เฉลยการบ้านที่ 2 ข้อ 3(c)

$\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ and $\vec{a}_3$ in trigonal Bravais lattice.

$\Rightarrow |\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = |\vec{a}_3| = a$ และมุม $\alpha = \beta = \gamma = \theta$

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \Rightarrow |\vec{b}| = \frac{2\pi}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \cdot a^2 \sin\theta$$

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

$$\vec{b}_1 \cdot \vec{b}_2 = \left[\frac{2\pi}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}\right]^2 (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \cdot (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)$$

$$= \left[\frac{2\pi}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}\right]^2 \overbrace{(\vec{a}_2 \cdot \vec{a}_3)}^{a^2\cos\theta}\overbrace{(\vec{a}_3 \cdot \vec{a}_1)}^{a^2\cos\theta} - \underbrace{(\vec{a}_2 \cdot \vec{a}_1)}_{a^2\cos\theta}\underbrace{(\vec{a}_3 \cdot \vec{a}_3)}_{a^2}$$

$$b^2 \cos\theta^* = \cancel{\left[\frac{2\pi}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}\right]^2} \cancel{a^4} (\cos^2\theta - \cos\theta$$

$\downarrow$

$$\cancel{\left[\frac{2\pi}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}\right]^2} \cdot \cancel{a^4} \sin^2\theta \cos\theta^* =$$

$$\sin^2\theta\cos\theta^* = \cos^2\theta - \cos\theta$$

$$(1-\cos^2\theta)\cos\theta^* = -\cos\theta(1-\cos\theta)$$

$$(1-\cancel{\cos\theta})(1+\cos\theta)\cos\theta^* = -\cos\theta\cancel{(1-\cos}$$

$$\boxed{\cos\theta^* = \frac{-\cos\theta}{1+\cos\theta}.}$$

หาความยาวของ primitive reciprocal lattice vect

ให้ a^* แทน ความยาว primitive vector ใน reciproca space.

จะได้ว่า $|\vec{b}_1| = |\vec{b}_2| = |\vec{b}_3| = a^*$

เลือกพิจารณาเฉพาะ $|\vec{b}_1|$

$$|\vec{b}_1| = \left|\frac{2\pi}{\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)}(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)\right|$$

โดยที่ $\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)$ คือปริมาตรของ unit cell

ปริมาตรของ rhombohedron ที่มีด้านยาว a และมุม θ.

$$V = \vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3) = a^3\sqrt{1-3\cos^2\theta+2\cos^2\theta}$$

$$\Rightarrow \quad a^* = |\vec{b}_1| = \frac{2\pi \cdot \cancel{a}^2 \sin\theta}{a^{\cancel{3}} \sqrt{1 - 3\cos^2\theta + 2\cos^3\theta}}$$

$$= \frac{2\pi}{a} \left(\frac{\sin^2\theta}{1 - 3\cos^2\theta + 2\cos^3\theta} \right)^{1/2}$$

$$= \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1 - \cos^2\theta}{(1 - \cos\theta)(1 + \cos\theta - 2\cos^2\theta)} \right)^{1/2}$$

$$= \frac{2\pi}{a} \left(\frac{\cancel{(1 - \cos\theta)}(1 + \cos\theta)}{\cancel{(1 - \cos\theta)}(1 + \cos\theta - 2\cos^2\theta)} \right)^{1/2}$$

$$= \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{\underbrace{\frac{1 + \cancel{\cos\theta}}{1 + \cancel{\cos\theta}}}_{=1} - 2\cos\theta \underbrace{\left(\frac{\cos\theta}{1 + \cos\theta} \right)}_{= -\cos\theta^*}} \right)^{1/2}$$

$$a^* = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{1 + 2\cos\theta\cos\theta^*} \right)^{1/2}$$