三斜晶基本単位格子の体積 (3 つのベクトルが張る平行 6 面体の体積)

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 で与えられる．3 つの一次独立なベクトルが張る平行 6 面体の体積 V は

$$V = \mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) \tag{1}$$

で与えられるが，これを $\mathbf{a}$，$\mathbf{b}$，$\mathbf{c}$，a，b，c で表すのはあまり簡単ではない．$\mathbf{a}$ と $\mathbf{b} \times \mathbf{c}$ の間の角度がすぐには明らかではないからである．

この問題に，反変ベクトルと共変ベクトルの関係を用いると比較的簡単に V を求めることができる．そのため，まず，$\mathbf{a}$，$\mathbf{b}$，$\mathbf{c}$ を共変基底ベクトル $\mathbf{e}_1$，$\mathbf{e}_2$，$\mathbf{e}_3$ とする．

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

これに対して，反変基底ベクトルを $\mathbf{e}^1$，$\mathbf{e}^2$，$\mathbf{e}^3$ とする．一般に，ベクトル $\mathbf{A}$ の共変基底ベクトルへの射影に共変基底ベクトルの長さを掛けた値，すなわち $\mathbf{A}$ と共変基底ベクトルの内積は，$\mathbf{A}$ を反変基底ベクトル $\mathbf{e}^1$，$\mathbf{e}^2$，$\mathbf{e}^3$ で表したときの共変ベクトル成分である．これは $\mathbf{A} = A_1\mathbf{e}^1 + A_2\mathbf{e}^2 + A_3\mathbf{e}^3$ と表して，$\mathbf{A}$ と $\mathbf{e}_i$ との内積をとることで明らかである．したがって，$\mathbf{a}$，$\mathbf{b}$，$\mathbf{c}$ を反変基底で表した共変ベクトルを $\{a_i\}$ など書くと，

$$\{a_i\} = (a^2, ab\cos\gamma, ac\cos\beta) \tag{3}$$
$$\{b_i\} = (ba\cos\gamma, b^2, bc\cos\alpha) \tag{4}$$
$$\{c_i\} = (ca\cos\beta, cb\cos\alpha, c^2) \tag{5}$$

である．一方，$\mathbf{b} \times \mathbf{c}$ を共変ベクトルで計算すると，以下のように反変ベクトルで表される．

$$\mathbf{b} \times \mathbf{c} = \frac{1}{V} \begin{vmatrix} \mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_2 & \mathbf{e}_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{vmatrix} \tag{6}$$

したがって，これと共変ベクトル $\mathbf{a} = a_1\mathbf{e}^1 + a_2\mathbf{e}^2 + a_3\mathbf{e}^3$ の内積を作ると，

$$\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = V = \frac{1}{V} \begin{vmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{vmatrix} = \frac{1}{V} \begin{vmatrix} a^2 & ab\cos\gamma & ac\cos\beta \\ ba\cos\gamma & b^2 & bc\cos\alpha \\ ca\cos\beta & cb\cos\alpha & c^2 \end{vmatrix} \tag{7}$$

これより，

$$V^2 = \begin{vmatrix} a^2 & ab\cos\gamma & ac\cos\beta \\ ba\cos\gamma & b^2 & bc\cos\alpha \\ ca\cos\beta & cb\cos\alpha & c^2 \end{vmatrix} = a^2b^2c^2 \begin{vmatrix} 1 & \cos\gamma & \cos\beta \\ \cos\gamma & 1 & \cos\alpha \\ \cos\beta & \cos\alpha & 1 \end{vmatrix} \tag{8}$$
$$= a^2b^2c^2(1 + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma - \cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma) \tag{9}$$

という関係式が得られる．

以上