

序章 pp. 1~3

◎書籍の概要

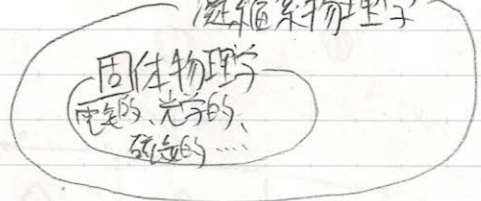
- ・初歩から学ぶ「固体物理学」(矢口裕之著、講談社)
- ・物性論をやりたいなと思って、評判よさそうな本を選んだ。
- ・代数/幾何学(ベクトルの扱い)、電磁気学については well-known の前提で書かれている。

○固体物理学とは?

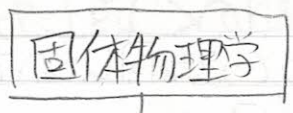
固体物理学: 固体の物理的性質を扱う物理学
(ちがめて物性という)

凝縮系物理学

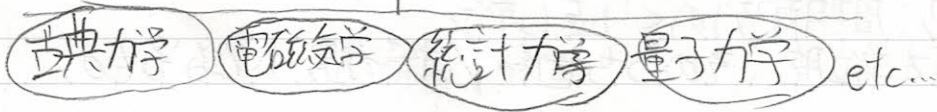
たとえば、電子機器の中では多数の固体の
種々の物性が活用されている



どう活用するのか? どう動作するのか?
それを理解するための 比較的応用的な学問



基礎



ただし.....

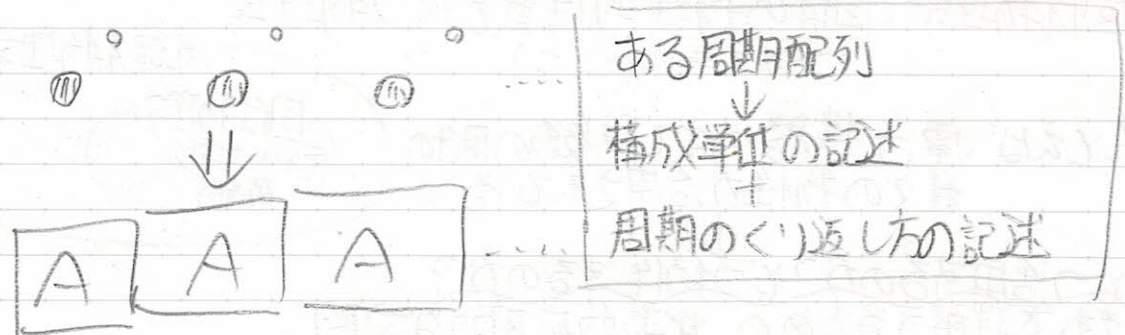
歴史的に古典論で扱われた話(電気的特性など)は
意外と量子論でも変わらない結果にいたりする

その場その場によって古典論と量子論を使いわけ。
(目的はあくまで「物性の活用」のため。)

結晶構造 pp.4~20

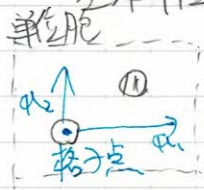
結晶: 原子・分子が3次元空間で周期的に配列したもの。
 結晶の構造で物性は変わる。
 (例) 同じ炭素のみの結晶だが
 ダイヤモンドは絶縁体で黒鉛は導体

格子
 格子: 結晶内のくり返し方を記述するための概念



*結晶相手なら、格子で周期のくり返し方が正確に記述されていれば、構成単位はどうしても同じものを表すはず。
 なので格子を使った記述を行う。

• 単位胞: 周期配列のくり返し単位
 ↳ 基本単位胞: そのうち面積/体積が最小となるもの

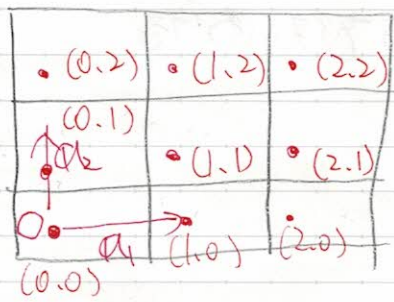


単位胞の中の点(格子点)を決め、その隣の単位胞の格子点までつなぐと、それは結局格子になる。

ある格子の格子点を原点(ゼロベクトル)とすると、特定の格子点を

$$R_n = n_1 a_1 + n_2 a_2 \quad (n_1, n_2 \text{ は整数})$$

で表せるベクトル空間ができる。
 このときの単位ベクトル a_1, a_2 を
 基本並進ベクトルという。



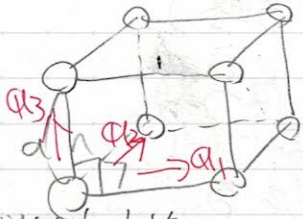
格子のくり返しを示す R_n も当然ベクトルなので、
 ベクトルのできる取り扱いは格子でも成立する。
 (並進対称性、並進不変性...)

当然、基本並進ベクトルを1本増やせば3次元の結晶にも対応する

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

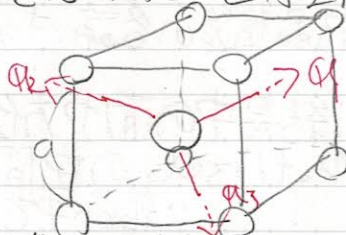
○3次元空間格子の例

※以下、特筆なければ $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ は現実の直交座標の単位ベクトル。



単体立方格子

$$\mathbf{a}_1 = \mathbf{e}_x \quad \mathbf{a}_2 = \mathbf{e}_y \quad \mathbf{a}_3 = \mathbf{e}_z$$



体心立方格子

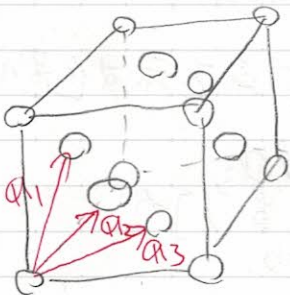
$$\begin{cases} \mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(-\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z) \\ \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z) \\ \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y - \mathbf{e}_z) \end{cases}$$

または

$$\mathbf{a}_1 = a\mathbf{e}_x \quad \mathbf{a}_2 = a\mathbf{e}_y \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z)$$

※並進ベクトルのとり方は通りではない。
見たいものに合わせ臨機応変にするのがよい。

※ブラッグ格子: こういう格子のうち、
現実にはある14種のこ。



面心立方格子

$$\begin{cases} \mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z) \\ \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_z + \mathbf{e}_x) \\ \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y) \end{cases}$$

	単体	体心	体心	面心
三射	○			
単射	○	○		
直方	○	○	○	○
六方	○			
三方	○			
正方	○		○	
立方	○		○	○

"○"がついているのが存在する。
つまりブラッグ格子であるもの。

※ウィグナー=サイツ胞: 格子の各辺の
二等分点で取り直した単位胞。

- 慣用単位胞: 基本単位胞は最小にはなるが普通わかりにくいので、もう少し大きくてもわかりやすく取った単位胞のこと。
(以下、このノートでは「単位胞」と書いたら基本的にこちらを指す。)

(pp.13~17は結晶構造の各論、キッテル漁りらしいので省略。)

- ミラー指数: 結晶中の面や方位を指定するのに使う数。

$R = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$ の空間を張っている結晶に対し、

結晶中を切るある面を考える。

それが各基本ベクトル u, v, w 倍の位置で座標と交わるとする。

(u, v, w) のそれぞれを整数倍し、

互いに素である整数の組 (h, k, l) を求める。
* $(h, k, l) = (vw, wu, uv)$ であるか
限らない、割れないところまで割っておく
必要がある。

こうして成る (h, k, l) の組は必ず一通りになる。面をまたぐためのミラー指数。

一方、同じ束で特定の点を示す位置ベクトル

h, k, l は

$$A = h a_1 + k a_2 + l a_3$$

となる。このときの $[h, k, l]$ が方位を示すミラー指数。

一部の結晶では(特に回転対称性のあるもの)

補助的に基本ベクトル c を追加で導入して、

ミラー指数を (h, k, l, m) / $[h, k, l, m]$ とすることも有る。

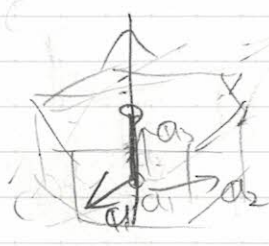
~pp.20 演習問題~

- 2.1 $\text{CaF}_2 \Rightarrow$ 立方晶・面心立方構造
- 2.2 $\text{MgF}_2 \Rightarrow$ 立方晶・体心立方構造
- 2.3 $\text{BaTiO}_3 \Rightarrow$ 立方晶・体心立方構造
- 2.4 $\text{Cu}_2\text{O} \Rightarrow$ 立方晶・面心立方構造
- 2.5 $\text{MgB}_2 \Rightarrow$ 六方晶・単純格子



↑ ここまではクダリ、ソースが間違っていない場合は合ってる。
2.6 簡単のため立方晶前提として、

$$R = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3 \quad \text{と回転軸平行のCを仮定}$$



直交座標に直すと、

$$\begin{cases} a_1 = a e_x \\ a_2 = a \left(-\frac{1}{2} e_x + \frac{\sqrt{3}}{2} e_y \right) \\ a_3 = a \left(-\frac{1}{2} e_x - \frac{\sqrt{3}}{2} e_y \right) \end{cases}$$

よって、 $a_1 + a_2 = \frac{a}{2} e_x + \frac{\sqrt{3}a}{2} e_y = -a_3$ となるため、
実際には a_3 は空間を張っていない。
そのため、 $(h \ k \ -(h+k) \ m)$ という形の組しが許されることになる。

2.7	^{12}C	3.56Å	周期表の ↓ 下に行くほど(殻が埋まるほど) 格子定数は大きくなる。
	^{14}Si	5.43Å	
	^{32}Ge	5.67Å	