固体物理学1

第6講

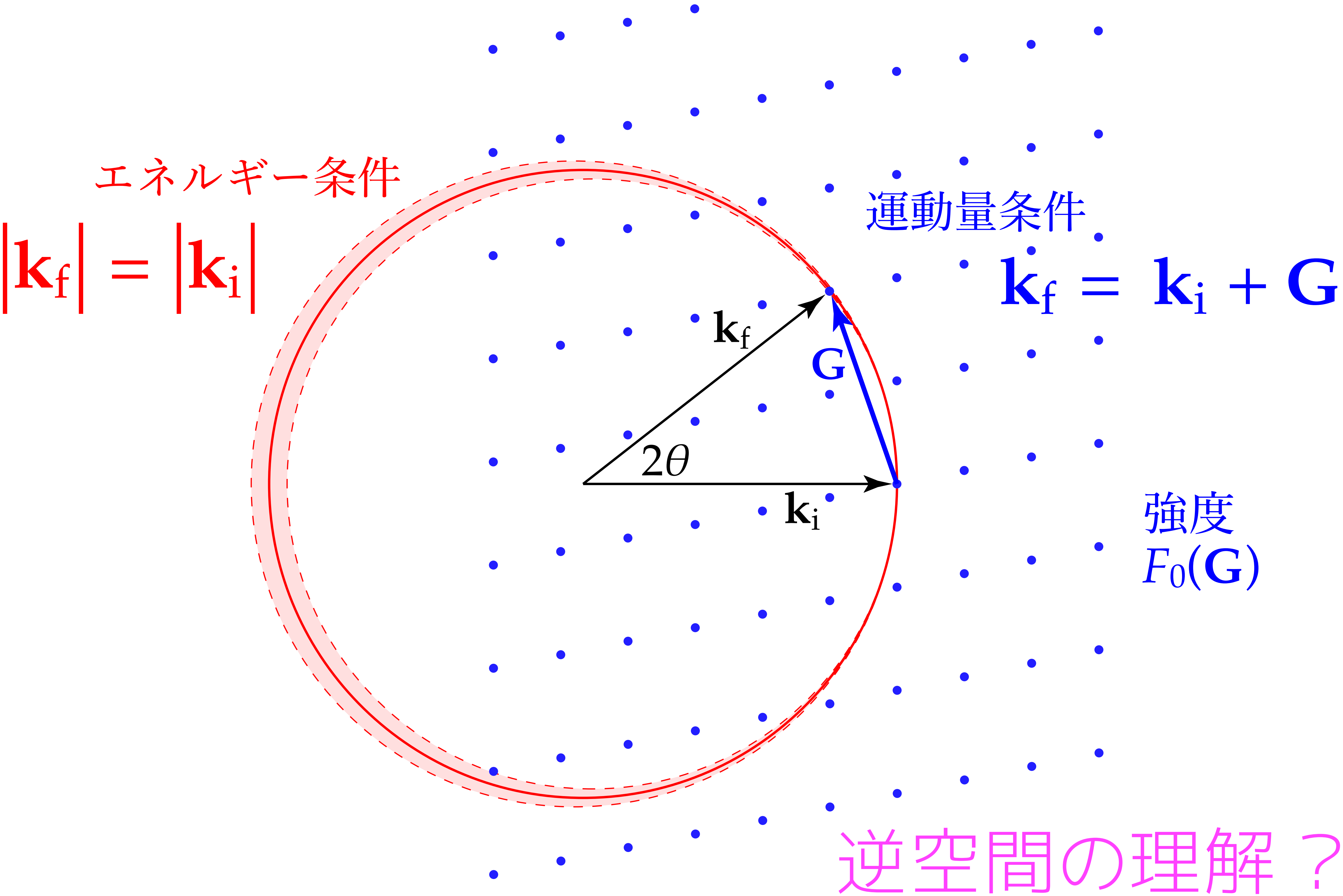
逆空間

~~ 逆もまた真なり ~~

広島大学　井野明洋

居室：理D205、放射光セ408

逆空間では単純な話

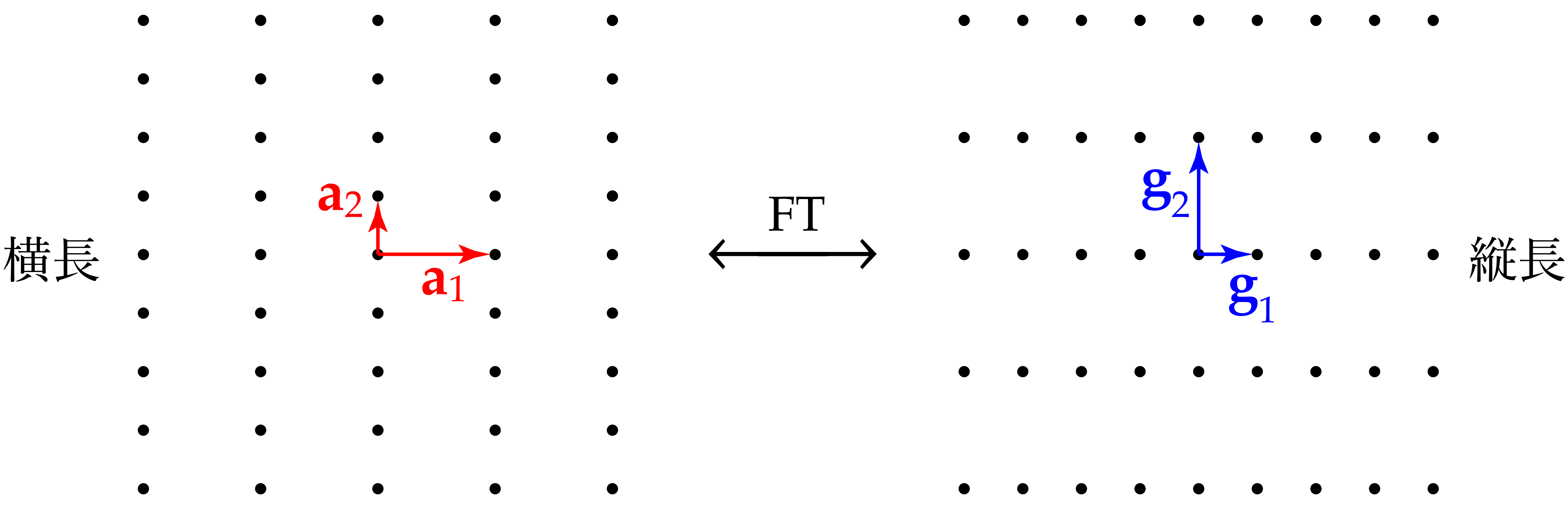


逆空間の理解？

数学的

~~実験~~事実

長方格子



実空間 $\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\,\delta_{ij}$ 逆空間

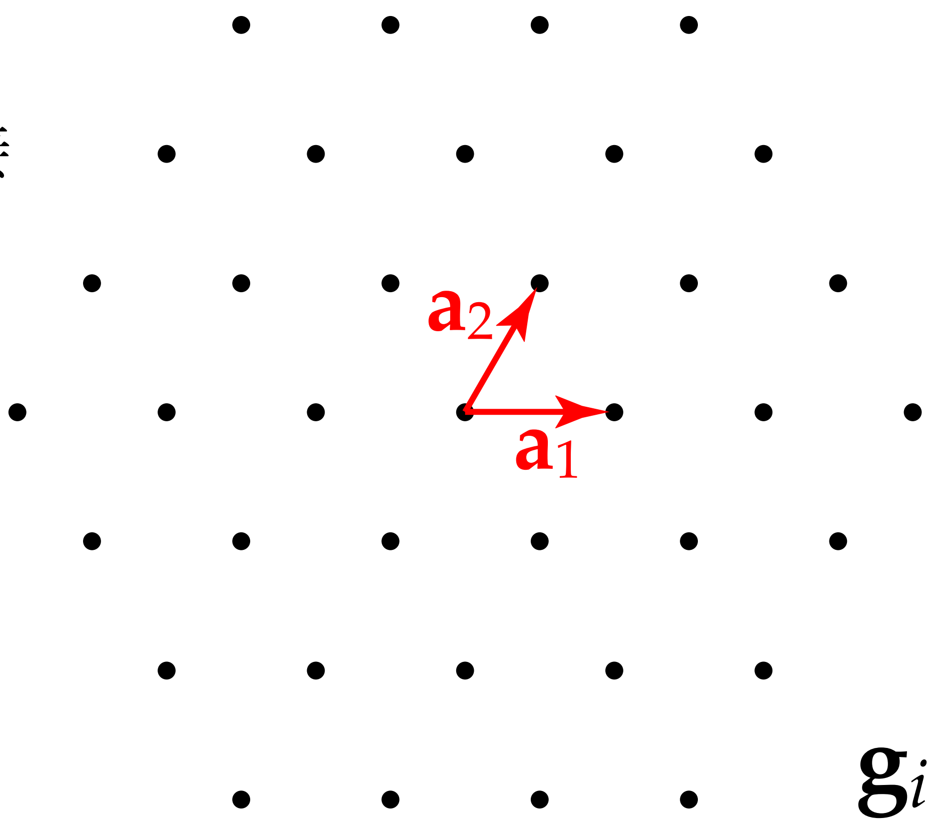
まあわかる

三角格子

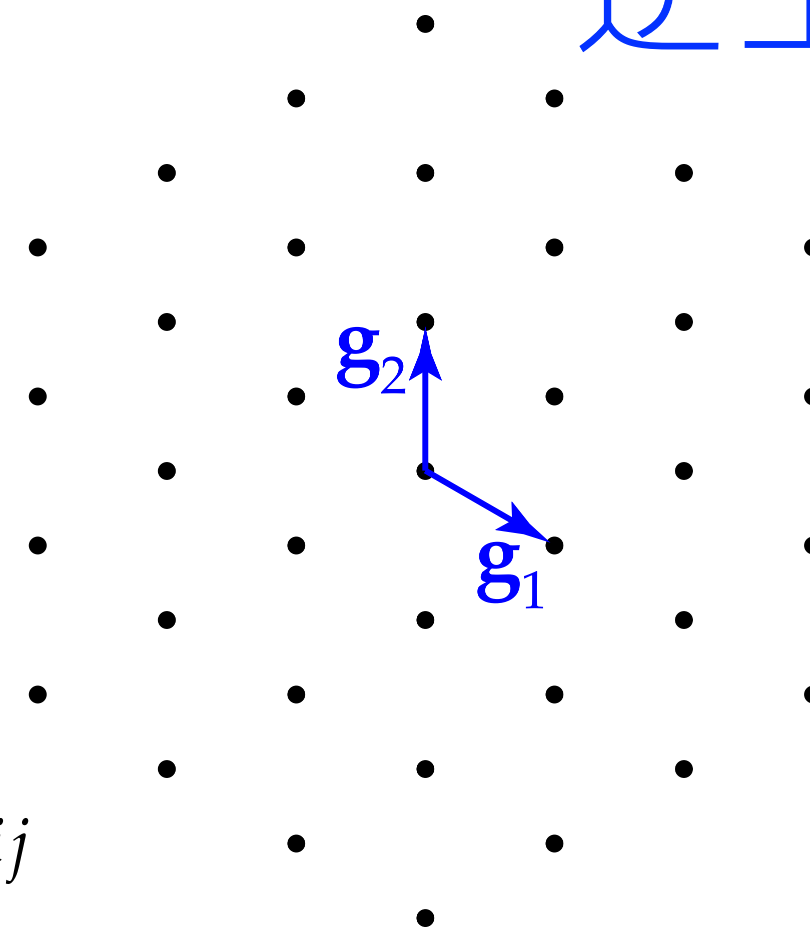
実空間

逆空間

最近接
180°
120°
60°
0°
-60°
-120°



FT
⟷



最近接
150°
90°
30°
-30°
-90°
-150°

$$\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\,\delta_{ij}$$

$\mathbf{a}_1$ によって、$\mathbf{g}_2$ の向きが決まり、

$\mathbf{a}_2$ によって、$\mathbf{g}_1$ の向きが決まる。

気持ち悪い

頭が追いつかない →『逆空間の壁』

課題

逆空間を

もっと直感的に！！！

方針

たたみこみを

頭にたたきこむ

- Fourier変換の「九九」
- Convolution定理

板書

フーリエ変換（無限空間 非ユニタリ）

$$
\begin{cases}
\text{正変換} \quad F(\mathbf{k}) = \displaystyle\int d\mathbf{r}\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) \\
\text{逆変換} \quad f(\mathbf{r}) = \displaystyle\int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} F(\mathbf{k})
\end{cases}
$$

↑

気にしない
（流儀によって変わる）

ガウシアン

正規分布関数

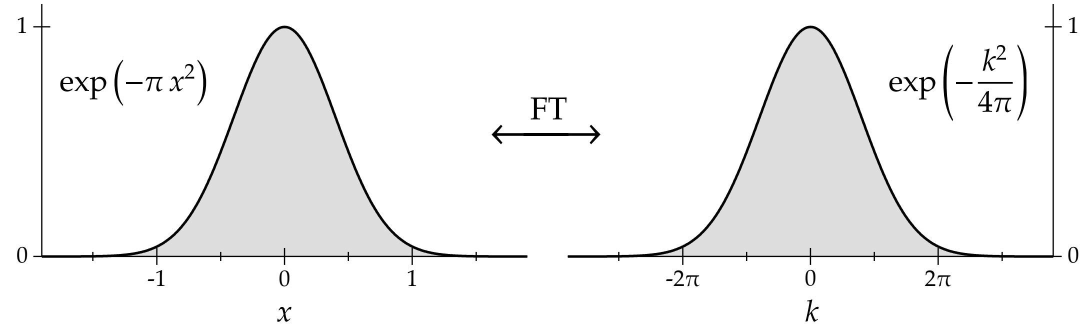
$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \xleftrightarrow{\text{FT}} \exp\left(-\frac{\sigma^2 k^2}{2}\right)$$

ツボQ1

実空間

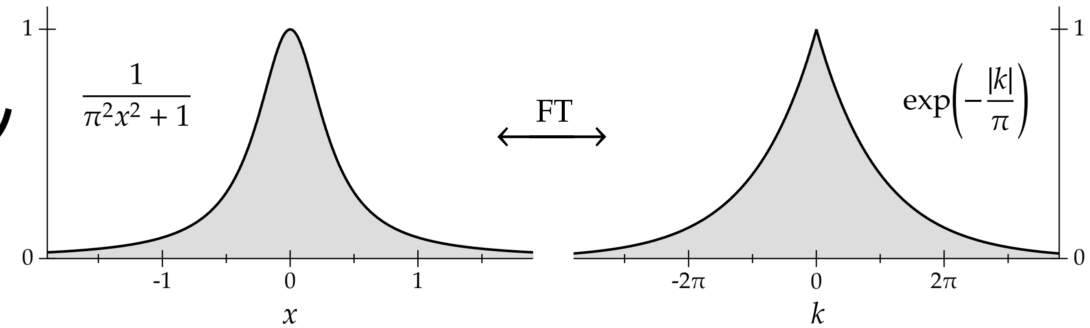
逆空間

ガウシアン



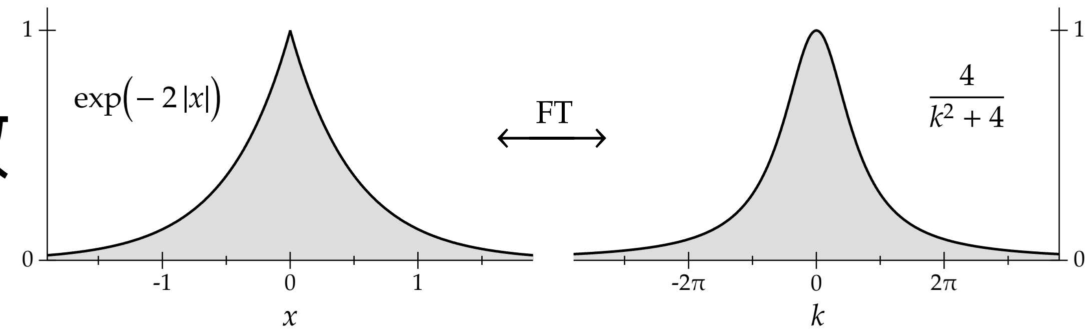
ガウシアン

ローレンチアン



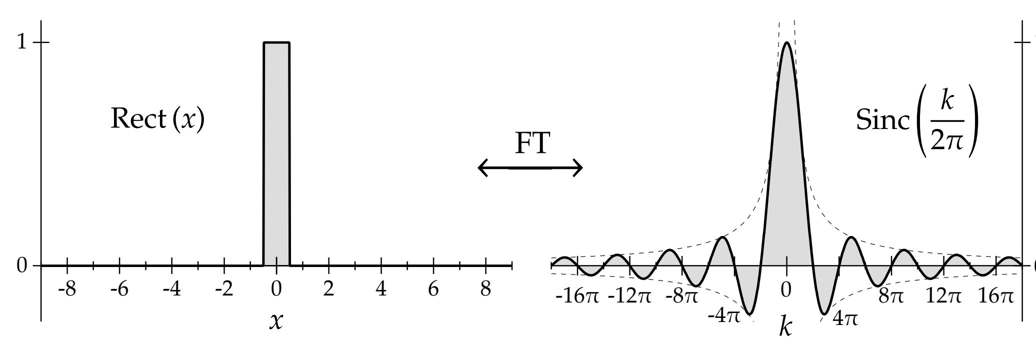
両側指数関数

両側指数関数



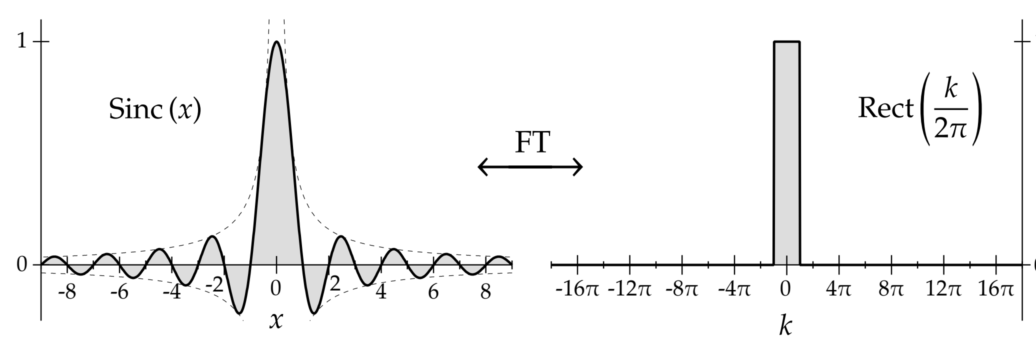
ローレンチアン

矩形関数



シンク関数

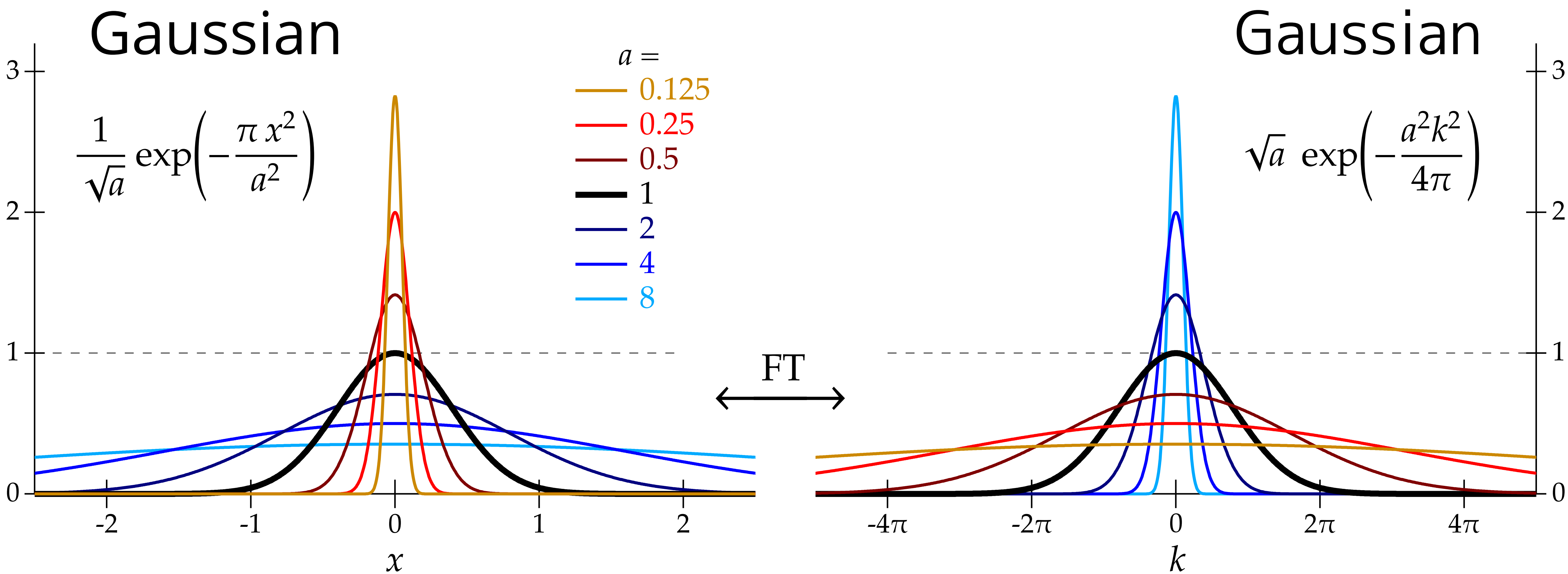
シンク関数



矩形関数

伸縮則

ツボ
Q1, Q2



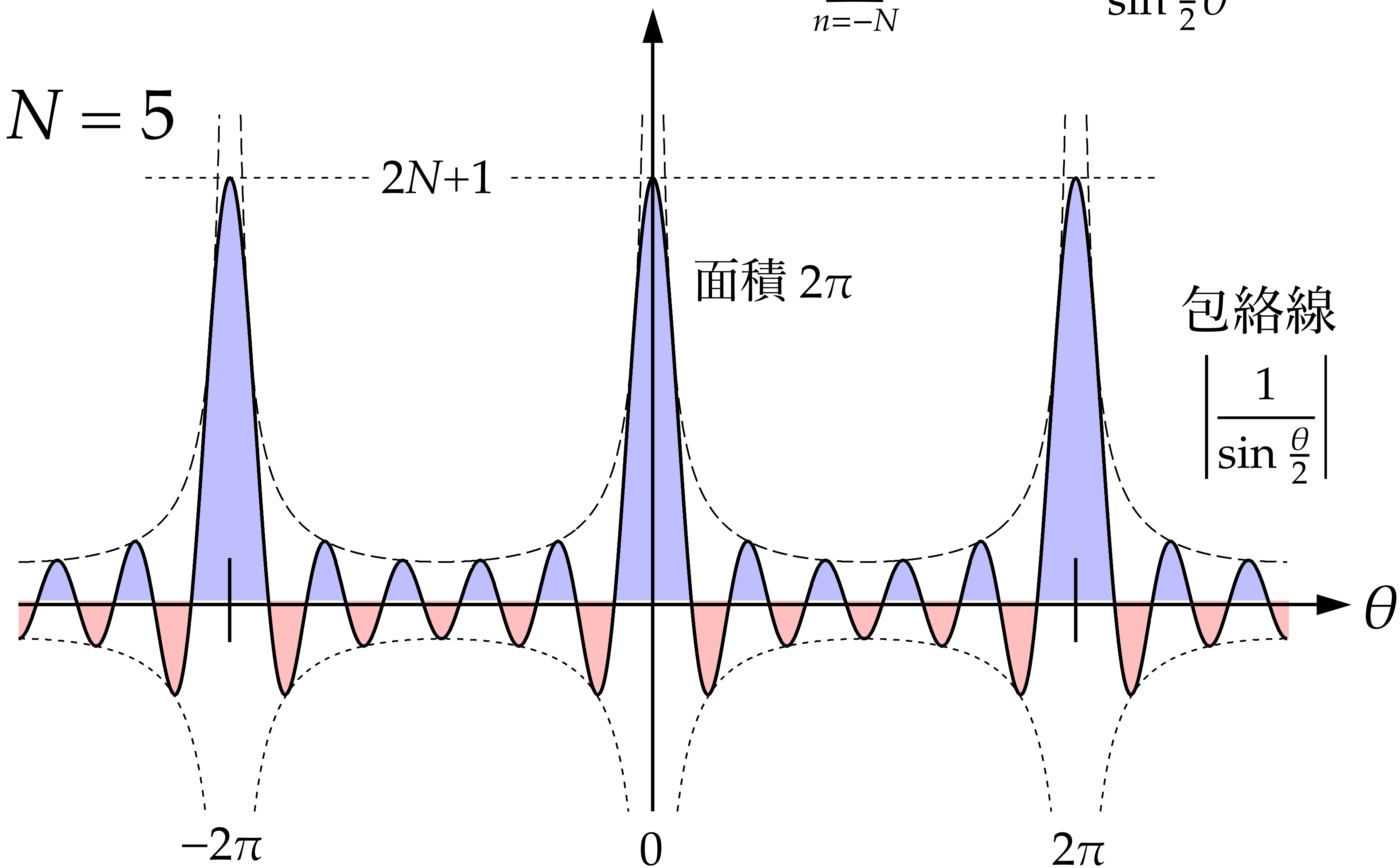
実空間

逆空間

不確定性

ディリクレ核 Dirichlet Kernel

$$D_N(\theta) \overset{\text{def.}}{=} \sum_{n=-N}^{N} e^{in\theta} = \frac{\sin\left(N+\frac{1}{2}\right)\theta}{\sin\frac{1}{2}\theta}$$



有限ディラック列

$\left|D_N(\theta)\right|^2$ は、ラウエ関数

実空間

$$f(x) = \frac{1}{2N+1}\sum_{n=-N}^{n=+N}\delta(x-na)$$

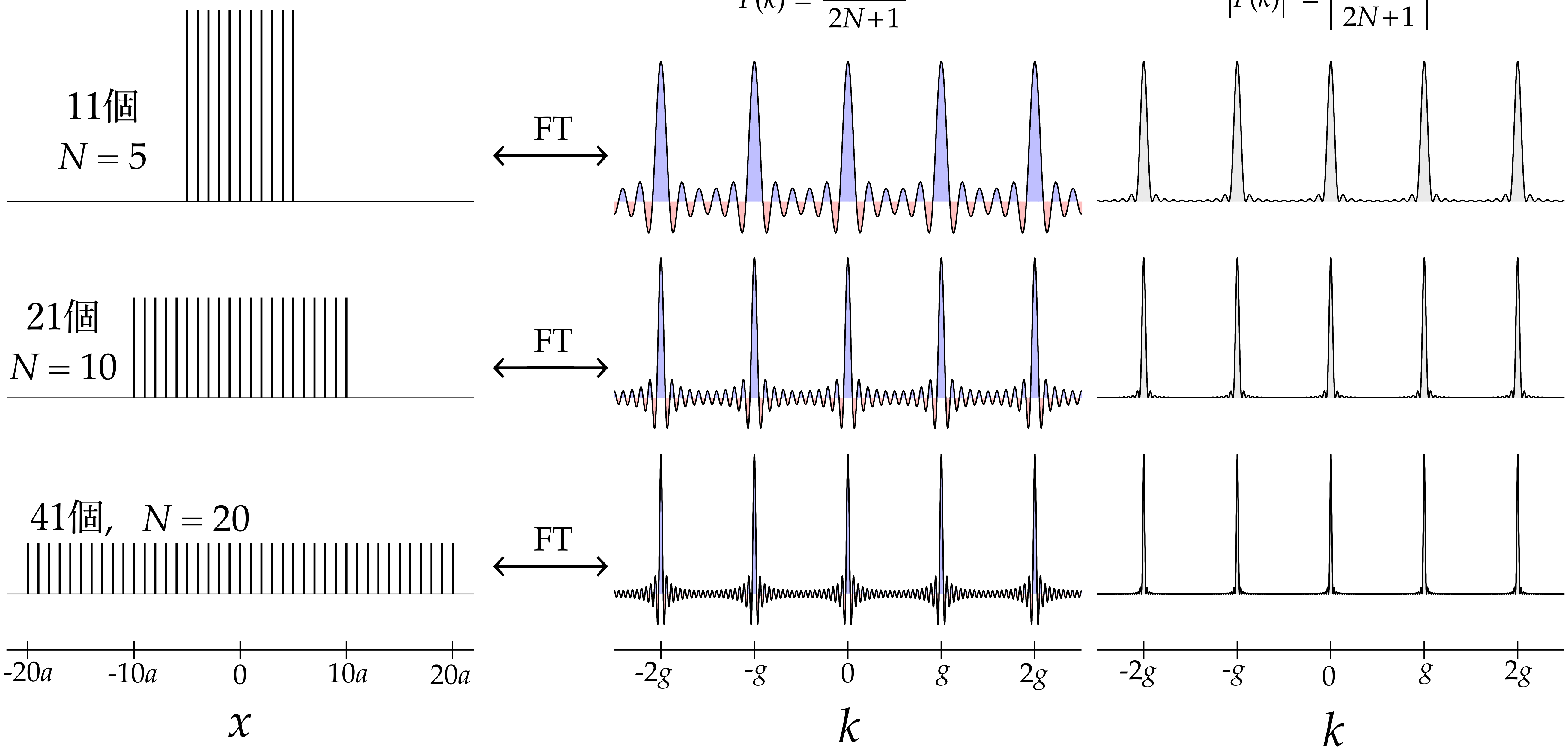
逆空間

散乱振幅

$$F(k) = \frac{D_N(ka)}{2N+1}$$

散乱強度

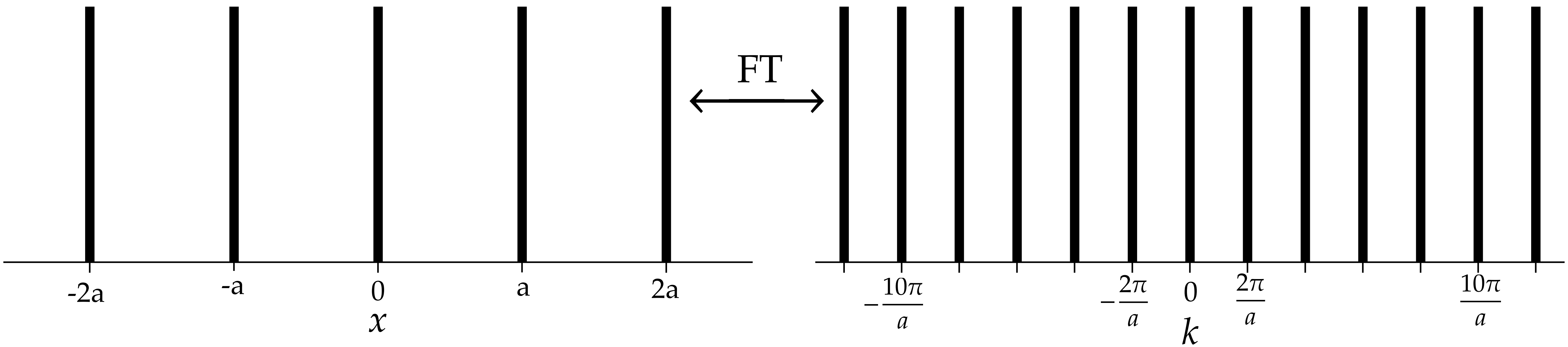
$$\left|F(k)\right|^2 = \left|\frac{D_N(ka)}{2N+1}\right|^2$$



無限ディラック列

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-na) \quad \xleftrightarrow{\text{FT}} \quad g \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(k-mg)$$

$$ga = 2\pi$$

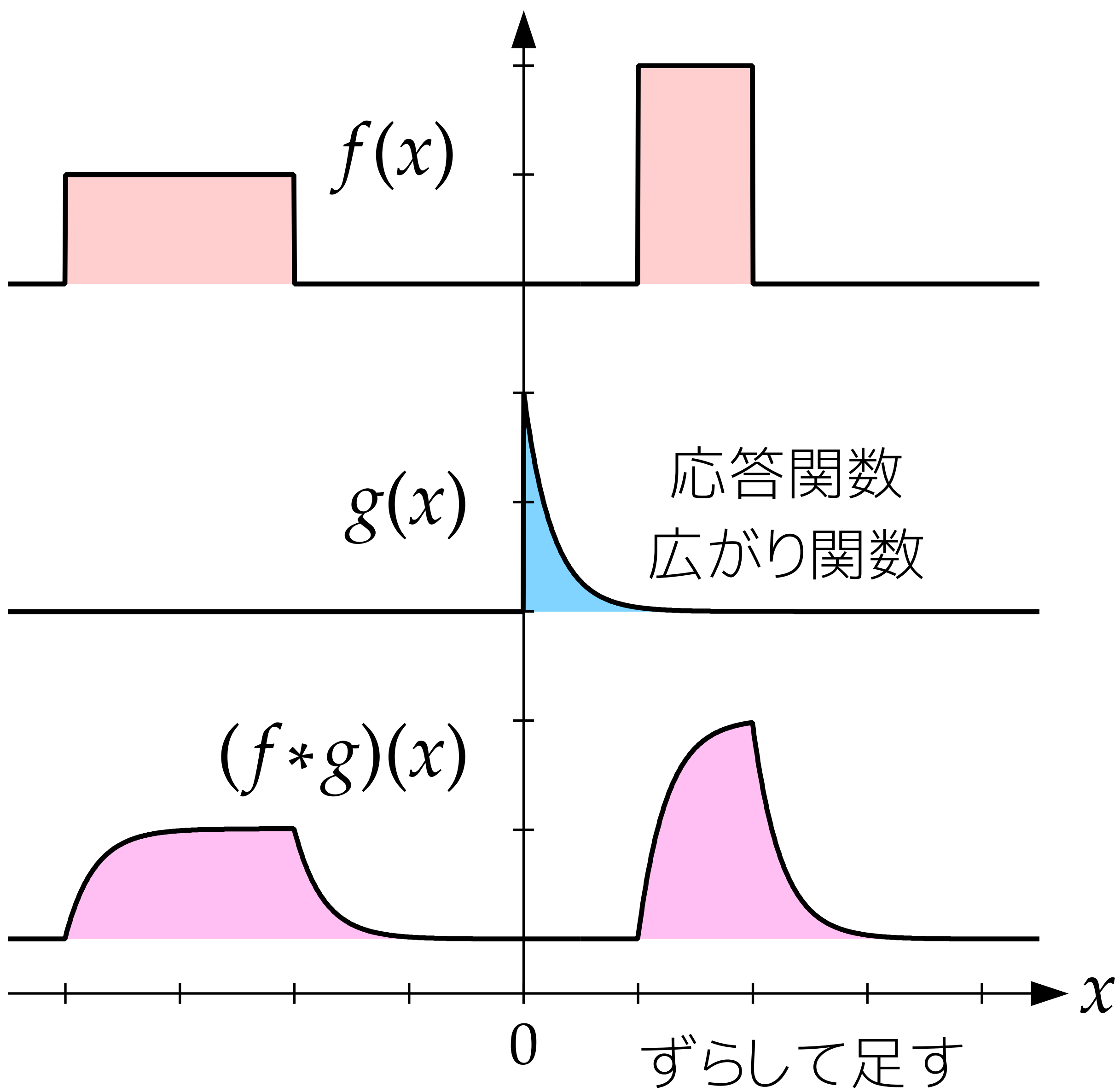


実空間　　　　逆空間

畳み込み (重畳積)

定義

$$(f*g)(x) \overset{\text{def.}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda)\, g(x-\lambda)\, d\lambda$$



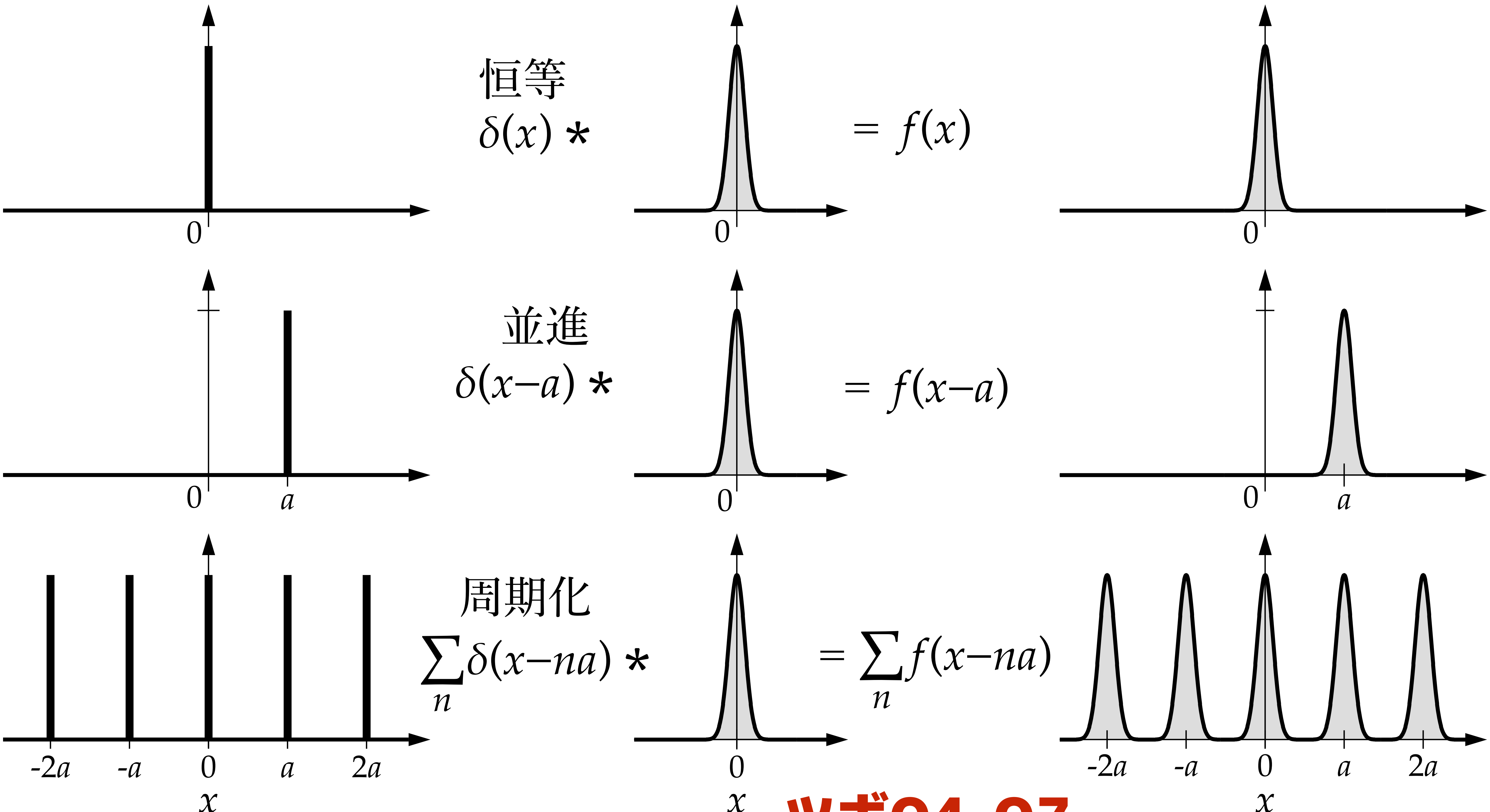
交換則	$f*g$	$=$	$g*f$
結合則	$(f*g)*h$	$=$	$f*(g*h)$
線形性	$f*(ag+bh)$	$=$	$a(f*g)+b(f*h)$
単位元	$\delta*f$	$=$	f

デルタ関数の定義

ツボQ4

畳み込みで、並進 と 周期化

$$g(x) \quad * \quad f(x) \quad = \quad (g*f)\,(x)$$



ツボQ4-Q7

畳み込み定理（無限空間 非ユニタリ）

ツボQ3

実空間

$$(f * g)(\mathbf{r}) \xleftrightarrow{\text{FT}} F(\mathbf{k}) \cdot G(\mathbf{k})$$

$$f(\mathbf{r}) \cdot g(\mathbf{r}) \xleftrightarrow{\text{FT}} \frac{1}{(2\pi)^3}(F * G)(\mathbf{k})$$

逆空間

気にしない
（流儀によって変わる）

畳み込み定理の **核心部**

ツボQ3

実空間

$$\ast \xleftrightarrow{\mathrm{FT}} \bullet$$

$$\bullet \xleftrightarrow{\mathrm{FT}} \ast$$

逆空間

畳み込み演算 の フーリエ変換

実空間

並進

$$\delta(x-a)\,* \quad \xleftrightarrow{\mathrm{FT}} \quad e^{ika}\,\bullet$$

搬送波

周期化

$$\sum_n \delta(x-na)\,* \quad \xleftrightarrow{\mathrm{FT}} \quad g\sum_n \delta(k-ng)\,\bullet$$

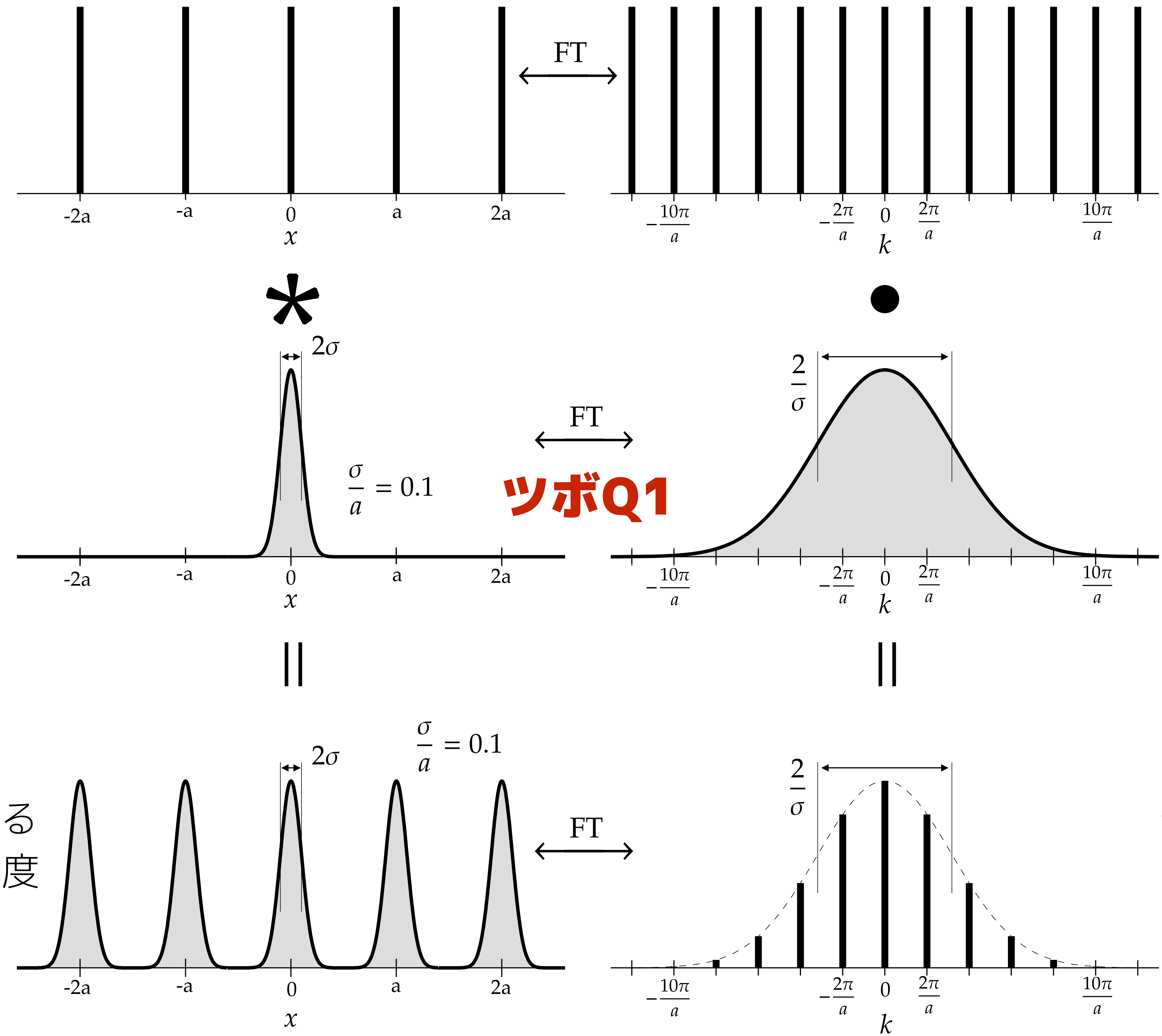
離散化

微分

$$\frac{d\,\delta(x)}{dx}\,* \quad \xleftrightarrow{\mathrm{FT}} \quad k\,\bullet$$

一次関数

逆空間



実空間

逆空間

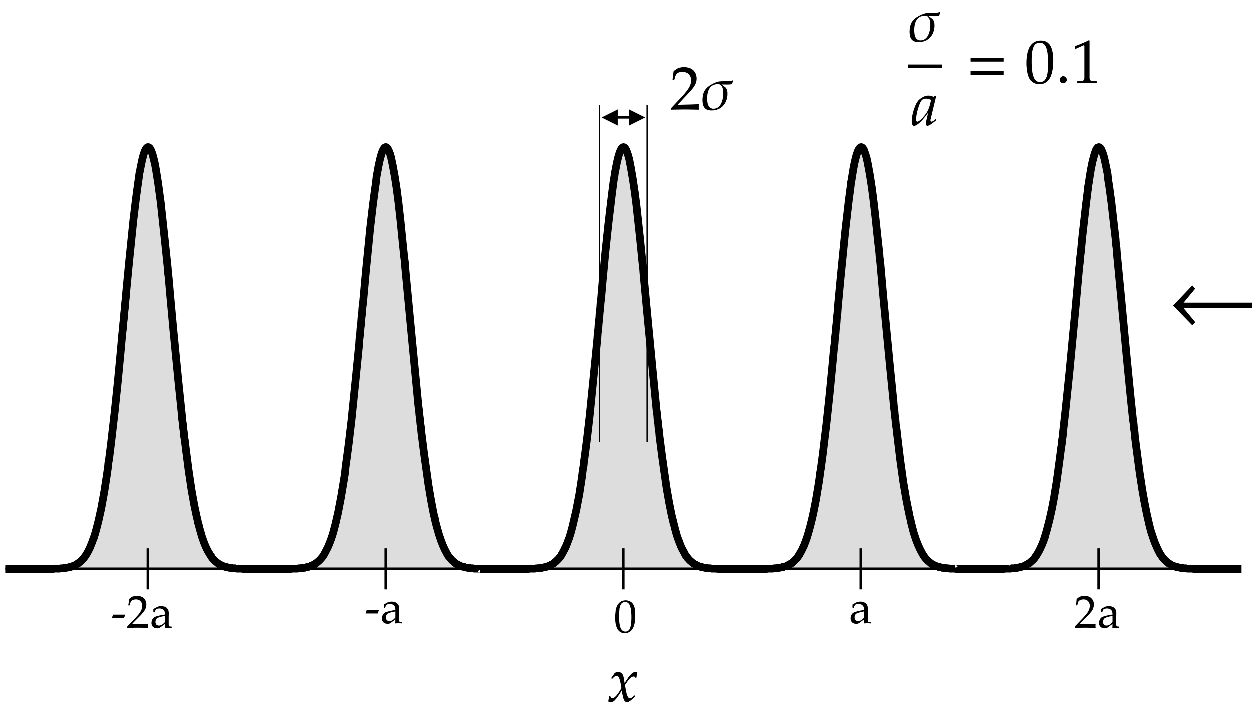
幅のある
電荷密度
分布

高調波
の抑制

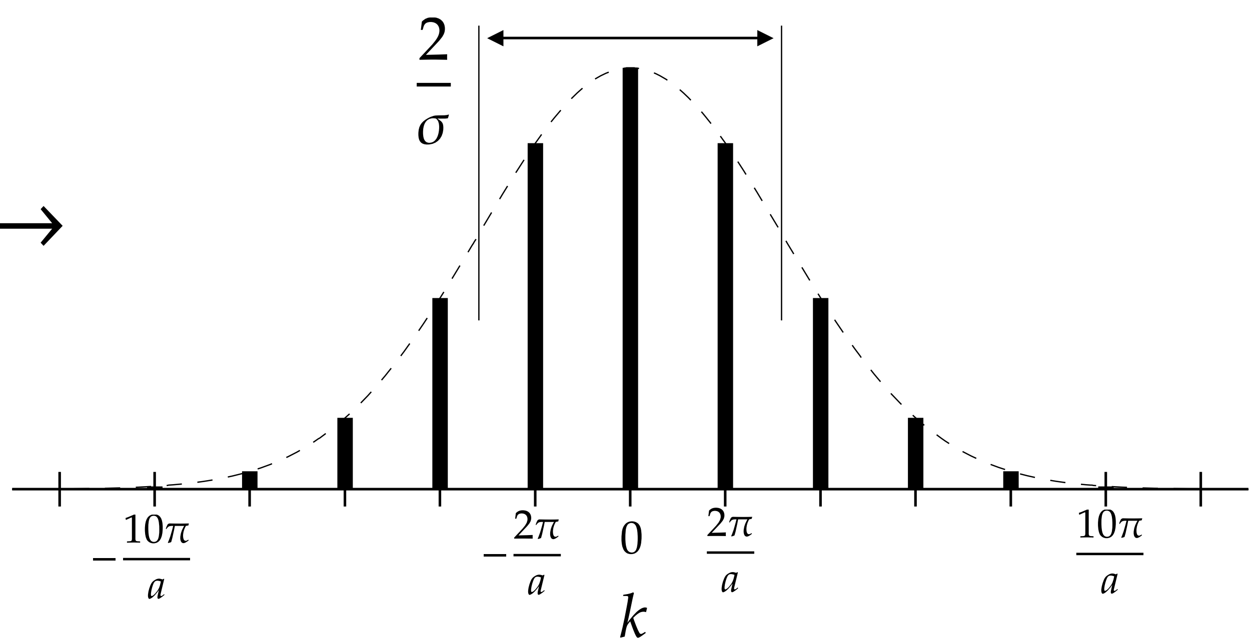
一次元周期関数

一次元結晶

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} f_0(x-na) \;\xleftrightarrow[ga\,=\,2\pi]{\text{FT}}\; g\,F_0(k)\sum_{m=-\infty}^{\infty}\delta(k-mg)$$



FT

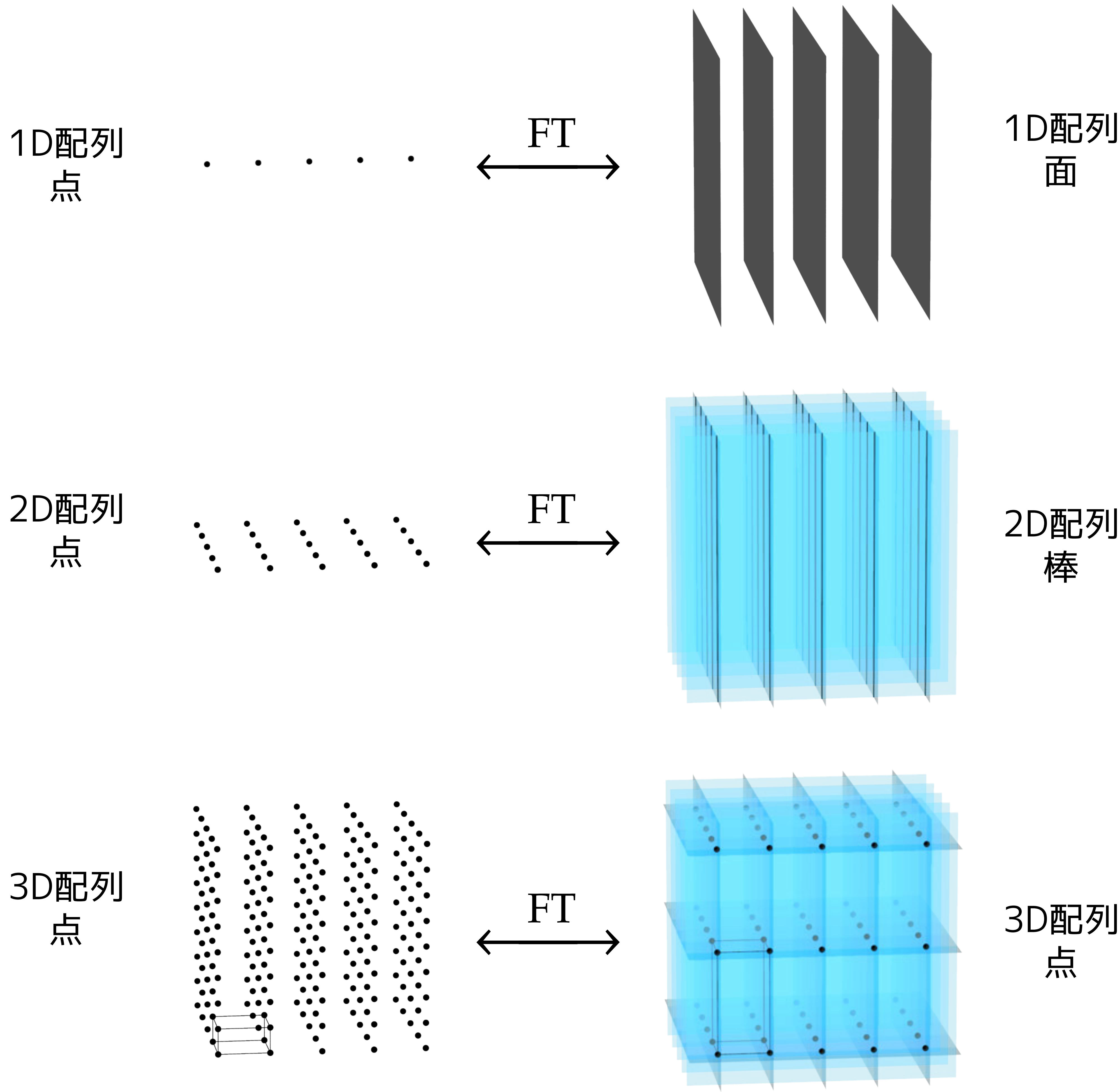


幅のある電荷密度分布

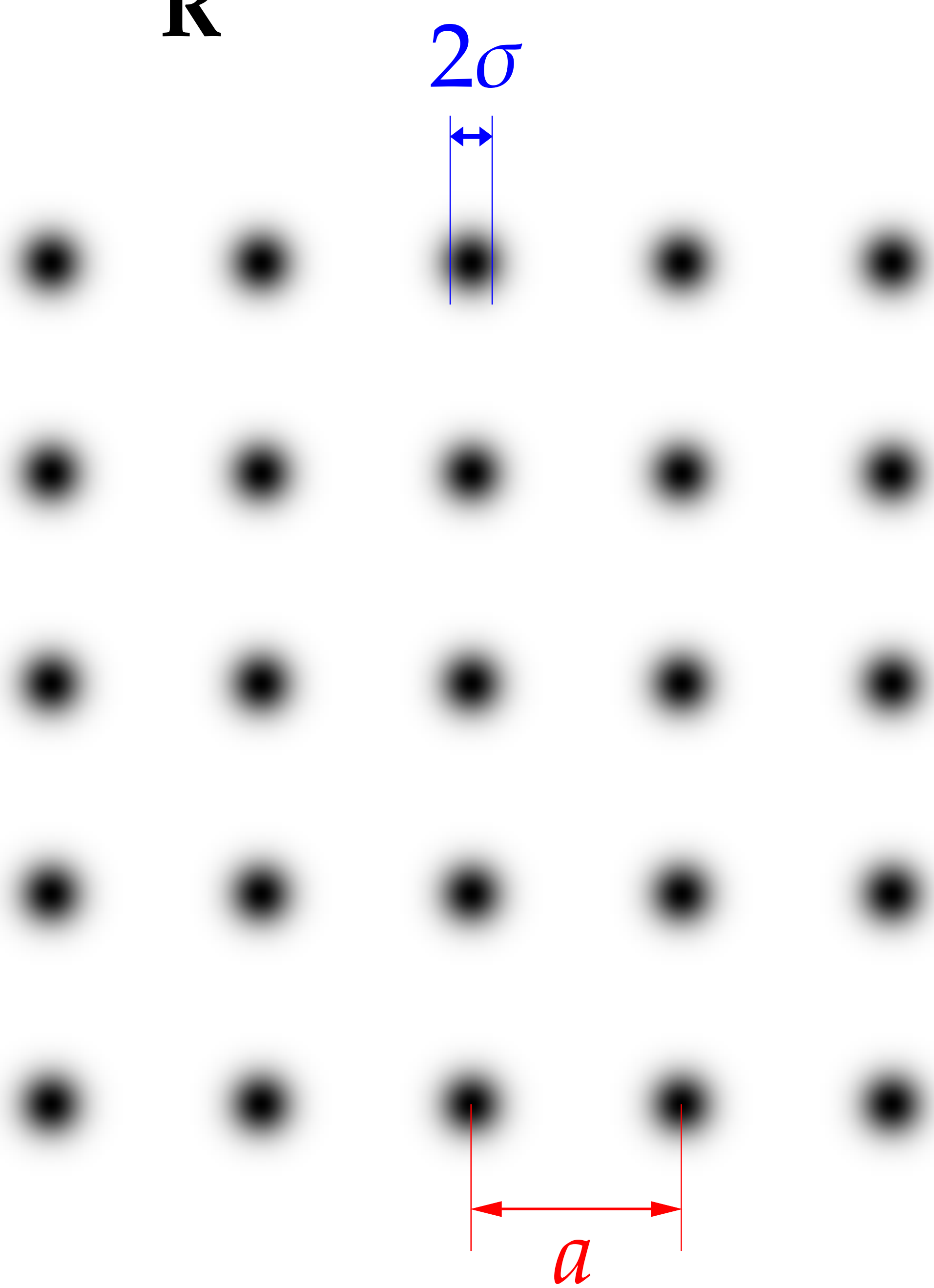
高調波の抑制

実空間

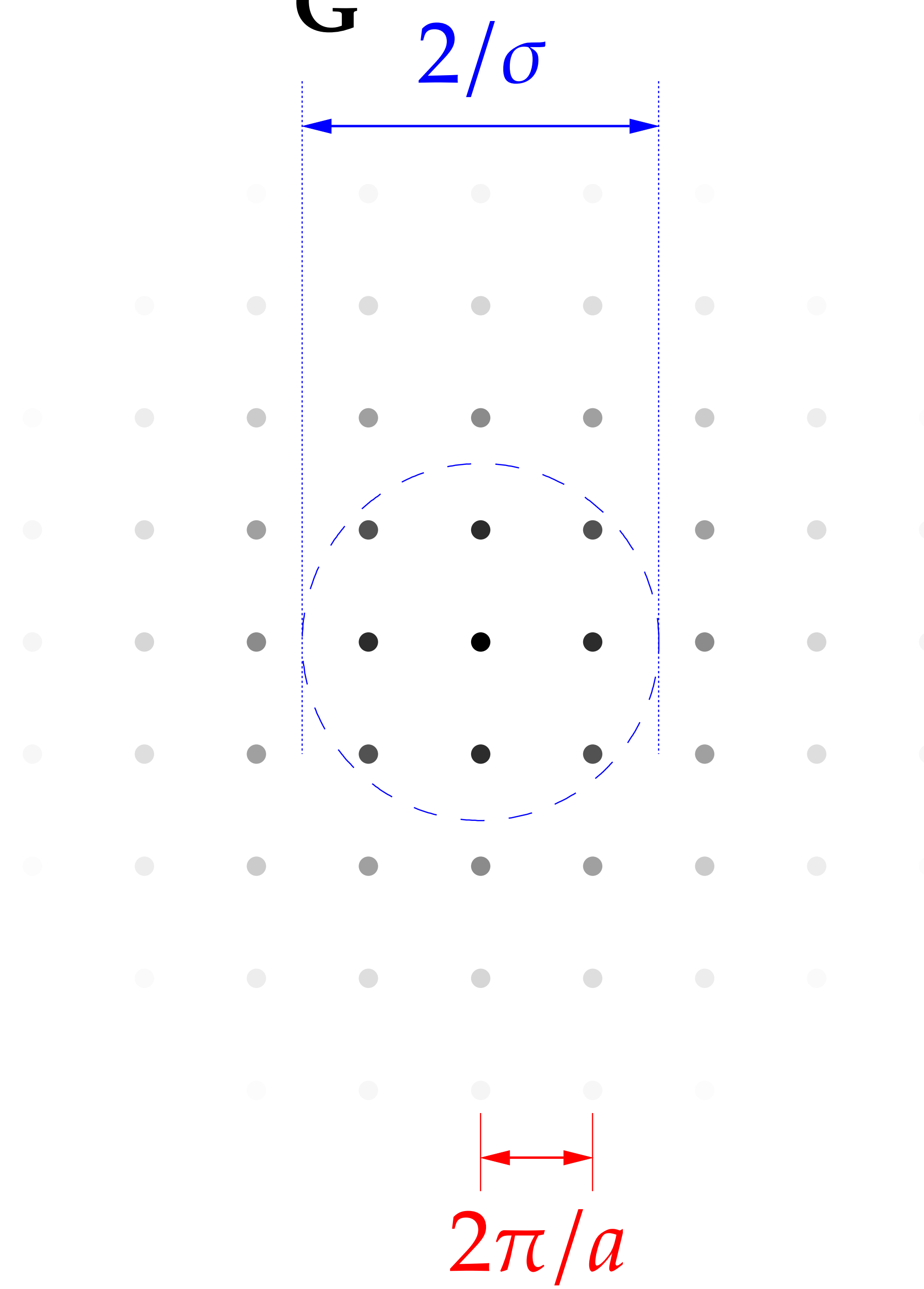
逆空間


1D配列
点
FT
1D配列
面
2D配列
点
FT
2D配列
棒
3D配列
点
FT
3D配列
点

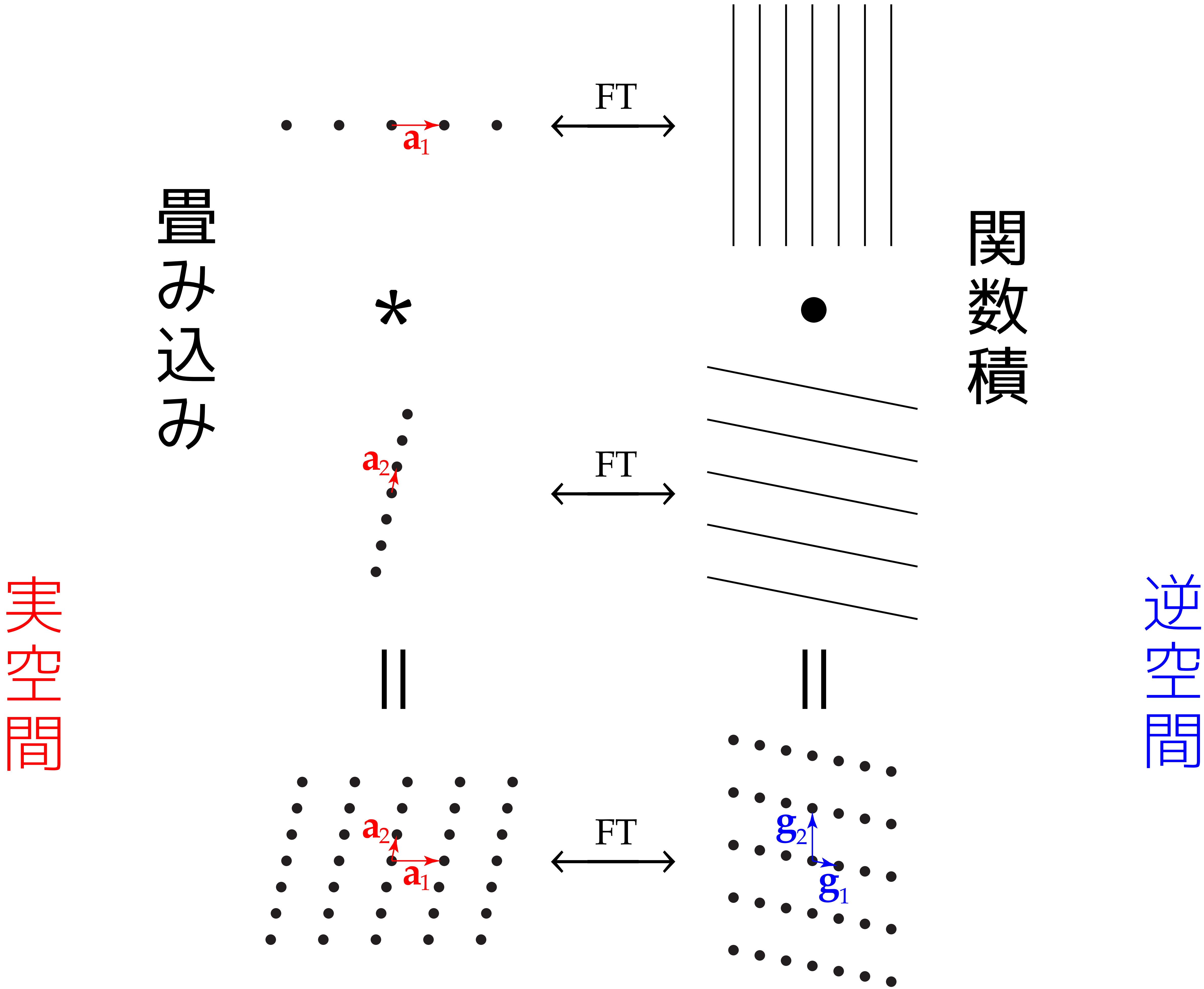
$$\sum_{\mathbf{R}} f_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \qquad\qquad \frac{(2\pi)^3}{\Omega} F_0(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{G}} \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{G})$$



$$\xleftrightarrow{\text{FT}}$$

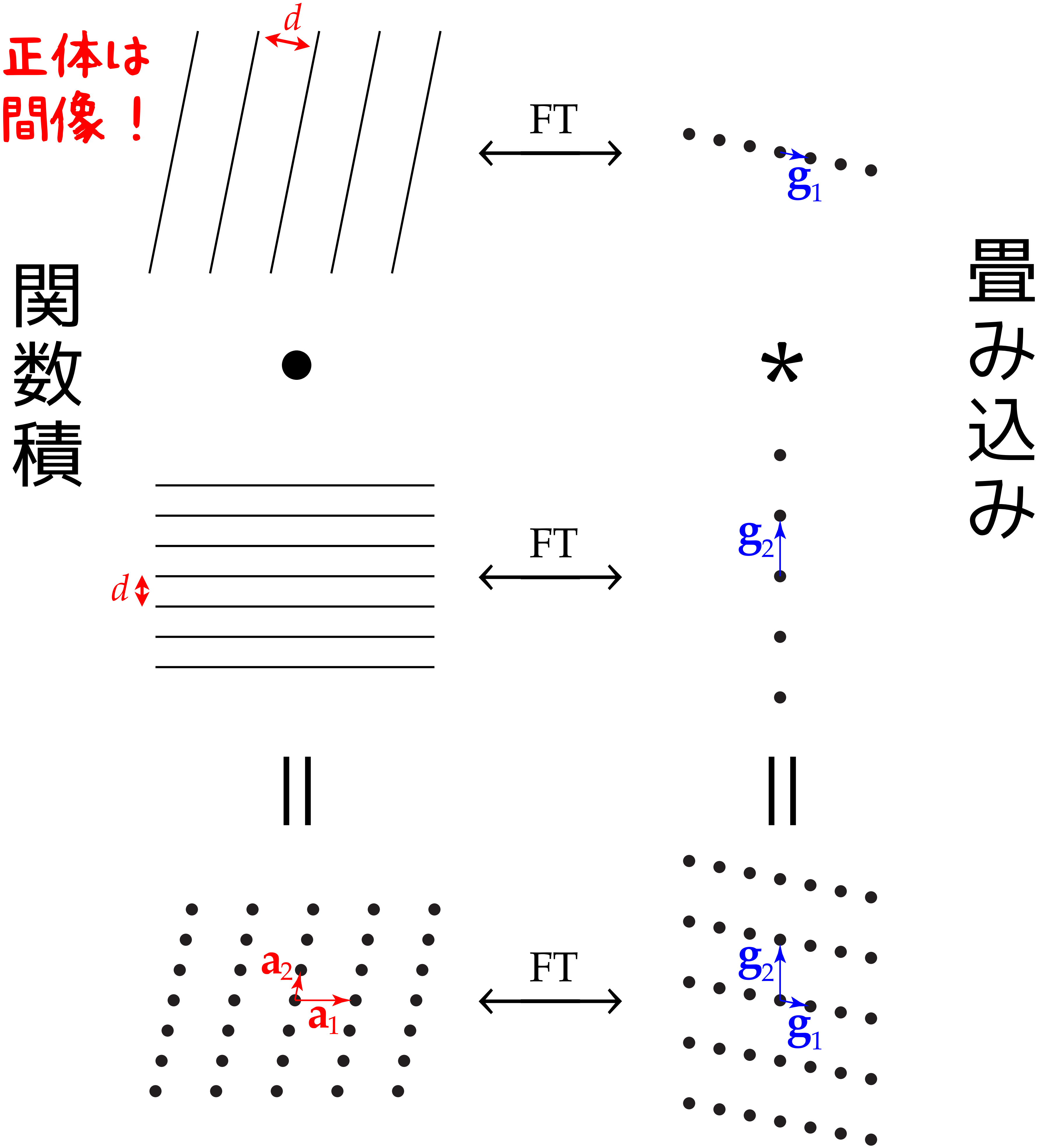


$$\frac{\ell}{a} = 0.1$$


畳み込み
関数積
実空間
逆空間
FT
FT
FT
$\mathbf{a}_1$
$\mathbf{a}_2$
$\mathbf{a}_2$
$\mathbf{a}_1$
$\mathbf{g}_2$
$\mathbf{g}_1$
*
•
=
=

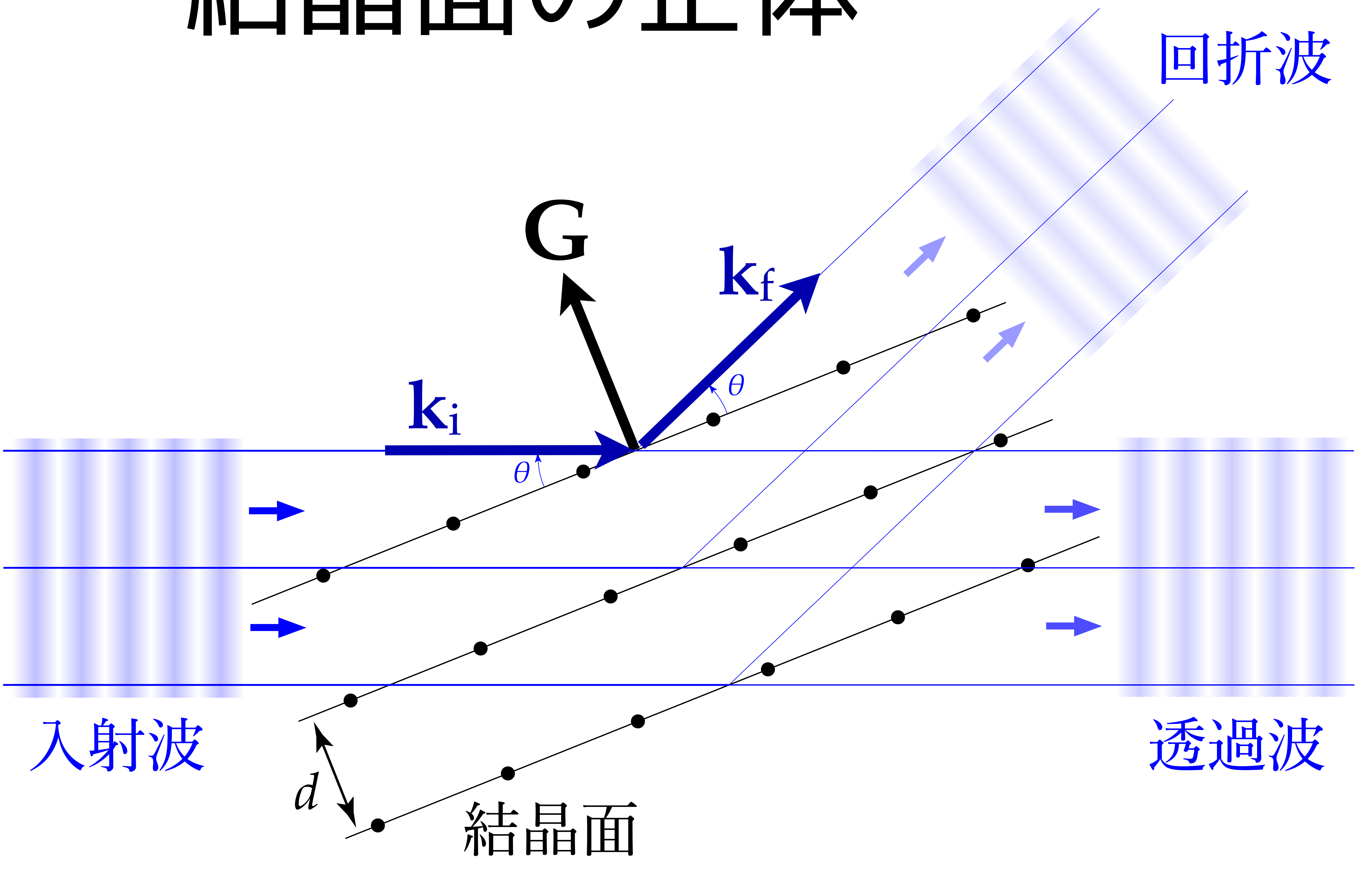
結晶面の正体は
g の実空間像！

実空間

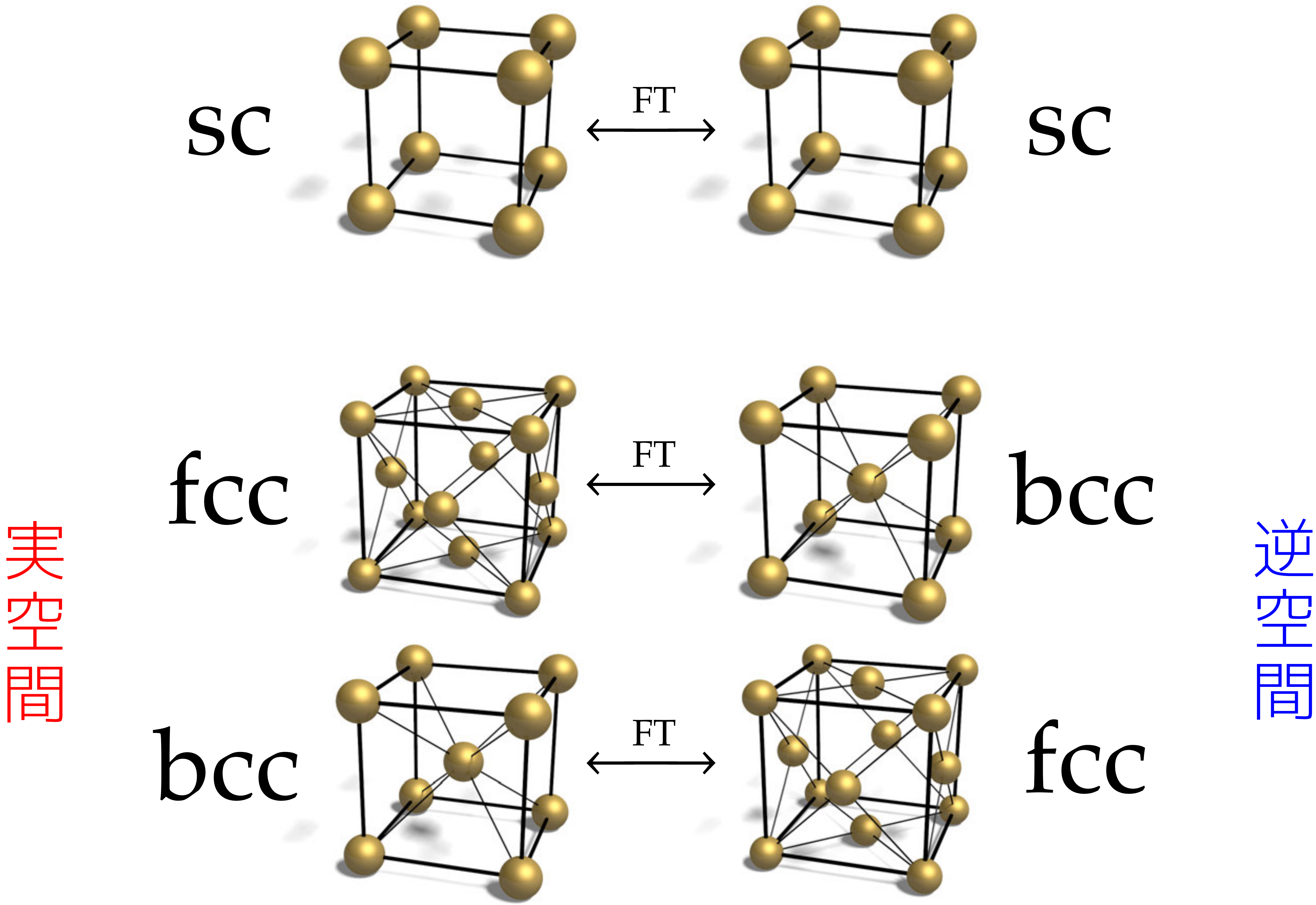


逆空間

結晶面の正体


回折波
G
$\mathbf{k}_\mathrm{f}$
$\mathbf{k}_\mathrm{i}$
θ
θ
入射波
透過波
d
結晶面

立方晶は三種類

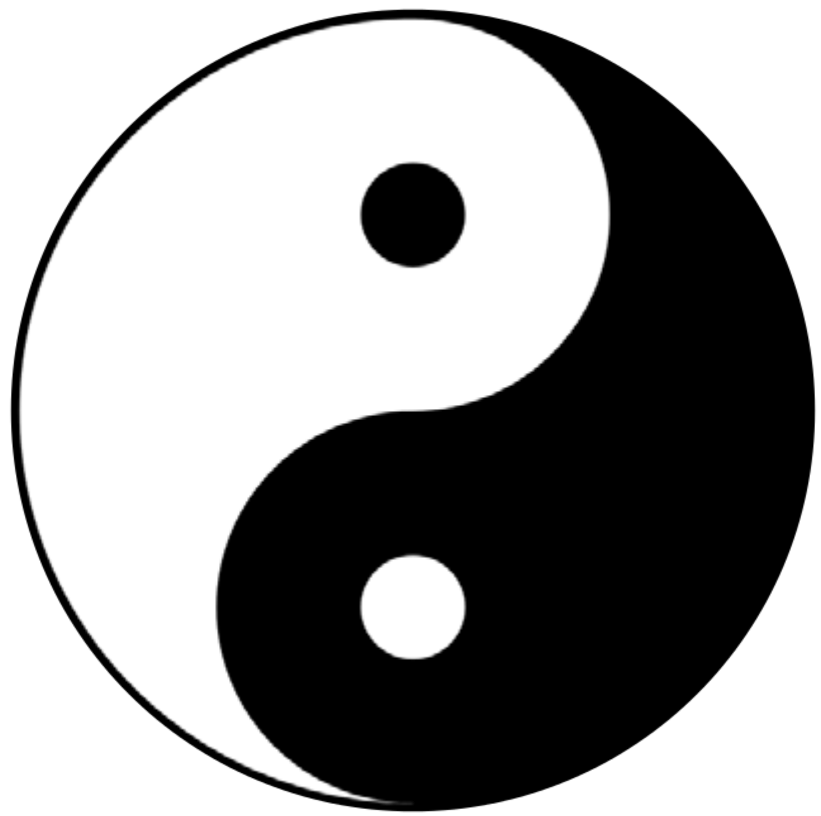


双対性 (duality)

そう つい

裏と表の関係

裏の裏は表



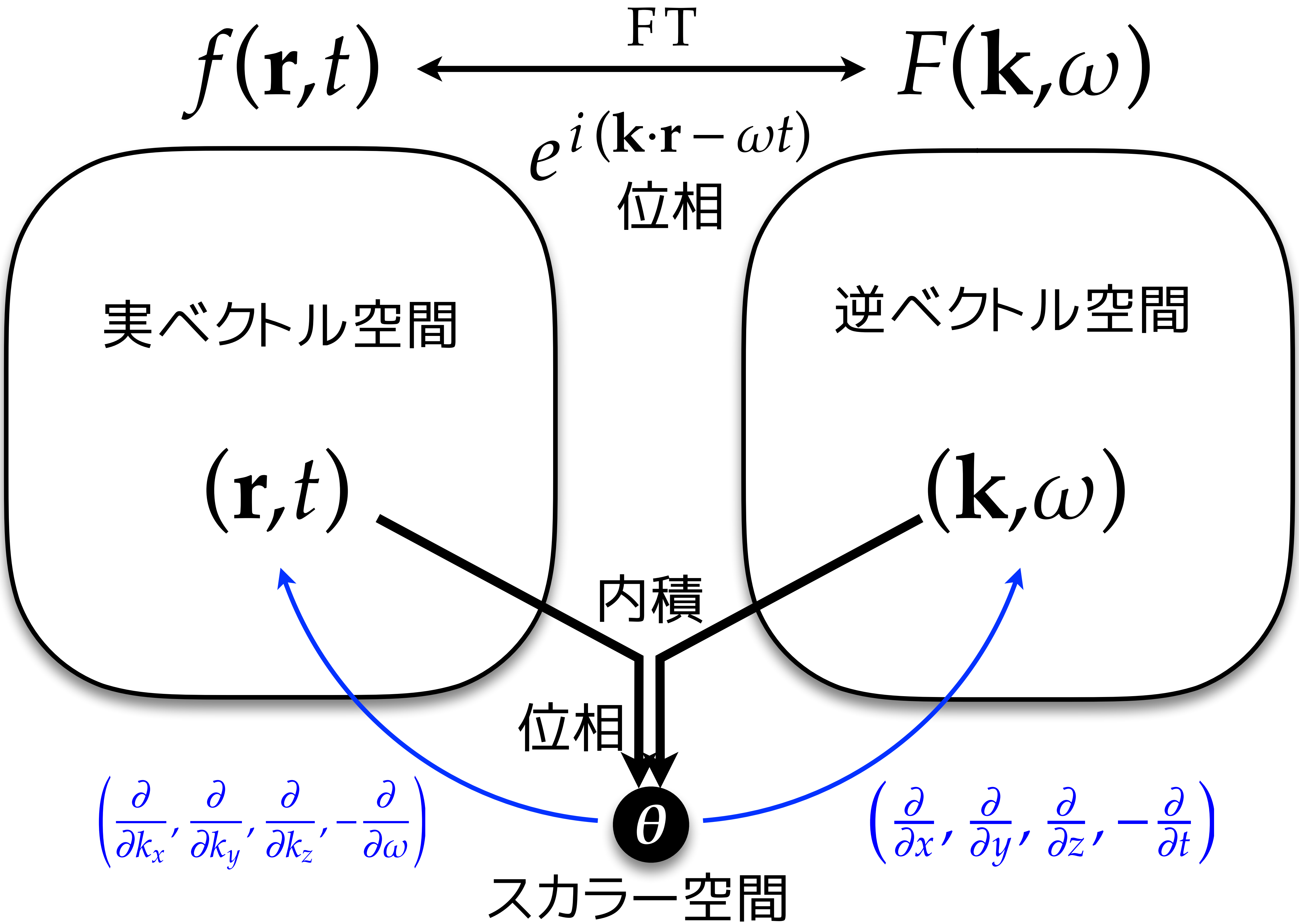
実体は１つ

表現が２つ

- ▷ 双対多面体
- ▷ **双対ベクトル空間**
- ▷ 論理の双対

- **縦ベクトル／横ベクトル**
- **反変テンソル／共変テンソル**
- **ブラ／ケット**
- **実空間／逆空間**
- **示量変数／示強変数**

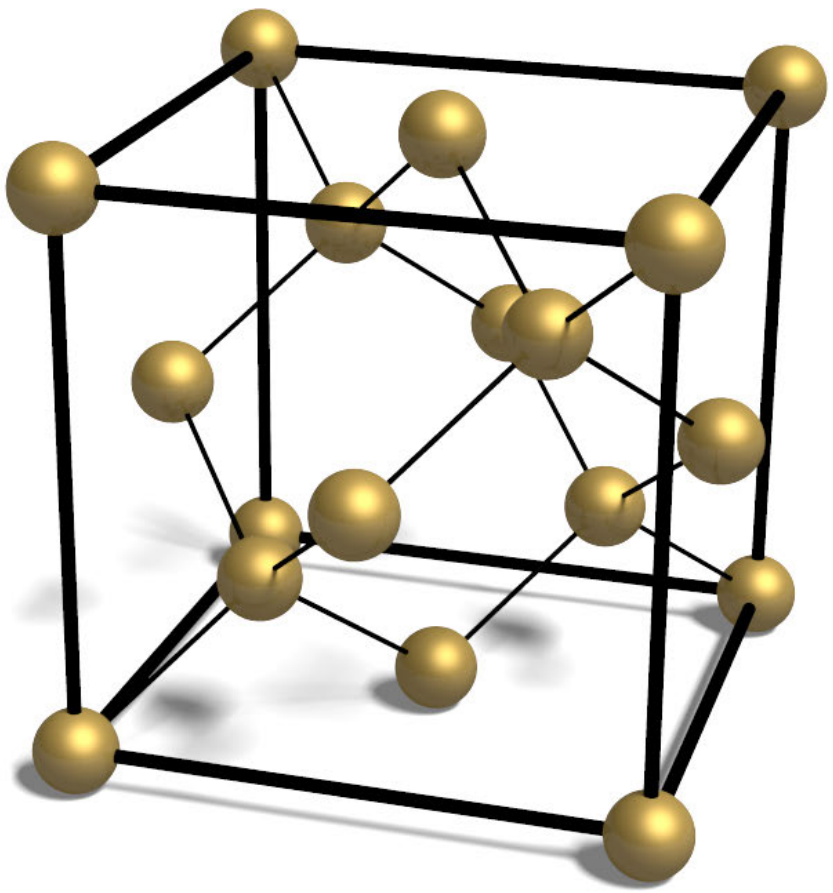
双対ベクトル空間



逆もまた真なり

実空間

逆空間



ダイヤモンド構造

FT

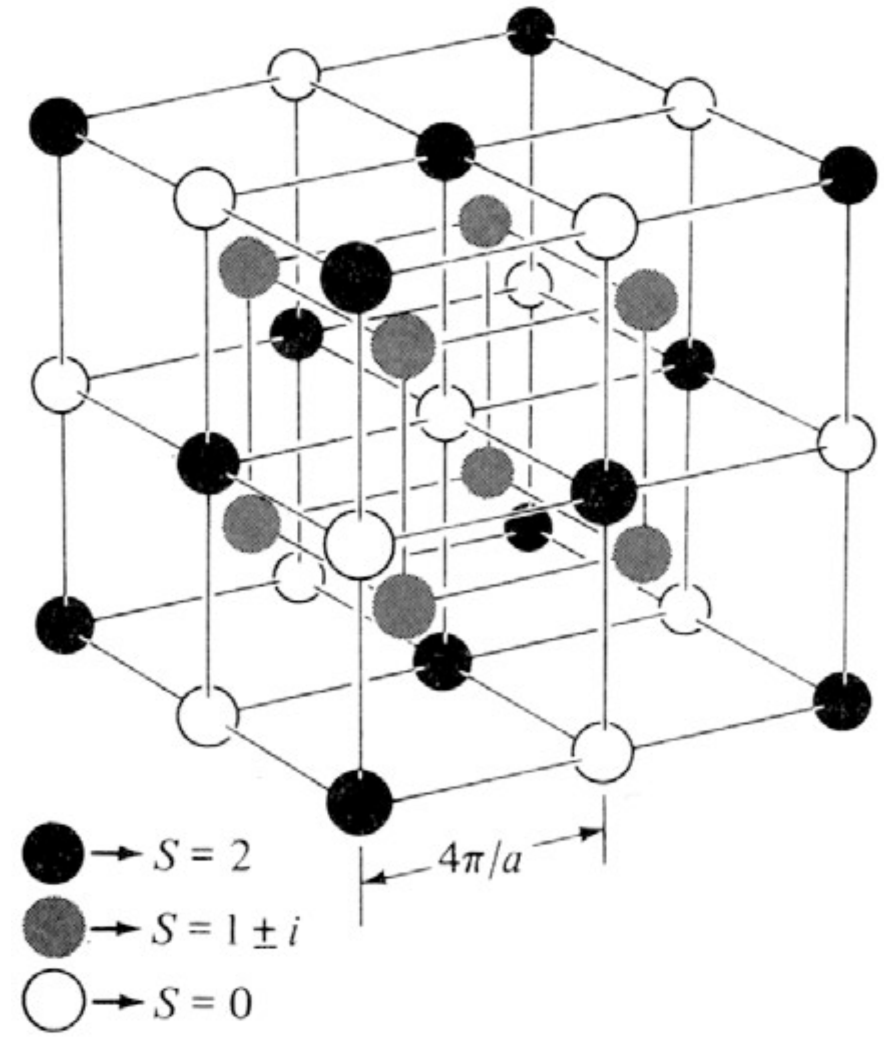


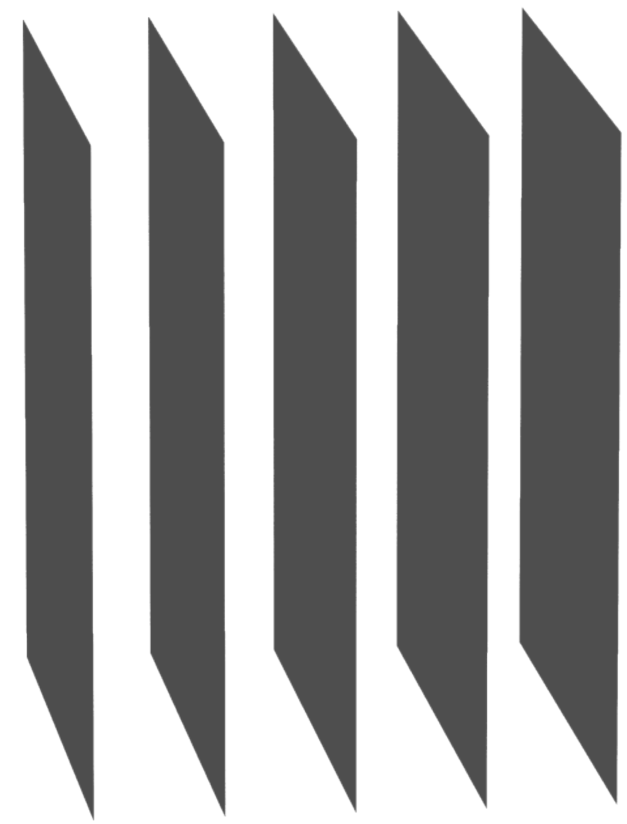
図 4.32　ダイヤモンド構造の逆空間 [3]。

fcc の単位胞に
原子 2 つ

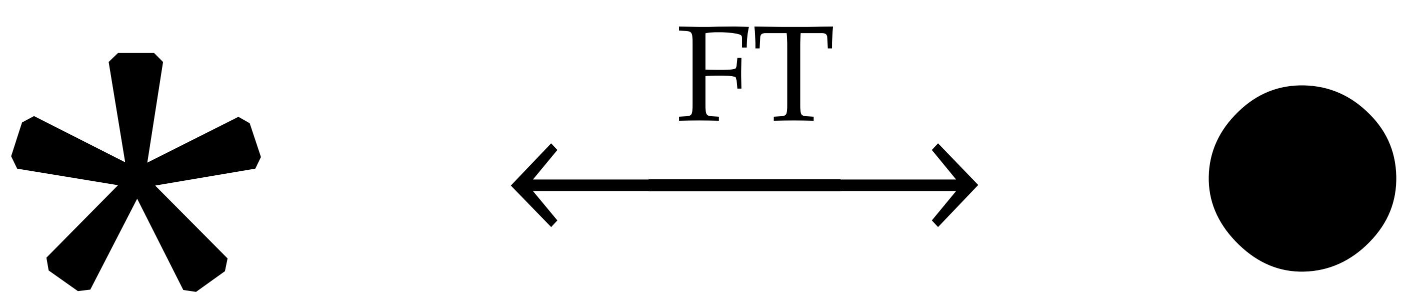
bcc の格子点の
強度が波打つ

まとめ

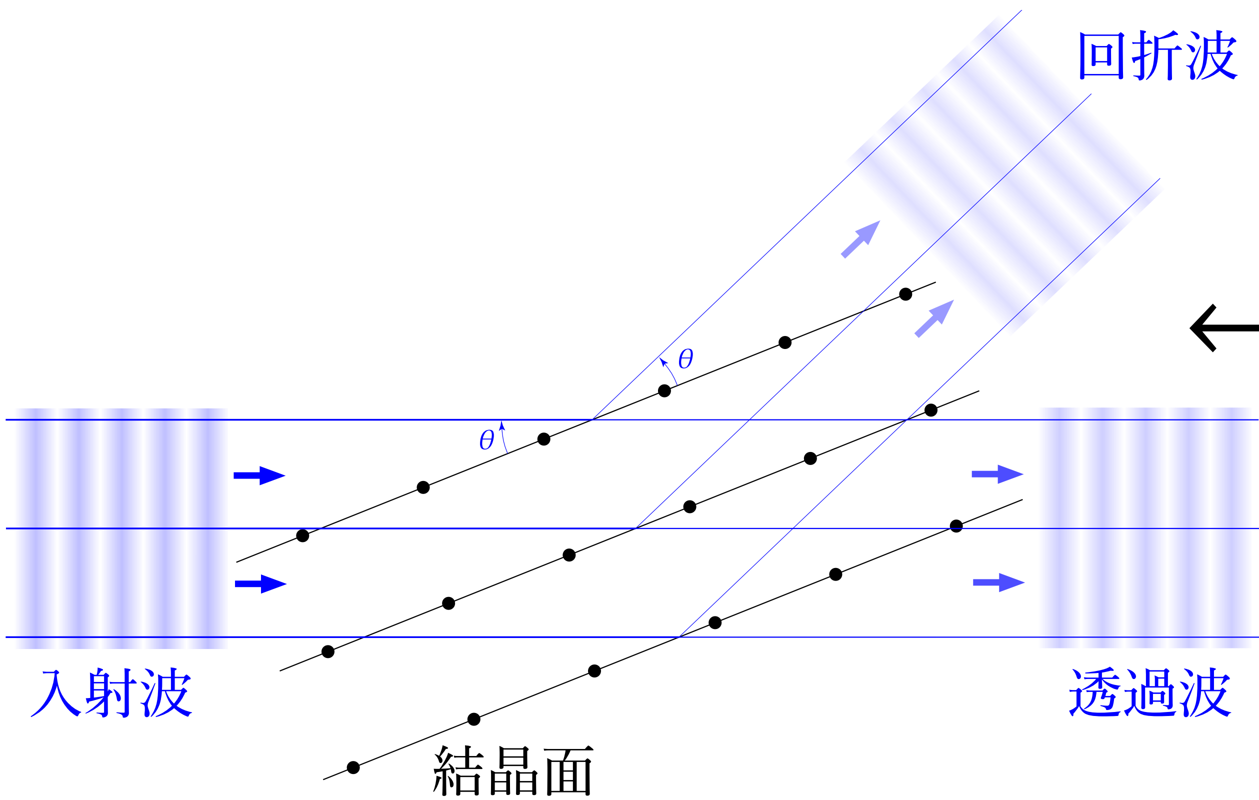
~~ 逆空間 ~~



実空間の結晶面の正体は、
逆格子ベクトル列



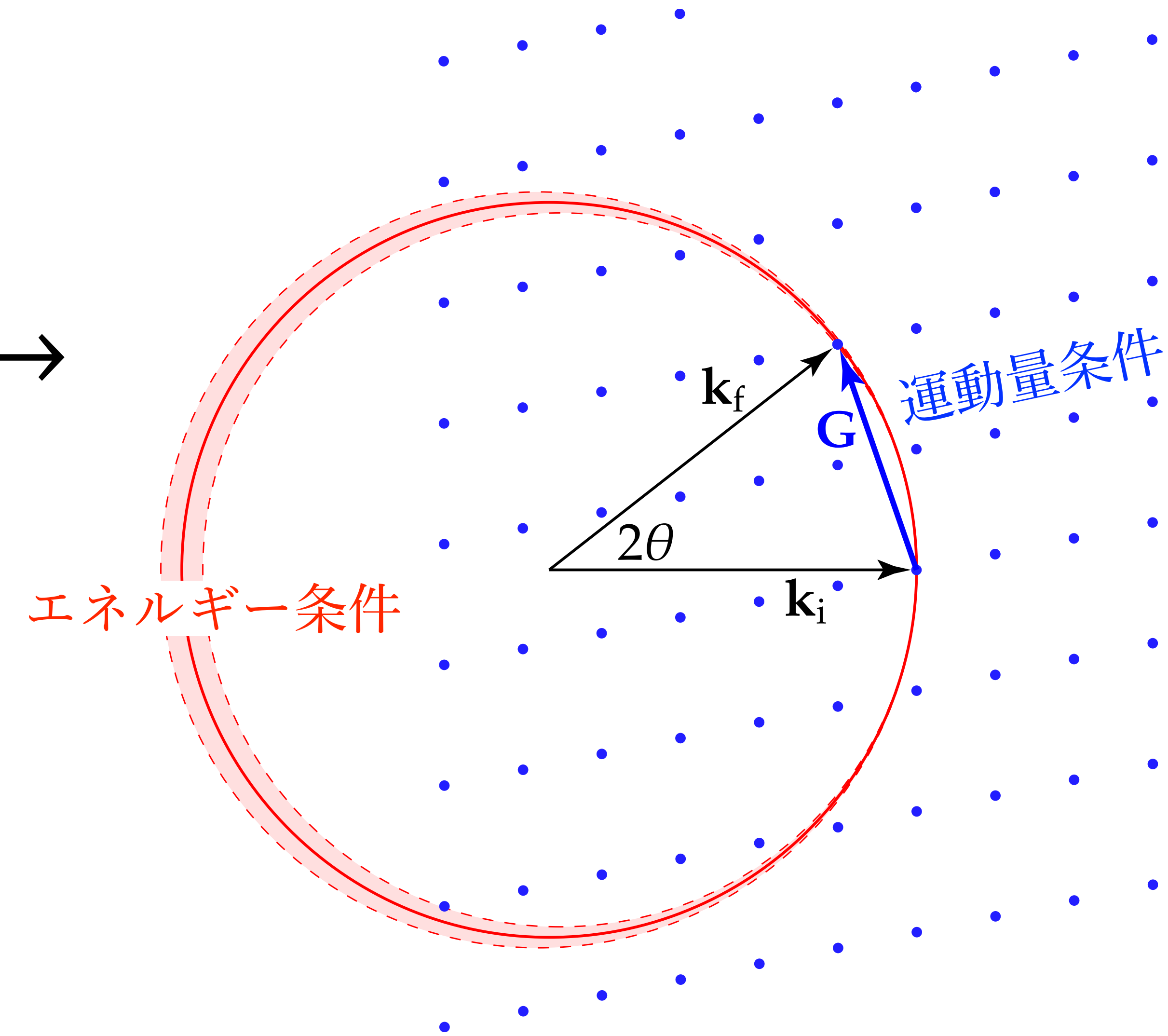
回折のしくみ



ブラッグ条件

$$2d\sin\theta = n\lambda$$

FT



$$\mathbf{k}_\mathrm{f} = \mathbf{k}_\mathrm{i} + \mathbf{G}$$ 運動量

$$|\mathbf{k}_\mathrm{f}| = |\mathbf{k}_\mathrm{i}|$$ エネルギー

逆空間の壁

なぜ、ブラッグ散乱は、
抵抗実験で
検出されないのか？

次回

食い違い

第7講　周期場中の電子

次回

逆空間に召喚

第7講　周期場中の電子

次回

新しい保存則

第7講　周期場中の電子