立方格子の投影による準格子

1　準格子の構成

3 次元空間における直交単位ベクトルを $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3$ とすると立方格子点 $\boldsymbol{p}$ は

$$\boldsymbol{p} = p_1\boldsymbol{e}_1 + p_2\boldsymbol{e}_2 + p_3\boldsymbol{e}_3 \qquad (p_1, p_2, p_3 : \text{整数}) \tag{1}$$

で与えられる．原点 (0,0,0) を通る平面 Π_0 と格子点 (1,1,1) を通り Π_0 に平行な平面 Π に挟まれた立方格子点を Π_0 に投影してできる 2 次元格子が「準格子」である．図 1 に示すように Π_0 内に互いに直交する単位ベクトル $\boldsymbol{e}'_1, \boldsymbol{e}'_2$ を定義し，これらのベクトル積で与えられる単位ベクトル $\boldsymbol{e}'_3$ を定義するとこれらは直交変換行列 T によって次式で与えられる．

$$\boldsymbol{e}'_j = \sum_{k=1}^{3} t_{jk}\boldsymbol{e}_k \qquad (j = 1, 2, 3). \tag{2}$$

ここに t_{jk} は T の要素で，$t_{jk} = \boldsymbol{e}'_j\boldsymbol{e}_k$ である．また，p_j は変換式

$$p'_j = \sum_{k=1}^{3} t_{jk}p_k \qquad (j = 1, 2, 3). \tag{3}$$

によって新しい座標 p'_j に変換される．平面 Π_0 と Π の間の格子点 (p_1, p_2, p_3) の条件は次式で与えられる．

$$0 \leq \ p'_3 < \ \sum_{k=1}^{3} t_{3k} \tag{4}$$

上式を満たす (p_1, p_2, p_3) を (3) に代入することによって平面 Π_0 上に準格子点 (p'_1, p'_2) が得られる．(4) は平面 Π_0 と Π 間に目をおいて立方格子点を眺めたとき 2 平面間にある格子点の条件であるから所謂「窓」と呼ばれる．図 2 からわかるように，平面 Π_0 に投影されて得られるセルは立方体の 3 種類の側面からのものである．

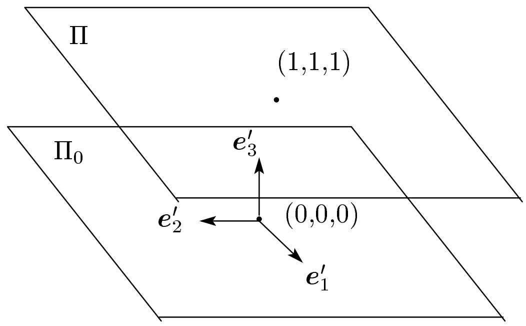

図 1: 平面 Π_0 と Π

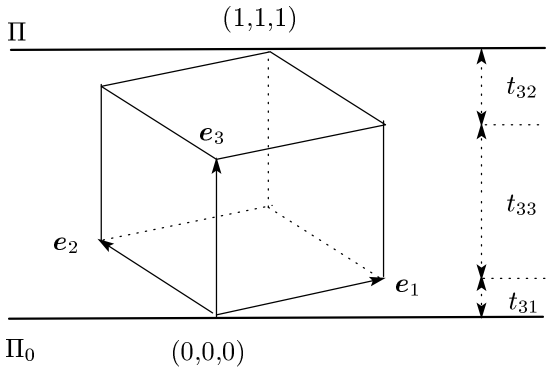

図 2: 窓の間隔

すなわち，単位ベクトル $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3$ を平面 Π_0 に投影された格子をそれぞれ $\boldsymbol{e}^{\parallel}_1, \boldsymbol{e}^{\parallel}_2, \boldsymbol{e}^{\parallel}_3$ とすると，

$$\boldsymbol{e}^{\parallel}_j = t_{1j}\boldsymbol{e}'_1 + t_{2j}\boldsymbol{e}'_2, \ (j = 1, 2, 3). \tag{5}$$

得られる準格子は 3 種類のセルから構成される．$\boldsymbol{e}^{\parallel}_1$ と $\boldsymbol{e}^{\parallel}_2$ よりの平行四辺形のセル，$\boldsymbol{e}^{\parallel}_2$ と $\boldsymbol{e}^{\parallel}_3$ よりの平行四辺形のセル，および $\boldsymbol{e}^{\parallel}_3$ と $\boldsymbol{e}^{\parallel}_1$ よりの平行四辺形のセルのである．これらのセルをそれぞれ (2,3) セル，(3,1) セルおよび (1,2) セルと名付ける．各セルが 2 平面内に存在し得る個数は図 2 か

らわかるようにそれぞれ t_{31}, t_{32}, t_{33} に比例する．また，各セルの面積はそれぞれ $S_1 = |\boldsymbol{e}_1^{\|} \times \boldsymbol{e}_2^{\|}|$, $S_2 = |\boldsymbol{e}_2^{\|} \times \boldsymbol{e}_3^{\|}|$，および $S_3 = |\boldsymbol{e}_3^{\|} \times \boldsymbol{e}_1^{\|}|$ であるから，得られる準格子点の面密度 ω は

$$\omega = \frac{\sum_{k=1}^{3} t_{3k}}{\sum_{k=1}^{3} t_{3k} S_k}. \tag{6}$$

然るに，上式の分母は

$$\sum_{k=1}^{3} t_{3k} S_k = \sum_{(ijk)} t_{3k} |\boldsymbol{e}_i^{\|} \times \boldsymbol{e}_j^{\|}| = \sum_{(ijk)} t_{3k}(t_{1i}t_{2j} - t_{2i}t_{1j}) = |T| = 1. \tag{7}$$

なお，上式における和は $(ijk) = (231), (312), (123)$ についてである．したがって，

$$\omega = \sum_{k=1}^{3} t_{3k}. \tag{8}$$

2　準格子の特徴

平面 Π_0 の法線の方向係数を (H, K, L) とすると，

$$\boldsymbol{e}_3' = \frac{1}{F}(H\boldsymbol{e}_1 + K\boldsymbol{e}_2 + L\boldsymbol{e}_3),\ \text{ただし},\ F = \sqrt{H^2 + K^2 + L^2}. \tag{9}$$

$\boldsymbol{e}_2'$ を $\boldsymbol{e}_3$ と $\boldsymbol{e}_3'$ に直交するように選ぶと

$$\boldsymbol{e}_2' = \frac{\boldsymbol{e}_3 \times \boldsymbol{e}_3'}{|\boldsymbol{e}_3 \times \boldsymbol{e}_3'|} = \frac{1}{G}(-K\boldsymbol{e}_1 + H\boldsymbol{e}_2),\ \text{ただし},\ G = \sqrt{H^2 + K^2}. \tag{10}$$

$\boldsymbol{e}_1'$ は

$$\boldsymbol{e}_1' = \boldsymbol{e}_2' \times \boldsymbol{e}_3' = \frac{L}{FG}(H\boldsymbol{e}_1 + K\boldsymbol{e}_2) - \frac{G}{F}\boldsymbol{e}_3. \tag{11}$$

したがって，T は次式で与えられる．

$$T = \begin{pmatrix} \dfrac{LH}{FG} & \dfrac{LK}{FG} & -\dfrac{G}{F} \\[2ex] -\dfrac{K}{G} & \dfrac{H}{G} & 0 \\[2ex] \dfrac{H}{F} & \dfrac{K}{F} & \dfrac{L}{F} \end{pmatrix}. \tag{12}$$

準格子の各セルの割合および面密度は

$$c_1 = \frac{H}{H+K+L},\ c_2 = \frac{K}{H+K+L},\ c_3 = \frac{L}{H+K+L}, \tag{13}$$

$$\omega = \frac{H+K+L}{\sqrt{H^2+K^2+L^2}}. \tag{14}$$

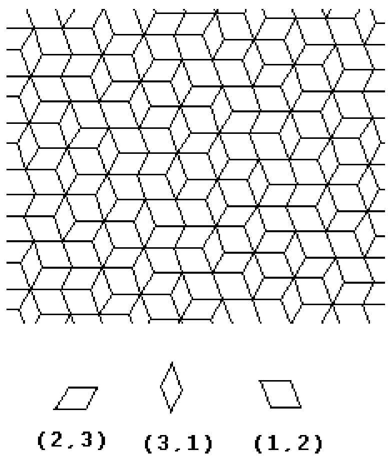

図 3: 準格子の実例

図 3 には，平面 Π_0 の法線の方向係数が (15,12,10) の場合に得られる準格子と各セルが示されている．