

## 逆格子ベクトルを求める

### 1. はじめに

結晶の性質を調べる際に使われる数学的概念として逆格子ベクトルがある。

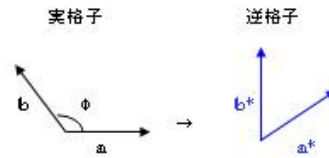
逆格子ベクトルは実格子ベクトル  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  を用いて

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{V} \quad (1)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi \vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{V} \quad (2)$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi \vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{V} \quad (3)$$

と定義される。ここで  $V$  は  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  のベクトルが作る体積である。



### 2. 目的

三組の実格子ベクトルが指定されたときにその結晶の逆格子ベクトルを求めること。

### 3. 方法

一般のベクトル  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  に対して逆格子の定義から fortran90 を用いて計算をする。後から任意の成分を入力出来るようにした。

### 4. 結果

例えば

$$\vec{a}_1 = (1, 0, 0), \vec{a}_2 = (0, 1, 0), \vec{a}_3 = (0, 0, 1) \quad (4)$$

に対して

$$\vec{b}_1 = (6.2831854820251465, 0, 0) = (2\pi, 0, 0) \quad (5)$$

$$\vec{b}_2 = (0, 6.2831854820251465, 0) = (0, 2\pi, 0) \quad (6)$$

$$\vec{b}_3 = (0, 0, 6.2831854820251465) = (0, 0, 2\pi) \quad (7)$$

となった。