

単位格子の体積

単位格子の体積

単位格子の体積 v_c は

$$v_c = (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c} \quad (1)$$

$$= abc \sin \gamma \cos \theta \quad (2)$$

$$= (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c} = (\vec{c} \times \vec{a}) \cdot \vec{b} = (\vec{c} \times \vec{b}) \cdot \vec{a} \quad (3)$$

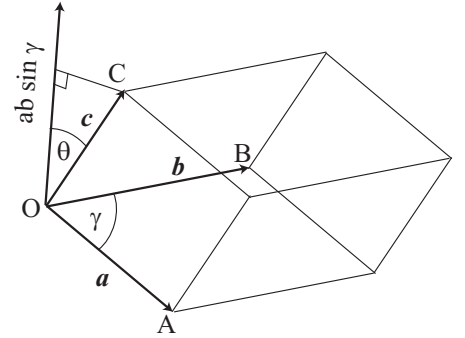


図 1: 単位格子

球面三角形の公式

単位格子の体積 v_c と格子定数、軸間角 $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ との関係式を導くためには、 θ と α, β, γ との関係を求める必要があり、球面三角形の公式を用いる。

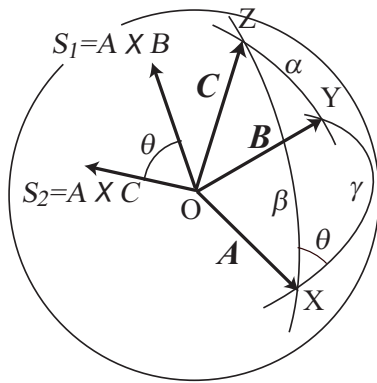


図 2: 球面三角形

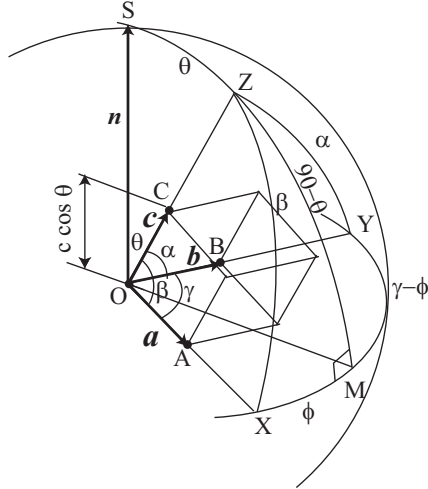


図 3: 球面三角形の適用

中心をOとする半径1の球面上の3つの点をX,Y,Zとし、 $\vec{OX} = \vec{A}, \vec{OY} = \vec{B}, \vec{OZ} = \vec{C}$ X,Y,Zを通る3つの大円からつくられる球面上の三角形XYZを考える。 $\angle YOZ = \alpha, \angle ZOX = \beta, \angle XOY = \gamma, \angle YXZ = \theta$ とおく。

$\vec{S}_1 = \vec{A} \times \vec{B}$ と $\vec{S}_2 = \vec{A} \times \vec{C}$ を考える。これらはAB面、AC面に垂直であり、 S_1 と S_2 のなす角は θ である。故に、

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = S_1 \cdot S_2 \cos \theta = \sin \gamma \sin \beta \sin \alpha \quad (4)$$

一方、スカラー三重積の積の順番を変えると

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = (\vec{A} \times \vec{B}) \cdot \vec{S}_2 = (\vec{B} \times \vec{S}_2) \cdot \vec{A} \quad (5)$$

$$= (\vec{B} \times (\vec{A} \times \vec{C})) \cdot \vec{A} \quad (6)$$

$$= ((\vec{B} \cdot \vec{C})\vec{A} - (\vec{B} \cdot \vec{A})\vec{C}) \cdot \vec{A} \quad (7)$$

$$\text{球面三角形の公式} \quad \cos \theta = \frac{\cos \alpha - \cos \beta \cos \gamma}{\sin \beta \sin \gamma} \quad (8)$$

単位格子の体積 v_c を求めるために、球面三角形の公式を図3に適用する。原点Oを中心とする球を考え、 $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ 軸との交点をそれぞれX、Y、Zとし、c面の法線OSが球面と交わる点をSとする。X、Y、Zを通る3つの大円とSZを通る大円を考え、これのXYを通る大円との交点をMとし、 $\angle XOM = \phi$ とする。

球面三角形XZMに球面三角形の公式(8)を適用する。式(8)の θ に対応する角を $\angle XMZ = 90^\circ, \alpha \rightarrow \beta, \beta \rightarrow \phi, \gamma \rightarrow 90^\circ - \theta$ とすると、

$$\cos 90^\circ = 0 = \frac{\cos \beta - \cos \phi \cos(90^\circ - \theta)}{\sin \phi \sin(90^\circ - \theta)} \quad (9)$$

$$\cos \beta = \sin \theta \cos \phi \quad (10)$$

同様に球面三角形 YZM に公式 (8) を適用して

$$\cos \alpha = \sin \theta \cos(\gamma - \phi) \quad (11)$$

式 (10) と (11) から

$$\begin{aligned} \frac{\cos \alpha}{\sin \theta} &= \cos(\gamma - \phi) = \cos \gamma \cos \phi + \sin \gamma \sin \phi \\ &= \frac{\cos \beta \cos \gamma}{\sin \theta} \pm \sin \gamma \sqrt{1 - \frac{\cos^2 \beta}{\sin^2 \theta}} \end{aligned} \quad (12)$$

$$\cos \alpha = \cos \beta \cos \gamma \pm \sin \gamma \sqrt{\sin^2 \theta - \cos^2 \beta} \quad (13)$$

θ を挟む球面三角形の辺 (角) が β と γ であり、 θ が直角 (90°) であることに注意して単位格子の場合に公式をあてはめると、

$$\cos \alpha - \cos \beta \cos \gamma = \pm \sin \gamma \sqrt{\sin^2 \theta - \cos^2 \beta} \quad (14)$$

$$\sin^2 \gamma (1 - \cos^2 \theta - \cos^2 \beta) = \cos^2 \alpha + \cos^2 \beta \cos^2 \gamma - 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma \quad (15)$$

整理すると

$$\sin^2 \gamma \cos^2 \theta = \sin^2 \gamma - \sin^2 \gamma \cos^2 \beta - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma \quad (16)$$

$$= 1 - \cos^2 \gamma - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma \quad (17)$$

したがって、単位格子の体積 v_c は

$$v_c = abc \sin \gamma \cos \theta = abc \sqrt{1 - \cos^2 \gamma - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma} \quad (18)$$

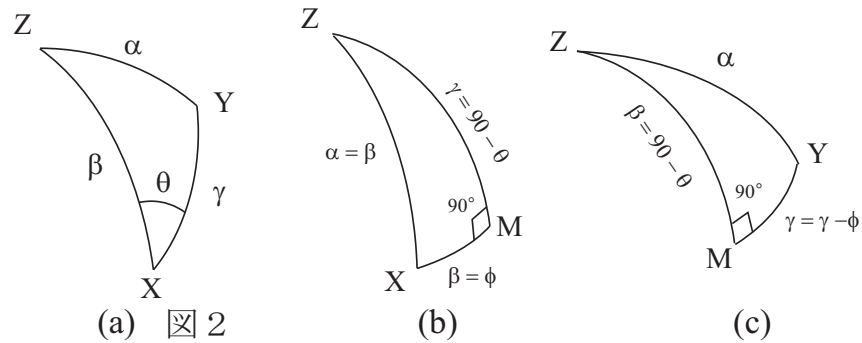


図 4: