3-7 Reciprocal Lattice and Distance between Planes

3-7-1 Reciprocal Lattice

- The general lattice vector is defined by using the basic translation vectors $\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$ $\vec{a},\ \vec{b},\ \vec{c}$

- The reciprocal lattice vectors can be defined by

$$\vec{a}^* = \frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})} = \frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\Omega}, \qquad (3\text{-}35)$$

$$\vec{b}^* = \frac{\vec{c}\times\vec{a}}{\vec{b}\cdot(\vec{c}\times\vec{a})} = \frac{\vec{c}\times\vec{a}}{\Omega}, \qquad (3\text{-}36)$$

$$\vec{c}^* = \frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{c}\cdot(\vec{a}\times\vec{b})} = \frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\Omega}. \qquad (3\text{-}37)$$

Where $\Omega = \vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c}) = \vec{b}\cdot(\vec{c}\times\vec{a}) = \vec{c}\cdot(\vec{a}\times\vec{b})$ ume of unit cell.

The properties of reciprocal lattice vector

- The dot product of reciprocal vector and real vector

$$\vec{a}^* \cdot \vec{b} = \frac{(\vec{b} \times \vec{c})}{\Omega} \cdot \vec{b} = 0 \qquad (3\text{-}38)$$

$$\vec{a}^* \cdot \vec{c} = \frac{(\vec{b} \times \vec{c})}{\Omega} \cdot \vec{c} = 0 \qquad (3\text{-}39)$$

Therefore, reciprocal vector $\vec{a}^*$ and $\vec{b}$ are orthogonal.

$$\vec{b}^* \cdot \vec{c} = \vec{b}^* \cdot \vec{a} = 0 \qquad (3\text{-}40)$$

$$\vec{c}^* \cdot \vec{a} = \vec{c}^* \cdot \vec{b} = 0 \qquad (3\text{-}41)$$

즉, 역격자 벡터, $\vec{b}^*$는 $\vec{c}$와 $\vec{a}$에 수직이고, $\vec{c}^*$는 $\vec{a}$와 $\vec{b}$에 수직이다. 그림 3-29 에 역격자 벡터 $\vec{b}^*$는 $\vec{c}$와 $\vec{a}$에 수직이고, $\vec{c}^*$는 $\vec{a}$와 $\vec{b}$에 수직인 것을 나타내었다.

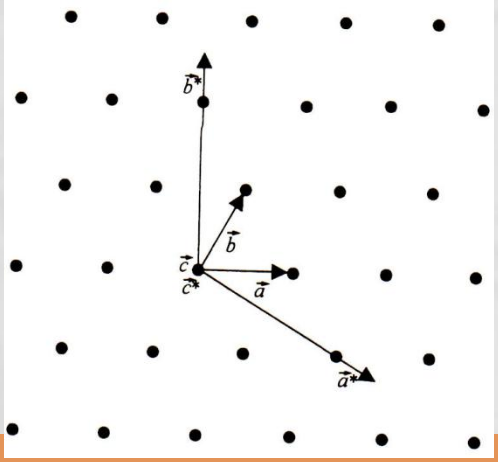

그림 3-29 실격자 벡터와 역격자 벡터의 구성.

- In real space, the translation vectors, $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ at orthorhombic tetragonal and cubic structure, $\vec{a}^* // \vec{a}, \ \vec{b}^* // \vec{b}, \ \vec{c}^* // \vec{c}$
- Therefore, the reciprocal and real vectors are parallel to each other for those structures.

- And the dot product of $\vec{a}^*$ and $\vec{a}$

$$\vec{a}^* \cdot \vec{a} = \frac{(\vec{b} \times \vec{c})}{\Omega} \cdot \vec{a} = \frac{(\vec{b} \times \vec{c}) \cdot \vec{a}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})} = 1 \tag{3-42}$$

And $\vec{b}^* \cdot \vec{b} = 1, \quad \vec{c}^* \cdot \vec{c} = 1$

If θ_1 is the angle between $\vec{a}^*$ and $\vec{a}$

$$\vec{a}^* \cdot \vec{a} = |\vec{a}^*||\vec{a}| \cos\theta_1 = 1 \tag{3-43}$$

$$|\vec{a}^*| = \frac{1}{|\vec{a}| \cos\theta_1} \tag{3-44}$$

If θ_2 is the angle between $\vec{b}^*$ and $\vec{b}$, and is the θ_3 angle between $\vec{c}^*$ and $\vec{c}$

$$|\vec{b}^*| = \frac{1}{|\vec{b}|\cos\theta_2} \tag{3-45}$$

$$|\vec{c}^*| = \frac{1}{|\vec{c}|\cos\theta_3} \tag{3-46}$$

- At orthorhombic, tetragonal and cubic structure, $\vec{a} \perp \vec{b} \perp \vec{c}$, i.e $\theta_i = 0$ then $\cos\theta_i = 1$

$$|\vec{a}^*| = \frac{1}{|\vec{a}|},\quad |\vec{b}^*| = \frac{1}{|\vec{b}|},\quad |\vec{c}^*| = \frac{1}{|\vec{c}|} \tag{3-47}$$

That is, the magnitude of reciprocal vector is the inverse of the magnitude of real space vector.

Properties of General Reciprocal Lattice Vector

$$\overrightarrow{OA}=\frac{\vec{a}}{h},\quad \overrightarrow{OB}=\frac{\vec{b}}{k},\quad \overrightarrow{OC}=\frac{\vec{c}}{l} \qquad (3\text{-}48)$$

이라 할 때, 면 ABC의 면 지수는 $(h\ k\ l)$이 된다. $\vec{g}^*$의 방향을 알기 위하여 $\vec{g}^*\cdot\overrightarrow{AB}$의 값을 계산하면,

$$\begin{aligned}\vec{g}^*\cdot\overrightarrow{AB} &= \vec{g}^*\cdot\left(\frac{\vec{b}}{k}-\frac{\vec{a}}{h}\right)\\ &= (h\vec{a}^*+k\vec{b}^*+l\vec{c}^*)\cdot\left(\frac{\vec{b}}{k}-\frac{\vec{a}}{h}\right)\\ &= 0\end{aligned} \qquad (3\text{-}49)$$

이고 마찬가지로 $\vec{g}^*\cdot\overrightarrow{BC}=0$ 이다. 이 결과로 $h\ k\ l$로 표시되는 **역격자 벡터** $\vec{g}^*=h\vec{a}^*+k\vec{b}^*+l\vec{c}^*$는 실공간 내의 면 ***ABC*** **즉** ***(h k l)*** 면에 수직임을 알 수 있다.

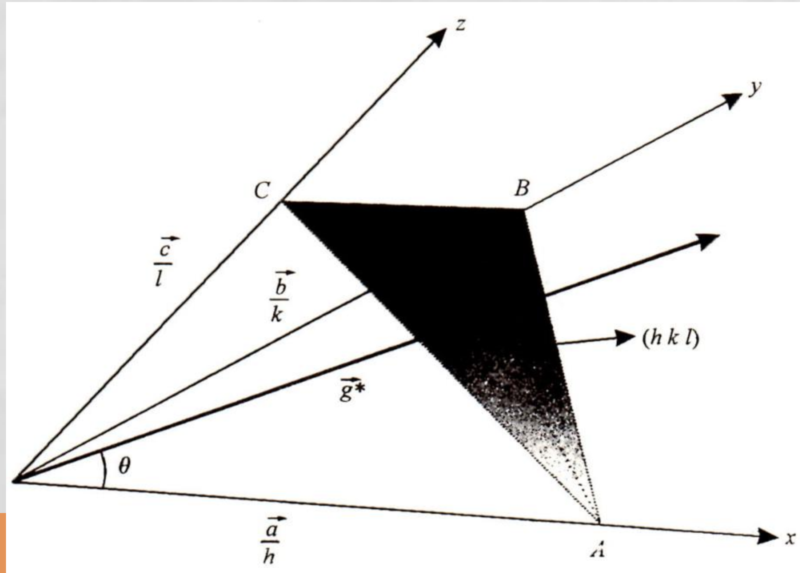

그림 3-30 역격자 벡터와 실공간 내의 (h k l) 격자면과의 관계. 역격자 벡터의 방향은 (h k l면에 수직이며 크기는 $1/d_{hkl}$

만약 θ가 $\vec{g}^*$와 $\overrightarrow{OA}$ 사이의 각이라면 원점 O에서 면 $(h\ k\ l)$ 사이의 면간 거리 d_{hkl}은

$$d_{hkl} = |\overrightarrow{OA}|\cos\theta \tag{3-50}$$

이 된다.

$$\cos\theta = \frac{\overrightarrow{OA}}{|\overrightarrow{OA}|}\cdot\frac{\vec{g}^*_{hkl}}{|\vec{g}^*_{hkl}|} \tag{3-51}$$

임을 이용하여 간단히 나타내면,

$$\begin{aligned} d_{hkl} &= \overrightarrow{OA}\cdot\frac{\vec{g}^*_{hkl}}{|\vec{g}^*_{hkl}|} \\ &= \frac{\vec{a}}{h}\cdot\frac{h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*}{|\vec{g}^*_{hkl}|} \\ &= \frac{1}{|\vec{g}^*_{hkl}|} \end{aligned} \tag{3-52}$$

이다. 그러므로, $|\vec{g}^*_{hkl}| = 1/d_{hkl}$ 이 된다. 즉, **$\vec{g}^*_{hkl}$ 의 크기는 실공간의 $(h\ k\ l)$ 면간 거리의 역수이다.**

이런 결과들을 이용하여 그림 3-31 과 같이 왼쪽에 있는 실공간 내의 기본 벡터 $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ 에서 오른쪽에 있는 역격자의 기본 벡터 $\vec{a}^*$, $\vec{b}^*$, $\vec{c}^*$ 를 그릴 수 있다. 그림에서 보면 모든 $\vec{g}^*_{hkl}$ 의 방향은 면 $(h\ k\ l)$에 수직인 방향이고, 모든 $\vec{g}^*_{hkl}$ 의 크기는 $(h\ k\ l)$ 면간 거리의 역수에 비례한다.

3-7-2 Distance and Angle between planes

앞에서 나온 역격자 벡터를 이용하면 면간 거리와 면간 각을 구할 수 있다. 역격자 벡터는

$$\vec{g}^*_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^* \tag{3-53}$$

이고 따라서

$$\begin{aligned}\vec{g}^*_{hkl} \cdot \vec{g}^*_{hkl} &= |\vec{g}^*_{hkl}|^2 = (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*)\cdot(h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \\ &= h^2|\vec{a}^*|^2 + k^2|\vec{b}^*|^2 + l^2|\vec{c}^*|^2 + 2\{hk(\vec{a}^* \cdot \vec{b}^*) + kl(\vec{b}^* \cdot \vec{c}^*) + lh(\vec{c}^* \cdot \vec{a}^*)\}\end{aligned} \tag{3-54}$$

이고, 역격자 벡터의 크기는 면간 거리 d_{hkl}의 역수와 같으므로

$$|\vec{g}^*_{hkl}|^2 = \frac{1}{d^2_{hkl}} \tag{3-55}$$

이다. 식(3-54)와 (3-55)에서

$$d_{hkl} = \frac{1}{|\overset{*}{g}_{hkl}|} = [h^2|\vec{a}^*|^2 + k^2|\vec{b}^*|^2 + l^2|\vec{c}^*|^2 + 2\{hk(\vec{a}^* \cdot \vec{b}^*) + kl(\vec{b}^* \cdot \vec{c}^*) + lh(\vec{c}^* \cdot \vec{a}^*)\}]^{-1/2} \tag{3-56}$$

로 면간 거리의 일반식이 나온다.

역격자 벡터는 격자면에 항상 수직이므로 두 격자면 사이의 각은 두 역격자 벡터 사이의 각과 같다. 밀러 지수가 $(h_1\, k_1\, l_1)$인 면에 수직인 역격자 벡터는

$$\vec{g}^{*}_{h_1k_1l_1} = h_1\vec{a}^{*} + k_1\vec{b}^{*} + l_1\vec{c}^{*} \tag{3-57}$$

이고, 면 지수가 $(h_2\, k_2\, l_2)$인 면에 수직인 역격자 벡터는

$$\vec{g}^{*}_{h_2k_2l_2} = h_2\vec{a}^{*} + k_2\vec{b}^{*} + l_2\vec{c}^{*} \tag{3-58}$$

이다. 그런데

$$\vec{g}^{*}_{h_1k_1l_1} \cdot \vec{g}^{*}_{h_2k_2l_2} = |\vec{g}^{*}_{h_1k_1l_1}| \cdot |\vec{g}^{*}_{h_2k_2l_2}| \cos\phi \tag{3-59}$$

이고 여기서 ϕ는 두 역격자 벡터 사이의 각, 즉 면간 각이다.

윗식 및 식 (3-57)과 (3-58)에서

$$\cos\phi = \frac{\vec{g}^{*}_{h_1k_1l_1} \cdot \vec{g}^{*}_{h_2k_2l_2}}{|\vec{g}^{*}_{h_1k_1l_1}| \cdot |\vec{g}^{*}_{h_2k_2l_2}|} = \frac{(h_1\vec{a}^{*} + k_1\vec{b}^{*} + l_1\vec{c}^{*}) \cdot (h_2\vec{a}^{*} + k_2\vec{b}^{*} + l_2\vec{c}^{*})}{|\vec{g}^{*}_{h_1k_1l_1}| \cdot |\vec{g}^{*}_{h_2k_2l_2}|} \tag{3-60}$$

이 되고, 식 (3-56)을 이용하여

$$|g^*_{h_1k_1l_1}| = \frac{1}{d_{h_1k_1l_1}} = [h_1^2|\vec{a}^*|^2 + k_1^2|\vec{b}^*|^2 + l_1^2|\vec{c}^*|^2 + 2\{h_1k_1(\vec{a}^* \cdot \vec{b}^*) + k_1l_1(\vec{b}^* \cdot \vec{c}^*) + l_1h_1(\vec{c}^* \cdot \vec{a}^*)\}]^{1/2} \quad (3\text{-}61)$$

이 되므로 식 (3-60)에 대입하여 정리하면

$$\cos\phi = \frac{h_1h_2|\vec{a}^*|^2 + k_1k_2|\vec{b}^*|^2 + l_1l_2|\vec{c}^*|^2 + (h_1k_2 + h_2k_1)\vec{a}^* \cdot \vec{b}^*}{\sqrt{h_1^2|\vec{a}^*|^2 + k_1^2|\vec{b}^*|^2 + l_1^2|\vec{c}^*|^2 + 2\{h_1k_1(\vec{a}^* \cdot \vec{b}^*) + k_1l_1(\vec{b}^* \cdot \vec{c}^*) + l_1h_1(\vec{c}^* \cdot \vec{a}^*)\}}}$$
$$\frac{+(k_1l_2 + k_2l_1)\vec{b}^* \cdot \vec{c}^* + (l_1h_2 + l_2h_1)\vec{c}^* \cdot \vec{a}^*}{\sqrt{h_2^2|\vec{a}^*|^2 + k_2^2|\vec{b}^*|^2 + l_2^2|\vec{c}^*|^2 + 2\{h_2k_2(\vec{a}^* \cdot \vec{b}^*) + k_2l_2(\vec{b}^* \cdot \vec{c}^*) + l_2h_2(\vec{c}^* \cdot \vec{a}^*)\}}} \quad (3\text{-}62)$$

이다.

각 결정계에 대하여 면간 거리와 면간 각을 구체적으로 살펴보자.

① 입방정

입방정에서는

$$a = b = c, \quad \alpha = \beta = \gamma = 90° \tag{3-63}$$

이며, 세 축이 서로 수직이므로

$$|\vec{a}^*| = |\vec{b}^*| = |\vec{c}^*| = \frac{1}{a} \tag{3-64}$$

이고, 역격자에서 세 축 사이의 각도를 α^*, β^*, γ^*라 하면

$$\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90° \tag{3-65}$$

로 역격자에서 세 축도 서로 수직이다.

따라서

$$\vec{g}^*_{hkl} \cdot \vec{g}^*_{hkl} = (h^2 + k^2 + l^2)|\vec{a}^*|^2 \tag{3-66}$$

이고

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \tag{3-67}$$

이다.

식 (3-62), (3-64)와 (3-65)에서

$$\cos\phi = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2}\sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}} \tag{3-68}$$

의 식으로 주어지고 여기서 면간 각을 구할 수 있다.

② 정방정

정방정에서는

$$a = b \neq c, \quad \alpha = \beta = \gamma = 90° \tag{3-69}$$

이며, 역시 세 축이 서로 수직이므로

$$|\vec{a}^*| = |\vec{b}^*| = \frac{1}{a}, \ |c^*| = \frac{1}{c}, \quad \alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90° \tag{3-70}$$

으로 역격자에서 세 축도 서로 수직이다.

따라서

$$|\vec{g}^*_{hkl}|^2 = (h^2 + k^2)|\vec{a}^*|^2 + l^2|\vec{c}^*|^2 \tag{3-71}$$

이고

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{(h^2 + k^2)}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}}} \tag{3-72}$$

이다.

면간 각은 식 (3-62)와 (3-70)에서

$$\cos\phi == \frac{\frac{h_1h_2 + k_1k_2}{a^2} + \frac{l_1l_2}{c^2}}{\sqrt{\frac{h_1^2 + k_1^2}{a^2} + \frac{l_1^2}{c^2}} \cdot \sqrt{\frac{h_2^2 + k_2^2}{a^2} + \frac{l_2^2}{c^2}}} \tag{3-73}$$

으로 주어진다.

③ 사방정

사방정에서는

$$a \neq b \neq c, \quad \alpha = \beta = \gamma = 90° \tag{3-74}$$

이며, 세 축이 서로 수직이므로

$$|\vec{a}^*| = \frac{1}{a}, \ |\vec{b}^*| = \frac{1}{b}, \ |\vec{c}^*| = \frac{1}{c}, \quad \alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90° \tag{3-75}$$

로 역격자에서 세 축도 서로 수직이다.

따라서

$$|\vec{g}^*_{hkl}|^2 = h^2|\vec{a}^*|^2 + k^2|\vec{b}^*|^2 + l^2|\vec{c}^*|^2 \tag{3-76}$$

이고

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h^2}{a^2}\right) + \left(\frac{k^2}{b^2}\right) + \left(\frac{l^2}{c^2}\right)}} \tag{3-77}$$

이다.

면간 각은 식 (3-62)와 (3-75)에서

$$\cos\phi = \frac{\frac{h_1 h_2}{a^2} + \frac{k_1 k_2}{b^2} + \frac{l_1 l_2}{c^2}}{\sqrt{\frac{h_1^2}{a^2} + \frac{k_1^2}{b^2} + \frac{l_1^2}{c^2}} \cdot \sqrt{\frac{h_2^2}{a^2} + \frac{k_2^2}{b^2} + \frac{l_2^2}{c^2}}} \tag{3-78}$$

로 주어진다.

④ 육방정

육방정에서는

$$a = b \neq c, \quad \alpha = \beta = 90°, \quad \gamma = 120° \tag{3-79}$$

이므로

$$|\vec{a}^*| = \left|\frac{(\vec{b}\times\vec{c})}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})}\right| = \frac{bc}{abc\cos 30°} = \frac{1}{a\sqrt{3}/2} = \frac{2}{a\sqrt{3}}$$

$$|\vec{b}^*| = \frac{2}{a\sqrt{3}} \tag{3-80}$$

$$|\vec{c}^*| = \left|\frac{(\vec{a}\times\vec{b})}{\vec{c}\cdot(\vec{a}\times\vec{b})}\right| = \frac{ab\sin 120°}{abc\cos 30°} = \frac{1}{c}$$

이고 역격자에서 세 축 사이의 각은

$$\alpha^* = \beta^* = 90°, \quad \gamma^* = 120° \tag{3-81}$$

이다. 이를 이용하면 식 (3-54)에서

$$|\vec{g}^*_{hkl}|^2 = (h^2 + hk + k^2)|\vec{a}^*|^2 + l^2|\vec{c}^*|^2 \tag{3-82}$$

이고

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\dfrac{h^2 + hk + k^2}{(\sqrt{3}a/2)^2} + \dfrac{l^2}{c^2}}} \tag{3-83}$$

이다.

면간 각은 식 (3-62), (3-80)과 (3-81)에서

$$\cos\phi = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + \dfrac{1}{2}(h_1k_2 + h_2k_1) + \dfrac{3a^2}{4c^2}l_1l_2}{\sqrt{h_1^{\,2} + k_1^{\,2} + h_1k_1 + \dfrac{3a^2}{4c^2}l_1^{\,2}} \cdot \sqrt{h_2^{\,2} + k_2^{\,2} + h_2k_2 + \dfrac{3a^2}{4c^2}l_2^{\,2}}} \tag{3-84}$$

로 주어진다.