

逆格子ベクトル

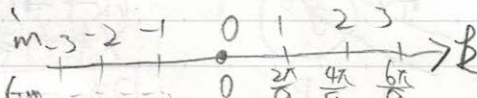
実空間の格子点ベクトル $R_n = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$

逆格子空間の逆格子ベクトル

周期 a の関数 $f(x+na) = f(x)$ に対して複素フーリエ変換すると

$$f(x+na) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} A_m e^{i \frac{2\pi}{a} m x} = f(x) \text{ となる.}$$

このときの e の冪の指数をビクア、ブして、

$$G_m = \frac{2\pi}{a} m \text{ を逆格子点という.}$$


G_m は周期関数をフーリエ級数で展開するのに用いられる波数の集合

これを3次元に拡張すると $f(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = f(\mathbf{r})$ となる関数に対して、

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{G_m} A_{G_m} e^{i G_m \cdot \mathbf{r}} \text{ となるベクトル } G_m \text{ を考える.}$$

これが周期関数となるには、 $e^{i G_m \cdot \mathbf{r}} = e^{i G_m \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R}_n)}$ なので、
 $e^{i G_m \cdot \mathbf{R}_n} = 1$ となればよい。

$$\Rightarrow G_m \cdot \mathbf{R}_n = n_1 G_m \cdot a_1 + n_2 G_m \cdot a_2 + n_3 G_m \cdot a_3 = 2\pi N \quad (N \text{ は整数})$$

a_1, a_2, a_3 が基本直交ベクトルであることを考慮すると、

$$\begin{cases} G_m \cdot a_1 = 2\pi m_1 \\ G_m \cdot a_2 = 2\pi m_2 \\ G_m \cdot a_3 = 2\pi m_3 \end{cases} \text{ を満足するよう、} \begin{cases} G_m = m_1 b_1 + m_2 b_2 + m_3 b_3 \\ a_i \cdot b_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i=j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}) \end{cases}$$

となる、逆格子の基本ベクトル b_j が定義される。

こまでの議論から、

$$b_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)} \quad b_2 = 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{a_2 \cdot (a_3 \times a_1)} \quad b_3 = 2\pi \frac{a_1 \times a_2}{a_3 \cdot (a_1 \times a_2)}$$

実空間の直交ベクトル2本を外積して正規化すると逆格子の基本ベクトル1本

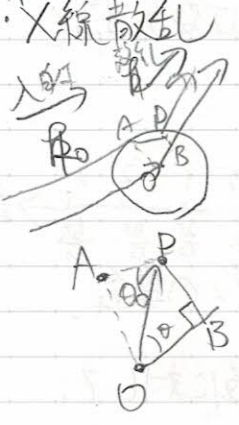
(例) 単純立方格子 $a_1 = a e_x, a_2 = a e_y, a_3 = a e_z$ に対して、

$$b_1 = 2\pi \frac{a e_y \times a e_z}{a e_x \cdot (a e_y \times a e_z)} = \frac{2\pi}{a} (e_y \times e_z) = \frac{2\pi}{a} e_x$$

残り2本は省略、このように単位胞の辺の長さを波長とした波数を軸とする単位ベクトルになる。

・ブリューアンパイン、逆格子空間における基本単位胞
 実空間のウグナー=サイツ胞と等しい

○結晶による回折



入射・散乱して波数ベクトルの大まは変わらない
 向きだけが変わる
 原子中心からだけ離れたPにある電子によって
 X線が散乱されると、中心Oで散乱される場合の光路差は

$$\frac{2\pi}{\lambda} (AP - OB) = \frac{2\pi}{\lambda} OP (\cos\theta_0 - \cos\theta) = \frac{2\pi}{\lambda} |P| (\cos\theta_0 - \cos\theta)$$

入射・散乱の波数ベクトルを用いて $\frac{2\pi}{\lambda} (AP - OB) = (k_0 - k) \cdot r$
 散乱ベクトル $k = k - k_0$ を定義して、 $-k \cdot r$ と書けるようになる。

位置ベクトル r の地点の電子分布密度を $\rho(r)$ とすると、

X線の振幅 E は $E \propto \rho(r) e^{-ik \cdot r} dr$

$\Rightarrow f(k) = \int \rho(r) e^{-ik \cdot r} dr$ 、これを原子散乱因子あるいは原子形状因子という。