格子面間隔の計算（斜交座標系の計量テンソルを用いる方法）

2014.6.17　　鈴木　実

最も一般的な三斜晶系について考える．実空間における座標軸が結晶軸に一致する斜交座標系を考える．この斜交座標系における基底ベクトルを $\mathbf{a}$，$\mathbf{b}$，$\mathbf{c}$ とする．三斜晶系で，$\mathbf{a}$，$\mathbf{b}$，$\mathbf{c}$ の大きさが a，b，c，$\mathbf{a}$ と $\mathbf{b}$ の間の角度が γ，$\mathbf{b}$ と $\mathbf{c}$ の間の角度が α，$\mathbf{c}$ と $\mathbf{a}$ の間の角度が β である．

斜交座標系であるので，厳密に実空間における共変基底ベクトル $\{\mathbf{e}_i\}$ を

$$\mathbf{e}_1 = \mathbf{a}, \quad \mathbf{e}_2 = \mathbf{b}, \quad \mathbf{e}_3 = \mathbf{c} \tag{1}$$

とする．基本並進ベクトル $\mathbf{a}$，$\mathbf{b}$，$\mathbf{c}$ と逆格子の基本並進ベクトル $\mathbf{a}^*$，$\mathbf{b}^*$，$\mathbf{c}^*$ の関係，すなわち $\mathbf{a}\cdot\mathbf{a}^* = 1$，$\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}^* = 0$ などを考慮すると，反変基底ベクトルは

$$\mathbf{e}^1 = \frac{\mathbf{a}^*}{2\pi}, \quad \mathbf{e}^2 = \frac{\mathbf{b}^*}{2\pi}, \quad \mathbf{e}^3 = \frac{\mathbf{c}^*}{2\pi} \tag{2}$$

とすることができる．

大きさを求めたいベクトルは

$$\mathbf{K} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^* = 2\pi h\mathbf{e}^1 + 2\pi k\mathbf{e}^2 + 2\pi l\mathbf{e}^3 \tag{3}$$

と，共変ベクトルで表される．成分表示すると，

$$\{K_i\} = (2\pi h, 2\pi k, 2\pi l) \tag{4}$$

である．

一方，$\mathbf{K}$ の反変成分については直接明らかではない．反変成分と共変成分の間には

$$K_i = \sum_j g_{ij} K^j \tag{5}$$

という関係があるので，これを用いて K^j を求めることができる．ここで，g_{ij} は計量テンソルで次のように表される．

$$\{g_{ij}\} = \begin{pmatrix} \mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2 & \mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_3 \\ \mathbf{e}_2\cdot\mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_2\cdot\mathbf{e}_2 & \mathbf{e}_2\cdot\mathbf{e}_3 \\ \mathbf{e}_3\cdot\mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_3\cdot\mathbf{e}_2 & \mathbf{e}_3\cdot\mathbf{e}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^2 & ab\cos\gamma & ca\cos\beta \\ ab\cos\gamma & b^2 & bc\cos\alpha \\ ca\cos\beta & bc\cos\alpha & c^2 \end{pmatrix} \tag{6}$$

(5) より，反変ベクトル成分は

$$K^i = \frac{G_{ji}}{G} K_j \tag{7}$$

となる．G は計量テンソルの行列式であり，G_{ij} は計量テンソル g_{ij} の第 i 行第 j 列余因子である．具体的に示せば，クラメルの公式を用いて，

$$\{K^i\} = \frac{1}{G}\left(\begin{vmatrix} 2\pi h & ab\cos\gamma & ca\cos\beta \\ 2\pi k & b^2 & bc\cos\alpha \\ 2\pi l & bc\cos\alpha & c^2 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} a^2 & 2\pi h & ca\cos\beta \\ ab\cos\gamma & 2\pi k & bc\cos\alpha \\ ca\cos\beta & 2\pi l & bc\cos\alpha \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} a^2 & ab\cos\gamma & 2\pi h \\ ab\cos\gamma & b^2 & 2\pi k \\ ca\cos\beta & bc\cos\alpha & 2\pi l \end{vmatrix}, \right) \tag{8}$$

となる．

$$\frac{(2\pi)^2}{d^2} = \mathbf{K}^2 = \sum_i K_i K^i \tag{9}$$

であるから

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h\begin{vmatrix} h & ab\cos\gamma & ca\cos\beta \\ k & b^2 & bc\cos\alpha \\ l & bc\cos\alpha & c^2 \end{vmatrix} + k\begin{vmatrix} a^2 & h & ca\cos\beta \\ ab\cos\gamma & k & bc\cos\alpha \\ ca\cos\beta & l & c^2 \end{vmatrix} + l\begin{vmatrix} a^2 & ab\cos\gamma & h \\ ab\cos\gamma & b^2 & k \\ ca\cos\beta & bc\cos\alpha & l \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} a^2 & ab\cos\gamma & ac\cos\beta \\ ab\cos\gamma & b^2 & bc\cos\alpha \\ ca\cos\beta & bc\cos\alpha & c^2 \end{vmatrix}} \tag{10}$$

となる．さらに，行列式の性質を用いて整理すると，

$$\begin{aligned} \frac{1}{d^2} &= \frac{hab^2c^2\begin{vmatrix} h/a & \cos\gamma & \cos\beta \\ k/b & 1 & \cos\alpha \\ l/c & \cos\alpha & 1 \end{vmatrix} + ka^2bc^2\begin{vmatrix} 1 & h/a & \cos\beta \\ \cos\gamma & k/b & \cos\alpha \\ \cos\beta & l/c & 1 \end{vmatrix} + la^2b^2c\begin{vmatrix} 1 & \cos\gamma & h/a \\ \cos\gamma & 1 & k/b \\ \cos\beta & \cos\alpha & l/c \end{vmatrix}}{a^2b^2c^2\begin{vmatrix} 1 & \cos\gamma & \cos\beta \\ \cos\gamma & 1 & \cos\alpha \\ \cos\beta & \cos\alpha & 1 \end{vmatrix}} \\ &= \frac{\frac{h}{a}\begin{vmatrix} h/a & \cos\gamma & \cos\beta \\ k/b & 1 & \cos\alpha \\ l/c & \cos\alpha & 1 \end{vmatrix} + \frac{k}{b}\begin{vmatrix} 1 & h/a & \cos\beta \\ \cos\gamma & k/b & \cos\alpha \\ \cos\beta & l/c & 1 \end{vmatrix} + \frac{l}{c}\begin{vmatrix} 1 & \cos\gamma & h/a \\ \cos\gamma & 1 & k/b \\ \cos\beta & \cos\alpha & l/c \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & \cos\gamma & \cos\beta \\ \cos\gamma & 1 & \cos\alpha \\ \cos\beta & \cos\alpha & 1 \end{vmatrix}} \end{aligned} \tag{11}$$

となる．行列式を展開すれば，前に得られた式 (格子面間隔の計算) と一致する．

以上