

波数空間と逆格子

波多腰玄一

1 はじめに

前回は半導体結晶の結晶構造について述べた。エネルギーバンドを考える上で、この結晶構造とその空間周波数である波数空間は極めて重要である。今回は波数空間で定義される逆格子について解説する。また波数空間に関連して重要なブロッホの定理についても述べる。

2 単位胞

図1に示したように、結晶の単位構造^{1~4)}を特徴づけるのは基本並進ベクトル (primitive translation vector) a_1, a_2, a_3 である。格子点の一つを原点にとると、任意の格子点の位置ベクトル R は a_1, a_2, a_3 を用いて以下で表される。

$$R = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3 \quad (1)$$

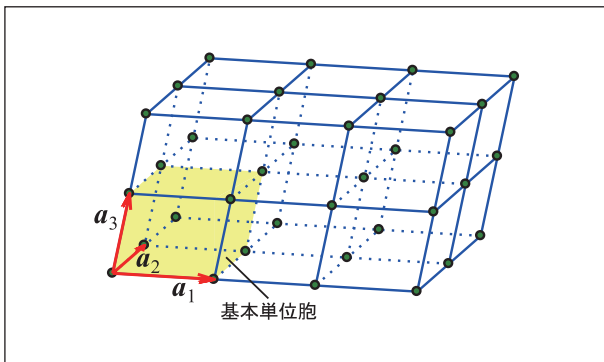


図1 基本並進ベクトルと基本単位胞

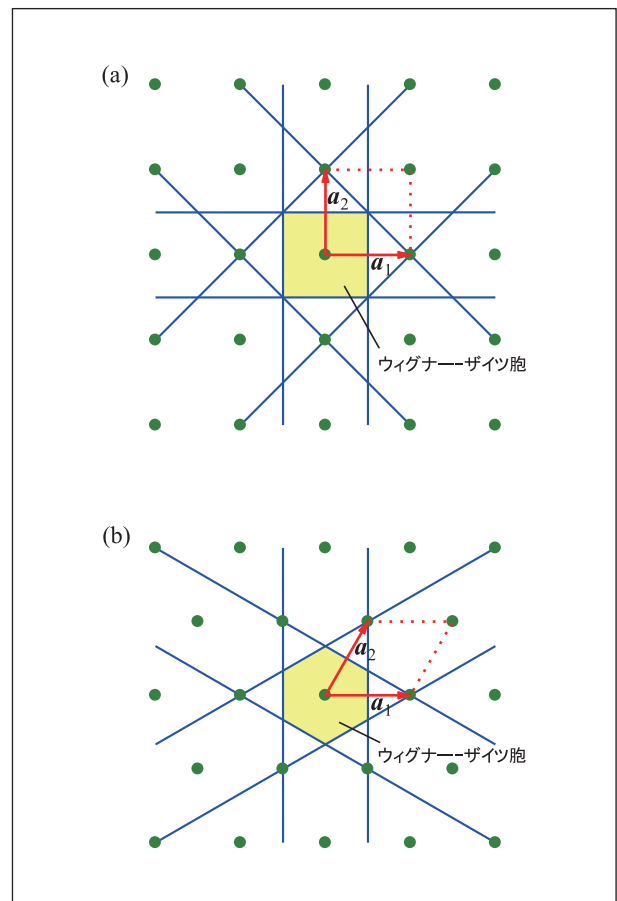


図2 ウィグナー-ザイツ胞 (a) 2次元正方格子 (b) 2次元六方格子

基本並進ベクトルで定義される平行6面体を基本単位胞^{1~4)} (primitive cell) (基本単位格子と呼ぶこともある) という。基本単位胞は単位胞 (unit cell) の一種であるが、通常用いられる単位胞は必ずしも基本単位胞ではない。