格子面間隔の計算

2014.6.13　　鈴木　実

逆格子の基本並進ベクトルを $\mathbf{a}^*$，$\mathbf{b}^*$，$\mathbf{c}^*$，格子面のミラー指数を h, k, l とする。(h,k,l) 面の格子面間隔 d は

$$\frac{2\pi}{d} = |\mathbf{K}| \tag{1}$$

で与えられる．ただし，

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

である（「固体物性と電気伝導」(森北出版) p.11）．

一般的な例として三斜晶ブラベー格子の格子面間隔を考える．慣例に従い，$\mathbf{a}$，$\mathbf{b}$，$\mathbf{c}$ の大きさを a，b，c，基本並進ベクトル $\mathbf{b}$ と $\mathbf{c}$ の角度を α，$\mathbf{c}$ と $\mathbf{a}$ の角度を β，$\mathbf{a}$ と $\mathbf{b}$ の角度を γ とする．(1) と (2) より

$$\frac{(2\pi)^2}{d^2} = h^2\mathbf{a}^{*2} + k^2\mathbf{b}^{*2} + l^2\mathbf{c}^{*2} + 2hk(\mathbf{a}^*\cdot\mathbf{b}^*) + 2kl(\mathbf{b}^*\cdot\mathbf{c}^*) + 2lh(\mathbf{c}^*\cdot\mathbf{a}^*) \tag{3}$$

である．ここで，逆格子ベクトルの定義から

$$\mathbf{a}^{*2} = \frac{(2\pi)^2}{V^2}b^2c^2\sin^2\alpha \tag{4}$$

$$\mathbf{b}^{*2} = \frac{(2\pi)^2}{V^2}c^2a^2\sin^2\beta \tag{5}$$

$$\mathbf{c}^{*2} = \frac{(2\pi)^2}{V^2}a^2b^2\sin^2\gamma \tag{6}$$

である．ただし，

$$V = \mathbf{a}\cdot(\mathbf{b}\times\mathbf{c}) \tag{7}$$

は基本単位格子の体積である．一方，(3) 式の右辺第 4 項の $\mathbf{a}^*\cdot\mathbf{b}^*$ はベクトル・スカラー積の巡回性とベクト 3 重積の公式 $(\mathbf{A}\times\mathbf{B})\times\mathbf{C} = -(\mathbf{B}\cdot\mathbf{C})\mathbf{A} + (\mathbf{A}\cdot\mathbf{C})\mathbf{B}$ を用いて以下のように変形できる．

$$\begin{aligned}
\mathbf{a}^*\cdot\mathbf{b}^* &= \frac{(2\pi)^2}{V^2}(\mathbf{b}\times\mathbf{c})\cdot(\mathbf{c}\times\mathbf{a}) \\
&= \frac{(2\pi)^2}{V^2}[\mathbf{c}\times(\mathbf{c}\times\mathbf{a})]\cdot\mathbf{b} \\
&= \frac{(2\pi)^2}{V^2}[(\mathbf{c}\cdot\mathbf{a})\mathbf{c} - (\mathbf{c}\cdot\mathbf{c})\mathbf{a}]\cdot\mathbf{b} \\
&= \frac{(2\pi)^2}{V^2}abc^2(\cos\beta\cos\alpha - \cos\gamma)
\end{aligned} \tag{8}$$

$\mathbf{a}^*$，$\mathbf{b}^*$，$\mathbf{c}^*$，a，b，c，α，β，γ を cyclic に変えることにより以下の式を得る．

$$\mathbf{b}^*\cdot\mathbf{c}^* = \frac{(2\pi)^2}{V^2}bca^2(\cos\gamma\cos\beta - \cos\alpha) \tag{9}$$

$$\mathbf{c}^*\cdot\mathbf{a}^* = \frac{(2\pi)^2}{V^2}cab^2(\cos\alpha\cos\gamma - \cos\beta) \tag{10}$$

(4)-(10) を (3) に代入すると

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

となる．ただし，

$$
\begin{aligned}
S_{11} &= b^2c^2\sin^2\alpha && (12)\\
S_{22} &= c^2a^2\sin^2\beta && (13)\\
S_{33} &= a^2b^2\sin^2\gamma && (14)\\
S_{12} &= abc^2(\cos\alpha\cos\beta - \cos\gamma) && (15)\\
S_{23} &= bca^2(\cos\beta\cos\gamma - \cos\alpha) && (16)\\
S_{31} &= cab^2(\cos\gamma\cos\alpha - \cos\beta) && (17)
\end{aligned}
$$

である．以上から，

$$d = V(S_{11}h^2 + S_{22}k^2 + S_{33}l^2 + 2S_{12}hk + 2S_{23}kl + 2S_{31}lh)^{-1/2} \tag{18}$$

が得られる．

[例] 単斜晶系の場合

三斜晶において，$\alpha = \gamma = \pi/2$ とすることで単斜晶になる．これを (12)–(17) に代入すると，

$$S_{11} = b^2c^2, \quad S_{22} = c^2a^2\sin^2\beta, \quad S_{33} = a^2b^2 \tag{19}$$

$$S_{12} = S_{23} = 0, \quad S_{31} = -ab^2c\cos\beta \tag{20}$$

となる．これを (18) に代入し，$V = \mathbf{a}\cdot(\mathbf{b}\times\mathbf{c}) = abc\sin\beta$ であることを使用すると，

$$d = \sin\beta\left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2\sin^2\beta}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} - \frac{2hl\cos\beta}{ac}\right)^{-1/2} \tag{21}$$

という式が得られる．

以上