



石家莊鐵道大學
SHIJIAZHUANG TIEDAO UNIVERSITY

在线开放课程

X射线衍射技术

倒易点阵

主讲：杨治刚

目录



在线开放课程

1 倒易点阵概述

2 倒易点阵与晶体点阵关系

3 倒易点阵物理意义

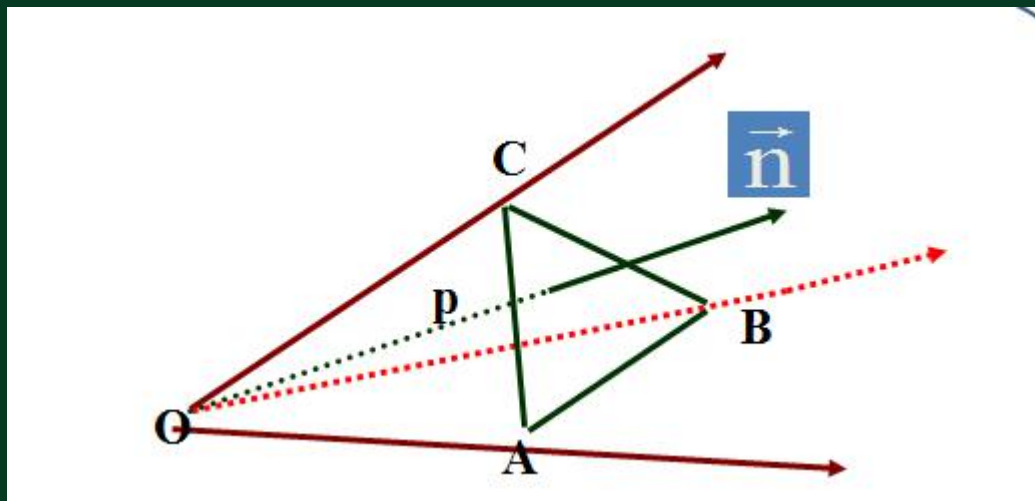
倒易点阵概述



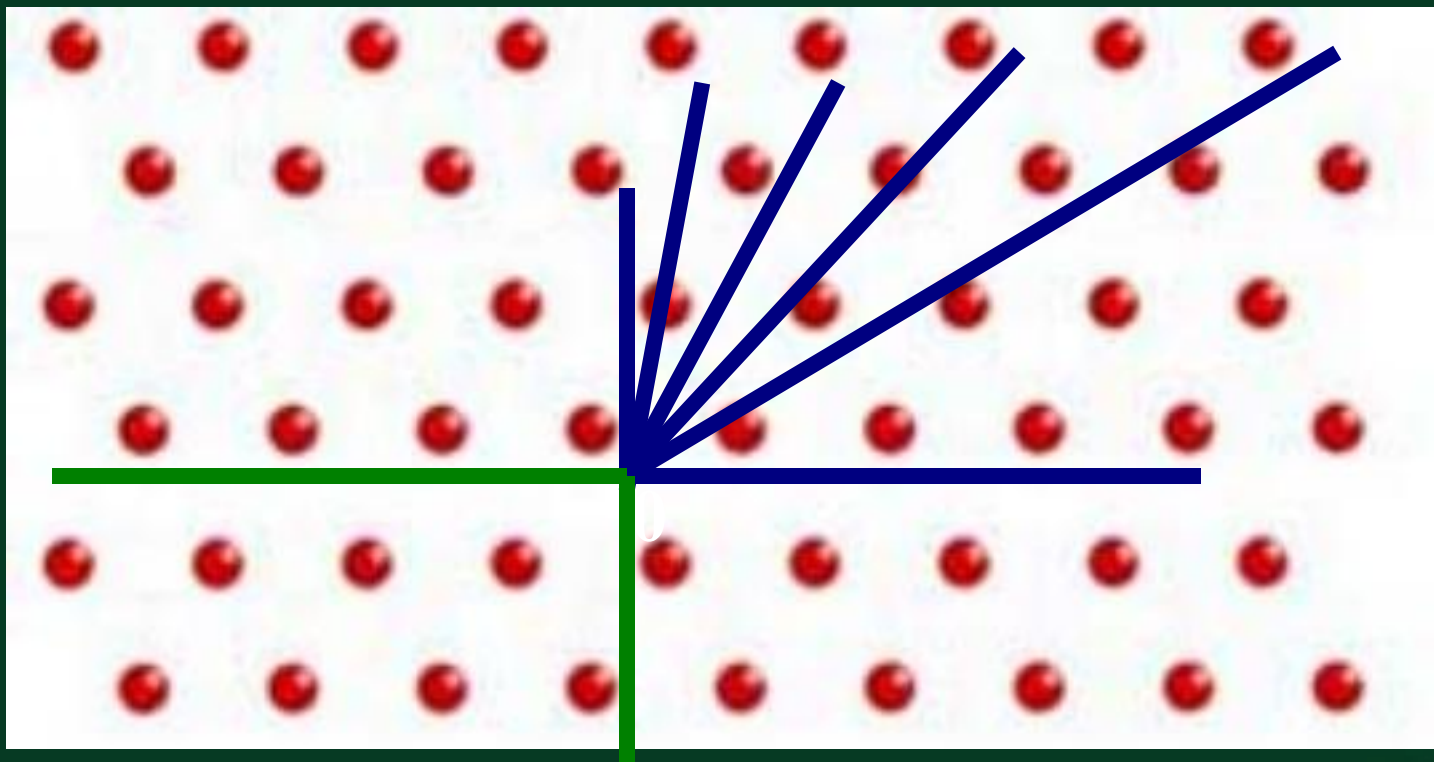
在线开放课程

- 为了便于处理晶体结构同其 X射线衍射效应的关系，最初由P. P. 厄瓦耳引进的概念。
- 倒易点阵是由被称为倒易点的点所构成的一种点阵，它也是描述晶体结构的一种几何方法，和空间点阵具有倒易关系。
- 倒易点阵中的一倒易点对应着空间点阵中一族晶面间距相等的点格平面。

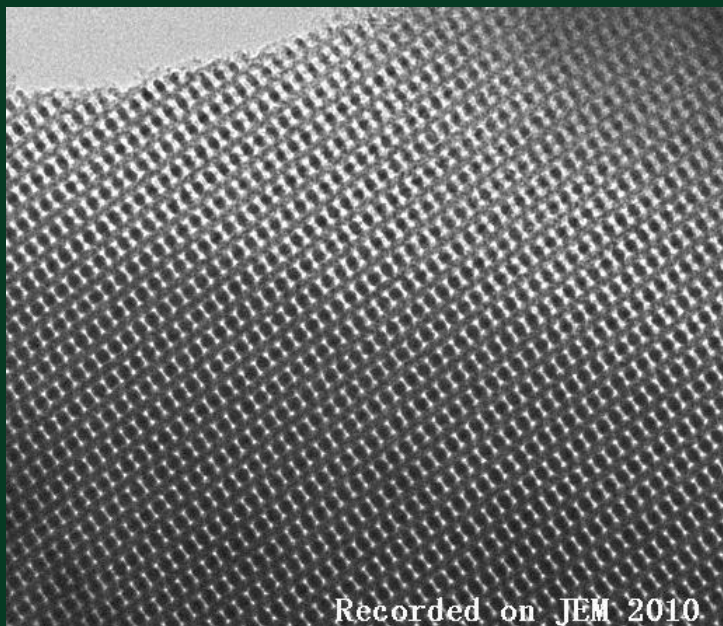
倒易点阵的定义



从O出发，沿着晶面法线方向，到达P点使得OP的大小为晶面间距的倒数，由此定出的点子组成新的点阵称为倒易点阵。



真实晶体结构和倒易点阵



倒易点阵和晶体点阵的关系

- 1) 倒易点阵基矢和晶体点阵（正点阵）基矢之间
有如下关系：

$$\vec{a}_i^* \cdot \vec{a}_j = \delta_{ij}$$

1 当 $i=j$ 时

0 当 $i \neq j$ 时

- 2) 正点阵晶面与对应倒易点阵格矢相互垂直。
- 3) 倒格矢大小的倒数是所对应的平行晶面之间的距离

- 4) 正点阵和倒易点阵是互易的
- 5) 同一晶格的正格子和倒格子有相同的点群对称性
- 6) 正空间中一族平行晶面对应于倒空间中一个直线点列

倒易矢量基本性质



在线开放课程

- 1. 倒易矢量方向垂直于正点阵中的晶面。
- 2. 倒易矢量的大小等于所对应晶面间距的倒数。

倒易点阵的物理意义

✂ 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 cm ，倒易点阵是 cm^{-1}

✂ 晶体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。

倒易点阵的物理意义



在线开放课程

✂ 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。

倒易点阵的物理意义

***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。**

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。

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

小结



在线开放课程

1. 倒易点阵的表达
2. 倒易点阵物理意义