補遺

de Moivreの定理

フーリエ解析と逆変換

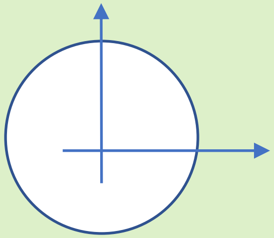
結晶結合：Van der Waals相互作用

ド・モアブル(de Moivre)の定理

2次元の座標軸に，単位円を描くとき，
実数軸・虚数軸について，次の式が成り立つ

$$e^{i\,n\theta} = (\cos\theta + i\sin\theta)^n = \cos n\theta + i\sin n\theta$$

証明）演繹法で，ゼロn=0のとき -> すぐできる。
正の整数n-1で式が成り立つとするとき，
nの式を書いてみると，



$$(\cos\theta + i\sin\theta)^{n-1} = \cos(n-1)\theta + i\sin(n-1)\theta$$

この式を使う

$$\begin{aligned}(\cos\theta + i\sin\theta)^n &= (\cos\theta + i\sin\theta)^{n-1}(\cos\theta + i\sin\theta)\\ &= [\cos(n-1)\theta + i\sin(n-1)\theta](\cos\theta + i\sin\theta)\\ &= [\cos(n-1)\theta\cos\theta - \sin(n-1)\theta\sin\theta\\ &\quad + i\,[\sin(n-1)\theta\cos\theta + \cos(n-1)\theta\sin\theta]\\ &= \cos n\theta + i\sin n\theta\end{aligned}$$

負の整数でも証明できる。

第2章　フーリエ解析と逆変換（固体物理学入門）

フーリエ解析 1次元では,

$$n(x) = \sum_{p \in C} n_p \exp(i2\pi px/a)$$

フーリエ解析 3次元では,

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{G} n_G \exp(i\mathbf{G} \bullet \mathbf{r}) \qquad (9)$$

逆格子空間では,

$$n_G = \frac{1}{V_c} \int_{cell} n(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G} \bullet \mathbf{r})\, dV \qquad (12)$$

逆ベクトル

格子点 (a_1, a_2, a_3) と逆格子の軸ベクトル$(b_{1,}, b_2, b_3)$

$$b_i \bullet a_j = 2\pi\delta_{ij}$$ クロネッカー記号

$$\mathbf{r} = x_j\mathbf{a}_1 + y_j\mathbf{a}_2 + z_j\mathbf{a}_3$$

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \bullet \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}, \mathbf{b}_2 = \ldots$$

$$\mathbf{G} = v_1\mathbf{b}_1 + v_2\mathbf{b}_2 + v_3\mathbf{b}_3$$ vは実数

回折の条件

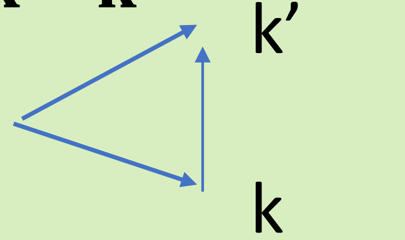
逆格子ベクトルGの組がX線の反射を決定する

散乱振幅は，k, k’ について，Fに比例する

(18)

$$F = \int dV\ n(\mathbf{r}) \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}^{'}) \bullet r] = \int dV\ n(\mathbf{r}) \exp[-i\Delta\mathbf{k} \bullet \mathbf{r}],$$

$$\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k} = \mathbf{k}^{'}$$



実空間(9) -> 逆空間(18)に代入すると，

$$F = \sum_{G} \int dV\ n_G \exp[i(\mathbf{G} - \Delta\mathbf{k}) \bullet \mathbf{r}]$$

$\Delta\mathbf{k} = \mathbf{G}$ (21)のときは，$F = Vn_G$

(21)より $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{G}$ -> $\mathbf{k} + \mathbf{G} = \mathbf{k}^{'}$

ゆえに，

$$2\mathbf{k} \bullet \mathbf{G} + \mathbf{G}^{2} = 0$$

第3章 結晶結合　Van der Waals相互作用

2つの１次元調和振動子

$$H_0 = \frac{1}{2m}p_1{}^2 + \frac{1}{2}Cx_1^2 + \frac{1}{2m}p_2{}^2 + \frac{1}{2}Cx_2^2, \quad C = m\omega^2$$

$$H_1 = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{R + x_1 - x_2} - \frac{e^2}{R + x_1} - \frac{e^2}{R - x_2}$$

x/Rで展開する

$$\frac{1}{R+x} = \frac{1}{R(1 + x/R)} = \frac{1}{R}\left(1 - \frac{x}{R} + \frac{x^2}{R^2} - \dots\right)$$

4つの項を計算すると，$H_1 \approx -2e^2 \dfrac{x_1 x_2}{R^3}$

変数を(+)と(-)に分ける

$$x_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2), \quad x_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2)$$

or

$$x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_s + x_a), \quad x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_s - x_a)$$

と分離して,

$$H = \left[\frac{1}{2m}p_s^2 + \frac{1}{2}\left(C - \frac{2e^\partial}{R^3}\right)x_s^2\right] + \left[\frac{1}{2m}p_a^2 + \frac{1}{2}\left(C + \frac{2e^\partial}{R^3}\right)x_a^2\right]$$

$$\omega = \left[\left(C \pm \frac{2e^2}{R^3}\right)/m\right]^{1/2} \approx \omega_0\left[1 \pm \frac{1}{2}\frac{2e^2}{CR^3} - \frac{1}{8}\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}\frac{2e^2}{CR^3}\right)^2\right]$$

$$\therefore\ \Delta U = -\hbar\omega_0 \frac{1}{8}\left(\frac{2e}{CR^3}\right)^2 \propto -\frac{A}{R^6}$$

マイクロ波の加熱