1 傅里叶变换

傅里叶变换是实现从空域或时域到频域的转换的工具

$$G(f_x, f_y) = \Gamma[g(x,y)] = \iint_{-\infty}^{\infty} g(x,y)\exp[-i2\pi(f_x x + f_y y)]dxdy$$

$$g(x,y) = \Gamma^{-1}[G(f_x, f_y)] = \iint_{-\infty}^{\infty} G(f_x, f_y)\exp[i2\pi(f_x x + f_y y)]df_x df_y$$

f_x, f_y *分别是x，y方向的空间频率*

[illegible] *表达一种任意空间二维函数*

周期信号的频域分析措施

考察信号

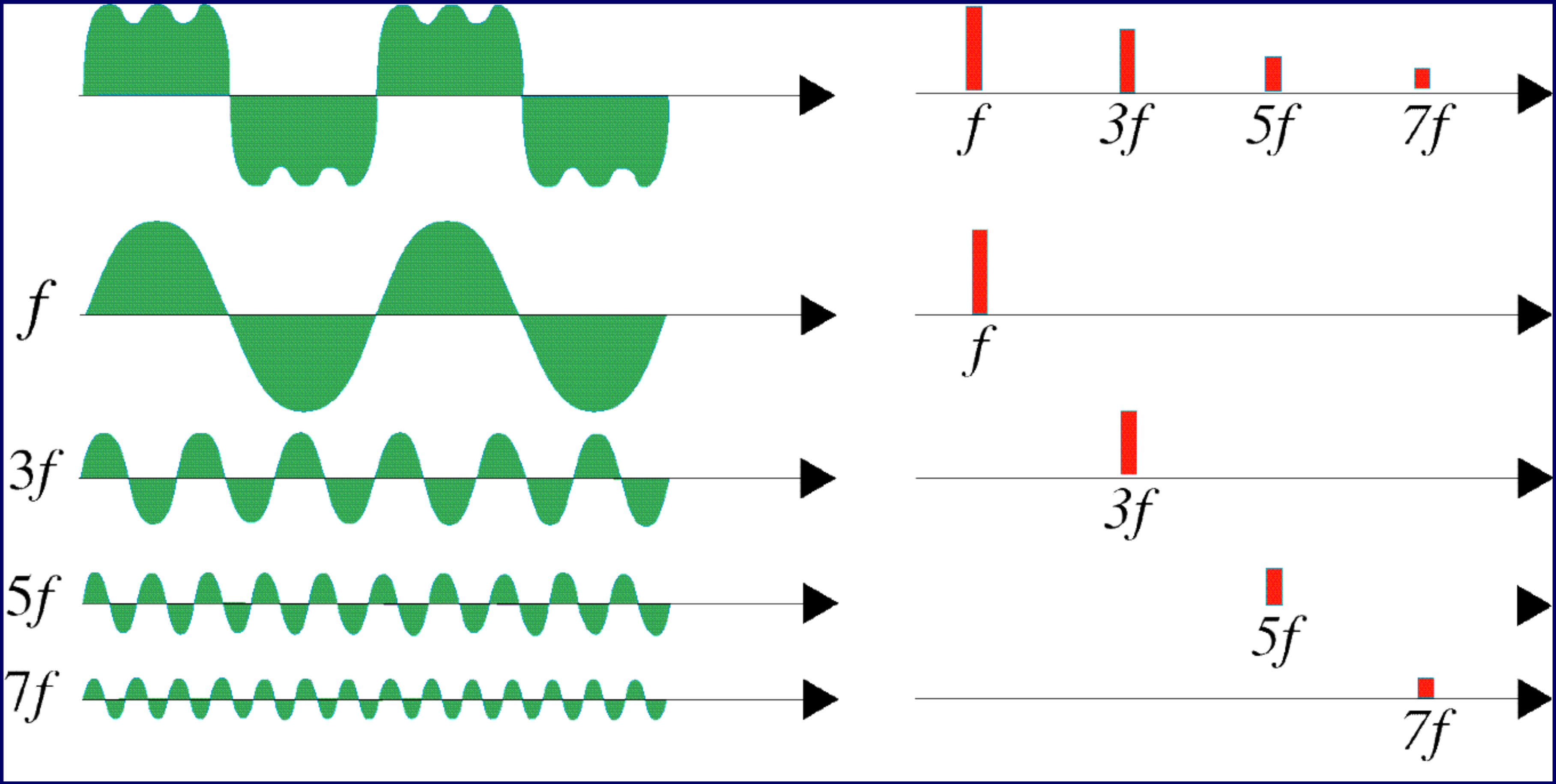
$$f(t)=\sin\omega_1 t+\frac{1}{3}\sin 3\omega_1 t+\frac{1}{5}\sin 5\omega_1 t+\frac{1}{7}\sin 7\omega_1 t$$

式中: $\omega_1=2\pi f_1$。ω_1基波频率，简称基频，ω_1的倍数称为谐波。

- 对于周期信号而言，其频谱由离散的频率成份，即基波与谐波构成。

傅立叶变换

复杂周期信号波形



a 时间域或空间域

b 频率域

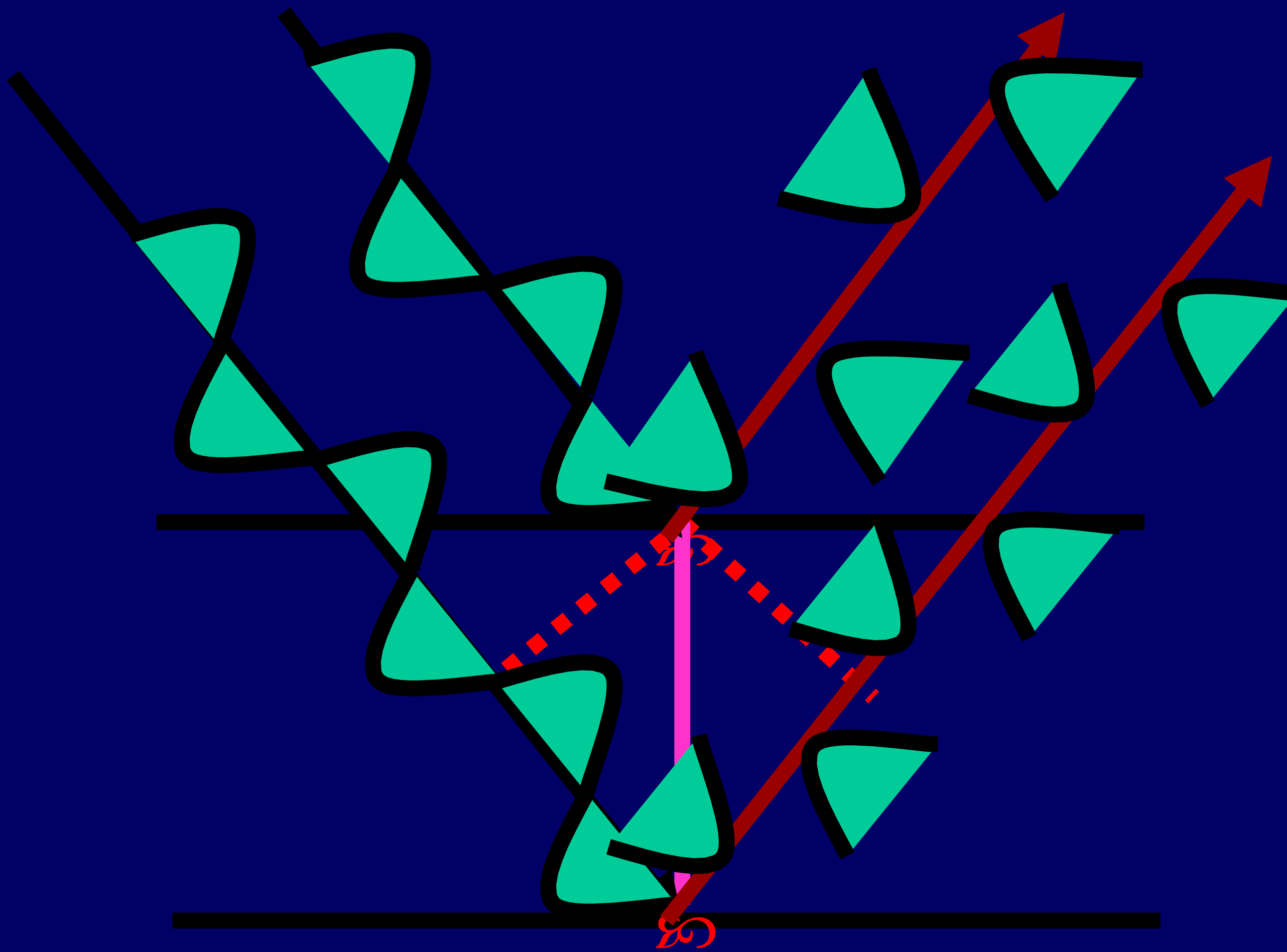
1.1.3 倒 格 子

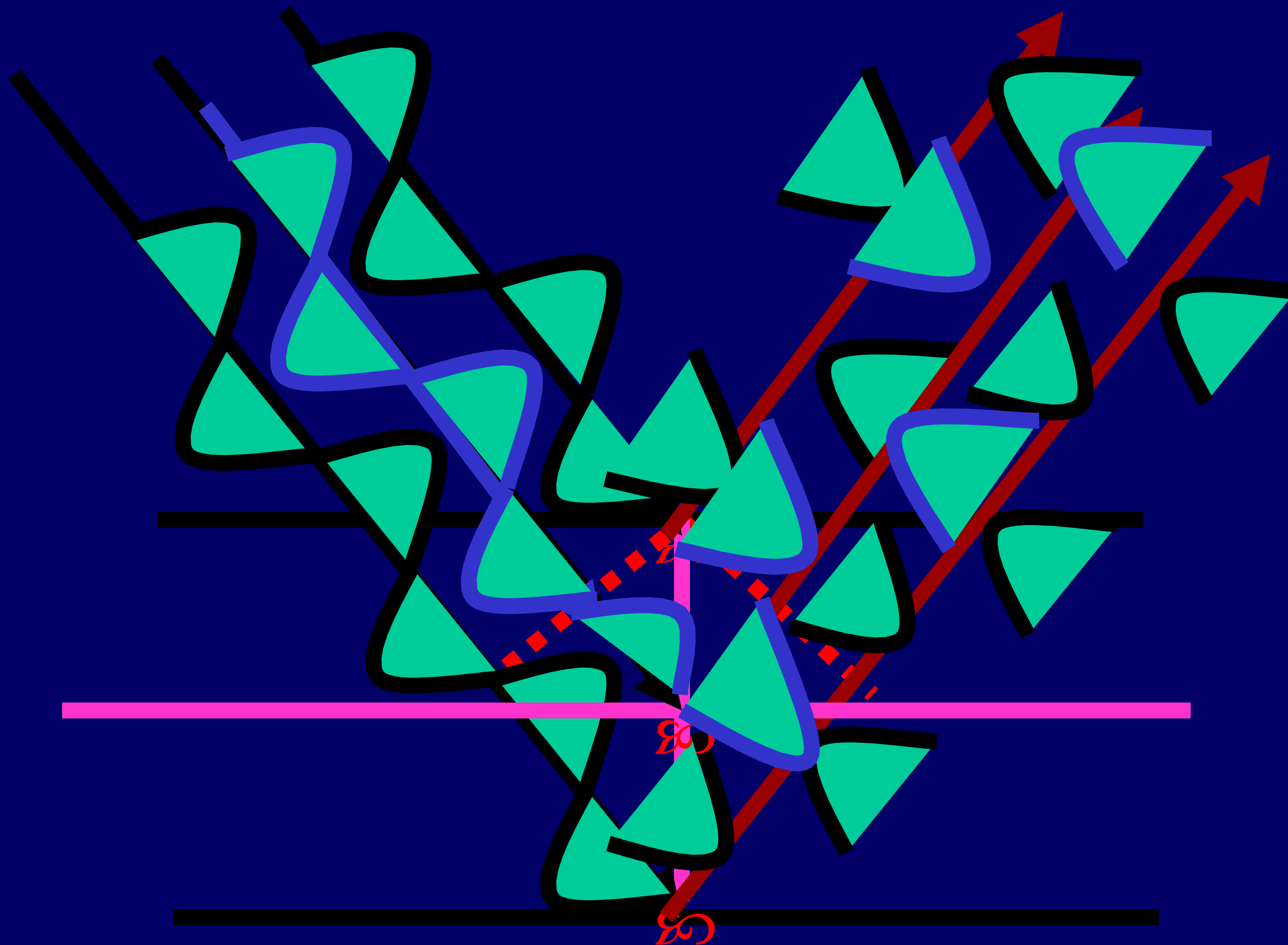
一、从X射线衍射方程 反射公式引出倒 格矢概念

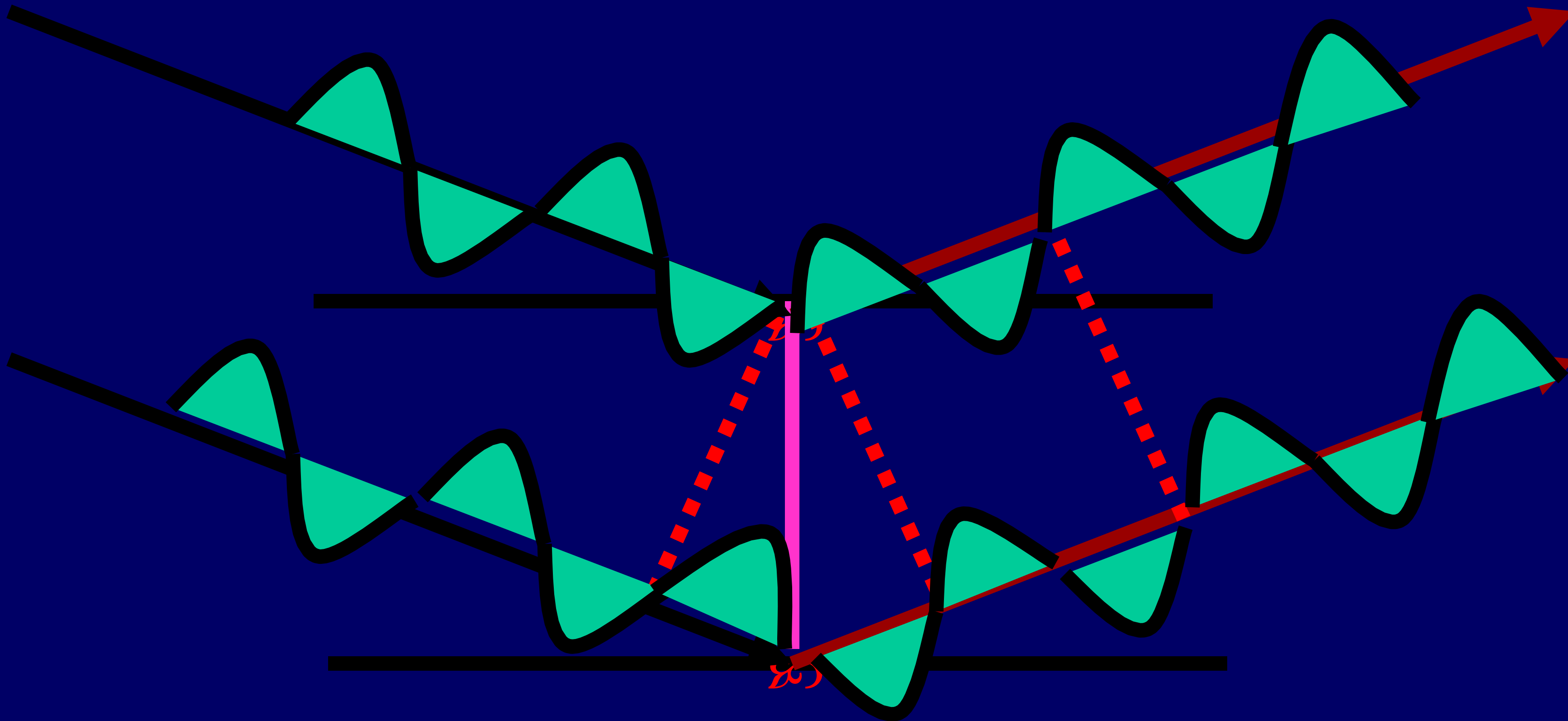
条件：

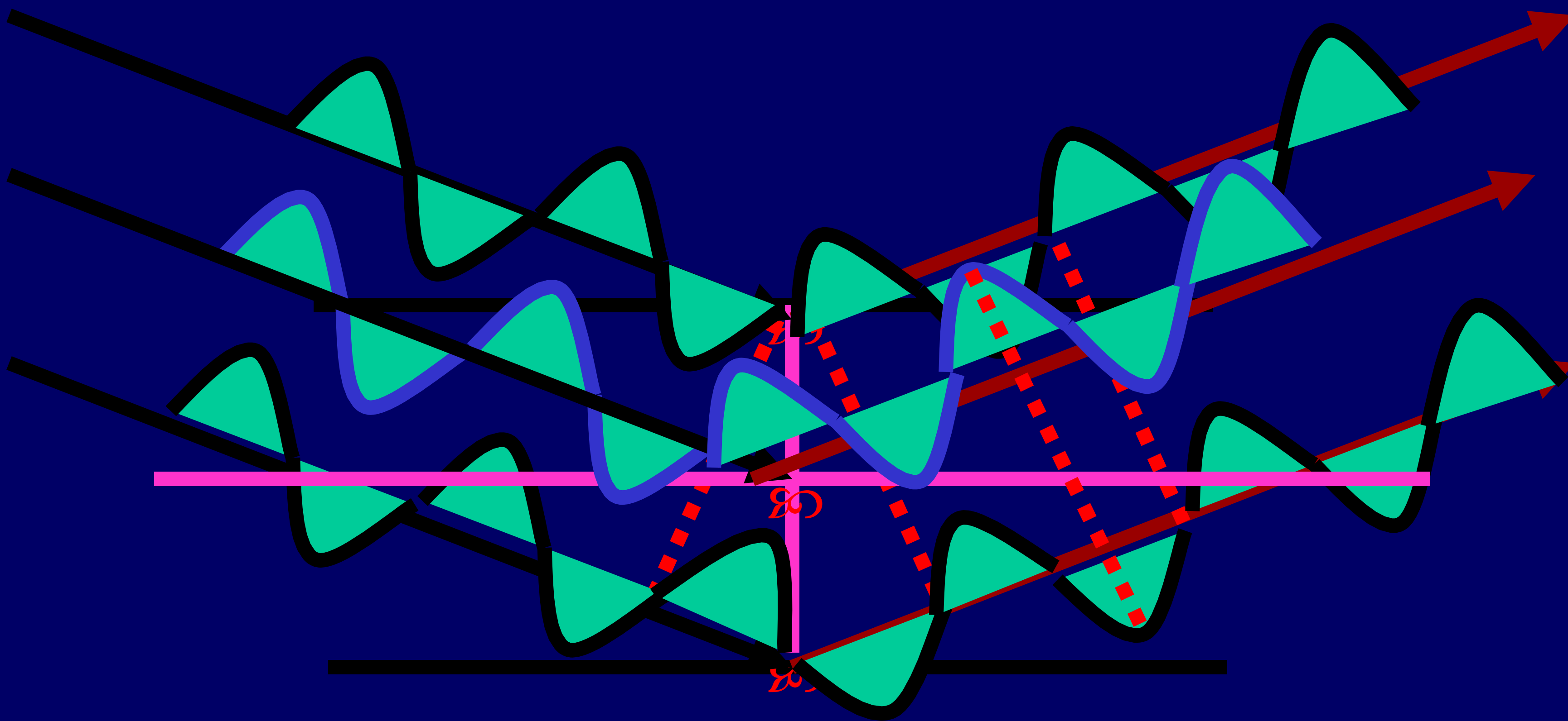
X射线源、观察点与晶体的距离都比晶体的线度大的多，入射线和衍射线可看成平行光线；

散射前后的波长不变,且为单色。

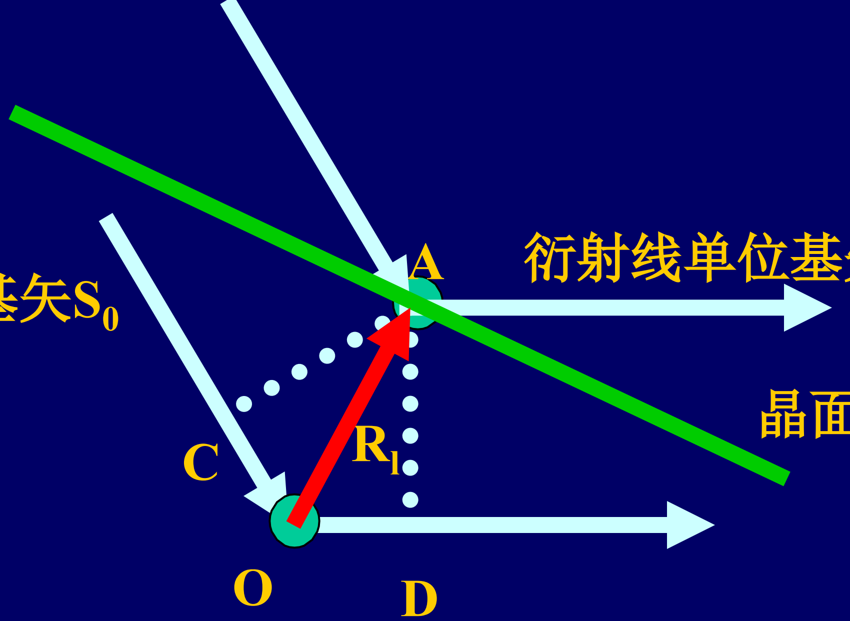








1. 衍射方程



$CO= -R_l \cdot S_0$　　　$OD= R_l \cdot S$

衍射加强条件：$R_l \cdot （S - S_0）=\mu\lambda$

有：$k_o=(2\pi/\lambda)\, S_0$　　$k=(2\pi/\lambda)\, S$

得：$R_l \cdot （k - k_0）= 2\pi\,\mu$

设：$k - k_0 = n\, K_h$

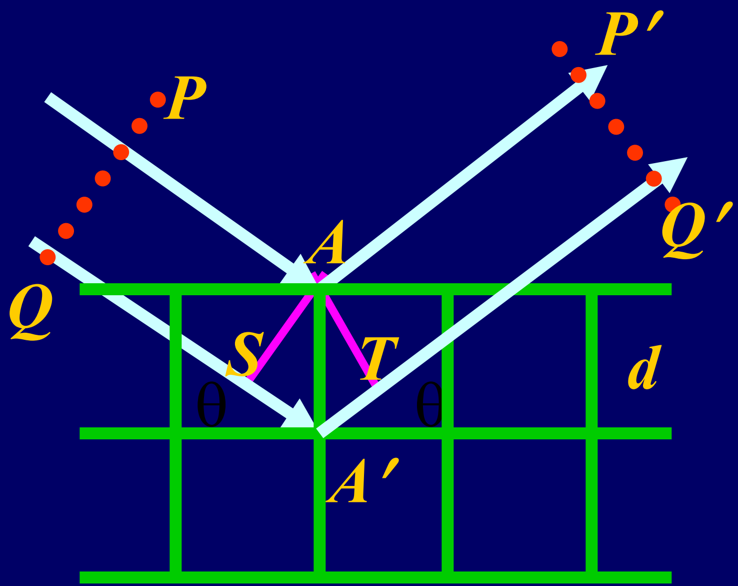
$k - k_0 = n\, K_h$的物理意义：当入射波矢和衍射波矢相差一种或几种K_h（倒格矢）时，满足衍射加强条件， n为衍射级数。

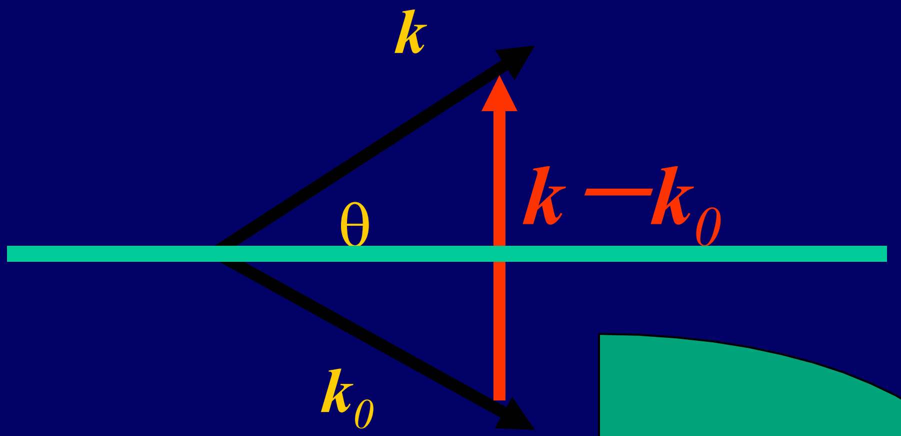
2. 反射公式

入射线与反射线之间的光程差：

$$\delta = SA' + A'T = 2d \sin\theta$$

满足衍射方程：$2d_{h1h2h3} \sin\theta = n\lambda$





$$|\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_0| = 2\pi\,|\boldsymbol{S}/\lambda - \boldsymbol{S}_0/\lambda| = (4\pi/\lambda)\sin\theta$$

$$|\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_0| = |\,n\boldsymbol{K}_h| = 2\pi n/d_{h1h2h3}$$

$$|\boldsymbol{K}_h| = 2\pi/d_{h1h2h3}$$

二、倒格子的概念

1. 倒格子的数学定义

设一晶格的基矢为 a_1、a_2、a_3, 有如下的关系：

$b_1 = 2\pi(a_2 \times a_3)\backslash\Omega$　阐明b_1垂直于a_2和a_3所拟定的面；

$b_2 = 2\pi(a_3 \times a_1)\backslash\Omega$　阐明b_2垂直于a_3和a_1所拟定的面

$b_3 = 2\pi(a_1 \times a_2\backslash\Omega$　阐明b_3垂直于a_1和a_2所拟定的面

式中：　$\Omega = a_1 \cdot (a_2 \times a_3)$为晶格原胞的体积。

倒格子：以b_1、b_2、b_3为基矢的格子是以a_1、a_2、a_3为基矢的格子的倒格子。

2. 正格子与倒格子的几何关系

（1） 正格子基矢和倒格子基矢的关系

$$a_i \cdot b_j = 2\pi\delta_{ij} \begin{cases} = 2\pi & (i=j) \\ = 0 & (i \neq j) \end{cases}$$

证明如下：$a_1 \cdot b_1 = 2\pi a_1 \cdot (a_2 \times a_3) / a_1 \cdot (a_2 \times a_3) = 2\pi$

因为倒格子基矢与不同下脚标的正格子基矢垂直，有：

$$a_2 \cdot b_1 = 0 \qquad a_3 \cdot b_1 = 0$$

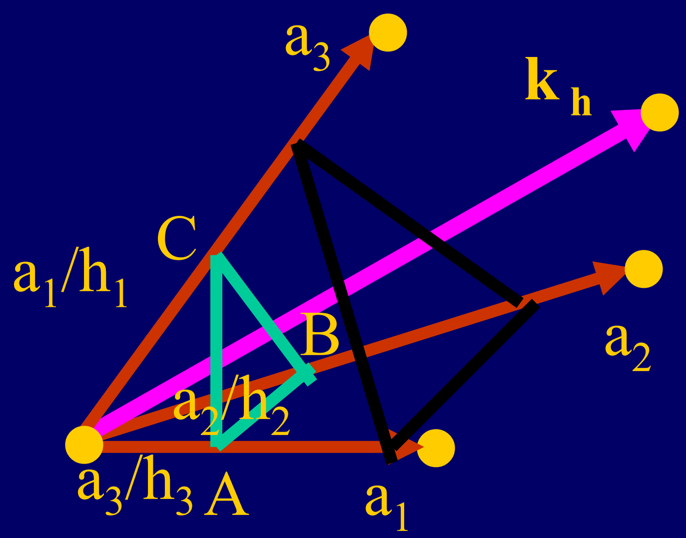
（2）除（2π）^{3}因子外，正格子原胞体积Ω和倒格子原胞体积Ω*互为倒数。

$$\Omega^* = b_1 \cdot (b_2 \times b_3) = (2\pi)^3 / \Omega$$

（3）正格子中一族晶面（$h_1h_2h_3$）和倒格矢

$$k_h = h_1 b_1 + h_2 b_2 + h_3 b_3$$ 正交，

即晶面的弥勒指数是垂直于该晶面的最短倒格矢坐标.



•表达正格点
• 表达倒格点

ABC为一族晶面（$h_1h_2h_3$）中的最接近原点的晶面，与 k_h垂直

（4）倒格矢的长度正比于晶面族（$h_1h_2h_3$）的面间距的倒数。

$d_{h1h2h3}=a_1/h_1\cdot k_h/|k_h|=a_1(h_1b_1+h_2b_2+h_3b_3)/h_1|k_h|=2\pi/|k_h|$

由（3）、（4）可知，一种倒格矢代表正格子中的一族平行晶面 。

晶面族（$h_1h_2h_3$）中离原点的距离为$\mu\, d_{h1h2h3}$的晶面的方程式可写成： $R_l\cdot k_h/|k_h|=\mu\, d_{h1h2h3}$

$(\mu=0,\pm1,\pm2,\ldots\ldots)$

得出正格矢和倒格矢的关系： $R_l\cdot k_h=2\pi\mu$

结论：假如两矢量的关系：$R_l\cdot k_h=2\pi\mu$，则其中一种为正格子，另一种必为倒格子；即正格矢和倒格矢恒满足正格矢和倒格矢的关系。

结论：

- 倒格矢K_h垂直某一晶面（$h_1h_2h_3$），也即该晶面的法线方向与此倒格矢方向一致。
- 倒格矢K_h的大小与和其垂直的晶面间距成正比。
- 一种倒格矢相应一族晶面，但一族晶面能够相应无数个倒格矢，这些倒格矢的方向一致，大小为最小倒格矢的整数倍。
- 满足X射线衍射的一族晶面产生一种斑点，该斑点代表一种倒格点，即该倒格点相应一族晶面指数。