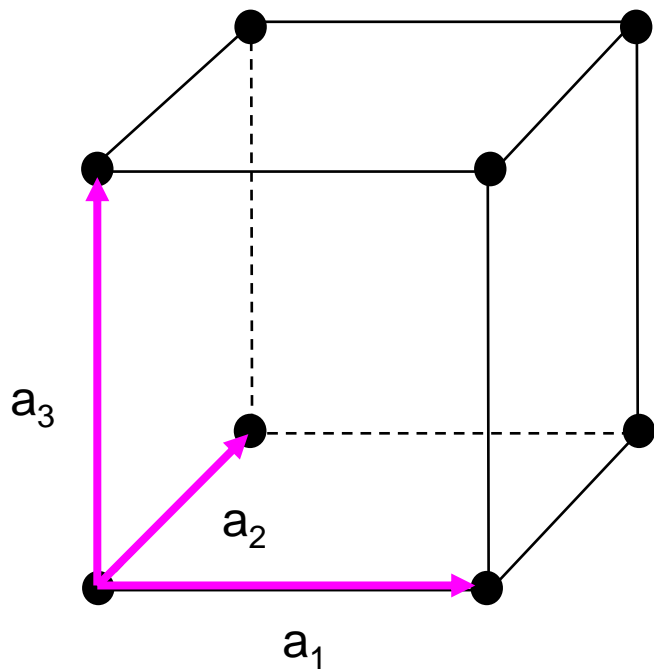


Real and reciprocal lattices appear to be rotated from one another !

# 三维

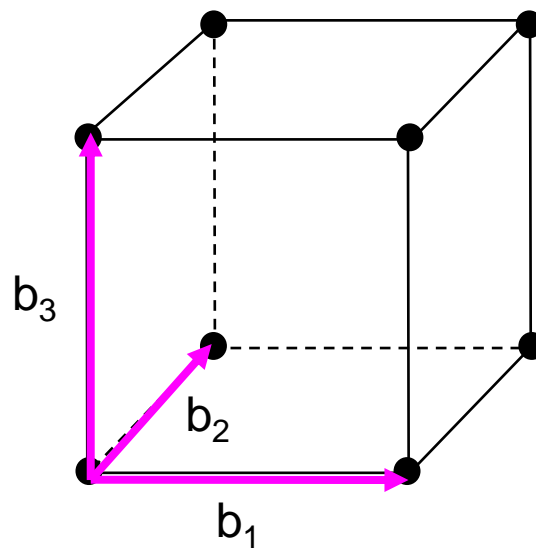
简立方点阵: 

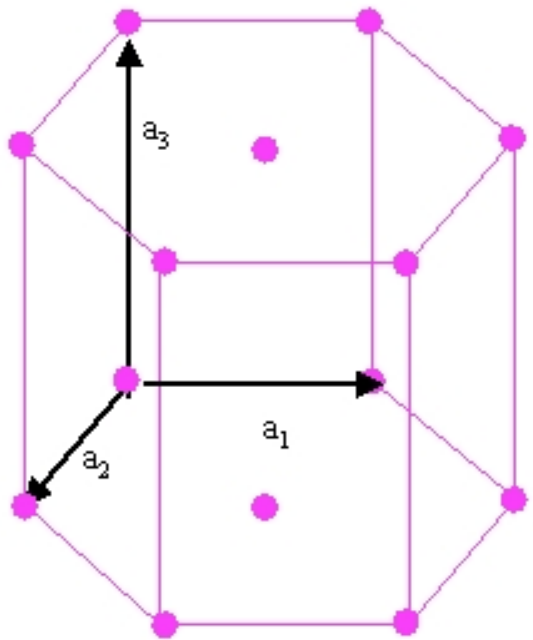
$$a_1 = a\vec{i}, a_2 = a\vec{j}, a_3 = a\vec{k}$$



倒易点阵仍是简立方点阵:

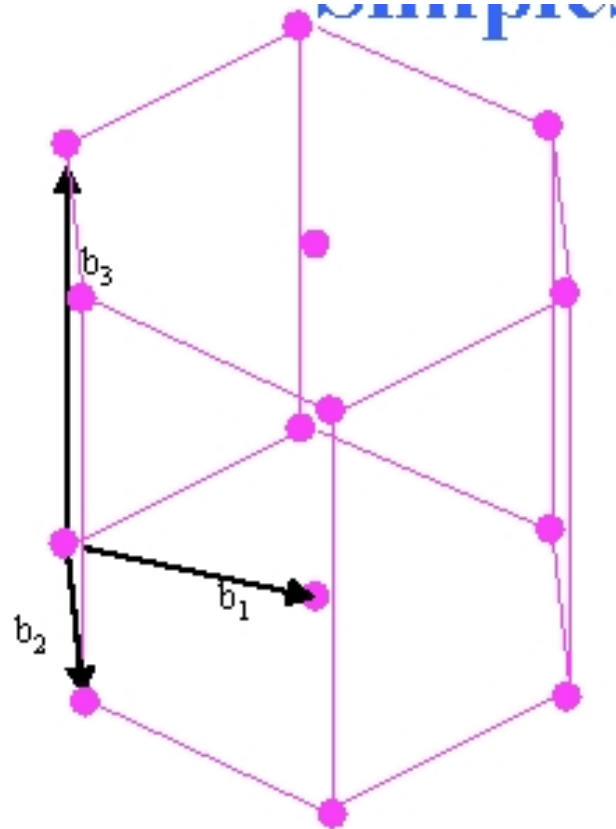
$$b_1 = \frac{2\pi}{a}\vec{i}, b_2 = \frac{2\pi}{a}\vec{j}, b_3 = \frac{2\pi}{a}\vec{k},$$





Hexagonal Bravais Lattice

$$a_1 = a_2 = a, a_3 = c$$

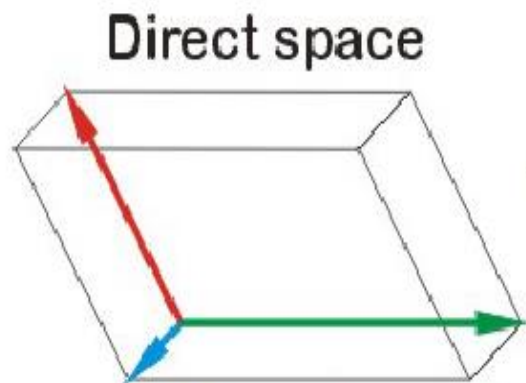


Reciprocal Lattice

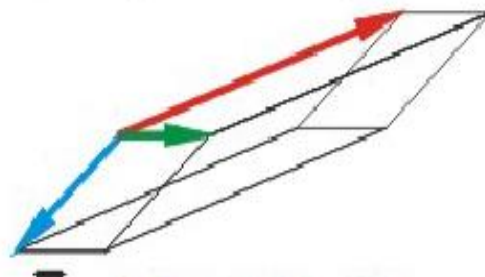
$$b_1 = b_2 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}, b_3 = \frac{2\pi}{c}$$

习题1.12

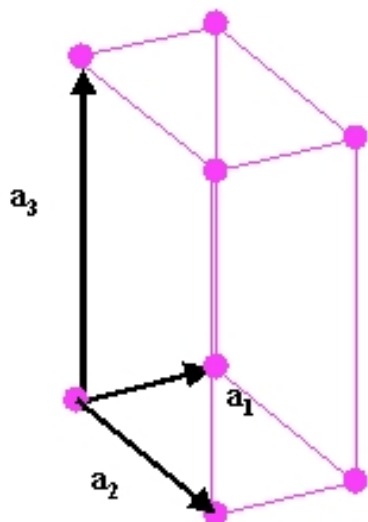
正格子空间六方结构，在倒格子空间亦为六方结构。不过其基矢尺寸关系发生变化，基矢方向也转了一个角度。



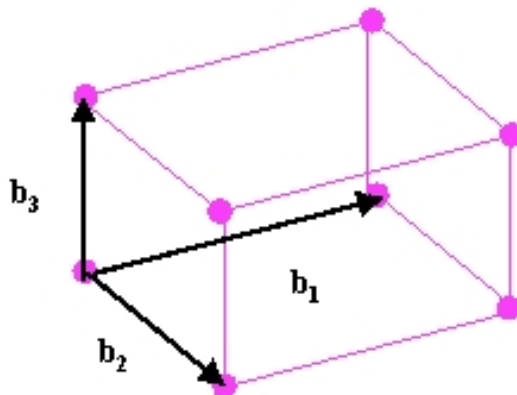
Reciprocal space



正点阵为简单点阵，倒易点阵也是简单点阵。



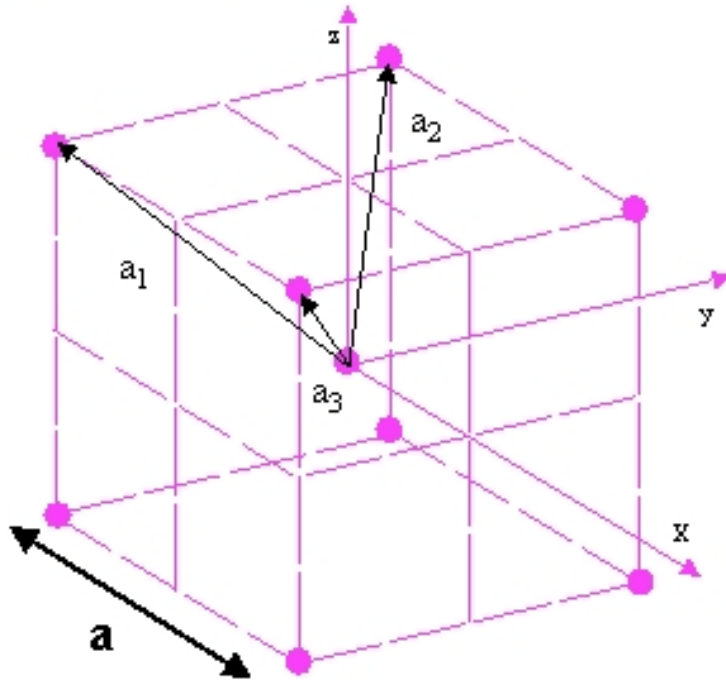
Simple Orthorhombic Bravais Lattice  
with  $a_3 > a_2 > a_1$



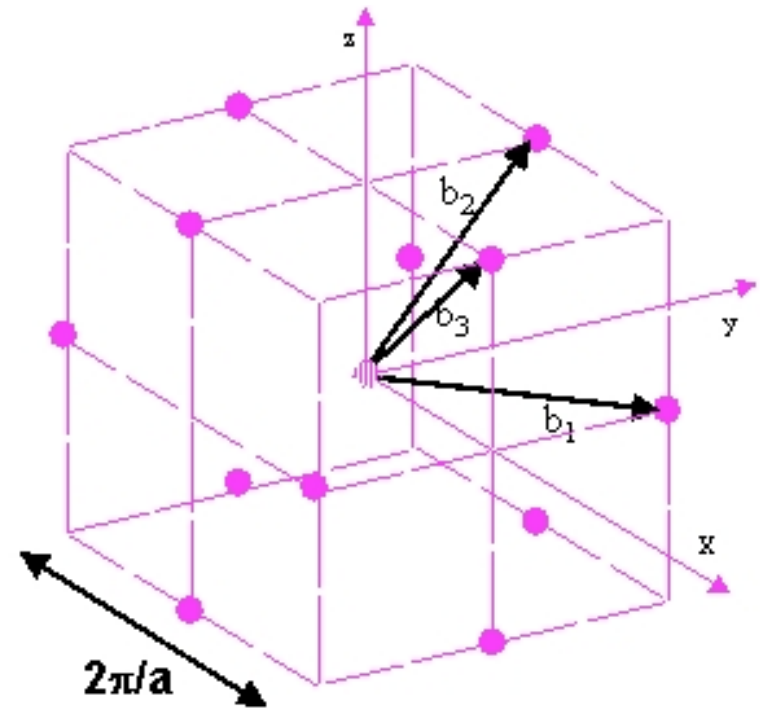
Reciprocal Lattice  
Note:  $b_1 > b_2 > b_3$

正格子空间中长的基矢 $a_3$ 对应于倒格子空间短的基矢 $b_3$ ，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。**

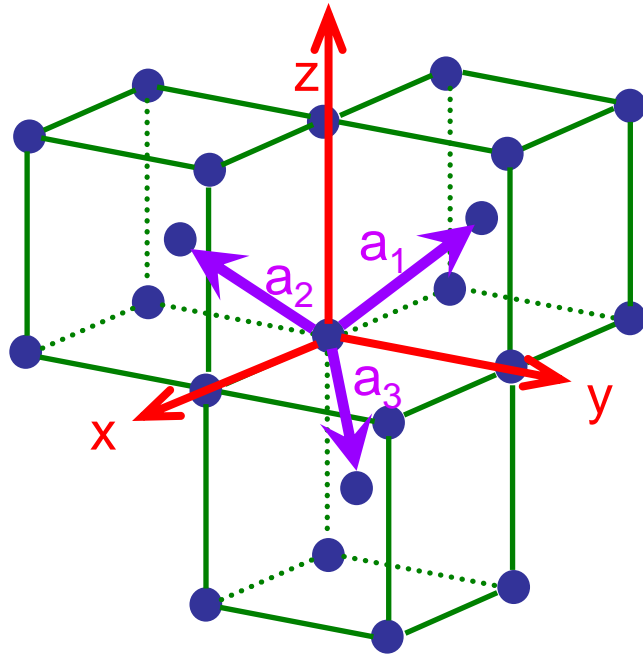


Primitive vectors and the conventional cell of bcc lattice



Reciprocal lattice is Face Centered Cubic

# Reciprocal Lattice to BCC Lattice



Crystal lattice

Primitive translation vectors :

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} (-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z});$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2} (\hat{x} - \hat{y} + \hat{z});$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2} (\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

$$\text{Volume} = a^3/2$$

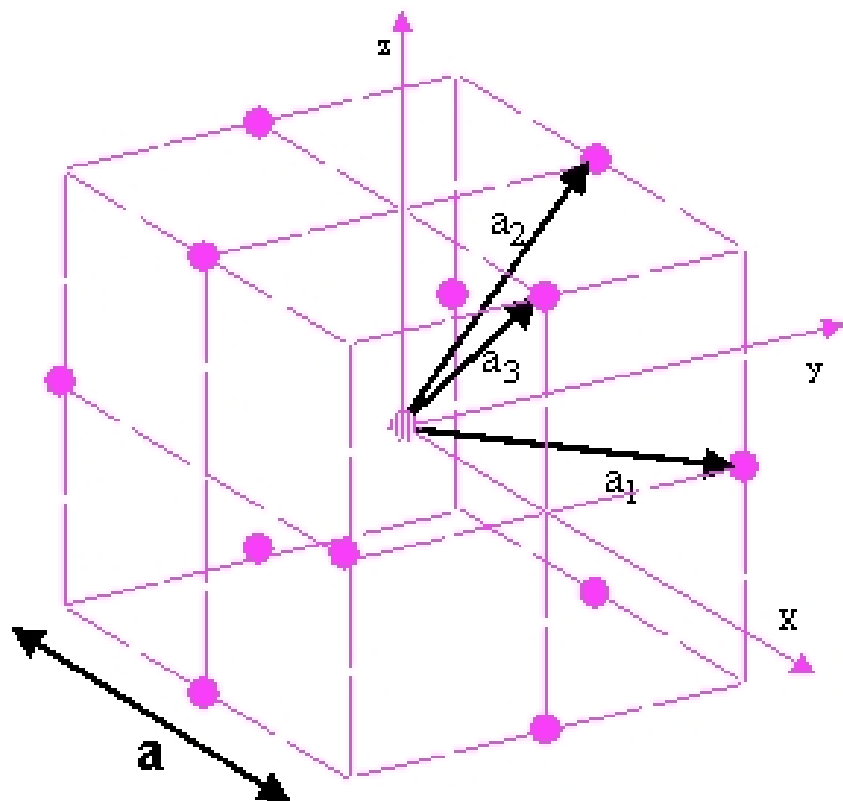
Reciprocal lattice

Primitive translation vectors :

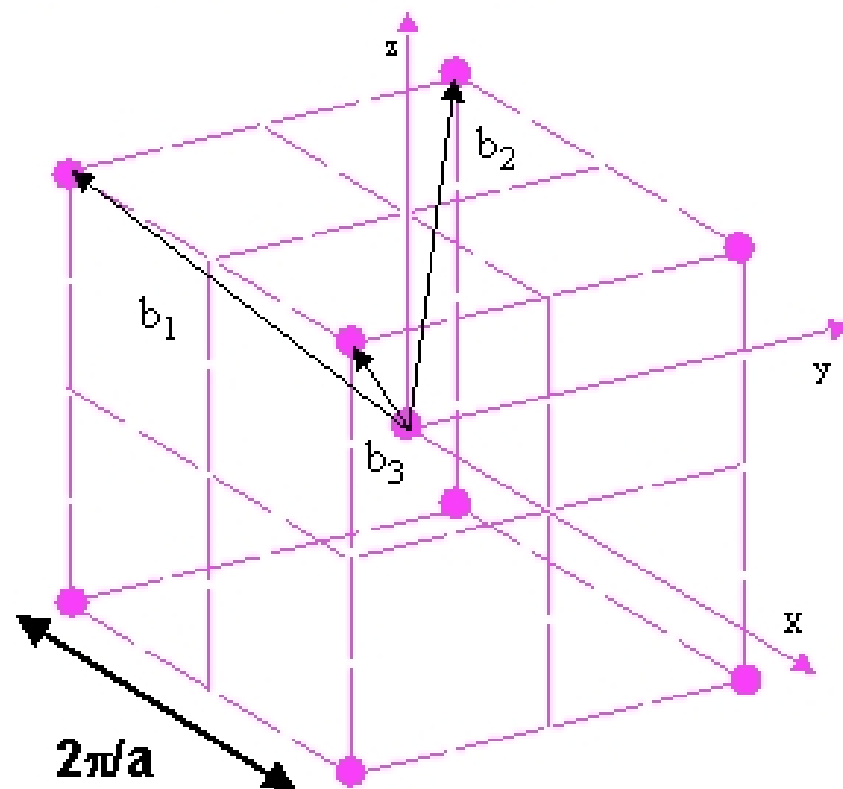
$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} (\hat{y} + \hat{z}); \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} (\hat{z} + \hat{x}); \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a} (\hat{x} + \hat{y})$$

FCC lattice

而面心立方点阵的倒格子为体心立方点阵。  
(具体证明见习题1.11)

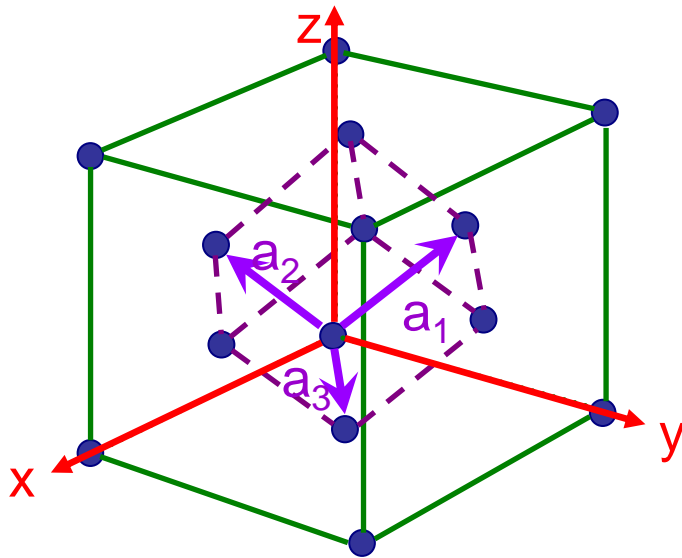


Primitive vectors and the conventional cell of fcc lattice



Reciprocal lattice is Body Centered Cubic

# Reciprocal Lattice to FCC Lattice



Crystal lattice

Primitive translation vectors :

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} (\hat{y} + \hat{z}) ;$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2} (\hat{z} + \hat{x}) ;$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2} (\hat{x} + \hat{y})$$

$$\text{Volume} = a^3/4$$

Reciprocal lattice

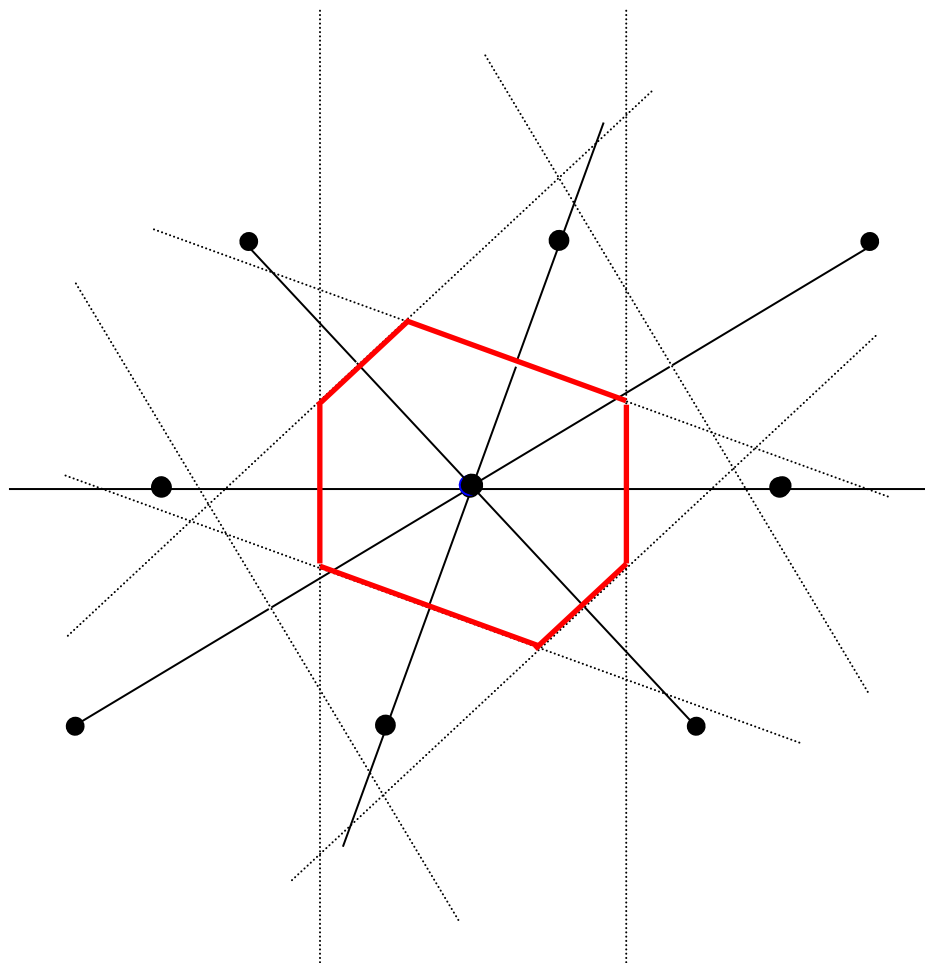
Primitive translation vectors :

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} (-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) ; \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} (\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}) ; \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a} (\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

BCC lattice

## 五. 布里渊区:

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。

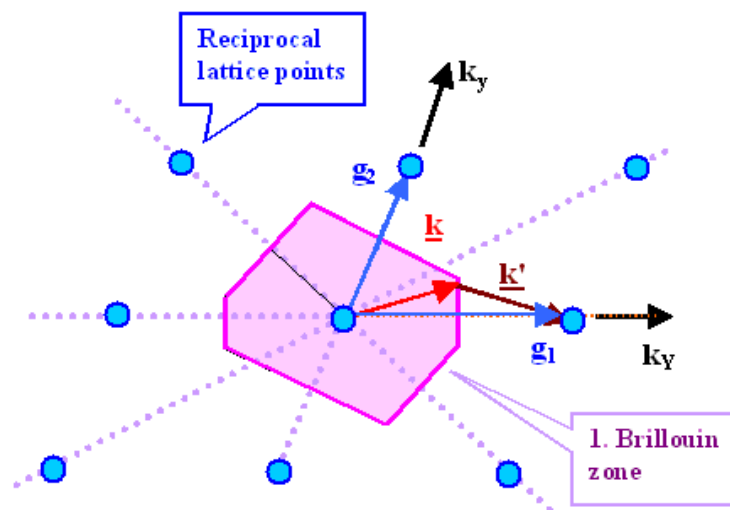


**布里渊区定义：**在**倒易点阵**中，以某一格点为坐标原点，做所有倒格矢的垂直平分面，倒易空间被这些平面分成许多包围原点的多面体区域，这些区域称作布里渊区，其中**最靠近原点的平面所围成的区域称作第一布里渊区**，第一布里渊区界面与次远垂直平分面所围成的区域称作第二布里渊区，依次类推得到二维正方格子的布里渊区图见下页。

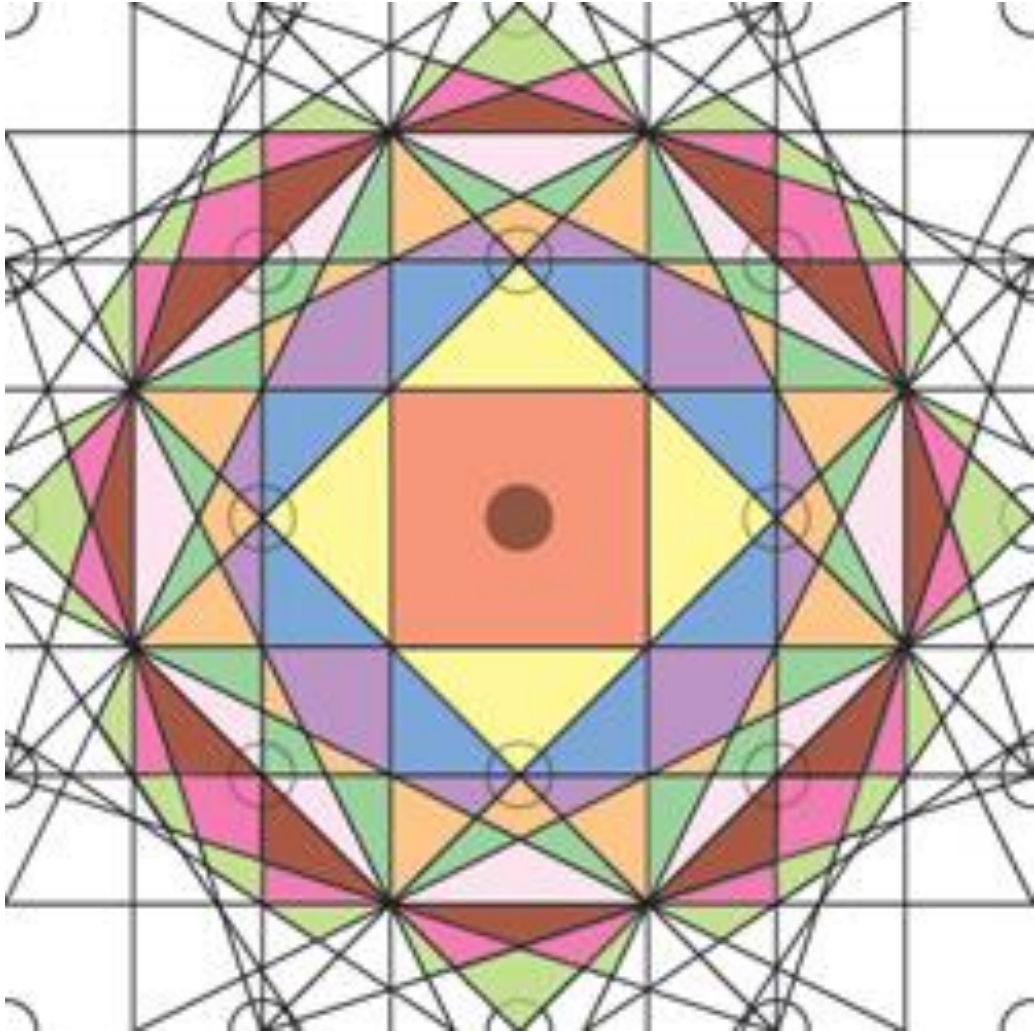
由于布里渊区界面是某倒格矢  $\vec{G}$  的垂直平分面，如果用  $\vec{k}$  表示从原点出发、端点落在布里渊区界面上的倒易空间矢量，它必然满足方程：

$$\vec{k} \cdot \vec{G} = \frac{1}{2} G^2$$

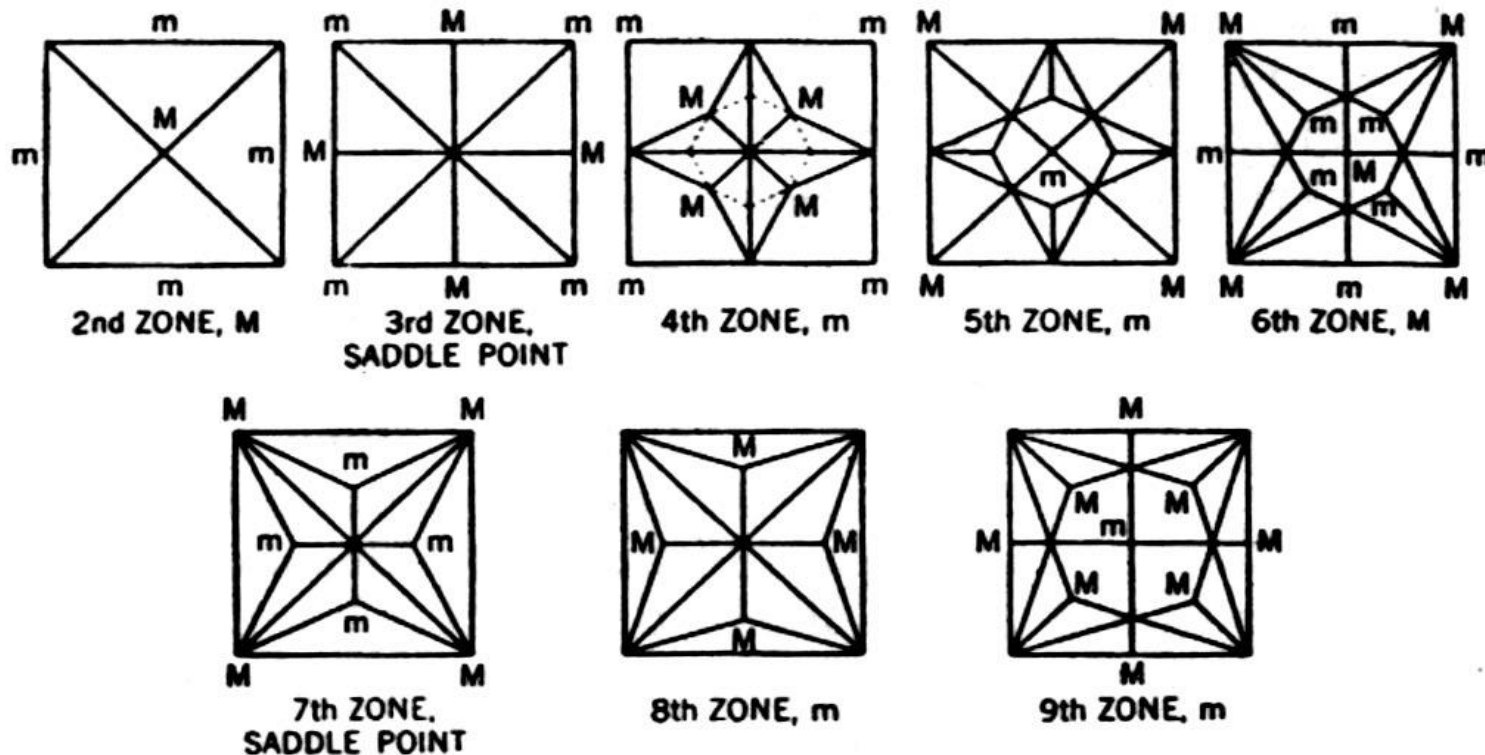
该方程称作布里渊区的界面方程



# 正方点阵布里渊区



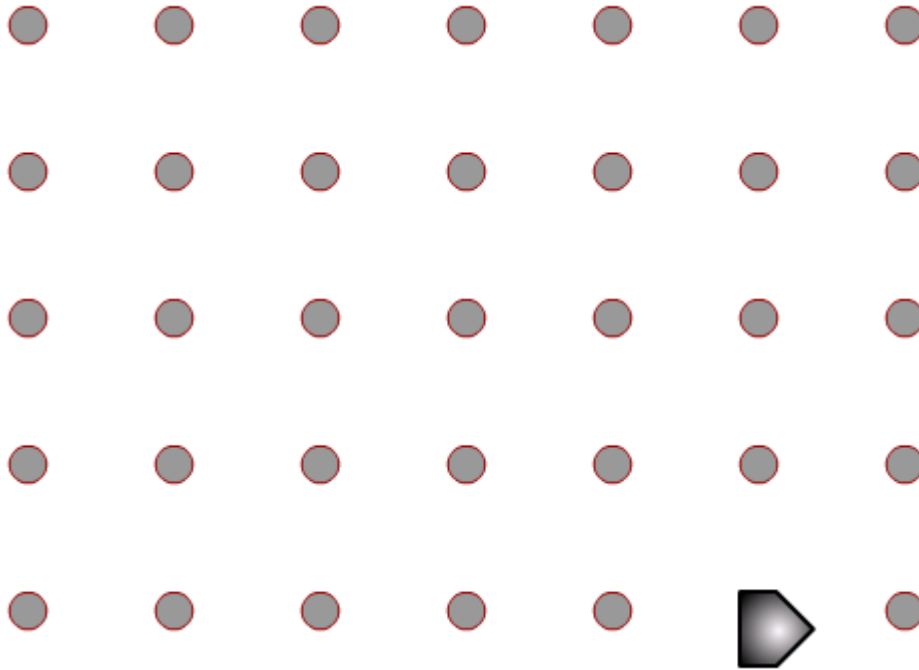
# 第二到第九Brillouin区约化到第一布里渊区



**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

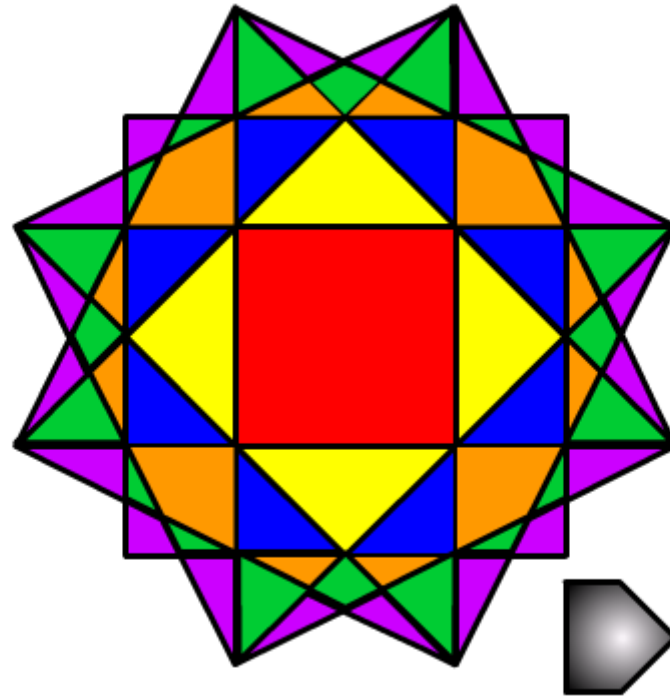
# 布里渊区构造动画

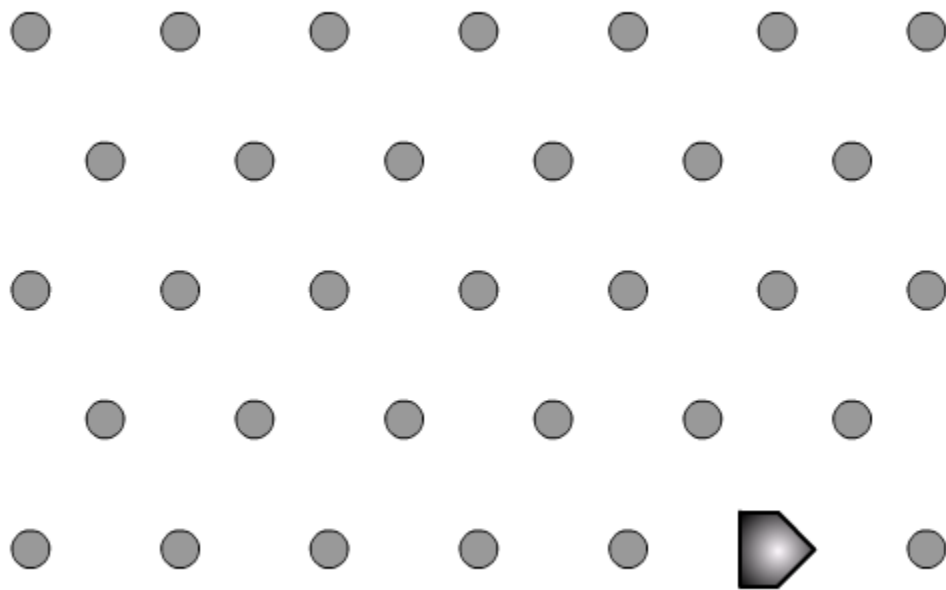


正方倒格子

[https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/brillouin\\_zones/zone\\_construction.php](https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/brillouin_zones/zone_construction.php)

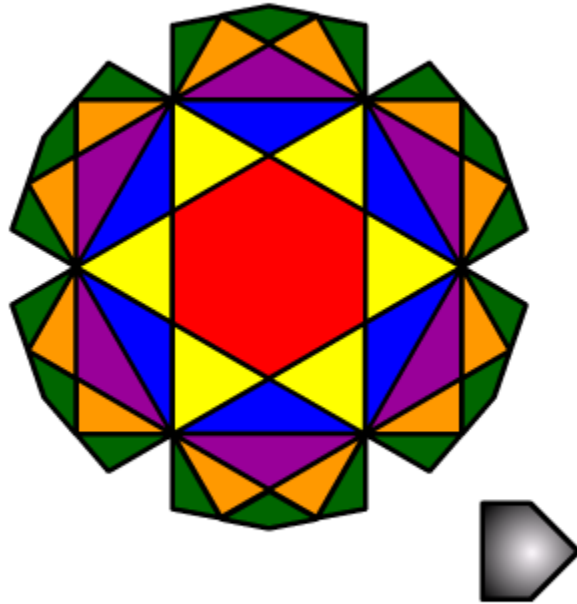
# 正方倒格子中第2到第6 Brillouin区约化到第一布里渊区的动画



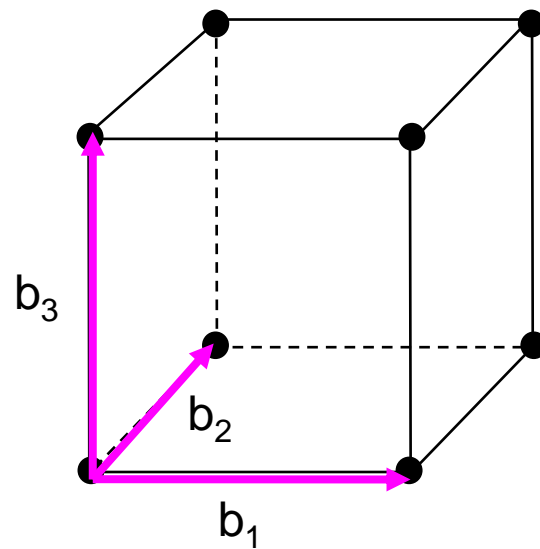
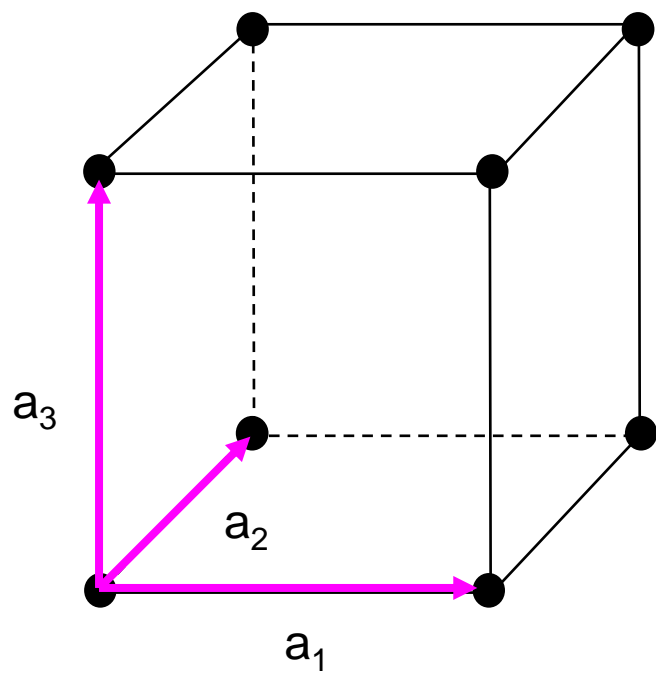


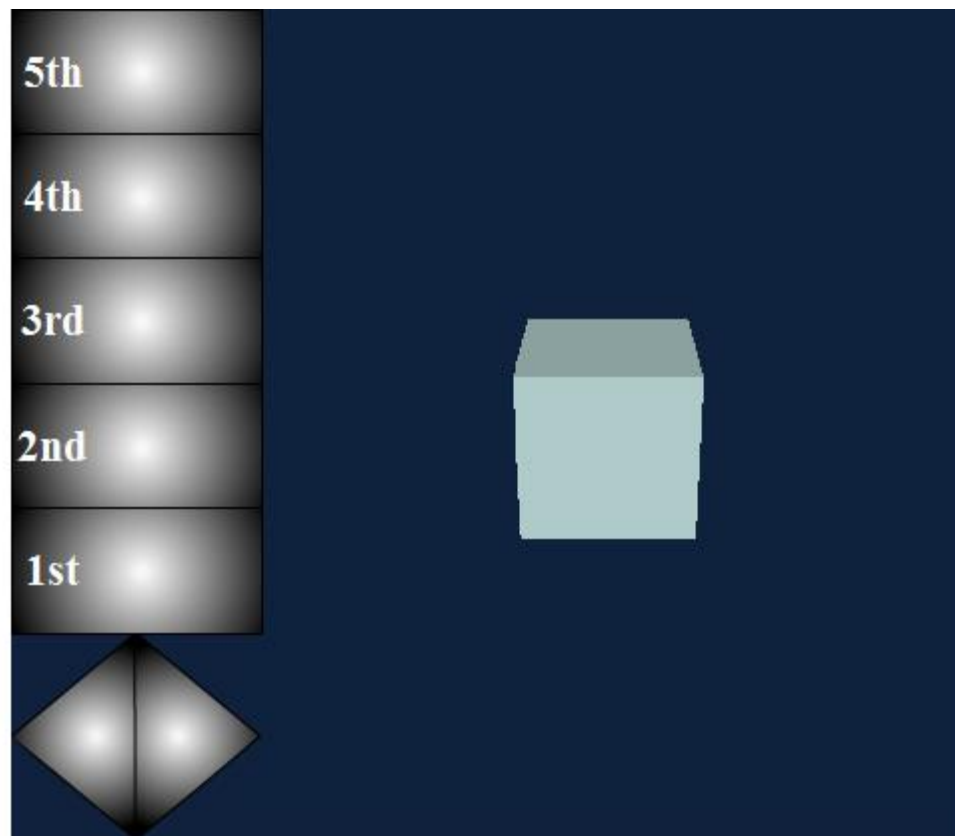
六角倒格子

# 六角倒格子中第2到第6 Brillouin区约化到第一布里渊区的动画



# 简立方 (sc)

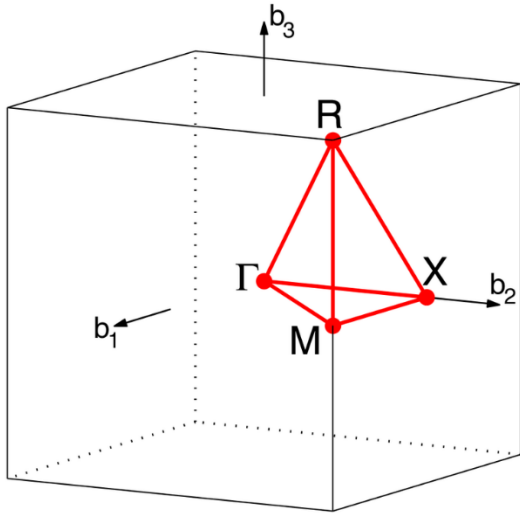




简立方（**sc**）倒格子布里渊区

# sc: 布里渊区的高对称点

简单立方



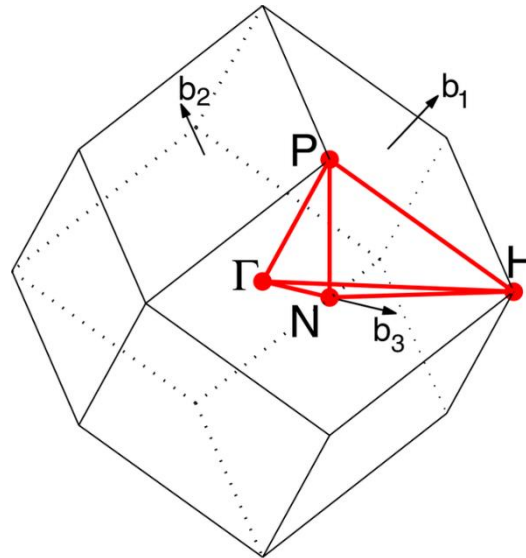
CUB path:  $\Gamma$ -X-M- $\Gamma$ -R-X|M-R

$$\Gamma : (0,0,0)$$

$$X : \frac{\pi}{a}(1,0,0)$$

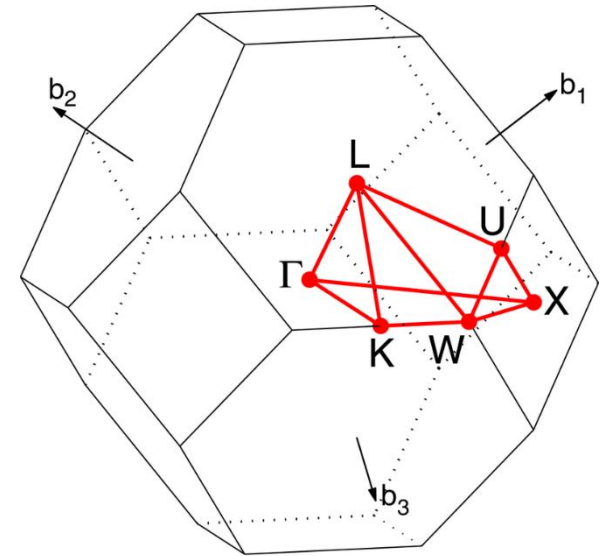
$$R : \frac{\pi}{a}(1,1,1)$$

体心立方



BCC path:  $\Gamma$ -H-N- $\Gamma$ -P-H|P-N

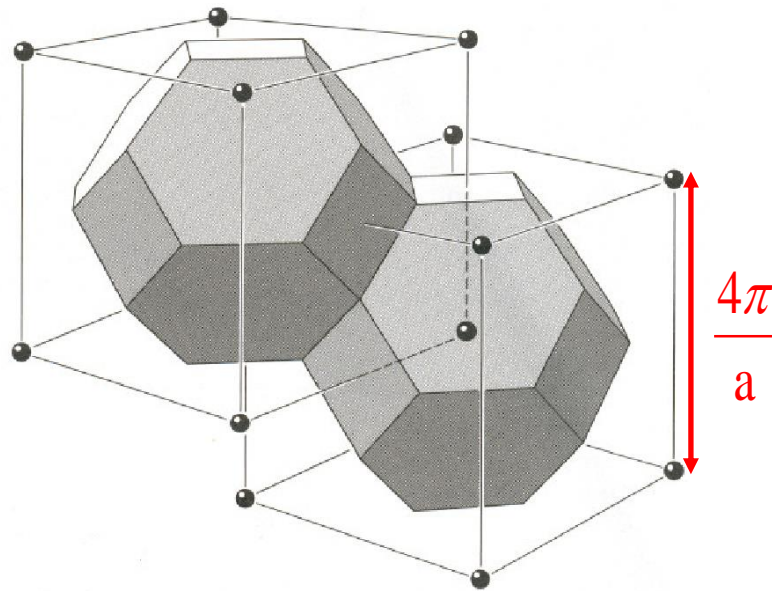
面心立方



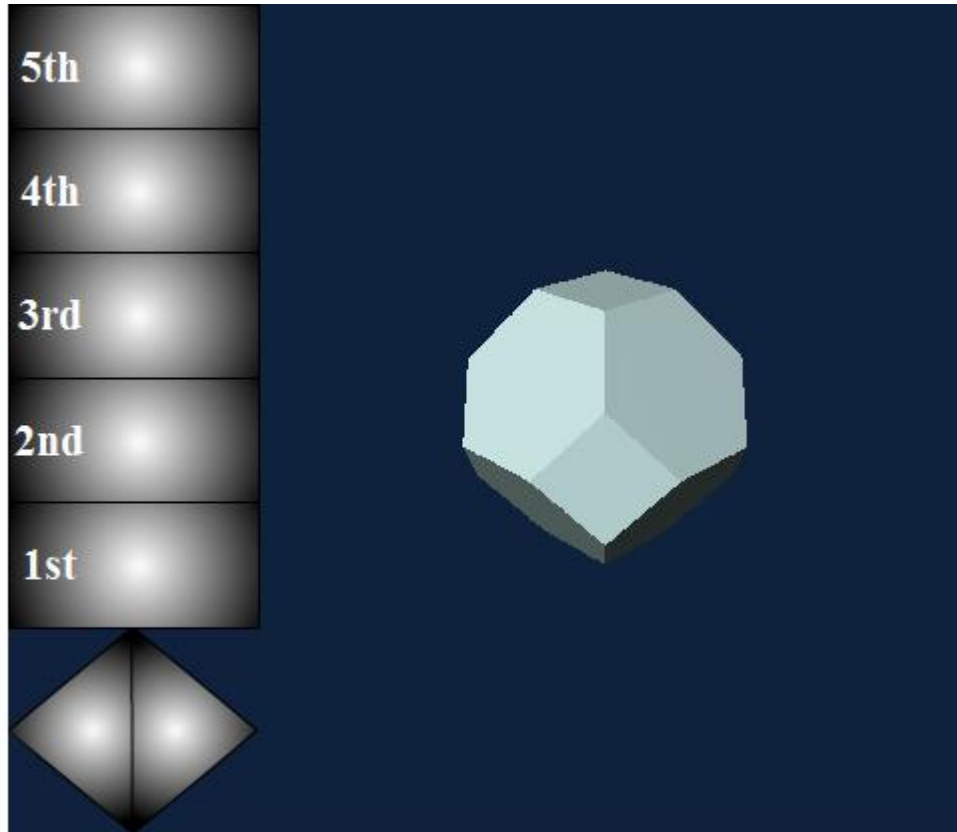
FCC path:  $\Gamma$ -X-W-K- $\Gamma$ -L-U-W-L-K|U-X

见黄昆书图4-24(p194)

## fcc 格子的倒格子 (bcc) 及布里渊区

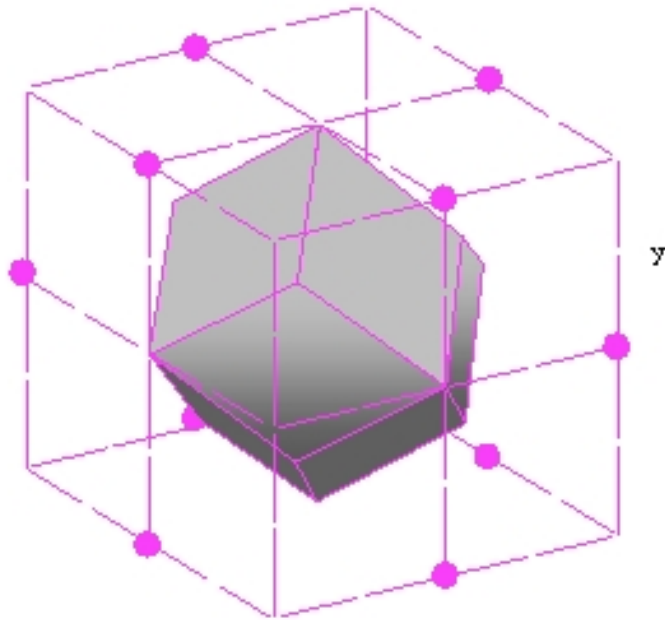


**Figure 15** Brillouin zones of the face-centered cubic lattice. The cells are in reciprocal space, and the reciprocal lattice is body centered.

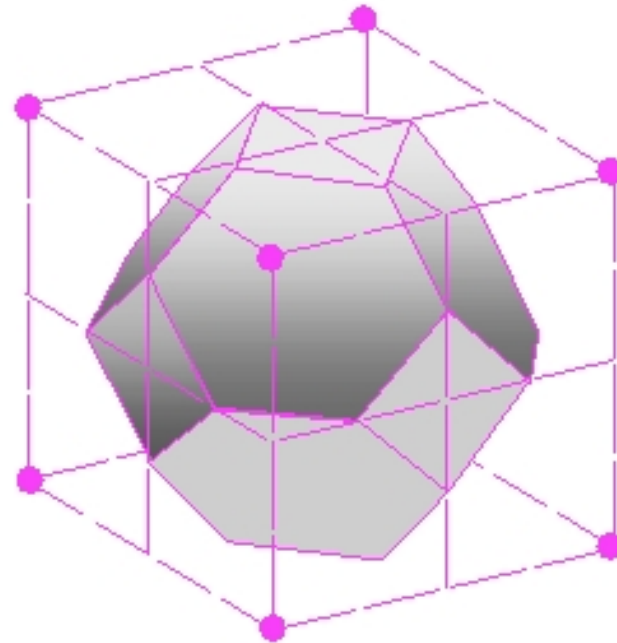


**Fcc**倒格子布里渊区

# 面心立方的Wigner-Seitz原胞及第一布里渊区

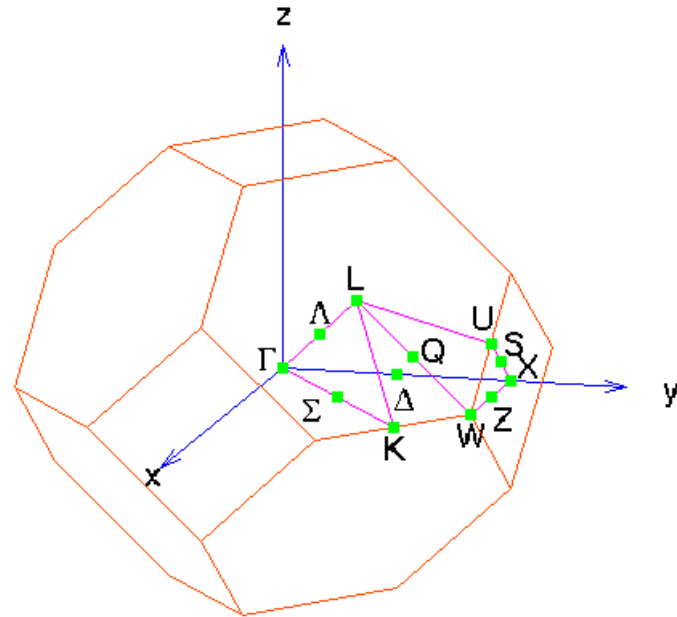
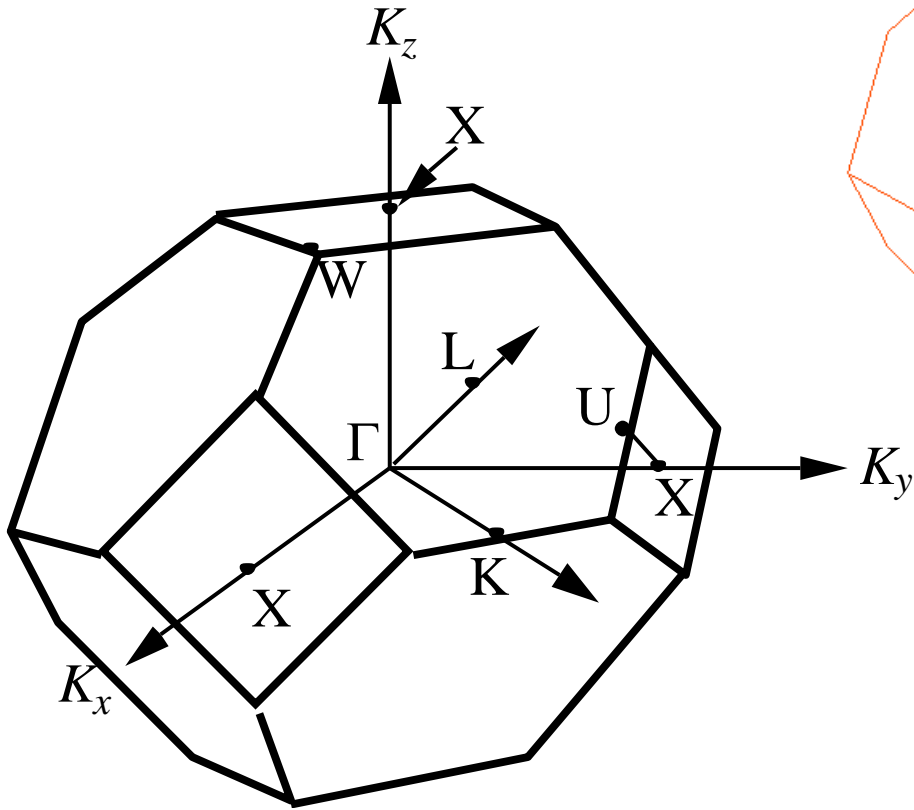


Wigner-Seitz Cell for  
Face Centered Cubic Lattice



Brillouin Zone =  
Wigner-Seitz Cell for  
Reciprocal Lattice

# fcc: 布里渊区的高对称点



1<sup>st</sup> Brillouin Zone

$$\Gamma : (0, 0, 0)$$

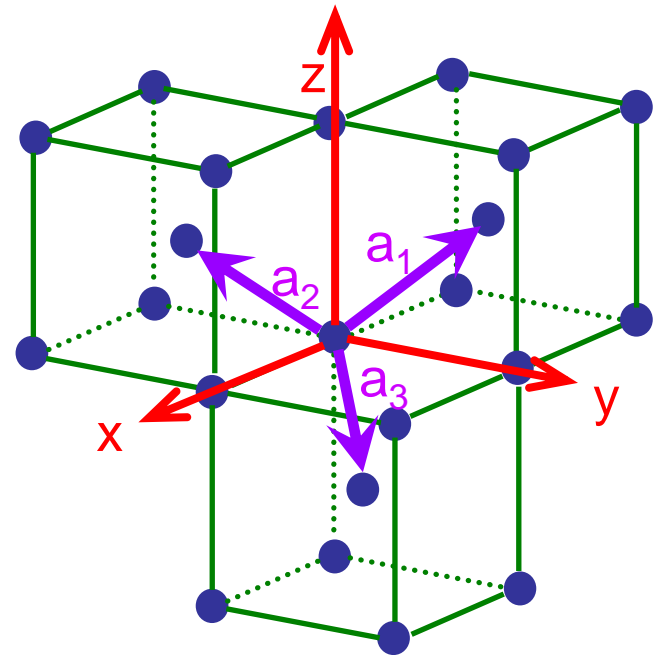
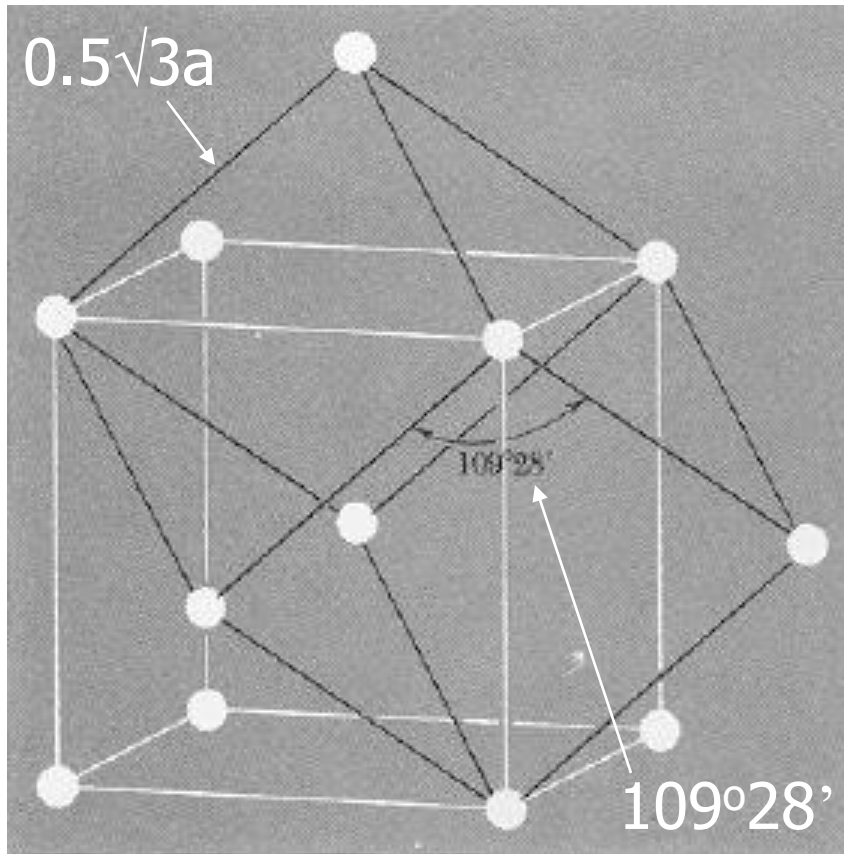
$$X : \frac{2\pi}{a} (1, 0, 0)$$

$$L : \frac{2\pi}{a} \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right)$$

$$K : \frac{2\pi}{a} \left( \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0 \right)$$

# bcc正格子

- Rhombohedron primitive cell



## bcc 格子的倒格子 (fcc) 及布里渊区

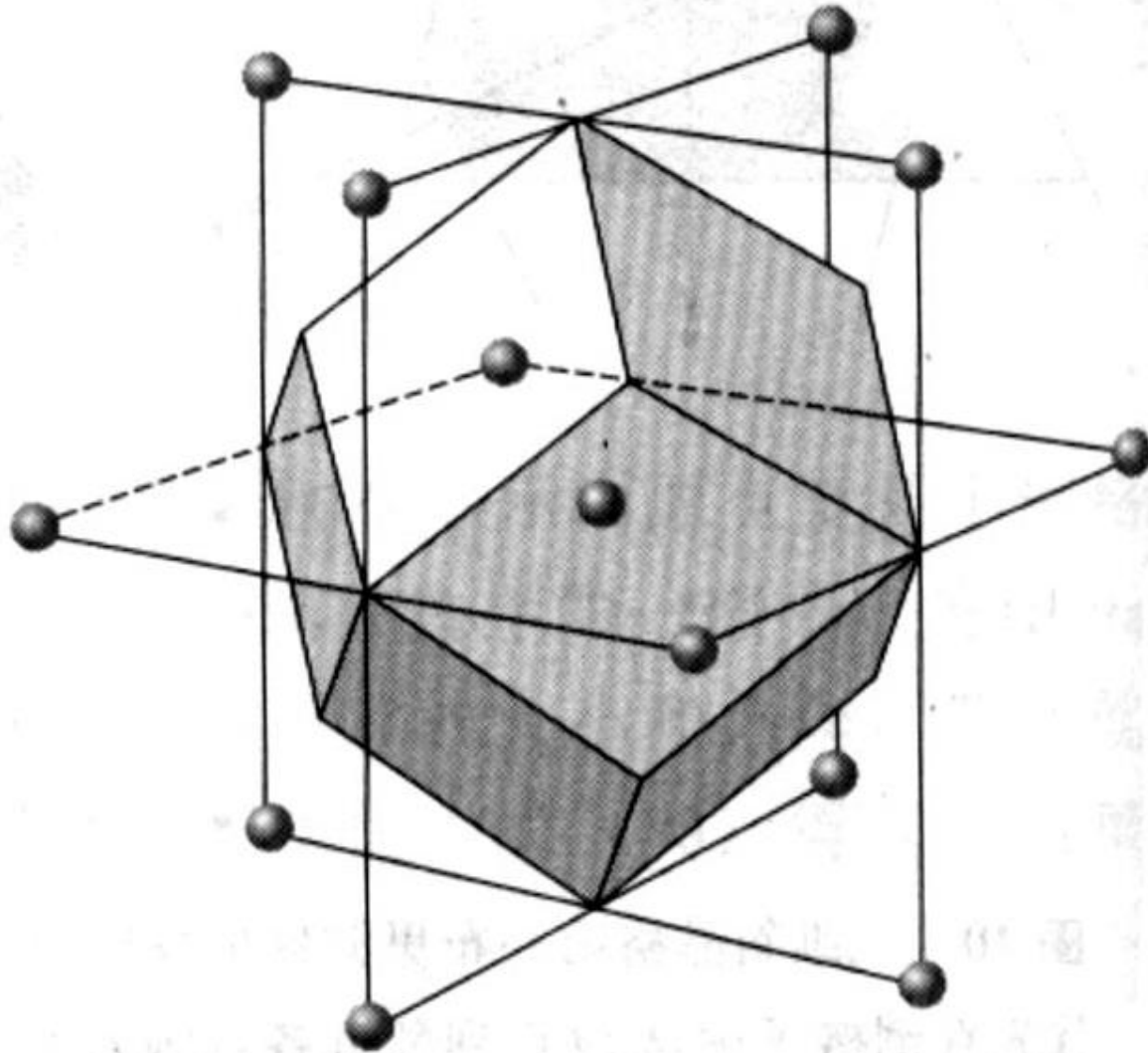


图 13 体心立方晶格的第一布里渊区，  
图形是一个正菱形十二面体。

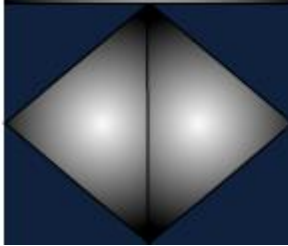
5th

4th

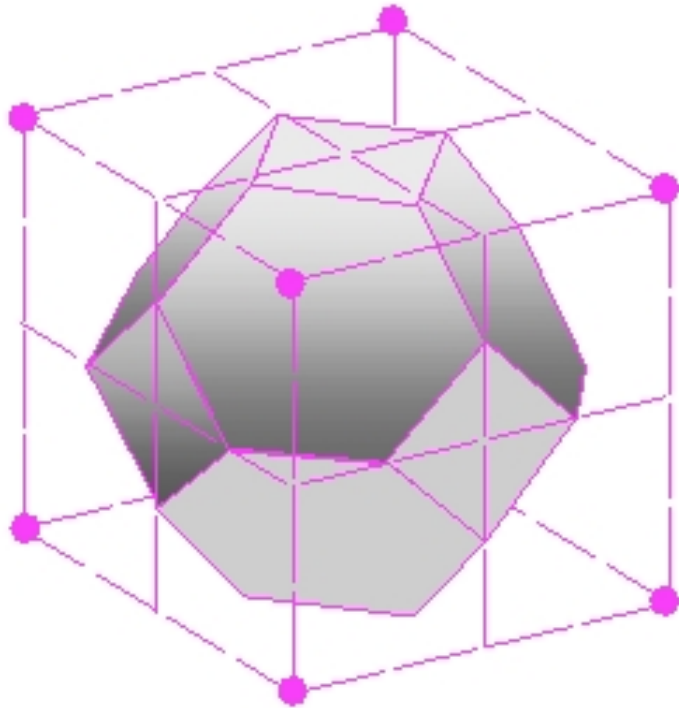
3rd

2nd

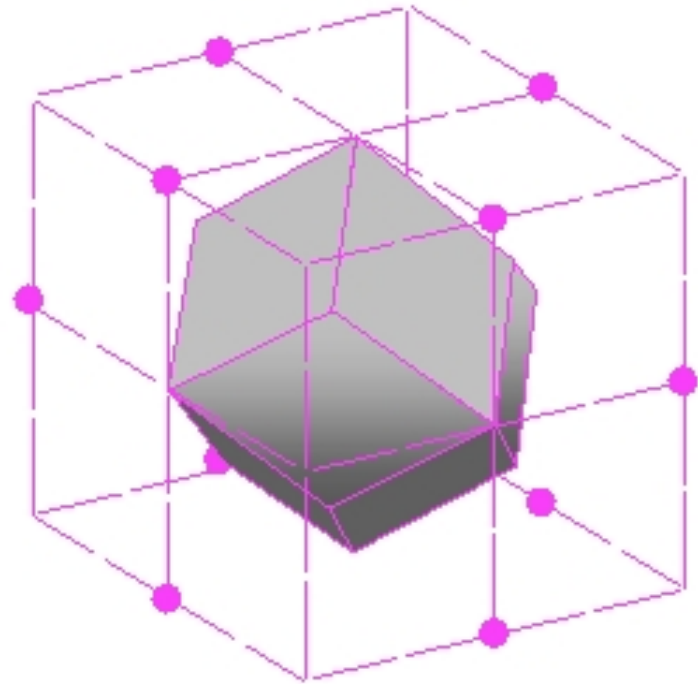
1st



# 体心立方的Wigner-Seitz原胞及第一布里渊区



Wigner-Seitz Cell for  
Body Centered Cubic Lattice



Brillouin Zone =  
Wigner-Seitz Cell for  
Reciprocal Lattice

$$\frac{4\pi}{a}$$

# bcc: 布里渊区的高对称点

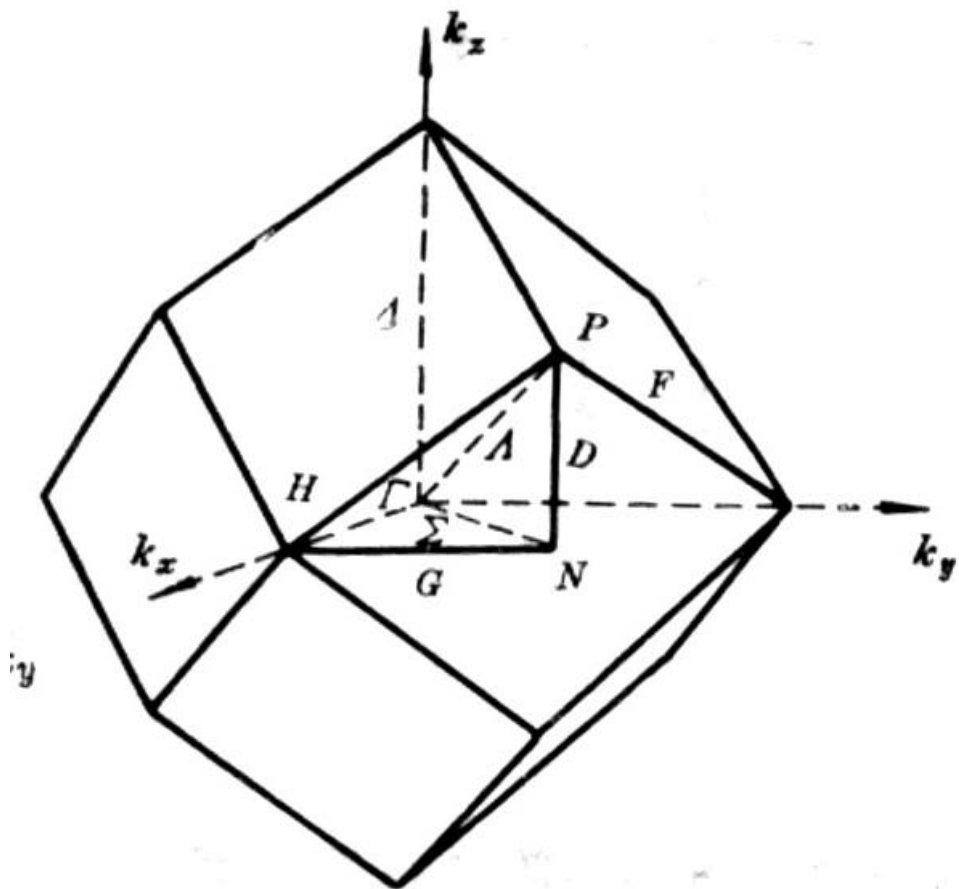
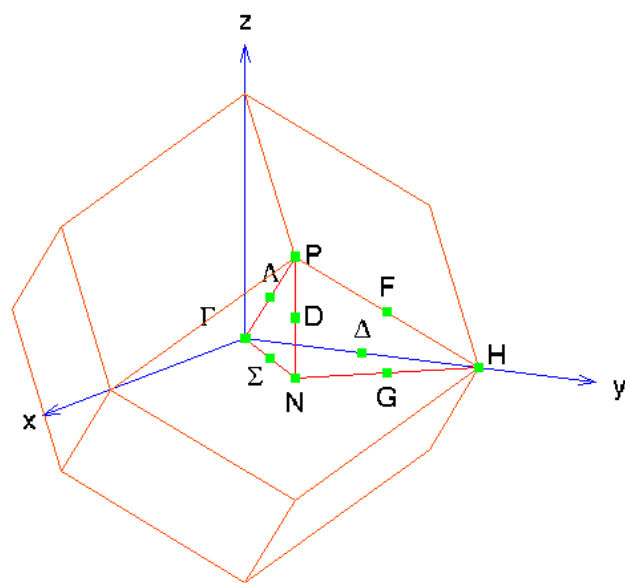


图6-10 体心立方晶格的简约布里渊区



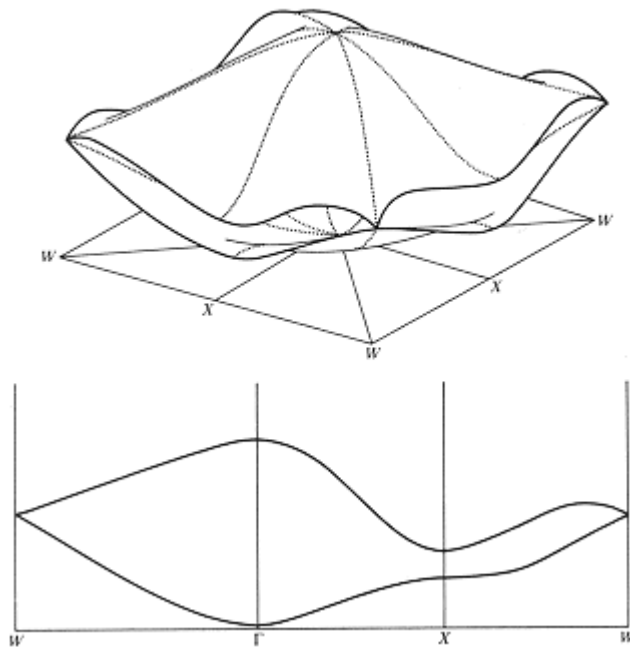
$$\Gamma : (0, 0, 0)$$

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

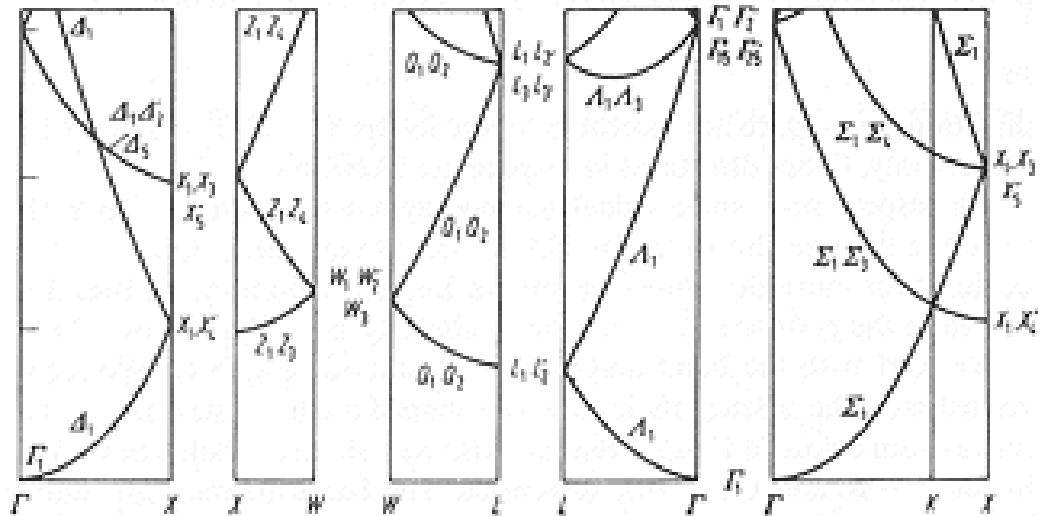
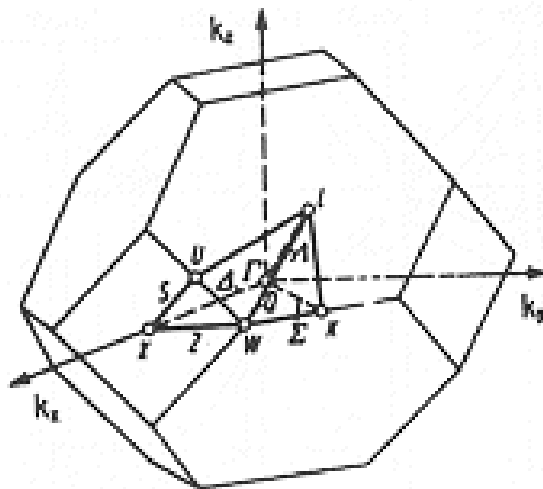
$$P : \frac{2\pi}{a} \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right)$$

$$N : \frac{2\pi}{a} \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0 \right)$$

# 能带与高对称点



It would be sufficient for most purposes to know the  $E_n(\mathbf{k})$  curves - the dispersion relations - along the major directions of the reciprocal lattice ( $n$  is the band index).



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。