ブラヴェー格子表現空間の基本領域

ブラヴェー格子表現空間の基本領域

細　谷　将　彦*

A Fundamental Region in the Representation Space of the Bravais Lattices

Masahiko HOSOYA*

Any Bravais lattices are represented uniquely as a point within a restricted region in a six-dimensional space. The boundary of the region constitutes of seven inequalities which were obtained by group-theoretical consideration and the Monte Carlo method.

結晶構造の変化などを取り扱うには，まず結晶構造の一義的な記述法が問題になる。原始胞の三稜の長さやその間の角度などのパラメータを用いて記述すると，同一の構造に対してパラメータの違ったとりかたが無数に生じる。即ちこのようなパラメータ空間の一点を只一つの構造に対応させるためには，パラメータの値域に制限をくわえなければならない。ちょうど格子振動のモードを逆空間で一義的に表すには第一ブリュアン・ゾーン内に制限しなければならないのと同様である。しかしパラメータ空間は少なくとも６次元になるので，この制限値域を初等的に求めるのは難しく，未だに求めた例はないと思われる。[1] 以下では群論的な考察とモンテカルロ法の利用により，この問題への解答を与える。最も簡単な結晶構造，即ちブラヴェー格子を例にとるが，この方法はもっと複雑な構造にも適用できる一般性を持つ。

ブラヴェー格子は原始胞の三稜ａ，ｂ，ｃで指定できる。例えば，ブラヴェー格子14種の中で最も対称性が高いのは，単純立方，面心立方，体心立方，六方の４種であるが，これらは直交座標系では次のようにとることができる。（この選び方は以下の目的にとって最も都合の良いものである。）

単純立方・・・・・・・$\mathbf{a}=(x_1,\ 0,\ 0)$
$\mathbf{b}=(0,\ x_1,\ 0)$
$\mathbf{c}=(0,\ 0,\ x_1)$

面心立方・・・・・・・$\mathbf{a}=(0,\ x_2,\ x_2)$
$\mathbf{b}=(x_2,\ 0,\ x_2)$
$\mathbf{c}=(x_2,\ x_2,\ 0)$

体心立方・・・・・・・$\mathbf{a}=(-x_3,\ x_3,\ x_3)$
$\mathbf{b}=(x_3,\ -x_3,\ x_3)$
$\mathbf{c}=(-x_3,\ -x_3,\ x_3)$

受付：1984年10月30日

* Dept of Physics, College of Science University of the Ryukyus, Nishihara, Okinawa 903-01.

$$
\begin{aligned}
&\text{六　　方}\cdots\cdots\cdots\ \mathbf{a}=(0,\ 0,\ z)\\
&\qquad\qquad\qquad\ \mathbf{b}=(2x_4,\ 0,\ 0)\\
&\qquad\qquad\qquad\ \mathbf{c}=(x_4,\ \sqrt{3}x_4,\ 0)
\end{aligned}
\tag{1}
$$

しかし，a，b，c そのままよりも，スカラー積 a・a，b・b，c・c，b・c，c・a，a・b を用いる方が後で都合が良くなる。そこで新たに次の量を定義し，以後これらを使うことにする。

$$
\begin{aligned}
&A=\mathbf{a}\cdot\mathbf{a},\quad B=\mathbf{b}\cdot\mathbf{b},\quad C=\mathbf{c}\cdot\mathbf{c},\\
&D=\mathbf{b}\cdot\mathbf{c},\quad E=\mathbf{c}\cdot\mathbf{a},\quad F=\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}
\end{aligned}
\tag{2}
$$

結局任意のブラヴェー格子はこれら6個の量を成分とする6次元ベクトルで指定できる。a，b，c をそのまま使うときには成分が合計9個あるわけだから，自由度が3個減っている。しかし（2）の6個が決れば，a，b，c の長さと相互間の角度が（符号を除いて）決るから，原始胞を指定するには十分である。（唯一の欠点は角度の符号が決らないために右手系と左手系の区別がなくなることである。）つまり減った3個は原始胞全体の回転を表す自由度であって，本質的な意味を持たない。従って，今の6成分で表すのが冗長度を含まない良い表し方である。そこでこの6次元ベクトルを6次元空間の位置ベクトルとみなせば，任意のブラヴェー格子はこの空間の一点で表される。例えば，上記（1）の最も対称性が高い4種のブラヴェー格子はそれぞれ次の点で表される。

$$
\begin{aligned}
&\text{単純立方}\cdots\cdots\cdots\ (x_1,\ x_1,\ x_1,\ 0,\ 0,\ 0)\\
&\text{面心立方}\cdots\cdots\cdots\ (2x_2,\ 2x_2,\ 2x_2,\ x_2,\ x_2,\ x_2)\\
&\text{体心立方}\cdots\cdots\cdots\ (3x_3,\ 3x_3,\ 4x_3,\ 2x_3,\ 2x_3,\ x_3)\\
&\text{六　　方}\cdots\cdots\cdots\ (x_4,\ 2y,\ 2y,\ y,\ 0,\ 0)
\end{aligned}
\tag{3}
$$

以後これらの点（および等価な点）を高対称点と呼ぶことにする。

さてこの問題を解くためには，今の6次元空間がある群の表現空間になっており，求める値域はその群の基本領域であることを認識しなければならないのである。以前の論文[1,2]で筆者はこの群に基本変換群と名付けた。基本変換群はこの6次元ベクトルに作用する6×6行列として与えることができる。そして任意の点は基本変換群のいくつかの要素に対して不変である。このような要素は群をなし，対応するブラヴェー格子をこの群によって指定できる。例えば単純立方の点に対応する群は次の生成子で作られる24個の要素から成る。

$$
C_3=\begin{pmatrix}
0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0\\
0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0\\
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1\\
0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0
\end{pmatrix}
$$

$$S_4=\begin{pmatrix}0&1&0&0&0&0\\1&0&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0\\0&0&0&0&1&0\\0&0&0&-1&0&0\\0&0&0&0&0&-1\end{pmatrix}$$

$$m_d=\begin{pmatrix}0&1&0&0&0&0\\1&0&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0\\0&0&0&0&1&0\\0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&0&1\end{pmatrix} \qquad (4)$$

面心立方，体心立方，六方の群は直接（A，B，C，D，E，F）の空間で与えるよりも，別の空間に移って変換が直交行列になるようにした方が便利である。それには，それぞれ次の行列で座標変換を行えば良い。

$$TRF=\begin{pmatrix}1&1&1&2&-2&-2\\1&1&1&-2&2&-2\\1&1&1&-2&-2&2\\1&-1&-1&2&0&0\\-1&1&-1&0&2&0\\-1&-1&1&0&0&2\end{pmatrix}$$

$$TRB=\begin{pmatrix}1&1&0&0&0&-2\\1&1&1&-2&-2&2\\0&0&1&0&0&0\\0&0&-1&1&1&0\\0&0&0&-1&1&0\\1&-1&0&1&-1&0\end{pmatrix}$$

$$TRH=\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{4}{3} & -\frac{4}{3} & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{2}{\sqrt{3}} & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (5)$$

そのような空間では，面心立方と体心立方の群は単純立方のそれと全く同じになり，六方の群は次の生成子で作られる12個の要素から成る。

$$C_6=\begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{3}{4} & 0 & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{4} \\ \frac{3}{4} & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{4} \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{4} & -\frac{\sqrt{3}}{4} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$m'_d=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (6)$$

◆ 基本領域の境界面の求め方

以下で用いる方法は逆空間におけるウィグナー・サイツ・セルの作り方と本質的に同じである。即ち適当な試験点を空間内に選び，その点とその点に対称操作を施した後の点との垂直二等分面を境界面とするのである。基本変換は6次元空間における回転とみなすことができるので，回転軸に相当するものがある。（高対称点はこれらの回転軸上にある。）回転軸はもちろん不変だから，境界面上になければならないが，対称操作が直交変換ならば，変換によってベクトルの長さが変らないので，垂直二等分面は必ず回転軸を通る。試験点に施す対称操作は全部をやる必要はなく，隣接

する領域に移す操作だけでよい。このような操作は基本領域の境界面上の高対称点を不変にする操作である。従って，試験点の近傍には，どんな高対称点があるかを探し，それらのうちどれが境界面上にあるかを調べなければいけない。これは6次元であるだけに簡単にはゆかない。候補となる高対称点を境界面上にあると仮定して基本領域を求め，仮定した高対称点は全部境界面上にあり，他の高対称点は領域内に入っていないことを確かめるという試行錯誤をやるしかないようである。(3)の高対称点はこのようにして，ある基本領域の境界面上にあることが分った点である。ともかくも，境界面を決めるには，境界面上の高対称点の群の要素だけを試みればよいのである。

垂直二等分面の作り方は簡単である。試験点（A_0，B_0，C_0，D_0，E_0，F_0）が点（A_1，B_1，C_1，D_1，E_1，F_1）に変換されるならば，その垂直二等分面は

$$(A_1-A_0)A+(B_1-B_0)B+(C_1-C_0)C+(D_1-D_0)D+(E_1-E_0)E+(F_1-F_0)F=0 \qquad (7)$$

である。

単純立方以外の場合は，(5)の座標変換をして，変換行列が直交行列になるようにしてから求めなければならない。垂直二等分面の式を求めた後，元の空間の式に直さなければならないが，それには6個の係数を6次元ベクトルとみなして，(5)を転置した行列をかければ良い。

さて試験点は恒等要素以外に対しては不変でない一般の点に選ばなければならない。もし不変だと垂直二等分面が不定になるからである。ところが，こうして求めた境界面は数が多く，また式の係数が一般には整数にならず，不便なものである。そこで，最初は一般の点に試験点を置き，次第にどこかの高対称点に近付けてゆくと，境界面のいくつかは互いに等しくなって数が減ってゆき，残った境界面の式も単純になってゆく。今回は試験点を（1，1，1，0.5，$0.5-d$，$0.5-2d$）ととり，$d\to 0$の極限で境界面を求めた。

以上のように境界面を整理した後，残る問題は不必要な境界面を取り除くことである。つまり，最も内側の境界面だけを残すことである。これにはモンテカルロ法を用いた。即ち領域内において乱数で決る一方向に試験点を動かしてゆき，最初にぶつかる面を探すのである。ぶつかるごとに，方向を乱数的に変えて，これを続ける。十分長時間にわたって探索をしてもぶつからない面は内側に入らない面であると判断できる。

結局ブラヴェー格子表現空間の基本領域は次の通りである。

$$D-E\geqq 0 \qquad (8)$$

$$E-F\geqq 0 \qquad (9)$$

$$B-C+5E-5F\geqq 0 \qquad (10)$$

$$C-2D-2E+4F\geqq 0 \qquad (11)$$

$$A-B+2D-2E\geqq 0 \qquad (12)$$

$$C-2E\geqq 0 \qquad (13)$$

$$-E+2F\geqq 0 \qquad (14)$$

それぞれの境界面で隣接の領域に代表点を移す操作は次のとおりである。

$$m_d(110)=\begin{pmatrix} 0&1&0&0&0&0\\ 1&0&0&0&0&0\\ 0&0&1&0&0&0\\ 0&0&0&0&1&0\\ 0&0&0&1&0&0\\ 0&0&0&0&0&1 \end{pmatrix} \tag{15}$$

$$m_d(011)=\begin{pmatrix} 1&0&0&0&0&0\\ 0&0&1&0&0&0\\ 0&1&0&0&0&0\\ 0&0&0&1&0&0\\ 0&0&0&0&0&1\\ 0&0&0&0&1&0 \end{pmatrix} \tag{16}$$

fcc
$$m_d(011)=\begin{pmatrix} 1&0&0&0&0&0\\ 0&0&1&0&0&0\\ 0&1&0&0&0&0\\ 0&0&0&1&0&0\\ 0&0&0&0&0&1\\ 0&0&0&0&1&0 \end{pmatrix} \tag{17}$$

bcc
$$C_{32}(-111)=\begin{pmatrix} 0&0&1&0&0&0\\ 1&0&0&0&0&0\\ 0&1&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&-1\\ 0&0&0&-1&0&0\\ 0&0&0&0&1&0 \end{pmatrix} \tag{18}$$

bcc
$$C_2(100)=\begin{pmatrix} 1&0&0&0&0&0\\ 0&1&0&0&0&0\\ 0&0&1&0&0&0\\ 0&0&0&1&0&0\\ 0&0&0&0&-1&0\\ 0&0&0&0&0&-1 \end{pmatrix} \tag{19}$$

$$\text{bcc}\qquad C_2\,(001)=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{20}$$

$$\text{hex}\qquad m_V\,(-120^\circ)=\begin{bmatrix} \frac{1}{4} & \frac{3}{4} & 0 & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{4} \\ \frac{3}{4} & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{4} \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{4} & \frac{\sqrt{3}}{4} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \tag{21}$$

参 考 文 献

1) Masahiko Hosoya: "A New Group-Theoretical Derivation of the Bravais Lattices" J. Phys. Soc. Japan **46**, 1691 (1979).

2) 細谷将彦：「結晶構造の体系的分類」物性研究 **34**, 297 (1980).