第二课：晶体结构

Wednesday, August 28, 2019 1:21 PM

1. 期中考试(重理解图像)：
   a. 第二章(自学)；
   b. 第三章；
   c. 第四章；
2. 期末考试(理解图像和演算并重)；
3. 基矢：确定原胞(晶胞)大小的矢量。原胞(晶胞)以基矢为周期排列，因此，基矢的大小为晶格常数；
4. 格矢：
   a. $\vec{R} = p\vec{a} + q\vec{b}$(p,q为整数)；
   b. $\vec{\mathrm{R}} = \mathrm{p}\vec{\mathrm{a}} + \mathrm{q}\vec{\mathrm{b}} + \mathrm{s}\vec{\mathrm{c}}$(p,q,s为整数)；
5. 晶格：由平移矢量R形成的有规则排列的空间点阵；
6. 格点：以R指定的点，称为格点；即空间点阵中的点；
7. 晶胞：晶体中最小的重复单元；
8. 原胞：只含有一个格点的晶胞；
9. 正格子：实空间中，晶体中的原子排列成的晶格点阵，称为正格子；
10. 倒格子**(VIP)**：为了方便描述和讨论晶体中传播的晶格振动或电子的运动及其状态等，引入的一个与正格子相关联的空间关系。描述倒格子所存在的空间也称为倒空间或K空间(K为波矢量)；
    a. $\frac{1}{L}, \frac{2\pi}{\lambda} = k, p = \bar{h}k;$
    b. 电子状态：$\mathrm{E}, \mathrm{k}, \Phi$ ；
    c. 假设倒格子的基矢为$\vec{\mathrm{b}}_1, \vec{\mathrm{b}}_2, \vec{\mathrm{b}}_3$，它们与正格子基矢$\vec{\mathrm{a}}_1, \vec{\mathrm{a}}_2, \vec{\mathrm{a}}_3$的关系为：

$$\vec{b}_1 \cdot \vec{a}_1 = \vec{b}_2 \cdot \vec{a}_2 = \vec{b}_3 \cdot \vec{a}_3 = 2\pi$$

$$\vec{b}_1 \cdot \vec{a}_2 = \vec{b}_1 \cdot \vec{a}_3 = \vec{b}_2 \cdot \vec{a}_3 = \vec{b}_2 \cdot \vec{a}_1 = \vec{b}_3 \cdot \vec{a}_1 = 0$$

或写成：

$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij} \quad (i,j = 1,2,3)$$

其中：

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

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

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