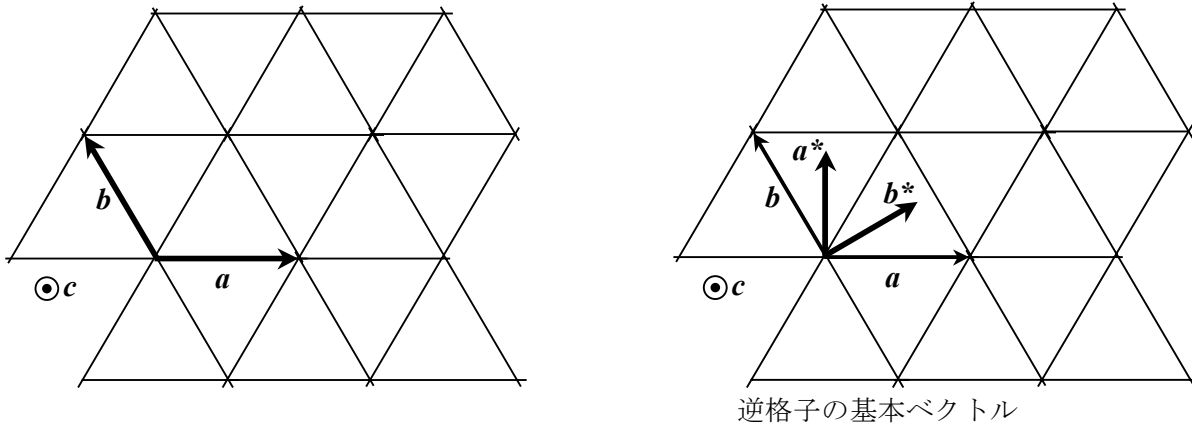


第10回講義レポート課題に関して

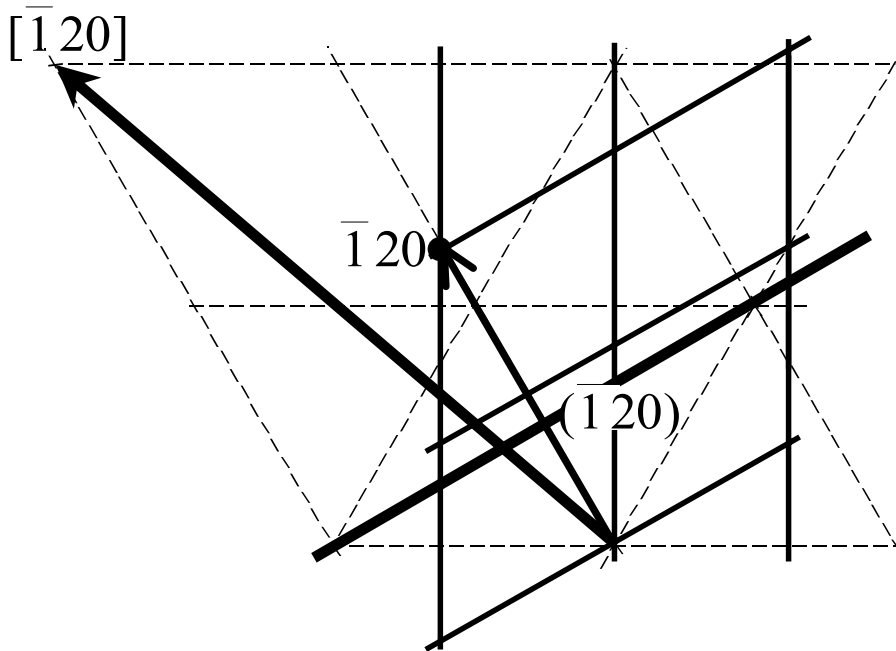
1. 次の問いに答えよ

ZnO は六方晶系に属する結晶である。下に、c 軸方向から見た六方晶の格子を a-b 面に投影した図を示す。次の質問に答えよ。



逆格子の基本ベクトル

$[\bar{1}20]$ ベクトル、 $(\bar{1}20)$ 面と逆格子の $\bar{1}20$ 点を描け。



消滅則について復習

fcc

$$F_{hkl} = f[1 + \exp(\pi i(h+k)) + \exp(\pi i(h+l)) + \exp(\pi i(k+l))]$$

h,k,l が非混合 : $F_{hkl} = 4f$

h,k,l が混合 : $F_{hkl} = 0$

NaCl(岩塩型構造)

$$F_{hkl} = (f_{Na} + f_{Cl} \exp(\pi i(h+k+l)))[1 + \exp(\pi i(h+k)) + \exp(\pi i(h+l)) + \exp(\pi i(k+l))]$$

h,k,l が非混合 : $F_{hkl} = 4(f_{Na} + f_{Cl} \exp(\pi i(h+k+l)))$

すべて偶数 : $F_{hkl} = 4(f_{Na} + f_{Cl})$

すべて奇数 : $F_{hkl} = 4(f_{Na} f_{Cl})$

KCl の場合、 $f_k - f_{Cl} \neq 0$ なので、 $F_{hkl} \neq 0$

h,k,l が混合 : $F_{hkl} = 0$

面を描く範囲について

教科書などで、単位格子内の範囲で面を描いているものがあるが・・・

面の定義 : a, b を独立な2つのベクトル、 (x,y) を任意の実数とするとき、 $xa + yb$ が張る空間

結論 : 「面は無限に広がっている」ので、どのように描いても構わない (どうせ無限は描けないから)

前回のまとめ

- 1) X線回折法により回折線の指数、回折角度、強度(結晶構造因子)を測定することにより、結晶構造解析ができる。
- 2) X線回折法では電子密度を測定するため、軽原子の感度が低い。
- 3) 中性子回折法では核スピンを測定するため、核スピンの大きい同位体を使うことで軽原子でも高精度分析が可能。
- 4) 電子回折法では、電子線を細かく絞れるため、数Åの領域の分析が可能。ただし多重散乱を考慮する必要がある。
- 5) 3次元の並進対称性を持たないが回折現象の生じる物質がある(準結晶)。

6) LCAO法では、分子の電子構造は Roothaan-Hall 方程式

$$\begin{vmatrix} H_{11} - ES_{11} & H_{12} - ES_{12} & \cdots & H_{1n} - ES_{1n} \\ H_{21} - ES_{21} & H_{22} - ES_{22} & & H_{2n} - ES_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ H_{n1} - ES_{n1} & H_{n2} - ES_{n2} & \cdots & H_{nn} - ES_{nn} \end{vmatrix} = 0$$

を解くことで知ることができる。

7) 異なる軌道間の S_{ij} を0とし、隣り合う原子間の H_{ij} のみを残す(Hückel 近似、Tight-binding 近似)と、

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E & H_{12} & \cdots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} - E & & H_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ H_{n1} & H_{n2} & \cdots & H_{nn} - E \end{vmatrix} = 0$$

を解けばよいことになる。

- 8) H_2 分子には結合軌道、反結合軌道があり、原子の 1s 軌道のエネルギーからの変化は $|H_{12}|$ となる。
- 9) 仮想的な直線状 H_3 分子には結合軌道、反結合軌道の他に非結合軌道ができる。
- 10) 環状 H_3 分子の波動関数とエネルギー準位は

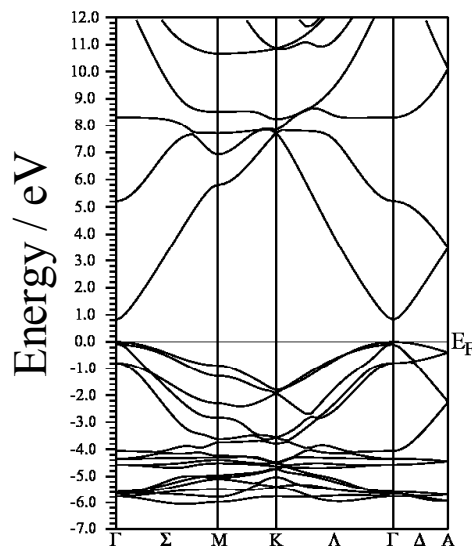
$$\phi_{kl} = \sum_j \varphi_j \exp(ik_l x_j) \quad (k_l = \frac{2\pi}{Na} l, N=3)$$

$$E(k_l) = \varepsilon_{1s} + 2h_{12} \cos(k_l a)$$

となる。

第 11 回講義 レポート課題

下図は、六方晶系に属する ZnO のバンド構造である。



1. 次の問いに答えよ。

- (ア) 最高被占有準位、最低非占有準位のエネルギーの値と k 点はどこか。また、ZnO は直接遷移型か間接遷移型か、理由をつけて答えよ。
- (イ) 電子と正孔のどちらの有効質量が軽いか、理由をつけて答えよ。
- (ウ) 実際の ZnO のバンドギャップはいくらか、調べてみよ。
- (エ) 六方晶の実格子の単位格子(3次元の平行六面体図)を描き、M 点、K 点、A 点が実格子のどの方位になるかを描き加えよ。

2. 講義に関する質問、疑問、感想、要望など

ブリリアンゾーンの特殊位置、軸の定義の調べ方

bibao crystallographic server: <http://www.cryst.ehu.es/>

Space Groups Retrieval Tools

の

KVEC The k-vector types and Brillouin zones of Space Groups

を選んで空間群番号を入力する。

例： ZnO: ウルツ鉱型、六方晶、 $P6_3mc$ (No.186)

===結果=== (注：下表の記号で GM は Γ 点のこと)

The k-vector types of space group 186 [$P6_3mc$]
 (Table for arithmetic crystal class 6mmP)
 ($P6mm-C_{6v}^1$ (183) to $P6_3mc-C_{6v}^4$ (186))
 Reciprocal-space group ($P6mm$)*, No. 183
 [Brillouin zone]

k-vector label		Wyckoff position			Parameters
CDML		ITA			ITA
GM	0,0,0	1	a	6mm	0,0,0
A	0,0,1/2 ex	1	a	6mm	0,0,1/2
DT	0,0,u ex	1	a	6mm	0,0,z : 0<z<1/2
D U	0,0,-u ex	1	a	6mm	0,0,z : -1/2<z<0
GM + A + DT + D U [GA]		1	a	6mm	0,0,z : -1/2<z<= 1/2
K	1/3 ,1/3 ,0	2	b	3m.	2/3,1/3,0
H	1/3 ,1/3 ,1/2	2	b	3m.	2/3,1/3,1/2
P	1/3 ,1/3 ,u ex	2	b	3m.	2/3,1/3,z : 0<z<1/2
P A	1/3 ,1/3 ,-u ex	2	b	3m.	1/3,2/3,z : -1/2<z<0
K + H + P + P A [JH]		2	b	3m.	1/3,2/3,z : -1/2<z<= 1/2
M	1/2 ,0,0	3	c	2mm	1/2,0,0
L	1/2 ,0,1/2	3	c	2mm	1/2,0,1/2
U	1/2 ,0,u ex	3	c	2mm	1/2,0,z : 0<z<1/2
U A	1/2 ,0,-u	3	c	2mm	1/2,0,z : -1/2<z<0
M + L + U + U A [NL]		3	c	2mm	1/2,0,z : -1/2<z<= 1/2
SM	u,0,0	6	d	..m	x,0,0 : 0<x<1/2
R	u,0,1/2 ex	6	d	..m	x,0,1/2 : 0<x<1/2
D	u, 0, v ex	6	d	..m	x,0,z : 0<x<1/2; 0<z<1/2
D A	u, 0, -v ex	6	d	..m	x,0,z : 0<x<1/2; -1/2<z<0
SM + R + D + D A		6	d	..m	x,0,z : 0<x<1/2; -1/2<z<= 1/2
LD	u, u, 0	6	e	.m.	x,x/2,0 : 0<x<2/3
T	1/2 -u, 2u, 0 ex	6	e	.m.	x,2x-1,0 : 1/2<x<2/3
T ~ T ₁ [KM C]					x,x/2,0 : 2/3<x<1
S	1/2 -u, 2u,1/2 ex	6	e	.m.	x,2x-1,1/2 : 1/2<x<2/3
S ~ S ₁ [HL C]					x,x/2,1/2 : 2/3<x<1
Q	u, u, 1/2	6	e	.m.	x,x/2,1/2 : 0<x<2/3
C	u, u, v	6	e	.m.	x,x/2,z : 0<x<2/3; 0<z<1/2

CA	$u, u, -v$	6	e	.m.	$x, x/2, z : 0 < x < 2/3; -1/2 < z < 0$
F	$1/2 -u, 2u, v$	6	e	.m.	$x, 2x-1, z : 1/2 < x < 2/3; 0 < z < 1/2$
$F \sim F_1$ [KM CHL C]					$x, x/2, z : 2/3 < x < 1; 0 < z < 1/2$
FA	$1/2 -u, 2u, -v$	6	e	.m.	
$FA \sim FA_1$ [KM CJN C]					$x, x/2, z : 2/3 < x < 1; -1/2 < z < 0$
$LD + T_1 + S_1 + Q + C + CA + F_1 + FA_1$					
[GM M CAL C]		6	e	.m.	$x, x/2, z : 0 < x < 1 \forall x=2/3; -1/2 < z \leq 1/2$
<hr/>					
GP	u, v, w [KMAHL]	12	f	1	$x, y, z : 0 < y < x/2; 2x-1 < y; -1/2 < z \leq 1/2$

[Brillouin Zone]をクリックする。

