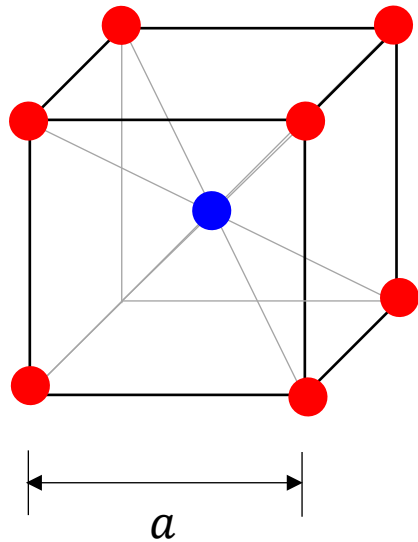


# 電子物性2 第9回目

# 3-5 bccおよびfcc格子のブリルアン・ゾーン

体心立方格子  
(Body-centered cubic  
lattice)



(a)立方格子 (格子定数 $a$ )  
の単位胞

実空間

(a)立方格子 (格子定数 $a$ ) の単位胞

2 個の原子を含む

体積 $V = a^3$

1原子当たりの体積 $\frac{1}{2}a^3$

(b)bcc格子の基本並進ベクトルを用いて作った単位胞  
・・・基本格子or単純格子 1つの格子点 (原子) )

$$\mathbf{a}_1 = \left(\frac{a}{2}\right) (-\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z)$$

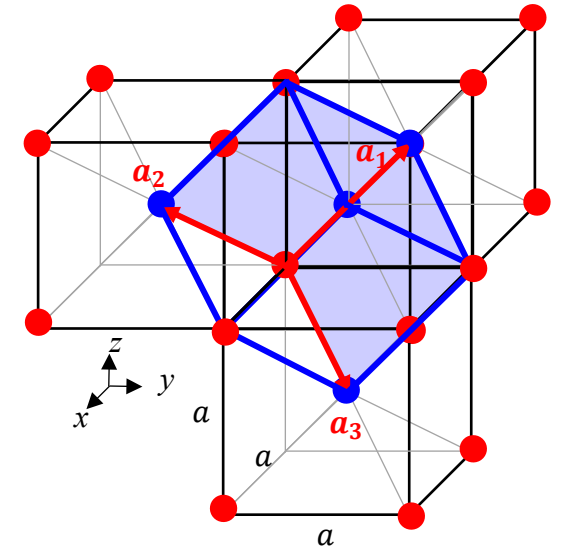
$$\mathbf{a}_2 = \left(\frac{a}{2}\right) (+\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z)$$

$$\mathbf{a}_3 = \left(\frac{a}{2}\right) (+\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y - \mathbf{e}_z)$$

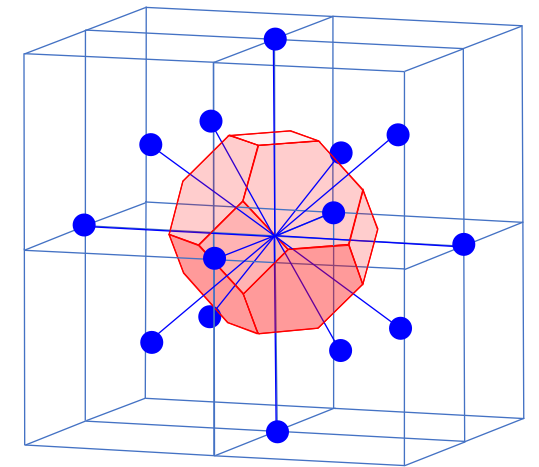
$$\begin{aligned} \text{体積} &= |\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)| = \left(\frac{a}{2}\right)^3 \begin{vmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{vmatrix} \\ &= \left(\frac{a}{2}\right)^3 \times 4 = \frac{a^3}{2} \end{aligned}$$

(c)ウィグナー・ザイツ・セル

8枚の $\{111\}$ 面と 6 枚の $\{002\}$ 面からなる多面体



(b)bcc格子の単位胞



(c)ウィグナー・ザイツ・セル

bcc格子のブリルアン・ゾーン  
逆格子空間における基本並進ベクトル

$$\begin{aligned}\mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z) \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_z) \\ \mathbf{b}_3 &= \frac{2\pi(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y)\end{aligned}$$

よって逆格子点の位置は、

$$\mathbf{g}_{hkl} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3 = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\{(k+l)\mathbf{e}_x + (h+l)\mathbf{e}_y + (h+k)\mathbf{e}_z\}$$

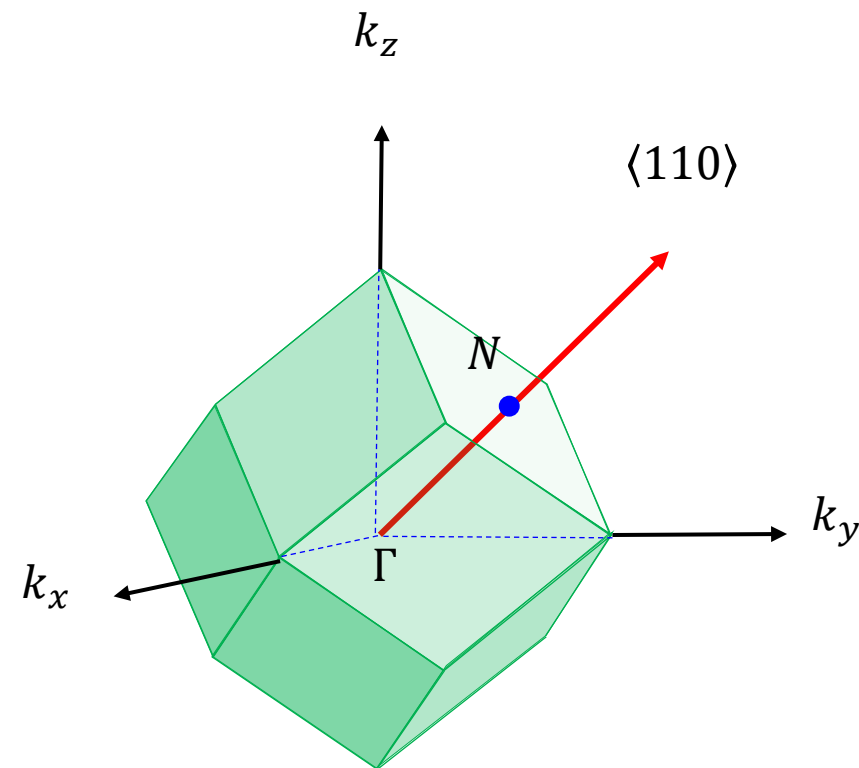
第一ブリルアン・ゾーンは、12本の等価な逆格子点

$$\mathbf{g}_{nn'0} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\{\pm\mathbf{e}_x \pm \mathbf{e}_y\} \quad (n \text{ と } n' \text{ は } 1 \text{ または } -1)$$

$$\mathbf{g}_{n0n'} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\{\pm\mathbf{e}_y \pm \mathbf{e}_z\} \quad (n \text{ と } n' \text{ は } 1 \text{ または } -1)$$

$$\mathbf{g}_{0nn'} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\{\pm\mathbf{e}_z \pm \mathbf{e}_x\} \quad (n \text{ と } n' \text{ は } 1 \text{ または } -1)$$

( $\mathbf{g}_{110}$  で代表。{110}面)の垂直2等分面



bcc格子のブリルアン・ゾーン

bcc格子の第1ブリルアン・ゾーンに詰められる電子数を求める。

第1ブリルアン・ゾーンの体積 $V_B$

$$V_B = |\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)| = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = 2 \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 = \frac{16\pi^3}{a^3}$$

実空間で体積 $V = L^3$ のbcc金属だと仮定すると、逆格子空間は $\frac{2\pi}{L}$ きざみで量子化されている。

$\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$  の体積に伝導電子 2 個が詰められる。

スピン

逆格子空間の単位体積当たり、 $2 \div \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = \frac{2V}{(2\pi)^3}$ 個詰められる。

よって、第1ブリルアン・ゾーンに詰められる伝導電子数は、

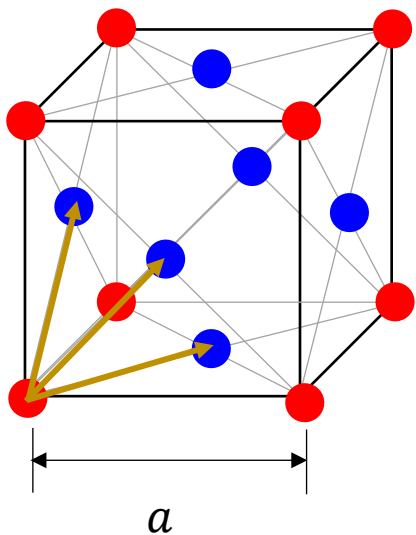
$$\frac{2V}{(2\pi)^3} \times V_B = \frac{2V}{(2\pi)^3} \times \frac{16\pi^3}{a^3} = \frac{4V}{a^3}$$

bcc格子では実空間の体積 $V$ に $V \times \left(\frac{2}{a^3}\right)$ の原子が含まれるので

—— 1 個の原子が占める体積

bcc格子の第1ブリルアン・ゾーンには1原子当たり $\frac{4V}{a^3} \div \frac{2V}{a^3} = 2$ 個の伝導電子を詰めることができる。

# 面心立方格子 (Face-centered cubic lattice)



(a)立方格子 (格子定数 $a$ )  
の単位胞

実空間

(a)立方格子 (格子定数 $a$ ) の単位胞

4個の原子を含む

体積 $V = a^3$

1原子当たりの体積 $\frac{1}{4}a^3$

(b)fcc格子の基本並進ベクトルを用いて作った単位胞

・・・基本格子or単純格子 1つの格子点 (原子) )

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

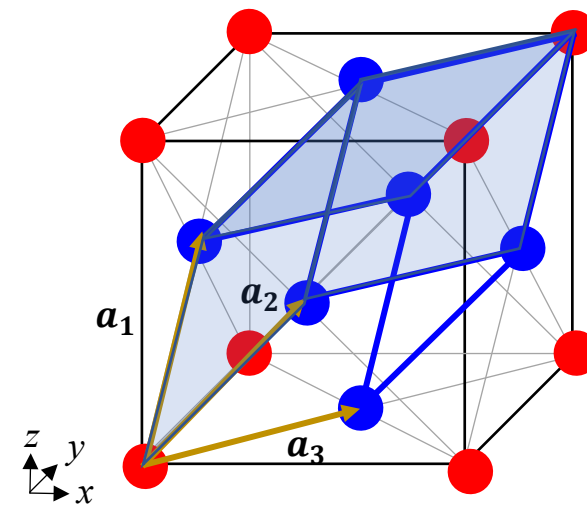
$$\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_z)$$

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

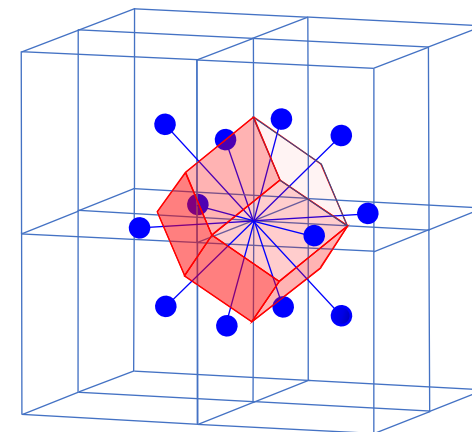
$$\begin{aligned} \text{体積} &= |\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)| = \left(\frac{a}{2}\right)^3 \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} \\ &= \left(\frac{a}{2}\right)^3 \times 2 = \frac{a^3}{4} \end{aligned}$$

(c)ウィグナー・ザイツ・セル

12枚の $\{110\}$ 面からなる多面体



(b)fcc格子の単位胞



(c)ウィグナー・ザイツ・セル

fcc格子のブリルアン・ゾーン  
逆格子空間における基本並進ベクトル

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = \frac{2\pi}{a}(-\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z)$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = \frac{2\pi}{a}(+\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z)$$

$$\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = \frac{2\pi}{a}(+\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y - \mathbf{e}_z)$$

よって逆格子点の位置は、

$$\mathbf{g}_{hkl} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3 = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\{(-h + k + l)\mathbf{e}_x + (h - k + l)\mathbf{e}_y + (h + k - l)\mathbf{e}_z\}$$

第一ブリルアン・ゾーンは、8本の最も原点から近い逆格子点

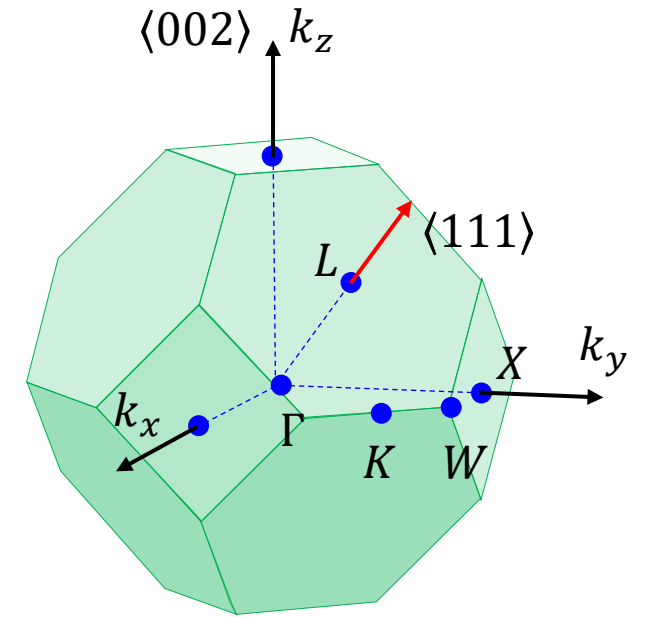
$$\mathbf{g}_{111} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\{\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z\}, \mathbf{g}_{11\bar{1}} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\{\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y - \mathbf{e}_z\}, \mathbf{g}_{1\bar{1}1} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\{\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z\}, \mathbf{g}_{\bar{1}11} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\{-\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z\},$$

$$\mathbf{g}_{\bar{1}\bar{1}1} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\{-\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z\}, \mathbf{g}_{1\bar{1}\bar{1}} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\{\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y - \mathbf{e}_z\}, \mathbf{g}_{\bar{1}1\bar{1}} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\{-\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y - \mathbf{e}_z\}, \mathbf{g}_{\bar{1}\bar{1}\bar{1}} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\{-\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y - \mathbf{e}_z\}$$

から得られる{111}面と、6本の次に近い逆格子点

$$\mathbf{g}_{200} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)(2\mathbf{e}_x), \mathbf{g}_{\bar{2}00} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)(-2\mathbf{e}_x), \mathbf{g}_{020} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)(2\mathbf{e}_y), \mathbf{g}_{0\bar{2}0} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)(-2\mathbf{e}_y), \mathbf{g}_{002} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)(2\mathbf{e}_z), \mathbf{g}_{00\bar{2}} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)(-2\mathbf{e}_z)$$

から得られる{002}面の垂直2等分面に囲まれた領域が第1ブリルアン・ゾーン  
⇒bccのウィグナー・ザイツ・セルと相似



fcc格子のブリルアン・ゾーン

fcc格子の第1ブリルアン・ゾーンに詰められる電子数を求める。

第1ブリルアン・ゾーンの体積 $V_B$

$$V_B = |\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)| = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 \begin{vmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{vmatrix} = 4 \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 = \frac{32\pi^3}{a^3}$$

実空間で体積 $V = L^3$ のfcc金属だと仮定すると、逆格子空間は $\frac{2\pi}{L}$ きざみで量子化されている。

$\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$  の体積に伝導電子2個が詰められる。

スピン

逆格子空間の単位体積当たり、 $2 \div \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = \frac{2V}{(2\pi)^3}$ 個詰められる。

よって、第1ブリルアン・ゾーンに詰められる伝導電子数は、

$$\frac{2V}{(2\pi)^3} \times V_B = \frac{2V}{(2\pi)^3} \times \frac{32\pi^3}{a^3} = \frac{8V}{a^3}$$

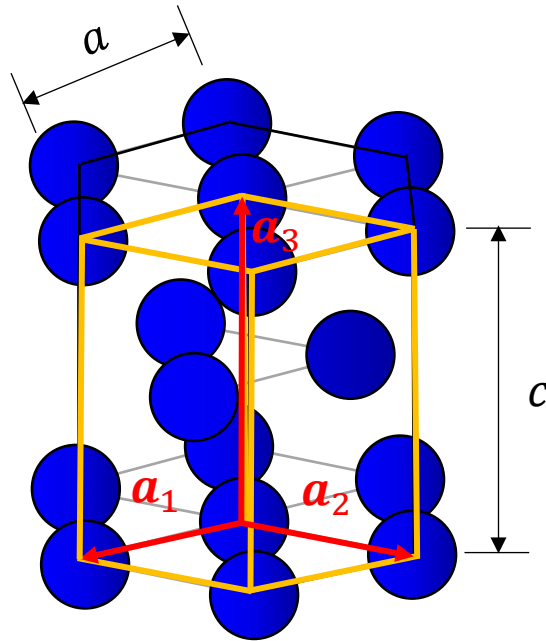
fcc格子では実空間の体積 $V$ に $V \times \left(\frac{4}{a^3}\right)$ 個の原子が含まれるので

1個の原子が占める体積

fcc格子の第1ブリルアン・ゾーンには1原子当たり $\frac{8V}{a^3} \div \frac{4V}{a^3} = 2$ 個の伝導電子を詰めることができる。

## 3-6 hcp格子のブリルアン・ゾーン

六方稠密格子  
(Hexagonal close-packed)



六方最密充填構造

実空間

(a) 六角形の底辺  $c$  面、 $c$  面内の最隣接原子間距離を  $a$  とすると  
軸比  $c/a$  は、剛体球なら 1.633

(b) hcp 格子の基本並進ベクトル

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2} \mathbf{e}_x - \frac{\sqrt{3}a}{2} \mathbf{e}_y$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2} \mathbf{e}_x + \frac{\sqrt{3}a}{2} \mathbf{e}_y$$

$$\mathbf{a}_3 = c \mathbf{e}_z$$

$$\begin{aligned} \text{体積} &= |\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)| = \mathbf{a}_1 \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ \frac{a}{2} & \frac{\sqrt{3}a}{2} & 0 \\ 0 & 0 & c \end{vmatrix} \\ &= \left( \frac{a}{2} \mathbf{e}_x - \frac{\sqrt{3}a}{2} \mathbf{e}_y \right) \cdot \left( \frac{\sqrt{3}ac}{2} \mathbf{e}_x - \frac{ac}{2} \mathbf{e}_y \right) = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c \end{aligned}$$

# hcp格子のブリルアン・ゾーン 逆格子空間における基本並進ベクトル

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = \frac{2\pi}{a} \left( \mathbf{e}_x - \frac{1}{\sqrt{3}} \mathbf{e}_y \right) \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = \frac{2\pi}{a} \left( \mathbf{e}_x + \frac{1}{\sqrt{3}} \mathbf{e}_y \right) \\ \mathbf{b}_3 &= \frac{2\pi(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = \frac{2\pi}{c} \mathbf{e}_z \end{aligned}$$

よって逆格子点の位置は、

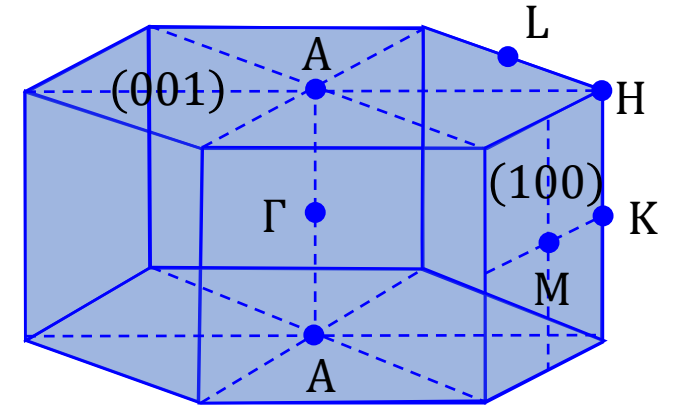
$$\mathbf{g}_{n_1 n_2 n_3} = n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + n_3 \mathbf{b}_3 = 2\pi \left\{ \left( \frac{1}{a} \right) (n_1 + n_2) \mathbf{e}_x + \left( \frac{1}{\sqrt{3}a} \right) (-n_1 + n_2) \mathbf{e}_y + \left( \frac{1}{c} \right) n_3 \mathbf{e}_z \right\}$$

第一ブリルアン・ゾーンは、最も原点から近い逆格子点

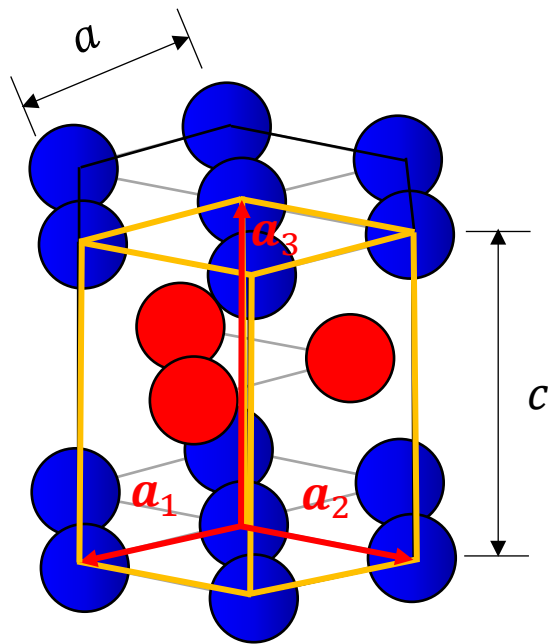
$$\begin{aligned} \mathbf{g}_{100} &= \left( \frac{2\pi}{a} \right) \left\{ \mathbf{e}_x + \left( -\frac{1}{\sqrt{3}} \right) \mathbf{e}_y \right\}, \mathbf{g}_{\bar{1}00} = \left( \frac{2\pi}{a} \right) \left\{ -\mathbf{e}_x + \left( \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \mathbf{e}_y \right\}, \mathbf{g}_{010} = \left( \frac{2\pi}{a} \right) \left\{ \mathbf{e}_x + \left( \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \mathbf{e}_y \right\}, \mathbf{g}_{0\bar{1}0} = \left( \frac{2\pi}{a} \right) \left\{ -\mathbf{e}_x - \left( \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \mathbf{e}_y \right\}, \\ \mathbf{g}_{110} &= \left( \frac{2\pi}{a} \right) \left\{ \left( \frac{2}{\sqrt{3}} \right) \mathbf{e}_x \right\}, \mathbf{g}_{\bar{1}\bar{1}0} = \left( \frac{2\pi}{a} \right) \left\{ -\left( \frac{2}{\sqrt{3}} \right) \mathbf{e}_x \right\}, \mathbf{g}_{001} = \left( \frac{2\pi}{c} \right) \mathbf{e}_z, \mathbf{g}_{00\bar{1}} = \left( \frac{2\pi}{c} \right) (-\mathbf{e}_z) \end{aligned}$$

の垂直2等分面  $\Rightarrow$  側面6枚の{100}面と上下2枚の{001}面

hcpには中央に原子面が存在するので、第1ブリルアン・ゾーンの{001}面はギャップが消失するのでもう少し大きなゾーンを取る必要がある。



hcp格子の第1ブリルアン・ゾーン



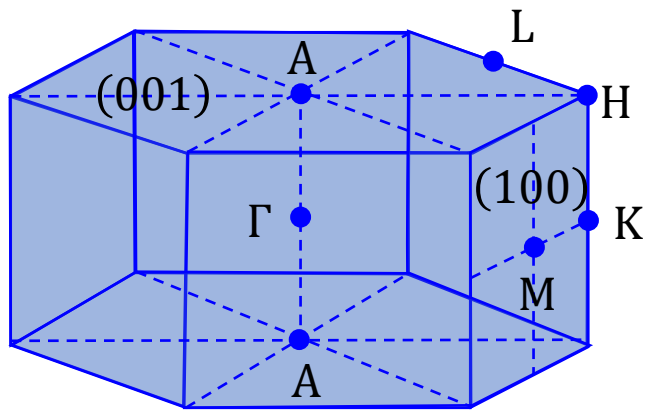
hcpの{001}面間で回折するはずのX線が中央の原子面との間で180°位相がずれて干渉するためギャップが消失する。

第2ブリルアン・ゾーンは、2枚の{002}面、12枚の{101}面、6枚の{100}面で構成される。

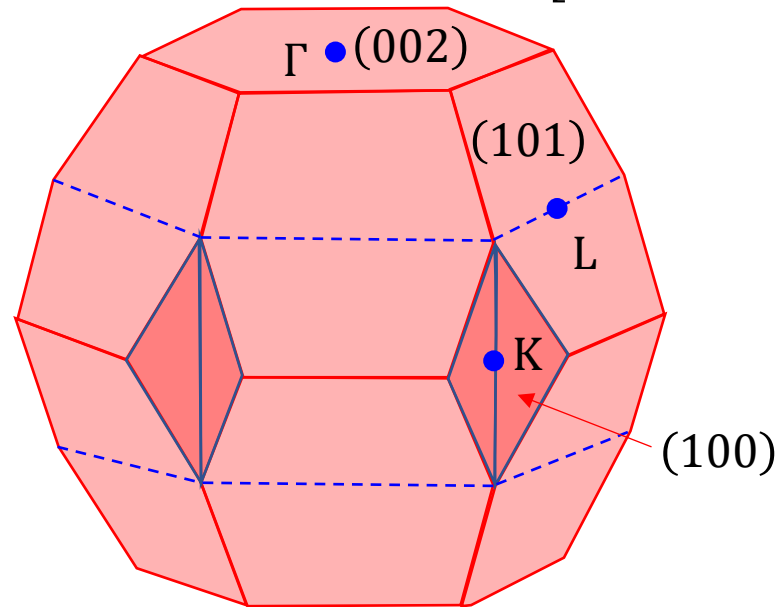
Γ点から見た最初に現れるエネルギー・ギャップ面は第1ゾーンと第2ゾーンの組み合わせたジョーンズ・ゾーンで生じる。

ジョーンズ・ゾーンに詰められる電子数は1原子当たり、

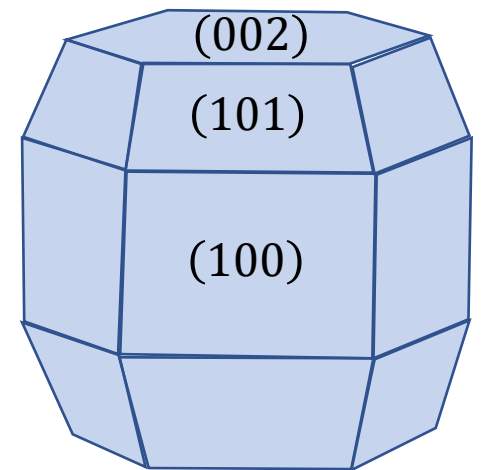
$$n = 2 - \frac{3}{4} \left( \frac{a}{c} \right)^2 \left[ 1 - \frac{1}{4} \left( \frac{a}{c} \right)^2 \right]$$



hcp格子の第1ブリルアン・ゾーン



hcp格子の第2ブリルアン・ゾーン



ジョーンズ・ゾーン