個体構造解析学　第7回　格子と逆格子の概要

**格子の基本概念**

**・**格子とは，格子点の周期的な集合である。3次元の格子は14種類のブラベー格子に分類される。

・結晶構造は，ブラベー格子の格子点に基底を置いたものである。基底は原子や分子の単位構造を指す。

**格子の分類**

1. 三斜格子

・対称心のみを持ち，，

1. 単斜格子

・2回軸を1本持ち，，，

1. 直方格子

・3本の2回軸が直交し，，

1. 正方格子

・1本の4回軸とそれに垂直な2回軸を持ち，，

1. 菱面体格子と六方格子

・それぞれ3回回反軸や6回軸を持つ。六方格子はの角を持ち，，

菱面体格子の場合は，

1. 立方格子

・3本の4回軸が直交し，，

**逆格子**

**・**逆格子は，格子ベクトルの集合で，実空間の格子の逆数の次元を持つ。基本ベクトルに対し，逆格子の基本ベクトルはである。

**幾何学的諸量の公式**

・単位格子の体積や面間隔，Bragg反射の公式が含まれる。

・単位格子の体積：

・面間隔(d)：

・Bragg反射：

(はBragg角，は波長)