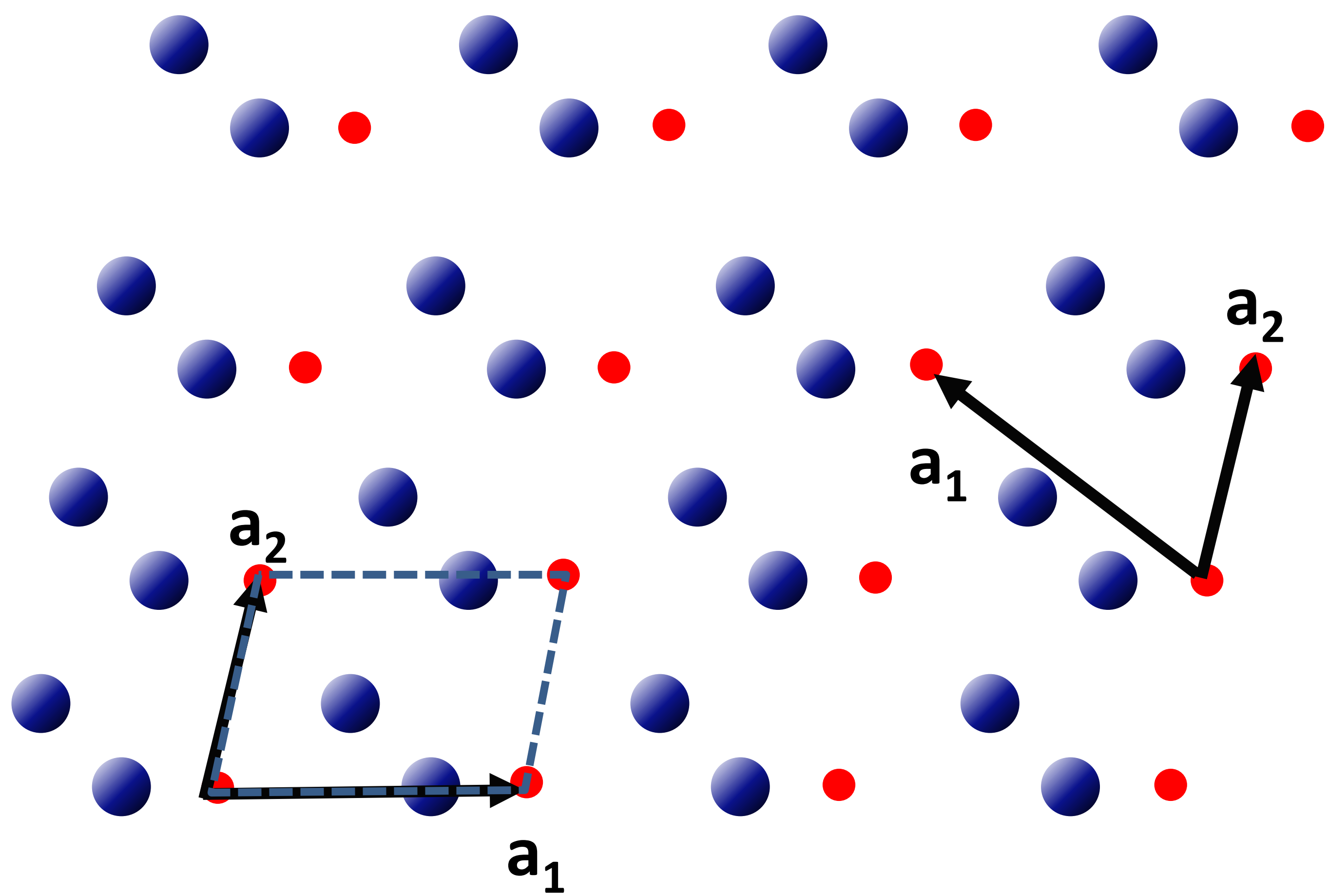
第1回目復習

以下の結晶構造の格子、基本並進ベクトル、基本単位胞は？



講義2回目の目標

● 2.1～2.2章

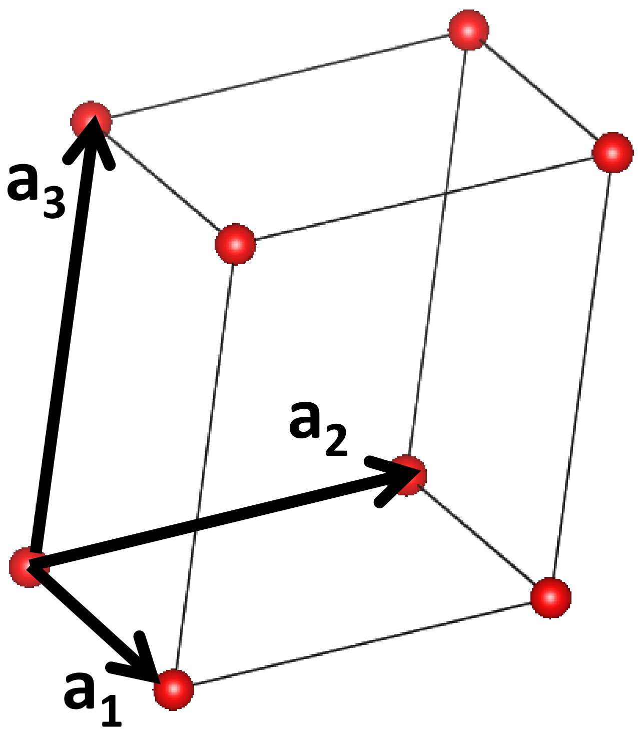
- ■ 格子とは何か理解する
- ■ 基本単位胞と格子点が何か理解する

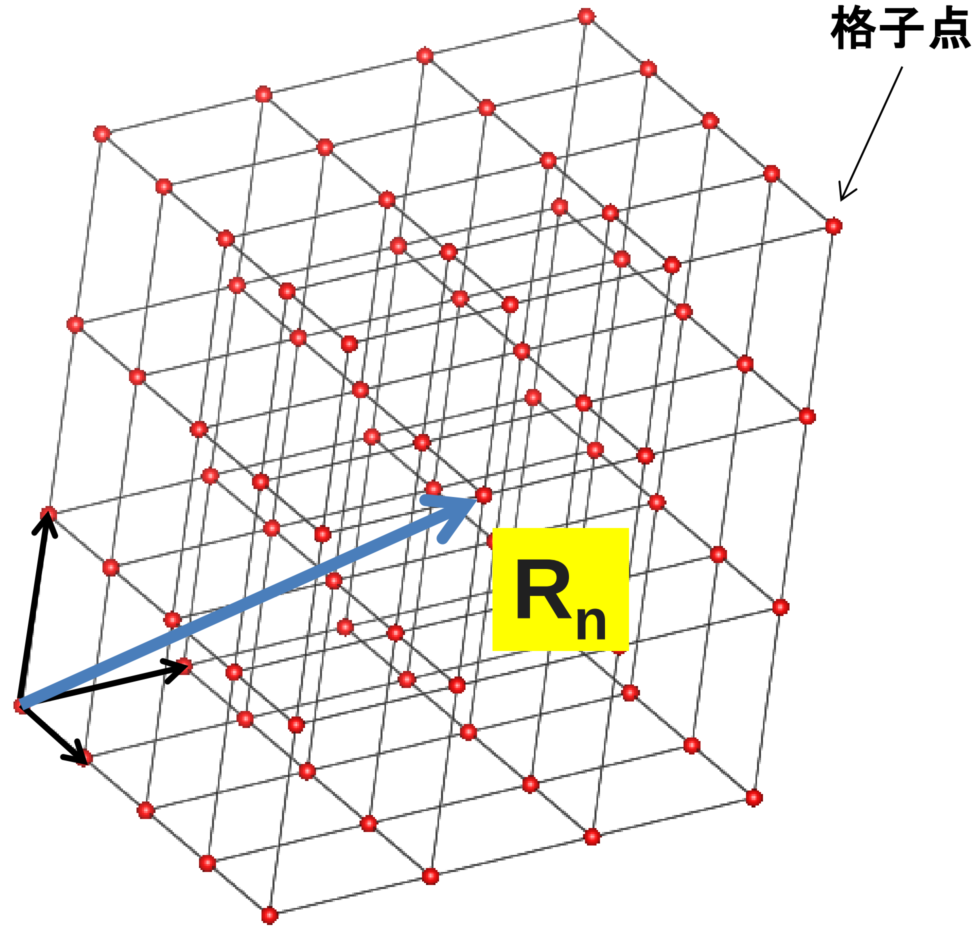
  （ある結晶構造があったとき、基本単位胞と格子点を示すことができる）
- ■ 基本並進ベクトルが何か理解する
- ■ ３次元空間格子（単純立方格子、体心立方格子、面心立方格子）
- ■ 対称操作（回転、鏡映）を理解する
- ■ ３次元ブラヴェ格子（3次元格子の型の分類）
- ■ ウィグナーザイツ胞

ここまで理解する

３次元空間格子

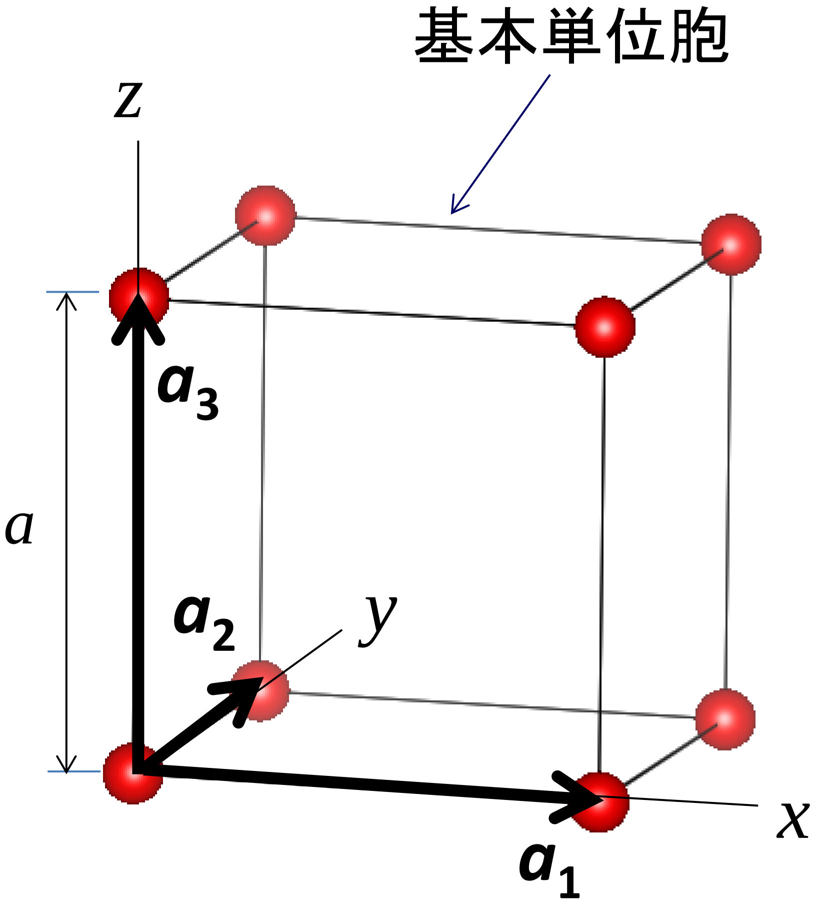
3次元空間格子





$\mathbf{R_n} = n_1\boldsymbol{a_1} + n_2\boldsymbol{a_2} + n_3\boldsymbol{a_3}$ （n_1 , n_2 , n_3 は整数）

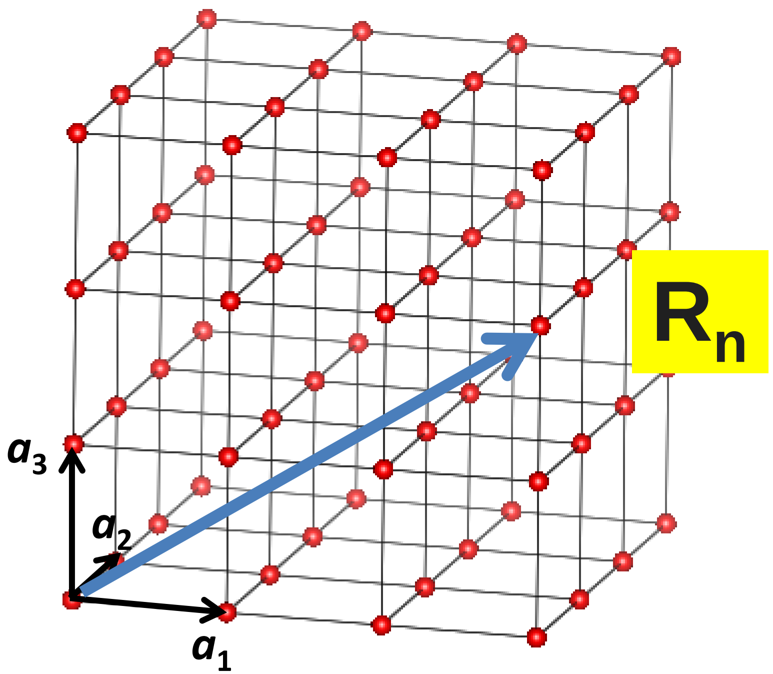
① 単純立方格子



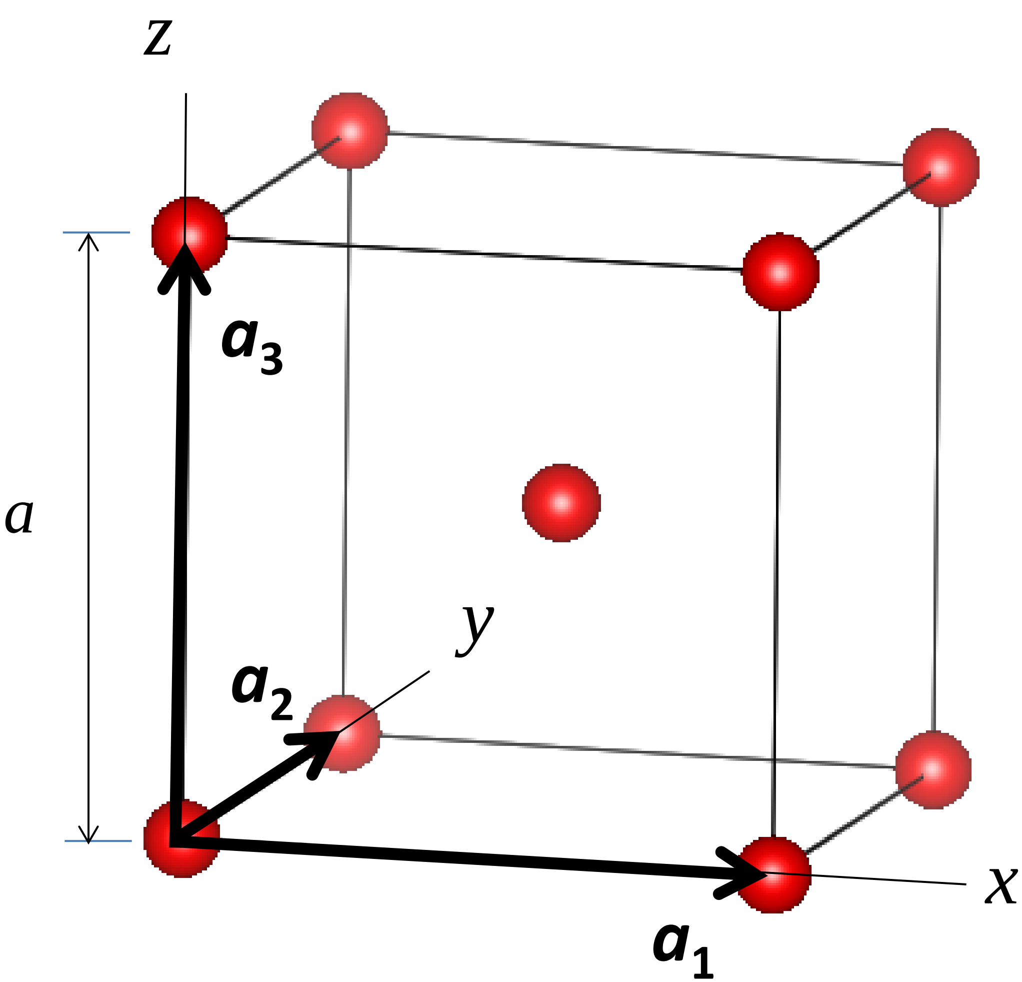
$$\mathbf{R_n} = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3$$

基本並進ベクトル

$$\boldsymbol{a}_1 = a\,\boldsymbol{e}_x$$
$$\boldsymbol{a}_2 = a\,\boldsymbol{e}_y$$
$$\boldsymbol{a}_3 = a\,\boldsymbol{e}_z$$



② 体心立方格子



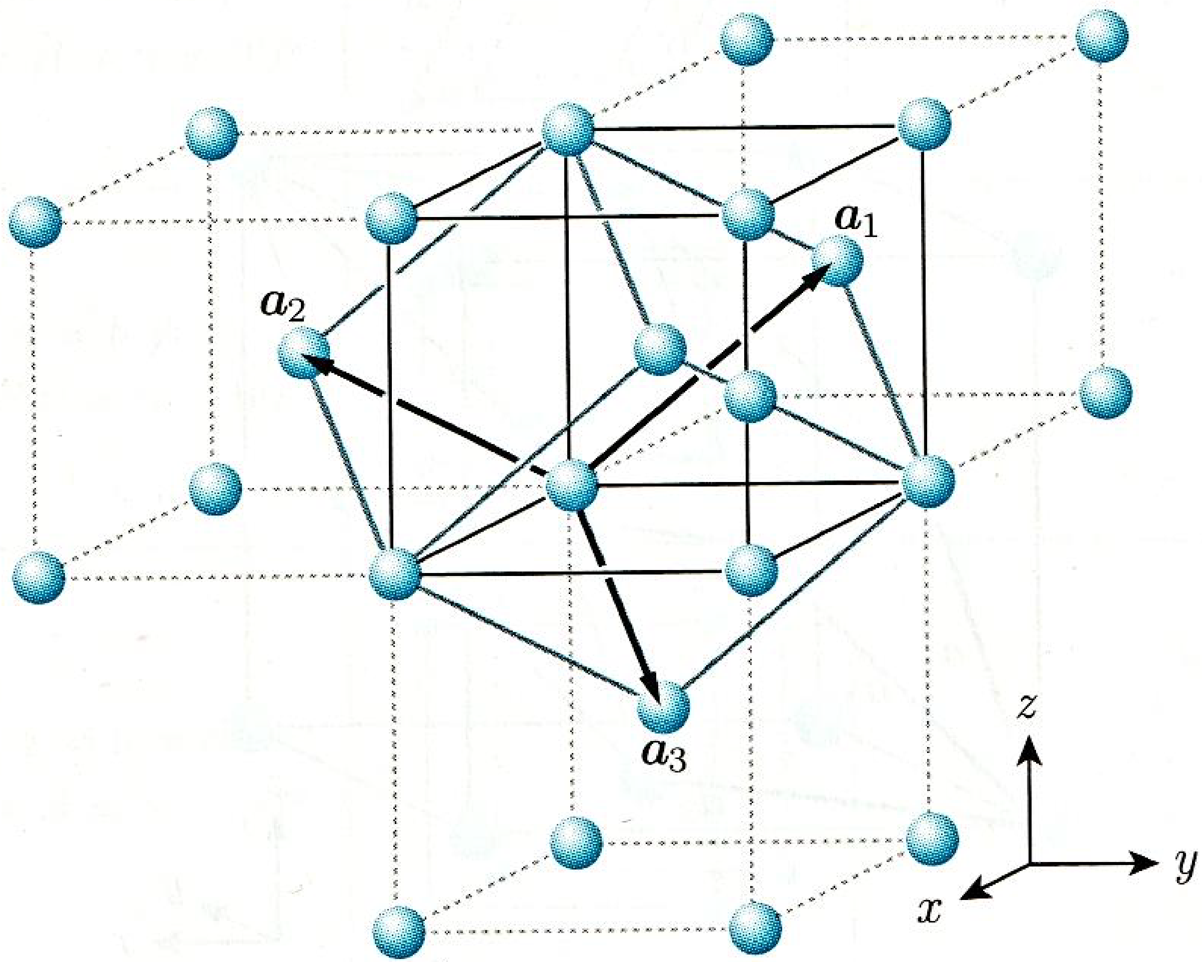
基本並進ベクトル？？

$$\boldsymbol{a}_1 = a\,\boldsymbol{e}_x$$

$$\boldsymbol{a}_2 = a\,\boldsymbol{e}_y$$

$$\boldsymbol{a}_3 = a\,\boldsymbol{e}_z$$

② 体心立方格子



基本並進ベクトル

$$a_1 = \frac{a}{2}(e_y + e_z - e_x)$$

$$a_2 = \frac{a}{2}(e_z + e_x - e_y)$$

$$a_3 = \frac{a}{2}(e_x + e_y - e_z)$$

基本単位胞

一辺の長さが $\frac{\sqrt{3}}{2}a$

α = β = γ = 109.47°の菱面体

体積は $a^3/2$

② 体心立方格子

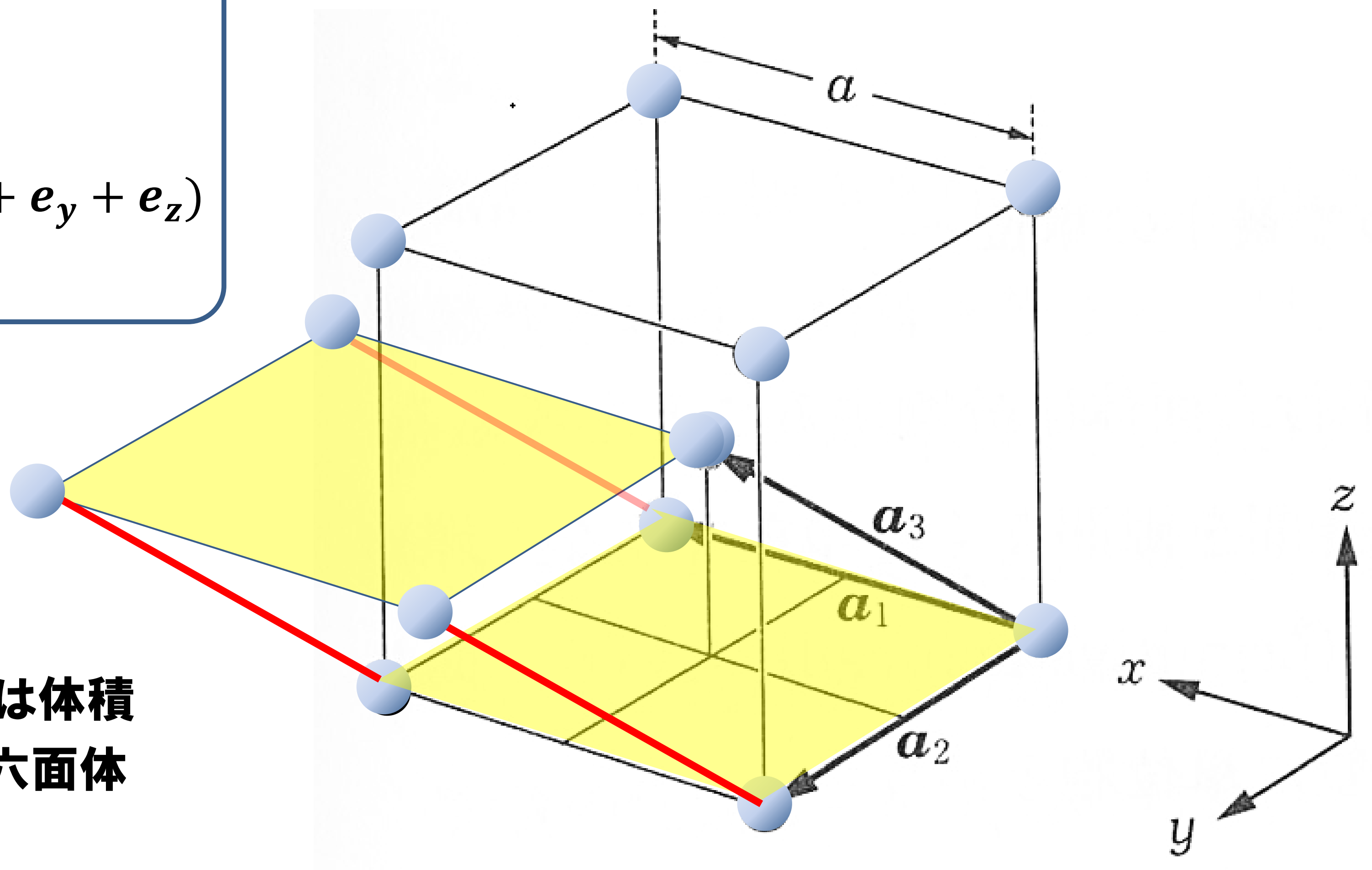
基本並進ベクトル

$$\boldsymbol{a}_1 = a\,\boldsymbol{e}_x$$

$$\boldsymbol{a}_2 = a\,\boldsymbol{e}_y$$

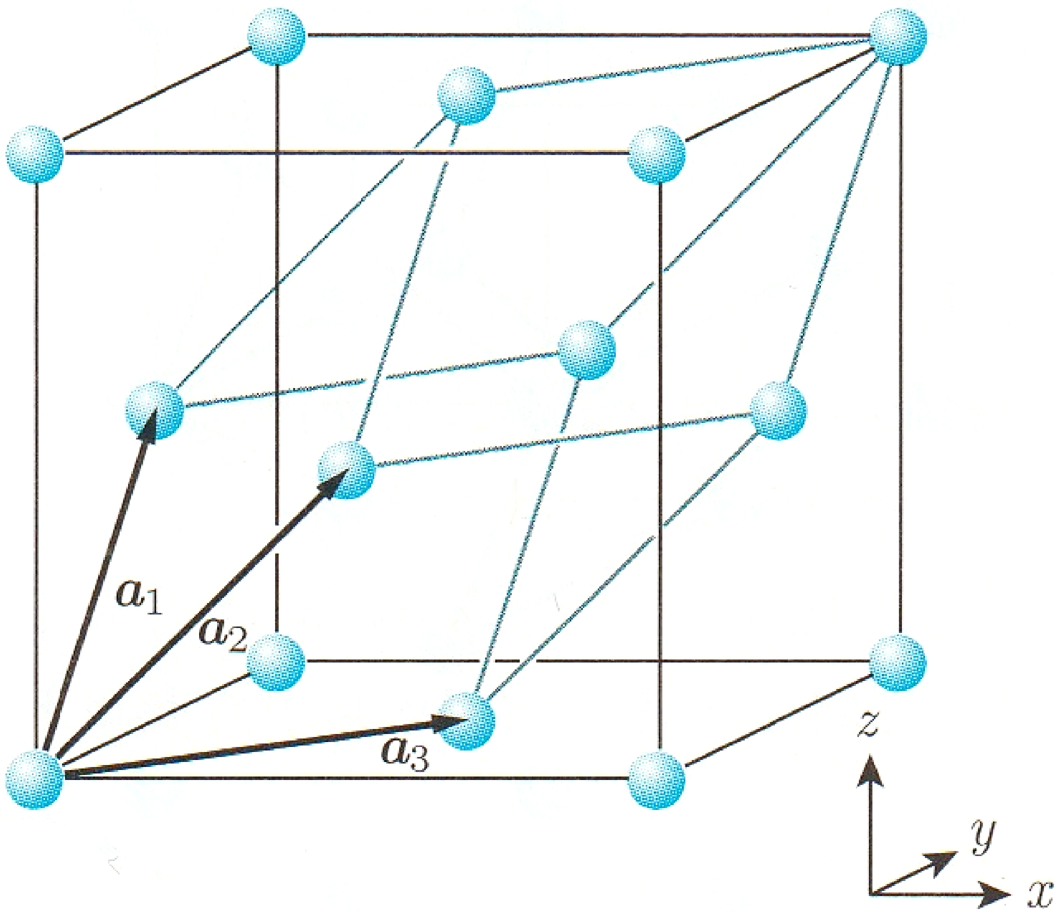
$$\boldsymbol{a}_3 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{e}_x + \boldsymbol{e}_y + \boldsymbol{e}_z)$$

基本並進ベクトルの別なとり方



基本単位胞は体積
$a^3/2$ **の平行六面体**

③ 面心立方格子



基本並進ベクトル

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

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

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

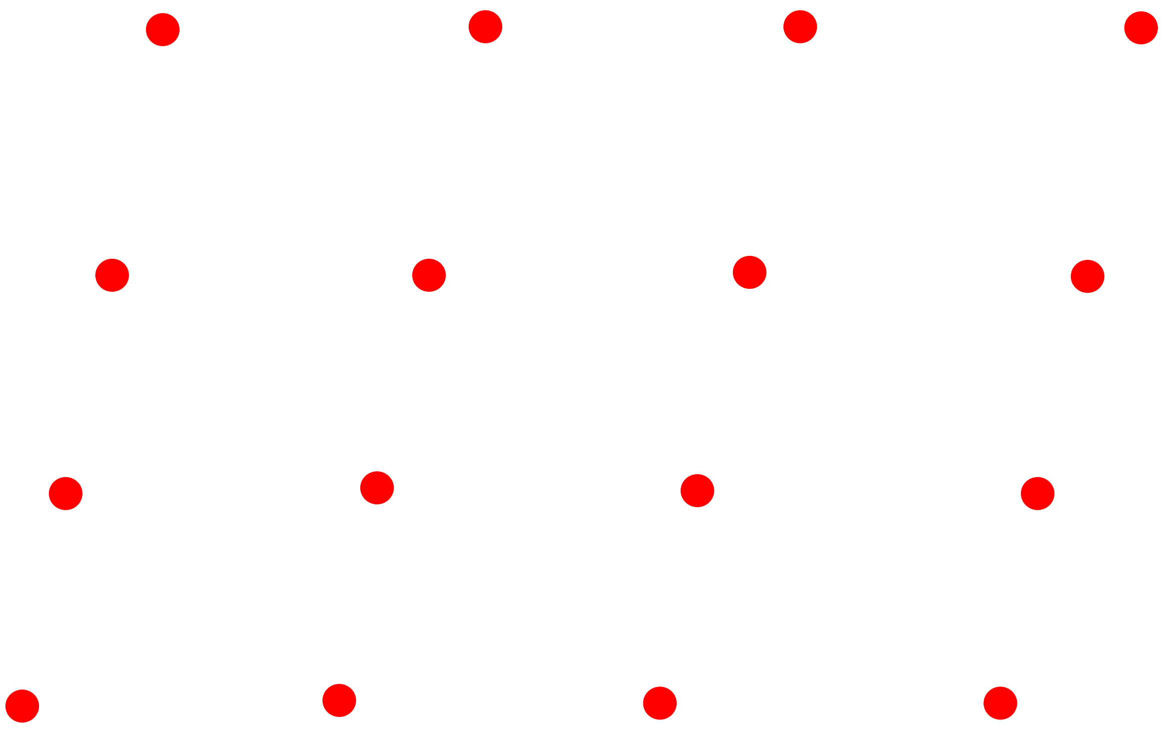
基本単位胞

一辺の長さが $\frac{\sqrt{2}}{2}a$

α = β = γ = 60°の菱面体

体積は $a^3/4$

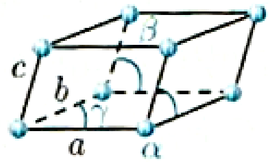
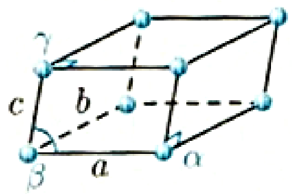
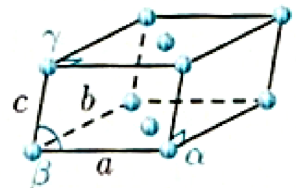
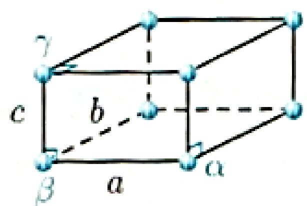
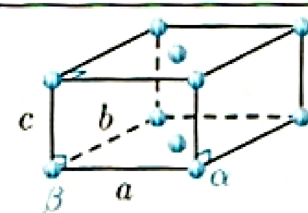
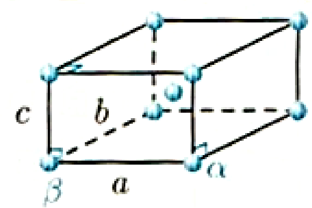
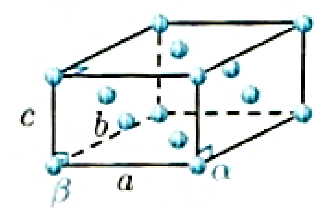
ブラヴェ格子



どの格子点の位置に立っても周りの景色が同じ格子

11ページ　表2.1

表 2.1　3 次元ブラヴェ格子

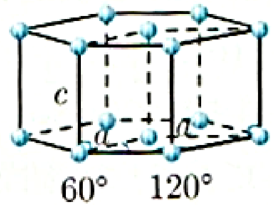
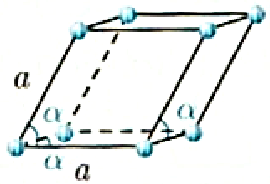
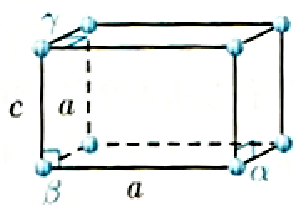
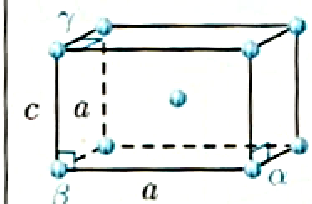
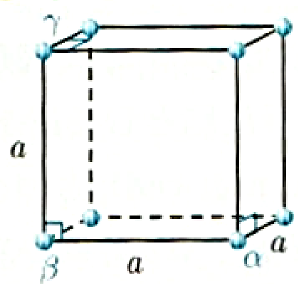
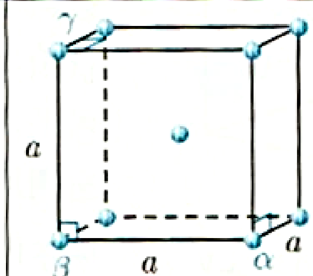
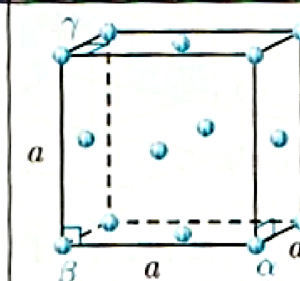
結晶系	格子条件	単純	底心	体心	面心
三斜晶	$a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma$				
単斜晶	$a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90°$, $\beta \neq 90°$				
直方晶	$a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$				

7種の単純格子 (P) だけでなく、晶系によっては同一の対称性を満たしながら、単位胞に複数の格子点を含むものが存在する

単純格子: 格子の隅にのみ格子点を持つ
底心格子: 上面と底面にも格子点を持つ
体心格子: 体心にも格子点を持つ
面心格子: 全ての面の中心にも格子点を持つ

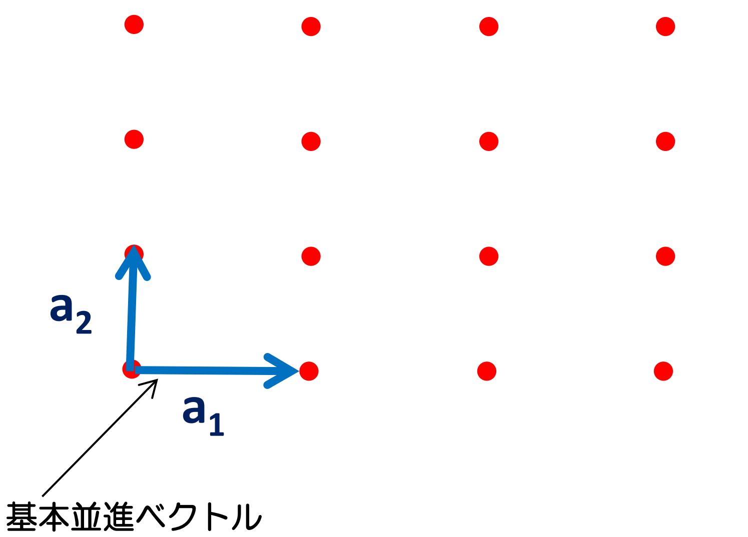
11ページ　表2.1

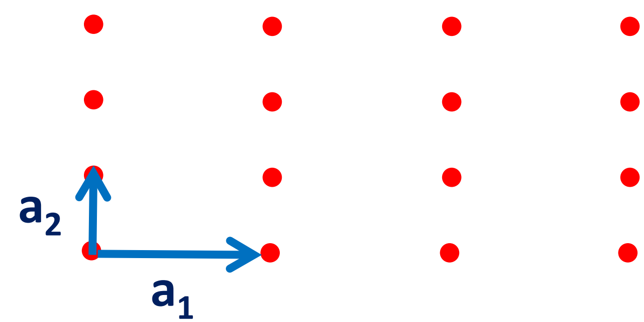
表 2.1　3 次元ブラヴェ格子

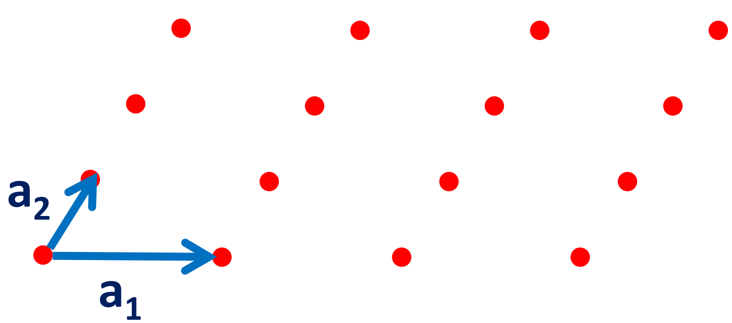
結晶系	格子条件	単純	底心	体心	面心
六方晶	$a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90°$, $\gamma = 120°$				
三方晶	$a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$				
正方晶	$a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$				
立方晶	$a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$				

なぜ ７つの結晶系、１４種類の格子に分類できるのか？

どのように分類できるか？







基本並進ベクトル a_1 , a_2 の長さ、その間の角度が異なる空間格子は無限に存在

いくつかの型に分類できないか？

（例えば、図形の○、□、△ などのように....）

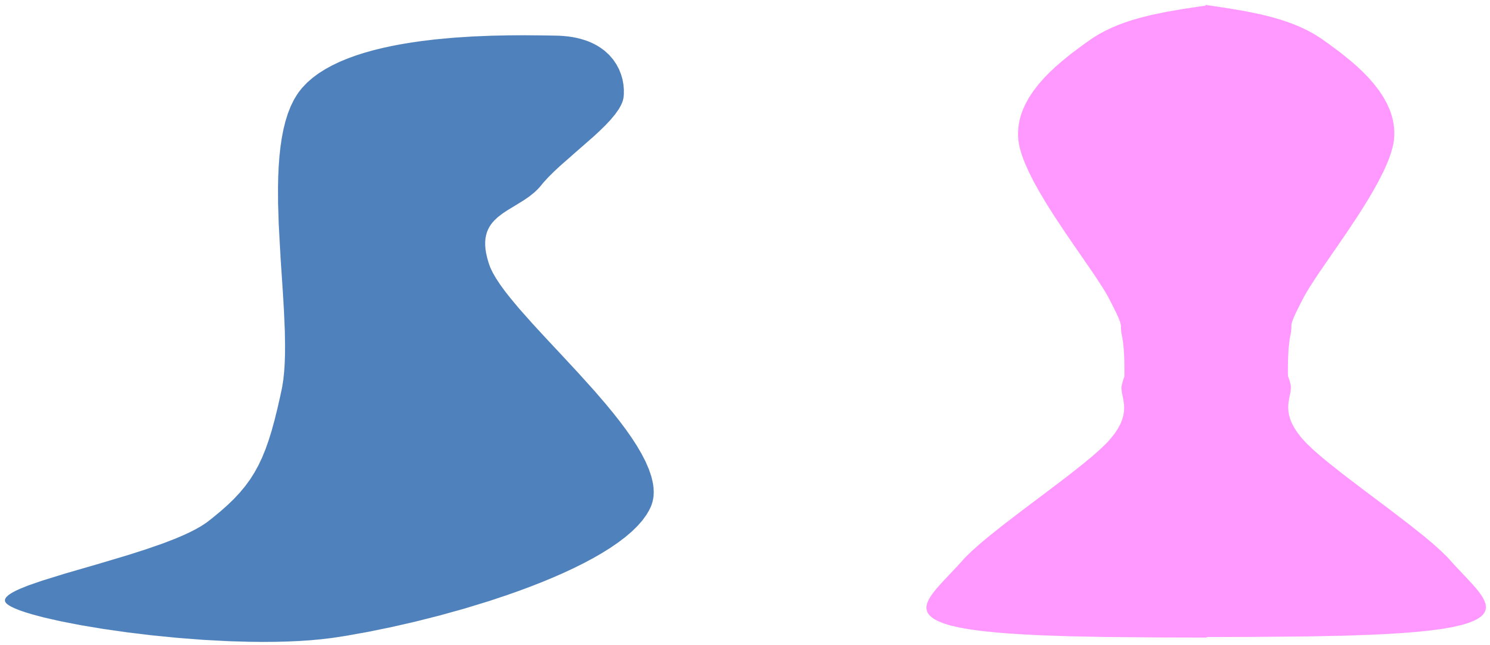
結晶は高い対称性を持つので、対称性の違いで分類できないか？

対称性の違いの観点から格子を分類する

並進、回転、鏡映、点対称…

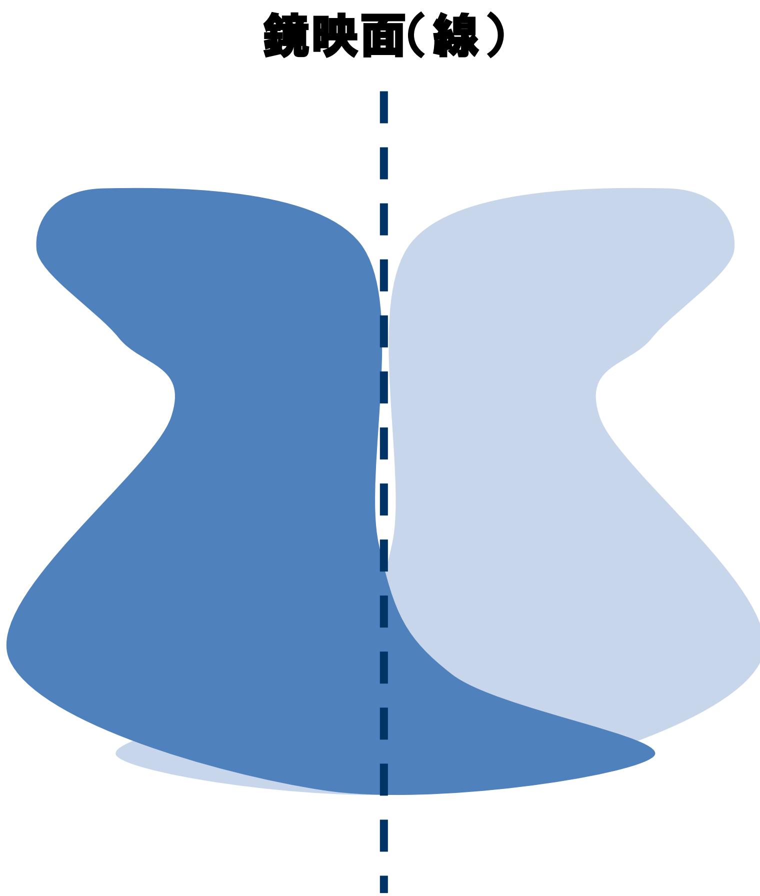
対称性とは？

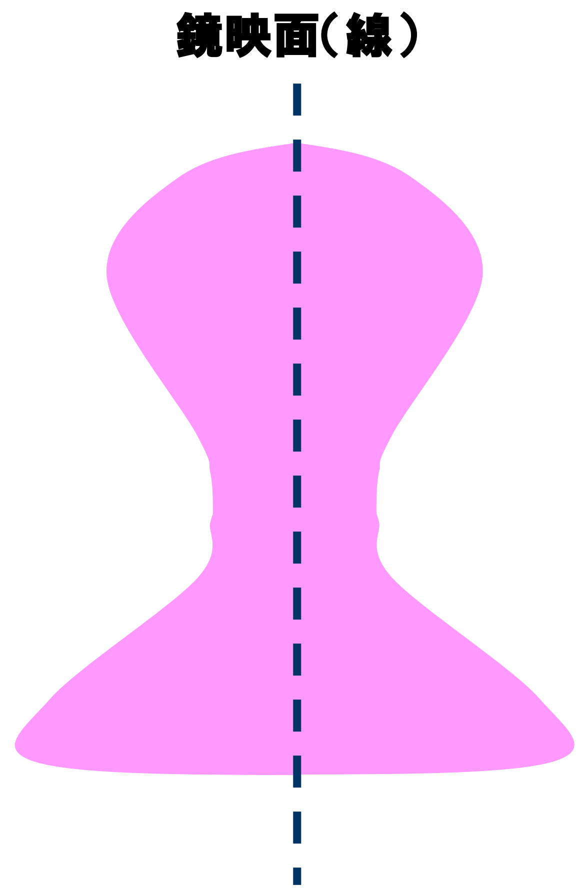
対称性とは？



対称性とは？

対称性とは？　　ある面（線）に対して、物体を**左右逆転**すると、

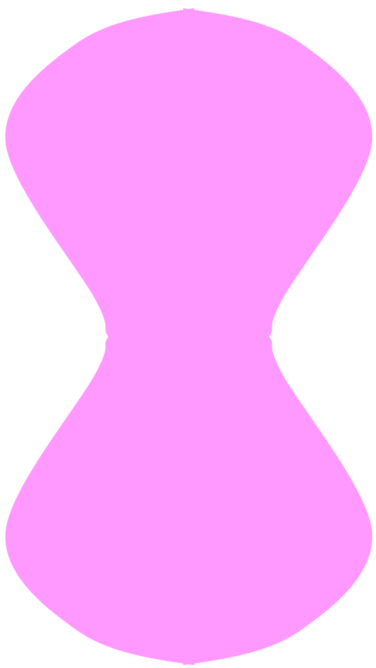


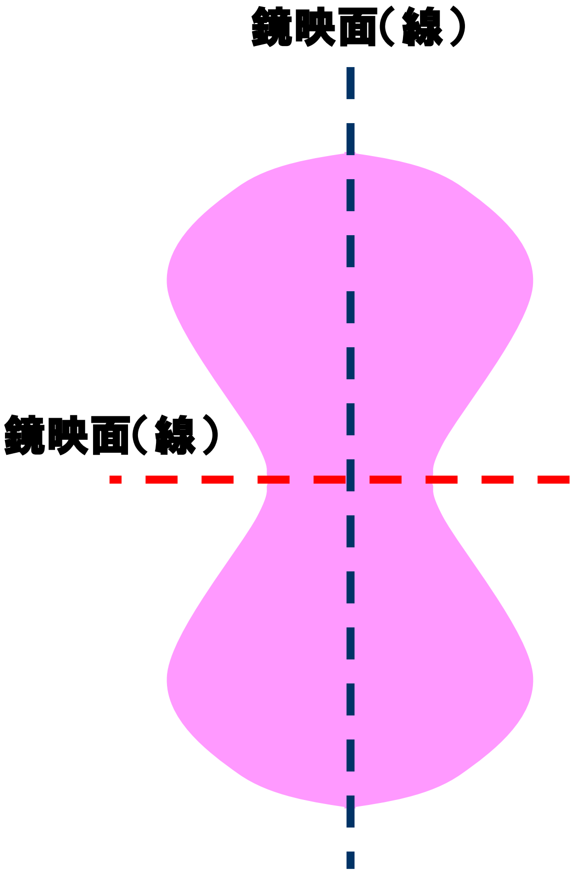


自分自信と重ならない　　　　**自分自信と重なる** ⇒ **鏡映操作**

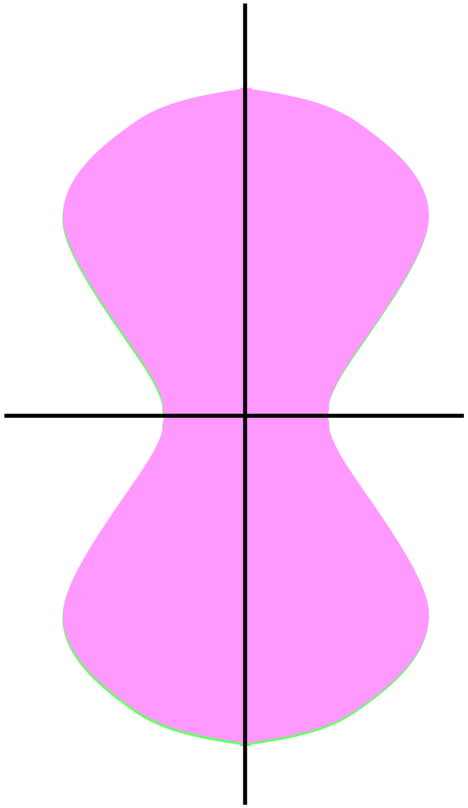
対称性とは？

対称性とは？





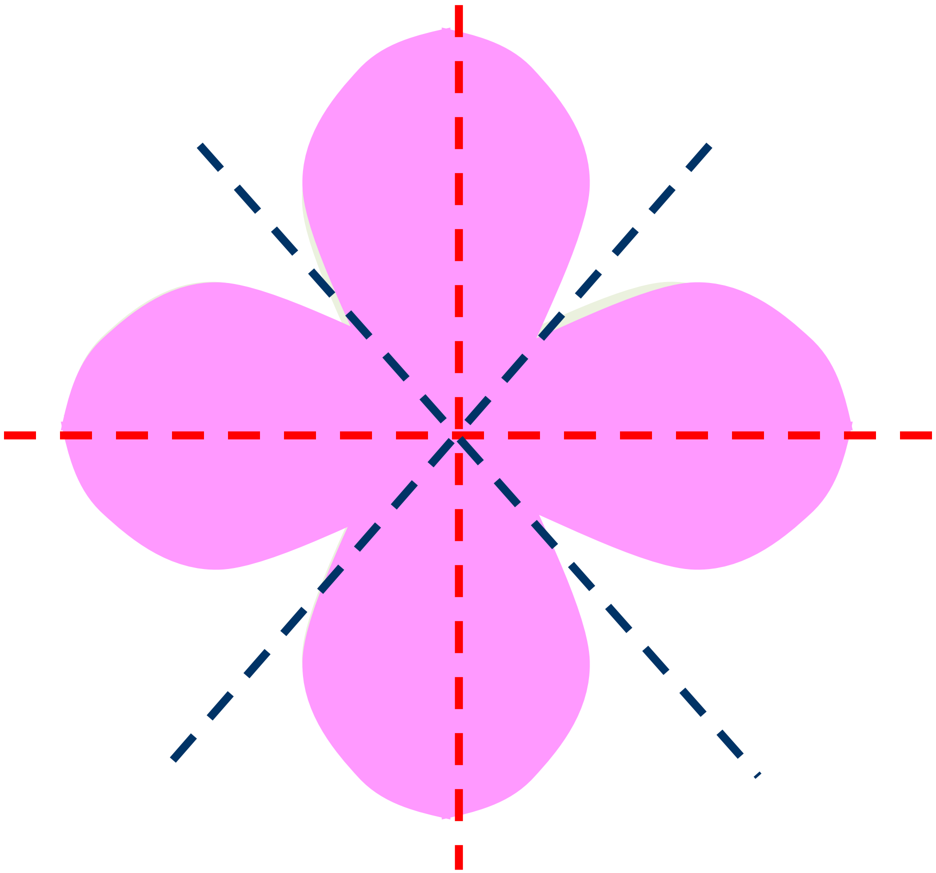
ある面(線)に対して、
物体を**左右逆転**すると、
自分自身に重なる



原点を中心として、180°
回転すると、自分自身に
重なる

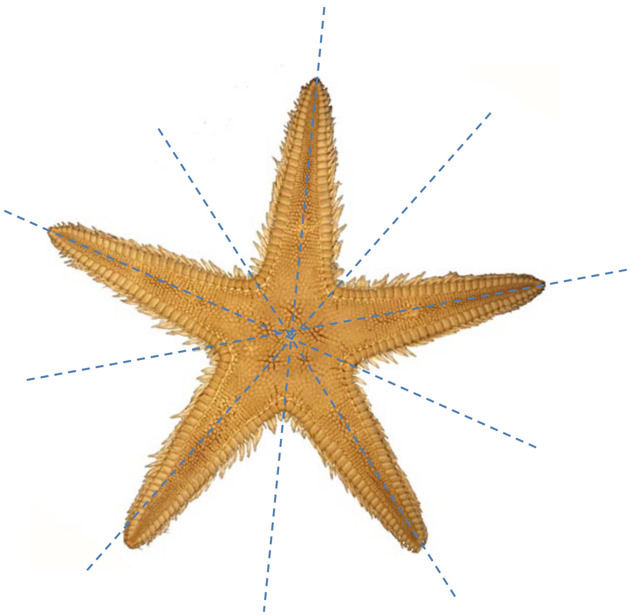
対称性とは？

下の形はどのような対称性をもっていますか？



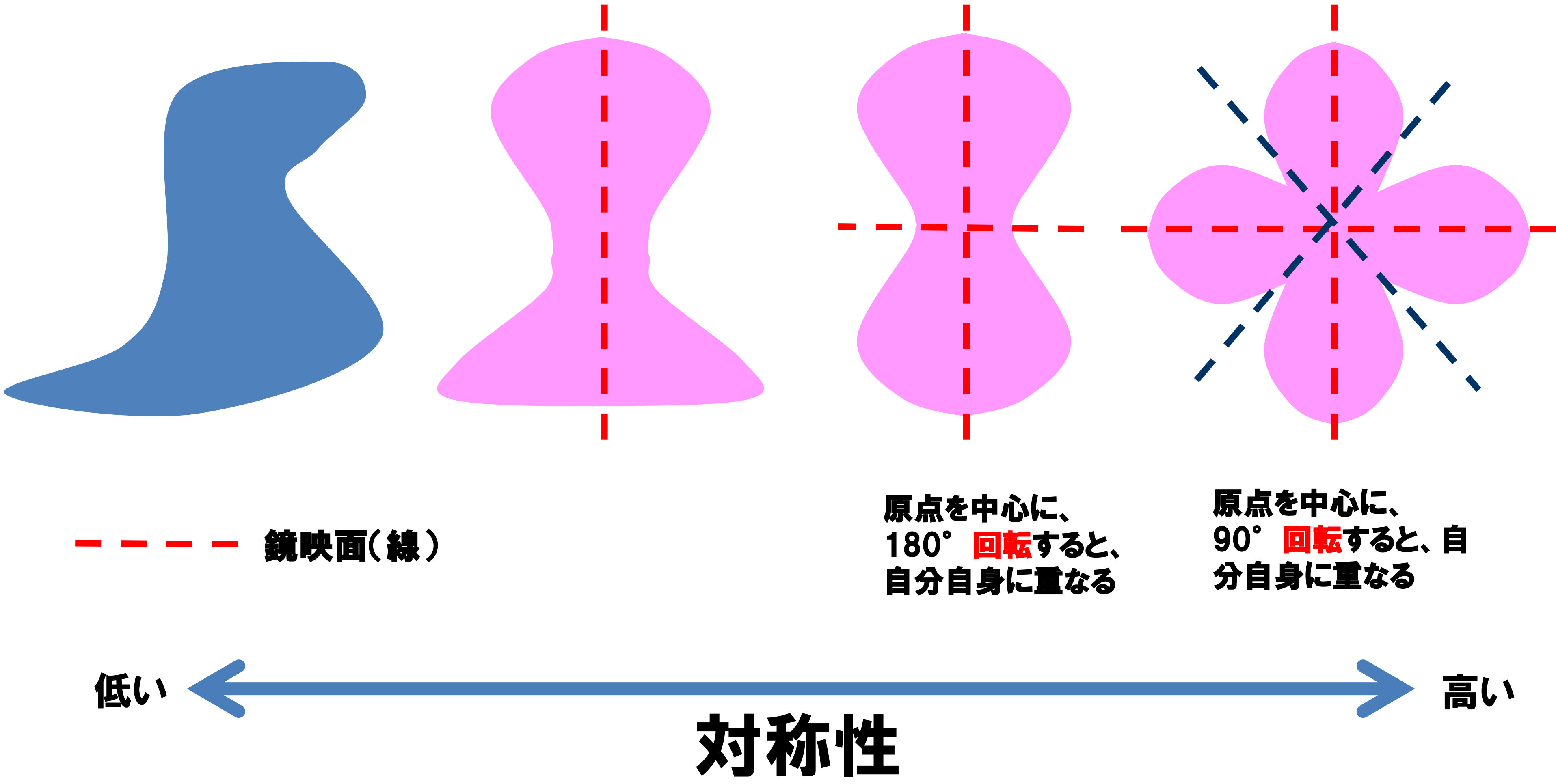
対称性とは？

身の周りには高い対称性を持つものに溢れています。
具体的にどのようなものがありますか？

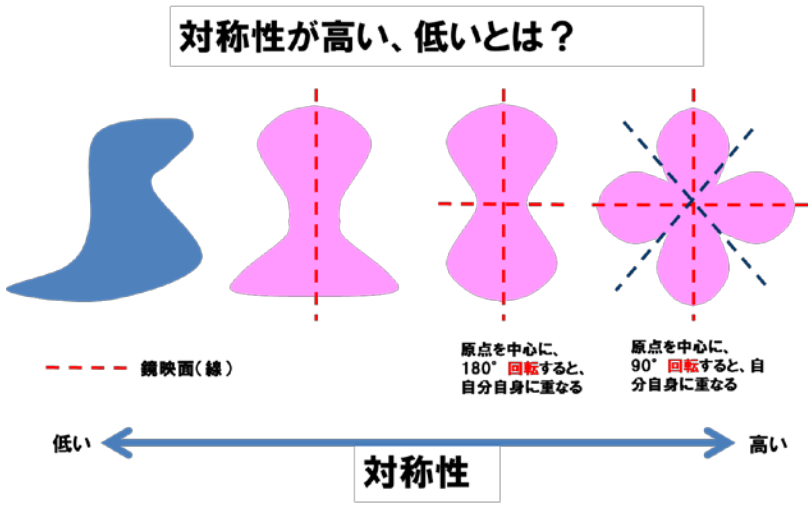


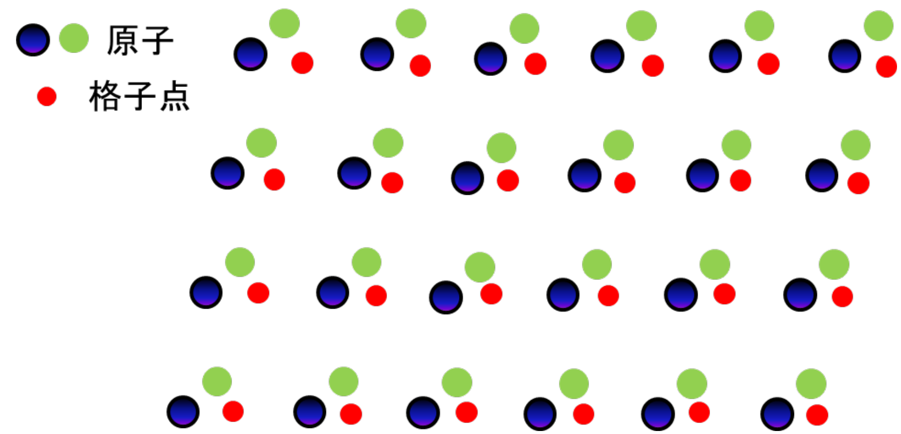
対称性とは？

対称性が高い、低いとは？



対称性とは？





結晶では、対称性の違いをどのように判断するか？

結晶固有の対称操作の種類、数で分類

※対称操作：　物体を移動したり、回転したり、鏡に映し出したり等、
様々な操作を施した後で、全く同じ物体が得られる操作

結晶の対称性

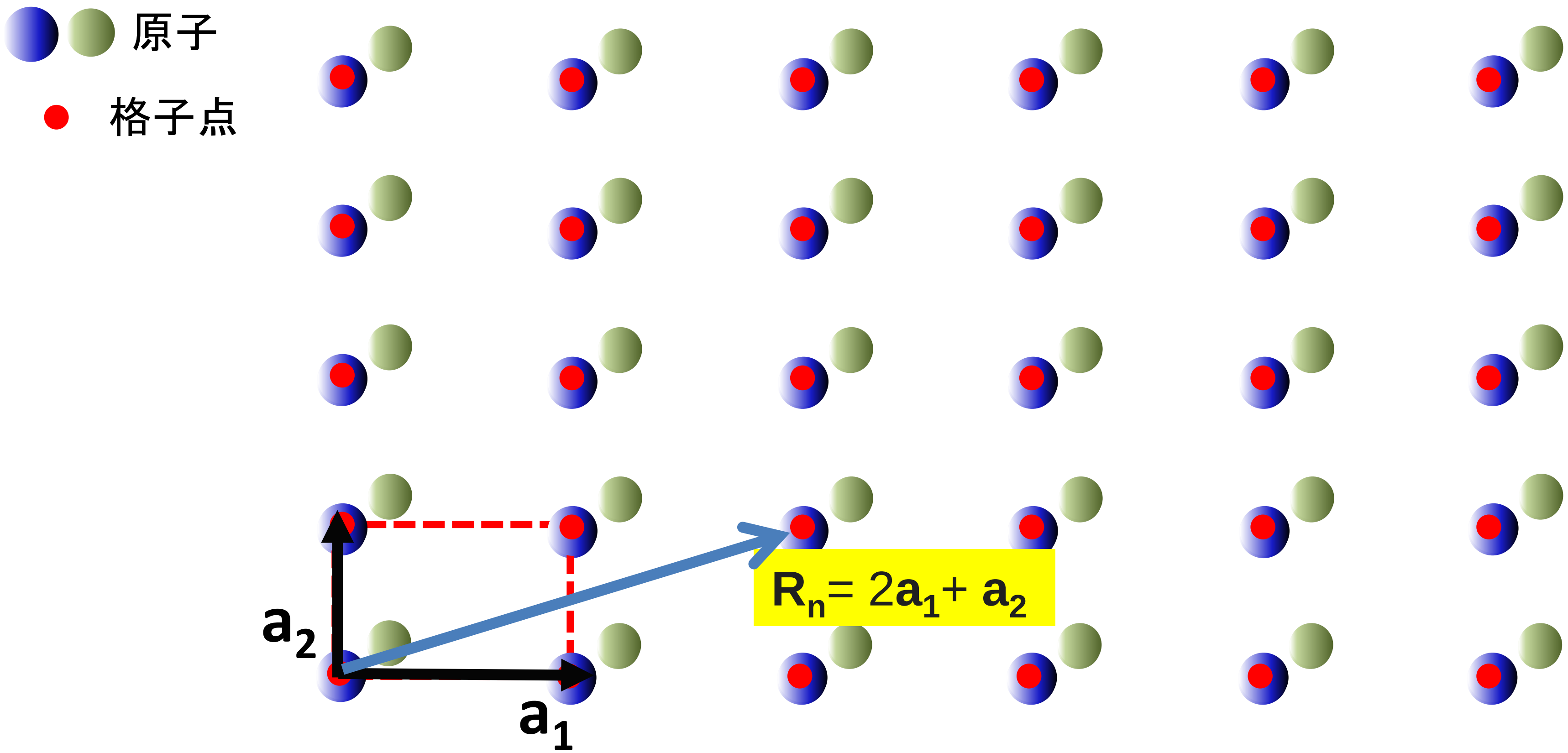
並進操作

格子（結晶構造） を並進させると、もとの格子（結晶構造）に重なる操作

並進対称性：

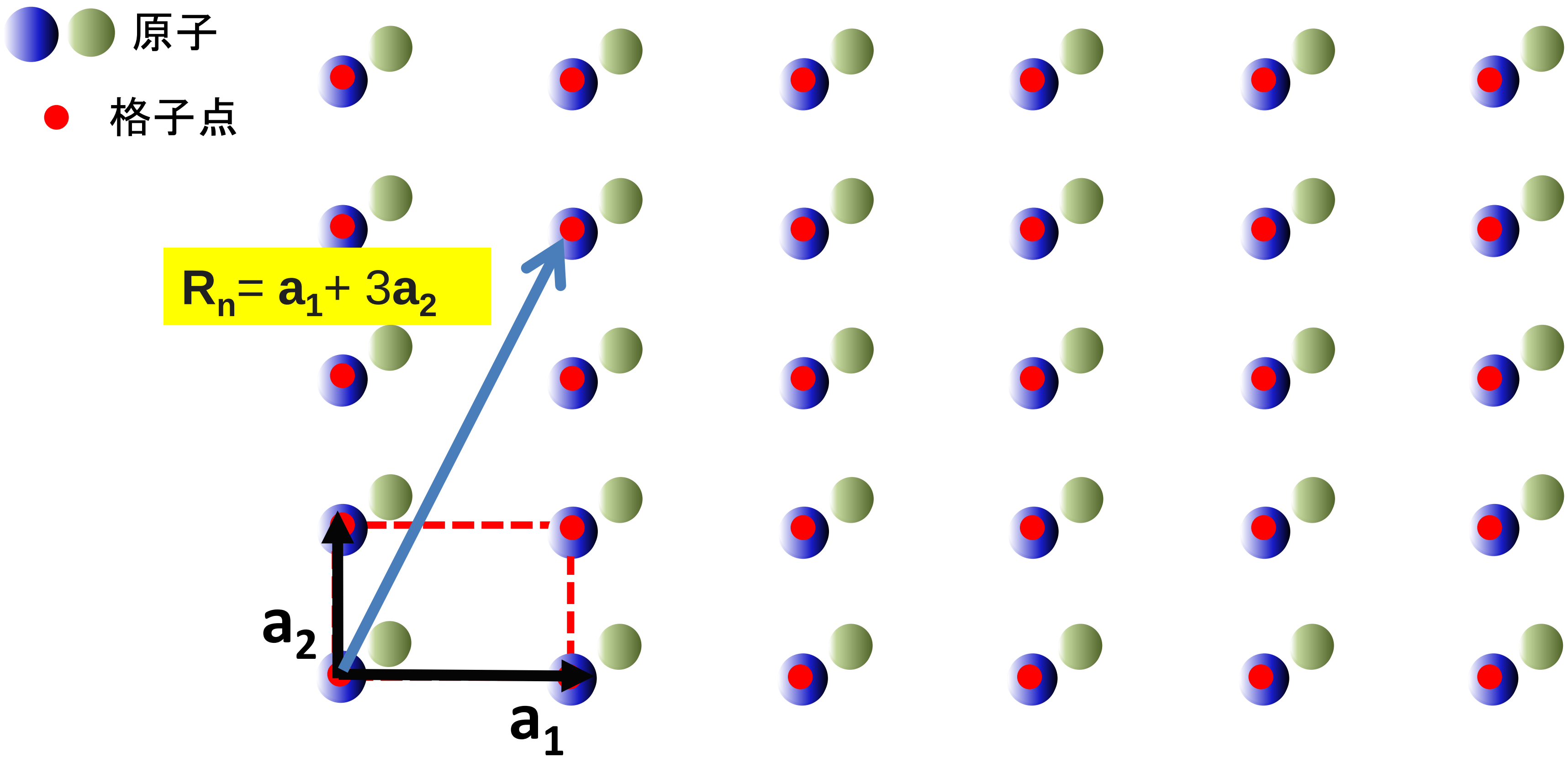
並進操作に対して格子（結晶構造）が不変である性質で、全ての結晶が持っている対称性

並進対称性とは？



ベクトル R_n の分だけ、格子（結晶）を平行移動すると、もとの格子（結晶構造）に重なる

並進対称性とは？



ベクトル R_n の分だけ、格子（結晶）を平行移動すると、もとの格子（結晶構造）に重なる

結晶の対称性

点対称操作

回転、反転などある格子点に関して操作を行ったとき、格子を自分自身に重ねることができるような軸、面、点が存在する操作

（1）回転操作

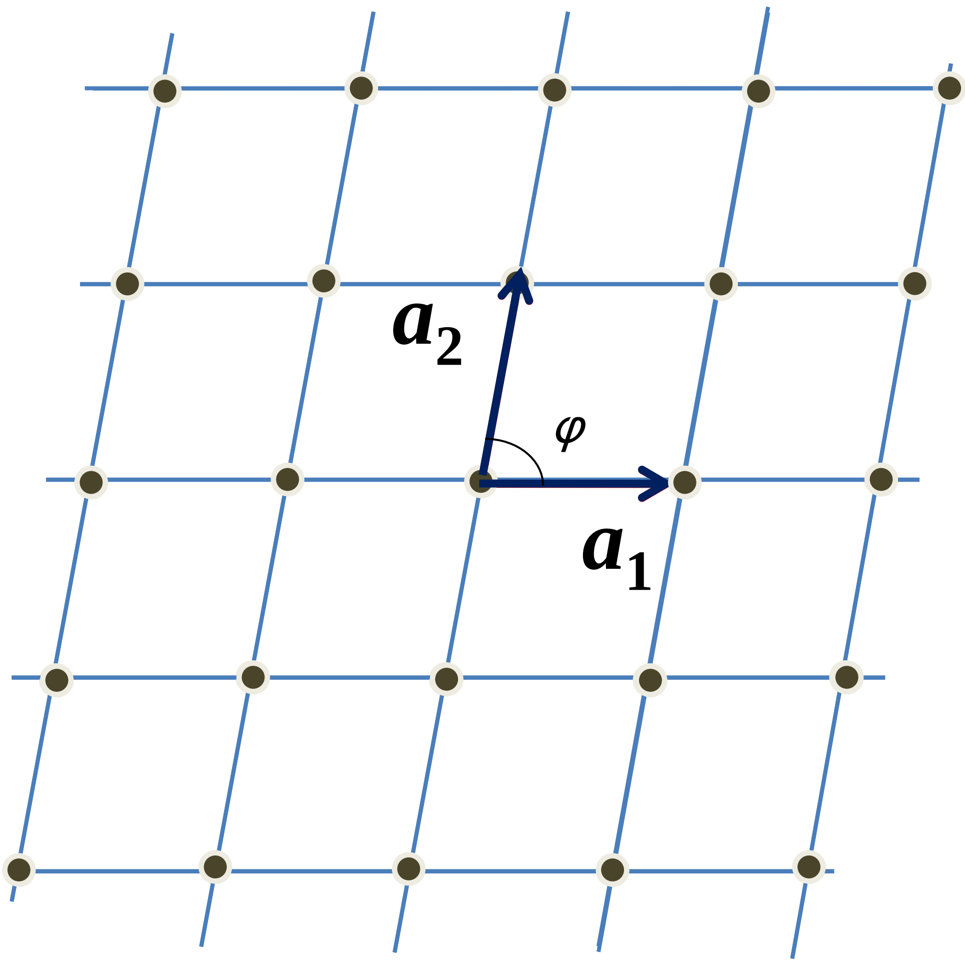
ある軸の周りで、ある角度回転させたとき自分自身に重なる操作

点対称操作：回転操作 ①

どのような回転操作に対して不変？

$$|a_1| = |a_2|$$

$$\varphi \neq 90°$$



180°ごとの回転で
自分自身に重なる

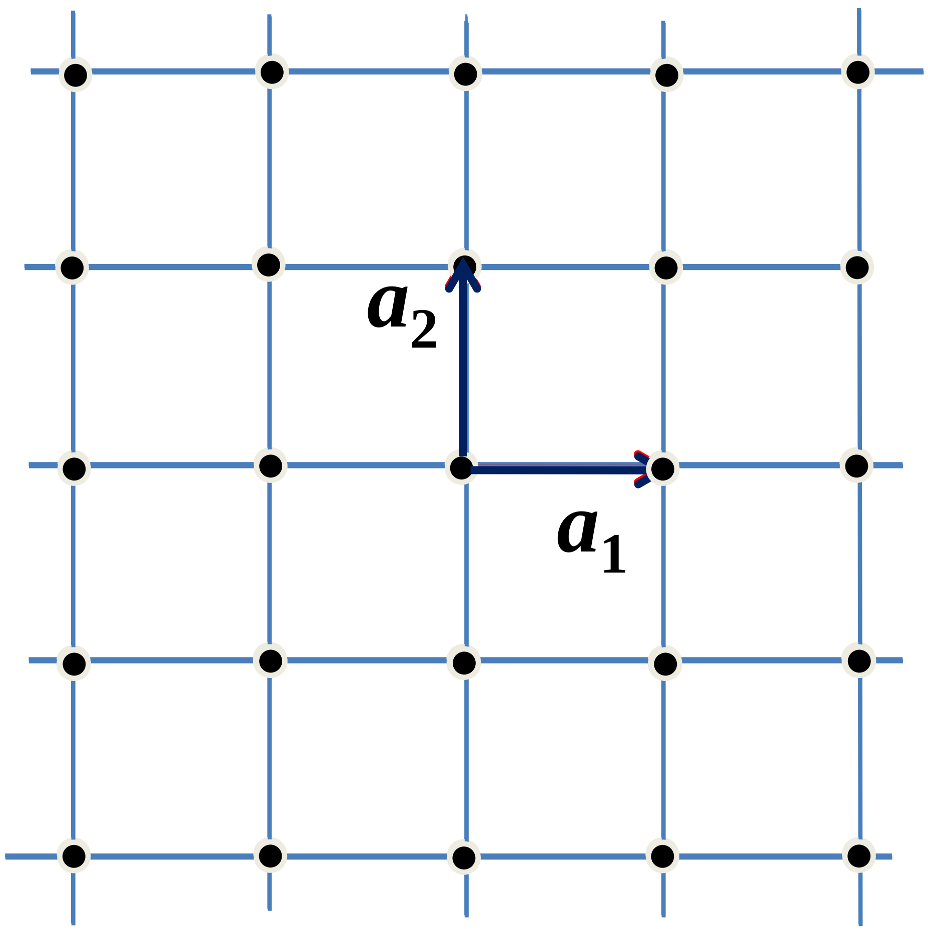
2π/2
（2回回転軸）

点対称操作： 回転操作 ②

どのような回転操作に対して不変？

$|a_1| = |a_2|$

$\varphi = 90°$



90° ごとの回転で
自分自身に重なる

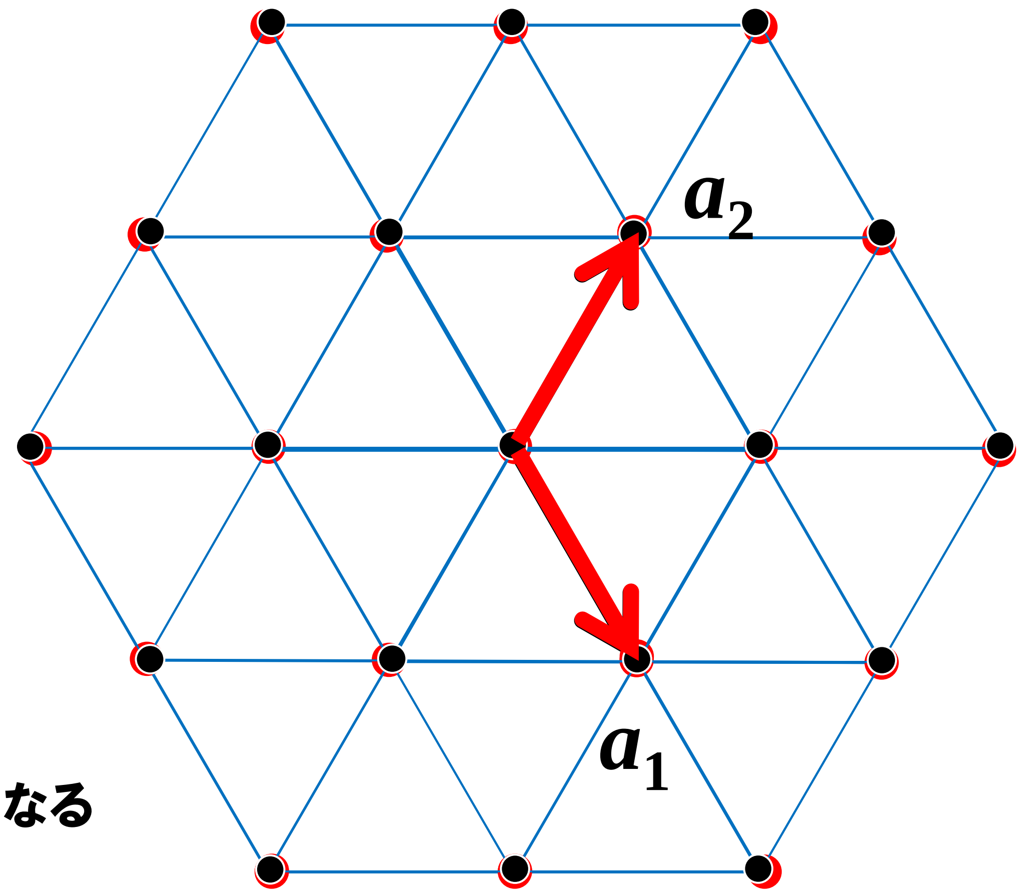
2π/4
（4回回転軸）

点対称操作：回転操作 ③

どのような回転操作に対して不変？

$$|\boldsymbol{a}_1| = |\boldsymbol{a}_2|$$

$$\varphi = 120°$$



60° ごとの回転で自分自身に重なる

2π／6 （6回回転軸）

点対称操作：　回転操作まとめ

- **回転操作：**

  ある軸の周りで、ある角度回転させたとき自分自身に重なる操作

  ※例えば、180度回転させたとき、自分自身と重なる場合は、
  　2π/2の回転操作に不変、あるいは、2回対称の回転軸を持つ、という

- **結晶は 2π, 2π/2, 2π/3, 2π/4, 2π/6 の回転操作のどれかに対して自分自身と重なる。** つまり、1回、2回、3回、4回、6回対称のどれか、あるいは複数の回転軸を持っている 。
  （ただし、５回対称は存在しない）

その他の点対称操作

- **鏡映操作**

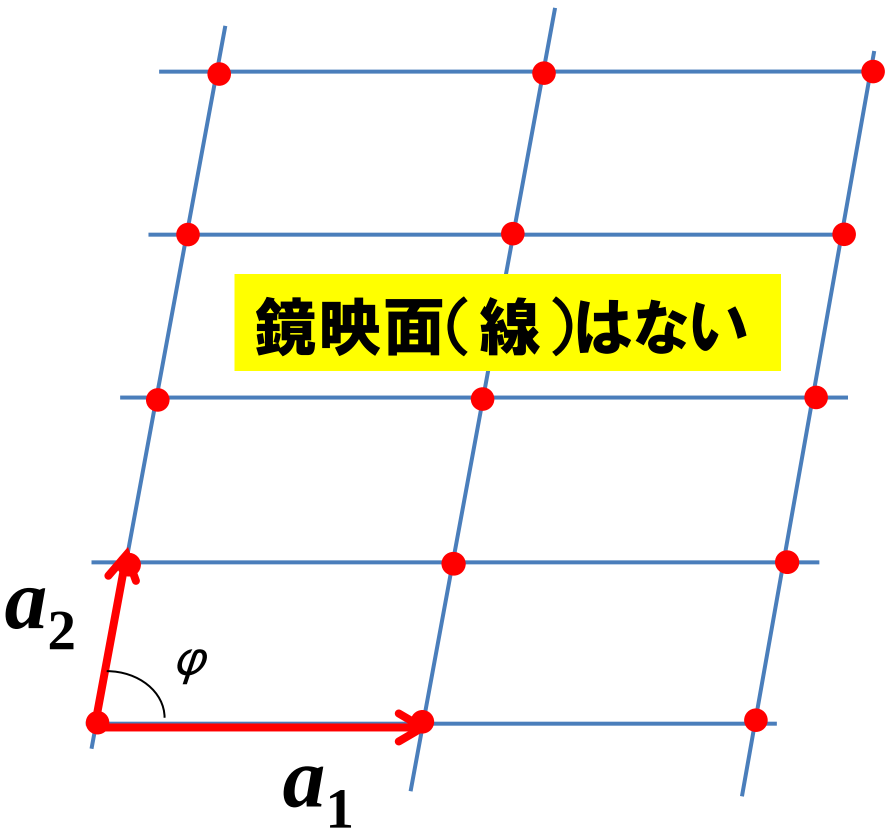
  ある面に対する鏡映が自分自身に重なる操作

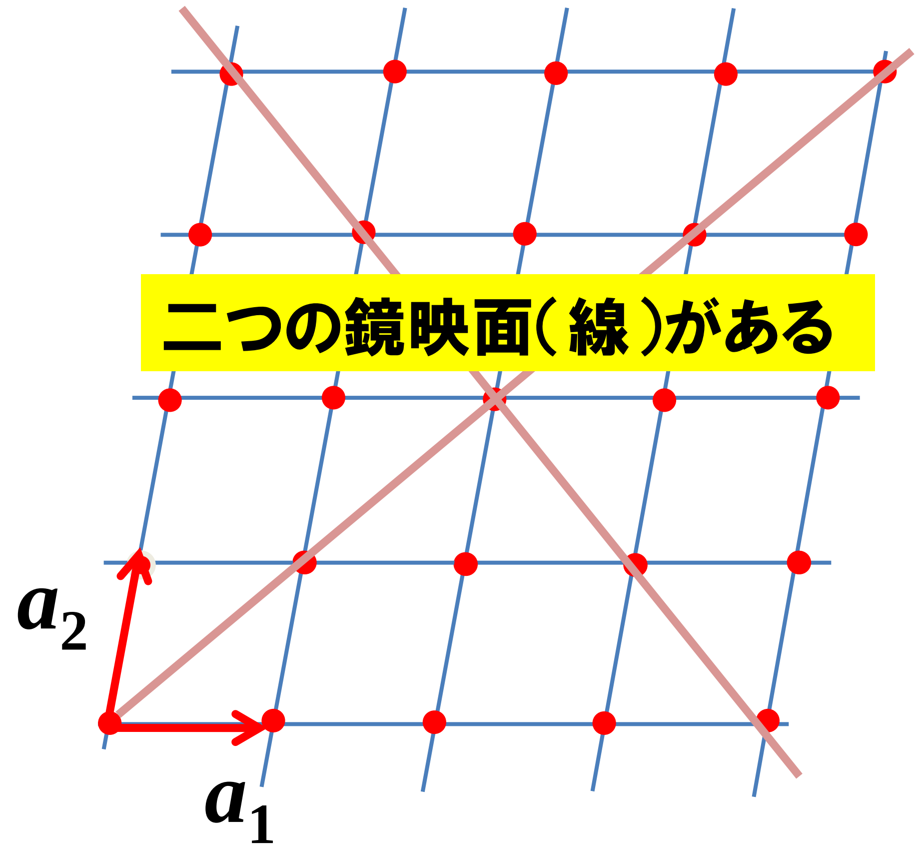
- **反転操作**

  ある軸に対して 180度回転した後、回転軸に垂直な面に対して鏡映操作を行ったとき自分自身に重なる操作

鏡映操作

鏡映操作： ある面に対する鏡映が自分自身に重なる操作



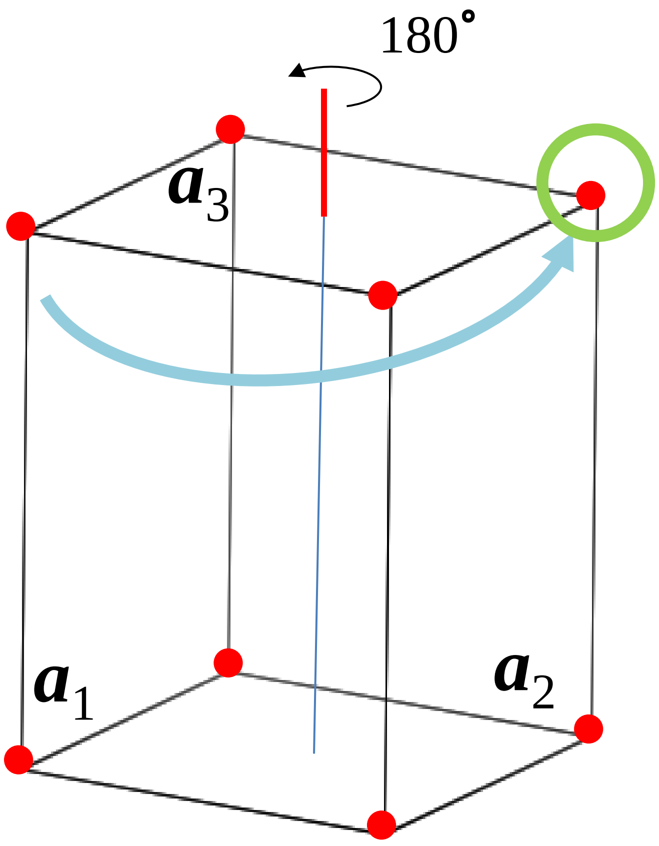


$|a_1| \neq |a_2| \quad \varphi \neq 90°$

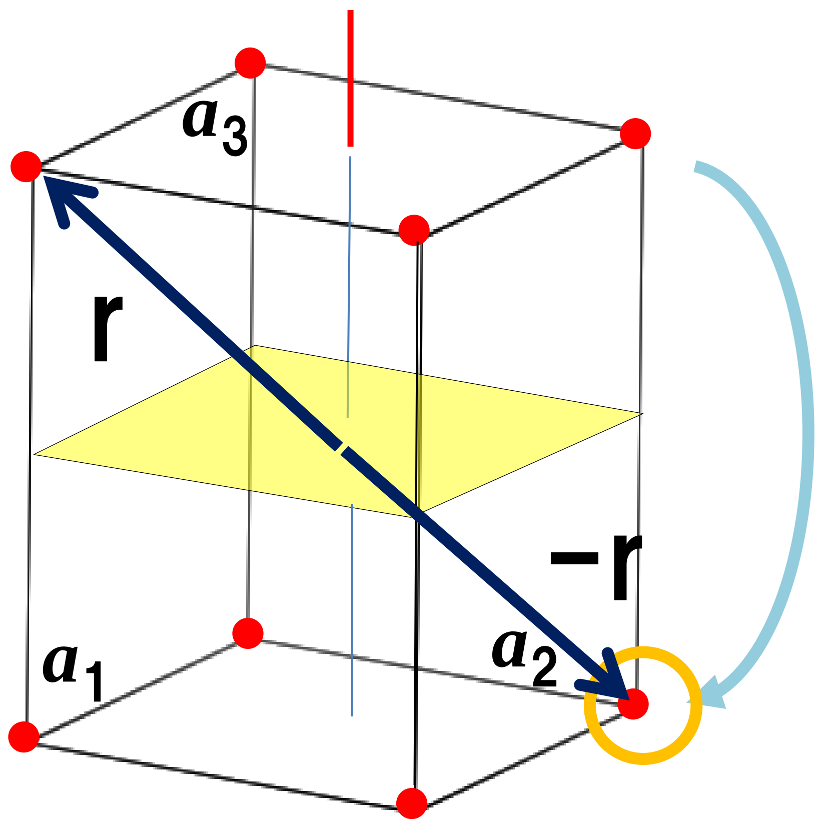
$|a_1| = |a_2| \quad \varphi \neq 90°$

反転操作

ある軸に対して 180度回転した後、回転軸に垂直な面に対して鏡映操作を行ったとき自分自身に重なる操作（ r → −r に対応）



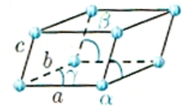
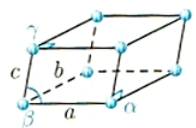
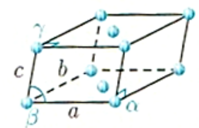
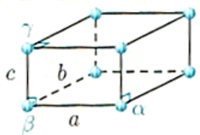
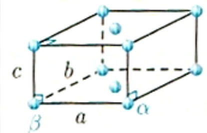
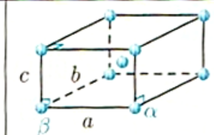
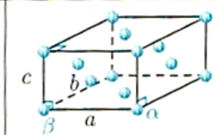
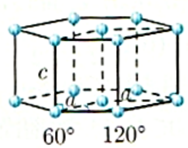
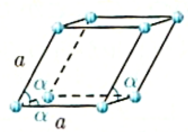
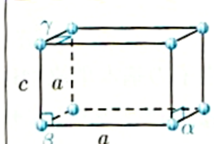
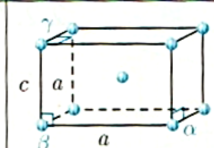
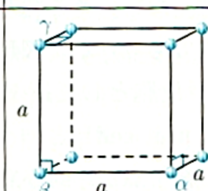
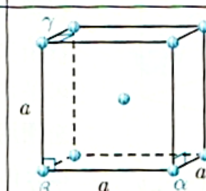
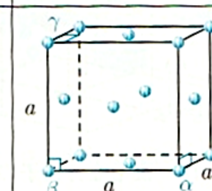
回転軸に対して 2π / 2 の回転操作



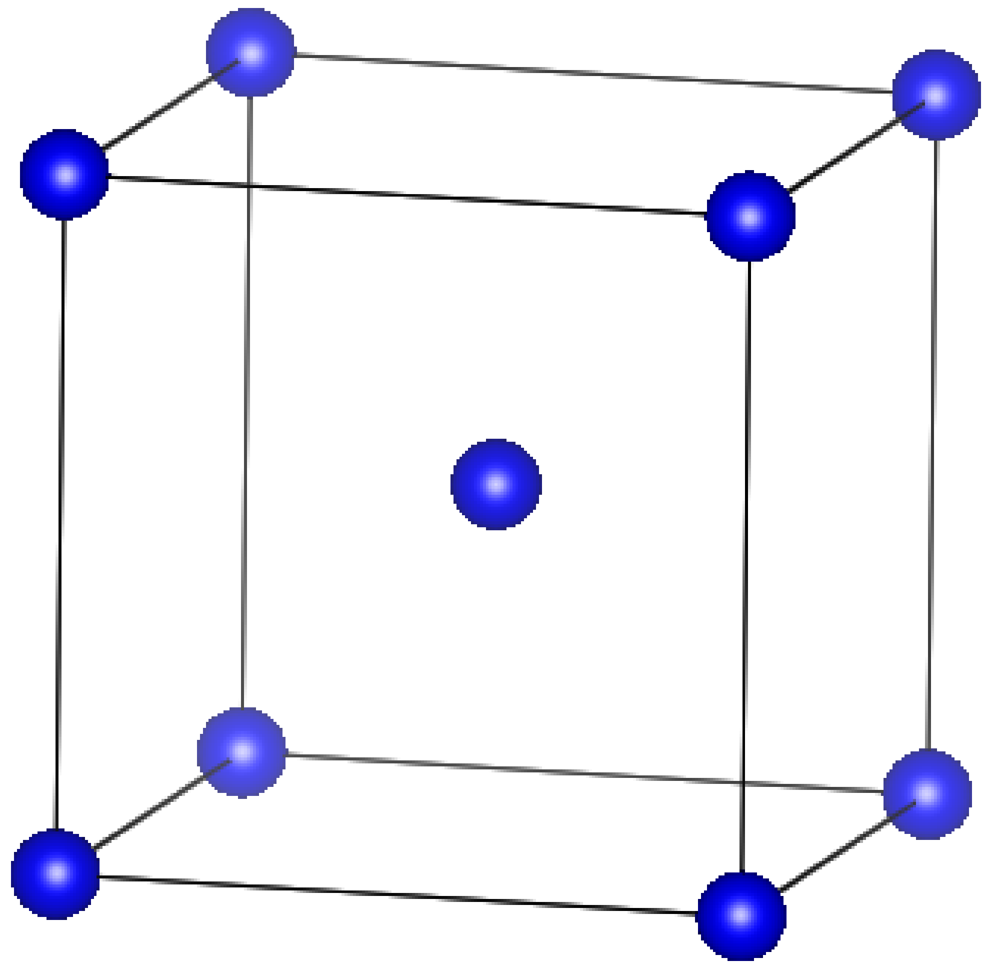
回転軸に垂直な面に対して鏡映操作

では、各結晶系はどのような対称性を持っているのか？

表 2.1　3 次元ブラヴェ格子

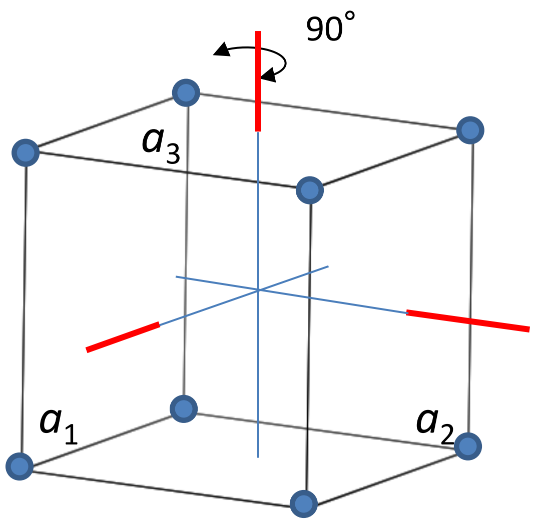
結晶系	格子条件	単純	底心	体心	面心
三斜晶	$a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma$				
単斜晶	$a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90°$, $\beta \neq 90°$				
直方晶	$a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$				
六方晶	$a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90°$, $\gamma = 120°$				
三方晶	$a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$				
正方晶	$a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$				
立方晶	$a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$				

演習　立方晶はどのような対称性を持っていますか？

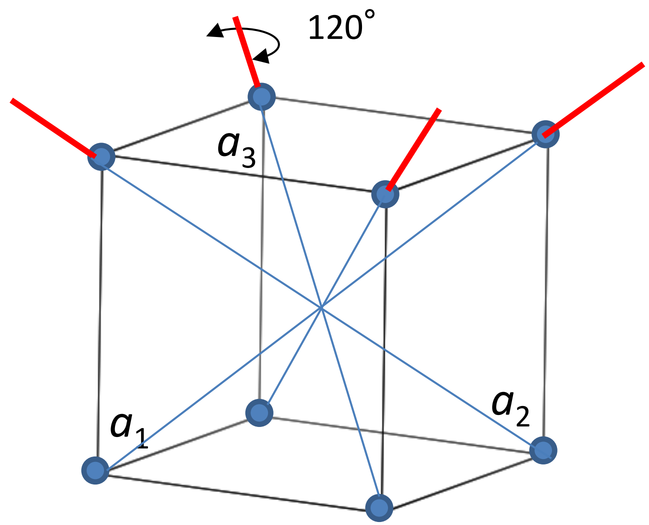


立方晶における対称性

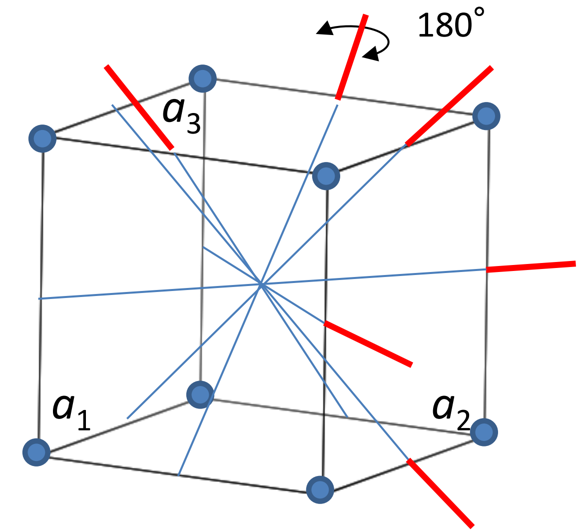
$$a_1 = a_2 = a_3$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90°$$



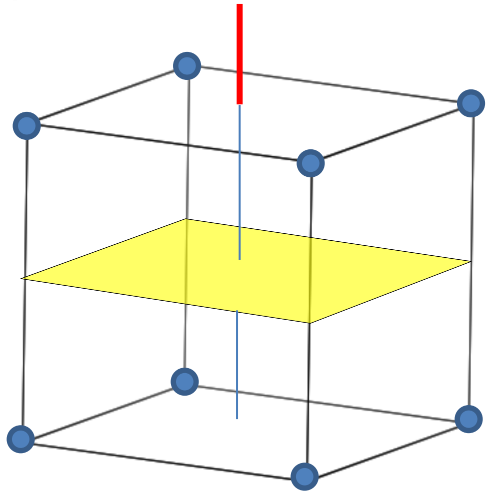
4回回転軸×3



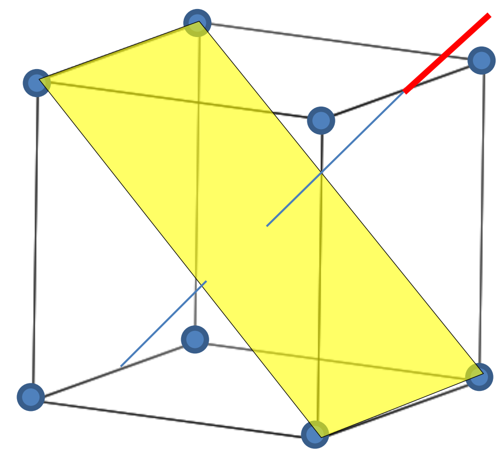
3回回転軸×4



2回回転軸×6



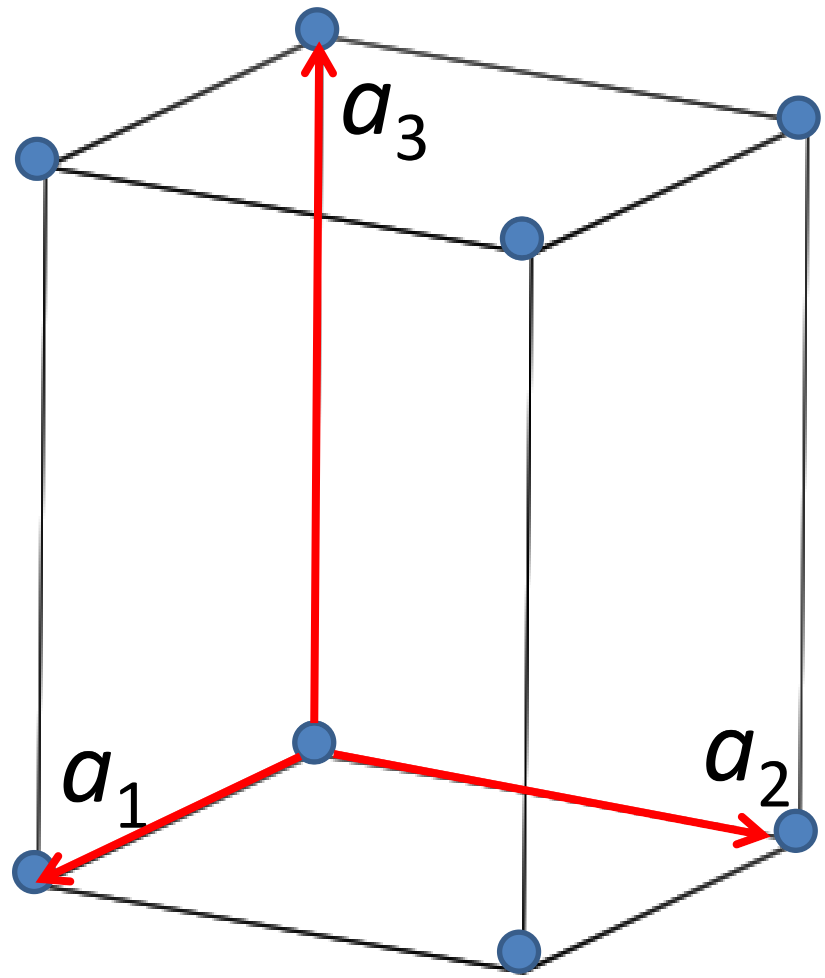
4回回転軸に垂直な鏡映面



２回回転軸に垂直な鏡映面

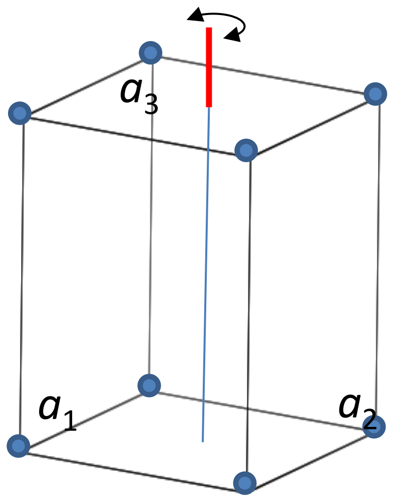
演習　**正方晶はどのような対称性を持っていますか？**

$$\boldsymbol{a_1 = a_2 \neq a_3}$$
$$\boldsymbol{\alpha = \beta = \gamma = 90°}$$

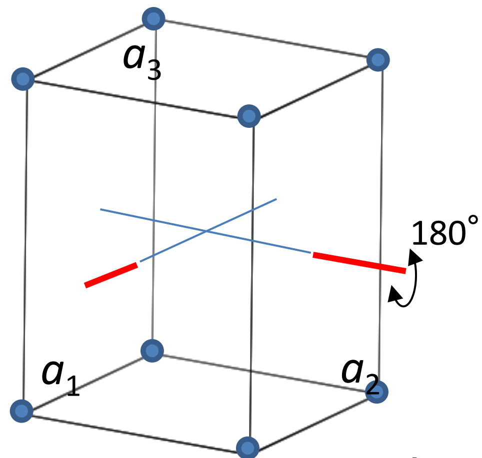


正方晶における対称性

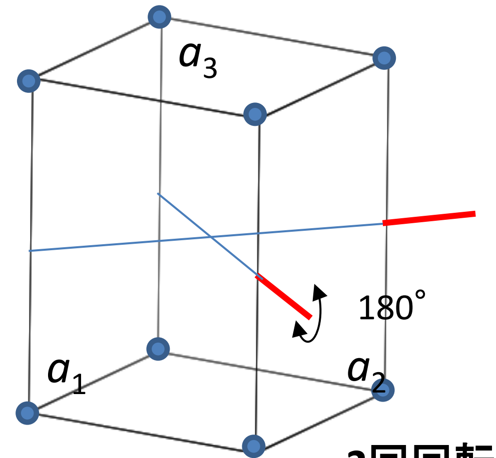
$$a_1 = a_2 \neq a_3$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90°$$



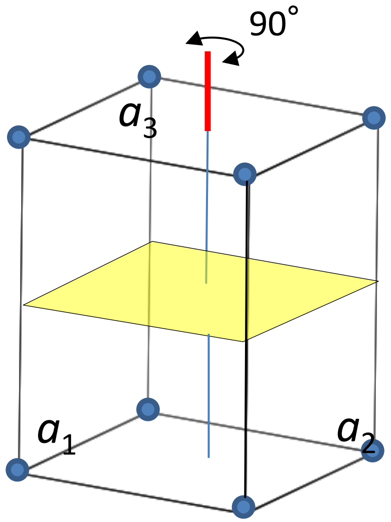
4回回転軸×1



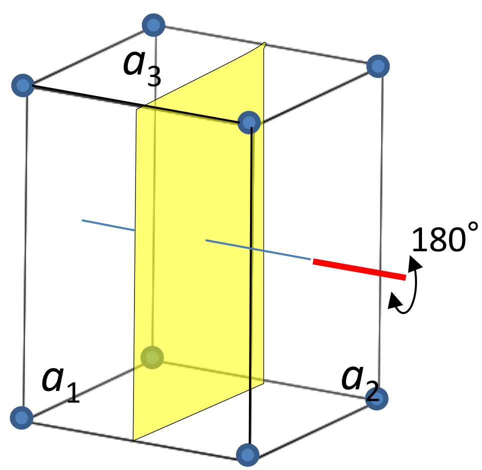
2回回転軸×2



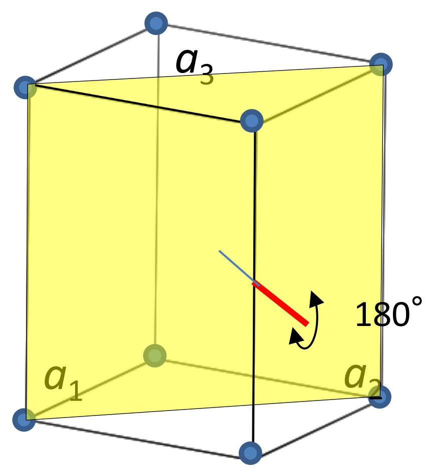
2回回転軸×2



4回回転軸に垂直な鏡映面



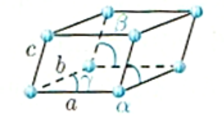
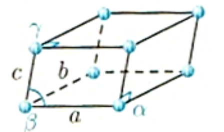
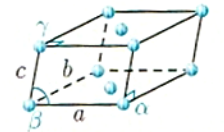
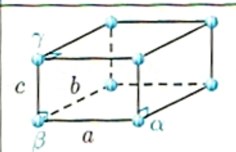
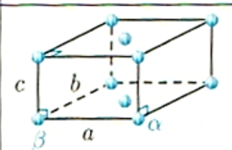
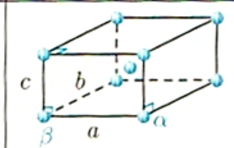
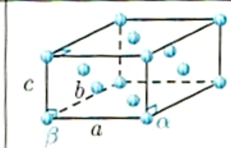
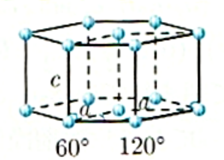
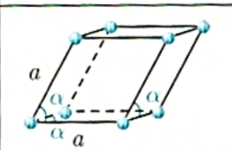
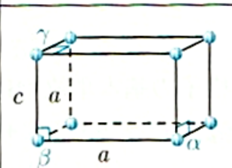
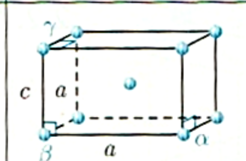
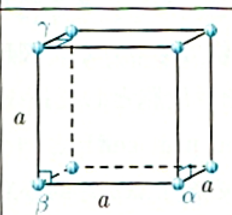
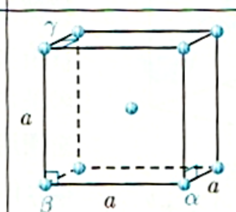
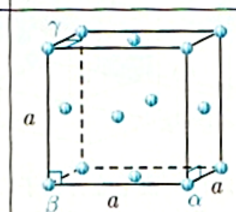
上の２回回転軸に垂直な鏡映面



上の２回回転軸に垂直な鏡映面

ブラヴェ格子の最小対称操作

表 2.1　3 次元ブラヴェ格子

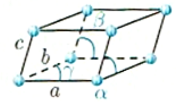
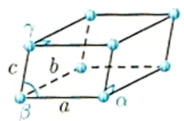
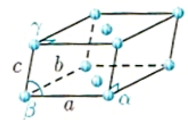
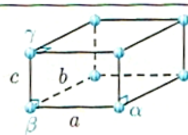
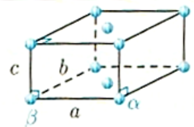
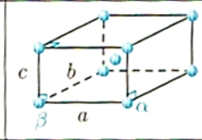
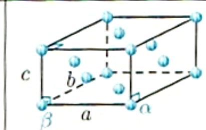
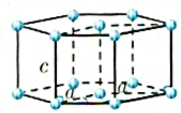
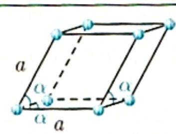
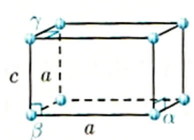
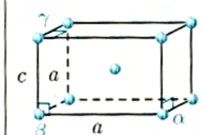
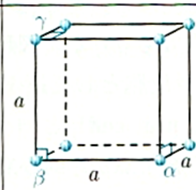
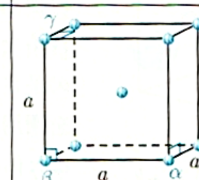
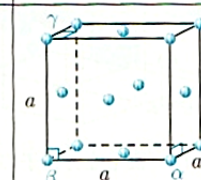
結晶系	格子条件	単純	底心	体心	面心
三斜晶	$a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma$				
単斜晶	$a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90°$, $\beta \neq 90°$				
直方晶	$a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$				
六方晶	$a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90°$, $\gamma = 120°$				
三方晶	$a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$				
正方晶	$a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$				
立方晶	$a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$				

結晶系を区別するための、最低限の対称操作

三斜	なし
単斜	1つの2回回転軸
直方	互いに直交した３つの２回回転軸
六方	1つの6回回転軸
三方	1つの3回回転軸
正方	１つの4回回転軸
立方	4つの3回回転軸

立方晶で底心がないのはなぜ？

表 2.1　3 次元ブラヴェ格子

結晶系	格子条件	単純	底心	体心	面心
三斜晶	$a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma$				
単斜晶	$a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90°$, $\beta \neq 90°$				
直方晶	$a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$				
六方晶	$a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90°$, $\gamma = 120°$	 60° 120°			
三方晶	$a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$				
正方晶	$a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$				
立方晶	$a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$				

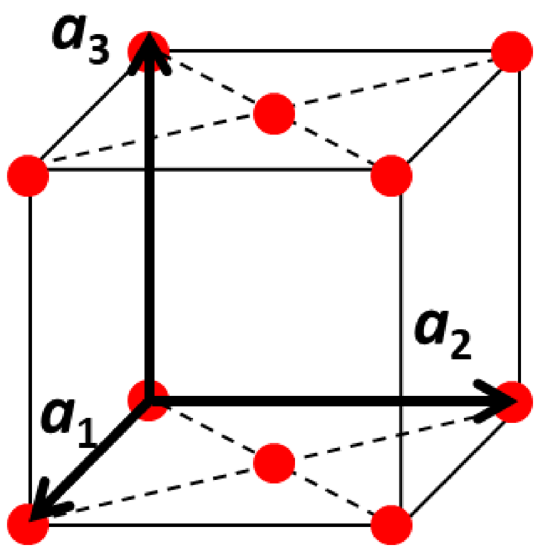
立方晶に（底心）の格子型がない理由

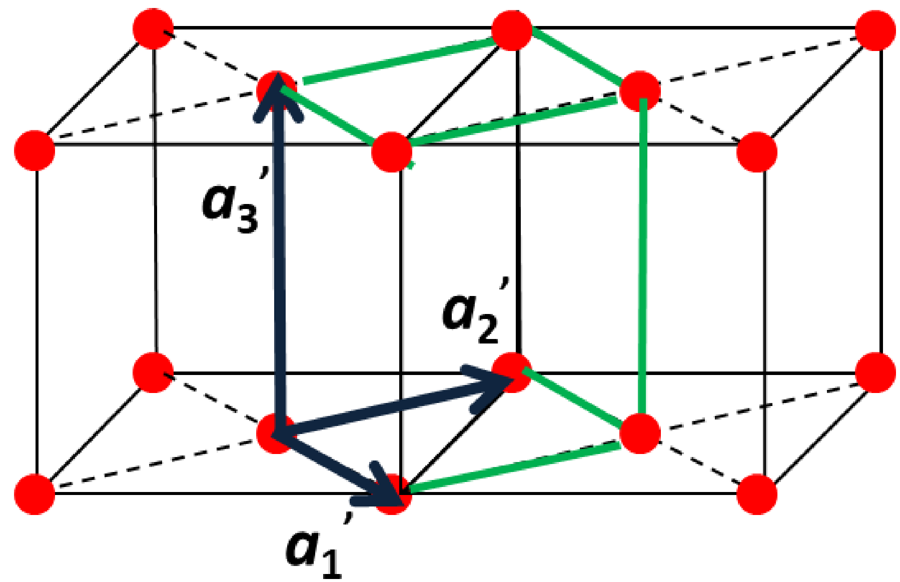
立方晶

$$a_1 = a_2 = a_3$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90°$$

正方晶

$$a_1' = a_2' \neq a_3'$$
$$\alpha' = \beta' = \gamma' = 90°$$





新たに結晶軸 $\boldsymbol{a}_1'$, $\boldsymbol{a}_2'$, $\boldsymbol{a}_3'$ を取り直すと、$a_1' = a_2' = \frac{a_1}{\sqrt{2}} = \frac{a_2}{\sqrt{2}}$、$a_3' = a_1 = a_2 = a_3$ の格子定数を持つ正方晶の単純格子と見なすことができるため、立方晶に 底心 の格子型はない。

ウィグナー・ザイツ胞

ウィグナー・ザイツ胞

2次元