

А. И. 季达依哥罗茨基

结构分析理论

科学出版社

14.92
354

结 构 分 析 理 论

A. И. 季达依哥罗茨基 著
王寿仁 李方华 梁炼材 译

科 (学 出 版) 社

А. И. Китайгородский
ТЕОРИЯ СТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА
Изд. АН СССР
Москва 1957

內 容 簡 介

本书叙述有关单晶体結構分析中各种方法的基本理論,特別着重闡述結構振幅之間符号关系法的理論.作者在本书中总结了他在1953—1955年为建立結構振幅关系的完整理論而做的工作,书中还涉及了其他人研究过的結構分析理論的一些問題.

本书第一至四章由王寿仁翻譯,第五章由李方华翻譯,第六章由梁栋材翻譯,全书由李方华校訂.譯者在翻譯过程中曾得到吳乾章同志的关怀与帮助.

結 構 分 析 理 論

[苏] А. И. 季达依哥罗茨基 著
王寿仁 李方华 梁栋材 译

*

科 学 出 版 社 出 版

北京朝阳門内大街 117 号
北京市书刊出版业营业許可証出字第 061 号

上海市印刷五厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店經售

*

1965 年 10 月 第 一 版 开本: 850×1168 1/32
1965 年 10 月 第 一 次 印 刷 印 张: 8
印 数: 0001—3,300 字 数: 206,000

統一書号: 13031·2144

本 社 書 号: 3269·13—3

定 价: [科七] 1.40 元

序 言

結構分析基于物质对輻射的衍射現象。在勞埃 (Laue) 发现 X 射綫衍射現象的最初 10—20 年間，曾創立了极完善的 X 射綫衍射理論，随后又建立了电子衍射理論，衍射理論給出了一些方程，利用这些方程可以計算已知結構的衍射强度分布图。当时的結構分析理論指的就是輻射的衍射理論。

1935 年帕特遜 (Patterson) 指出了解决与此相反的問題的途徑，即指出如何根据已知的衍射强度分布图来寻求結構。最初是研究者的保守思想，后来則是战争阻扰了这种想法的发展与广泛应用。仅在最近十年間才闡明了作为帕特遜方法——分析电子密度卷积的方法——的基础的一切丰富可能性。

1947 年，哈尔克尔 (Harker) 和卡斯波尔 (Kasper) 找到了直接的結構分析方法的新途徑——寻找結構振幅之間关系的方法。1952 年，賽亞 (Sayre)、科克兰 (Cochran) 和扎哈賴兴 (Zacharisen) 在同一期杂志上就結構振幅之間有极简单的联系問題发表了他們的观察情况和有意思的計算結果。結構振幅之間有这种简单的联系，就使此新方法有可能用来进行直接的結構分析。解决此問題的另一新途徑源出于威尔逊 (Wilson) 的工作，他指出可以把統計概念应用到强度分布上去。

許多作者在 1947—1955 年間对直接的結構分析方法理論作出了极大的貢獻。在这方面，卡尔 (Karle) 和豪普特曼 (Hauptman) 的工作、古德庫普 (Goedkoop) 精細的工作以及許多其他工作都有极大的意义。

这样，在最近的 5—10 年間創建了一个新的科学領域——寻

找結構的方法的理論。此理論的起始點就是輻射的衍射理論停止活動的地方。

近來已很明顯地看出，衍射理論所特有的使命，例如動力吸收、反常散射以及其他一些問題，在結構分析（指此概念的狹義方面）中并不起作用。因此把衍射理論和結構分析理論等同起來是不對的。

“結構分析理論”的術語與“尋找結構的方法的理論”這個術語完全相同。本書所討論的正是此理論。這是一本專論，其主要部分概括了作者在 1953—1955 年間旨在建立結構振幅之間關係的完整理論的工作。為了本書的完整性，作者力求論及一切在蘇聯和外國所探討的結構分析理論問題。但是，由於這是一本個人的著作，可能許多有價值、有意義的工作仍未能敘述到。

作者希望本書能作為這一新課題的概論，並進一步推動這一有意思的領域內的研究工作，其目的是推廣結構分析的應用範圍，並使它自動化。

目 录

序言	iii
第一章 数学概論	1
§ 1. 傅里叶积分和倒易空間	1
§ 2. 傅里叶变换	2
§ 3. 变换的特殊情形	3
§ 4. 变换的投影和截面	6
§ 5. 函数的卷积	7
§ 6. 函数的自卷积	13
第二章 基本理論	16
§ 1. X 射綫的散射	16
§ 2. 作为散射空間的倒易函数空間	19
§ 3. 电子密度依時間的平均	20
§ 4. 把物体看作原子組	24
§ 5. 把物体看作质点組	29
§ 6. 形状因子	31
§ 7. 无穷的 δ 点陣	36
§ 8. 有限的 δ 点陣	40
§ 9. 有限的理想晶体点陣	44
§ 10. 眞实晶体	47
§ 11. 結構振幅与結構乘积	48
§ 12. X 射綫、电子和中子結構分析的比較	50
第三章 把結構振幅和結構乘积看作随机变数	59
§ 1. 問題的提出	59
§ 2. 独立变数之和的分布函数	63
§ 3. 中心对称晶体結構振幅分布函数的高斯表达式	69
§ 4. 振幅的分布函数与結構的关系	73
§ 5. 晶体偏离于中心对称性, “完全”失去对称中心	77

§ 6. 中心对称晶体与非中心对称晶体之间的统计区别	79
§ 7. 结构振幅的分布函数和超对称性	84
§ 8. 结构因子的平均值及求单位结构振幅的问题	89
§ 9. 借分析强度分布的统计数据来测定空间群的可能性	96
§ 10. 三阶结构乘积的分布函数	98
§ 11. 结构乘积的高斯分布	102
§ 12. 在高斯分布的应用范围内结构乘积为正值概率	106
§ 13. 不完全的结构乘积平均的奇特性	109
第四章 结构振幅关系论	112
§ 1. 问题的提出	112
§ 2. 确切为正的乘积	114
§ 3. 有一个原子在一般位置的中心对称晶体	116
§ 4. 振幅与其分量之间的关系	117
§ 5. 单位结构振幅与其分量之间的平均关系	119
§ 6. 单位结构振幅之间的简单不等式	121
§ 7. 借柯西不等式寻求结构振幅之间的关系. 第一种方法	124
§ 8. 应用柯西不等式的第二种方法	133
§ 9. 结构振幅之间关系的基本方程	135
§ 10. 低阶关系行列式的形状	138
§ 11. 决定性符号	141
§ 12. 用基本关系方程来求符号的可能性	144
§ 13. 结构乘积的优势正性	147
§ 14. 挑出正乘积	154
§ 15. 结构振幅绝对值之间的关系	158
§ 16. 结构乘积和振幅的符号	161
§ 17. 结构乘积可能值的界限	163
§ 18. 最简单 D_m 的关系方程的图示	170
§ 19. 完备的结构振幅关系论	180
§ 20. 结构乘积为正的概率	181
§ 21. 直接结构分析的方法	183
第五章 电子密度卷积的研究	186
§ 1. 卷积作为原子间函数的和	186
§ 2. 原子间函数的形状	187
§ 3. 从卷积中提取原子间矢量系	189

§ 4. 电子密度的卷积与晶体的对称性	191
§ 5. 由卷积推导结构	208
§ 6. 差异倒反	213
§ 7. 卷积的锐化	214
第六章 使结构振幅计算值逼近于测量值的方法	216
§ 1. 对抗衍射	216
§ 2. R 因子和相关系数	222
§ 3. 逼近法的一般特征	224
§ 4. 布斯(Booth)的“最速下降”法	227
§ 5. 最小二乘法	229
§ 6. 微分法	231
§ 7. 差数级数法	233
§ 8. 准确度的因素	235
§ 9. 计算测定原子坐标时的误差	238
§ 10. 对误差公式中求和值的粗略估计	239
結束語	243

第一章

数学概論¹⁾

§ 1. 傅里叶积分和倒易空間

大家知道，在实际应用中遇到的每一个函数都滿足下列柯西 (Cauchy) 公式：

$$g(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\pi i x \xi} d\xi \int_{-\infty}^{+\infty} g(x') e^{2\pi i x' \xi} dx'. \quad (1)$$

此公式可以推广到有三个变数的函数：

$$\begin{aligned} g(xyz) &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\pi i(x\xi + y\eta + z\zeta)} d\xi d\eta d\zeta \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} g(x'y'z') e^{2\pi i(x'\xi + y'\eta + z'\zeta)} dx' dy' dz'. \end{aligned} \quad (2)$$

在文献中常常把公式(1)和(2)称为傅里叶双重积分。

由(2)有

$$g(xyz) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(\xi\eta\zeta) e^{-2\pi i(x\xi + y\eta + z\zeta)} d\xi d\eta d\zeta, \quad (3)$$

此处

$$G(\xi\eta\zeta) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(xyz) e^{2\pi i(x\xi + y\eta + z\zeta)} dx dy dz. \quad (4)$$

函数 $g(xyz)$ 和 $G(\xi\eta\zeta)$ 称为傅里叶变换配偶。

令 xyz 和 $\xi\eta\zeta$ 为两个空間的相对坐标。

坐标 xyz 的空間由它的度量亦即由三个基本矢量 \mathbf{a}_i 来决定。由原点引到点 xyz 的矢量 \mathbf{R} 等于

$$\mathbf{R} = x\mathbf{a}_1 + y\mathbf{a}_2 + z\mathbf{a}_3.$$

量 xyz 是相对数。

¹⁾ 此概論为一概要，我們只限于形式上的証明。

其次,令 $\xi\eta\zeta$ 空間由度量 \mathbf{b}_i 給定,由原点引到点 $\xi\eta\zeta$ 的矢量 \mathbf{H} 就等于

$$\mathbf{H} = \xi\mathbf{b}_1 + \eta\mathbf{b}_2 + \zeta\mathbf{b}_3.$$

量 $\xi\eta\zeta$ 也是相对数.

xyz 空間的体积元为

$$dv = \mathbf{a}_i[\mathbf{a}_j\mathbf{a}_k] dx dy dz, \quad (5)$$

$\xi\eta\zeta$ 空間的体积元为

$$d\tau = \mathbf{b}_i[\mathbf{b}_j\mathbf{b}_k] d\xi d\eta d\zeta. \quad (6)$$

于是就产生了如何把(2)表达为矢量形式的問題. 不难看出,如果在 x 和 ξ 空間的两种度量之間沒有联系,就不可能作到. 只有当关系式

$$\mathbf{a}_i\mathbf{b}_i = 1, \quad \mathbf{a}_i\mathbf{b}_k = 0 \quad (7)$$

成立时,式(2)才能表为矢量形式.

由(7)有

$$\mathbf{a}_i[\mathbf{a}_j\mathbf{a}_k] = \frac{1}{\mathbf{b}_i[\mathbf{b}_j\mathbf{b}_k]}. \quad (8)$$

由(8)得出:若矢量 \mathbf{a}_i 有长度量綱,矢量 \mathbf{b}_i 便有逆长度量綱. 今后我們把 xyz 空間称为物理空間,而把 $\xi\eta\zeta$ 空間称为倒易空間.

利用(7)和(8)式可把(2)变为

$$g(\mathbf{R}) = \int e^{-2\pi i\mathbf{H}\mathbf{R}} d\tau \int g(\mathbf{R}') e^{2\pi i\mathbf{H}\mathbf{R}'} dv'. \quad (9)$$

这样,当物理空間与倒易空間之間有关系(7)时,物理空間的矢量的函数可以表为矢量形式的傅里叶双重积分.

§ 2. 傅里叶变换

由(9)有

$$g(\mathbf{R}) = \int G(\mathbf{H}) e^{-2\pi i\mathbf{H}\mathbf{R}} d\tau, \quad (10)$$

此处

$$G(\mathbf{H}) = \int g(\mathbf{R}) e^{2\pi i\mathbf{H}\mathbf{R}} dv. \quad (11)$$

函数 g 与 G 有不同的量纲: $[G] = [g][L^3]$.

定义于物理空间的函数 $g(\mathbf{R})$ 和定义于倒易空间的函数 $G(\mathbf{H})$ 称为傅里叶变换配偶. 为要区别 (10) 与 (11) (因为物理空间与倒易空间不同), 我们称 $G(\mathbf{H})$ 为函数 $g(\mathbf{R})$ 的傅里叶变换, 而且把 (11) 简记为

$$G = \Phi(g). \quad (11a)$$

函数 $g(\mathbf{R})$ 则称为函数 $G(\mathbf{H})$ 的傅里叶反变换, 而且把 (10) 简记为

$$g = \Phi^{-1}(G). \quad (10a)$$

由 (9) 显见有

$$G = \Phi\Phi^{-1}(G). \quad (12)$$

函数 (3) 和 (4) 也有同样的记法.

利用 (10) 和 (11) 很容易得到下列关系: 若 $G_1(\mathbf{H})$ 和 $G_2(\mathbf{H})$ 分别为 $g_1(\mathbf{R})$ 和 $g_2(\mathbf{R})$ 的傅里叶变换, 则

$$\int G_1(\mathbf{H}) G_2(\mathbf{H}) d\tau = \int g_1(\mathbf{R}) g_2(-\mathbf{R}) dv. \quad (13)$$

若考虑到

$$g^*(\mathbf{R}) = \int G^*(\mathbf{H}) e^{2\pi i \mathbf{H}\mathbf{R}} d\tau, \quad (106)$$

以及

$$G^*(\mathbf{H}) = \int g^*(\mathbf{R}) e^{-2\pi i \mathbf{H}\mathbf{R}} dv \quad (116)$$

(星号表示函数的复共轭), 则与 (13) 相似, 有

$$\int G_1(\mathbf{H}) G_2^*(\mathbf{H}) d\tau = \int g_1(\mathbf{R}) g_2^*(\mathbf{R}) dv. \quad (14)$$

(14) 的一个重要特殊情形就是两个函数相等的情形, 此时有

$$\int |G(\mathbf{H})|^2 d\tau = \int |g(\mathbf{R})|^2 dv. \quad (15)$$

§ 3. 变换的特殊情形

当函数是圆球对称的或当函数可以表为分别依赖于一个坐标

变量的几个函数之积时，上一节所用到的三重积分可以化为单重积分。

令

$$G(\mathbf{H}) = G_1(\xi)G_2(\eta)G_3(\zeta),$$

于是(10)就变为下列形状：

$$\begin{aligned} g(\mathbf{R}) &= \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{+\infty} G_1(\xi) e^{-2\pi i x \xi} d\xi \int_{-\infty}^{+\infty} G_2(\eta) e^{-2\pi i y \eta} d\eta \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} G_3(\zeta) e^{-2\pi i z \zeta} d\zeta, \end{aligned} \quad (16)$$

亦即

$$Vg(\mathbf{R}) = g_1(x)g_2(y)g_3(z), \quad (17)$$

此处

$$g_i = \Phi^{-1}(G_i), \quad V = \mathbf{a}_i[\mathbf{a}_j \mathbf{a}_k].$$

这样，在此情形下可以分别研究只含一个变量的諸函数之变换。

現在設 $G(\mathbf{H})$ 是圓球对称的，从而 $g(\mathbf{R})$ 也是圓球对称的。引进圓球坐标，于是可以把(10)写为

$$g(\mathbf{R}) = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} G(\mathbf{H}) e^{-2\pi i H R \cos \alpha} H^2 \sin \alpha dH d\alpha d\varphi. \quad (18)$$

对角变量积分便得

$$Rg(R) = 2 \int_0^\infty HG(H) \sin 2\pi HR dH. \quad (19)$$

这就是說， $Rg(R)$ 与 $HG(H)$ 是通常所謂的傅里叶正弦变换配偶。所以若圓球对称函数 $g(\mathbf{R})$ 与 $G(\mathbf{H})$ 是傅里叶变换配偶，則 $Rg(R)$ 与 $HG(H)$ 是傅里叶正弦变换配偶。

在圓柱对称的情形， $g(\mathbf{R})$ 与 $G(\mathbf{H})$ 之間并无此种简单的关系。

現在举几个只有一个变量的变换例子。

令 $g(x) = e^{-\pi x^2}$ 。求 $\Phi(g)$ 。

依照(4)，

$$G(\xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\pi x^2} e^{2\pi i x \xi} dx.$$

先乘以 $e^{-\pi t^2}$, 然后再除以 $e^{-\pi t^2}$, 可以把积分变为

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}t^2} dt = \sqrt{2\pi}.$$

这样, $G(\xi) = e^{-\pi \xi^2}$. 由此可见, 此函数与其变换的形状相同. 第二个例子取 $g(x) = e^{-\beta|x|}$, ($\beta > 0$). 于是

$$G(\xi) = \int_0^{\infty} e^{-\beta x} e^{2\pi i \xi x} dx + \int_0^{\infty} e^{-\beta x} e^{-2\pi i \xi x} dx = \frac{2\beta}{\beta^2 + 4\pi^2 \xi^2}.$$

所以 $e^{-\beta|x|}$ 和 $\frac{2\beta}{\beta^2 + 4\pi^2 \xi^2}$ 是傅里叶变换配偶.

这些函数应满足关系(15), 事实上

$$2 \int_0^{\infty} e^{-2\beta x} dx = \frac{1}{\beta},$$

$$4\beta^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\xi}{(\beta^2 + 4\pi^2 \xi^2)^2} = \frac{1}{\beta}.$$

今后我们感到兴趣的几乎都是圆球对称函数. 现在利用公式(19)来求函数 $G_1 = Ze^{-\alpha H^2}$ 和 $G_2 = Ze^{-\alpha|H|}$ 的变换:

$$g_1 = \frac{2Z}{R} \int_0^{\infty} H e^{-\alpha H^2} \sin 2\pi H R dH,$$

$$g_2 = \frac{2Z}{R} \int_0^{\infty} H e^{-\alpha H} \sin 2\pi H R dH.$$

积分后得

$$g_1(R) = Z \frac{\pi^{3/2}}{\alpha^{3/2}} e^{-\frac{\pi^2}{\alpha} R^2}, \quad (20)$$

$$g_2(R) = \frac{8\pi Z \alpha}{(\alpha^2 + 4\pi^2 R^2)^2}. \quad (21)$$

这里要注意到有一个变量的函数的傅里叶变换不同于有三个变量的函数的傅里叶变换(例如 $e^{-\alpha x}$ 的傅里叶变换不同于 $e^{-\alpha R}$ 的傅里叶变换).

最后讨论常量函数 $g(x) = c$ 的傅里叶变换:

$$G(\xi) = c \int_{-\infty}^{+\infty} e^{2\pi i \xi x} dx. \quad (22)$$

今后我們將常用到所謂 δ 函数, 其定义如下: 对于除了 $x=0$ 以外的一切 x 值, $\delta(x)=0$, 而且

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1. \quad (23)$$

在(22)中所出現的积分

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{2\pi i \xi x} dx = \delta(\xi) \quad (24)$$

是 δ 函数的重要例子. 所以

$$G(\xi) = c\delta(\xi). \quad (25)$$

这样, 常量函数是除了在坐标原点以外处处为零的函数的傅里叶反变换.

§ 4. 变换的投影和截面

令 $g(\mathbf{R})$ 和 $G(\mathbf{H})$ 为傅里叶变换配偶.

現在討論 $g(\mathbf{R})$ 在平面 A 上的投影, 平面 A 的法綫方向为 \mathbf{n} . $g(\mathbf{R})$ 的投影定义如下:

$$g_A(\mathbf{R}) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(\mathbf{R}) dn, \quad (26)$$

此处 dn 为沿方向 \mathbf{n} 的长度元.

为便于計算引进投影坐标系 \mathbf{a}'_i ; 此时令一个坐标矢量 (例如說 \mathbf{a}'_3) 沿着 \mathbf{n} 的方向. 同时, 为方便起見把坐标 \mathbf{a}'_1 和 \mathbf{a}'_2 取作坐标矢量 \mathbf{a}_1 和 \mathbf{a}_2 在投影面上的投影. 这样在投影坐标系中 \mathbf{a}'_3 垂直于 $\mathbf{a}'_1\mathbf{a}'_2$. 把与 \mathbf{a}'_i 相倒易的坐标系記作 \mathbf{b}'_i .

在新的坐标系中, (26) 有如下形状:

$$g_A(x'_1 x'_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x'_1 x'_2 x'_3) a'_3 dx'_3. \quad (27)$$

应注意, x'_i 是以新坐标矢量的长度为单位来表示的坐标.

令

$$g(x'_1 x'_2 x'_3) = \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{+\infty} G(\xi'_1 \xi'_2 \xi'_3) e^{-2\pi i(x'_1 \xi'_1 + x'_2 \xi'_2 + x'_3 \xi'_3)} d\xi'_1 d\xi'_2 d\xi'_3, \quad (28)$$

于是(27)可以写成

$$g_A(x'_1 x'_2) = \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{+\infty} G(\xi'_1 \xi'_2 \xi'_3) e^{-2\pi i(x'_1 \xi'_1 + x'_2 \xi'_2)} a'_3 d\xi'_1 d\xi'_2 e^{-2\pi i x'_3 \xi'_3} dx'_3 d\xi'_3.$$

利用公式(24)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\pi i x'_3 \xi'_3} dx'_3 = \delta(\xi'_3),$$

又考虑到公式(23), 便得

$$g_A(x'_1 x'_2) = \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{+\infty} G(\xi'_1 \xi'_2 0) e^{-2\pi i(x'_1 \xi'_1 + x'_2 \xi'_2)} a'_3 d\xi'_1 d\xi'_2. \quad (29)$$

这样, 我们证明了下述定理: 若 $g(\mathbf{R})$ 与 $G(\mathbf{H})$ 为傅里叶变换配偶, 则其中之一在平面 A 上的投影等于另一函数被此平面所截的零截面的傅里叶变换(乘上投影方向的基本矢量长度)¹⁾.

现在讨论 $g(\mathbf{R})$ 在方向 \mathbf{n} 上的投影, 把它记作 $g_n(\mathbf{R})$.

在上述的投影坐标系中, $g_n(\mathbf{R})$ 定义如下:

$$g_n(x'_3) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(\mathbf{R}) |[\mathbf{a}'_1 \mathbf{a}'_2]| dx'_1 dx'_2. \quad (30)$$

把(28)代入并利用 δ 函数的性质, 便得

$$g_n(x'_3) = \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{+\infty} G(00\xi'_3) e^{-2\pi i x'_3 \xi'_3} |[\mathbf{a}'_1 \mathbf{a}'_2]| d\xi'_3. \quad (31)$$

这样, 若 $g(\mathbf{R})$ 与 $G(\mathbf{H})$ 是傅里叶变换配偶, 则其中之一在方向 \mathbf{n} 上的投影等于另一函数在此方向上的零截面的傅里叶变换(乘上在垂直于此方向的平面上的基本矢量所构成的面积).

§5. 函数的卷积

两个函数 g_1 和 g_2 的卷积定义为下列积分:

$$S(g_1, g_2) = \int g_1(\mathbf{R}') g_2(\mathbf{R} - \mathbf{R}') d\mathbf{v}'. \quad (32)$$

在物理空间所给定的两个函数的卷积, 当然仍是此空间的坐标的函数. 积分(32)中被积函数的足码 1 和 2 可以互调, 故有

¹⁾ 尽管正空间与倒易空间有不同的量纲, 但我们可假想地把它们放在一起.

$$S(g_1, g_2) = S(g_2, g_1). \quad (33)$$

同样可以定义在倒易空間里所給定的两个函数的卷积:

$$S(G_1, G_2) = \int G_1(\mathbf{H}') G_2(\mathbf{H} - \mathbf{H}') d\tau'. \quad (32a)$$

現在作函数 $g_1(\mathbf{R})$ 和 $g_2(\mathbf{R})$ 的乘积的傅里叶变换:

$$\Phi(g_1, g_2) = \int g_1(\mathbf{R}) g_2(\mathbf{R}) e^{2\pi i \mathbf{H}\mathbf{R}} dv.$$

把公式(10)代入其中的一个被积函数中便得

$$\begin{aligned} \Phi(g_1, g_2) &= \int g_2(\mathbf{R}) e^{2\pi i \mathbf{H}\mathbf{R}} dv \int G_1(\mathbf{H}') e^{-2\pi i \mathbf{H}'\mathbf{R}} d\tau' \\ &= \int G_1(\mathbf{H}') d\tau' \int g_2(\mathbf{R}) e^{2\pi i \mathbf{H}\mathbf{R}(\mathbf{H} - \mathbf{H}')} dv \\ &= \int G_1(\mathbf{H}') G_2(\mathbf{H} - \mathbf{H}') d\tau'. \end{aligned} \quad (34)$$

这就是說, 两个函数的乘积的傅里叶变换等于这两个函数的傅里叶变换的卷积:

$$\Phi(g_1, g_2) = S(G_1, G_2), \quad (35)$$

換言之, $g_1 g_2$ 和 $S(G_1, G_2)$ 是傅里叶变换配偶, 所以函数 G_1 和 G_2 的卷积的傅里叶变换等于原給函数的乘积:

$$\Phi^{-1}[S(G_1, G_2)] = g_1 g_2. \quad (36)$$

此公式还可写成

$$\Phi^{-1}[S(G_1, G_2)] = \Phi^{-1}(G_1) \Phi^{-1}(G_2). \quad (37)$$

用类似(34)的方式去計算乘积 $G_1 G_2$ 的傅里叶反变换, 得

$$\Phi^{-1}(G_1 G_2) = S(g_1, g_2); \quad (35a)$$

$$\Phi[S(g_1, g_2)] = G_1 G_2; \quad (36a)$$

$$\Phi[S(g_1, g_2)] = \Phi(g_1) \Phi(g_2). \quad (37a)$$

这就是說, 若在物理空間(或倒易空間)里有一个函数等于其它两个函数的乘积, 則此函数的变换在倒易空間(或物理空間)里是这两个因子函数的变换的卷积.

显而易见, 卷积这种运算可以重复地作, 此时作卷积的先后次

序对结果并不起作用。

由(35)可以得出卷积运算的可调换性质。为了证明卷积的这一重要性质，我们取四个函数来作示范性的计算。四个函数的卷积可以这样作：先作任意一对函数的卷积，再作剩下的一对函数的卷积，最后把作好的两个卷积再卷积一次，得

$$S[S(g_1, g_2), S(g_3, g_4)]; \quad (38)$$

或者先作两个函数的卷积，再作此卷积与剩下的函数之一的卷积，最后作所得的卷积与未用过的函数的卷积，得

$$S\{g_1, S[g_2, S(g_3, g_4)]\}. \quad (39)$$

利用(35a)，先把(38)变成

$$S[\Phi^{-1}(G_1 G_2), \Phi^{-1}(G_3 G_4)],$$

此后再用一次(35a)，并应用公式(12)就得

$$\Phi^{-1}(G_1 G_2 G_3 G_4) = S[S(g_1, g_2), S(g_3, g_4)]. \quad (40)$$

由此清楚可见，任意调换足码并不影响卷积的值，因为在(40)的左方所出现的是 G_i 的乘积，而乘积的因子是可以调换次序的。

用同样的方法利用(35a)可把(39)改写成

$$\begin{aligned} S\{g_1, S[g_2, \Phi^{-1}(G_3 G_4)]\} &= S[g_1, \Phi^{-1}(G_2 G_3 G_4)] \\ &= \Phi^{-1}(G_1 G_2 G_3 G_4). \end{aligned}$$

这就是说，用任意的次序来作卷积都可以得到相同的结果，因此在谈到 n 个函数的卷积时用不着指明次序，这和我們谈到完全有定义的函数一样。

不管卷积的次序如何，在求 n 个函数的卷积时，其积分永远可以化为

$$\begin{aligned} &S(g_1, S(g_2, S(\dots S(g_{n-1}, g_n) \dots))) \\ &= \int g_1(\mathbf{R}_1) g_2(\mathbf{R}_2) g_3(\mathbf{R}_3) \dots g_n(\mathbf{R} - \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2 \\ &\quad \dots - \mathbf{R}_{n-1}) dv_1 dv_2 \dots dv_{n-1}. \end{aligned} \quad (41)$$

n 个函数的卷积表为 $n-1$ 重的积分。

仍取四个函数来作(41)式的示范性证明：