

设原晶格中. 晶格参数为 a , 晶格矢量分为 \vec{a} , \vec{b}
且: $|\vec{a}| = |\vec{b}| = a$

当建立 $L \times L$ 倍晶胞时.

新晶格参数为 $|\vec{L}| \cdot a$.

且应有:

$$a\vec{L} = m\vec{a} + n\vec{b} \quad \text{其中: } m, n \text{ 为整数.}$$

根据余弦定理:

$$|\vec{L}|^2 a^2 = |m\vec{a}|^2 + |n\vec{b}|^2 - 2|m\vec{a}| \cdot |n\vec{b}| \cdot \cos 60^\circ$$

$$L^2 = m^2 + n^2 - mn.$$

当 $L = \sqrt{7}$ 时. $7 = m^2 + n^2 - mn.$ (代入法)

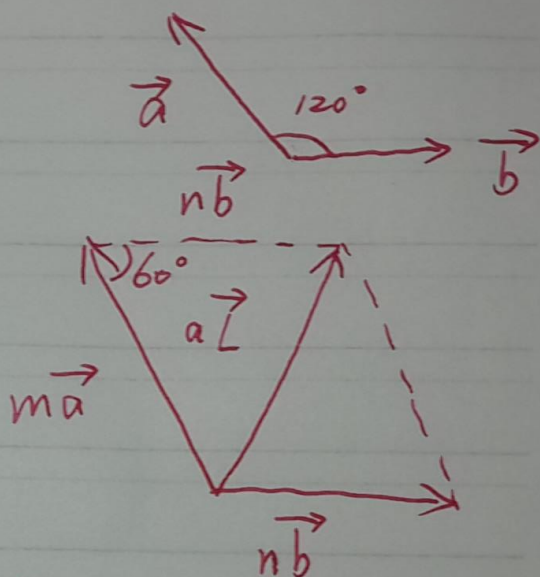
$$\begin{cases} m=3 \\ n=1 \end{cases} \quad \text{或} \quad \begin{cases} m=-1 \\ n=2 \end{cases}$$

故新的晶格矢量为:

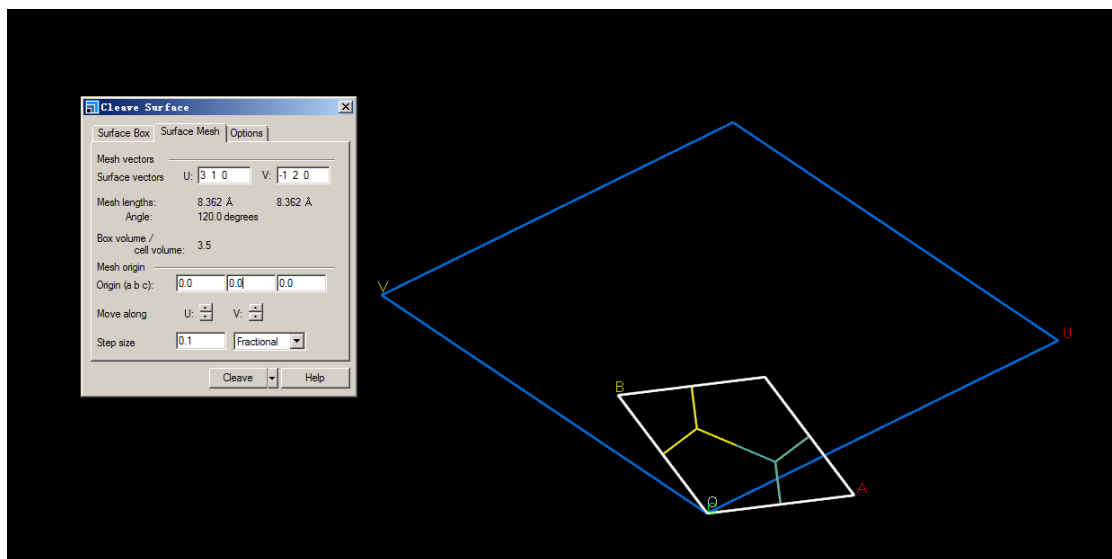
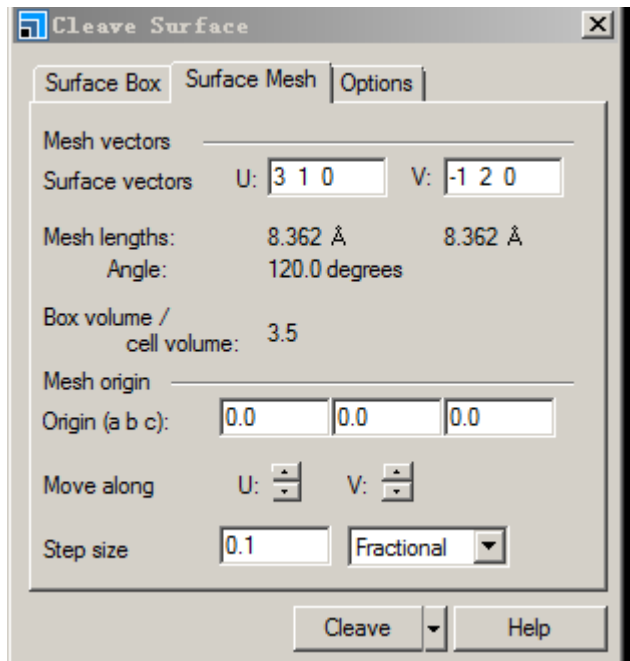
$$\begin{cases} 3\vec{a} + \vec{b} \\ -\vec{a} + 2\vec{b} \end{cases}$$

即: Surface vectors: $(3, 1, 0)$ $(-1, 2, 0)$

当 $L = \sqrt{3}$ 时. 方法亦同上.



在用 MS 时候，设置 (001) 面的 vectors 如下即可：



因此，根据矢量倍数关系解余弦定律方程即可。