

晶体倒易空间变换及衍射与散射谱学的教学探索

沈 烨¹ 杨 银¹ 王晓蕾² 刘中灏¹

(¹ 宁波大学物理科学与技术学院, 高压物理科学研究所, 浙江 宁波 315000;

² 北京工业大学物理与光电工程学院, 北京 100124)

摘 要 在固体物理学中, 倒易空间是理解晶体结构、衍射现象以及声子与电子等谱学的核心概念。然而在本科教学中, 该概念常以抽象的数学形式呈现, 学生难以将其与具体实验和物理图像建立有效联系。针对这一教学痛点, 本文以固体物理和材料物理本科课程为对象, 提出以倒易空间为主线的教学设计方案, 将其视为晶体周期结构在傅里叶变换意义下的自然表达, 系统阐述倒易空间的数学基础与物理内涵, 并将其贯穿于衍射与散射谱学的教学之中。通过从实空间周期结构出发, 引入 X 射线衍射等典型实验, 阐明倒易空间在描述衍射条件和谱学信号中的作用, 进一步结合倒易格子、布里渊区以及能量-动量表征, 构建统一而直观的物理图像。该教学设计有助于学生在空间变换框架下将晶体结构、实验谱图与理论分析有机联系起来, 从而形成完整的认知链条, 提升其对现代凝聚态物理实验方法与谱学分析的理解与应用能力。

关键词 倒易空间; 傅里叶变换; 布里渊区; 衍射; 散射谱学

DOI: 10.27024/j.wlygc.2026.01.16.03

TEACHING EXPLORATION OF CRYSTALLINE RECIPROCAL SPACE TRANSFORMATION AND DIFFRACTION AND SCATTERING SPECTROSCOPY

SHEN Ye¹ YANG Yin¹ WANG Xiaolei² LIU Zhonghao¹

(¹ School of Physical Science and Technology, Institute of High Pressure Physics Science, Ningbo University, Ningbo, Zhejiang 315000;

² College of Physics and Optoelectronic Engineering, Beijing University of Technology, Beijing 100124)

Abstract In solid-state physics, reciprocal space is a fundamental concept for understanding crystal structures, diffraction phenomena, and spectroscopic behavior related to phonons and electrons. However, in undergraduate teaching, this concept is often introduced in an abstract mathematical form, making it difficult for students to connect it with concrete experiments and intuitive physical understanding. To address this pedagogical challenge, this paper proposes a teaching framework for undergraduate courses in solid-state physics and materials physics centered on reciprocal space. In this framework, reciprocal space is presented as the natural Fourier-space representation of crystal periodicity. Its mathematical foundation and physi-

收稿日期: 2026-01-16; 修回日期: 2026-03-28; 出版日期: 2026-05-20

基金项目: 宁波大学教学改革重点项目资助(物理学前沿研究与教学融汇协同育人模式创新与探索, JYXM2025015)。

通信作者: 王晓蕾, xiaolei.wang@bjut.edu.cn; 刘中灏, liuzhonghao@nbu.edu.cn。

引文格式: 沈烨, 杨银, 王晓蕾, 等. 晶体倒易空间变换及衍射与散射谱学的教学探索[J]. 物理与工程, 2026, 36(3): 121-129.

Cite this article: SHEN Y, YANG Y, WANG X L, et al. Teaching exploration of crystalline reciprocal space transformation and diffraction and scattering spectroscopy[J]. Physics and Engineering, 2026, 36(3): 121-129. (in Chinese)

cal significance are systematically explained and integrated into the teaching of diffraction and scattering spectroscopy. Starting from periodic structures in real space, typical experiments such as X-ray diffraction are introduced to clarify the role of reciprocal space in describing diffraction conditions and spectroscopic signals. By further incorporating reciprocal lattices, Brillouin zones, and energy-momentum representations, a unified and intuitive physical picture is established. This teaching design helps students connect crystal structures, experimental spectra, and theoretical analysis within a coherent framework of spatial transformation, thereby improving their understanding and application of modern condensed-matter experimental methods and spectroscopic analysis.

Key words reciprocal space; Fourier transformation; Brillouin zone; diffraction; scattering spectroscopy

固体物理学是研究固态物质结构、性质及其微观机制的核心学科,也是物理与材料类专业学生由基础理论走向真实材料与实验的重要桥梁。经典教材如黄昆和韩汝琦的《固体物理学》^[1]、李正中的《固体理论》^[2]以及查尔斯·基泰尔的《Introduction to Solid State Physics》^[3]均将晶体结构、晶格振动和电子能带作为核心内容,而贯穿这些内容的一个共同理论框架正是倒易空间(reciprocal space)。倒易空间并非单纯的数学构造,而是晶体周期性在动量空间中的自然表达,为描述衍射、声子与电子激发等实验现象提供了统一语言;倒易点阵则构成了衍射条件、声子色散与电子能带结构在动量空间中表达的几何基础^[4]。

在现代凝聚态物理与材料物理中,大量衍射和散射实验技术都依托倒易空间来表述,如图1所示。例如,在X射线、电子和中子衍射等弹性散射实验中,入射与散射粒子之间无能量交换,测量满足布拉格条件的动量转移,反映晶体的倒易点阵结构^[3,4];在如中子非弹性散射、拉曼散射等中,粒子在散射过程中同时发生动量与能量交换,从而探测到声子等元激发的能量与动量之间的色散关系^[5,6]。

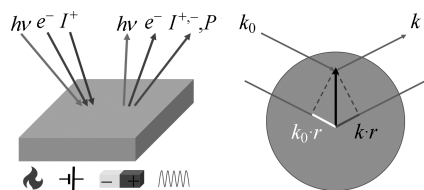


图1 衍射与散射实验中实空间到倒易空间的傅里叶映射示意图

然而在固体物理课程教学中,倒易空间通常

会是学生学习过程中难以理解的门槛。传统教学中,往往以数学定义或傅里叶变换公式的形式直接引入倒易空间,使许多学生陷入“会计算但缺乏物理图像”的困境。因此,在实际教学中,可以尝试以物理现象为引导、以实验为支点、以数学分析为桥梁,帮助学生理解倒易空间的物理内涵。基于这一目标,本文提出一条以“倒易空间”为视角的教学设计思路,如图2所示:从实空间晶体结构出发,通过X射线衍射这一典型弹性散射实验引入倒易点阵的几何意义;再借助傅里叶变换建立实空间周期性与倒易空间波矢的对应,引出布里渊区等关键概念;并将教学视野拓展至声子、电子等谱学实验,揭示倒易空间如何为能量—动量色散关系提供统一描述框架。

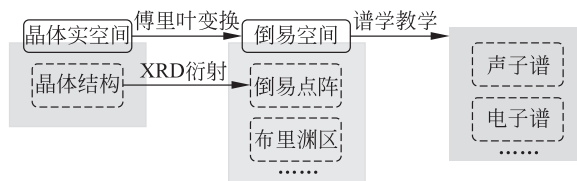


图2 本教学设计逻辑图

本教学路径着力解决传统倒易空间教学中概念衔接生硬、数学形式抽象以及与实际实验脱节等问题,这样处理有助于把实验现象和后续理论联系起来,从而提升学生对晶体结构、衍射规律与实验谱学的整体理解能力,并在这一过程中强化其物理建模能力与科学逻辑思维训练。

1 实空间: 晶体结构的直观描述

在固体物理学习的起点,学生首先接触的是

“实空间”(real space),即描述晶体中原子在三维欧氏空间中排列的物理空间。在实空间中,原子排布、晶胞几何、晶面取向以及晶格常数等结构信息都可以用“肉眼可见”的直观几何方式加以表述。

实空间中的晶体结构由晶格(lattice)与基元(basis)共同构成,二者的结合使学生能够在实空间中准确把握“周期性”这一核心概念。如图3所示,对于一个三维晶格,所有晶格点的位置都可以由三个整数(l_1, l_2, l_3)和基矢 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ 来生成,即

$$R = l_1 \alpha_1 + l_2 \alpha_2 + l_3 \alpha_3 \quad (1)$$

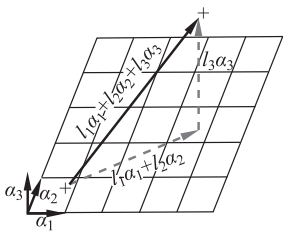


图3 三维晶体格点的位置图

该表达式直接体现了晶体在实空间中的平移对称性^[7-9]。除了平移对称性之外,晶体还具有旋转、反射与反演等空间对称操作,如图4所示。这些对称性在实空间中均可通过几何方式直观理解,是后续的点阵理论、空间群分析以及能带简并性的讨论基础^[10]。

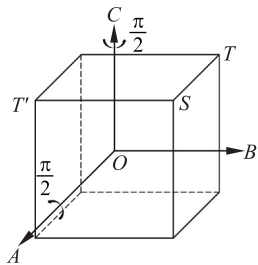


图4 晶体对称性操作图^[1]

在教学中,实空间的突出优势在于其直观可视性。借助晶胞几何图、球棍模型或三维可视化软件(如图5所示的CsCl结构),学生可以直接观察到原子在晶体中的周期排列。这种直观几何图像为理解晶面间距、原子相对位置以及后续的衍射条件提供了清晰的物理基础^[11,12]。布洛赫定理指出,周期势场中电子的本征态具有布洛赫形式,这一结论从量子力学层面确立了实空间周期性在

电子结构理论中的根本地位^[13]。各种衍射与散射现象的物理起源均可追溯到晶体在实空间中的周期排列^[14]。因此,在教学中帮助学生在实空间中建立准确而定量的结构认知,是理解倒易空间以及衍射与散射谱学的前提。

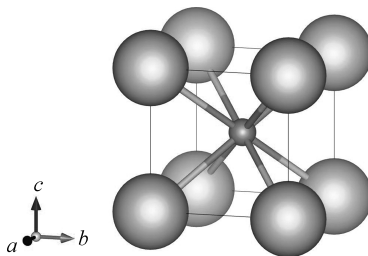


图5 CsCl的球棍模型图

2 X射线衍射: 从实验现象引出倒易空间

在学生建立实空间晶体结构的直观认识之后,教学的关键过渡是引导他们意识到:晶体的周期性不仅体现在原子的几何排列中,也可投影于可观测的动量空间中。这一认识在X射线衍射(XRD)的发现史中具有典型意义。1912年,劳厄在研究硫酸铜晶体对X射线的散射时,首次观测到规则的衍射斑点,由此证明了X射线具有波动性,同时也揭示了晶体内部存在高度有序的空间周期结构^[3,4]。

XRD实验正是理解实空间到倒易空间映射的最佳教学接口。如图6所示,当X射线入射晶体时,周期排列的原子相当于三维衍射光栅,各原子对入射波产生弹性散射。由于不同散射路径之间存在相位差,次级波在某些方向上发生相长干涉形成规则的衍射图样。这些衍射峰来源于晶体周期结构引起的相干干涉,其分布规律直接反映了晶体的空间周期性。

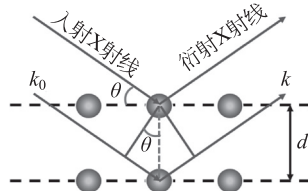


图6 XRD原理图

如果从波矢角度来描述,XRD实验测量的是入射波矢 k_0 与散射波矢 k 之间的动量转移。对

于弹性散射过程,二者模长相同,而它们的差值 k 必须满足

$$k = k - k_0 = G_{hkl} \quad (2)$$

其中, G_{hkl} 是某一倒易点阵矢量。该关系即劳厄条件,是布拉格定律在倒易空间中的等价表述^[4]。它表明:只有当散射引起的波矢变化恰好等于一个倒易格矢时,才会产生可观测的衍射峰。在实空间中,衍射条件通常用布拉格定律表示

$$2d_{hkl} \sin\theta = n\lambda \quad (n=1,2,3,\dots) \quad (3)$$

其中, d_{hkl} 是 (hkl) 晶面间距, θ 为入射角, λ 为 X 射线波长。该公式可以被理解为原子平面上散射波的“选择性相长干涉”条件。倒易空间语言则揭示了其更深层的物理本质:布拉格衍射对应于波矢在倒易点阵上的匹配。

在实验上,粉末衍射(PXRD)与单晶衍射(SCXRD)是两种基本模式。PXRD 图谱中一系列衍射峰的位置对应于一组倒易矢量模长 $|G_{hkl}|$, 反映得是倒易点阵的径向分布;而 SCXRD 中获得的衍射斑点图则可以近似视为倒易点阵在某一平面上的截面投影。衍射图样在本质上是倒易点阵的映射,只是被晶体的结构因子加权调制^[11]。

并非所有满足劳厄条件的倒易点都会呈现为强衍射峰。衍射峰的强度受到结构因子和散射因子的调制,它取决于晶胞中原子的种类与相对位置,因此会导致某些衍射点消失(系统消光)。这进一步说明,实验中观测到的衍射图样是倒易点阵经物理权重修正后的结果。

在教学实践中,学生往往能够理解布拉格定律的几何推导,但仍会困惑:为什么只有特定晶面族会产生衍射峰?为何衍射斑点呈现出高度有序的点阵结构?引入具体材料的衍射图样有助于化解这一困惑。例如,黑磷单晶薄膜的 XRD 图谱(图 7)呈现出清晰而规则的衍射峰列,可以直接对

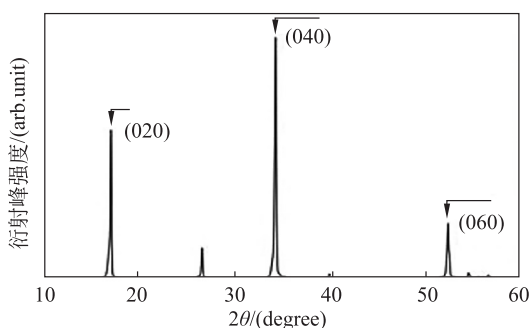


图 7 黑磷单晶薄膜的 XRD 图像^[15]

应到其层状晶体的倒易点阵结构。通过引导学生分析这样真实的 XRD 图谱,并尝试反推出晶体的晶格类型与取向,学生获得的将不再是割裂的公式,而是一套从实验数据到倒易空间再到实空间结构的完整认知路径。

3 倒易空间:周期性的数学表达

3.1 倒易格子:动量空间中的周期结构

在理解了 XRD 衍射峰与布拉格条件之间的对应关系之后,学生需要进一步认识到:这些实验规律虽然源于晶体在实空间中的周期性结构,但其散射条件与选择规则在与之对应的动量空间——倒易空间中得到更为自然和简洁的描述。

倒易空间的建立根植于晶体周期性的傅里叶分析。晶体中任何具有晶格周期性的物理量,如电子密度 $n(r)$ 或晶格势 $V(r)$,均满足 $n(r+R) = n(r)$,其中 R 为任意晶格矢量。凡是满足晶格周期性的函数,其傅里叶展开必然由一组离散波矢标记,而这些波矢正构成倒易点阵^[3]。这确立了实空间与倒易空间的对应关系。这样的函数可展开为

$$n(r) = \sum_G n_G e^{iG \cdot r} \quad (4)$$

为使基函数 $e^{iG \cdot r}$ 本身具有晶格平移对称性(即满足 $e^{iG \cdot R} = 1$),波矢 G 必须满足条件 $G \cdot R = 2\pi m$ (m 为整数)。这要求 G 构成一个离散的点阵,即倒易点阵。其基矢 b_1, b_2, b_3 由实空间基矢 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ 通过正交关系定义为

$$\alpha_i \cdot b_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (5)$$

其具体形式为

$$\begin{aligned} b_1 &= 2\pi \frac{\alpha_2 \times \alpha_3}{\alpha_1 \cdot (\alpha_2 \times \alpha_3)} \\ b_2 &= 2\pi \frac{\alpha_3 \times \alpha_1}{\alpha_1 \cdot (\alpha_2 \times \alpha_3)} \\ b_3 &= 2\pi \frac{\alpha_1 \times \alpha_2}{\alpha_1 \cdot (\alpha_2 \times \alpha_3)} \end{aligned} \quad (6)$$

并以新的矢量构成一个倒格子。所有倒易格点的位置可由倒易点阵矢量表示为

$$G_{hkl} = hb_1 + kb_2 + lb_3 \quad (7)$$

其中, (h, k, l) 为晶面指数^[1]。倒易空间与实空间之间存在深刻的几何对应关系,倒格矢 G_{hkl} 垂直于实空间中的晶面族 (hkl) ,且其模长与晶面间距

d_{hkl} 成反比例关系^[1]

$$|G_{hkl}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}} \quad (8)$$

该几何关系直接建立了倒易空间与实空间晶面族之间的联系,使得衍射条件能够用倒易点阵直观表示。

3.2 傅里叶变换: 连接两大空间的数学桥梁

在实空间与倒易空间之间,傅里叶变换不仅是形式上的积分变换,更是揭示晶体几何周期性如何转化为波动响应的核心机制。它建立了晶体空间周期排列与实验中动量分辨图谱之间的系统对应关系。傅里叶变换的基本思想是:具有周期性的空间函数都可以展开为一组不同波矢的平面波之和。在晶体中,原子势场、电子密度以及离子位移均满足晶格周期性,因此天然适用于傅里叶展开。以晶格势场 $V(r)$ 为例,由于晶体势函数 $V(r)$ 具有与晶格相同的空间周期性,即 $V(r+R)=V(r)$,因此可以在一个原胞内将其展开为倒易点阵上的傅里叶级数,其傅里叶表示形式为

$$V(r) = \sum_G V_G e^{iG \cdot r} \quad (9)$$

其中, G 为倒易点阵矢量,对应的傅里叶系数为

$$V_G = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V(r) e^{-iG \cdot r} dr \quad (10)$$

表征了周期势在倒易空间中不同动量分量的权重。这意味着,倒易点阵给出允许的动量通道,结构因子或傅里叶系数则决定这些通道的物理强度。通过这一表示,实空间中复杂的周期势场被转化为一组离散的动量分量,从而显著简化理论计算。强调这一跨表征对应关系,有助于学生在“结构—倒易空间—谱学响应”之间建立统一的概念框架。

3.3 布里渊区: 倒易空间中基本单元

在建立倒易空间的数学与物理图像之后,学生面临的下一个关键概念是布里渊区(Brillouin zone)。它不仅是倒易点阵中的几何构造,更构成了描述晶体中电子、声子等波动现象的动量(波矢)基本定义域。无论是能带色散、布洛赫波函数、能隙的起源,还是电子在外场中的动力学性质,其描述都以布里渊区为框架。因此,布里渊区是从结构周期性走向谱学研究的关键概念。

第一布里渊区是描述晶体中波动与准粒子运动所需的最小完备区域,即包含所有不等价波矢

的最小区域^[16]。它被定义为倒易点阵的维格纳-赛兹原胞,是电子与声子等谱学动量空间的基本定义域。由于晶体的平移对称性,任何超出第一布里渊区的波矢 k 都可以通过减去一个倒格矢 G ($k=k'-G$) 折叠回第一布里渊区内。因此电子能带 $E(k)$ 或声子色散 $\omega(q)$ 都可以仅在该区域内完整描述。

布里渊区的几何形状完全由实空间的晶体结构决定。例如,简单立方晶格的第一布里渊区为立方体,而面心立方晶格的第一布里渊区则为截角八面体(图8、图9)。教学中展示布里渊区模型能使学生直观感受实空间对称性如何在倒易空间中映射。

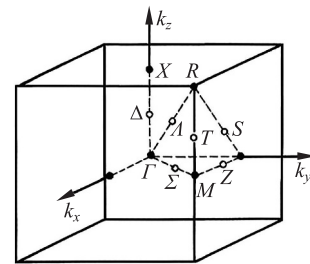


图8 简单立方布里渊区^[1]

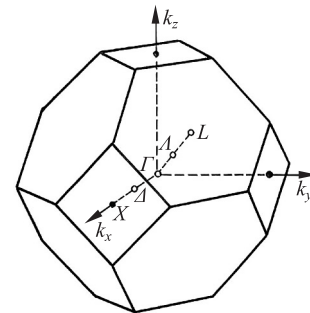


图9 面心立方布里渊区^[1]

在布里渊区中,存在一系列高对称点(如简单立方的 Γ 、 X 、 M 、 R , 面心立方的 Γ 、 X 、 K 、 L 等)和连接它们的高对称方向(如 Γ - X 、 Γ - K)。由于这些路径保留了晶体点群对称性的关键信息,理论计算和实验结果通常沿高对称方向给出,从而最大程度反映简并、带交叉及范霍夫奇点等重要物理特征^[11]。

教学中,可以以金属镍(Ni, 面心立方结构)为例^[17]。首先展示其截角八面体形的第一布里渊区,标注高对称点,再将其能带结构图与之并置(图10),引导学生识别图中横坐标(如 Γ 到 X)与

布里渊区几何路径的对应关系。通过这种几何—谱图对照,学生可以从镍能带结构中直接读取关键信息,例如其金属性、不同方向色散的各向异性(反映有效质量和费米面形状),以及费米能级附近的能带分布等。

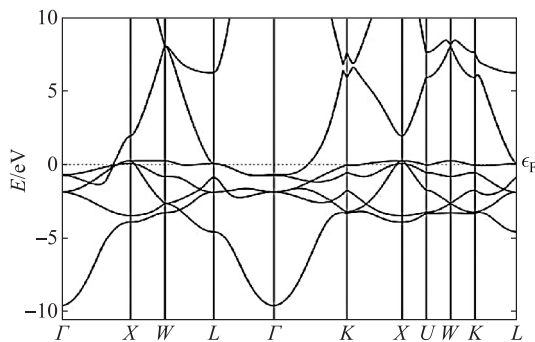


图 10 镍的色散关系图^[17]

至此,倒易点阵与布里渊区已经为晶体周期性建立了完整的几何与数学框架:实空间的平移对称性在倒易空间中表现为离散的倒易点阵,而所有物理上不等价的波矢均可映射到第一布里渊区之内。

然而,如果倒易空间只停留在几何构造和抽象波矢的层面,其物理意义仍然难以被学生真正把握。倒易空间之所以在固体物理中占据核心地位,根本原因在于:它不是人为引入的数学空间,而是实验直接“看到”的空间。在衍射与散射实验中,探测器记录的并非原子在实空间中的位置,而是入射粒子与晶体交换的动量与能量,而这些量天然定义在倒易空间与布里渊区中。

因此,从教学逻辑上看,倒易空间与布里渊区并非理论分析的终点,而是理解谱学实验的起点。只有当学生进一步看到声子色散、电子能带及费米面如何在布里渊区中被实际测量与表征时,倒易空间才从抽象的数学结构转化为具有直接物理可观测性的描述框架。

4 倒易空间框架下的谱学解读

在建立起倒易空间与布里渊区的几何与物理意义之后,教学可以自然延伸到其在现代凝聚态谱学实验中的应用。非弹性 X 射线散射、中子散射和角分辨光电子能谱(ARPES)等是探测材料内部微观激发(声子、磁子、电子等)能量与动量关系

的直接实验手段。而倒易空间为理解与解读各类谱学数据提供了统一、普适的坐标系与物理语言。

在谱学实验中,实验测量的是激发能量 E 随其动量(波矢 q 或 k)变化的函数 $E(q)$,即色散关系,通常在第一布里渊区中给出。因此,一张完整的声子或电子等色散图,本质上是在倒易空间中描绘各种元激发的“能量景观”。将谱学教学置于倒易空间框架下具有显著优势:一方面,它将抽象的倒易空间概念具体化为可视的谱图,使学生能够在布里渊区中“看到”高对称点与能量分布;另一方面,它揭示了不同谱学技术在物理本质上的统一性——无论研究的是晶格振动还是电子运动,其能量与动量始终在同一倒易空间中被测量和分析。由此,学生可以形成从晶体结构到激发谱学的连续认知。

4.1 声子谱

声子谱即声子频率 ω 随其波矢 q 变化的色散关系 $\omega(q)$,是描述晶体晶格动力学的最基本物理图像。声子的波矢 q 通常取在第一布里渊区内,其取值范围 and 对称性由晶体的平移对称性与原胞结构决定。实验上,非弹性中子散射通过测量中子在散射前后能量与动量的变化,可以直接获得声子激发的 $\hbar\omega$ 与 $\hbar q$,从而在布里渊区的高对称方向上绘制出 $\omega(q)$ 曲线。

为了理解声子谱的基本结构,教学中常从一维双原子链模型入手(图 11)。该模型中每个原胞包含两个质量不同的原子,其振动模式自然分裂为两类:声学支与光学支(图 12(a))。在三维晶体中,每个原胞包含 n 个原子,则整个系统的声子谱共有 $3n$ 条分支,其中 3 条为声学支,其余 $3n-3$ 条为光学支^[1]。在长波极限($q \rightarrow 0$)下,声学支频率趋于零,对应于晶体的整体平移;而光学支则具有有限起始频率,对应于原胞内原子的相对振动。

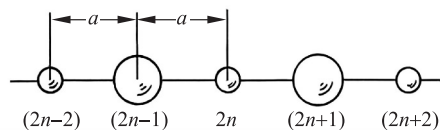


图 11 一维双原子链图^[1]

以硅(Si)为例(图 12(b)、图 13),其声子谱是固体物理教材中最为经典的实例之一。硅具有金刚石结构,每个原胞包含两个原子,因此声子谱中包含三条声学支和三条光学支。在长波极限

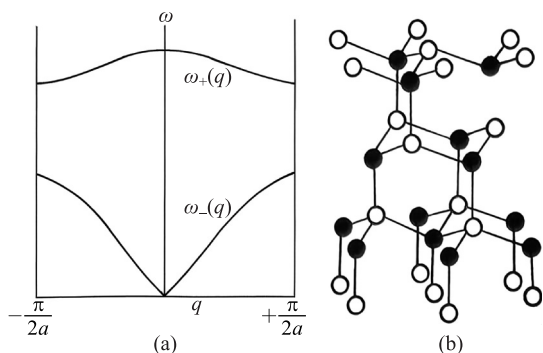


图 12 声子谱示意图及硅的晶体结构

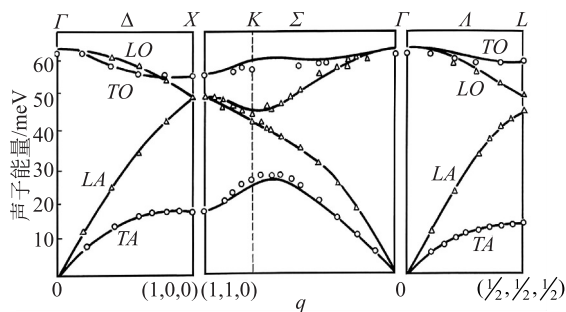
(a) 声子谱的声学支和光学支; (b) 硅晶体结构图^[1]

($q \rightarrow 0$)下,纵声学波与横声学波具有不同的波速,而纵光学波与横光学波在布里渊区中心点简并。这些特征都直接反映了晶体对称性与原胞结构在倒易空间中的表现。将这一真实三维声子谱与一维双原子链模型对照,有助于学生理解简化模型如何推广到真实材料。

图 13 所示的声子色散关系在量子力学课程中同样可以通过对周期体系施加周期性边界条件得到。以一维含 N 个原子的周期链为例,周期性边界条件要求振动模满足

$$k = \frac{2\pi n}{Na}$$

其中, $n=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N/2$, 从而使得允许的波矢在倒易空间中呈离散分布。当 $N \rightarrow \infty$ 时,波矢间隔 $\Delta k = 2\pi/(Na)$ 趋于零,离散波矢在第一布里渊区内形成准连续分布,声子色散关系 $\omega(k)$ 由此自然引入。

图 13 Si 的声子谱^[1]

4.2 电子谱

电子结构的实验探测主要依赖于电子与光或其他粒子的相互作用。其中,ARPES 可以直接测量晶体中电子能量与动量之间的关系^[6], 获得能

带色散和费米面形貌,为研究低能电子结构提供了关键的实验依据。

ARPES 的基本物理过程可从能量与动量守恒两个层面加以理解。基于光电效应,入射光子能量 $h\nu$ 被用于克服电子的束缚能 E_B 和材料功函数 ϕ , 其余部分转化为逸出光电子的动能 E_k , 满足能量守恒关系

$$E_k = h\nu - E_B - \phi \quad (11)$$

其中,费米能级对应的束缚能定义为 $E_B = 0$ 。在动量空间中,固体内电子动量与真空中光电子动量均可分解为平行于样品表面的分量 $\hbar k_{\parallel}$ 和垂直于表面的分量 $\hbar k_{\perp}$ 。由于光电子激发过程在样品表面平行方向上保持平移对称性,平行动量分量在激发过程中守恒,即

$$k_{\parallel, \text{样品电子}} = k_{\parallel, \text{光电子}} \quad (12)$$

结合实验几何关系,平行动量可由光电子动能和出射角 θ 直接确定为

$$\hbar k_{\parallel, \text{样品电子}} = \hbar k_{\parallel, \text{光电子}} = \sqrt{2mE_k} \sin\theta \quad (13)$$

在面内坐标系中进一步分解得

$$k_{x, \text{样品电子}} = k_{x, \text{光电子}} = \frac{\sqrt{2mE_k}}{\hbar} \sin\theta \cos\phi$$

$$k_{y, \text{样品电子}} = k_{y, \text{光电子}} = \frac{\sqrt{2mE_k}}{\hbar} \sin\theta \sin\phi \quad (14)$$

其中, ϕ 为样品表面内的方位角^[18]。由此,ARPES 实验通过测量光电子的能量与出射角度,实现了对布里渊区内电子平行动量分布的直接测量。

由于样品表面势垒和垂直方向平移对称性的破缺^[13], 通常引入自由电子末态假设 (Free-electron Final-state Model), 将光激发末态近似为自由电子态, 并引入内势 V_0 描述固体内部势场的平均影响。在该近似下, 固体中电子的垂直动量可表示为

$$\begin{aligned} k_{\perp, \text{样品电子}} &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E_k + V_0) - k_{\parallel}^2} \\ &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E_k + V_0) - \frac{2mE_k}{\hbar^2} (\sin\theta)^2} \\ &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m [E_k (\cos\theta)^2 + V_0]} \quad (15) \end{aligned}$$

通过系统调节入射光子能量 $h\nu$, 可以改变探测到的 $k_{\perp}$ 值, 从而实现对不同 k_z 截面的能带测量, 获得三维布里渊区内电子结构的完整信息, 如图 14 所示。这一特性使 ARPES 成为倒易空间教

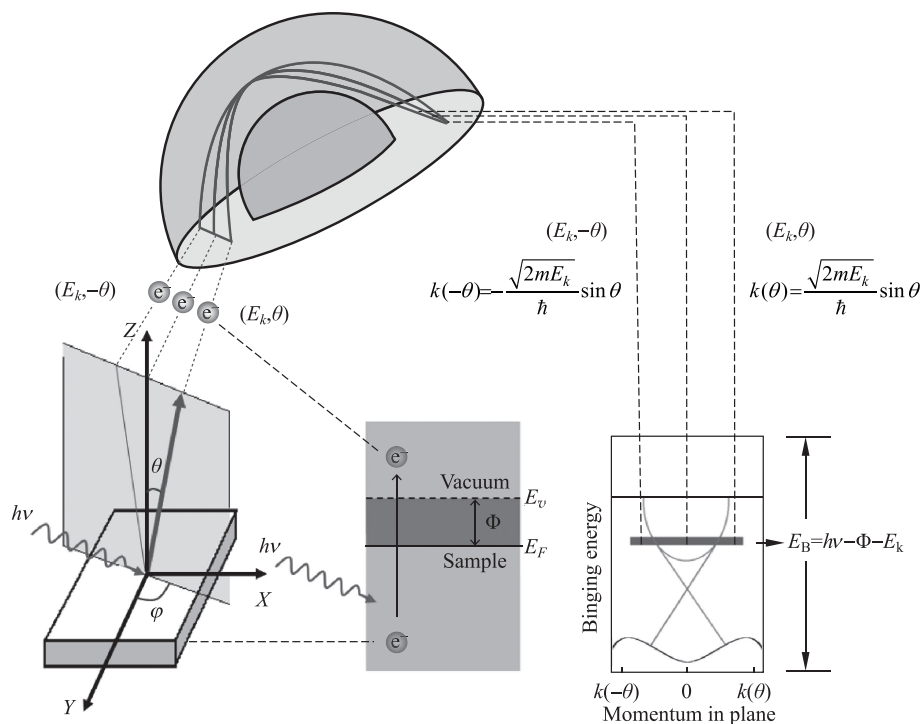


图 14 ARPES 实验原理图

学中连接理论模型与真实材料电子行为的关键实验手段。

以 CoSn 为例(图 15、图 16、图 17),其计算能带与 ARPES 实验色散沿布里渊区高对称路径给出,使学生能够将抽象的倒易空间结构与真实实

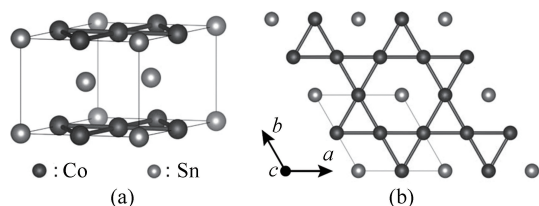


图 15 CoSn 晶体结构

(a) CoSn 三维晶体结构; (b) CoSn 二维面内投影^[20]

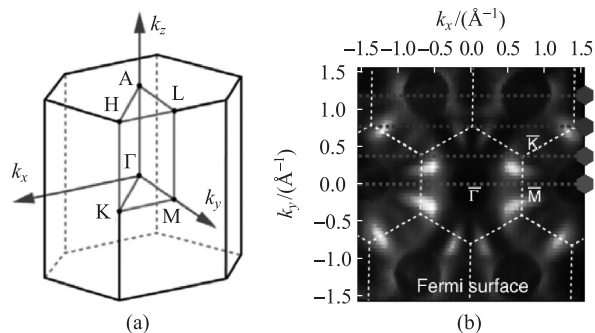


图 16 CoSn 布里渊区及费米面

(a) CoSn 布里渊区及其高对称点; (b) 实验测量 CoSn 的费米面^[20]

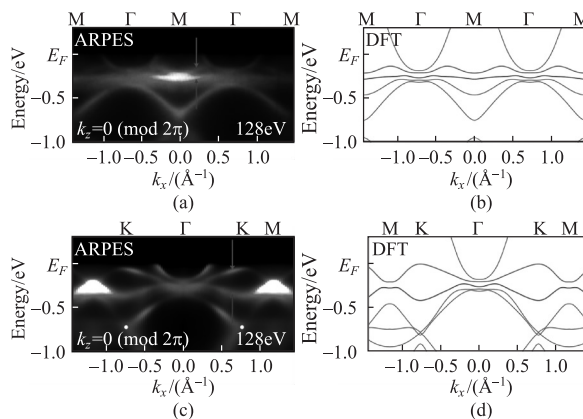


图 17 实验测量和计算的 CoSn 能带对比图

(a) 实验测量 CoSn 沿 Γ -M 方向的色散; (b) 计算的 CoSn 沿 Γ -M 方向的色散; (c) 实验测量 CoSn 沿 Γ -K 方向的色散; (d) 计算的 CoSn 沿 Γ -K-M 方向的色散^[20]

验图像对应。能带的坡度、带交叉和费米面形状反映了电子有效质量、费米速度以及材料的金属性与拓扑特征。这种实验与理论结合的教学设计,不仅增强了倒易空间教学的直观性,也培养了学生分析电子结构、理解电子输运性质及材料特殊物性的能力。

5 结语

本文从实空间结构出发,通过 X 射线衍射这

一典型实验,引入动量空间描述,并进一步过渡到倒易空间及其在谱学中的应用,构建了一个从结构到激发谱的系统性教学框架。相较于直接从数学定义出发,这种基于实验现象逐步展开的路径,有助于学生建立各物理概念之间的内在联系。

在由实空间向动量空间过渡的过程中,学生往往在倒易空间与布里渊区等关键概念处出现认知障碍。若将衍射图样、声子色散与电子能带等内容置于统一的倒易空间框架下加以讲解,可以有效减少知识表征之间的不连续性,增强整体理解。

因此,从结构、衍射到谱学逐层展开的教学组织方式,不仅保持了内容的内在连续性,也更贴近现代实验研究中对问题的处理路径。该方法在课堂教学中具有良好的可操作性,并可为相关课程内容的组织与讲授提供参考。

参 考 文 献

- [1] 黄昆, 韩汝琦. 固体物理学[M]. 北京: 高等教育出版社, 1988.
- [2] 李正中. 固体理论[M]. 北京: 高等教育出版社, 2002.
- [3] KITTEL C, MCEUEN P. Introduction to solid state physics[M]. John Wiley & Sons, 2018.
- [4] ASHCROFT N W, MERMIN N D. Solid state[J]. Physics (New York: Holt, Rinehart and Winston) Appendix C, 1976, 1.
- [5] LOVESEY S W. Theory of neutron scattering from condensed matter [M]. Oxford: Oxford University Press, 1984.
- [6] HÜFNER S. Photoelectron spectroscopy: Principles and applications [M]. Springer Science & Business Media, 2013.
- [7] AROYO M I. International Tables for Crystallography Volume A: Space-group Symmetry [J]. International Tables for Crystallography, 2016: 193-687.
- [8] ZIMAN J M. Principles of the Theory of Solids[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1979.
- [9] NYE J F. Physical properties of crystals [M]. Oxford: Clarendon Press, 1985.
- [10] SETYAWAN W, CURTAROLO S. High-throughput electronic band structure calculations: Challenges and tools [J]. Computational Materials Science, 2010, 49(2): 299-312.
- [11] CULLITY B D. Elements of X-ray diffraction[M]. Hsin Yueh, 1986.
- [12] GUINIER A. X-ray diffraction in crystals, imperfect crystals, and amorphous bodies[M]. San Francisco: Freeman, 1963.
- [13] BLOCH F. Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern[J]. Zeitschrift für physik, 1929, 52(7): 555-600.
- [14] BORN M, HUANG K. Dynamical theory of crystal lattices[M]. Oxford: Oxford University Press, 1996.
- [15] SARSWAT P K, SARKAR S, CHO J, et al. Structural and electrical irregularities caused by selected dopants in black-phosphorus[J]. ECS Journal of Solid State Science and Technology, 2016, 5(11): Q3026.
- [16] 徐永康, 贾护军. 对倒格子第一布里渊区的些许思考[J]. 大学物理, 2019, 38(4): 59-62.
- [17] GHALEB A H M, MOHAMMED F M, MAJEED M A, et al. Electron momentum density in Nickel (Ni)[J]. Advances in Physics Theories and Applications, 2015, 46(1): 59-65.
- [18] 杨海峰. 新奇复杂量子材料的角分辨光电子能谱研究[D]. 北京: 中国科学院大学, 2016.
- [19] HUANG H, ZHENG L, LIN Z, et al. Flat-band-induced Anomalous Anisotropic Charge Transport and Orbital Magnetism in Kagome Metal CoSn[J]. Physical Review Letters, 2022, 128(9): 096601.
- [20] KANG M, FANG S, YE L, et al. Topological Flat Bands in Frustrated Kagome Lattice CoSn[J]. Nature Communications, 2020, 11(1): 4004.