

## 分子電子構造論レポート課題 (2018/07/11 締切)

結晶点群は全部で32種類あることが知られている。これらは並進操作と両立しうる回転軸をもっている。これらの関係を考えながら結晶の分極について考察する。

問題 1. 並進操作と両立する回転軸  $n$  は  $n=1,2,3,4,6$  しかないことを示せ。

問題 2. 回転軸  $n=1,2,3,4,6$  をもつ点群(多面体群を除く)は重複を除いて27種類あることを示せ。

問題 3. 結晶系では化学でもちいるシェーンフリース記号とちがひ、ヘルマンモーガン系を用いる。下図はヘルマンモーガン系で32個の結晶点群を示し、対称性の高いものから低いものへと繋いでいる ( $O_h$  と  $D_{6h}$  から出発して  $C_1$  となる)。シェーンフリース記号をもちいて下図を表せ。

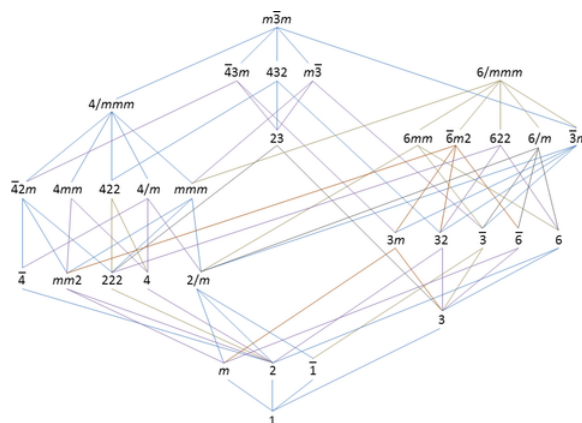


図 1. 結晶点群の部分群

問題 4. 前問では3次元の結晶群のつながりを考えた。図1は2次元ではどうなるか示せ。シェーンフリース記号を用いて示せ。

問題 5. 中心対称性がない場合極性をもつことがある。問題4で極性をもつ可能性のある点群を理由とともに述べよ。

問題 6. 結晶では周期境界条件があるため、分極を考えることが難しい。その理由を分子との違いを含めて述べよ。

問題 7. 無限系での分極を求めるための理論的方法について述べよ。

(ヒント: バルクでは電荷をためておく表面がないため、分極は外部電場の有無により通過する電流により定義される。)