

付録 2.A ブリルアンゾーン

14 種類のブラベー格子のブリルアンゾーンの図をまとめて示す。各図でブリルアンゾーンの外に延びている実線が a^* , b^* , c^* 軸で、手前左に延びた軸が a^* 軸、手前右に延びた軸が b^* 軸、上に延びた軸が c^* 軸である。ブリルアンゾーンの面のエッジや角で終る対称軸はブリルアンゾーンの外部に出て隣のゾーンに入ると一般に名前が変わる。各図には対称軸を外に延ばしてどの軸になるかを示す補助線が点線で描かれている。

また、各図には対称点、対称軸が示してあるが、それらの座標 — a^* , b^* , c^* 成分 — を図の横に示している。対称軸の座標にはパラメーターを含んでいるが、その値の範囲はそれぞれの軸の端にある対称点の座標から読みとれる。端が対称点で終わっていない軸は、このパラメーターの範囲、つまり、軸の長さが格子定数によって変るものである。

最初の 3 つの立方格子と三方格子以外の単純格子ではその形が格子定数によらないが、その他のものは格子定数によって形が変るものがある。形は変らないまでもブリルアンゾーン内に現れる対称軸が変わる。これらでは複数の図が示され、その形になる格子定数の範囲が示される。

単純立方格子

Γ	(0 0 0)
X	(1/2 0 0)
M	(1/2 1/2 0)
R	(1/2 1/2 1/2)
Δ	(ξ 0 0)
Σ	(ξ ξ 0)
Λ	(ξ ξ ξ)
Z	(1/2 ξ 0)
S	(1/2 ξ ξ)
T	(1/2 1/2 ξ)

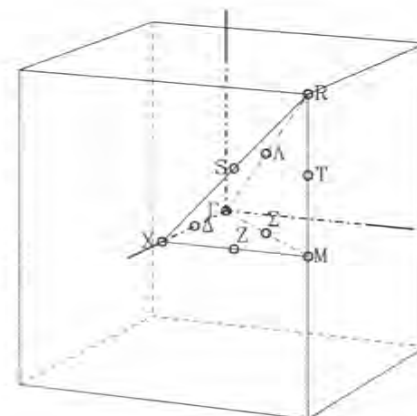


図 A.1 単純立方格子のブリルアンゾーン

面心立方格子

Γ	(0 0 0)
X	(1 0 0)
W	(1 1/2 0)
L	(1/2 1/2 1/2)
K	(3/4 3/4 0)
U	(1 1/2 1/2)
Δ	(ξ 0 0)
Σ	(ξ ξ 0)
Λ	(ξ ξ ξ)
Z	(1 ξ 0)
S	(1 ξ ξ)
Q	(1/2 + ξ 1/2 (1 - ξ))

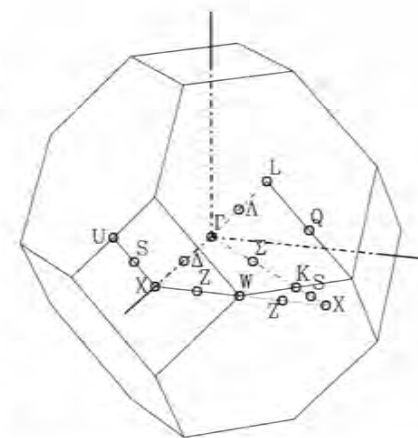
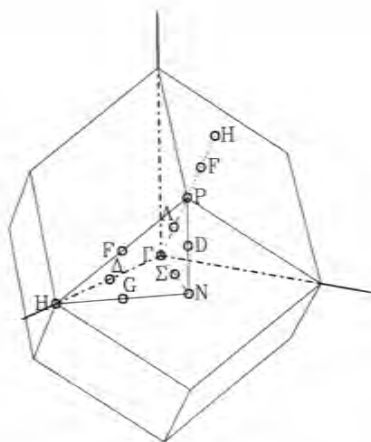


図 A.2 図では重なりを防ぐために S 軸を座標に示した場所ではなくその星の $(1 - \xi, \xi)$ にしてある。Σ 軸は K 点で外に出て S 軸につながる。K と U は互いに相手の星になっていて本来同じ名前をつけるべきである。また、この 2 つの点は Σ 軸と同じ対称性をもっており、対称点としての資格をもっていない。この 2 つの事項は論理的には少しおかしいが、慣習にしたがっている。

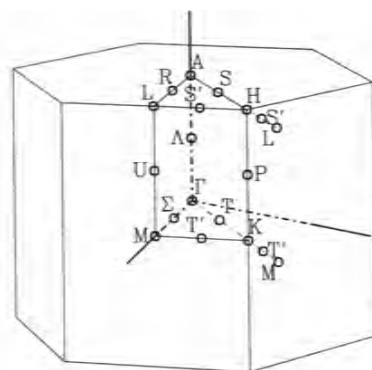
体心立方格子

Γ	(0 0 0)
H	(1 0 0)
N	(1/2 1/2 0)
P	(1/2 1/2 1/2)
Δ	(ξ 0 0)
Σ	(ξ ξ 0)
Λ	(ξ ξ ξ)
D	(1/2 1/2 ξ)
F	(1- ξ ξ ξ)
G	(1- ξ ξ 0)

図 A.3 図に示すように Λ 軸は外に出て F 軸につながる。

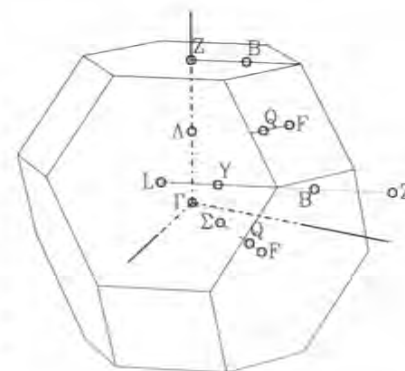
六方格子

Γ	(0 0 0)
A	(0 0 1/2)
K	(1/3 1/3 0)
M	(1/2 0 0)
H	(1/3 1/3 1/2)
L	(1/2 0 0)
Σ	(ξ 0 0)
Λ	(0 0 ξ)
T	(ξ ξ 0)
T'	(1/2- ξ 2 ξ 0)
R	(ξ 0 1/2)
S	(ξ ξ 1/2)
S'	(1/2- ξ 2 ξ 1/2)
U	(1/2 0 ξ)
P	(1/3 1/3 ξ)

図 A.4 T 軸は外に出て T' 軸に, S 軸は S' 軸につながる。この晶系では a^* 軸と b^* 軸が 60 度の傾きをもっているため、座標値が少し複雑になっている。

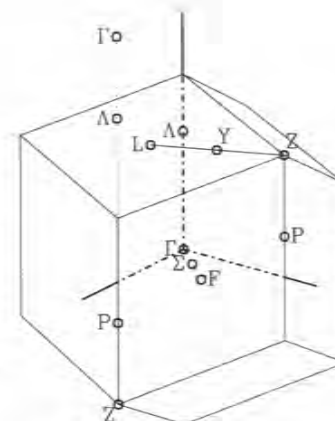
三方格子 1
 $\sqrt{2} a < \sqrt{3} c$

Γ	(0 0 0)
Z	(0 0 3/2)
F	(0 1/2 1)
L	(1/2 0 1/2)
Σ	(ξ ξ 0)
Λ	(0 0 ξ)
Q	(2 ξ 1/2- ξ 1)
Y	(1/2- ξ 2 ξ 1/2)
B	(- ξ 2 ξ 3/2)

図 A.5 Σ 軸は外に出て Q 軸に, Y 軸は B 軸につながる。この晶系では a^* 軸も b^* 軸も対称軸にならない。

三方格子 2
 $\sqrt{2} a > \sqrt{3} c$

Γ	(0 0 0)
Z	(0 1 1/2)
F	(1/2 1/2 0)
L	(1/2 0 1/2)
Σ	(ξ ξ 0)
Λ	(0 0 ξ)
Y	(1/2- ξ 2 ξ 1/2)
P	(-1 0 ξ)

図 A.6 c が小さく, c^* が大きくなると, Λ 軸が途中で外に出て P 軸につながる。図では P 軸が 2 つ示してあるが、この 2 つは S_6 の対称操作で互いに相手の星になる。ブリルアンゾーンの外に描いてある Λ 軸は内部でいえば Γ 点の下に延びたものである。

単純正方格子

Γ	(0 0 0)
X	(1/2 0 0)
Z	(0 0 1/2)
M	(1/2 1/2 0)
R	(1/2 0 1/2)
A	(1/2 1/2 1/2)
Δ	(ξ 0 0)
Σ	(ξ ξ 0)
Λ	(0 0 ξ)
Y	(1/2 ξ 0)
U	(ξ 0 1/2)
S	(ξ ξ 1/2)
T	(1/2 ξ 1/2)
W	(1/2 0 ξ)
V	(1/2 1/2 ξ)

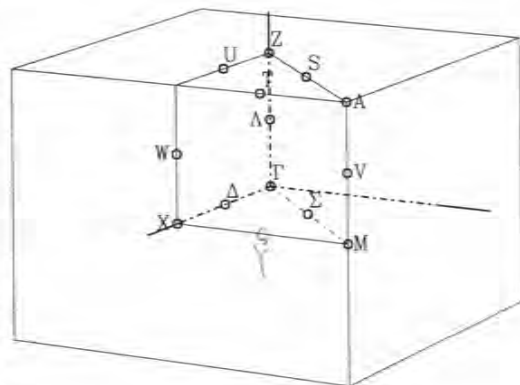


図 A.7 単純正方格子のブリルアンゾーン

体心正方格子1

$$a < c$$

Γ	(0 0 0)
Z	(0 0 1)
X	(1/2 1/2 0)
N	(1/2 0 1/2)
P	(1/2 1/2 1/2)
Δ	(ξ ξ 0)
Σ	(ξ 0 0)
Λ	(0 0 ξ)
Y	(1 - ξ ξ 0)
F	(ξ 0 1)
U	(ξ ξ 1)
W	(1/2 1/2 ξ)
Q	(1/2 ξ 1/2)

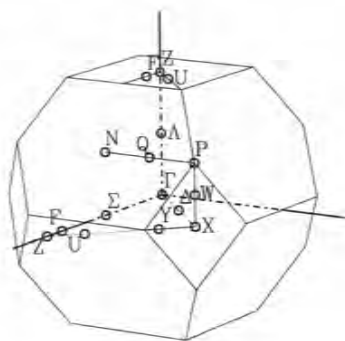


図 A.8 Σ 軸が外に出て F 軸に、Y 軸が外に出て U 軸につながる。単純正方格子と Δ 軸と Σ 軸が入れかわり、(1/2 1/2 0) の点が X になっている。体心正方格子の逆格子は面心格子になるが、正方格子であるために軸を 45 度回転してみると a^* が $1/\sqrt{2}$ の体心格子になる。このことを考えて慣習的に 45 度回転して見ることが行われるためにこのような名前がつけられる。

体心正方格子2

$$a > c$$

Γ	(0 0 0)
Z	(1 0 0)
X	(1/2 1/2 0)
N	(1/2 0 1/2)
P	(1/2 1/2 1/2)
Δ	(ξ 0 0)
Σ	(ξ ξ 0)
Λ	(0 0 ξ)
Y	(1 - ξ ξ 0)
W	(1/2 1/2 ξ)
V	(1 0 ξ)
Q	(1/2 ξ 1/2)

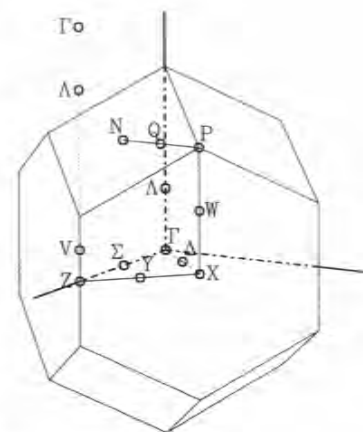


図 A.9 c が小さく、 c^* が大きくなると、 Λ 軸が途中で外に出て V 軸につながる。(1 0 0) の点が Z になるのに注意しなければならない。

単純直方格子

Γ	(0 0 0)
X	(1/2 0 0)
Y	(0 1/2 0)
Z	(0 0 1/2)
S	(1/2 1/2 0)
U	(1/2 0 1/2)
T	(0 1/2 1/2)
R	(1/2 1/2 1/2)

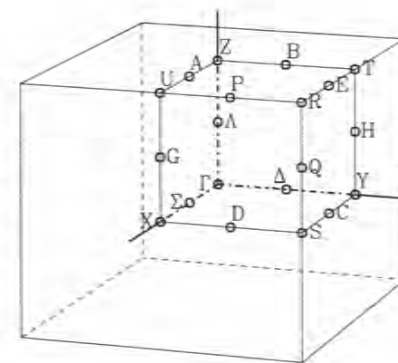


図 A.10 図から明らかであるので対称軸の座標は省略してある。

面心直方格子1

$$1/a^2 < 1/b^2 + 1/c^2$$

$$|1/b^2 - 1/c^2| < 1/a^2$$

$$\Gamma (0 \ 0 \ 0)$$

$$X (1 \ 0 \ 0)$$

$$Y (0 \ 1 \ 0)$$

$$Z (0 \ 0 \ 1)$$

$$L (1/2 \ 1/2 \ 1/2)$$

$$\Sigma (\xi \ 0 \ 0)$$

$$\Delta (0 \ \eta \ 0)$$

$$\Lambda (0 \ 0 \ \xi)$$

$$A (\xi \ 0 \ 1)$$

$$B (0 \ \eta \ 1)$$

$$C (\xi \ 1 \ 0)$$

$$D (1 \ \eta \ 0)$$

$$G (1 \ 0 \ \xi)$$

$$H (0 \ 1 \ \xi)$$

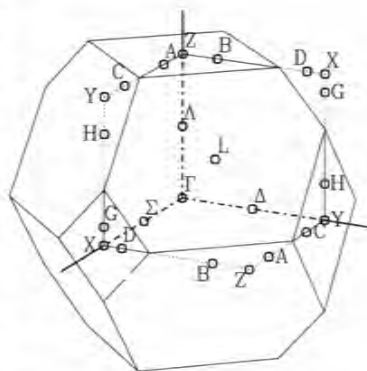


図 A.11 a, b, c が互いに近い値をもっているとき、この図の14面体になる。この場合、境界面上の軸が図のようなつながりをもっている。

面心直方格子2

$$1/a^2 > 1/b^2 + 1/c^2$$

$$\Gamma (0 \ 0 \ 0)$$

$$X (0 \ 1 \ 1)$$

$$Y (0 \ 1 \ 0)$$

$$Z (0 \ 0 \ 1)$$

$$L (1/2 \ 1/2 \ 1/2)$$

$$\Sigma (\xi \ 0 \ 0)$$

$$\Delta (0 \ \eta \ 0)$$

$$\Lambda (0 \ 0 \ \xi)$$

$$B (0 \ \eta \ 1)$$

$$H (0 \ 1 \ \xi)$$

$$A (\xi \ 0 \ 1)$$

$$C (\xi \ 1 \ 0)$$

$$U (\xi \ 1 \ 1)$$

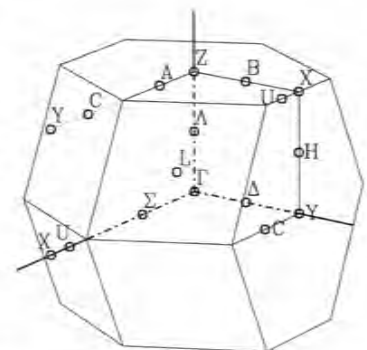


図 A.12 a が小さく、 a^* が大きい場合、 Σ 軸が途中で外に出て、 U 軸につながり、 D, G 軸が消える。

面心直方格子3

$$1/b^2 > 1/a^2 + 1/c^2$$

$$\Gamma (0 \ 0 \ 0)$$

$$X (1 \ 0 \ 0)$$

$$Y (1 \ 0 \ 1)$$

$$Z (0 \ 0 \ 1)$$

$$L (1/2 \ 1/2 \ 1/2)$$

$$\Sigma (\xi \ 0 \ 0)$$

$$\Delta (0 \ \eta \ 0)$$

$$\Lambda (0 \ 0 \ \xi)$$

$$A (\xi \ 0 \ 1)$$

$$G (1 \ 0 \ \xi)$$

$$B (0 \ \eta \ 1)$$

$$D (1 \ \eta \ 0)$$

$$R (1 \ \eta \ 1)$$

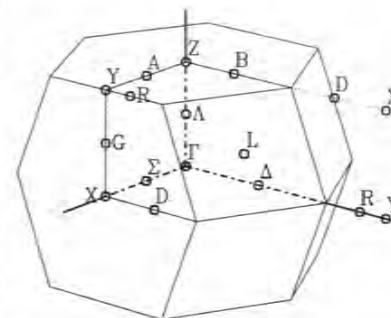


図 A.13 b が小さく、 b^* が大きい場合、 Δ 軸が途中で外に出て、 R 軸につながり、 C, H 軸が消える。

面心直方格子4

$$1/c^2 > 1/a^2 + 1/b^2$$

$$\Gamma (0 \ 0 \ 0)$$

$$X (1 \ 0 \ 0)$$

$$Y (0 \ 1 \ 0)$$

$$Z (1 \ 1 \ 0)$$

$$L (1/2 \ 1/2 \ 1/2)$$

$$\Sigma (\xi \ 0 \ 0)$$

$$\Delta (0 \ \eta \ 0)$$

$$\Lambda (0 \ 0 \ \xi)$$

$$C (\xi \ 1 \ 0)$$

$$D (1 \ \eta \ 0)$$

$$G (1 \ 0 \ \xi)$$

$$H (0 \ 1 \ \xi)$$

$$Q (1 \ 1 \ \xi)$$

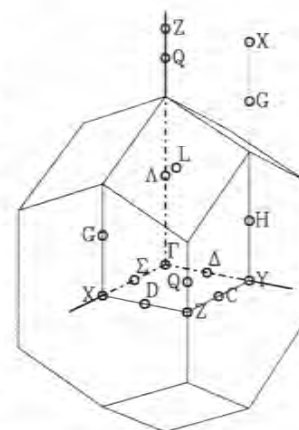


図 A.14 c が小さく、 c^* が大きい場合、 Λ 軸が途中で外に出て、 Q 軸につながり、 A, B 軸が消える。

体心直方格子1

$$a > c, a > b$$

Γ	(0 0 0)
X	(1 0 0)
T	(1/2 1/2 0)
R	(1/2 0 1/2)
S	(0 1/2 1/2)
W	(1/2 1/2 1/2)
Σ	(ξ 0 0)
Δ	(0 η 0)
Λ	(0 0 ξ)
G	(1 0 ξ)
U	(1 η 0)
D	(ξ 1/2 1/2)
P	(1/2 1/2 ξ)
Q	(1/2 η 1/2)

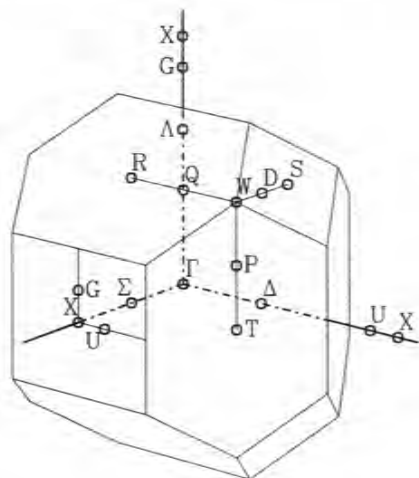


図 A.15 a が大きく、 a^* が小さいとき、 Δ と Λ 軸が途中で外に出て、それぞれ U 軸と G 軸につながる。

体心直方格子2

$$a < b, b > c$$

Γ	(0 0 0)
X	(0 1 0)
T	(1/2 1/2 0)
R	(1/2 0 1/2)
S	(0 1/2 1/2)
W	(1/2 1/2 1/2)
Σ	(ξ 0 0)
Δ	(0 η 0)
Λ	(0 0 ξ)
G	(0 1 ξ)
F	(ξ 1 0)
D	(ξ 1/2 1/2)
P	(1/2 1/2 ξ)
Q	(1/2 η 1/2)

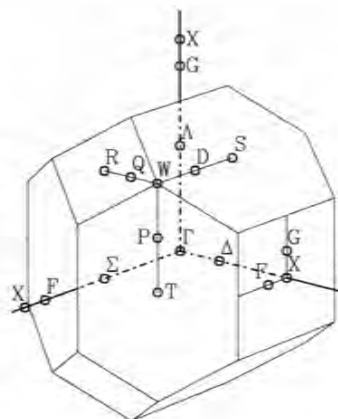


図 A.16 b が大きく、 b^* が小さいとき、 Σ 軸と Λ 軸が途中で外に出て、それぞれ F 軸と G 軸につながる。

体心直方格子3

$$a < c, b < c$$

Γ	(0 0 0)
X	(0 0 1)
T	(1/2 1/2 0)
R	(1/2 0 1/2)
S	(0 1/2 1/2)
W	(1/2 1/2 1/2)
Σ	(ξ 0 0)
Δ	(0 η 0)
Λ	(0 0 ξ)
F	(ξ 0 1)
U	(0 η 1)
D	(ξ 1/2 1/2)
P	(1/2 1/2 ξ)
Q	(1/2 η 1/2)

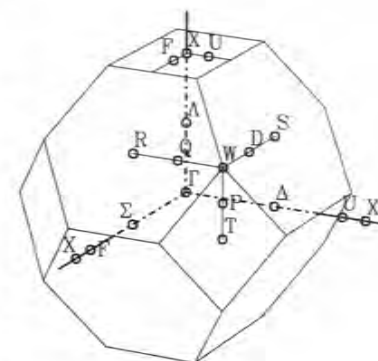


図 A.17 c が大きく、 c^* が小さいとき、 Σ 軸と Δ 軸が途中で外に出て、それぞれ F 軸と U 軸につながる。

底心直方格子1

$$a < b$$

Γ	(0 0 0)
Y	(0 1 0)
Z	(0 0 1/2)
T	(0 1 1/2)
S	(1/2 1/2 0)
R	(1/2 1/2 1/2)
Σ	(ξ 0 0)
Δ	(0 η 0)
Λ	(0 0 ξ)
A	(ξ 0 1/2)
B	(0 η 1/2)
C	(ξ 1 0)
E	(ξ 1 1/2)
D	(1/2 1/2 ξ)
H	(0 1 ξ)

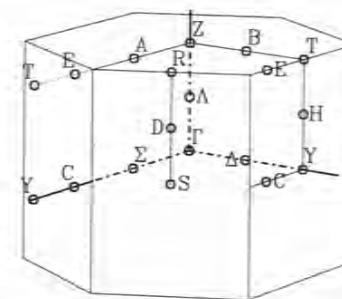


図 A.18 a が小さく、 a^* が大きい場合、この図のように Σ 軸が途中で外に出て、C 軸につながる。 Δ 軸が (0 1 0) の Y 点で終り、C、E 軸が現れるが、次の図にある F、G 軸が現れていない。

底心直方格子2

$$a > b$$

Γ	(0 0 0)
Y	(1 0 0)
Z	(0 0 1/2)
T	(1 0 1/2)
S	(1/2 1/2 0)
R	(1/2 1/2 1/2)
Σ	(ξ 0 0)
Δ	(0 η 0)
Λ	(0 0 ζ)
A	(ξ 0 1/2)
B	(0 η 1/2)
F	(1 η 0)
G	(1 η 1/2)
D	(1/2 1/2 ξ)
H	(0 1 ξ)

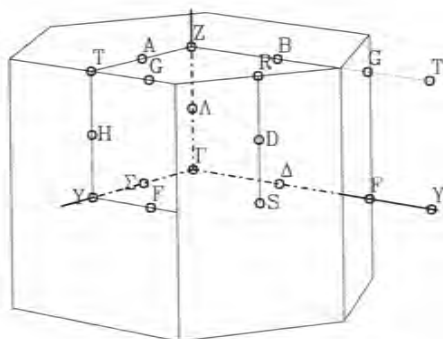


図 A.19 b が小さく, b^* が大きい場合, この図のように Δ 軸が途中で外に出て, F 軸につながる. Σ 軸が (1 0 0) の Y 点で終り, F , G 軸が現れるが, 前の図の C , E 軸が消える.

単純単斜格子

Γ	(0 0 0)
X	(1/2 0 0)
Y	(0 1/2 0)
Z	(0 0 1/2)
A	(1/2 1/2 0)
C	(0 1/2 1/2)
D	(1/2 0 -1/2)
E	(1/2 1/2 -1/2)
Λ	(0 η 0)
U	(1/2 η -1/2)
V	(1/2 η 0)
W	(0 η 1/2)

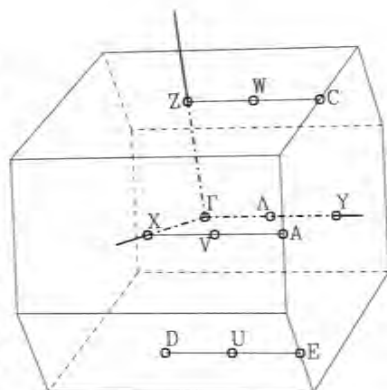


図 A.20 a , b , c , $\cos \beta$ が自由にとれて, さまざまな形が現れることが期待されるが, たまたまこれらの格子定数がより対称性の高い格子のそれらに一致するとき以外は六角柱の形だけが現れる.

底心単斜格子1

$$a < b$$

Γ	(0 0 0)
Y	(0 1 0)
Z	(0 0 1/2)
M	(0 1 1/2)
V	(1/2 1/2 0)
L	(1/2 1/2 -1/2)
Λ	(0 η 0)
U	(0 η 1/2)

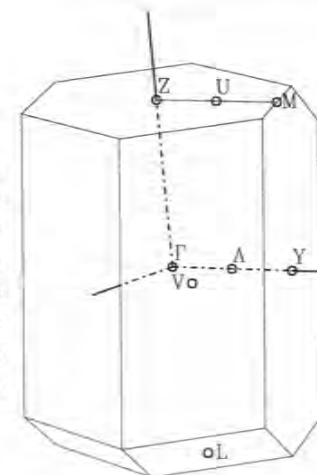


図 A.21 2 回軸を b 軸にとった場合, b が大きく b^* が小さい場合はこの図のように 2 つの対称軸が対称点で終り 12 面体になる.

底心単斜格子2

$$a > b$$

Γ	(0 0 0)
Y	(1 0 0)
Z	(0 0 1/2)
V	(1/2 1/2 0)
M	(1 0 -1/2)
L	(1/2 1/2 -1/2)
Λ	(0 η 0)
U	(0 η 1/2)
C	(1 η 0)
E	(1 η 1/2)

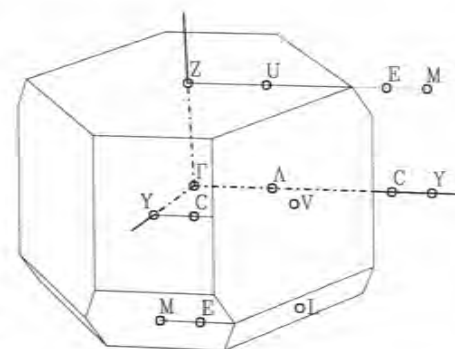


図 A.22 b が小さく, b^* が大きい場合, Y 点が (1 0 0) に, M 点が (1 0 1/2) になり, C , E 軸が現れ, この 14 面体になる.

単純三斜格子1

Γ	(0 0 0)
X	(1/2 0 0)
Y	(0 1/2 0)
Z	(0 0 1/2)
T	(0 1/2 1/2)
U	(1/2 0 -1/2)
S	(1/2 -1/2 0)
R	(1/2 -1/2 -1/2)

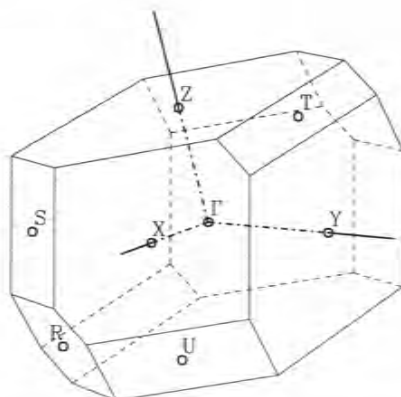


図 A.23 三斜格子は格子定数が自由にとれるのでさまざまな形が期待される。しかし、実際は反転以外の対称性をもてないという条件がきびしく、形はこの14面体に限られてしまう。もちろん、より高い対称性の格子からの歪みの大きさで辺の長さはさまざまになる。

単純三斜格子2

Γ	(0 0 0)
X	(1/2 0 0)
	(-1/2 0 1)
Y	(0 1/2 0)
	(0 -1/2 1)
Z	(0 0 1/2)
T	(0 1/2 -1/2)
U	(1/2 0 -1/2)
S	(1/2 -1/2 0)
R	(-1/2 1/2 1/2)

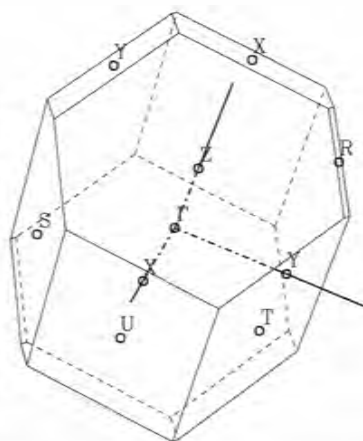


図 A.24 底心直方格子を歪ませた格子定数が使われている。この図では(1/2 0 0)のX点と(0 1/2 0)のY点が外になり、(-1/2 0 1)のX点と(0 -1/2 1)のY点が中心になる面が現れている。

付録2.B 立方調和関数と六方調和関数の図

ここでは第8章でとり上げた立方、六方調和関数の角度依存性を図で示す。すべて実関数でその符号が線の濃淡で示されている。全体の符号は任意であるのでどちらを正と考えてもよい。すべての図の座標軸は共通の直交座標で左から右に x 軸、手前から向こうに y 軸、下から上に z 軸がとられている。

各図の対称性を見やすくするために、 O_h 群と D_{6h} 群の既約表現の指標を下の表に示す。

表 B-1 O_h 群の既約表現

JR	E	C_2	C_3	u_2	C_4	I	σ_h	S_6	σ_d	S_4	最小の l
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
2	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	9
3	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	6
4	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	3
5	2	2	-1	0	0	2	2	-1	0	0	2
6	2	2	-1	0	0	-2	-2	1	0	0	5
7	3	-1	0	-1	1	3	-1	0	-1	1	4
8	3	-1	0	-1	1	-3	1	0	1	-1	1
9	3	-1	0	1	-1	3	-1	0	-1	1	2
10	3	-1	0	1	-1	-3	1	0	1	-1	3

表 B-2 D_{6h} 群の既約表現

JR	E	C_3	C_6	C_2	u_1	u_2	I	S_6	S_3	σ_h	σ_v	σ_d	最小の l
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
2	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	7
3	1	1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	6
4	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1
5	1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	4
6	1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	1	3
7	1	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	1	4
8	1	1	-1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	1	-1	3
9	2	-1	1	2	0	0	2	-1	-1	-2	0	0	2
10	2	-1	1	-2	0	0	-2	1	1	2	0	0	1
11	2	-1	-1	2	0	0	2	-1	-1	2	0	0	2
12	2	-1	-1	2	0	0	-2	1	1	-2	0	0	3