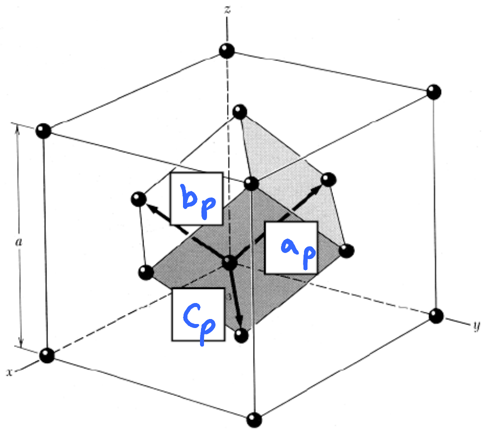
Prob. 4

2008년 9월 29일 월요일

오후 12:34

(a)



unit cell안에 원자가 한개 존재함을 확인할 수 있다.

(b)
$$\vec{a}_p^* = \frac{\vec{b}_p \times \vec{c}_p}{\vec{a}_p \cdot (\vec{b}_p \times \vec{c}_p)} = \frac{1}{a_0}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

$$\left(\begin{aligned} \vec{b}_p \times \vec{c}_p &= \frac{a_0^2}{4}(\hat{y} - \hat{x} + \hat{z}) \\ \vec{a}_p \cdot (\vec{b}_p \times \vec{c}_p) &= \frac{a_0^3}{8}(1+1) = \frac{a_0^3}{4} \end{aligned} \right)$$

마찬가지로, $\vec{b}_p^* = \frac{1}{a_0}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$, $\vec{c}_p^* = \frac{1}{a_0}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$

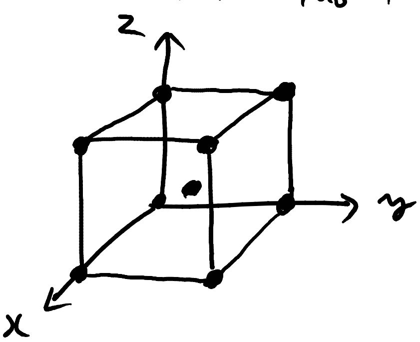
(c)
$$\vec{a}_p^* + \vec{b}_p^* = \frac{2}{a_0}\hat{z} \ , \quad \vec{b}_p^* + \vec{c}_p^* = \frac{2}{a_0}\hat{x} \ , \quad \vec{c}_p^* + \vec{a}_p^* = \frac{2}{a_0}\hat{y}$$

$$\vec{a}_p^* + \vec{b}_p^* + \vec{c}_p^* = \frac{1}{a_0}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

따라서 역격자는 x, y, z 좌표로 표현하면,

200, 020, 002, 111, 220, 202, 022, 222 ....

의 위치에 $1/a_0$의 dimension을 가지고 존재하게 된다.



100, 010, 001 등의 위치에 격자점이 없는 것을 알 수 있다.

⇒ BCC 구조

(d) $(\vec{a^*})^* = \dfrac{b^* \times c^*}{\vec{a^*}\cdot(\vec{b^*}\times\vec{c^*})} = \vec{a}$ 를 증명하면 된다.

$$\vec{b^*}\times\vec{c^*} = \vec{b^*}\times\frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})} = \frac{\vec{a}(b^*\cdot b)-\vec{b}(b^*\cdot a)}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})} = \frac{\vec{a}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})}$$

를 이용하면, $\dfrac{\vec{b^*}\times\vec{c^*}}{\vec{a^*}\cdot(\vec{b^*}\times\vec{c^*})} = \dfrac{\dfrac{\vec{a}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})}}{\dfrac{\vec{a^*}\cdot\vec{a}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})}} = \vec{a}$

기타 여러가지 계산법이 있다.