

課題

ZnOの σ_V 面, $\sigma_{V'}$ 面, (0001)面について、以下について述べよ。

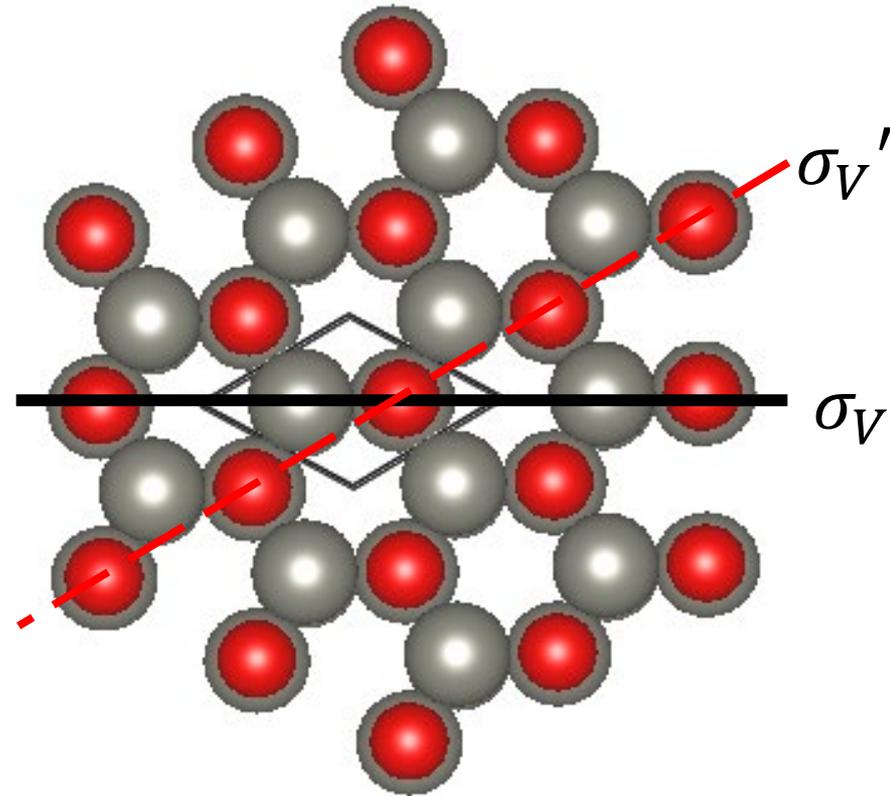
1. 面指数を求めよ
2. そのミラー指数をもつ方位ベクトルを描け
3. 原子配列が3次的にわかる絵をVESTAで描き、特徴を述べよ

PowerPointのプレゼンテーションファイルにして提出

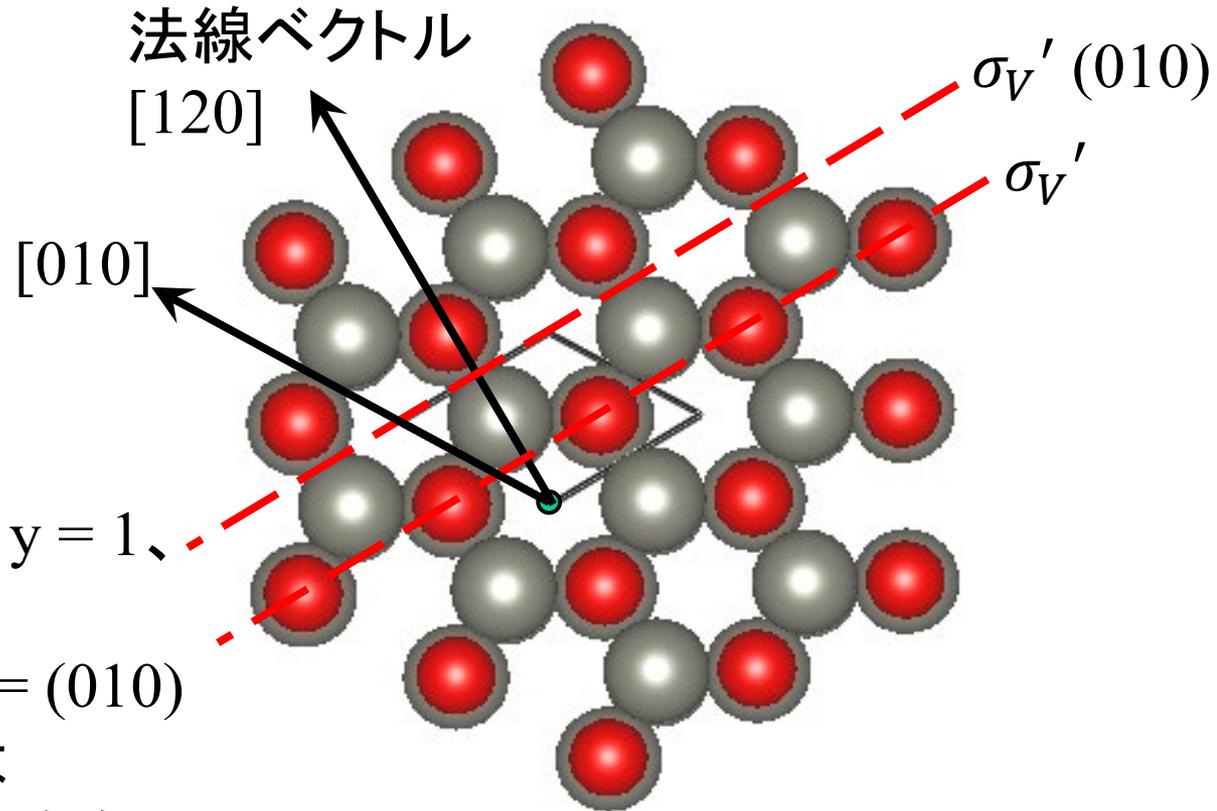
期限: 今日の17:00までに
できたところまでで可

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: 法線ベクトルの図解



σ_V' は a軸を $x = \infty$, b軸を $y = 1$,
c軸を $z = \infty$ で交わる。

$$\Rightarrow (h k l) = (1/\infty \ 1/1 \ 1/\infty) = (010)$$

(010)面の法線ベクトルは

$(1/2)a + b + 0c$ であることから、 $[120]$

$[010]$ ベクトルは $0a + b + 0c$

法線ベクトルのベクトルの成分による解

デカルト座標 (Cartesian) での
格子ベクトル

$$\mathbf{a} = a\mathbf{e}_{x,c}$$

$$\mathbf{b} = a(-1/2\mathbf{e}_{x,c} + \sqrt{3}/2\mathbf{e}_{y,c})$$

$$\mathbf{c} = c\mathbf{e}_{z,c}$$

(010)面を構成するベクトル

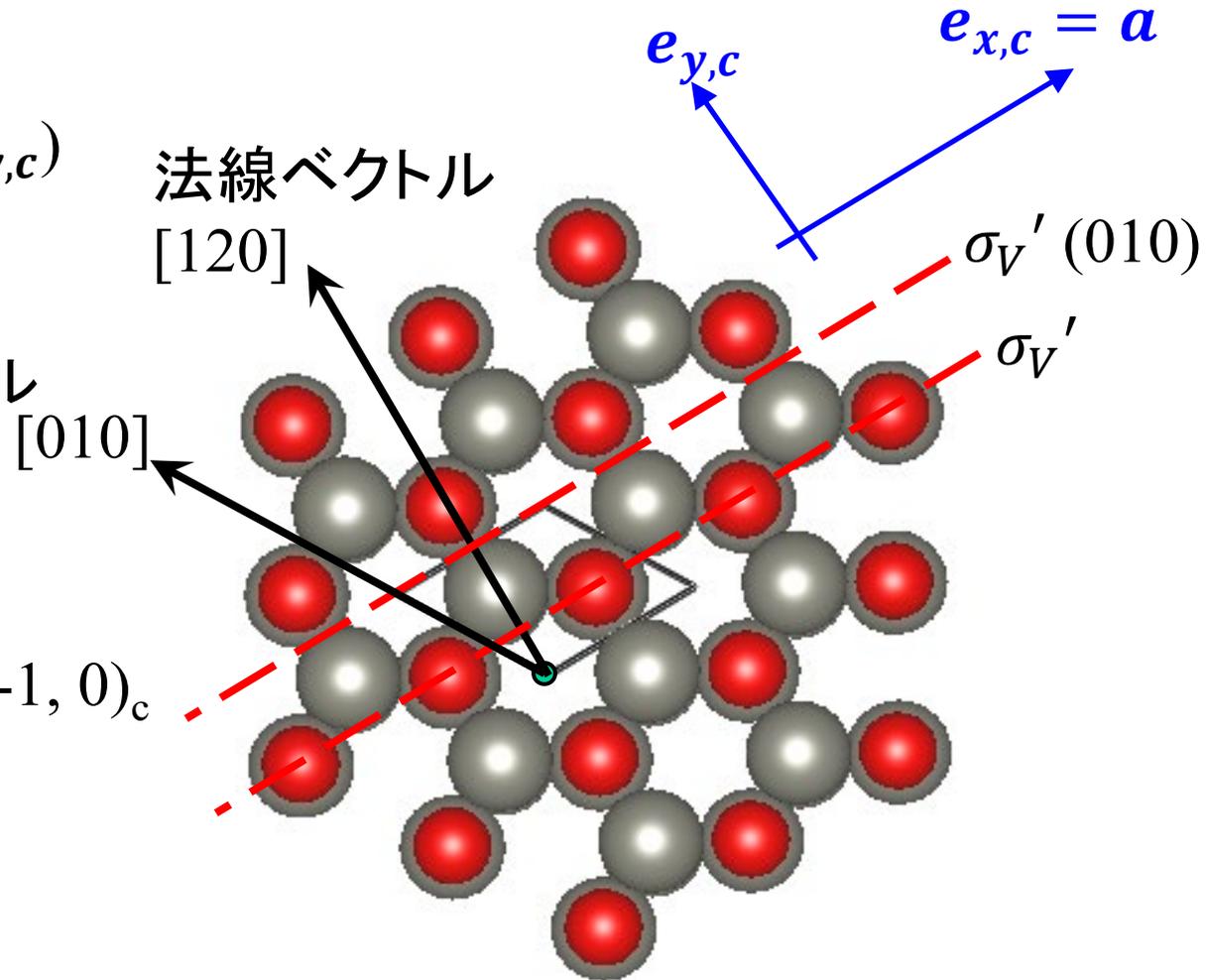
$$\mathbf{a} \propto (1, 0, 0)_c$$

$$\mathbf{c} \propto (0, 0, 1)_c$$

法線ベクトル $\mathbf{a} \times \mathbf{c} \propto (0, -1, 0)_c$

$$\propto \mathbf{e}_{y,c} \propto \mathbf{a} + 2\mathbf{b}$$

※ [120]



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

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

$$\mathbf{r} = x_1 \mathbf{e}_1 + x_2 \mathbf{e}_2 + x_3 \mathbf{e}_3 = x_i \mathbf{e}_i$$

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 Σ 記号を省略する ($\sum_i x_i \mathbf{e}_i \equiv x_i \mathbf{e}_i$)

(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

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

$$\mathbf{r} \times \mathbf{r}' = (x_2 x_3' - x_3 x_2', x_3 x_1' - x_1 x_3', x_1 x_2' - x_2 x_1')$$

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 \mathbf{a}_i とすると ($\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j \neq \delta_{ij}$)、

任意のベクトルは $\mathbf{r} = x_1 \mathbf{a}_1 + x_2 \mathbf{a}_2 + x_3 \mathbf{a}_3 = x_i \mathbf{a}_i$

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

$$g_{ij} = \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j \quad (\text{デカルト座標では } g_{ij} = \delta_{ij})$$

3. 直交するベクトルはGram-Schmidtの直交化法で求める

$$\mathbf{a}_{1\perp} = \mathbf{a}_1$$

$$\mathbf{a}_{2\perp} = \mathbf{a}_2 - \frac{\mathbf{a}_{1\perp} \cdot \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_{1\perp} \cdot \mathbf{a}_{1\perp}} \mathbf{a}_{1\perp}$$

$$\mathbf{a}_{3\perp} = \mathbf{a}_3 - \frac{\mathbf{a}_{1\perp} \cdot \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_{1\perp} \cdot \mathbf{a}_{1\perp}} \mathbf{a}_{1\perp} - \frac{\mathbf{a}_{2\perp} \cdot \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_{2\perp} \cdot \mathbf{a}_{2\perp}} \mathbf{a}_{2\perp}$$

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。

$$\mathbf{r} = x_1 \mathbf{a}_1 + x_2 \mathbf{a}_2 + x_3 \mathbf{a} = x_i \mathbf{a} = \mathbf{X}^t \mathbf{A}$$

基底ベクトルが行列 T で変換されたとする。

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

- ・ 座標は次のように変換され、ベクトルは不変である。

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

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

- ・ スカラーは(定義上)座標変換に対して不変

物理学とベクトル

- ・ スカラーは(定義上)座標変換に対して不変
- ・ 特定の物理量は、任意の座標変換に対して不変ではないが、特定の座標変換に対して不変

ある座標変換 (対称操作) C に対して
ハミルトニアン H (ラグランジアン L) が不変であることを、
「系は C 対称を持つ」という

Newton力学: 時間(並進)対称性 \Rightarrow エネルギー保存則
並進対称性 (デカルト変換) \Rightarrow 運動量保存則
回転対称性 \Rightarrow 角運動量保存則

特殊相対論: Newton力学で、並進対称性をローレンツ変換に修正

一般相対論: 特殊相対論で、並進対称性を一般座標変換に拡張

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 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$

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

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。

$$\mathbf{a}_1 = a\mathbf{e}_1$$

$$\mathbf{a}_2 = a_{21}\mathbf{e}_1 + a_{22}\mathbf{e}_2$$

$$\mathbf{a}_3 = a_{31}\mathbf{e}_1 + a_{32}\mathbf{e}_2 + a_{33}\mathbf{e}_3$$

2. 軸長、軸角の関係から未知係数 a_{ij} をきめる。

$$\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 = a^2 \cos \frac{\pi}{3} = -\frac{1}{2}a^2 = aa_{21} \quad \Rightarrow a_{21} = -\frac{1}{2}a$$

$$\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_2 = a^2 = a_{21}^2 + a_{22}^2 \quad \Rightarrow a_{22}^2 = a^2 - a_{21}^2 = \frac{3}{4}a^2$$

$$\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_3 = 0 = aa_{31} \quad \Rightarrow a_{31} = 0$$

$$\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3 = 0 = a_{22}a_{32} \quad \Rightarrow a_{32} = 0$$

$$\mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_3 = c^2 = a_{33}^2 \quad \Rightarrow a_{33} = c$$

$$\mathbf{a}_1 = a\mathbf{e}_1$$

$$\mathbf{a}_2 = a\left(-\frac{1}{2}\mathbf{e}_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{e}_2\right)$$

$$\mathbf{a}_3 = c\mathbf{e}_3$$

デカルト座標を使ったベクトル演算: 法線ベクトル

$$\mathbf{a}_1 = a\mathbf{e}_1$$

$$\mathbf{a}_2 = a\left(-\frac{1}{2}\mathbf{e}_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{e}_2\right)$$

$$\mathbf{a}_3 = c\mathbf{e}_3$$

σ_V' 面 [(010)面] 内のベクトル

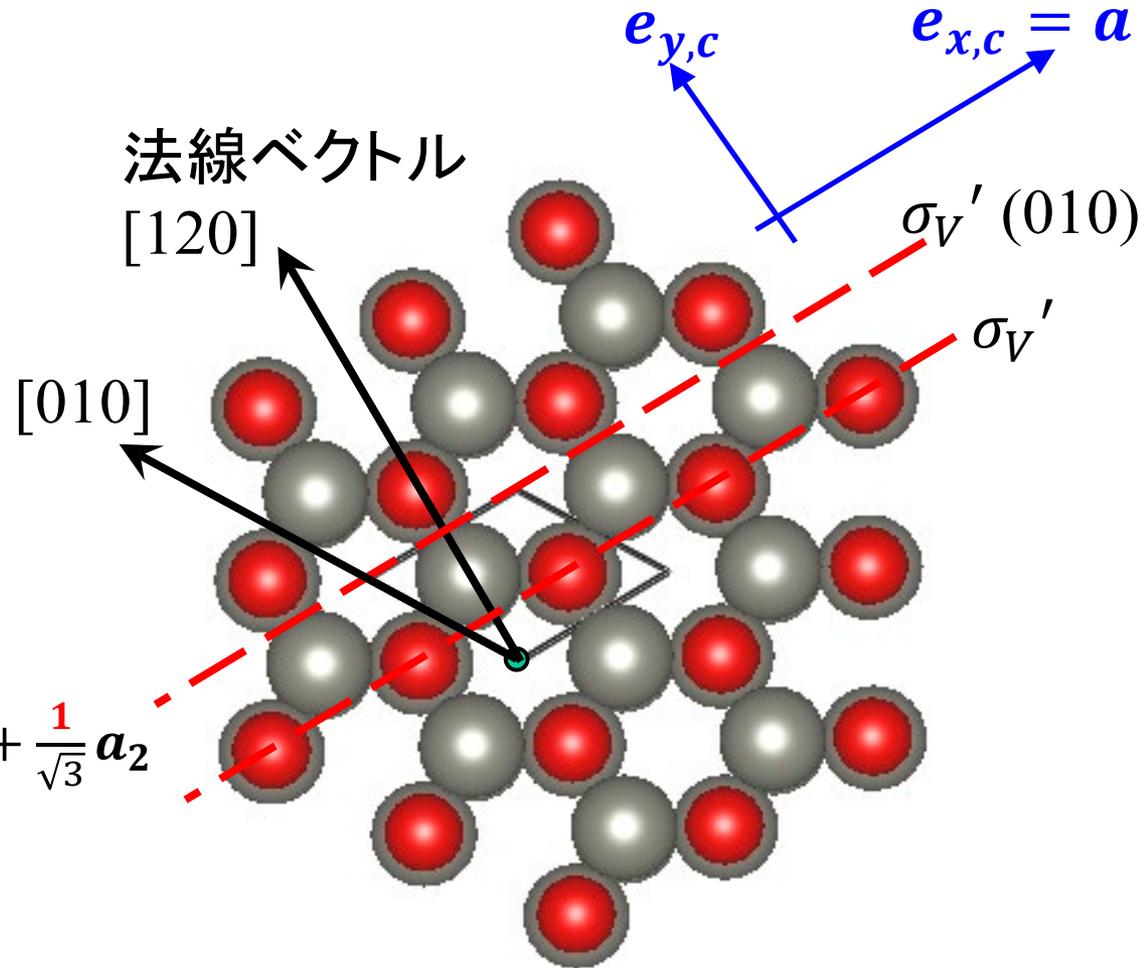
$$\mathbf{a}_{\sigma_V'} = \alpha_1\mathbf{a}_1 + \alpha_3\mathbf{a}_3$$

α_1, α_3 は任意の実数

$$\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_3 = ace_1 \times e_3 = ace_2$$

$$ae_2 = \frac{2}{\sqrt{3}}\mathbf{a}_2 + \frac{1}{\sqrt{3}}ae_1 = \frac{2}{\sqrt{3}}\mathbf{a}_2 + \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{a}_1$$

$$\text{※ } \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_3 \propto [120]$$



成分を使わないベクトル演算II: 法線ベクトル

σ_V' 面 [(010)面] の法線ベクトルを次のように書く

$$\mathbf{a}_{\perp\sigma_V} = \alpha_1 \mathbf{a}_1 + \alpha_2 \mathbf{a}_2 + \alpha_3 \mathbf{a}_3$$

σ_V' 面 [(010)面] 内のベクトル

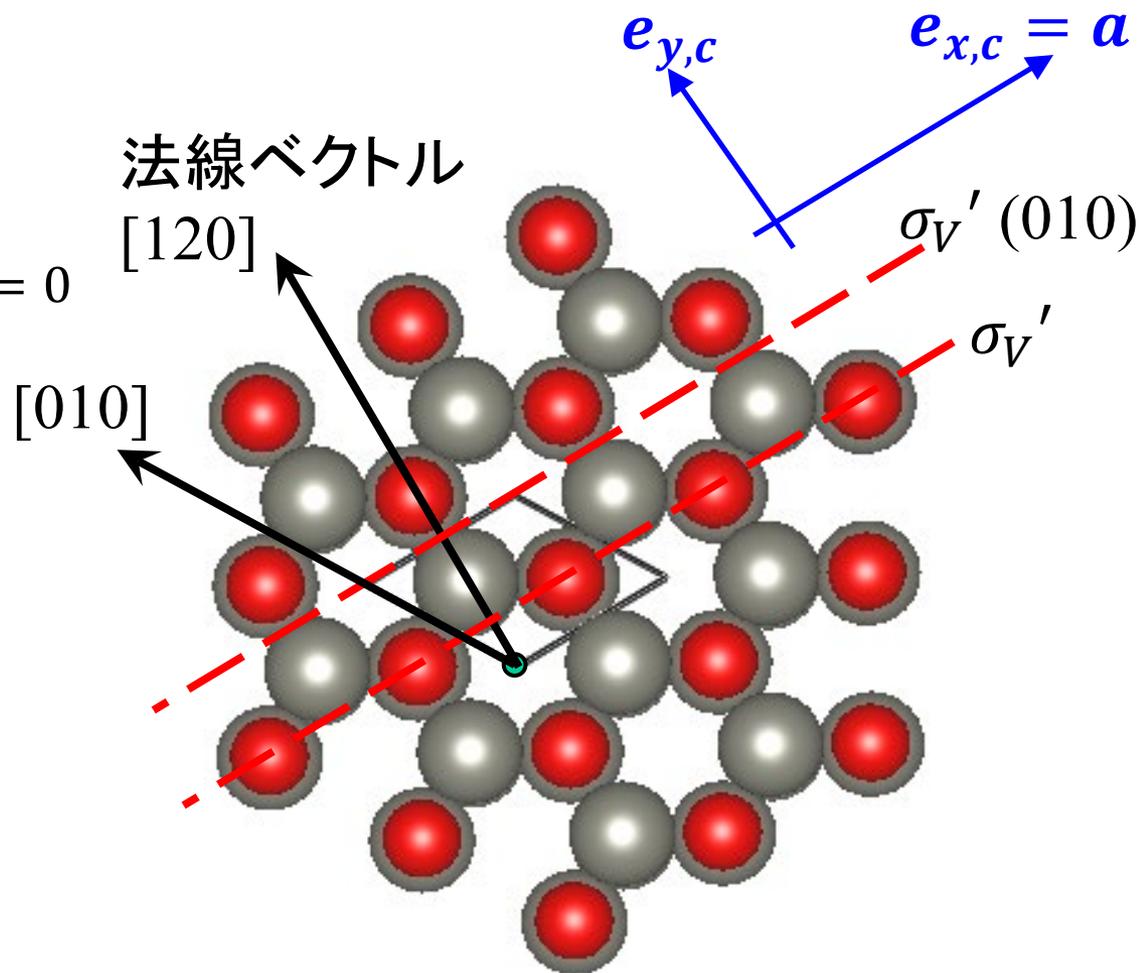
$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_3$ に直交するので

$$\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_{\perp\sigma_V} = \alpha_1 a^2 + \alpha_2 \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 = 0$$

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

$$\mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_{\perp\sigma_V} = \alpha_3 a^2 = 0$$

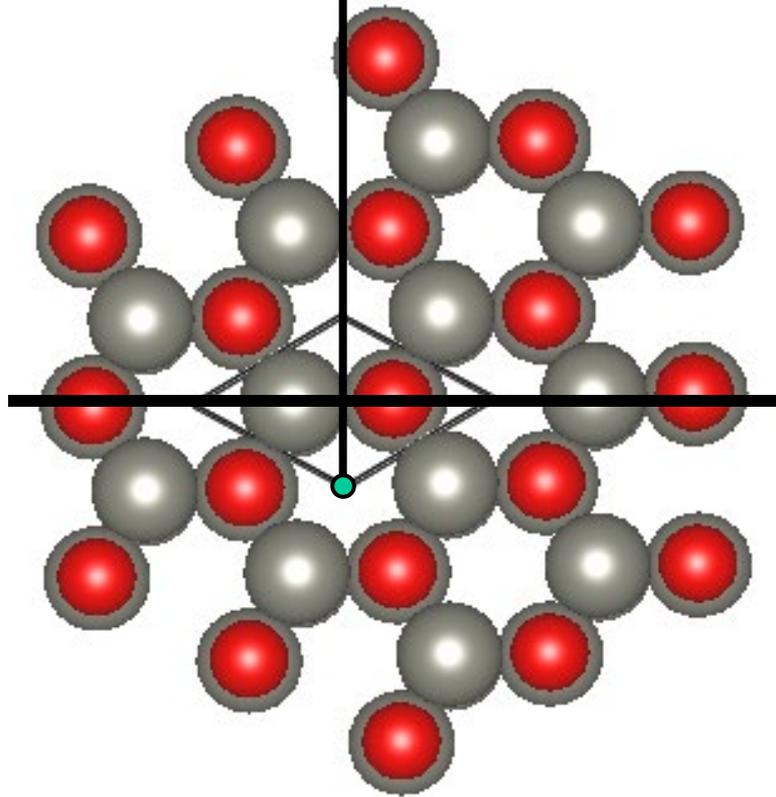
$$\mathbf{a}_{\perp\sigma_V} = \alpha_1 (\mathbf{a}_1 + 2\mathbf{a}_2) \propto [120]$$



σ_V 面

法線ベクトル

[110]



σ_V (110)

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 ($z = \infty$ で交わる)。

$$\Rightarrow (h \ k \ l) = (1/1 \ 1/1 \ 1/\infty) = (110)$$

(110)面の法線ベクトルは
 $a + b + 0c$ であることから、[110]