

固体物理学

anko9801

2023 年 11 月 13 日

目次

1	格子	2
---	----------	---

1 格子

基本単位胞 (primitive unit cell) 単純立方格子

体心立方格子ウィグナーザイツ胞

基本並進ベクトル

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad (1.1)$$

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = f(\mathbf{r}) \quad (1.2)$$

1 次元複素 Fourier 変換を拡張することで

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}_m} A_{\mathbf{G}_m} \exp(i\mathbf{G}_m \cdot \mathbf{r}) \quad (1.3)$$

と書けるとする。周期条件を適用することで

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = \sum_{\mathbf{G}_m} A_{\mathbf{G}_m} \exp(i\mathbf{G}_m \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R}_n)) \quad (1.4)$$

$$= \sum_{\mathbf{G}_m} A_{\mathbf{G}_m} \exp(i\mathbf{G}_m \cdot \mathbf{r}) \exp(i\mathbf{G}_m \cdot \mathbf{R}_n) \quad (1.5)$$

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}_m} A_{\mathbf{G}_m} \exp(i\mathbf{G}_m \cdot \mathbf{r}) \quad (1.6)$$

より $\mathbf{G}_m \cdot \mathbf{R}_n = 2\pi N$ となるから

$$\mathbf{G}_m = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3 \quad (1.7)$$

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (1.8)$$