第３章　逆格子

3.1～3.2　逆格子空間、逆格子ベクトル

- **波数ベクトル・逆格子を用いる理由**
- **逆格子の導入　（１次元）**
- **逆格子の導入　（３次元）**
- **立方格子における逆格子**
  ・単純立方格子、面心立方格子
- **ブリュアン・ゾーン**

ここまで理解する

3.3　結晶による回折

波数ベクトル・逆格子を用いる理由

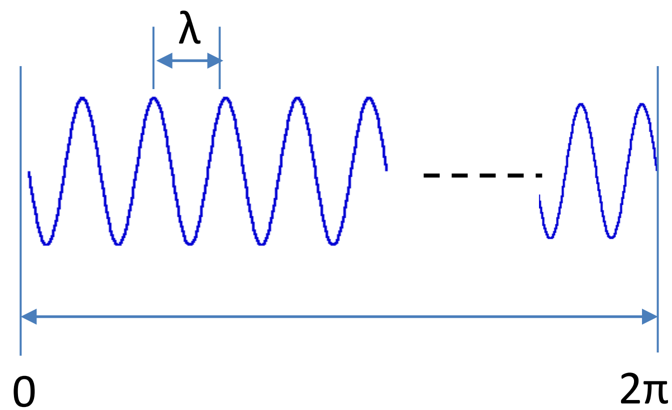
逆格子空間 → k (波数) 空間とも言う

✓ **そもそも k とは？**

$$\boxed{\text{波数 } k = 2\pi / \lambda}$$

2π 単位長さあたりの波の数

（長さの逆の次元を持つ）

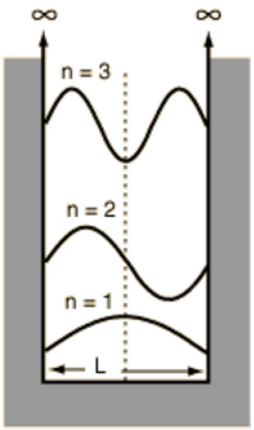


✓ **どういう場面で k を見かけるか？**

例えば..

- **電磁波のエネルギー：** $E = h\nu = \hbar c k$ **運動量：** $p = \hbar k$

- **量子力学： 無限の高さのポテンシャル障壁に閉じこまれている粒子のエネルギー** $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}$

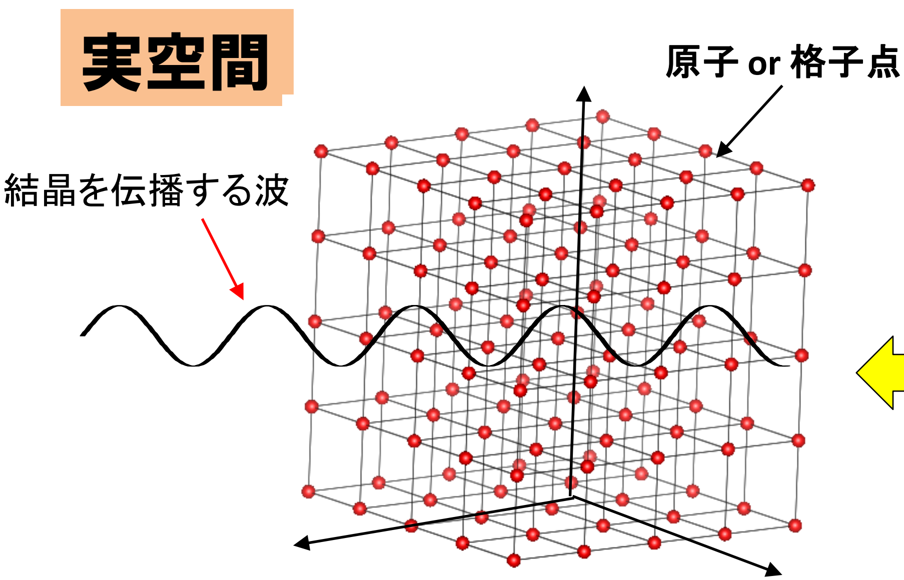


波数 *k* は、結晶内に存在、もしくは進行する波の状態（エネルギー、進行方向、波長など）を特徴づける物理量

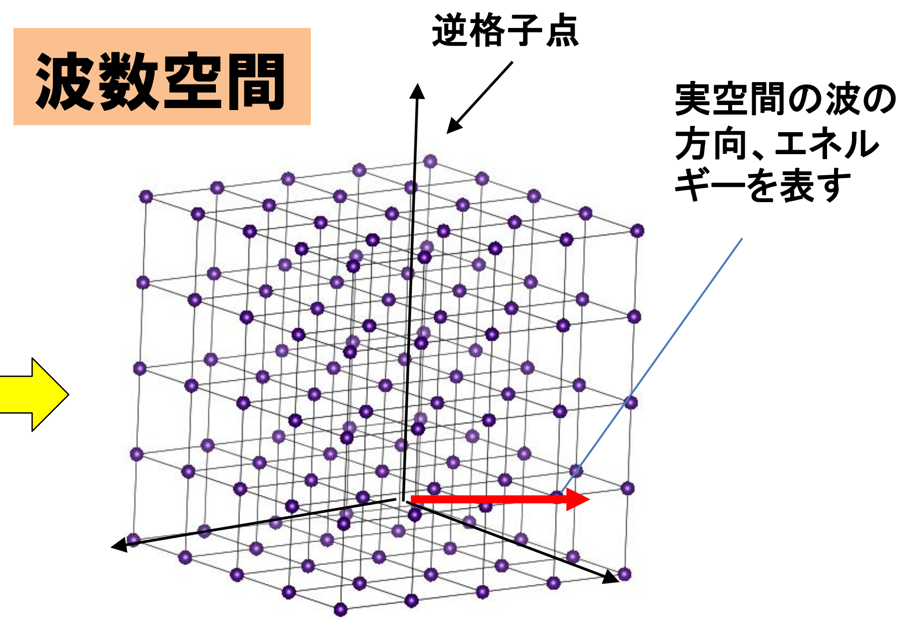
波数ベクトル・逆格子を用いる理由

- **結晶内に存在あるいは進行する波**
  - 回折に寄与する波: 10^3～10^5の原子層を進行
  - 格子振動による波： 10～100 nm程度

⇒ 結晶内の広い範囲にまたがっている



結晶（格子）



「逆格子」が形成

格子振動、波の回折など、実空間では広範囲で起こる物理現象に関し、
k空間では逆格子上に、その状態を狭い範囲内で表現できる

逆格子の導入（1次元）

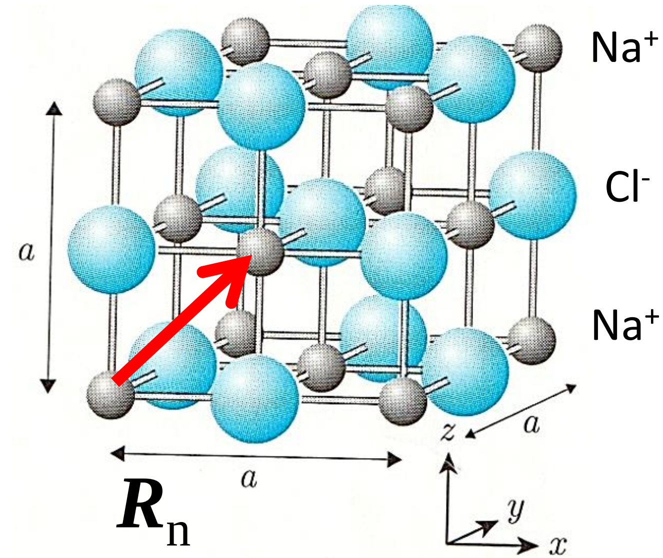
- 結晶内では、電荷密度、電子数密度、磁気モーメント密度、原子核密度などが、三次元空間的に周期関数となっている

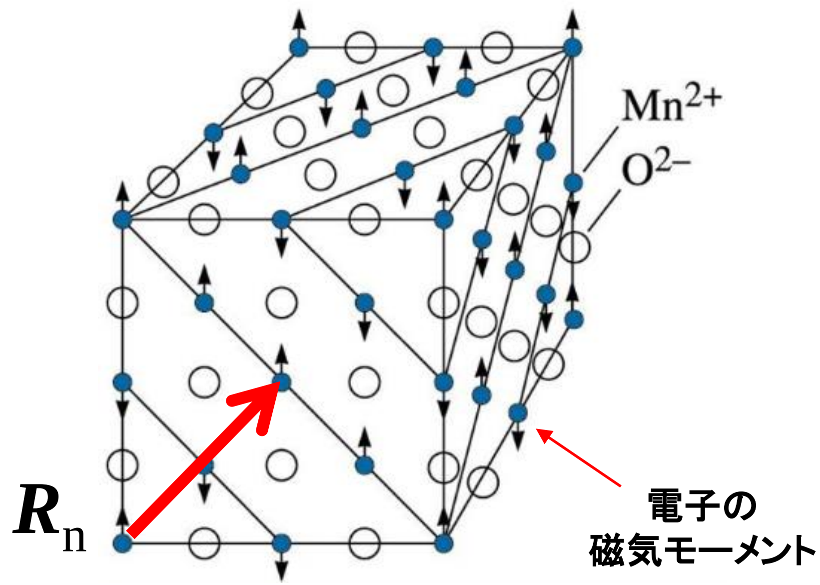
- 結晶では $f(\mathbf{r}+\boldsymbol{R}\mathrm{n})=f(\mathbf{r})$ の並進対称性を持つ

$$\boldsymbol{R}_\mathrm{n} = n_1\boldsymbol{a}_\mathbf{1} + n_2\boldsymbol{a}_\mathbf{2} + n_3\boldsymbol{a}_\mathbf{3}$$

$(n_1 , n_2 , n_3$：整数$)$

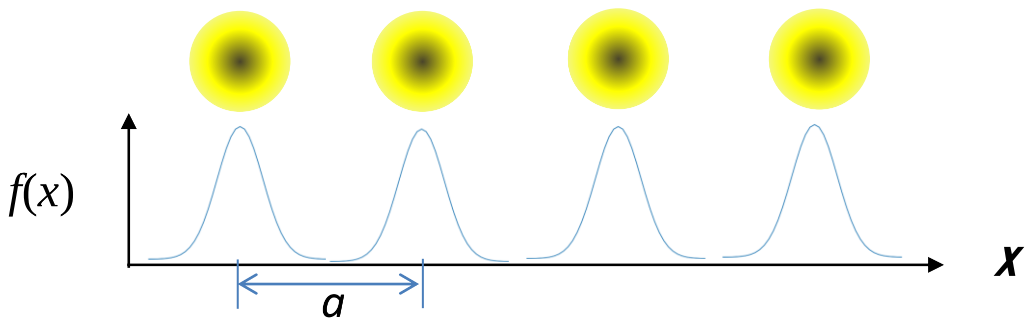
f (r) の周期性をフーリエ解析の知識を用いて取り扱う





逆格子の導入（1次元）

● 一次元の特性 $f(x)$ のフーリエ級数



どんな波数 k (=2πm/a) の波がどの位含まれているかを表す係数

波数 k (=2πm/a)の波の成分

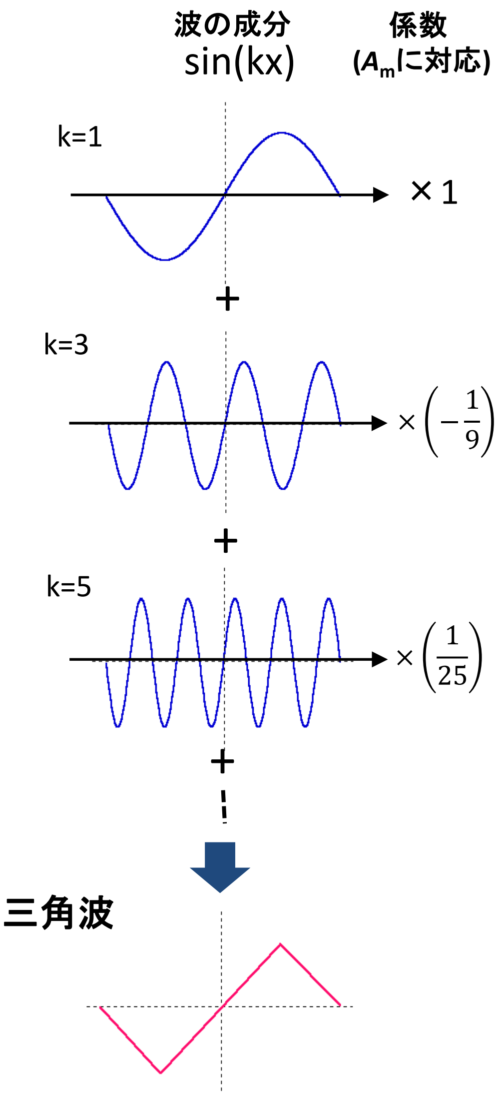
$f(x)$ の複素フーリエ級数

$$f(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} A_m \exp\left(i\frac{2\pi}{a}mx\right)$$

フーリエ係数

$$A_m = \frac{1}{a}\int_0^a f(x)\exp\left(-i\frac{2\pi}{a}mx\right)dx$$

復習 フーリエ級数の例

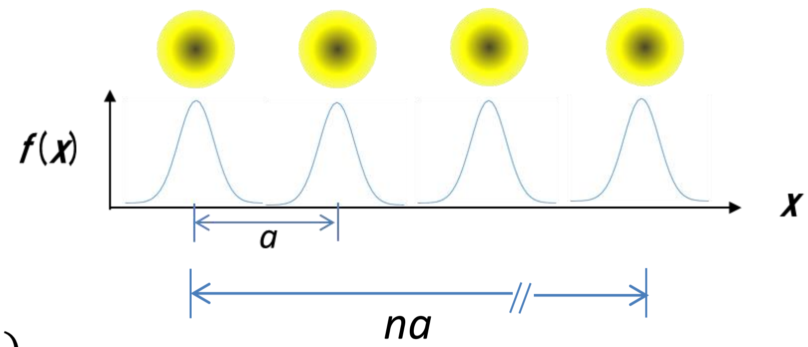


逆格子の導入（1次元）

結晶では、 $f(x+na) = f(x)$ **が成り立つ**

$$f(x+na) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} A_m \exp\left\{i\frac{2\pi}{a}m(x+na)\right\}$$

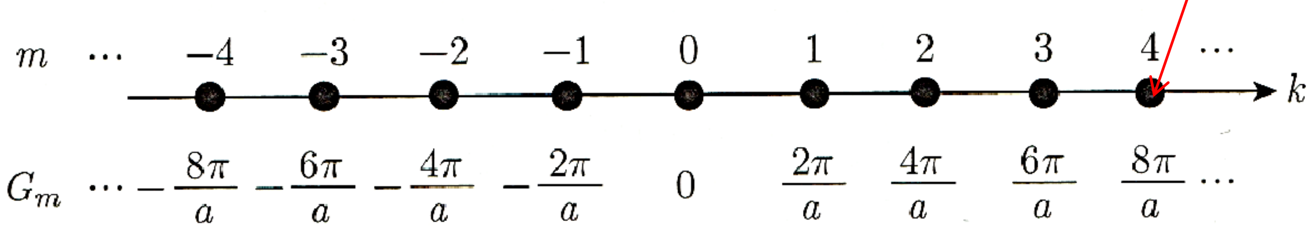
$$= \sum_{m=-\infty}^{\infty} A_m \exp\left(i\frac{2\pi}{a}mx\right)\exp(i2\pi mn)$$



$f(x+na) = f(x)$ **を満足するには、**
$\exp(i2\pi mn) = 1$ **である必要がある**

→ *m* **が整数以外は許されない**
(*m* =0, ±1, ±2, ±3, ...**の時のみ意味を持つ**)

$k = G_m = \frac{2\pi}{a}m$ **とすると、格子の周期性は、波数空間では、点（逆格子点）として表される**



逆格子点がつくる格子

「逆格子」

1/長さ の次元を持つ

逆格子の導入（３次元）

三次元への拡張

整数の組について和をとる

f (r) の複素フーリエ級数

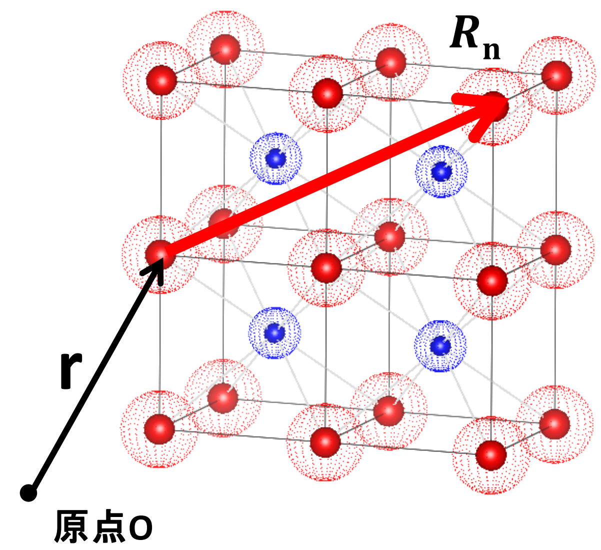
$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\boldsymbol{G_m}} A_{\mathrm{Gm}} \exp(i\boldsymbol{G_m} \cdot \boldsymbol{r})$$

フーリエ係数

$$A_{\mathrm{Gm}} = \frac{1}{V_c} \int_{cell} f(\mathbf{r}) \exp(-i\boldsymbol{G_m} \cdot \boldsymbol{r})\, dV$$

単位胞の体積

単位胞についての積分



結晶は並進対称性を持つので、$\boldsymbol{R}_n$ の並進操作後の $f(\mathbf{r}+\boldsymbol{R}_n)$ は $f(\mathbf{r})$ と等しい

$$f(\mathbf{r}+\boldsymbol{R}_n) = \sum_{\boldsymbol{G_m}} A_{\mathrm{G}} \exp\{i\boldsymbol{G_m}\cdot(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}_n)\} = \sum_{\boldsymbol{G_m}} A_{\mathrm{G}} \exp(i\boldsymbol{G_m}\cdot\boldsymbol{r}) \exp(i\boldsymbol{G_m}\cdot\boldsymbol{R}_n)$$

$f(\mathbf{r}+\boldsymbol{R}_n) = f(\mathbf{r})$ を満足するには、$\exp(i\boldsymbol{G_m}\cdot\boldsymbol{R}_n) = 1$ である必要がある

※ $\boldsymbol{G_m}\cdot\boldsymbol{R}_n = n_1\boldsymbol{G_m}\cdot\boldsymbol{a_1} + n_2\boldsymbol{G_m}\cdot\boldsymbol{a_2} + n_3\boldsymbol{G_m}\cdot\boldsymbol{a_3} = 2\pi N$（ Nは任意の整数）

逆格子の導入（３次元）

$\exp(i\boldsymbol{G_m}\cdot\boldsymbol{R}_n)=1$ **を満たすようなベクトル** G_m **として、以下の逆格子ベクトルを導入**

$$\boldsymbol{G_m}=m_1\mathbf{b_1}+m_2\mathbf{b_2}+m_3\mathbf{b_3}$$

(m_1 , m_2 , m_3 **は整数)**

$\mathbf{b_1}$, $\mathbf{b_2}$, $\mathbf{b_3}$ ： **逆格子の基本ベクトル**

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

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

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

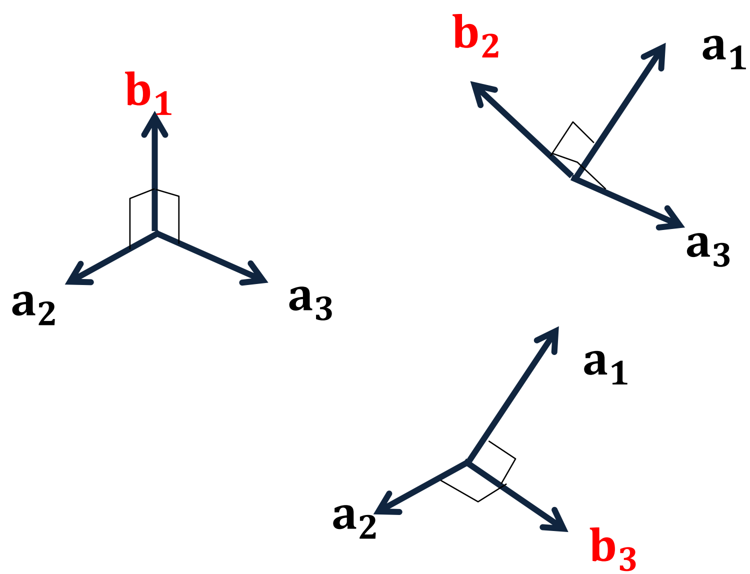
$$\mathbf{b}_i\cdot\boldsymbol{a}_j=2\pi\delta_{ij}$$

クロネッカーのデルタ

$i=j$ **のとき、**2π

$i\neq j$ **のとき、**0

$\mathbf{b_1}$, $\mathbf{b_2}$, $\mathbf{b_3}$は、結晶格子の2つの軸ベクトルと直交



逆格子の導入（３次元）

一応、本当に $\exp(i\boldsymbol{G_m}\cdot\boldsymbol{R}_n)=1$ となるか確かめてみる

$$\boldsymbol{R_n}=n_1\boldsymbol{a_1}+n_2\boldsymbol{a_2}+n_3\boldsymbol{a_3}$$

$$\boldsymbol{G_m}=m_1\mathbf{b_1}+m_2\mathbf{b_2}+m_3\mathbf{b_3}$$ を代入すると

$$\exp(i\boldsymbol{G_m}\cdot\boldsymbol{R}_n)=\exp[i(m_1\mathbf{b_1}+m_2\mathbf{b_2}+m_3\mathbf{b_3})(n_1\boldsymbol{a_1}+n_2\boldsymbol{a_2}+n_3\boldsymbol{a_3})]$$

$$=\exp[2\pi i(m_1n_1+m_2n_2+m_3n_3)]$$

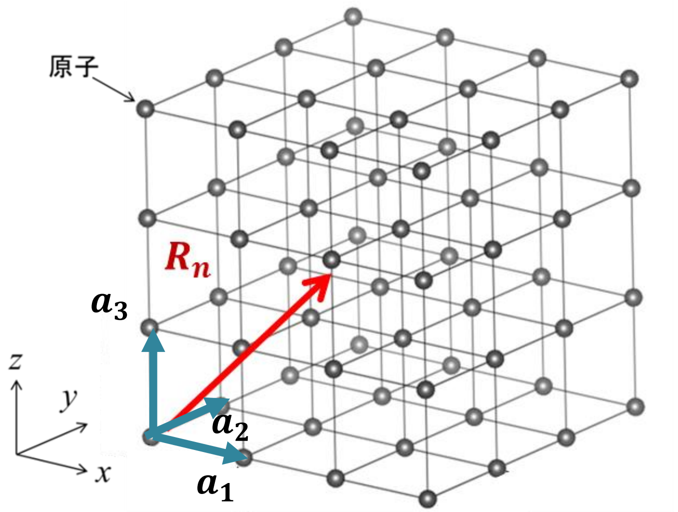
m_1，m_2，m_3，n_1，n_2，n_3 は整数であるので、 常に $e^{i\boldsymbol{G_m}\cdot\boldsymbol{R}_n}=1$ を満足

逆格子ベクトル G_{m} を導入することにより、$f(\mathbf{r}+\boldsymbol{R}_n)=f(\mathbf{r})$ が成り立つ

格子と逆格子の対応（まとめ）

原子が周期的配列を持つ場合、逆格子点が周期的に配列した逆格子が波数空間に形成

格子（実空間）

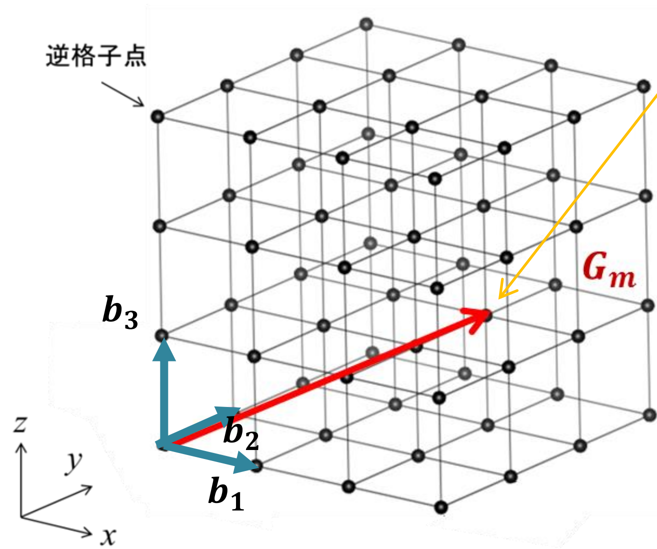


$$R_n = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$$

（ n_1 ， n_2 , n_3 は整数)

逆格子（波数空間）

各逆格子点は、G_m の終点で与えられる



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

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

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

$$G_m = m_1 \mathbf{b_1} + m_2 \mathbf{b_2} + m_3 \mathbf{b_3}$$

（ m_1 ， m_2 , m_3 は整数)

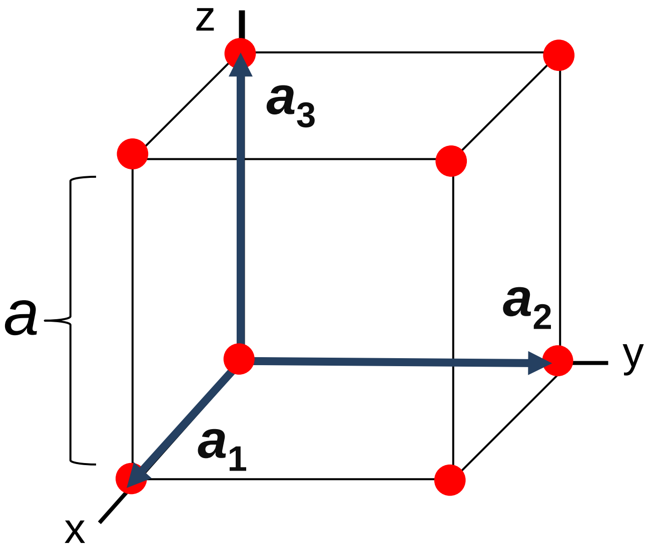
周期な原子配列は、種々の逆格子（波数）ベクトルG_mで表される波の重ね合わせとして、複素フーリエ級数展開できる

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{G_m} A_{Gm} \exp(i G_m \cdot r)$$

立方格子の逆格子

- 単純立方格子
- 面心立方格子
- 体心立方格子

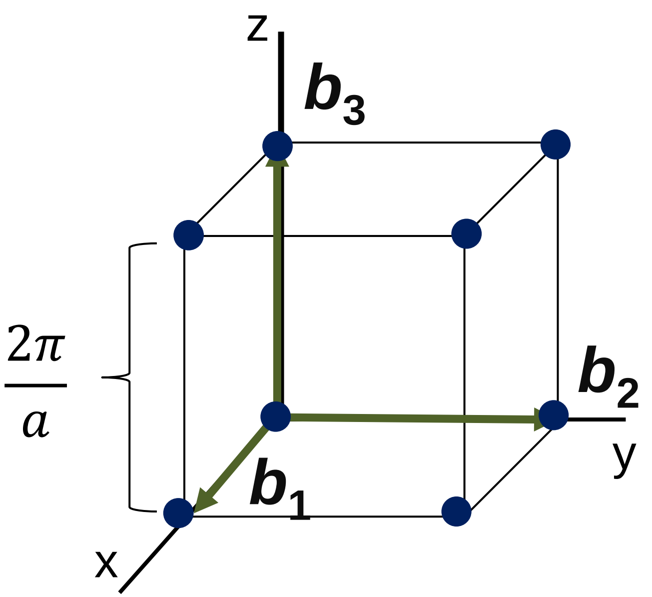
単純立方格子の逆格子



基本並進ベクトル

$$\boldsymbol{a}_1 = a\,\boldsymbol{e}_x$$
$$\boldsymbol{a}_2 = a\,\boldsymbol{e}_y$$
$$\boldsymbol{a}_3 = a\,\boldsymbol{e}_z$$

$$\left\{\begin{aligned} \boldsymbol{b}_1 &= 2\pi \frac{\overbrace{\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3}^{a^2\boldsymbol{e}_x}}{\underbrace{\boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)}_{\text{体積}\ a^3}} \\ \boldsymbol{b}_2 &= 2\pi \frac{\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1}{\boldsymbol{a}_2 \cdot (\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1)} \\ \boldsymbol{b}_3 &= 2\pi \frac{\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{a}_3 \cdot (\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2)} \end{aligned}\right.$$



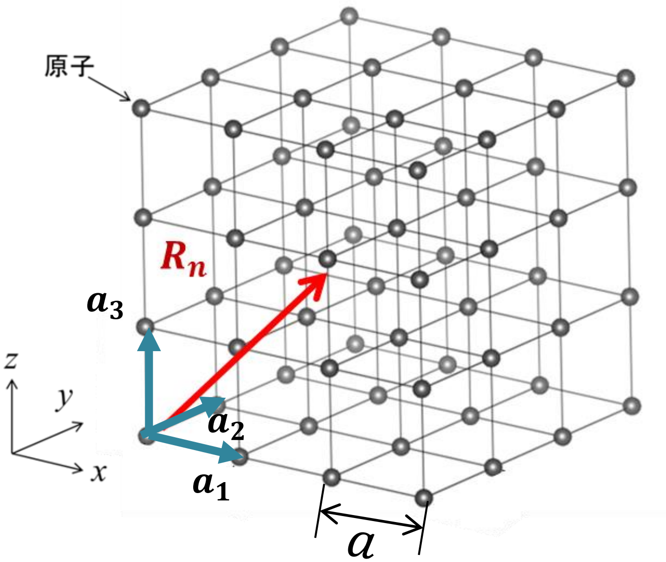
逆格子の基本ベクトル

$$\boldsymbol{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\,\boldsymbol{e}_x$$
$$\boldsymbol{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\,\boldsymbol{e}_y$$
$$\boldsymbol{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\,\boldsymbol{e}_z$$

b_1, b_2, b_3 はそれぞれ x, y, z 方向のベクトルで、2π/aの長さを持つ

単純立方格子の逆格子

格子（実空間）

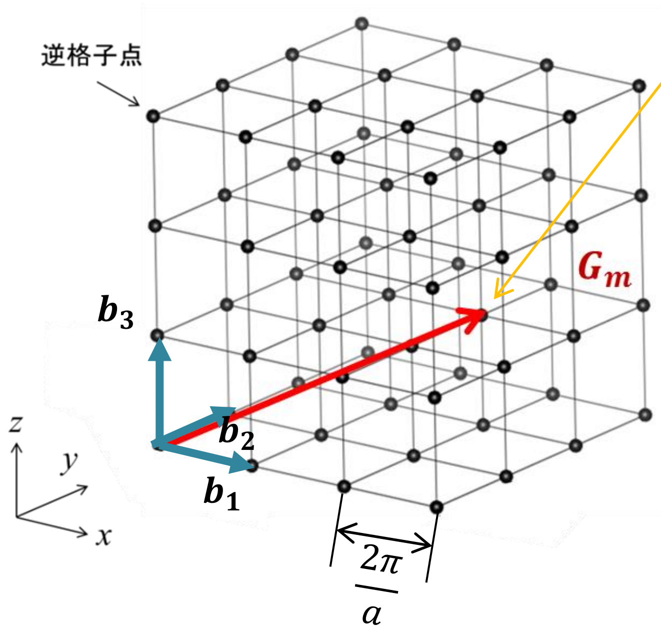


$$R_n = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$$

（ n_1， n_2，n_3 は整数)

逆格子（波数空間）

各逆格子点は、G_m の終点で与えられる



$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} e_x$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} e_y$$

$$\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a} e_z$$

（ m_1， m_2，m_3 は整数)

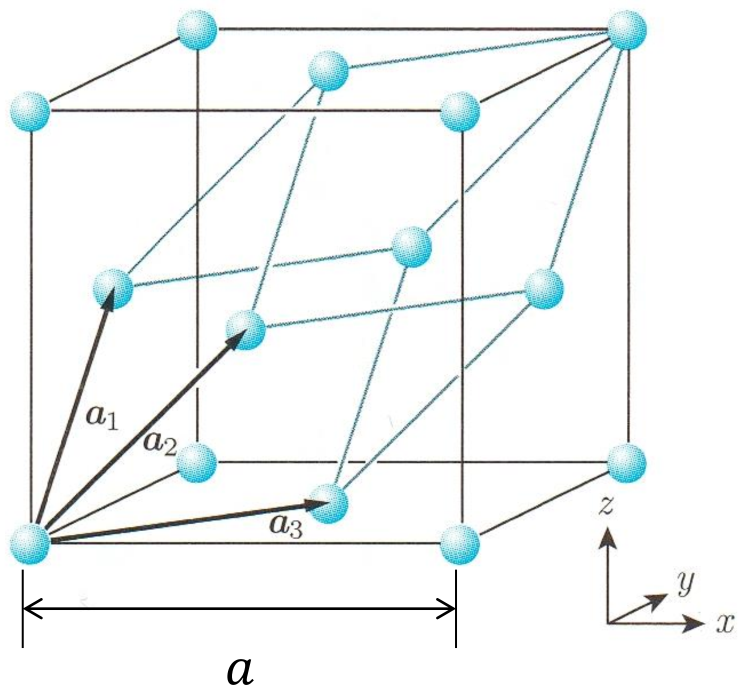
$$G_m = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3$$

$$= \frac{2\pi}{a} m_1 e_x + \frac{2\pi}{a} m_2 e_y + \frac{2\pi}{a} m_3 e_z$$

- ベクトル Gmの終点がつくる格子（逆格子点の集合） が逆格子
- 実空間で単純立方格子の場合、逆格子も単純立方格子

面心立方格子の逆格子

格子
(実空間)



● **基本並進ベクトル**

$$\boldsymbol{a_1} = \frac{a}{2}(\boldsymbol{e_y} + \boldsymbol{e_z})$$

$$\boldsymbol{a_2} = \frac{a}{2}(\boldsymbol{e_x} + \boldsymbol{e_z})$$

$$\boldsymbol{a_3} = \frac{a}{2}(\boldsymbol{e_x} + \boldsymbol{e_y})$$

$$\boldsymbol{b}_1 = 2\pi \frac{\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)}$$

$$\boldsymbol{a_2} \times \boldsymbol{a_3} = (a_{2y}a_{3z} - a_{2z}a_{3y})\boldsymbol{e_x} + (a_{2z}a_{3x} - a_{2x}a_{3z})\boldsymbol{e_y} + (a_{2x}a_{3y} - a_{2y}a_{3x})\boldsymbol{e_z}$$

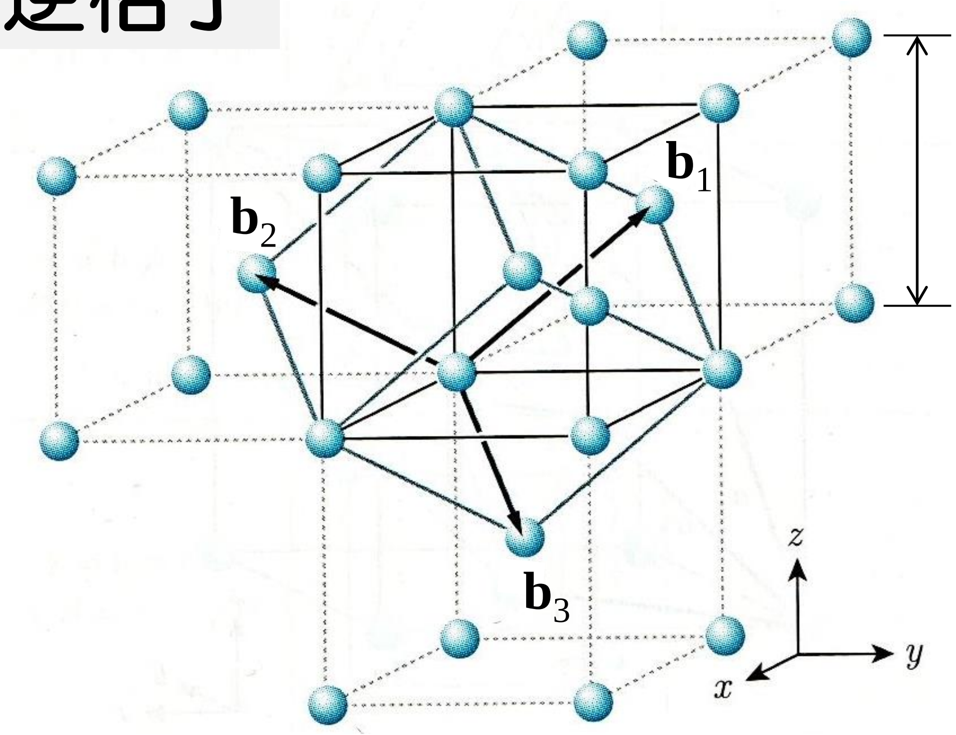
$$= \left(\frac{a}{2}\right)^2 [(0-1)\boldsymbol{e_x} + (1-0)\boldsymbol{e_y} + (1-0)\boldsymbol{e_z}] \quad = \left(\frac{a}{2}\right)^2 (-\boldsymbol{e_x} + \boldsymbol{e_y} + \boldsymbol{e_z})$$

$$\boldsymbol{a_1} \cdot \boldsymbol{a_2} \times \boldsymbol{a_3} = \frac{a}{2}(\boldsymbol{e_y} + \boldsymbol{e_z}) \times \left(\frac{a}{2}\right)^2 (-\boldsymbol{e_x} + \boldsymbol{e_y} + \boldsymbol{e_z}) = \frac{a^3}{4}$$

$$\mathbf{b_1} = \frac{2\pi}{a}(-\boldsymbol{e_x} + \boldsymbol{e_y} + \boldsymbol{e_z})$$

面心立方格子の逆格子

逆格子



● 逆格子の基本ベクトル

$$\mathbf{b_1} = \frac{2\pi}{a}(-\boldsymbol{e}_x + \boldsymbol{e}_y + \boldsymbol{e}_z)$$

$$\mathbf{b_2} = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{e}_x - \boldsymbol{e}_y + \boldsymbol{e}_z)$$

$$\mathbf{b_3} = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{e}_x + \boldsymbol{e}_y - \boldsymbol{e}_z)$$

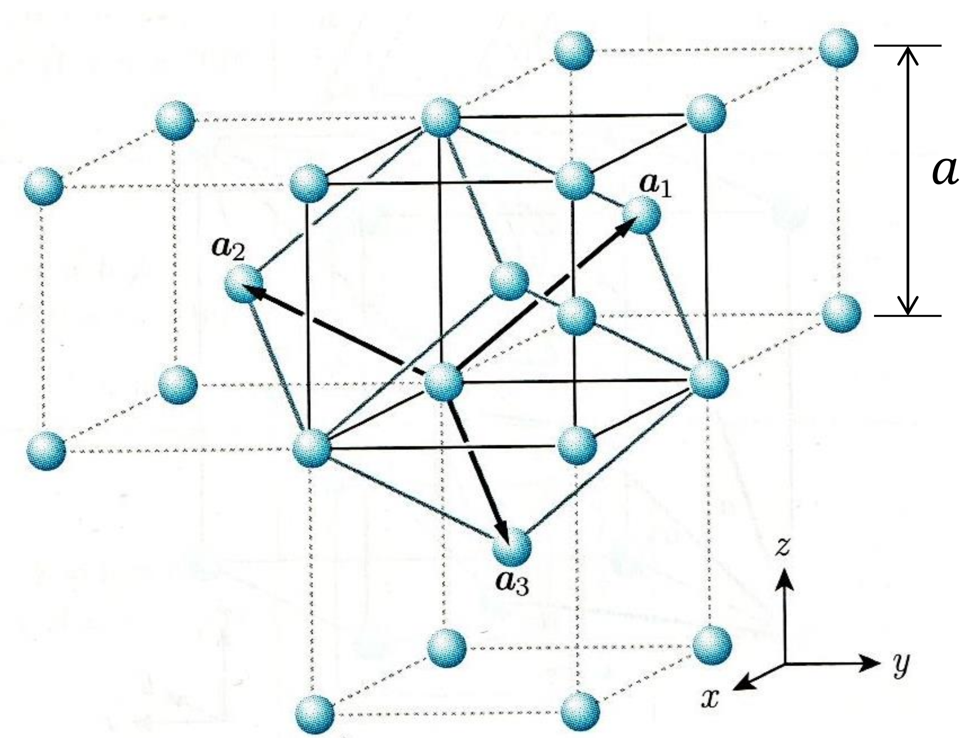
$$\boldsymbol{G_m} = m_1\mathbf{b_1} + m_2\mathbf{b_2} + m_3\mathbf{b_3}$$ （m_1，m_2，m_3 は整数)

$$= \frac{2\pi}{a}m_1(-\boldsymbol{e}_x + \boldsymbol{e}_y + \boldsymbol{e}_z) + \frac{2\pi}{a}m_2(\boldsymbol{e}_x - \boldsymbol{e}_y + \boldsymbol{e}_z) + \frac{2\pi}{a}m_3(\boldsymbol{e}_x + \boldsymbol{e}_y - \boldsymbol{e}_z)$$

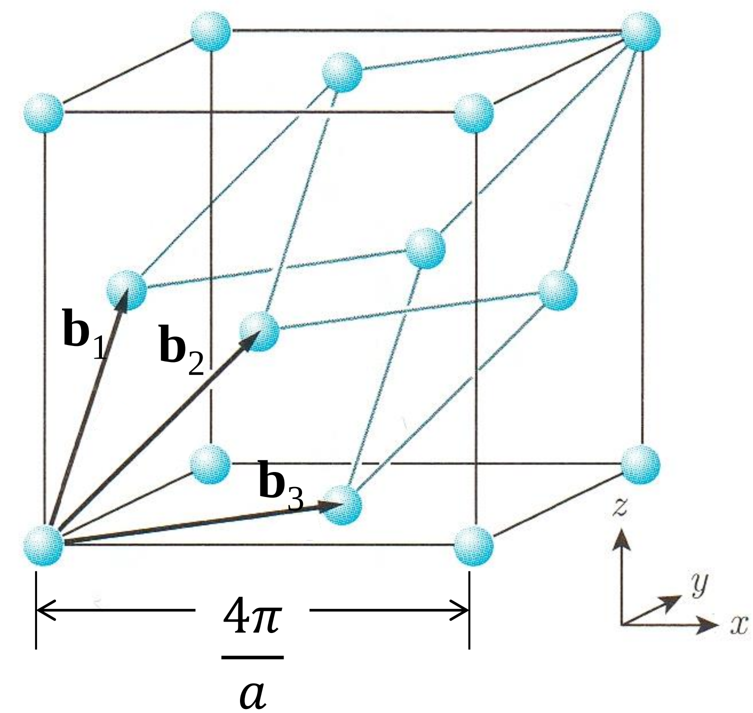
逆格子ベクトル Gmの終点がつくる格子は体心立方格子

体心立方格子の逆格子

実空間



逆格子空間

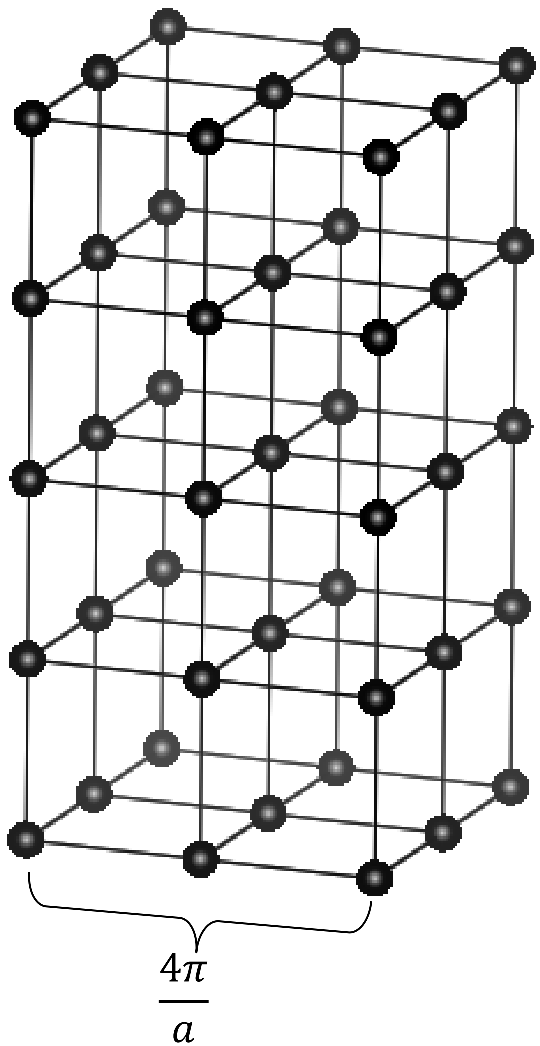


立方体の一辺が a の体心立方格子

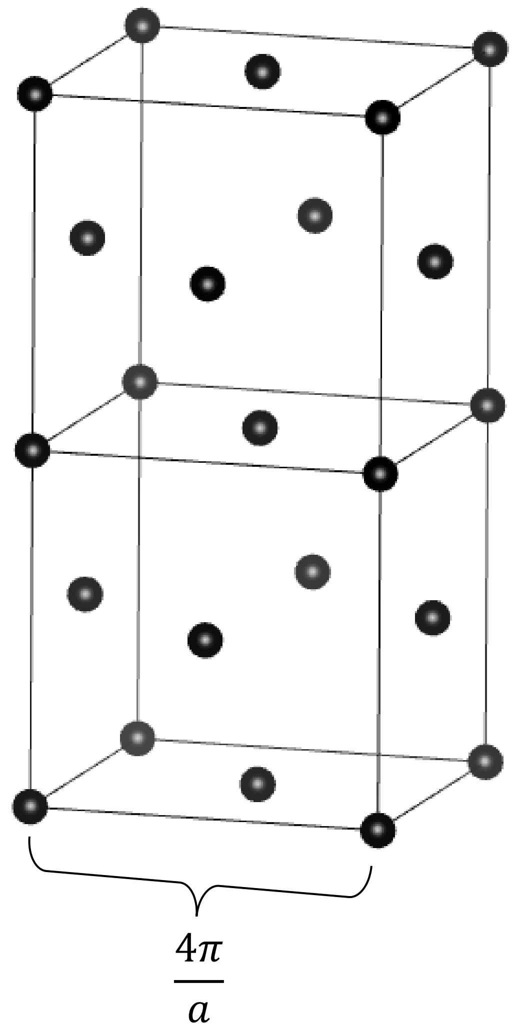
立方体の一辺が $\frac{4\pi}{a}$ の面心立方格子

立方格子の逆格子（まとめ）

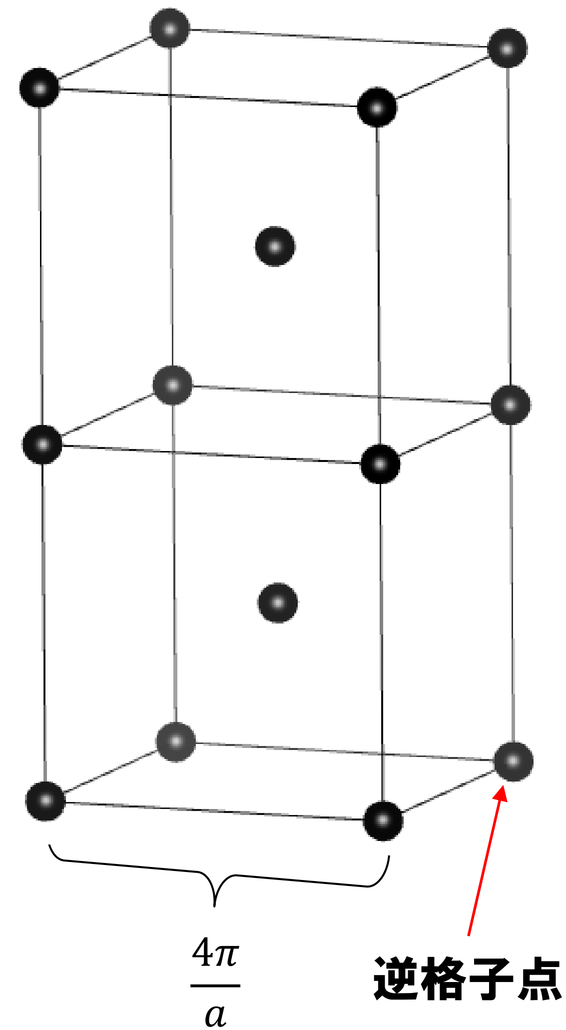
単純立方格子の逆格子



体心立方格子の逆格子



面心立方格子の逆格子



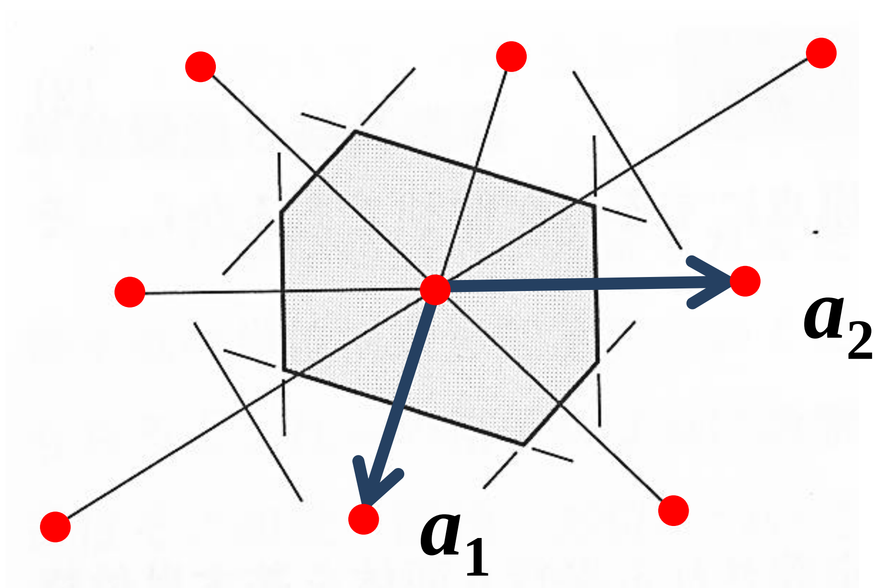
ブリュアン・ゾーン

ブリュアン・ゾーン①

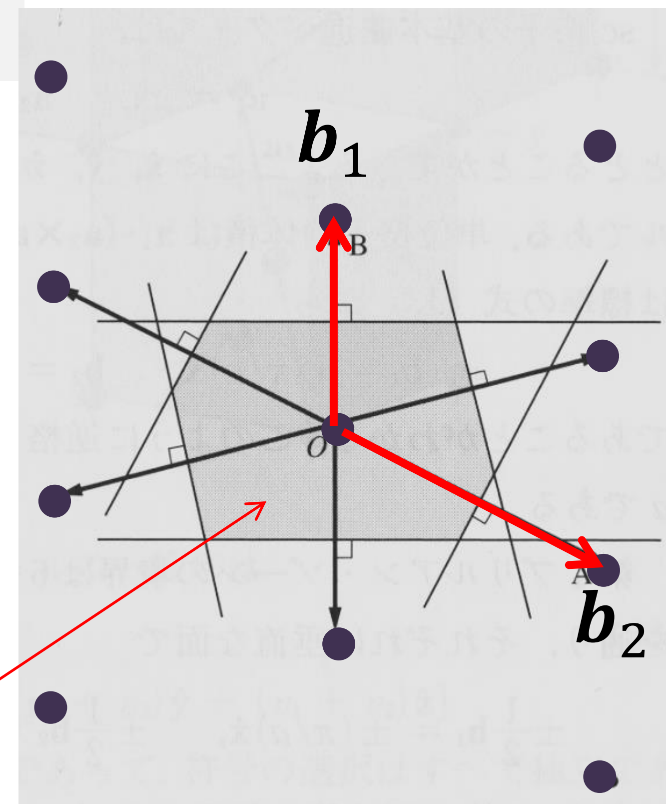
実空間のウィグナーザイツ胞　→　基本単位胞の定義の一つ

逆格子空間のウィグナーザイツ胞　→　ブリュアン・ゾーンと関係

実空間



逆格子空間

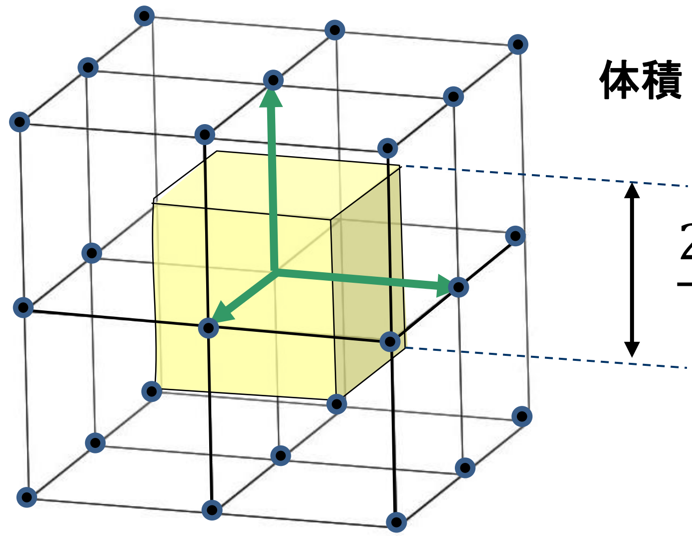


原点(G=0)と各逆格子点を結ぶ線の
垂直二等分面で囲まれる最小体積の領域

→ 第一ブリュアン・ゾーン

ブリュアン・ゾーン②

単純立方格子の
第1ブリュアンゾーン

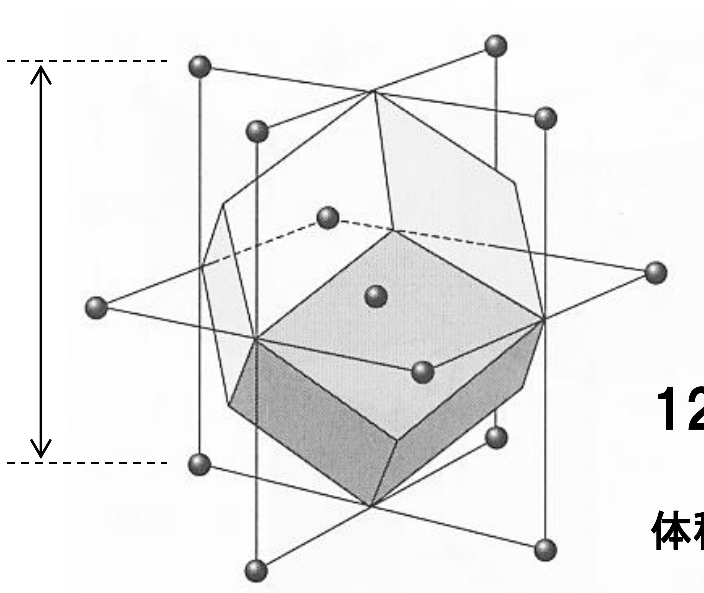


$\dfrac{2\pi}{a}$

体積 $\left(\dfrac{2\pi}{a}\right)^3$

体心立方格子の
第1ブリュアンゾーン

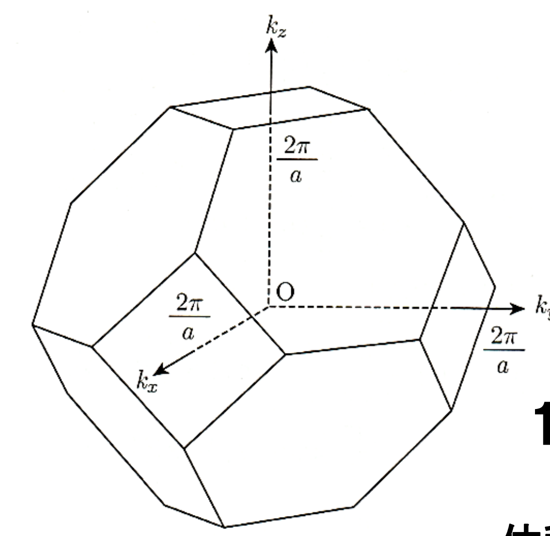
$\dfrac{4\pi}{a}$



12面体

体積 $2\left(\dfrac{2\pi}{a}\right)^3$

面心立方格子の
第1ブリュアンゾーン



14面体

体積 $4\left(\dfrac{2\pi}{a}\right)^3$

課題　Webclassで提出して下さい

締切：
5/28 (金) 17:00

(1) 逆格子の基本ベクトルを与える式(3.19)を用いて六方格子の逆格子点を求めなさい。ただし，六方格子の基本並進ベクトルは，x, y, z 方向の単位ベクトル $\boldsymbol{e}_x$, $\boldsymbol{e}_y$, $\boldsymbol{e}_z$ を用いて

$$\boldsymbol{a}_1 = \frac{a}{2}\boldsymbol{e}_x - \frac{\sqrt{3}a}{2}\boldsymbol{e}_y$$

$$\boldsymbol{a}_2 = \frac{a}{2}\boldsymbol{e}_x + \frac{\sqrt{3}a}{2}\boldsymbol{e}_y$$

$$\boldsymbol{a}_3 = c\boldsymbol{e}_z$$

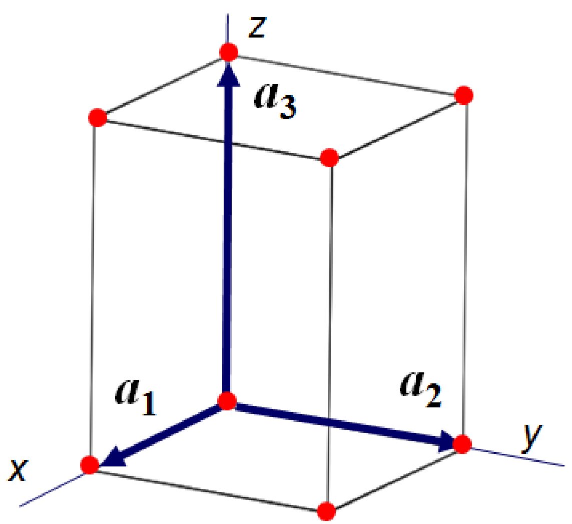
で与えられるとしなさい。ちなみに，六方格子の基本並進ベクトルにはいろいろな表現法があり，ここで示したのはそのうちの1つである。

(2) **右図の正方晶の単純格子について、逆格子の基本ベクトルを計算し、逆格子を図示しなさい。なお、実空間での基本並進ベクトルは以下で与えられる。**

$$\boldsymbol{a}_1 = 2a\,\boldsymbol{e}_x$$

$$\boldsymbol{a}_2 = 2a\,\boldsymbol{e}_y$$

$$\boldsymbol{a}_3 = 3a\,\boldsymbol{e}_z$$



$|\boldsymbol{a}_1| = |\boldsymbol{a}_2| = 2a \qquad |\boldsymbol{a}_3| = 3a$