Korean J. Crystallography
Vol. 17, No. 1, pp.1~5, 2006

2次元的인 直格子와 逆格子間의 相互關係

金榮相[a] · 高在中[a] · 姜相旭[a] · 韓元植[a] · 徐日煥[a] · 金珍圭[b] · 金潤中[b]
[a]高麗大學校 新素材化學科 (瑞倉 campus)
[b]電子顯微鏡研究部, 韓國基礎科學支援研究院

Interrelation between Two-Dimensional Direct and Reciprocal Lattices

Young-Sang Kim[a], Jaejung Ko[a], Sang Ook Kang[a], Won-Sik Han[a], Il-Hwan Suh[a], Jin-Gyu Kim[b] and Youn-Joong Kim[b]
[a]*Department of Material Chemistry, Korea University, 208 Seochang, Chochiwon, Chungnam 339-700, Korea*
[b]*Division of Electron Microscopic Research, Korea Basic science Institute, 52 Yeoeun-Dong, Yusung-gu, Daejeon 305-333, Korea*

抄　錄

二次元的인 直格子와 逆格子의 基本 vectors를 定義하고 이들 間에 存在하는 여러 가지 相互關係를 誘導한 後 $\vec{d}^*(hk)$ //direction of (hk), $d(hk)=1/d^*(hk)$, [uv] 方向에 屬한 (hk)面들, 그리고 二次元的인 4가지 格子들의 面積 및 面間距離等의 計算法을 提示하였다.

Abstract

After the definition of the basis vectors of the two-dimensional direct and reciprocal lattices, various interrelations between them are derived, and additionally how to calculate $\vec{d}^*(hk)$ //direction of (hk), $d(hk)=1/d^*(hk)$, planes belonging to a direction [uv], areas and interplanar spacing of 2-dimensional four different lattices are shown.

1. The basis vectors of the direct and reciprocal lattices.

다음과 같이 定義한다.

$\vec{a}$, $\vec{b}$: basis vectors of direct lattice

$\vec{n}_1$, $\vec{n}_2$: unit vectors of basis vectors $\vec{a}$ and $\vec{b}$ of direct lattice

$\vec{a}^*$, $\vec{b}^*$: basis vectors of reciprocal lattice

$\vec{n}_1^*$, $\vec{n}_2^*$: unit vectors of basis vectors $\vec{a}^*$ and $\vec{b}^*$ of reciprocal lattice

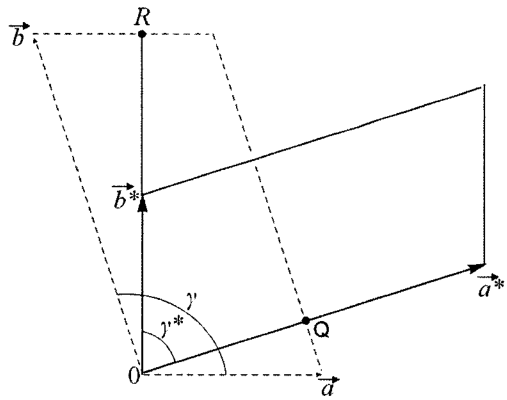

Fig. 1. A general oblique lattice in two dimension showing a choice of the basis vectors $\vec{a}$, $\vec{b}$ of direct lattice (dashed line) and $\vec{a}^*$, $\vec{b}^*$ of reciprocal lattice (solid line).

Fig. 1과 같이 direct lattice의 2개 basis vectors $\vec{a}$와 $\vec{b}$와 그 들의 사이 角이 γ로 이루 워 진 two-dimensional oblique unit cell의 面積 A는 다음과 같이 表現된다.

$$\mathrm{area}(A)=|\vec{a}\times\vec{b}|=ab\sin\gamma \quad (1)$$

OQ=$d(10)$와 OR=$d(01)$는 two-dimensional plane (10)과 (01)의 interplanar spacings 이다.

Reciprocal lattice의 basis vectors $\vec{a}^*$ 및 $\vec{b}^*$는 다음같이 定義한다(refer to Fig. 1).

$$\vec{a}^*=\vec{b}^*(01)=\frac{\vec{n}_1^*}{d(10)}=\frac{\vec{n}_1^*}{a\sin\gamma}=\frac{\overrightarrow{bn_1^*}}{A} \text{ where } \vec{n}_1^*\perp\vec{n}_2^*, \quad (2)$$

Vector $\vec{a}^*$의 크기는 原點으로부터 (10) 面의 interplanar spacing $d(10)$의 逆인 1/d(10) 點까지이고, 이 vector의 方向은 (10)面의 方向과 나란하며 그 한 點이 바로 連續的인 (10)面들을 나타낸다. $d(h0)$는 h가 커질수록 작아지므로 $d(10)$는 $(h0)$面들 中에서 가장 크기 때문에 그의 逆인 $1/d(10)$은 $(h0)$ 面들의 것 中의 最小이다. 따라서 $\vec{n}_1^*/d(10)$을 reciprocal lattice의 basis vector $\vec{a}^*$로 나타낼 수 있다.

마찬가지로 $\vec{b}^*$는 다음과 같다.

$$\vec{b}^*=\vec{d}^*(01)=\frac{\vec{n}_2^*}{d(01)}=\frac{\vec{n}_2^*}{b\sin\gamma}=\frac{\overrightarrow{an_2^*}}{A} \text{ where } \vec{n}_2^*\perp\vec{n}_1 \quad (3)$$

그러므로, 다음과 같은 關係를 얻는다.

$$|\vec{a}^*|=\frac{1}{a\sin\gamma}=\frac{b}{A},\quad |\vec{b}^*|=\frac{1}{b\sin\gamma}=\frac{a}{A}$$

$$\frac{a^*}{b^*}=\frac{(b/A)}{(a/B)}=\frac{b}{a},\quad aa^*=bb^*$$

γ^*는 다음과 같이 계산된다.

$$\gamma^*=\cos^{-1}\frac{\vec{a}^*\cdot\vec{b}^*}{a^*b^*}$$

$$\gamma^*=\gamma-2\left(\gamma-\frac{\pi}{2}\right)=\pi-\gamma$$

$$\sin\gamma^*=\sin\gamma,\ \cos\gamma^*=-\cos\gamma$$

$$A^*=|\vec{a}^*\times\vec{b}^*|=a^*b^*\sin\gamma^*=a^*b^*\sin\gamma$$

이와 유사하게 direct lattice의 basis vectors는 reciprocal lattice의 basis vectors로 다음같이 表示할 수 있다.

$$\vec{a}=\frac{\vec{n}_1}{d^*(10)}=\frac{\vec{n}_1}{a^*\sin\gamma^*}=\frac{b^*\vec{n}_1}{A^*} \text{ where } \vec{n}_1\perp\vec{n}_2^*,$$

$$\vec{b}=\frac{\vec{n}_2}{d^*(01)}=\frac{\vec{n}_2}{b^*\sin\gamma^*}=\frac{a^*\vec{n}_2}{A^*} \text{ where } \vec{n}_2\perp\vec{n}_1^*,$$

$$a=\frac{1}{a^*\sin\gamma^*}=\frac{b^*}{A^*},\ b=\frac{1}{b^*\sin\gamma^*}=\frac{a^*}{A^*}$$

$$\gamma=\cos^{-1}\frac{\vec{a}-\vec{b}}{ab}$$

$$AA^*=ab\sin\gamma a^*b^*\sin\gamma^*=ab\sin\gamma\frac{b}{A}\frac{a}{A}\sin\gamma=1 \quad (4)$$

위의 성질로부터 다음의 관계가 성립한다.

$$\vec{a}^*\cdot\vec{a}=\frac{\overrightarrow{bn_1^*}}{A}\cdot\vec{a}=\frac{ab}{A}\cos\left(\gamma-\frac{\pi}{2}\right)=\frac{ab}{A}\sin\gamma=1$$

$$\vec{b}^*\cdot\vec{b}=\frac{\overrightarrow{an_1^*}}{A}\cdot\vec{a}=\frac{ab}{A}\cos\left(\gamma-\frac{\pi}{2}\right)=\frac{ab}{A}\sin\gamma=1 \quad (5)$$

$$\vec{a}^*\cdot\vec{b}=0\quad \vec{b}^*\cdot\vec{a}=0$$

Two dimensional lattice內에는 서로 平行하며 等間隔인 (hk)面이 無數히 많다. 이 (hk) 平面들의 reciprocal lattice point는 다음같이 作圖할 수 있다.

(1) reciprocal lattice에서 任意로 擇한 原點으로부터 그 (hk) 平面의 共通인 法線을 긋고

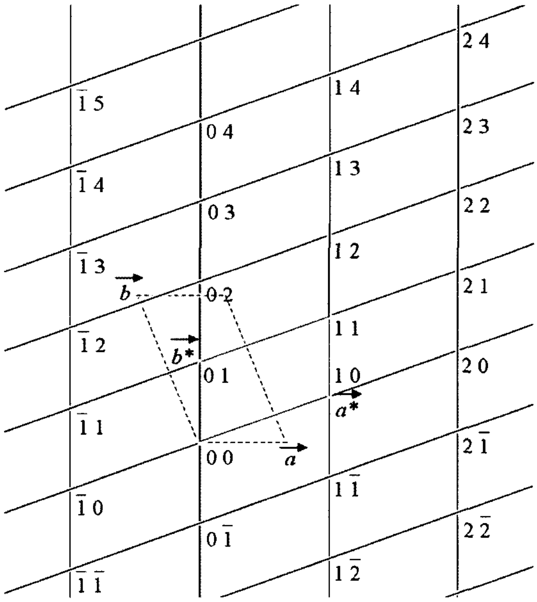

Fig. 2. A two-dimensional oblique unit cell (dashed line) of direct lattice and its reciprocal lattice net (solid line).

(2) 그 法線上에 (hk)의 interplanar spacing에 反比例하는 한 點을 찍어서 만든다.

이렇게 함으로서 (hk) 平面들의 總集合이 한 個의 點으로 表示된다(refer to Fig. 2).

Fig. 2에서 다음과 같은 reciprocal lattice vector들의 크기 關係가 얻어진다.

$d^*(20)=2d^*(10)$

$d^*(30)=3d^*(10)$ 等等

따라서 Eqs. (2), (3) 로 定義한 reciprocal lattice의 basis vectors $\vec{a}^*$ 와 $\vec{b}^*$ 를 사용하여 作圖한 two-dimensional reciprocal lattice net內의 任意의 原點으로부터 任意의 平面 (hk)의 reciprocal lattice point까지의 vector $\vec{d}^*(hk)$는 다음과 같이 表示할 수 있다.

$$\vec{d}^*(hk)=h\vec{a}^*+k\vec{b}^* \quad (6)$$

2. $\vec{d}^*(hk)$ is parallel to the direction of (hk).

Eqs. (2)와 (3)으로 나타낸 reciprocal lattice vector $\vec{d}^*(hk)$의 方向이 (hk)面의 方向임을 보이자.

Fig. 3에서와 같이 AB를 (hk) form 中에서 原點으로부터 가장 가까운 平面이라고 하면 Miller index의 定義에 依하여 原點으로부터 A와 B까지의 vector는 各各 $\overrightarrow{0A}=\vec{a}/h$, $\overrightarrow{0B}=\vec{b}/k$ 이다. 따라서 (hk)平面內에 있는 $\overrightarrow{AB}$ vector는 다음과 같다.

$\vec{d}^*$ 와 $\overrightarrow{AB}$를 scalar product를 하면 Eq. (5)에 의하여 다음같이 된다.

$$\vec{d}^*\cdot\overrightarrow{AB}=(h\vec{a}^*+k\vec{b}^*)\cdot(\vec{b}/k-\vec{a}/h)=0$$

$$\therefore\ \vec{d}^*(hk)//\text{direction of }(hk).$$

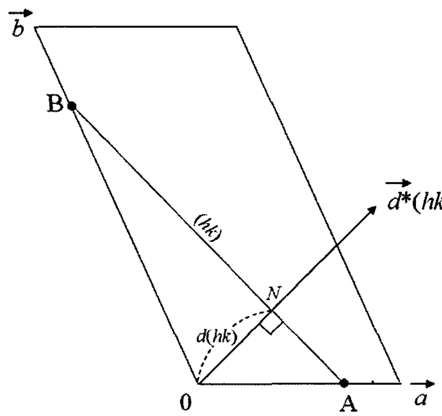

Fig. 3. A plane (hk) with the interplanar spacing $d(hk)$ is shown. The direction vector $\vec{d}^*(hk)$ of the (hk) is perpendicular to the plane itself.

3. The reciprocal relation between $d(hk)$ and $d^*(hk)$

$\vec{n}^*$를 $\vec{d}^*(hk)$ 方向의 unit vector 라 할 때 Fig. 3에서

$$d(hk)=ON=\frac{\vec{a}}{h}\cdot\vec{n}^*=\frac{\vec{a}}{h}\cdot\frac{\vec{d}^*(hk)}{d^*(hk)}$$
$$=\frac{\vec{a}}{h}\cdot\frac{h\vec{a}^*+k\vec{b}^*}{d^*(hk)}=\frac{1}{d^*(hk)} \quad (7)$$
$$\therefore\ d(hk)=\frac{1}{d^*(hk)}$$

4. Planes belonging to a direction [uv]

面 (hk)이 한 lattice vector [uv]에 包含될 條件 卽 (hk)面의 方向이 한 lattice vector 方向에 垂直일 條件을 求해보자.

Lattice vector 方向인 $\vec{r}_{uv}=\mathrm{u}\vec{a}+\mathrm{v}\vec{b}$ 과 (hk)面의 方向인 Eq. (6)이 垂直이기 爲하여는 두 vector의 scalar product가 零이 되어야 한다.

$$[uv]\cdot\vec{d}^*(hk)=(u\vec{a}+v\vec{b})\cdot(h\vec{a}^*+k\vec{b}^*)=hu+kv=0 \quad (8)$$

한 方向 $[uv]$에 屬한 (hk)面들은 Eq. (8)를 滿足한다.

5. Unit cell area of four different two-dimensional lattices

2-dimension에는 (1) oblique (2) hexagonal (3) rectangular (4) square lattices만이 存在한다.[1,2] Eq. (1)으로부터 이들의 面積는 다음과 같다.

(1) Oblique lattice: $A=ab\sin\gamma$

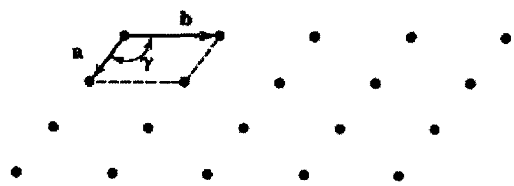

Fig. 4. General oblique lattice, $a\neq b$, γ=arbitrary.

(2) Hexagonal lattice: $A=a^2\sin 120=(\sqrt{3}/2)a^2$

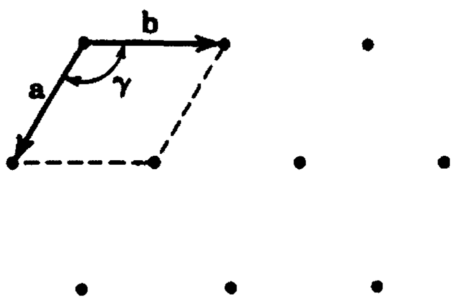

Fig. 5. Hexagonal lattice, *a*=*b*, γ=120°.

(3) Rectangular lattice: $A=ab$

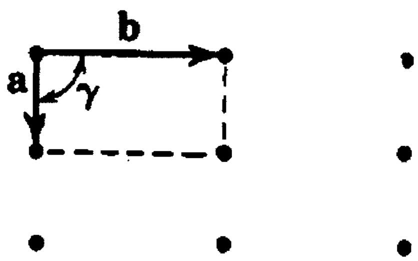

Fig. 6. Rectangular lattice, *a*≠*b*, γ=90°.

(4) Square lattice: $A=a^2$

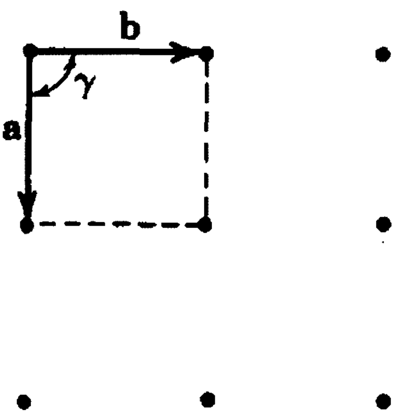

Fig. 7. Square lattice, *a*=*b*, γ=90°.

6. Interplanar spacing *d*(*hk*) of the four 2-dimensional lattices

Eq. (6)과 (7)로부터 다음의 관계를 얻는다.

$$\left[\frac{1}{d(hk)}\right]^2=[d^*(hk)]^2=(h\vec{a}^*+k\vec{b}^*)\cdot(h\vec{a}^*+k\vec{b}^*)$$
$$=h^2a^{*2}+k^2b^{*2}+2hk\vec{a}^*\cdot\vec{b}^*$$
$$=h^2\left(\frac{b}{A}\right)^2+k^2\left(\frac{a}{A}\right)^2+2hk\left(\frac{b}{A}\right)\left(\frac{a}{A}\right)(-\cos\gamma)$$
$$=\frac{1}{A^2}(h^2b^2+k^2b^2-2hkab\cos\gamma)$$

一般的인 $d(hk)$ 값은 다음과 같다:

$$d(hk)=\frac{ab\sin\gamma}{(h^2b^2+k^2a^2-2hkab\cos\gamma)^{1/2}} \qquad (9)$$

(1) Oblique lattice

Oblique lattice는 일반적인 2차원적 lattice에 해당이 되며, lattice translation vectors의 크기 a 및 b와 그들 間의 角度 γ에 대한 制限이 없으므로 oblique lattice의 $d(hk)$는 Eq. (9) 自體이다.

$$d(hk)=\frac{ab\sin\gamma}{(h^2b^2+k^2a^2-2hkab\cos\gamma)^{1/2}}$$

$d(10)=a\sin\gamma$, $d(01)=b\sin\gamma$.

(2) Hexagonal lattice, $a=b$, $\gamma=120°$

$$d(hk)=\frac{ab\sin\gamma}{(h^2b^2+k^2a^2-2hkab\cos\gamma)^{1/2}}$$
$$=\frac{a^2\frac{\sqrt{3}}{2}}{a(h^2+k^2+hk)^{1/2}}$$

$$d(10)=d(01)=\frac{\sqrt{3}}{2}a.$$

(3) Rectangular lattice, $a\neq b$, $\gamma=90°$

$$d(hk)=\frac{ab}{(h^2b^2+k^2a^2)^{1/2}}$$

$a(10)=a$, $d(01)=b$.

(4) Square lattice, $a=b$, $\gamma=90°$

$$d(hk)=\frac{a}{(h^2+k^2)^{1/2}}$$

$d(10)=d(01)=a$.

References

1) Kim, J.-G., *et al.*, *Korean J. Crystallography*, **16**(1), 11 (2005).

2) International Tables for Crystallography, Vol. A. Edited by Theo Hahn, fourth, revised edition, Kluwer Academic Publishers, p. 15 (1995).