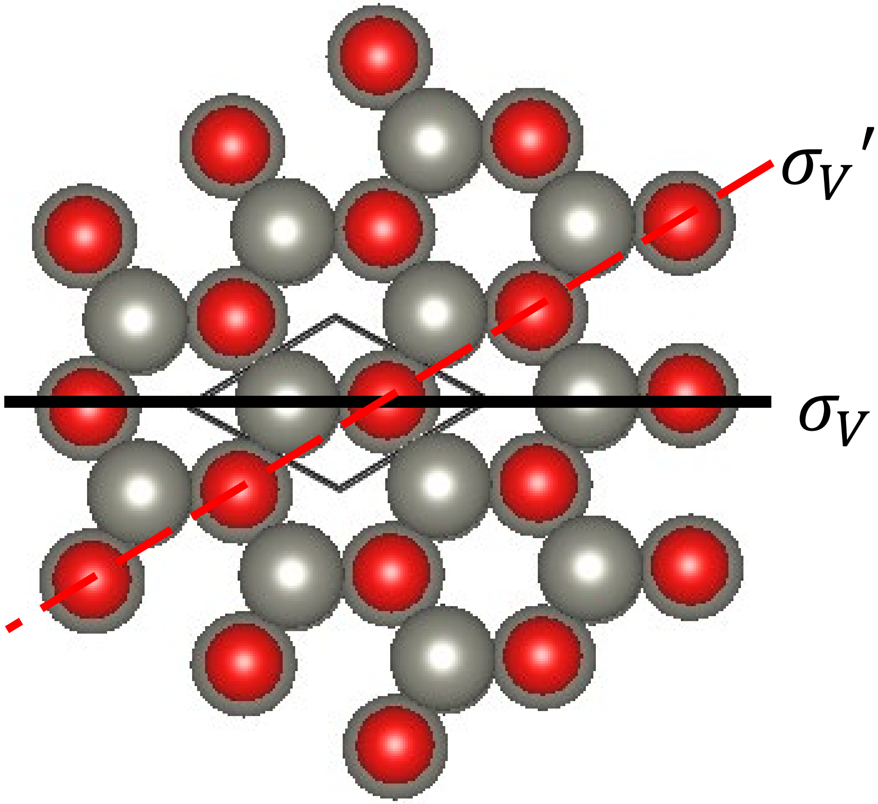
問題

ZnOのσ_V面, σ_V'面, (0001)面 について、以下について述べよ。

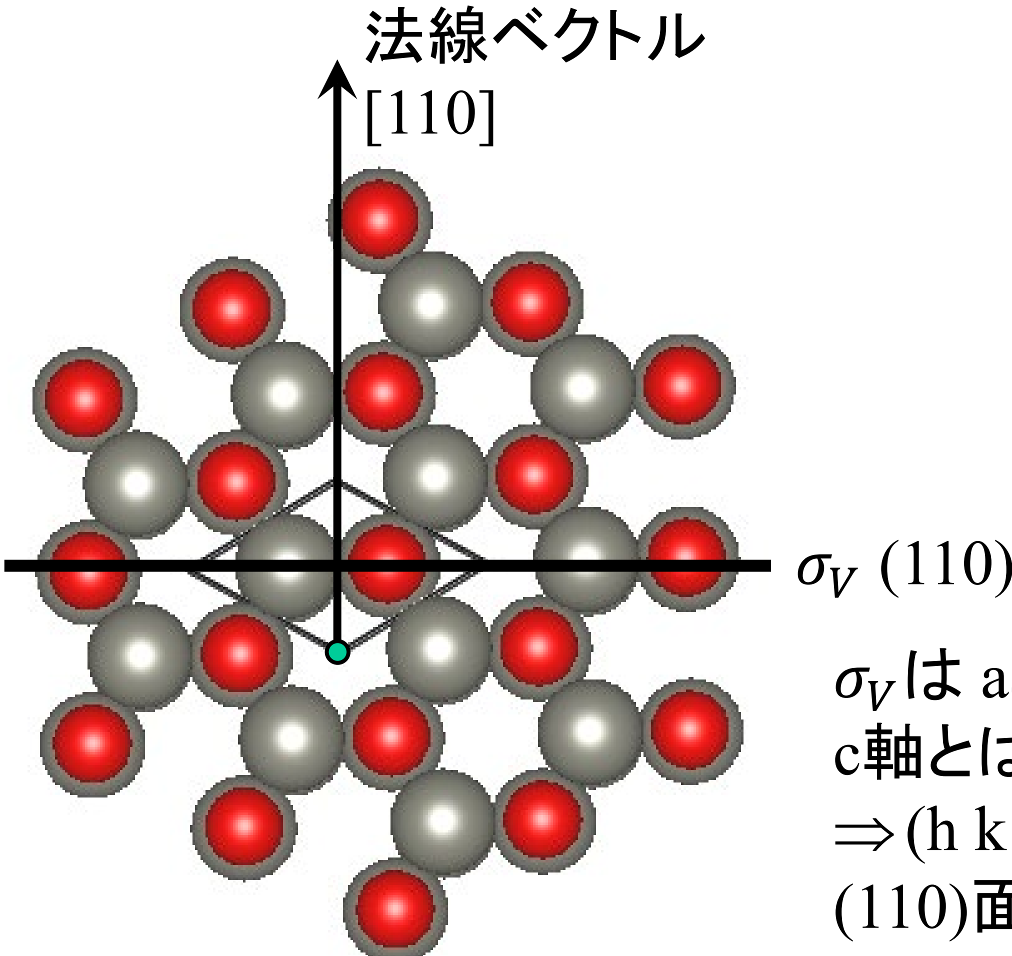
1. 面指数を求めよ
2. そのミラー指数をもつ方位ベクトルを描け

ZnOの*a*–*b*面内の原子配列

赤い酸素原子の配列を見ると、C_6対称がはっきりわかる

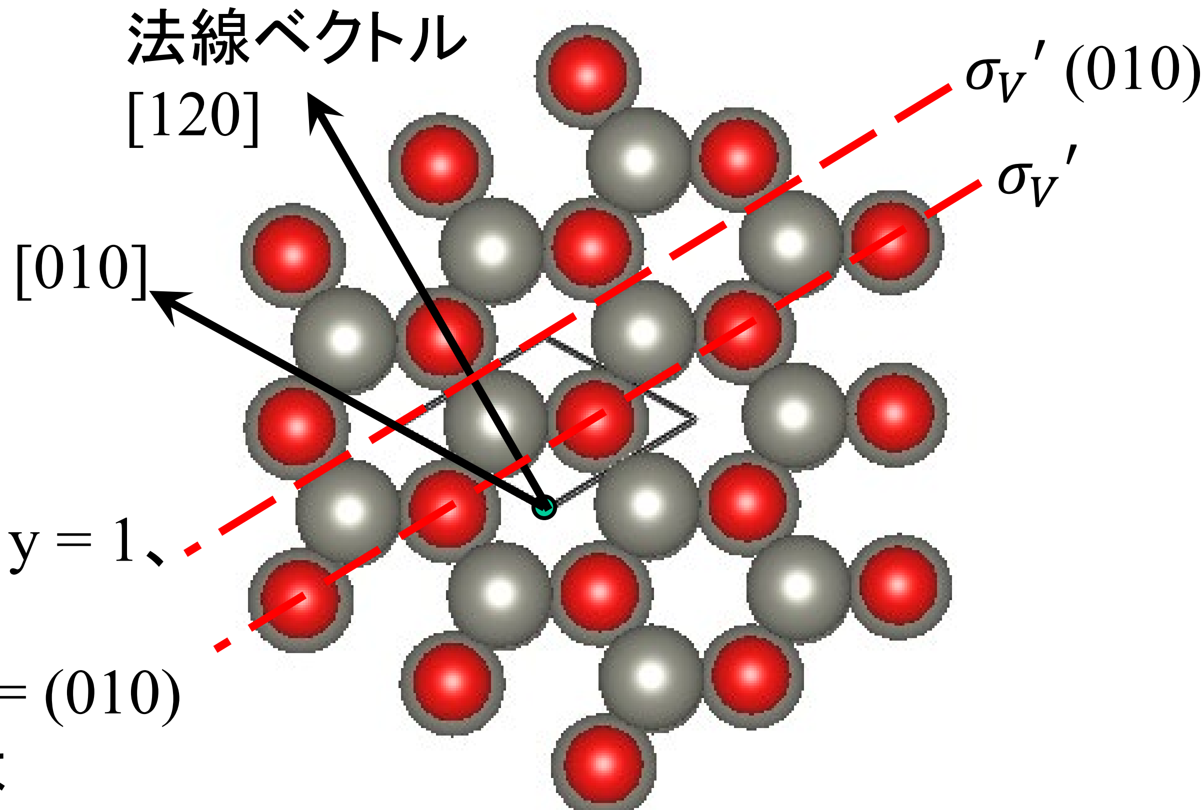


σ_v面は面指数と法線ベクトルの指数が一致



σ_Vは a軸を x = 1, b軸を y = 1で交わり、
c軸とは交わらない (z = ∞で交わる)。
$\Rightarrow$(h k l) = (1/1 1/1 1/∞) = (110)
(110)面の法線ベクトルは
$\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b} + 0\,\boldsymbol{c}$ であることから、[110]

σ_v'面: 面指数と法線ベクトルの指数は異なる
ー作図による法線ベクトルの解ー



σ_V'は a軸を x = ∞, b軸を y = 1、
c軸を z = ∞で交わる。
⇒ (h k l) = (1/∞ 1/1 1/∞) = (010)
(010)面の法線ベクトルは
(1/2)***a*** + ***b*** + 0 ***c*** であることから、[120]

[010]ベクトルは 0***a*** + ***b*** + 0***c***

ベクトル演算の考え方 I

１．ベクトルをデカルト座標 (Cartesian) での成分で表現する

(i) デカルト座標での基本ベクトル (基底ベクトル) を

$\boldsymbol{e_1}, \boldsymbol{e_2}, \boldsymbol{e_3}$ $(\boldsymbol{e_i} \cdot \boldsymbol{e_j} = \boldsymbol{\delta_{ij}})$ とすると、任意のベクトルは

$$\boldsymbol{r} = x_1\boldsymbol{e_1} + x_2\boldsymbol{e_2} + x_3\boldsymbol{e_3} = x_i\boldsymbol{e_i}$$

以後、ベクトル成分の同じ添え字が対になって現れ、
和を取ることが自明な場合には∑記号を省略する $(\sum_i x_i\boldsymbol{e_i} \equiv x_i\boldsymbol{e_i})$

(ii) ベクトル同士の内積と外積から、
すべての幾何学量の計算ができる

$$\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{r}' = x_i x_i{}'$$

$$\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{r}' = (x_2x_3' - x_3x_2',\ x_3x_1' - x_1x_3', x_1x_2' - x_2x_1')$$

ベクトル演算の考え方 II

ベクトルは、特定の座標 (デカルト座標など) がなくても、
本質は変わらない ＝＞ 特定の座標を仮定しなくても計算できる

１．基底ベクトルを $\boldsymbol{a_i}$ とすると($\boldsymbol{a_i} \cdot \boldsymbol{a_j} \neq \delta_{ij}$)、
任意のベクトルは $\boldsymbol{r} = x_1\boldsymbol{a_1} + x_2\boldsymbol{a_2} + x_3\boldsymbol{a}_3 = x_i\boldsymbol{a}_\mathbf{i}$

２．次の計量テンソルが与えられれば、
すべてのベクトル演算は実行可能である

$g_{ij} = \boldsymbol{a_i} \cdot \boldsymbol{a_j}$　　(デカルト座標では$g_{ij} = \delta_{ij}$)

３．直交するベクトルはGram–Schmidtの直交化法で求める

$$\boldsymbol{a_{1\perp}} = \boldsymbol{a_1}$$

$$\boldsymbol{a_{2\perp}} = \boldsymbol{a_2} - \frac{\boldsymbol{a_{1\perp}} \cdot \boldsymbol{a_2}}{\boldsymbol{a_{1\perp}} \cdot \boldsymbol{a_{1\perp}}}\boldsymbol{a_{1\perp}}$$

$$\boldsymbol{a_{3\perp}} = \boldsymbol{a_3} - \frac{\boldsymbol{a_{1\perp}} \cdot \boldsymbol{a_3}}{\boldsymbol{a_{1\perp}} \cdot \boldsymbol{a_{1\perp}}}\boldsymbol{a_{1\perp}} - \frac{\boldsymbol{a_{2\perp}} \cdot \boldsymbol{a_3}}{\boldsymbol{a_{2\perp}} \cdot \boldsymbol{a_{2\perp}}}\boldsymbol{a_{2\perp}}$$

ベクトルがなぜ便利なのか

・ベクトルはの本質は、座標の選択に依存しない
　＝＞ 座標変換で、基底ベクトルと座標は変化するが、
　　　ベクトル自体は変わらない

行列で表現する。

$$\boldsymbol{r} = x_1\boldsymbol{a_1} + x_2\boldsymbol{a_2} + x_3\boldsymbol{a} = x_i\boldsymbol{a} = \boldsymbol{X}^t\boldsymbol{A}$$

基底ベクトルが行列 $\boldsymbol{T}$ で変換されたとする。

$$\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{T}\boldsymbol{A}$$

・座標は次のように変換され、ベクトルは不変である。

$$\boldsymbol{X}' = \boldsymbol{T}^{-1t}\boldsymbol{X}$$

$$\boldsymbol{r}' = \left(\boldsymbol{T}^{-1t}\boldsymbol{X}\right)^t\boldsymbol{T}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{X}^t\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{T}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{X}^t\boldsymbol{A} = \boldsymbol{r}$$

・スカラーは（定義上）座標変換に対して不変

デカルト座標を使ったベクトル演算: 格子ベクトル

格子ベクトル : $\boldsymbol{a_1}, \boldsymbol{a_2}, \boldsymbol{a_3}$

デカルト座標 (Cartesian) の基本ベクトル : $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3$

1. 任意性を失わずに、格子ベクトルは以下のようにとれる。

$$\boldsymbol{a_1} = a\boldsymbol{e_1}$$
$$\boldsymbol{a_2} = a_{21}\boldsymbol{e_1} + a_{22}\boldsymbol{e_2}$$
$$\boldsymbol{a_3} = a_{31}\boldsymbol{e_1} + a_{32}\boldsymbol{e_2} + a_{33}\boldsymbol{e_3}$$

2. 軸長、軸角の関係から未知係数 a_{ij} をきめる。

$$\boldsymbol{a_1}\cdot\boldsymbol{a_2} = a^2\cos\frac{\pi}{3} = -\frac{1}{2}a^2 = aa_{21} \qquad => a_{21} = -\frac{1}{2}a$$
$$\boldsymbol{a_2}\cdot\boldsymbol{a_2} = a^2 = {a_{21}}^2 + {a_{22}}^2 \qquad => {a_{22}}^2 = a^2 - {a_{21}}^2 = \frac{3}{4}a^2$$
$$\boldsymbol{a_1}\cdot\boldsymbol{a_3} = 0 = aa_{31} \qquad => a_{31} = 0$$
$$\boldsymbol{a_2}\cdot\boldsymbol{a_3} = 0 = a_{22}a_{32} \qquad => a_{32} = 0$$
$$\boldsymbol{a_3}\cdot\boldsymbol{a_3} = c^2 = {a_{33}}^2 \qquad => a_{33} = c$$

$$\boldsymbol{a_1} = a\boldsymbol{e_1}$$
$$\boldsymbol{a_2} = a\left(-\frac{1}{2}\boldsymbol{e_1} + \frac{\sqrt{3}}{2}\boldsymbol{e_2}\right)$$
$$\boldsymbol{a_3} = c\boldsymbol{e_3}$$

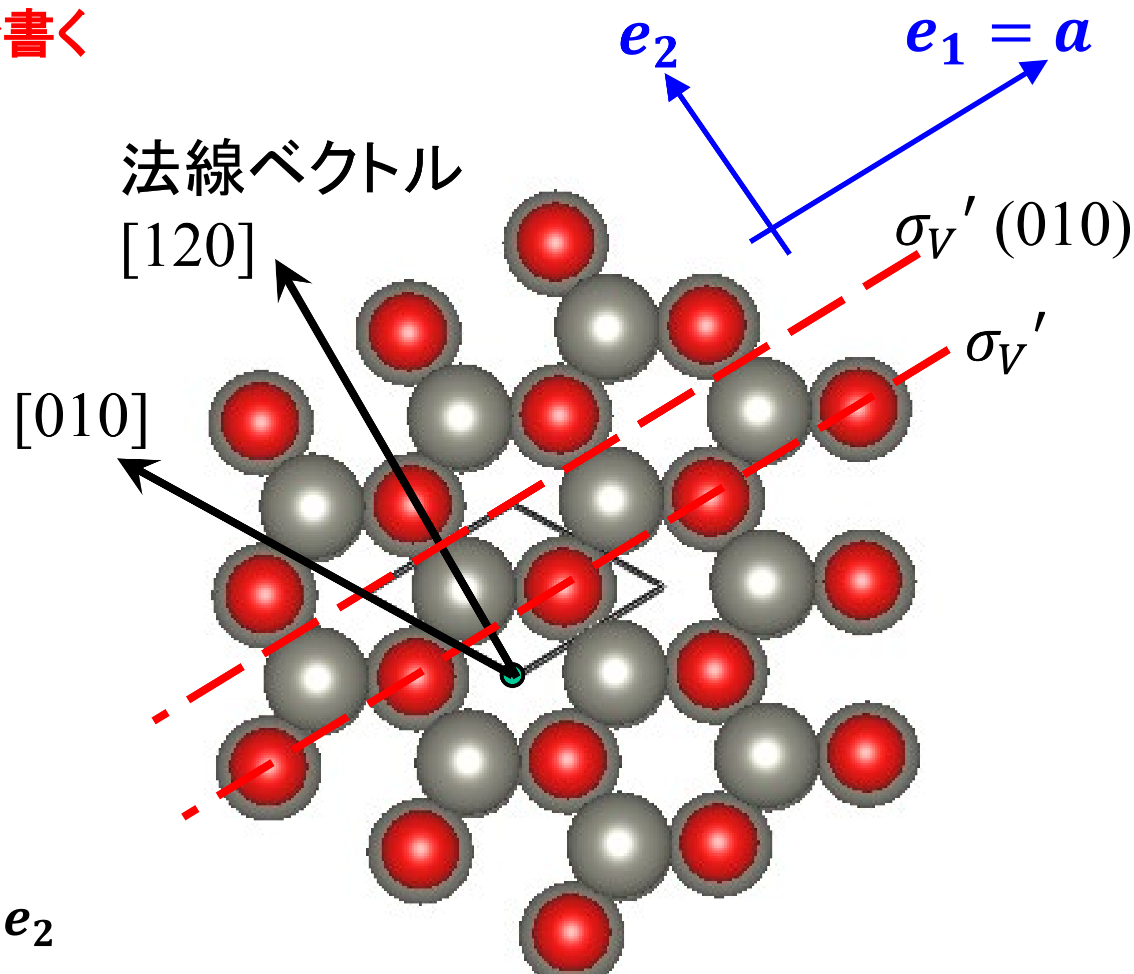
デカルト座標系を使ったベクトル演算: 法線ベクトル

格子ベクトルをデカルト座標系で書く

$$\boldsymbol{a_1} = a\boldsymbol{e_1} \quad (1)$$

$$\boldsymbol{a_2} = a\left(-\frac{1}{2}\boldsymbol{e_1} + \frac{\sqrt{3}}{2}\boldsymbol{e_2}\right) \quad (2)$$

$$\boldsymbol{a_3} = c\boldsymbol{e_3} \quad (3)$$



$\sigma_V{}'$面 [(010)面] 内のベクトル
は次のように表せる

$$\boldsymbol{a}_{\sigma_V} = \alpha_1\boldsymbol{a_1} + \alpha_3\boldsymbol{a_3} \quad \textbf{(4)}$$

α_1, α_3 **は任意の実数**

法線ベクトルは$\boldsymbol{a_1} \times \boldsymbol{a}_{\sigma_V}$:

(4)式より

$$\boldsymbol{a_1} \times \boldsymbol{a}_{\sigma_V} = a\alpha_3\boldsymbol{e_1} \times \boldsymbol{e_3} = -a\alpha_3\boldsymbol{e_2}$$

(2)式と(1)式より

$$a\boldsymbol{e_2} = \frac{2}{\sqrt{3}}\boldsymbol{a_2} + \frac{1}{\sqrt{3}}a\boldsymbol{e_1} = \frac{2}{\sqrt{3}}\boldsymbol{a_2} + \frac{1}{\sqrt{3}}\boldsymbol{a_1}$$

※ $\boldsymbol{a_1} \times \boldsymbol{a}_{\sigma_V} \propto [120]$

デカルト座標系を使わないベクトル演算II: 法線ベクトル

$\sigma_V{}'$面 [(010)面] の法線ベクトルは一般性を失わずに次のように書ける

$$\boldsymbol{a}_{\perp\sigma_V} = \alpha_1\boldsymbol{a_1} + \alpha_2\boldsymbol{a_2} + \alpha_3\boldsymbol{a_3}$$

$\boldsymbol{a}_{\perp\sigma_V}$は $\sigma_V{}'$面 [(010)面] 内のベクトル$\boldsymbol{a_1}, \boldsymbol{a_3}$に直交するので

$$\boldsymbol{a_1} \cdot \boldsymbol{a}_{\perp\sigma_V} = \alpha_1 a^2 + \alpha_2 \boldsymbol{a_1} \cdot \boldsymbol{a_2} = 0$$

$$\alpha_1 - \frac{1}{2}\alpha_2 = 0$$

$$\boldsymbol{a_3} \cdot \boldsymbol{a}_{\perp\sigma_V} = \alpha_3 a^2 = 0$$

$$\boldsymbol{a}_{\perp\sigma_V} = \alpha_1(\boldsymbol{a_1} + 2\boldsymbol{a_2}) \propto [120]$$