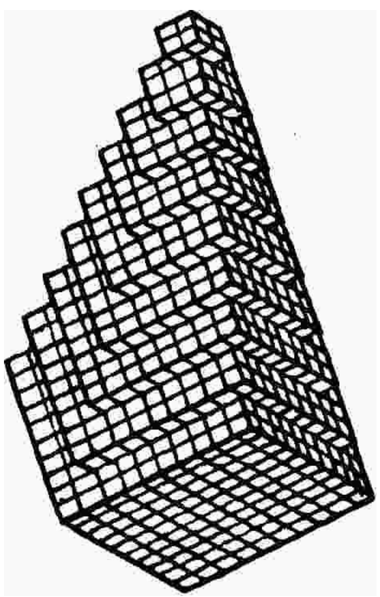
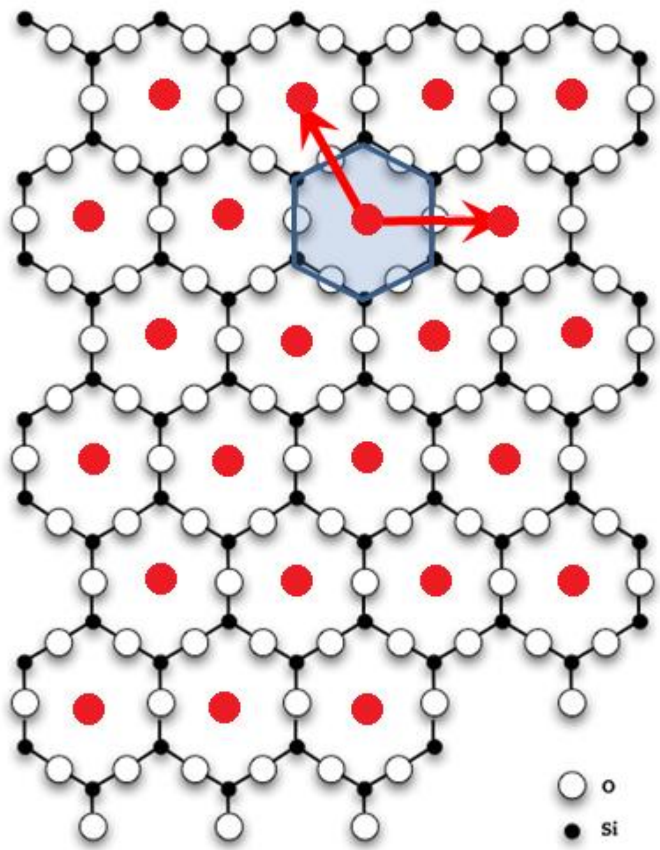
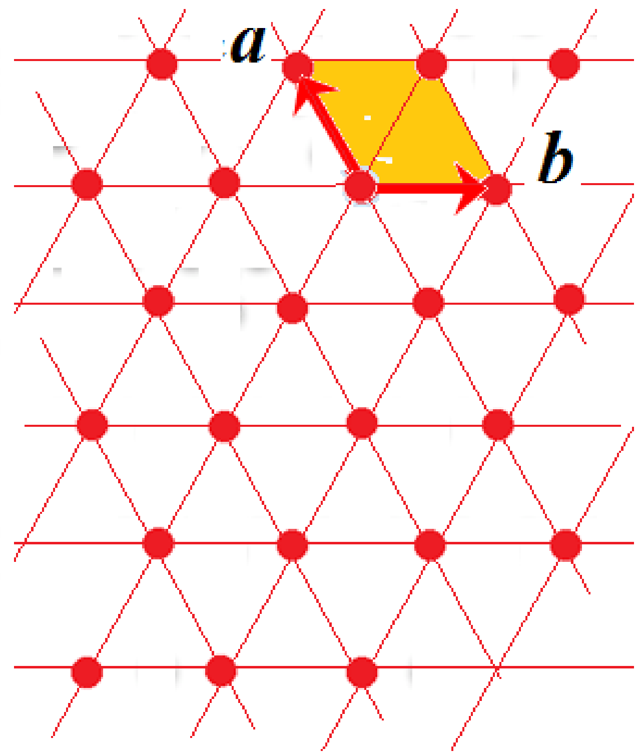
結晶空間 (周期的な離散空間)　空間のデジタル化

格子＝**並進群**　がある

アウイの概念
方解石(1783)







結晶面(格子点を載せている面)
の傾きは有理数⇒有理指数の法則

$$lattice\ points = \{ n\boldsymbol{a} + m\boldsymbol{b} \}$$

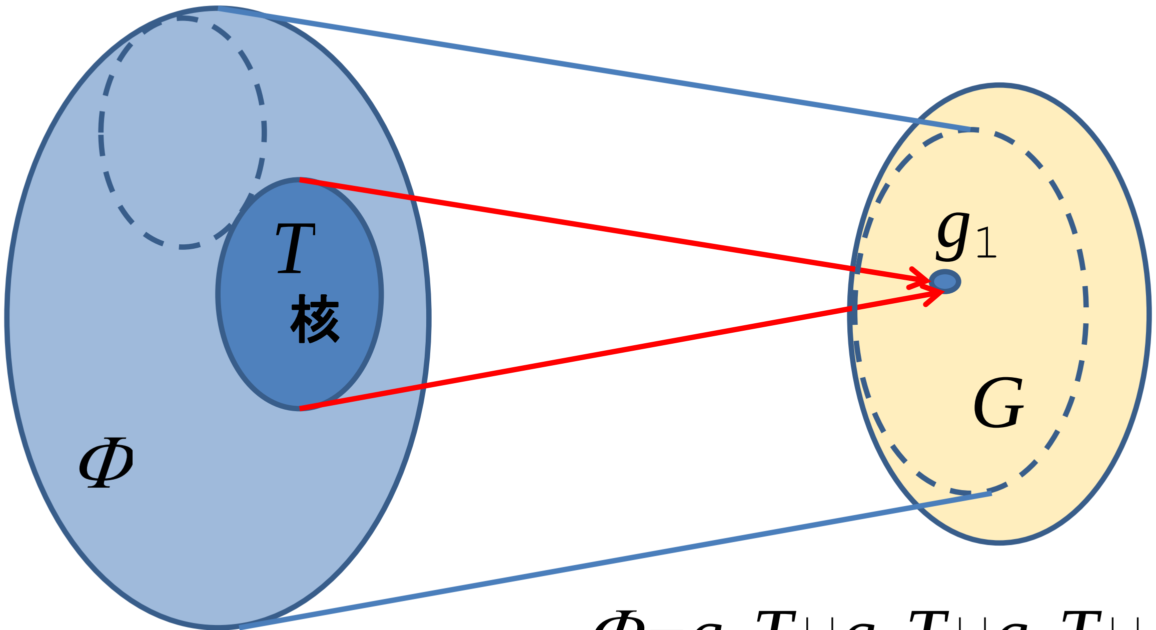
結晶空間群と結晶点群

無限に広い結晶空間を1つの単位胞の中に畳み込む

並進群Tを核として，結晶空間群Φ（230種類）は，結晶点群G（32種類）に準同型写像される.

$$\Phi / T \cong G\,, \quad T \lhd \Phi$$

（Φ結晶空間群，T並進群，G結晶点群）



$$\Phi = g_1 T \cup g_2 T \cup g_3 T \cup \cdots\cdots \cup g_s T$$

$$\text{Fourier変換で結ばれる双対空間}\quad\begin{cases}\text{結晶格子}\,Ш(\boldsymbol{r})\\ \text{逆格子}\,Ш^{*}(\boldsymbol{R})\end{cases}$$

$$Tr\,[\rho(r)]=F(R),\quad Tr\,[\rho(r)\star\rho(r)]=|F(R)|^{2}$$

電子密度分布$\rho(r)$により散乱されるX線の散乱振幅は$F(R)$で，$\rho(r)$のFourier変換にほかなりません.
観測される散乱強度は$|F(R)|^{2}$なので位相情報は失われます. これは，原子間ベクトルのFourier変換です.

$$Tr\,[\rho_0(r)\star Ш(r)]=Tr\,[\rho_0(r)]\cdot Tr\,[Ш(r)]$$

$$F_0(R)\cdot Ш^{*}(R)$$

因果律（キューリーの原理）

**原因の中にある対称性は，
結果の対称性のなかに反映される**

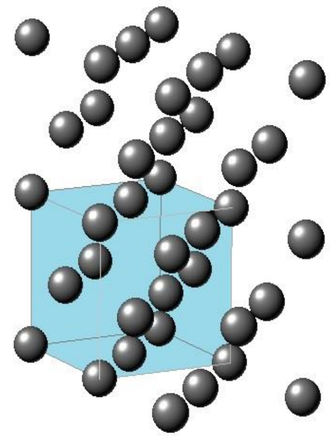
Friedel則は，Curieの原理に含まれます

X線

$\rho_0(\boldsymbol{r}) \star \text{Ш}(\boldsymbol{r})$

（原因）

結晶構造



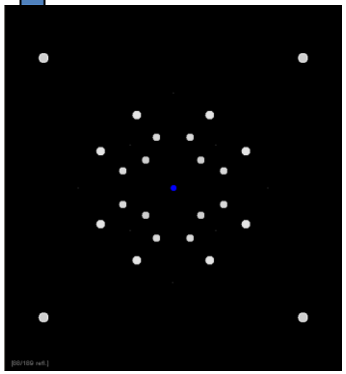
結晶構造は非常に小さいので見えないが，回折像の対称性を観測すればその方向から見た結晶の対称性がわかるはずだが？回折対称の上昇があるかもしれない‼

Fourier変換

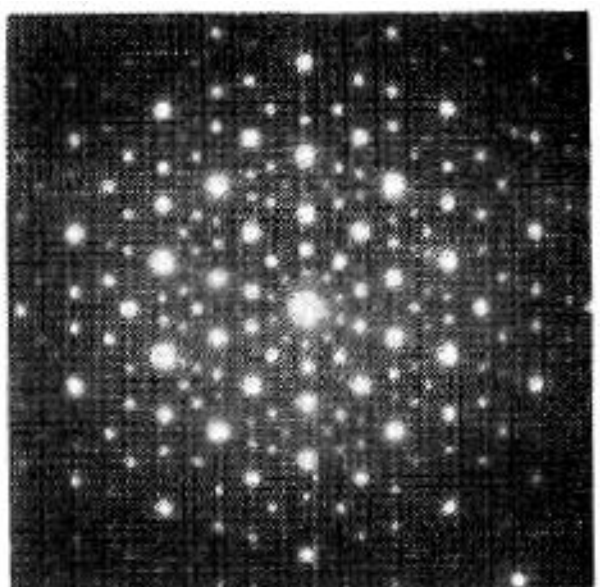
（結果）

回折像

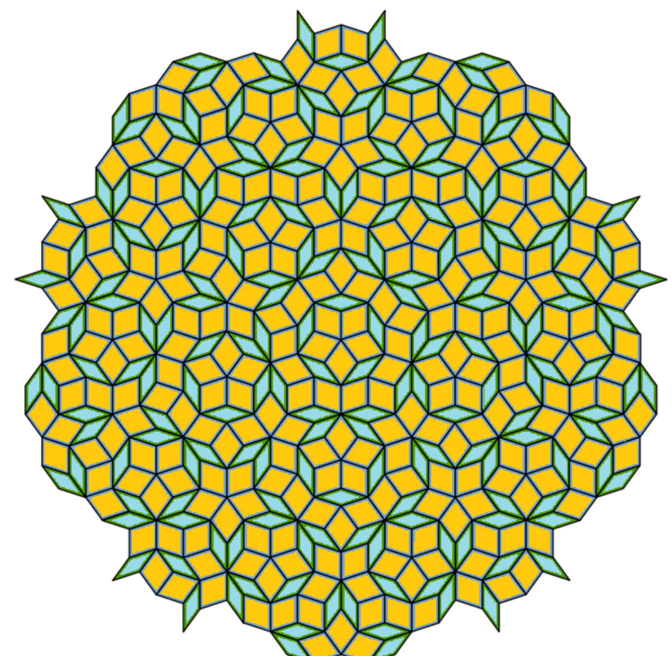
$F_0(\boldsymbol{R})\cdot\text{Ш}^*(\boldsymbol{R})$



（例）結晶構造に，4回対称性が存在すれば，X線回折像の対称性に，少なくとも4回対称性は反映される．しかし，X線回折像に4回対称性が存在しても，結晶に必ずしも4回対称性が存在するわけではない．
これを**回折対称の上昇**という．
（例）X線回折像に10回対称（5回対称⊗Friedel則）があったとしても，その原因たる結晶構造に5回対称性があるとは限らない．特に，結晶構造の5回対称性は周期性（結晶の定義）と矛盾するのであり得ない．
しかし，周期性を外せばあり得る．
準結晶のモデルは，非周期のペンローズ・タイリングで実現できる．

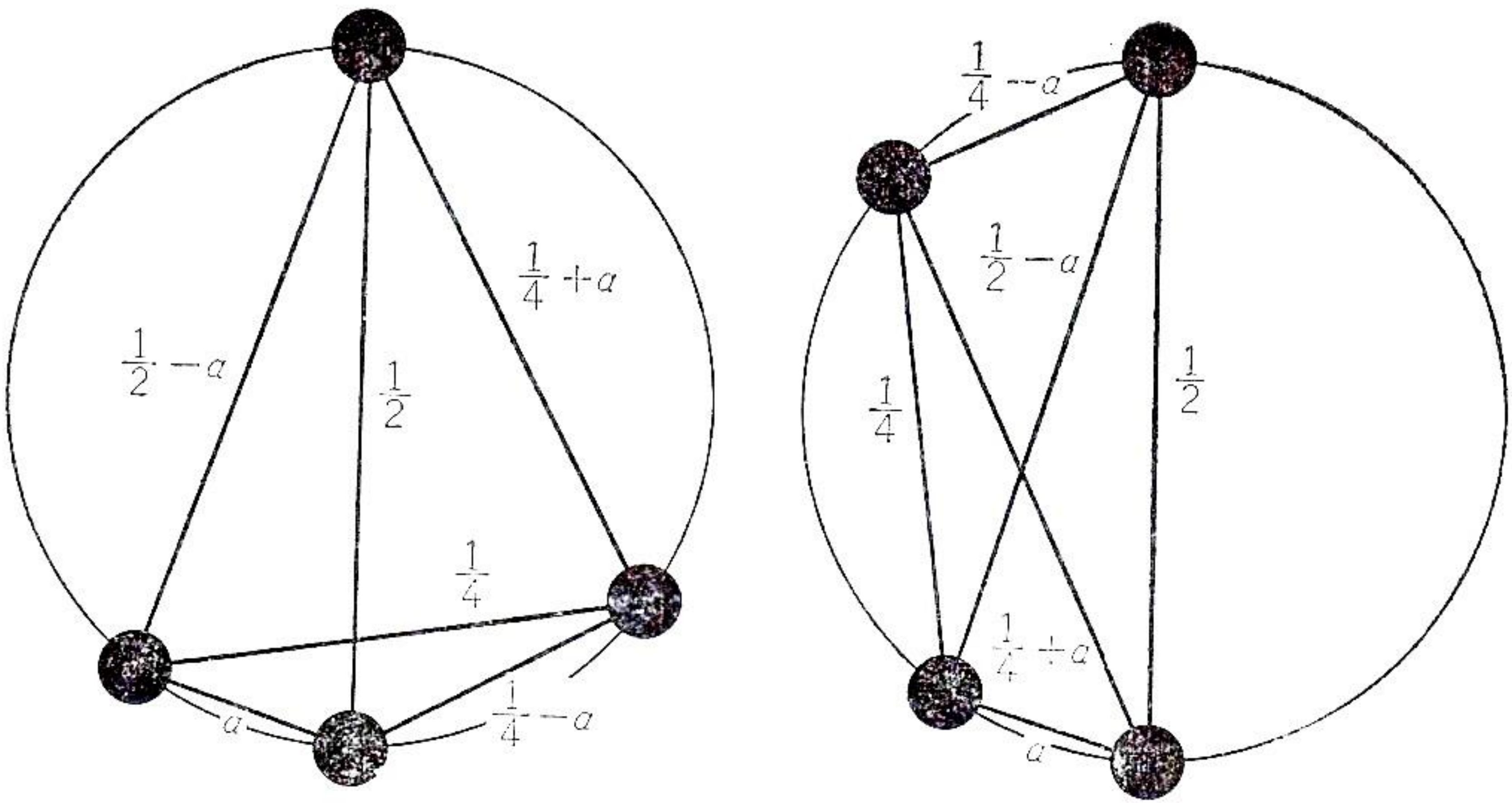


シュヒトマン（1984）



ペンローズ（1966）

点集合とベクトル集合．ホモメトリック構造



1次元のモデル，
Patterson(1944)

1次元の単位胞モデル⇒円周（長さ1）
図中に描き込まれた長さは円弧に沿って測ります（弦の長さではない）．