三斜晶系の格子面間隔 (反変ベクトル，共変ベクトルを用いる方法)

2014.6.18　　鈴木　実

三斜晶基本単位格子は基本並進ベクトル $\mathbf{a}$，$\mathbf{b}$，$\mathbf{c}$ の大きさ a，b，c とそれぞれの間の角度 α，β，γ で決められる．格子面間隔 d は，

$$\frac{2\pi}{d} = |\mathbf{K}|, \quad \mathbf{K} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^* \tag{1}$$

より与えられる (「固体物性と電気伝導」(森北出版)) から $\mathbf{K}^2$ を計算すれば良い．

斜交座標系の内積は，反変ベクトルと共変ベクトルの内積を用いると計量テンソルを使う必要がない．そこで，$\mathbf{a}^*$，$\mathbf{b}^*$，$\mathbf{c}^*$ を共変基底ベクトル $\mathbf{e}_1$，$\mathbf{e}_2$，$\mathbf{e}_3$ とする．すなわち，

$$\mathbf{e}_1 = \mathbf{a}^*, \quad \mathbf{e}_2 = \mathbf{b}^*, \quad \mathbf{e}_3 = \mathbf{c}^*, \tag{2}$$

ベクトルの反変成分は共変基底ベクトル方向成分，共変成分は共変基底ベクトルとの内積で与えられることに注意すると，

$$\begin{aligned}
K^1 &= h && (3)\\
K^2 &= k && (4)\\
K^3 &= l && (5)\\
K_1 &= ha^{*2} + ka^*b^*\cos\gamma^* + la^*c^*\cos\beta^* && (6)\\
K_2 &= hb^*a^*\cos\gamma^* + kb^{*2} + lb^*c^*\cos\alpha^* && (7)\\
K_3 &= hc^*a^*\cos\beta^* + kc^*b^*\cos\alpha^* + lc^{*2} && (8)
\end{aligned}$$

となる．ここで，a^*，b^*，c^* は $\mathbf{a}^*$，$\mathbf{b}^*$，$\mathbf{c}^*$ の大きさ，γ^*，α^*，β^* はそれぞれの間の角度である．(2)–(7) より，

$$\begin{aligned}
\mathbf{K}\cdot\mathbf{K} &= h^2a^{*2} + hka^*b^*\cos\gamma^* + hla^*c^*\cos\beta^*\\
&+ khb^*a^*\cos\gamma^* + k^2b^{*2} + klb^*c^*\cos\alpha^*\\
&+ lhc^*a^*\cos\beta^* + lkc^*b^*\cos\alpha^* + l^2c^{*2}
\end{aligned} \tag{9}$$

を得る．ここで，

$$\begin{aligned}
\mathbf{a}^* &= \frac{2\pi}{V}\mathbf{b}\times\mathbf{c}, \quad a^* = \frac{2\pi}{V}bc\sin\alpha && (10)\\
\mathbf{b}^* &= \frac{2\pi}{V}\mathbf{c}\times\mathbf{a}, \quad b^* = \frac{2\pi}{V}ca\sin\beta && (11)\\
\mathbf{c}^* &= \frac{2\pi}{V}\mathbf{a}\times\mathbf{b}, \quad c^* = \frac{2\pi}{V}ab\sin\gamma && (12)
\end{aligned}$$

また，

$$\begin{aligned}
\mathbf{a}^*\cdot\mathbf{b}^* &= \frac{(2\pi)^2}{V^2}(\mathbf{b}\times\mathbf{c})\cdot(\mathbf{c}\times\mathbf{a}) = \frac{(2\pi)^2}{V^2}[(\mathbf{c}\times\mathbf{a})\times\mathbf{b}]\cdot\mathbf{c}\\
&= \frac{(2\pi)^2}{V^2}[-(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})\mathbf{c} + (\mathbf{c}\cdot\mathbf{b})\mathbf{a}]\cdot\mathbf{c} = \frac{(2\pi)^2}{V^2}abc^2(-\cos\gamma + \cos\alpha\cos\beta)
\end{aligned} \tag{13}$$

より，次式が得られる．

$$\begin{aligned}
a^*b^*\cos\gamma^* &= \frac{(2\pi)^2}{V^2}abc^2(-\cos\gamma + \cos\alpha\cos\beta) && (14)\\
b^*c^*\cos\alpha^* &= \frac{(2\pi)^2}{V^2}bca^2(-\cos\alpha + \cos\beta\cos\gamma) && (15)\\
c^*a^*\cos\beta^* &= \frac{(2\pi)^2}{V^2}cab^2(-\cos\beta + \cos\gamma\cos\alpha) && (16)
\end{aligned}$$

(15)(16) は巡回性から得られる．(10)–(12) および (14)–(15) を (9) に代入し，$\mathbf{K}^2 = (2\pi/d)^2$ の関係を用いると，

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{d^2} &= \frac{1}{V^2}[h^2b^2c^2\sin^2\alpha + k^2c^2a^2\sin^2\beta + l^2a^2b^2\sin^2\gamma \\
&+ 2hkabc^2(\cos\alpha\cos\beta - \cos\gamma) \\
&+ 2klbca^2(\cos\beta\cos\gamma - \cos\alpha) \\
&+ 2lhcab^2(\cos\gamma\cos\alpha - \cos\beta)] \qquad (17)
\end{aligned}
$$

が得られる．

$$S_{11} = b^2c^2\sin^2\alpha \qquad (18)$$

$$S_{22} = c^2a^2\sin^2\beta \qquad (19)$$

$$S_{33} = a^2b^2\sin^2\gamma \qquad (20)$$

$$S_{12} = abc^2(\cos\alpha\cos\beta - \cos\gamma) \qquad (21)$$

$$S_{23} = bca^2(\cos\beta\cos\gamma - \cos\alpha) \qquad (22)$$

$$S_{31} = cab^2(\cos\gamma\cos\alpha - \cos\beta) \qquad (23)$$

とおけば，

$$\frac{1}{d^2} = \frac{1}{V^2}(S_{11}h^2 + S_{22}k^2 + S_{33}l^2 + 2S_{12}hk + 2S_{23}kl + 2S_{31}lh) \qquad (24)$$

となる．

以上