

物性物理同演習

伊藤公平

授業の方針

- ・ ミクロな立場から、物性の電気、磁気、光学的性質が決まってくる原理に関する基本骨格となる考え方を学ぶ。
- ・ 物性工学における履修内容の基礎を学ぶ
- ・ 授業の内容は、プリントして配布する。

物性物理と物性工学の関係 金属の電気伝導度を求める

$$E_{th} = \frac{1}{2} m v_{th}^2 = \frac{3}{2} k_B T$$
 電子の平均熱エネルギー

$$\vec{F} = e\vec{E} = m \frac{d^2 y}{dt^2}$$
 電界ありで電子にかかる力

$$a = \frac{F}{m} = \frac{eE}{m}$$
 加速度

$$V_d = a \langle \tau \rangle = \frac{eE}{m} \langle \tau \rangle = \mu E$$
 平均速度（ドリフト速度）

$$\mu = \frac{e \langle \tau \rangle}{m}$$
 移動度

$$E = V/l$$
 ポテンシャルV

4月15日 14時から

$\langle \tau \rangle$: 平均緩和時間

物性物理と物性工学の関係 (2)

次にオームの法則を考える

$$\begin{cases} V = IR \\ E = \rho J = \frac{1}{\sigma} J \end{cases}$$

抵抗(Ω) $R = \rho \frac{l}{A}$ 抵抗率 $\rho = \frac{1}{\sigma} \Rightarrow \Omega \cdot m$

$J \Rightarrow$ 電流密度 $\Rightarrow \frac{\text{電流}}{\text{sec} \cdot m^2}$

dt時間あたりに面積dAを通り抜ける電荷数dq

$$dq = en dA v dt$$

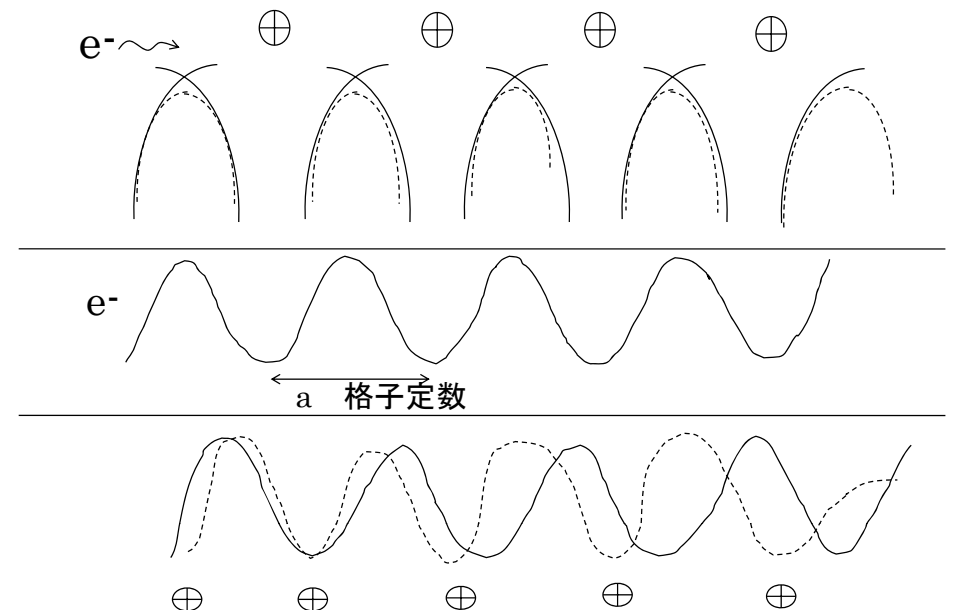
$$J = \frac{dq}{dtdA} = env = en\mu E = \sigma E$$

$$\sigma = en\mu = \frac{e^2 n \langle \tau \rangle}{m}$$

どこに結晶の性質がはいつてくるのか？

答え: nとm*と $\langle \tau \rangle$

物性物理と物性工学の関係 (3)



1 結晶構造

原子

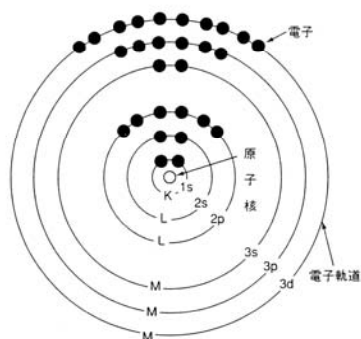


図 1-1 原子核をとりまく各軌道の電子配置図

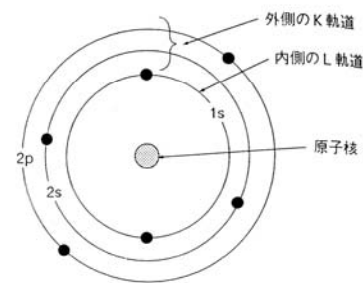


図 1-2 炭素原子の模式図

C.R パレット、W.D ニックス、A.S.テテルマン「材料科学 1—材料の微視的構造—」培風館(1979)より転写

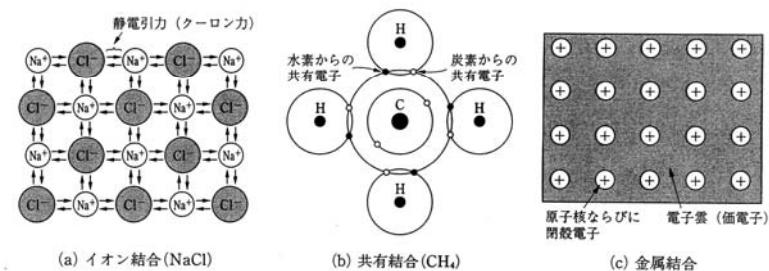
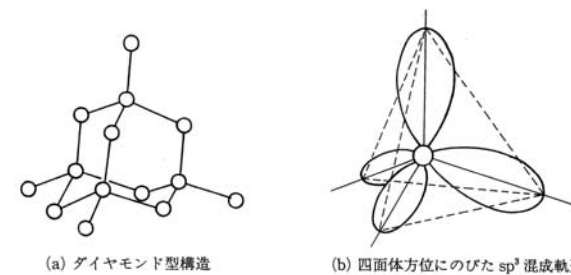


図 化学結合のいろいろ



☒ ダイヤモンド型構造と混成軌道

C.R パレット、W.D ニックス、A.S.テテルマン「材料科学 1—材料の微視的構造—」培風館(1979)より転写

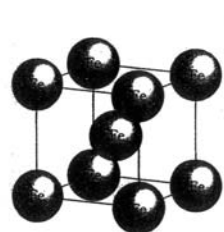


图 1-6 体心立方构造
(BCC: α -Fe)

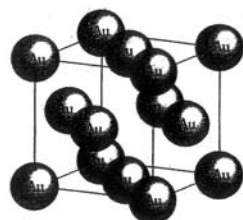


圖 1-7 面心立方構造
(FCC: Au)

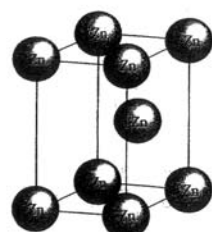


圖 1-8 六方最密充填構造
(HCP: Zn)

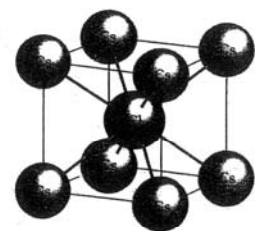


図 1-9 塩化セシウム型構造(CsCl)

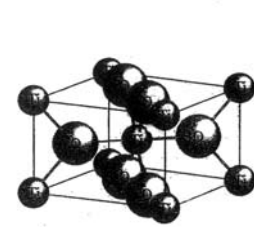


図 1-10 ルチル型構造(TiO_2)

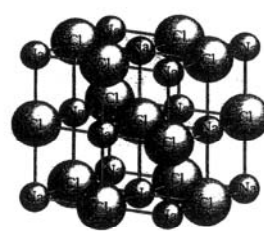


圖 1-11 岩鹽型構造(NaCl)

C.R.パレット、W.D.ニックス、A.S.テテルマン「材料科学1—材料の微視的構造—」培風館(1979)より転写

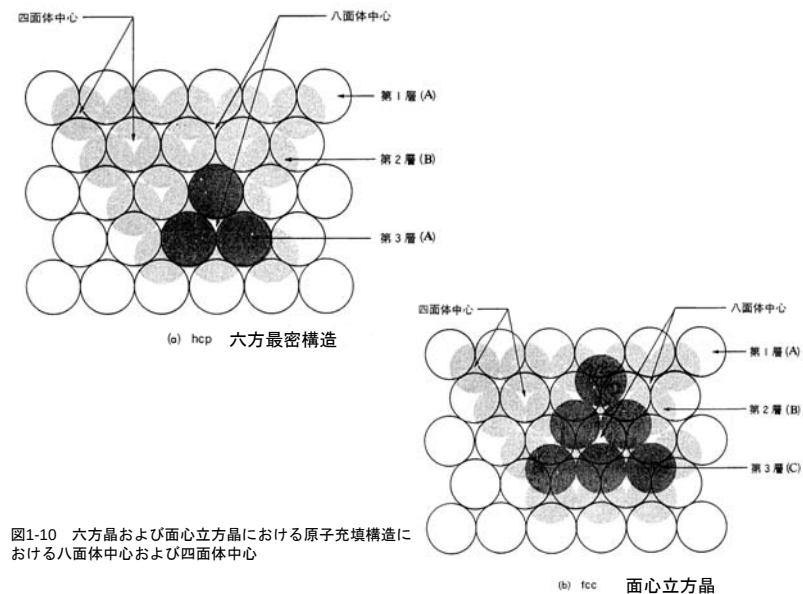
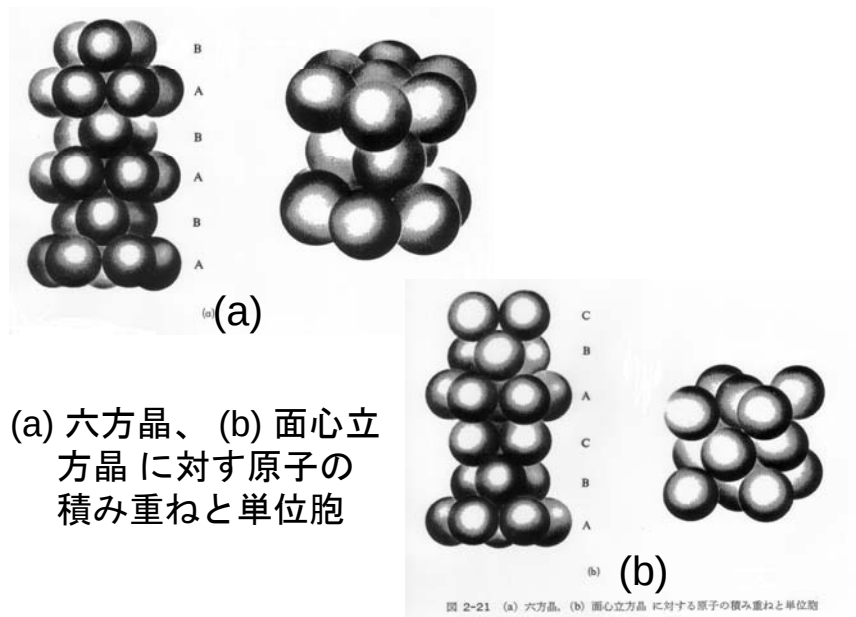
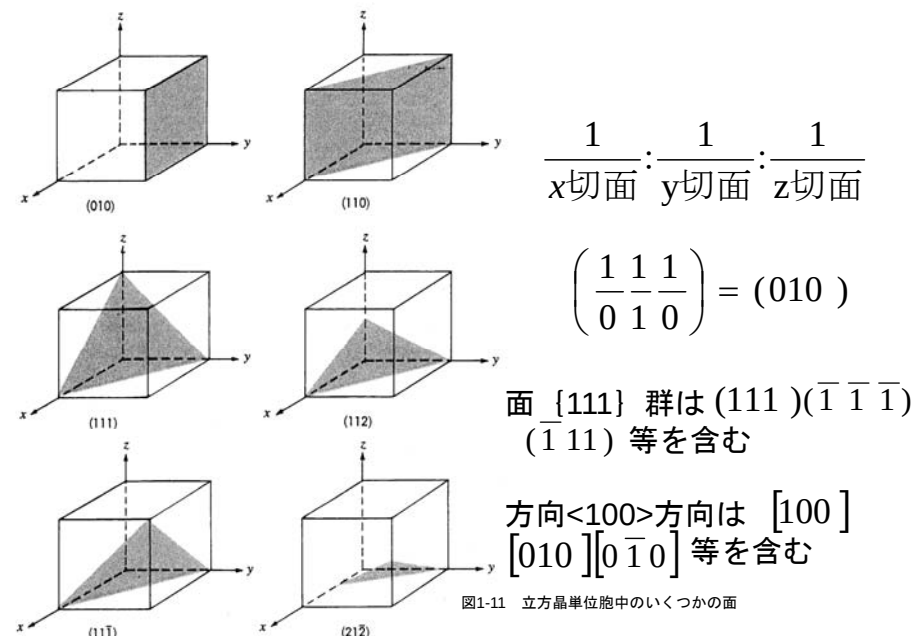


図1-10 六方晶および面心立方晶における原子充填構造における八面体中心および四面体中心

C.R パレット、W.D ニックス、A.S.テテルマン「材料科学1ー材料の微視的構造ー」培風館(1979)より転写



C.R. バレット、W.D. ニックス、A.S. テルマン「材料科学 1 - 材料の微視的構造」培風館(1979)より転写



C.R. バレット、W.D. ニックス、A.S. テルマン「材料科学 1 - 材料の微視的構造」培風館(1979)より転写

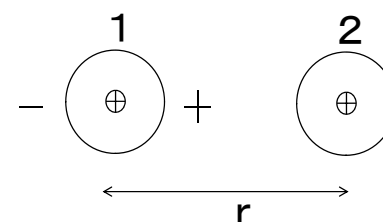
1. 2 化学結合

・ファン・デル・ワールス相互作用

この相互作用は多少ともどのような物質にも存在するものがあるが、この相互作用が重要となる物質は、希ガス元素 (Ne, Ar, Kr, Xe) の固体である。

これらの物質では、自由原子の電子が閉殻構造をとるため、電荷分布は球対称であり、固体になるとき原子はできる限り密に詰まろうとする。そのため、固体では面心立方構造を持つ。しかし、その凝集エネルギーは、共有結合で結合する物質の1%以下と小さい。以下で、その結合機構を簡単に述べる。

・ファン・デル・ワールス相互作用 2



仮定：原子 1 が瞬間的に双極子モーメント P_1 をもっていたとする。 ($\langle P_1 \rangle = 0$)

原子 2 における電界 $\vec{E} \approx \frac{\vec{P}_1}{r^3}$

原子 2 における誘発された双極子モーメント $\vec{P}_2 \approx \alpha \frac{\vec{P}_1}{r^3}$

引力ポテンシャル $\Delta U_A \propto -\frac{P_1 P_2}{r^3} \approx \frac{-\alpha P_1^2}{r^6} = \frac{A}{r^6}$

では引力ばかりでどこまでも原子同士が近づくか？

一方、もし原子の電荷分布が偏って電気双極子モーメント p_1 が発生すると考える。電気双極子モーメントが作る電場 E_1 は次式ようになる (電磁気で学んだ)。

$$E_1 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 r^3} \left\{ p_1 - \frac{3}{r^2} (p_1 \cdot r) r \right\} \quad r \parallel p_1 \text{ では } E_1 = \frac{p_1}{2\pi\epsilon_0 r^3} \propto \frac{p_1}{r^3}$$

斥力ポテンシャルの原因は、2つの電子は、同じ量子数を持つことはできないことを意味する「パウリの排他律」によるもので、その詳細を計算することは難しい。しかし、経験的には、次式で良く表現されることが知られている。

$$\Delta U_R = \frac{B}{r^{12}}$$

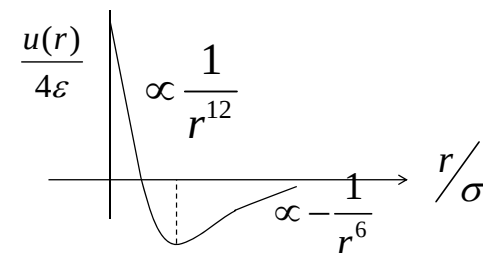
これらを併せて、 $4\epsilon\sigma^6 \equiv A$, $4\epsilon\sigma^{12} \equiv B$ と置くことにより、

$$U = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\}$$

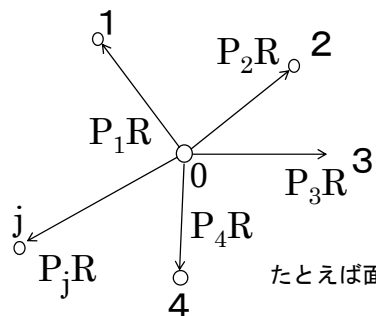
と全体のポテンシャルエネルギーを表すことができ、これをレナードジョーンズのポテンシャルと呼ぶ。2原子間の力は、 $-dU/dr$ で求められる。また、この力が0となるところで、平衡原子間距離が求まることになる（実際には結晶構造を考えて求める）。

希ガス原子固体の各パラメタ（キッテル：固体物理学入門より引用）

最隣接原子 間距離 (Å)	凝集エネルギーの 実験値		融 点 (K)	自由原子の イオン化ポ テンシャル	レナードジョー ンズ・ポテンシャル の定数 (10)	
	kJ/mol	eV/atom			ϵ 10 ⁻¹⁶ erg	σ Å
He	(気圧ゼロで液体状態)				14	2.56
Ne	3.13	1.88	0.02	24	50	2.74
Ar	3.76	7.74	0.080	84	15.76	3.40
Kr	4.01	11.2	0.116	117	14.00	3.65
Xe	4.35	16.0	0.17	161	12.13	3.98



格子定数



原点原子とすべての原子間の
ポテンシャルエネルギーの合計

$$U = 4\epsilon \sum_j \left[\left(\frac{\sigma}{P_j R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{P_j R} \right)^6 \right]$$

トータルの原子数Nの結晶では

$$U_{tot} = \frac{N}{2} U = 2N\epsilon \left[\sum_j \left(\frac{\sigma}{P_j R} \right)^{12} - \sum_j \left(\frac{\sigma}{P_j R} \right)^6 \right]$$

たとえば面心立方fccでは $\sum_j \frac{1}{P_{ij}^{12}} = 12.13$ $\sum_j \frac{1}{P_{ij}^6} = 14.45$

$$U_{tot} = 2N\epsilon \left[(12.13) \left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - 14.45 \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right]$$

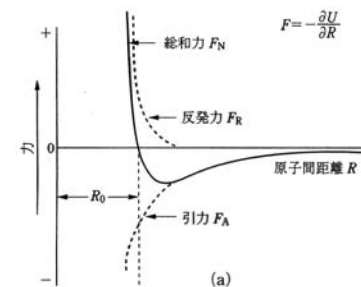
反発力は最近接原子12だけが相互作用して、それ以外はわずか0.13しか寄与しない
クーロン引力はもう少し長距離で2.45も寄与する

熱平衡状態における格子定数 R_0

$$\frac{dU_{tot}}{dR} = 0 = -2N\epsilon \left[12.13 \times \frac{\sigma^{12}}{R_0^{13}} - 14.45 \times 6 \frac{\sigma^6}{R_0^7} \right] = -2N\epsilon \frac{\sigma^6}{R_0^7} \left[12.13 \times 12 \times \frac{\sigma^6}{R_0^6} - 14.45 \times 6 \right]$$

$$\text{この解は } \frac{R_0}{\sigma} = 1.09$$

実際にはNe 1.14 Kr 1.10 Ar 1.11 Xe 1.09



2つの原子を
距離Rに近づける

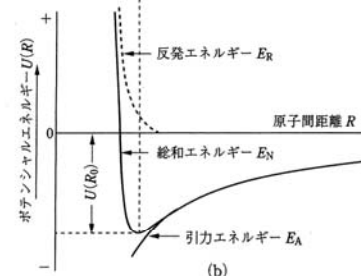


図1-3 2つの原子の原子間距離の関数として与えられる力(a)とポテンシャルエネルギー(b)

C.R.パレット、W.D.ニックス、A.S.テデルマン「材料科学1—材料の微視的構造—」培風館(1979)より転写

・イオン結合

イオン結合は、異符号の電荷を持つイオン間の静電相互作用により生じる。この結合は、原子のイオン化エネルギーと電子親和力から理解できる。

イオン化エネルギー：中性原子から電子1個をとるために必要なエネルギー

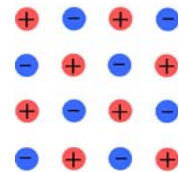
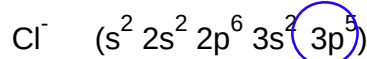
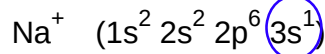
電子親和力：中性原子に電子1個を付け加える時に放出されるエネルギー

イオン化エネルギーが小さく、電子親和力が大きい場合、

$$\begin{array}{l} \text{イオン化エネルギー} - \text{電子親和力} \\ + \text{クーロンエネルギー} < 0 \end{array}$$

が成り立つとき、イオン結合が生じる。

例) NaCl



イオン結晶のイオンの並びかた

ここで、

$$A = \sum_{j \neq i} \frac{\pm 1}{r_{ij}} \quad (1-15)$$

をマーデリング定数と呼ぶ。

マーデリング定数

NaCl構造：1.748

CsCl構造：1.763

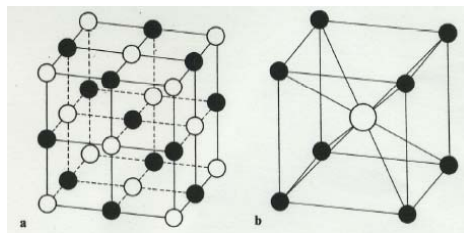


図1-11. a: NaCl構造、b: CsCl構造

典型的なイオン結晶の凝集エネルギーは以下のようなのである。

NaCl: 7.95 eV/イオン対 (765kJ/mol)

NaI : 7.10 eV/イオン対 (683kJ/mol)

KBr : 6.92 eV/イオン対 (663kJ/mol)

希ガス原子固体より2桁大きい。

1対のイオン間のポテンシャルエネルギーは、

$$U_{ij} = \pm \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + \frac{B}{r_{ij}^n}$$

であり、 n は6から10の値となる。次に、イオン i の位置に他のすべてのイオン j が作るポテンシャルは、

$$U_i = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \sum_{j \neq i} \frac{\pm 1}{r_{ij}} + \frac{B}{r^n} \sum_{j \neq i} \frac{1}{r_{ij}^n}$$

となる。ここで、 r は最近接原子間距離であり、

$$r_{ij} = r p_{ij}$$

の関係がある。全ポテンシャルエネルギーは、 N 対のイオンがある場合、

$$U = NU_i = N \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \sum_{j \neq i} \frac{\pm 1}{r_{ij}} + \frac{B}{r^n} \sum_{j \neq i} \frac{1}{r_{ij}^n} \right)$$

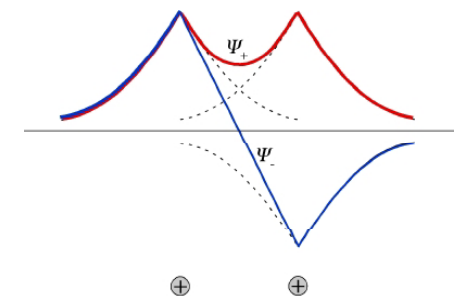
となる。

・共有結合

典型的な半導体であるSiやGeで見られる結合である。また、この結合の機構は、原子が接近して結晶になるときにエネルギー準位がバンドに変化する過程を理解する上でも重要である。

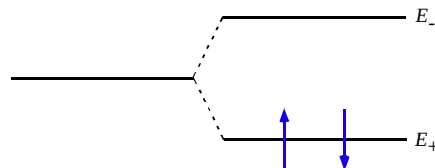
2つの原子を考え、それぞれの原子の波動関数が重なった場合を考える。この時、2通りの波動関数の重なり方が考えられる。

2つの波動関数が足し算的に重なった場合（結合軌道）と引き算的に重なった場合（反結合軌道）。

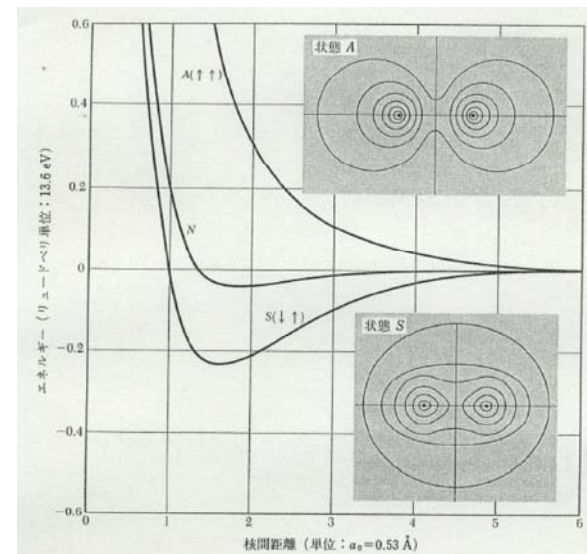


このように2つの軌道ができると、そのエネルギーは分裂する。
この分裂の大きさは、2つの原子の重なりが大きい程増大する。

2つの波動関数が足し算的に重なった場合（結合軌道）と引き算的に重なった場合（反結合軌道）。反平行のスピンを低い軌道にに入れることで、全体のエネルギーが低下する。



このような機構で、結合軌道のエネルギーが減少するならば、
電子を共有して結合軌道を作り分子となる方が安定である。これ
が、共有結合の基本的な考え方である。次ページに水素分子の軌
道エネルギーの計算例を記しておく。



離れ離れの中性原子を基準とした水素分子のエネルギー。Aは平行スピン、Sは反平行スピン、Nは自由原子の電荷分布を用いて計算されている。（キッテル：固体物理学入門より引用）

例) sp^3 混成軌道

C、Si、Geなどは4族の元素であり、その固体は共有結合結晶の典型である。それぞれの原子は次のような電子配置を持つ。

$$C: (1s)^2(2s)^2(2p)^2$$

$$Si: (1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^2$$

$$Ge: (1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(3d)^{10}(4s)^2(4p)^2$$

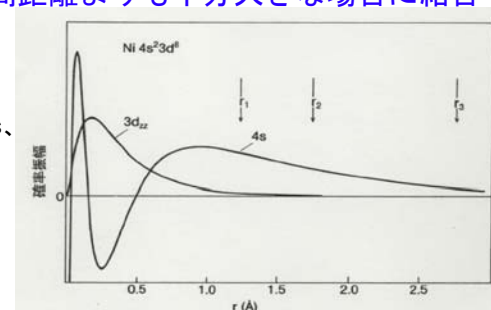
この場合、普通であれば、外殻の p 電子2個を共有して結合することが想像されるが、実際には、s 軌道と p 軌道が混じった同等の4個の混成軌道を作る。それは、電子を s 軌道から p 軌道へ移すためのエネルギーの損失よりも、共有結合を4つに増やすことで生じるエネルギーの利得が大きいからである。

共有結合はイオン結合と同程度の強さを持つもので、強い方向性を持っている。また、共有結合結晶では（C、Si、Geで見られる）ダイヤモンド構造等の低い空間充填率を持つ。

・金属結合

この結合では、共有結合と比較して電子の波動関数は広がっており、その広がりが隣接原子間距離よりも十分大きな場合に結合が生じる。

Ni原子の波動関数の振幅。ここでは、4s、3d波動関数が示されており、第1、第2および第3近接原子間原子との中点が↓で示されている。（イバツハ・リュート：固体物理学より引用）



金属結合が生じる機構は次のように理解される。まず、不確定性原理を思いだそう。 $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar$

電子が Δx の範囲に閉じ込められた場合には、 $\Delta p \sim \frac{\hbar}{\Delta x}$

の運動量を必然的に持つ。この時、電子の運動エネルギーは

$$\Delta E = \frac{1}{2m} (\Delta p)^2 = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{\Delta x} \right)^2$$

となり、 Δx が大きい程減少することが分かる。すなわち、電子は動き回った方がエネルギーを低下させることができる。また、電子が2つの原子殻の間に来ると、原子殻間のクーロンエネルギーを減少させる役割も果たす。このような機構が金属結晶を安定化させることになる。

金属結合では、結合の方向性はなく、アルカリ金属などでは、結合エネルギーはあまり大きくない

表1-4 単原子結晶の凝集エネルギー (kcal/mole)

希ガス原子結晶	He	0.025	Li	36.5	Be	76.6	B	96	C	170.4
	Ne	0.511	Na	26.1	Mg	35.9	Al	74.4	Si	87
	Ar	1.84	K	21.7	Ca	45.9	Ga	66	Ge	78
	Kr	2.54	Rb	20.5	Sr	39.2	In	58.2	Sn	72
	Xe	3.57	Ce	18.8	Ba	42	Tl	43.3	Pb	46.5
貴金属	Cu	81.2	Sc	93	Y	103	La	88	共有結合結晶	
	Ag	69	Ti	112	Zr	125	Hf	***		
	Au	82.3	V	119	Nb	184	Ta	185		
	Zn	31.2	Cr	80	Mo	155	W	201		
	Cd	27	Mn	68	Tc	***	Re	189	遷移金属	
	Hg	15	Fe	96.7	Ru	160	Os	174		
			Co	105	Rh	138	Ir	165		
			Ni	101	Pd	93	Pt	121		

- ・単純金属では、価数が増える程凝集エネルギーが増加する。
- ・遷移金属では、d電子が結合に加わるため、凝集エネルギーが大きい。
- ・貴金属では、d電子の結合への寄与が小さく、凝集エネルギーが小さい。

2. 結晶構造、ブラベー格子

結晶構造



水晶玉

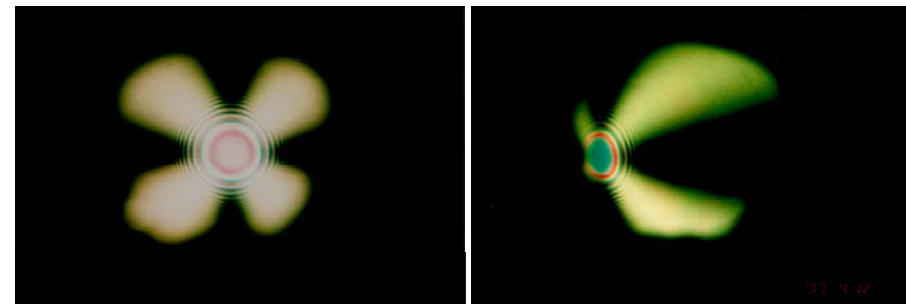


石英ガラス玉

図1-1. 水晶と石英ガラスでは光学的な性質が違う

水晶とガラス玉の違い

水晶玉に直線偏光を当てると？



石英ガラス玉に直線偏光を当てると？



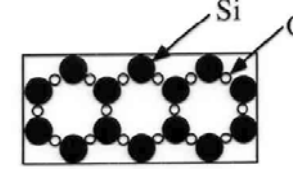
天然の水晶を一旦融解させたのち急冷すると石英ガラスが得られる。両者を比較すると、表のような特徴の差が見られる。

表1-1. 水晶と石英ガラスの比較

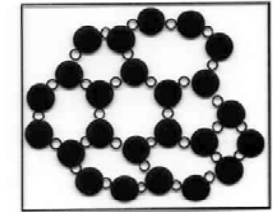
	水晶	石英ガラス
組成	SiO_2	SiO_2
外観	面がある。	特定の形がない。
物理的性質	方向によって異なる。 例) 熱伝導 光学軸方向 $9.3 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ 光学軸方向に垂直 $5.4 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$	方向に依存しない。 どの方向でも $1.4 \sim 1.9 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$

物質の物理的性質は、組成だけでは決まらない。

水晶



石英ガラス



原子間の角度が一定
→ 規則性がある

原子間の角度がバラバラ
→ 規則性がない

図1-2.

結晶

非結晶

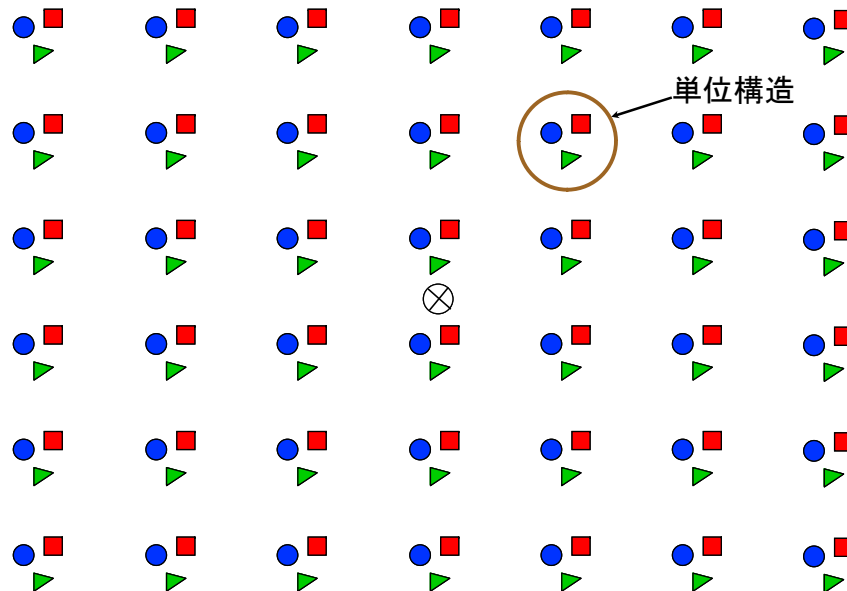
アモルファス

・結晶の定義

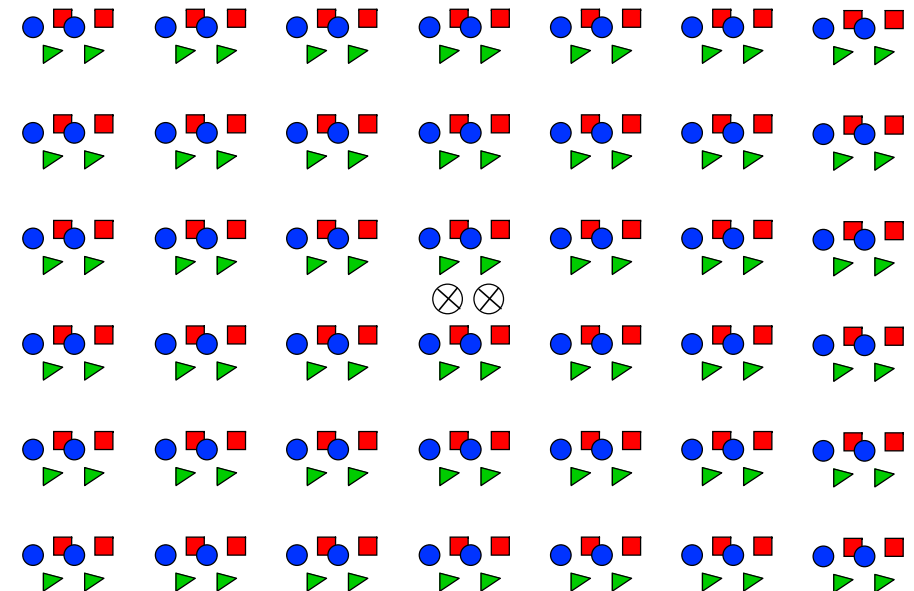
結晶とは、空間的に**周期的な**原子配置を持った固体物質で、**空間格子構造**を持つ。

この定義に属さない固体物質を**非結晶**、**非晶質**、**アモルファス**、**ガラス**などと呼ぶ。

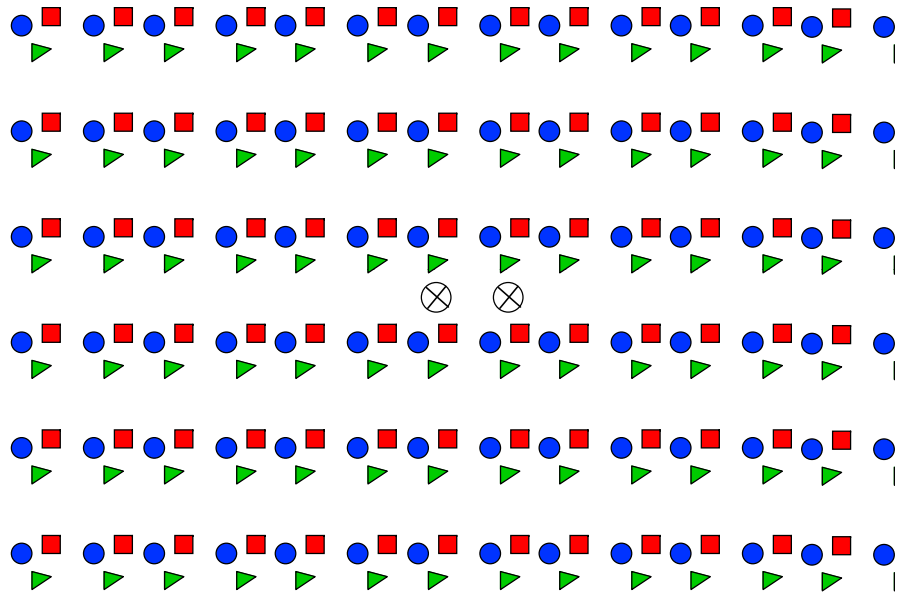
周期的な原子配置の例



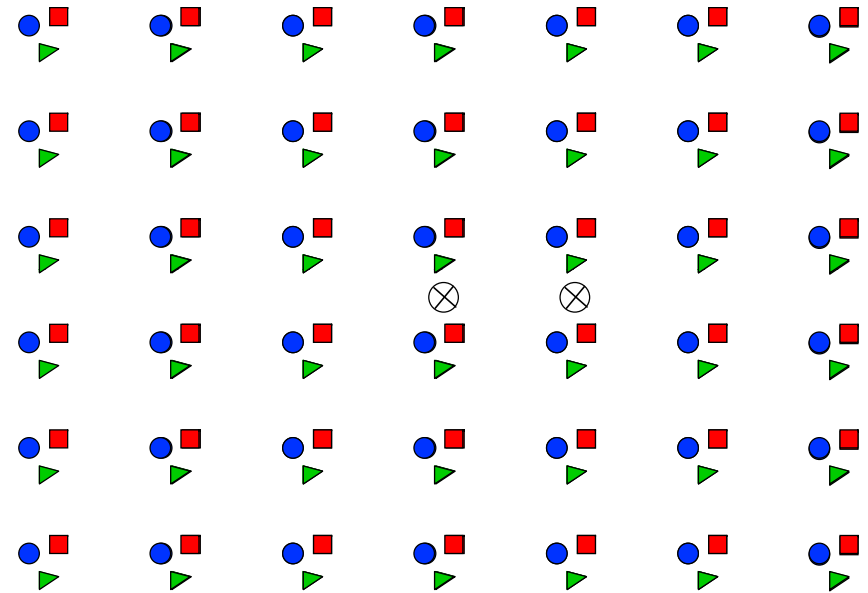
周期的な原子配置の例



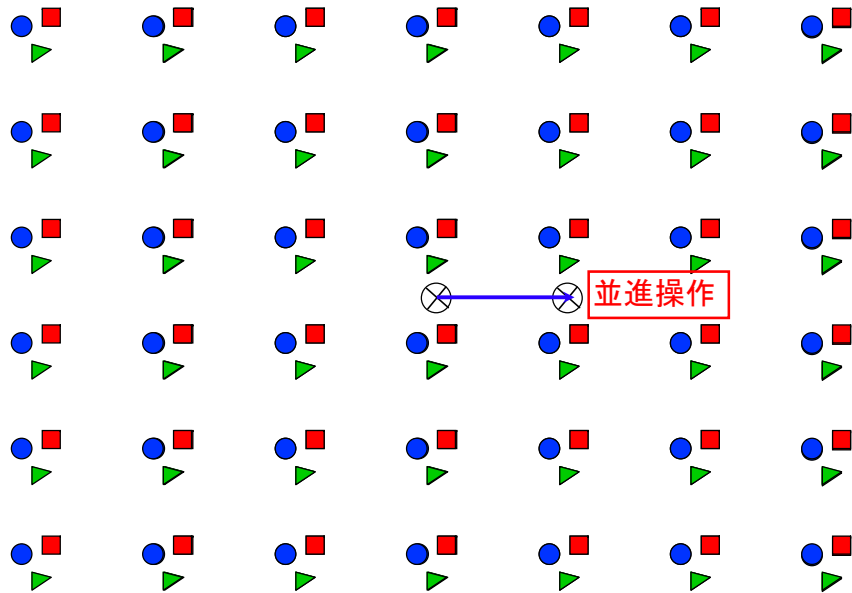
周期的な原子配置の例



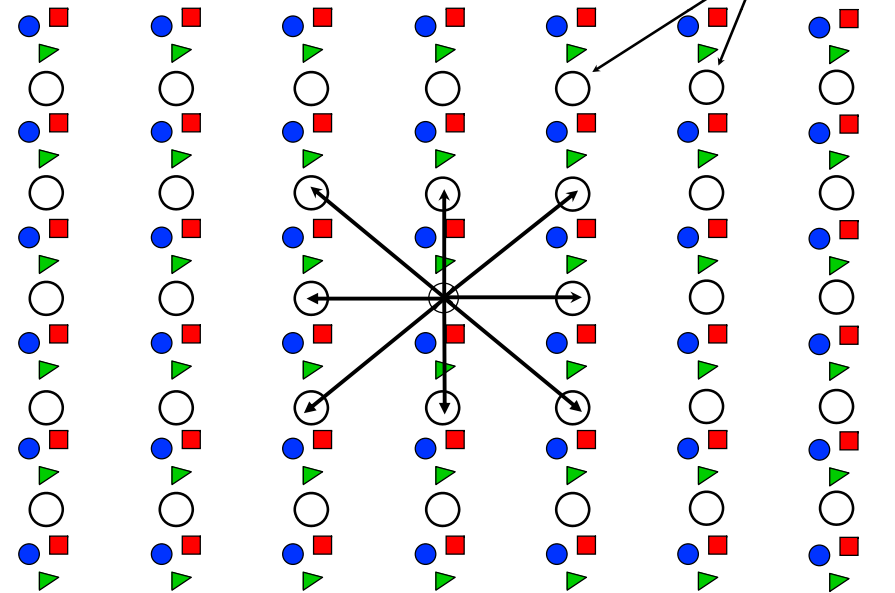
周期的な原子配置の例



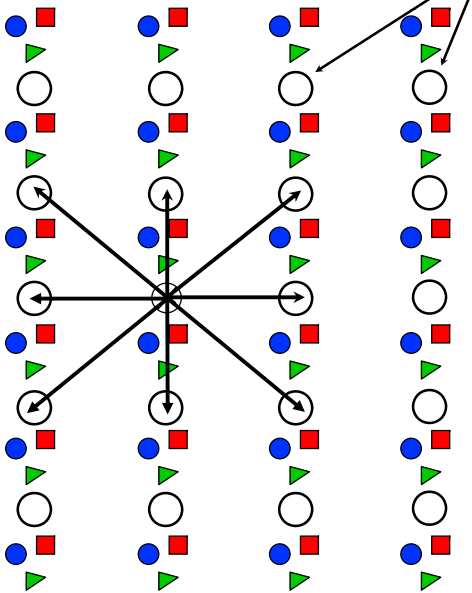
周期的な原子配置の例



周期的な原子配置の例



ブラベー格子 or 空間格子



ブラベー格子は並進操作により作り出されることが分かる。
 ブラベー格子は、基本並進ベクトル

$$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$$

で定義される。原子の配列を点 $\mathbf{r}$ から周囲を眺めた時と、

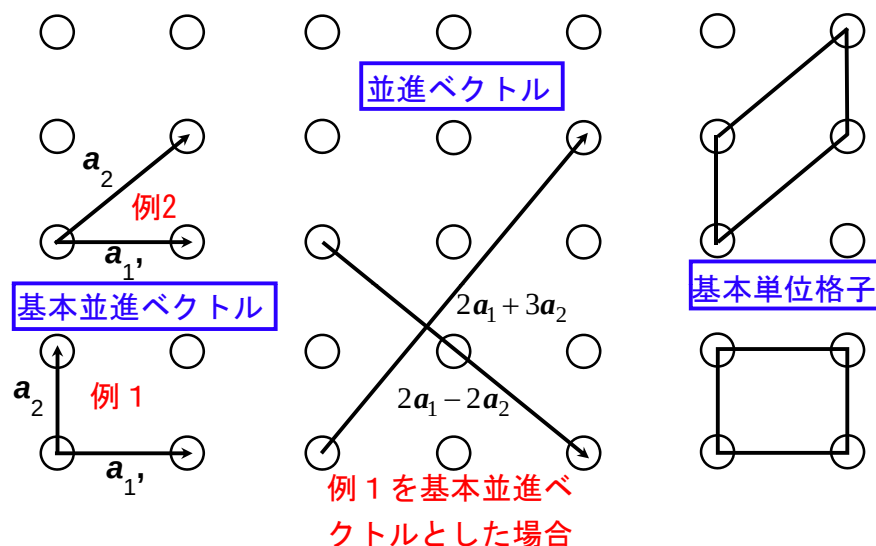
$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

で与えられる $\mathbf{r}'$ から眺めたときとで、同一に見えるようなベクトルが基本並進ベクトルである。言い換えると、すべての

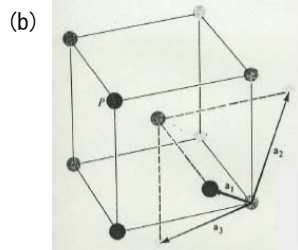
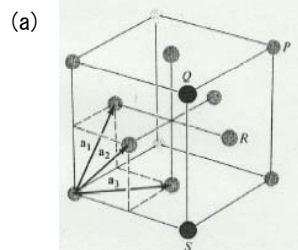
の組で作られる $\mathbf{r}'$ がブラベー格子に対応する。

さらに、"基本"とは、 $\mathbf{r}$ と $\mathbf{r}'$ が常に整数の組で関係づけられることを示す。3本の基本並進ベクトルで作られるブロックは結晶の基本単位格子となる。

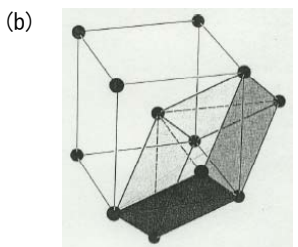
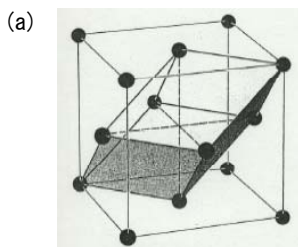
$$n_1, n_2, n_3$$



基本並進ベクトル、並進ベクトル、基本単位格子



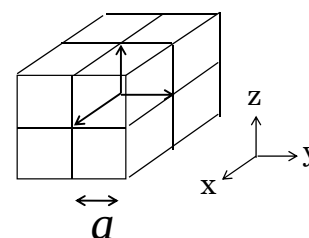
(a) 面心立方格子と(b)体心立方格子の基本並進ベクトル。(アシュクロフト・マーミン：固体物理の基礎より引用)



(a) 面心立方格子と(b)体心立方格子の基本単位格子と慣用単位格子。(アシュクロフト・マーミン：固体物理の基礎より引用)

ブラベー格子と基本単位ベクトルの例

単純立方格子

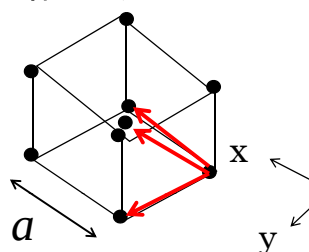


$$\vec{a}_1 = a\hat{x}$$

$$\vec{a}_2 = a\hat{y}$$

$$\vec{a}_3 = a\hat{z}$$

体心立方



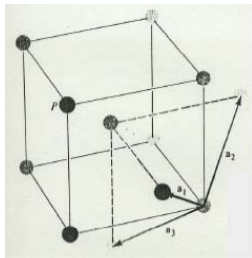
$$\vec{a}_1 = a\hat{x}$$

$$\vec{a}_2 = a\hat{y}$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

ブラベ格子と基本単位ベクトルの例 (2)

体心立方

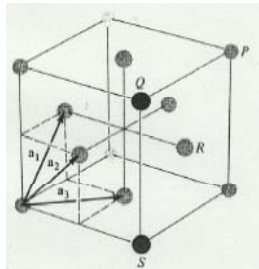


$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z} - \hat{x})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x} - \hat{y})$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

面心立方



$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x})$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})$$

すなわち、結晶構造は、

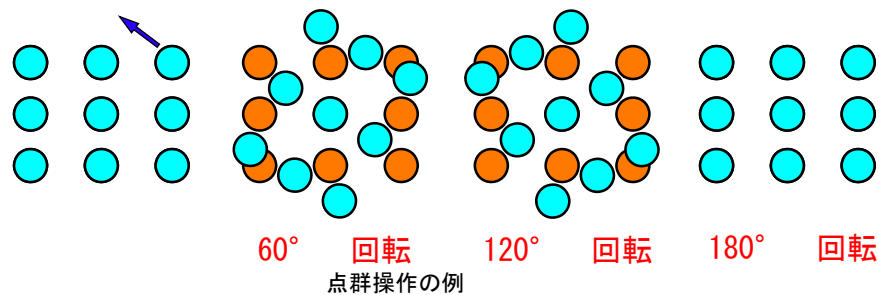
(ブラベ格子) + (単位構造) = (結晶構造)
という関係で表されることになる。

ブラベ格子の並進対称性 (ブラベ格子を並進させて元のブラベ格子に重なるような対称性) は、次のような並進ベクトル (ブラベ格子ベクトル) によって作られる並進操作で決まる。

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

一方、ブラベ格子には、もう一つ大事な対称性がある。それは点群操作と呼ばれる対称操作 (ブラベ格子をそれ自身に移す剛体的な操作) からなるものである。

点群操作とは、一つの格子点を動かさないような操作である。

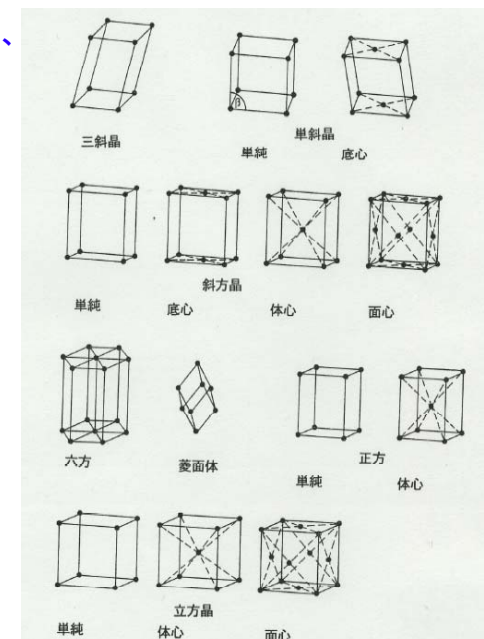


点群操作で区別される結晶形は次の7個である。

各結晶形の基底ベクトルと角 (イバツハ・リュート: 固体物理学より引用)

基底ベクトル	角	結晶軸
$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	三斜
$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta \neq 90^\circ$	単斜
$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	斜方
$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	正方
$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma = 120^\circ$	六方
$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	菱面体
$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	立方

次に、点群操作だけでなく、
並進操作も加えてブラベ格子
の対称性のすべてを考えると、
ブラベ格子は14個の異なる空間群に区別される。



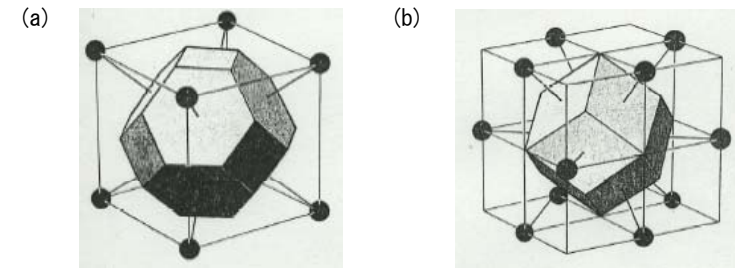
14種類の異なる空間群に属するブラベ格子。(イバツハ・リュート: 固体物理学より引用)

ここまでの話は、**ブラベー格子の対称性**についてであったが、単位構造にも対称性がある（**ブラベー格子は、球のように完全対称性を持つ**）。このことを考えると、結晶は全部で点群操作だけで**32種類**に分類され、並進操作を含めたすべてを考えると**230種類**の異なる空間群に属する。

・基本単位格子と慣用単位格子

基本単位格子は、結晶全体を埋め尽くすことができるが、基本でない単位格子で埋め尽くすこともできる。良く知られた**面心立方格子**や**体心立方格子**は、基本単位格子で考えるより、立方体を基にした（基本でない）慣用単位格子を利用することが多いし分かりやすい。しかし、逆格子を考えるときには、基本単位格子に戻って考える方が容易である。

基本単位格子の取り方には自由度があるが、もっとも結晶の対称性を反映する基本単位格子の作り方として**ウィグナー-サイツ・セル**がある。これは、ある格子点に最も近い空間領域として定義されるものである。

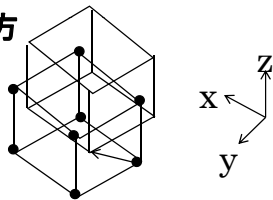


(a) 体心立方格子と (b) 面心立方格子のウィグナー-サイツ・セル。
(アシュクロフト・マーミン：固体物理の基礎より引用)

ウィグナー-サイツ・セルを逆格子空間で作成する場合には、その領域を**ブリルアン領域**と呼んでおり、物質の物性を考える上で非常に重要なものとなる。

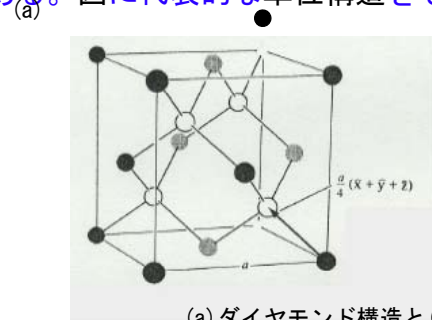
・単位構造を持つ格子

体心立方

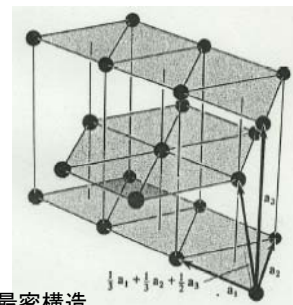


0 と $\frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$ に2個の
格子点を含む立方格子
 $a\hat{x}$ $a\hat{y}$ $a\hat{z}$

結晶構造を考える上で、**単位構造**を持つ格子には注意が必要である。図に代表的な単位構造をもつ結晶構造を示す。



(a) ダイヤモンド構造と (b) 六方最密構造



例) ダイヤモンド構造

A. 基本単位格子

ブラベー格子：

基本並進ベクトル：

単位構造：

面心立方構造

$$a_1 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}), \quad a_2 = \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x}), \quad a_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})$$

$$0, \frac{a}{4}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

B. 慣用単位格子

ブラベー格子：

基本並進ベクトル：

単位構造：

単純立方構造

$$a_1 = a\hat{x}, \quad a_2 = a\hat{y}, \quad a_3 = a\hat{z}$$

$$0, \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y}), \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}), \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x}),$$

$$\frac{a}{4}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}), \frac{a}{4}(3\hat{x} + 3\hat{y} + \hat{z}), \frac{a}{4}(\hat{x} + 3\hat{y} + 3\hat{z}), \frac{a}{4}(3\hat{x} + \hat{y} + 3\hat{z})$$

例) 六方最密構造

ブラベー格子：

基本並進ベクトル：

単位構造：

六方構造

$$a_1 = a\hat{x}, \quad a_2 = \frac{a}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{y}, \quad a_3 = c\hat{z}$$

$$0, \frac{1}{3}a_1 + \frac{1}{3}a_2 + \frac{1}{3}a_3$$