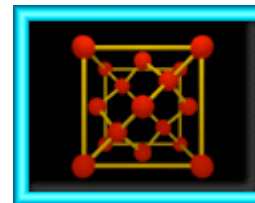
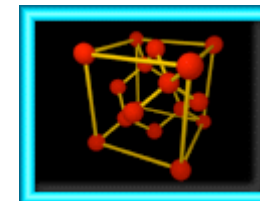
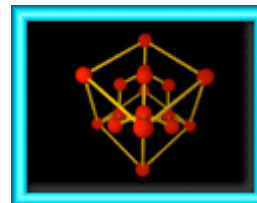
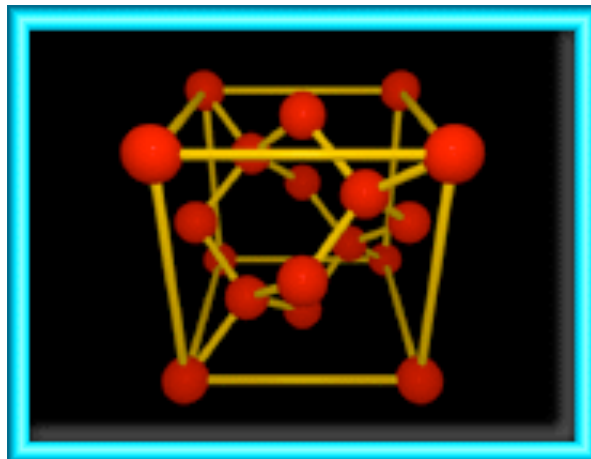


第3回. 結晶構造

固体は結晶からできている

結晶は格子と呼ばれる周期的な構造を持つ

ゆえに、その性質（物性）は、
格子の周期性を強く反映する。



ダイヤモンドの結晶構造



フーリエ変換 $G(\mathbf{G}) = \int F(\mathbf{R}) e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}} d\mathbf{R}$
を導入し、物質の諸性質を考える。

フーリエ変換は物質の中にある波の周期を見出す変換式

→ 逆格子空間の導入

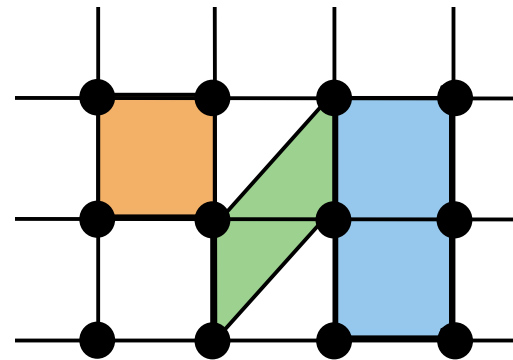
その前に、まずは、実空間の話、、、

I. 単位格子

単位格子 ----- 結晶格子を構成する単位

→ 並進操作により空間をうめつくすることができる。

ex) 2次元正方格子

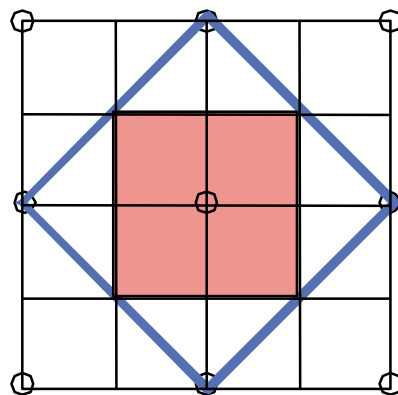


いろいろな単位格子の取り方がある。

II. ウィグナー・サイツセル

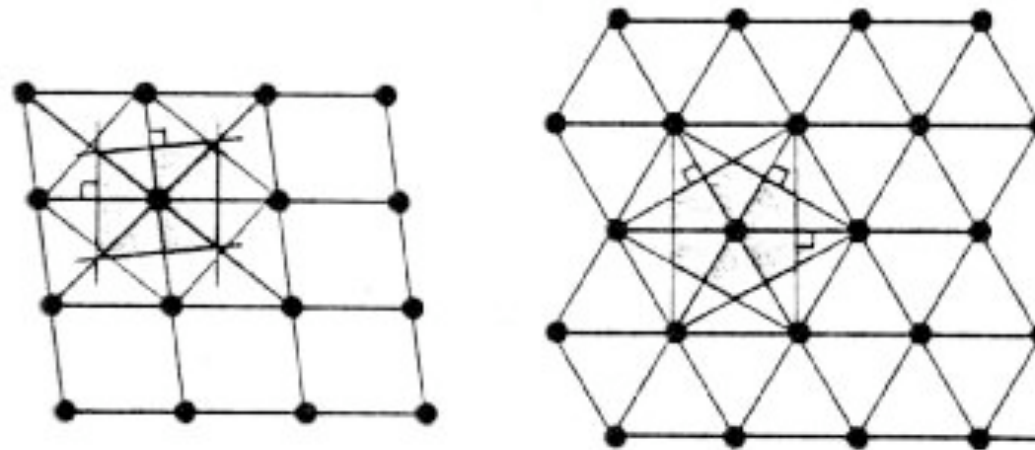
ウィグナー・サイツセル : 簡単な単位胞のを見つけ方

格子点と格子点を結ぶ線分の
垂直二等分線（面）で囲まれる範囲。



→ 単位格子はできるだけ簡単にとり方が望ましい。

ウィグナー・サイツセルの例



ウィグナー・サイツセルの構成

単位格子のうち、最小単位のことを “基本単位格子” と呼ぶ

III. 結晶方位

方位をあらわすミラー指数

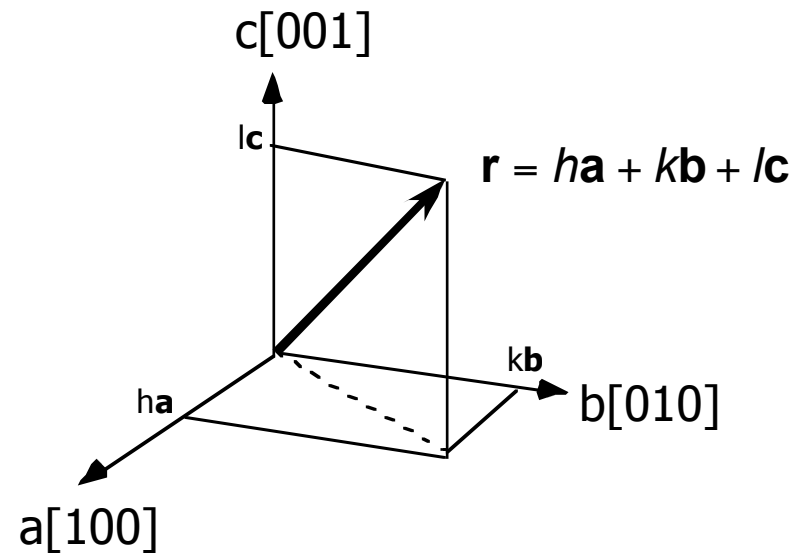
いくつか
練習して
みよう

ex)

$$\mathbf{a} = [1\ 0\ 0]$$

$$\mathbf{b} = [0\ 1\ 0]$$

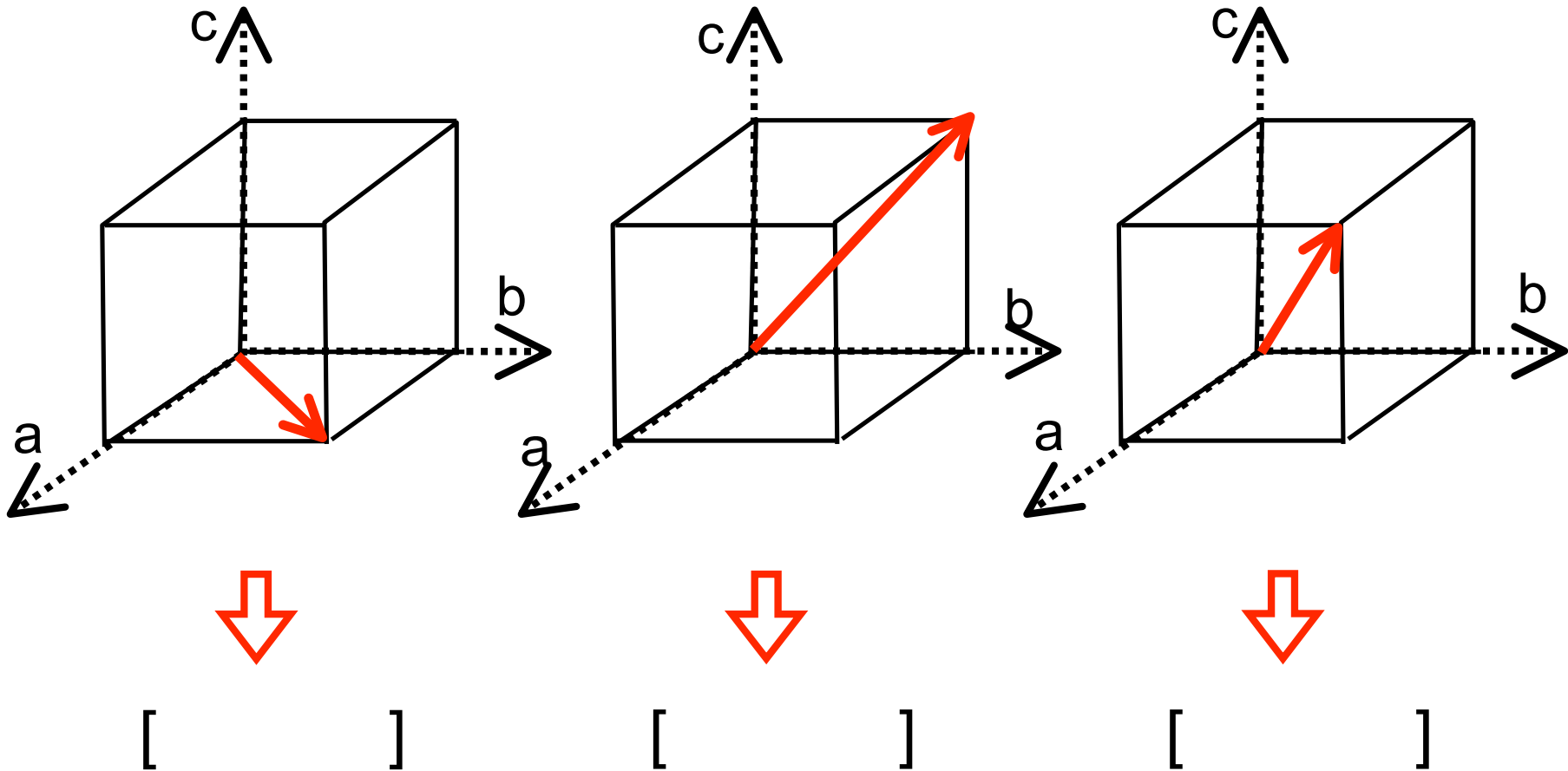
$$\mathbf{c} = [0\ 0\ 1]$$



h, k, l を公約数を持たない整数として、 $[h\ k\ l]$ を方位をあらわすミラー指数

[] かぎカッコ

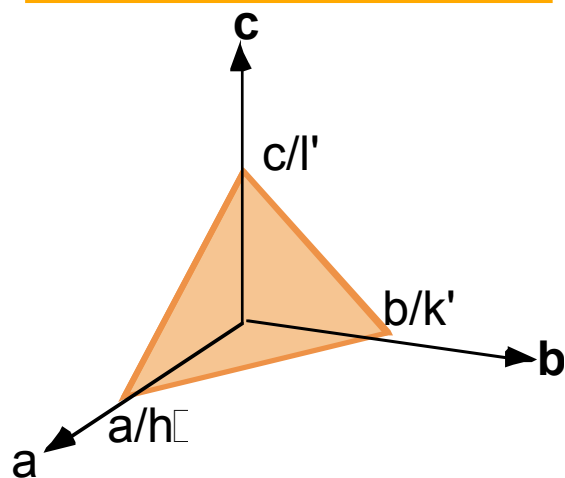
結晶方位（練習問題）いくつか練習してみよう！！



IV. 結晶面

面を表すミラー指数

いくつか
練習して
みよう



h' , k' , l' の比を保つ整数

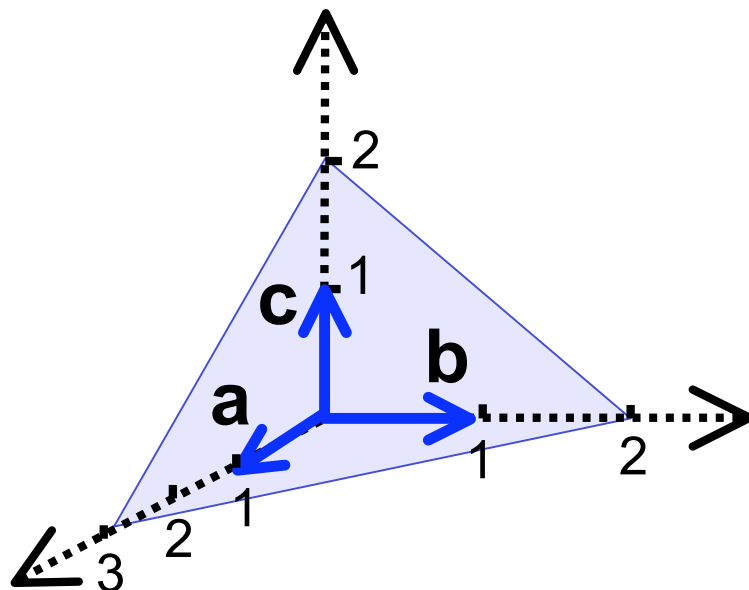
$(h' k' l')$ を面を表すミラー指数

()丸かっこ

$3a$ 、 $2b$ 、 $2c$ 、で軸と交わる。

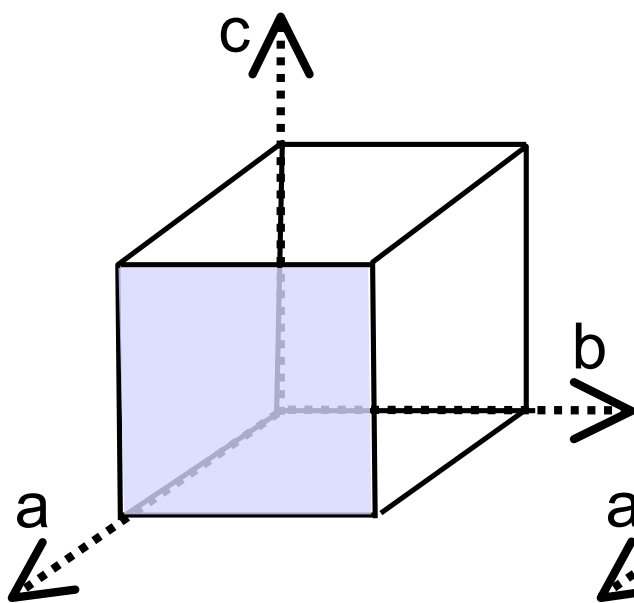
$$\begin{aligned} h' : k' : l' &= \frac{1}{3} : \frac{1}{2} : \frac{1}{2} \\ &= \frac{2}{6} : \frac{3}{6} : \frac{3}{6} \end{aligned}$$

⇒ $(2\ 3\ 3)$ 面

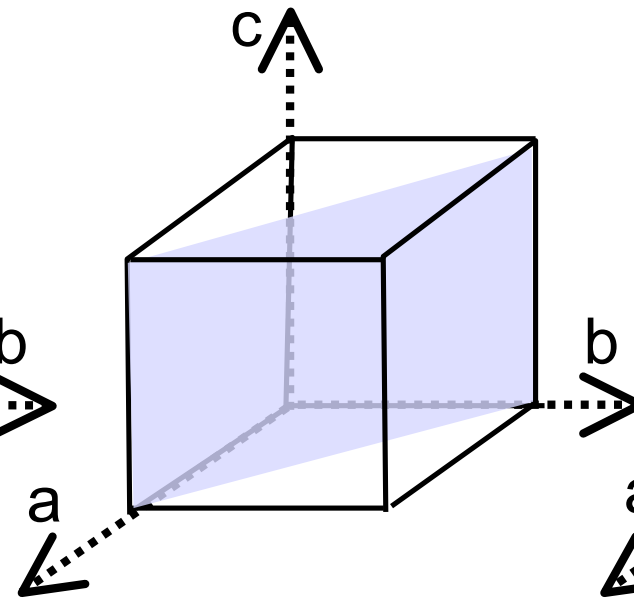


結晶面（練習問題）

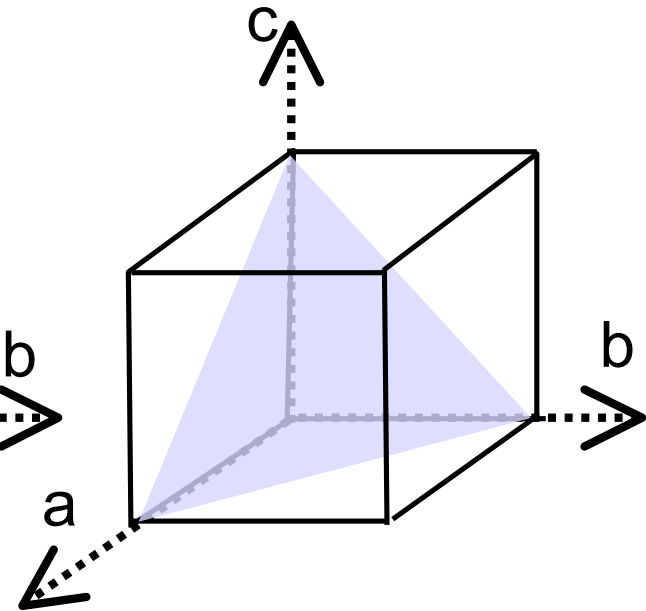
いくつか練習してみよう！！



() 面



() 面



() 面

V. 結晶の対称性について

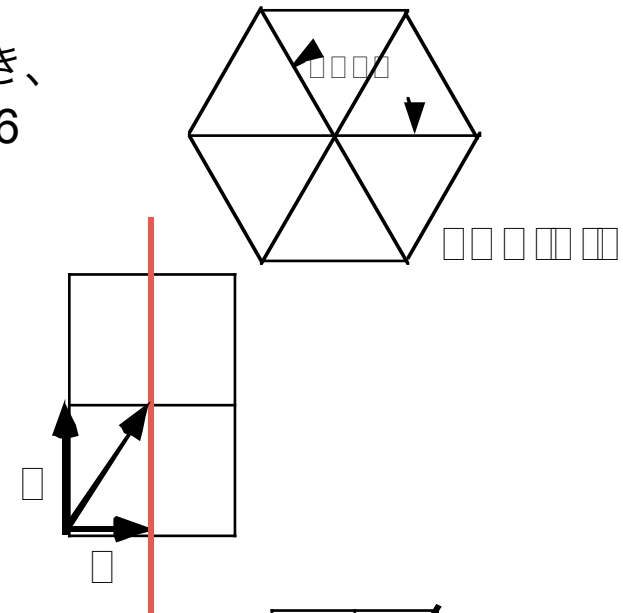
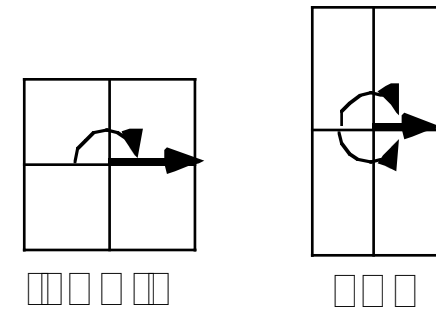
回転対称 ある格子点を中心に回して重なる。
(ただし、360度回転は含まない)

→ n回回転操作を繰り返して元に戻るとき、
“n回回転対称軸”と呼ぶ。 $n=2,3,4,6$

鏡映対称 格子点の配置が格子のある面に対して
左右対称である

反転対称 格子点のある点に対して、各格子点を
等距離の反対側にもっていく。

(回反对称) n回回転対称軸操作 + 反転対称操作



VI. ブラベー格子

“結晶は単位格子の繰り返し”
格子構造を（点群の）対称性により分類

⇒ ブラベー格子と呼ぶ

2次元ブラベー格子	5種類
3次元ブラベー格子	14種類

2次元ブラベー格子

5種類

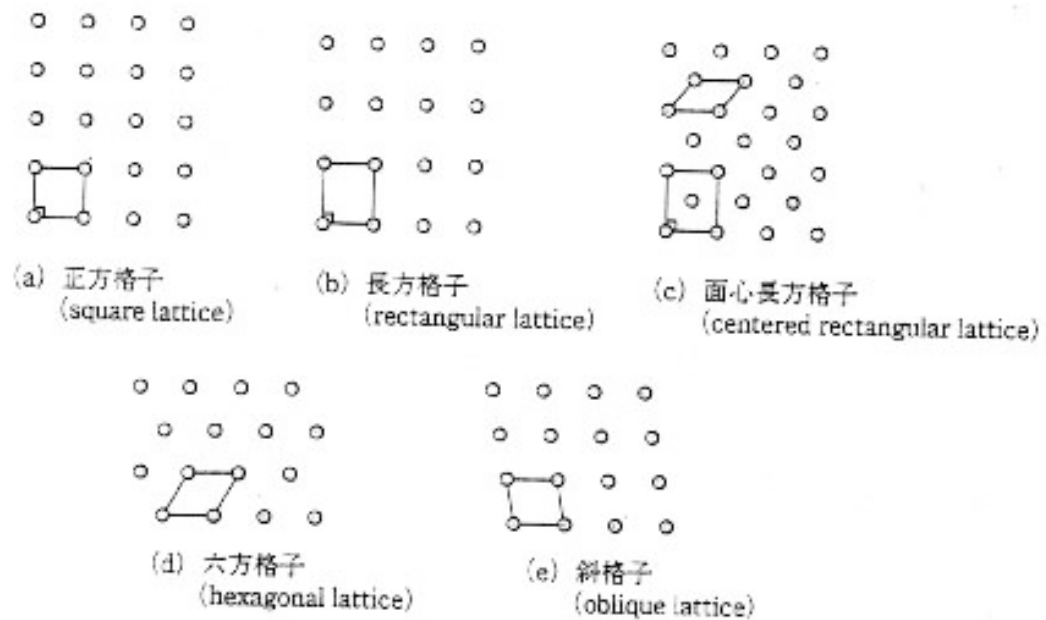


図 2.3 5種類の2次元ブラベー格子.

表 2.1 2次元ブラベー格子の単位胞.

格子	単位胞	単位胞の軸	点群対称性
正方格子	正方形	$a = b, \gamma = 90^\circ$	4 回軸, 鏡映
長方格子	長方形	$a \neq b, \gamma = 90^\circ$	2 回軸, 鏡映
面心長方格子	長方形	$a \neq b, \gamma = 90^\circ$	2 回軸, 鏡映
六方格子	菱形 (頂角 60°)	$a = b, \gamma = 120^\circ$	6 回軸, 鏡映
斜格子	平行四辺形	$a \neq b, \gamma \neq 90^\circ$	2 回軸

3次元ブラベー格子

14種類

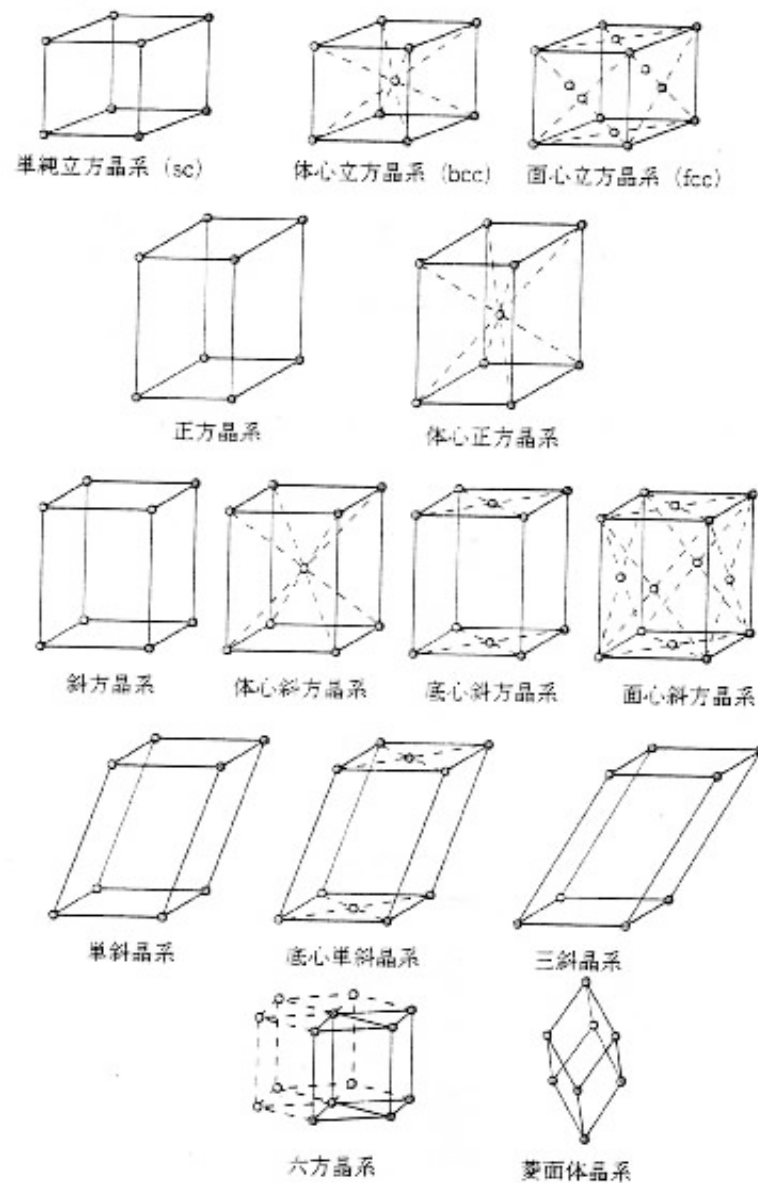


図 2.5 14 種類の 3 次元ブラベー格子.