8223036　栗山淳

# 逆空間と実空間

$\mathbf{K}$を波動ベクトルとし，$\mathbf{k_I}$を入射ビーム，$\mathbf{k_D}$を回折ビームとすると，弾性散乱であるため以下の式が成り立つ

$$|\mathbf{k_I}| = |\mathbf{k_D}| = \frac{1}{\lambda} = |\mathbf{k}|$$

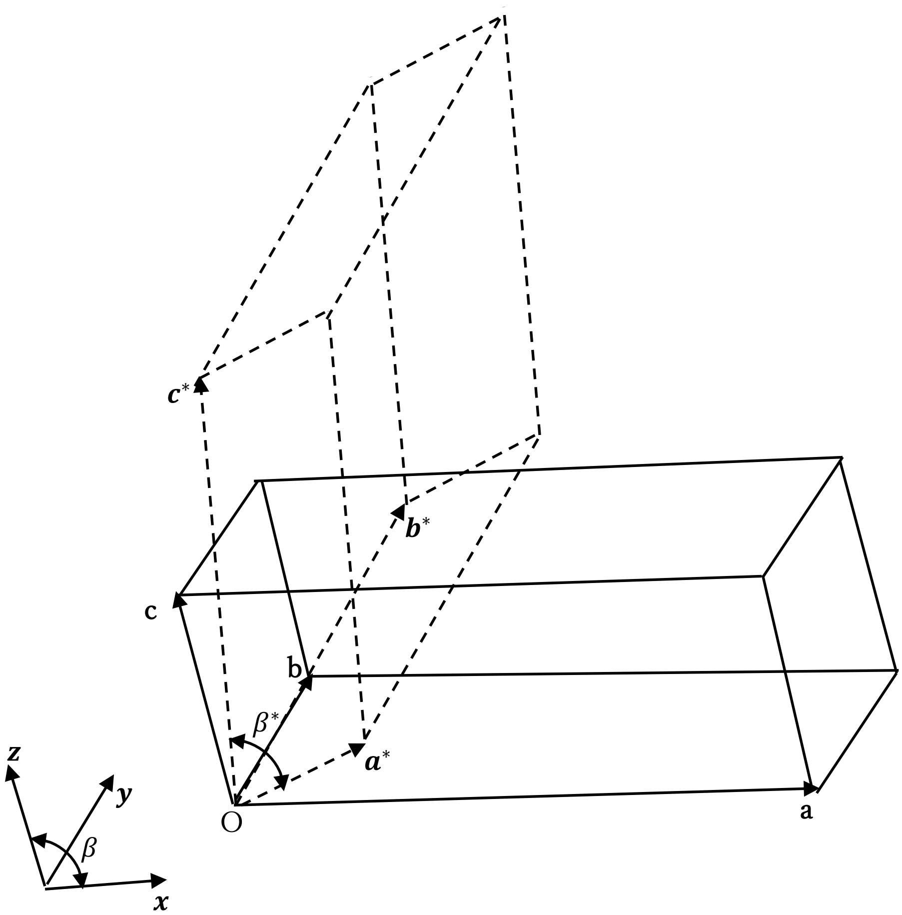
回折ビームがブラック条件を参照した場合には以下のような式が成り立つ

$$|\boldsymbol{K_B}| = \frac{1}{d}$$

$$|\mathbf{K_B}| = \mathrm{g}$$

これらの式より$\mathbf{K}$とgの両方が同じ単位(例，長さ$^{-1}$)を持っていることが分かる。

実空間に単位セルがあると想像すると，単位セルの中の点は原子として見ることができる。
しかし，$\mathbf{K}$とgの目を全て見ると逆空間内の単位セルまたは格子内に見られる点は実際には特定の平面セットを表す。
これらの例の１つを下の図に表した。この図では実線が実空間の単位セルを表し，破線が逆空間の単位セルを表している。



8223036　栗山淳

逆格子を数学的に記述するために実空間と逆空間で見えるすべてを比較すると次のようになる。

まず，実空間のベクトルを見てみる。ベクトルは次のように書くことができる。このとき$n_1, n_2, n_3$はベクトルの大きさであり，$\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}$は実空間の方向を表している。

$$n_1\boldsymbol{x} + n_2\boldsymbol{y} + n_3\boldsymbol{z}$$

次に逆空間のベクトルを見てみる。逆空間のベクトルは次のように書くことができる。この時$n_1^*, n_2^*, n_3^*$は逆空間のベクトルの大きさであり，$\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{y}^*, \boldsymbol{z}^*$は逆空間での方向を表している。

$$n_1^*\boldsymbol{x}^* + n_2^*\boldsymbol{y}^* + n_3^*\boldsymbol{z}^*$$

逆空間と実空間という関係より次のようなベクトルの大きさでは次のような関係式が導き出せる

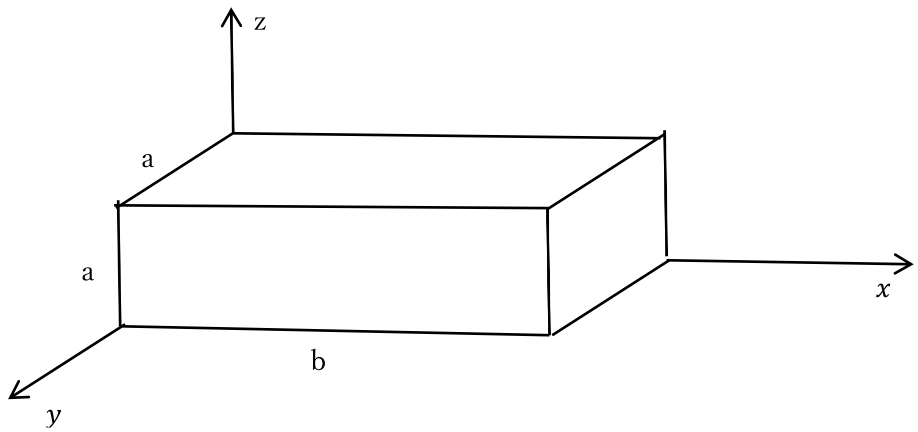
$$n_1^* = \frac{1}{n_1} \qquad n_2^* = \frac{1}{n_2} \qquad n_3^* = \frac{1}{n_3}$$

また方向でも逆空間と実空間という関係より$\boldsymbol{x}^*$は実空間の$\boldsymbol{y}$と$\boldsymbol{z}$によって定義される平面に垂直になるため，$\boldsymbol{x}^*$と$\boldsymbol{y}$の内積そして$\boldsymbol{x}^*$と$\boldsymbol{z}$の内積はそれぞれ 0 となる。$\boldsymbol{y}^*$と$\boldsymbol{z}^*$でも同じことが成り立つので次のような関係式が成り立つ。

$$\boldsymbol{x}^* \cdot \boldsymbol{y} = 0 \qquad \boldsymbol{y}^* \cdot \boldsymbol{x} = 0 \qquad \boldsymbol{z}^* \cdot \boldsymbol{x} = 0$$
$$\boldsymbol{x}^* \cdot \boldsymbol{z} = 0 \qquad \boldsymbol{y}^* \cdot \boldsymbol{z} = 0 \qquad \boldsymbol{z}^* \cdot \boldsymbol{y} = 0$$

逆空間は座標系から独立しているため，座標系は互いに 90 度離れて直行する場合もあれば，直行しない場合もある。

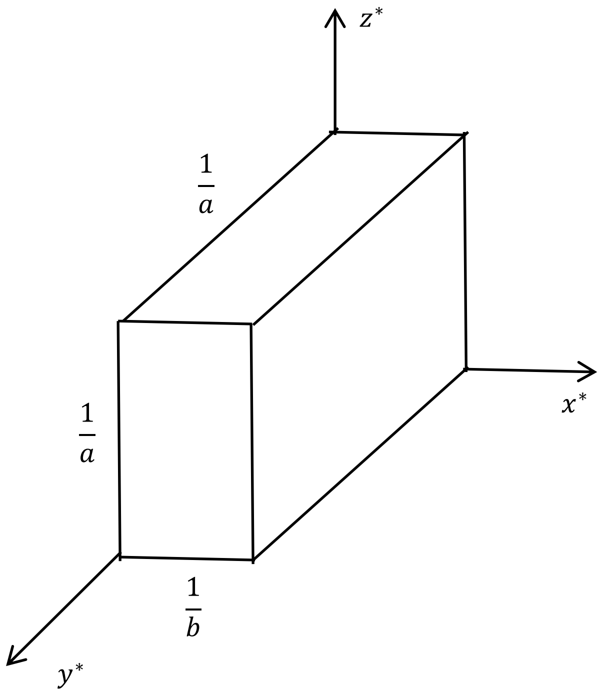
実空間の正方晶格子では$x$，$y$，$z$軸が互いに 90 度の角度を持つ正方晶格子を示す。短い辺の長さは$a$,長い辺の長さは$b$である。図にすると以下のようになる。




逆格子空間の正方晶格子は実空間での各辺の逆数が逆格子空間での辺の長さとなり，逆格子空間では辺の長さが

8223036　栗山淳

$1/A$ ,$1/A$,$1/B$となっている。実空間の A が B より小さい場合，逆格子空間では$1/A$が$1/B$より長くなる。図にすると以下のようになる。




実空間の格子形成では実空間のユニットセルを繰り返しコピーして格子を形成する。

逆格子空間のユニットセルを繰り返しコピーして格子を形成する。