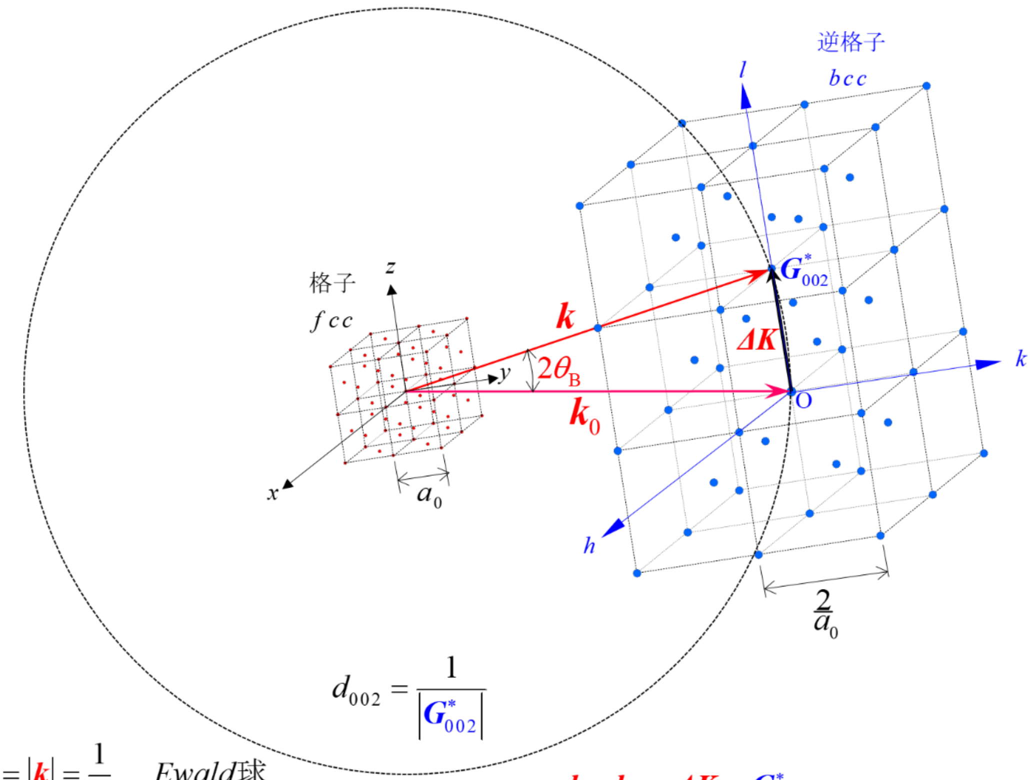


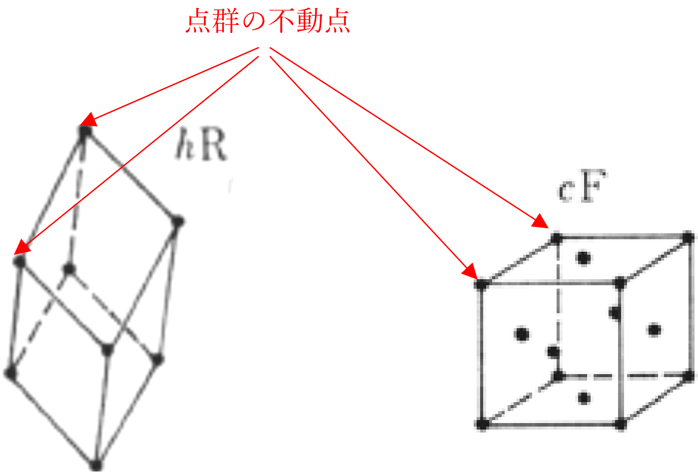
$$d_{002} = \frac{1}{\left|\boldsymbol{G}^*_{002}\right|}$$

$$|\boldsymbol{k}_0| = |\boldsymbol{k}| = \frac{1}{\lambda} \qquad Ewald球$$

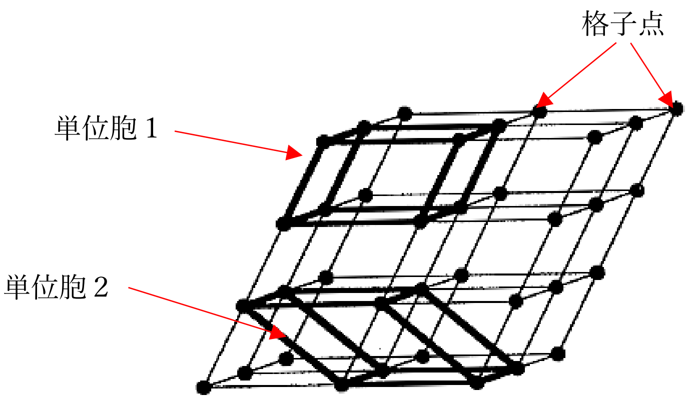
$$\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_0 = \boldsymbol{\Delta K} = \boldsymbol{G}^*_{002}$$

格子

ブラベー格子
（実空間）



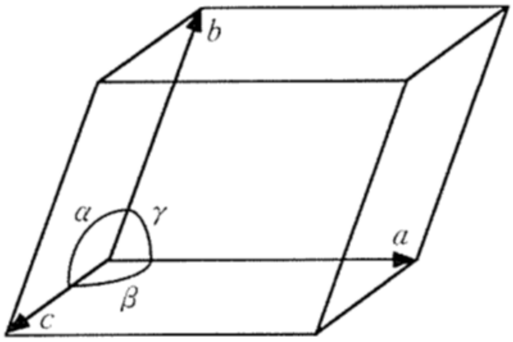
§　空間格子の対称性



空間格子の単位胞の取り方は任意性がある．

単位胞はどのようにとってもよいが宣言してから記述すること！

一般的には実空間で最も小さい体積で，且つ対称性をよく表しているものを単位胞として選択する．



最も対称性の低い単位胞は平行六面体である．

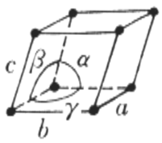
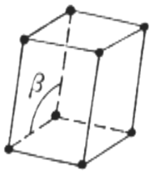
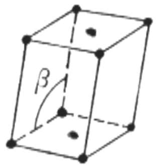
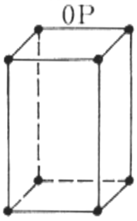
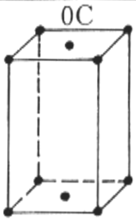
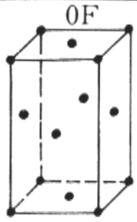
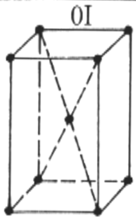
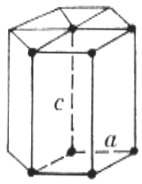
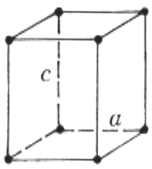
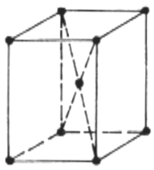
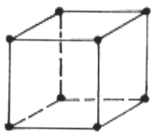
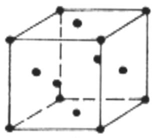
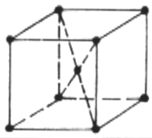
すべての辺の長さが異なり，辺のなす角度すべてが直角でないものとなる．

ブラベー格子

格子点が周期的に配列している空間格子も空間における模様であり，対称性を持っている.

Bravais はこれを　14　種類に分類した.

P :　Primitive　　　　F :　Face-centered　　　　I :　Innenzentrierte

結晶系	格子定数	単純 (P)	底心 (C)	面心 (F)	体心 (I)
三斜 (triclinic) または (anorthic)	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	aP 			
単斜 (monoclinic)	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta > 90^\circ$	mP 	mC 		
斜方 orthorhombic) または (rhombic)	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	0P 	0C 	0F 	0I 
六方 (hexagonal)	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	hP 			
菱面体 rhombohedral) または 三方 trigonal)	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	hR 			
正方 (tetragonal)	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	tP 			tI 
立方 (cubic)	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	cP 		cF 	cI 

三斜格子　（triclinic）

格子点が1回軸しか無い様に配列している空間格子

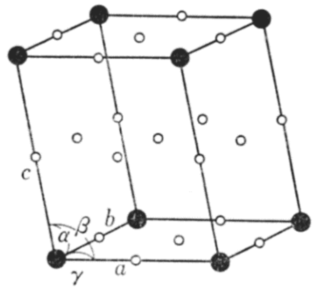
$a \neq b \neq c$，$\alpha \neq \beta \neq \gamma$

この格子の対称は，対称心のみで，その位置は右図の格子点●と○である．

つまり

$$\begin{pmatrix}0\\0\\0\end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix}1/2\\0\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1/2\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\0\\1/2\end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix}1/2\\1/2\\1/2\end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix}1/2\\1/2\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1/2\\0\\1/2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1/2\\1/2\end{pmatrix}$$

三斜格子の点群は，$\bar{1}$



三斜格子（P）

単斜格子　（monoclinic）

2回軸を1本持つ空間格子

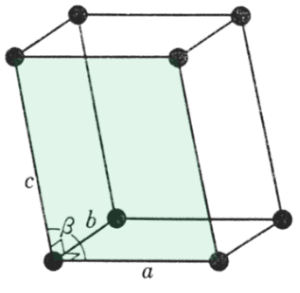
$a \neq b \neq c$，$\alpha = \gamma = 90^\circ$，$\beta \neq 90^\circ$

2回軸に垂直に m を持つので点群は，$2/m$

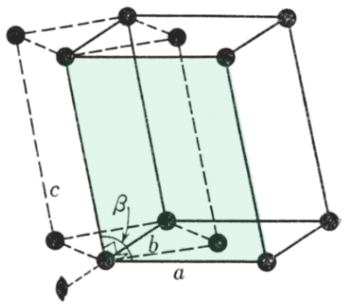
単純格子：P　と

c面の中心に格子点がある底心格子：C

a 面の中心に格子点となる底心格子の場合は：A



（a） 単純単斜格子（P）

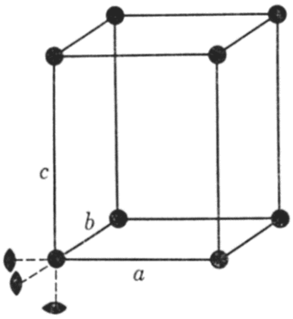


（b） 底心単斜格子（C）

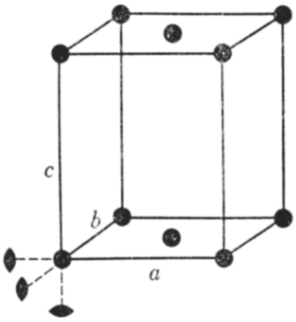
直方格子　（斜方格子）　（rhombic　又は　orthorhombic）

3本の2回軸が互いに直交している空間格子　　$a \neq b \neq c$，$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

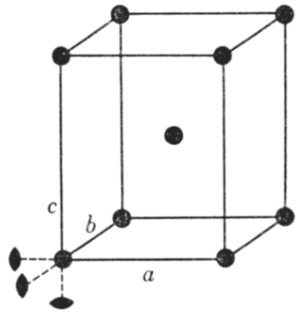
2回軸に垂直な m も互いに直交しているので，点群は，mmm



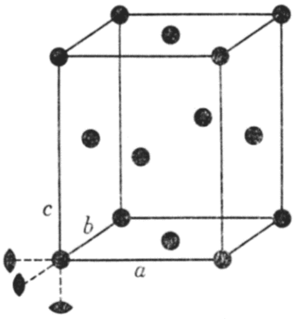
（a）単純斜方格子（P）



（b）底心斜方格子（C）



（c）体心斜方格子（I）



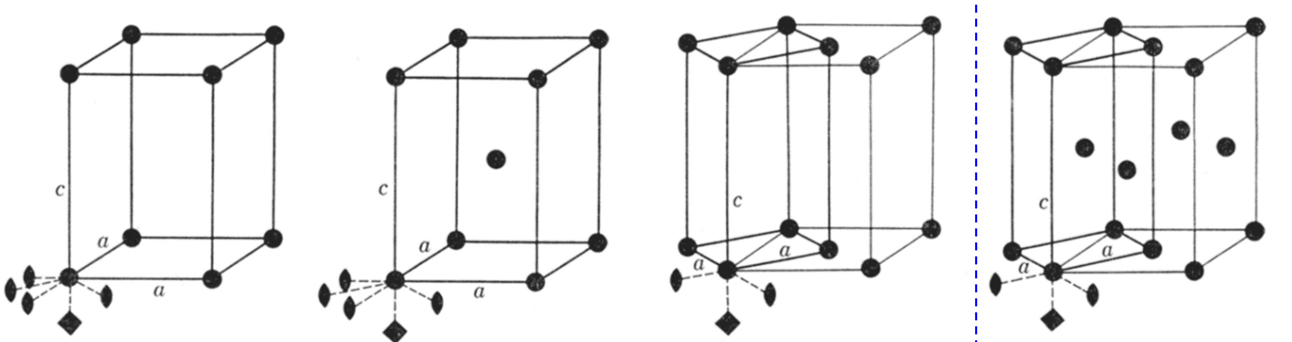
（d）面心斜方格子（F）

体心（Innenzentrierte）

正方格子　（ tetragonal ）

空間格子の 1 本の軸が 4 回軸ならば，それに垂直な 2 回軸が 4 本できる．格子点間の短い方を a， b とする．

$a = b \neq c$， $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$　　点群は， $4/mmm$



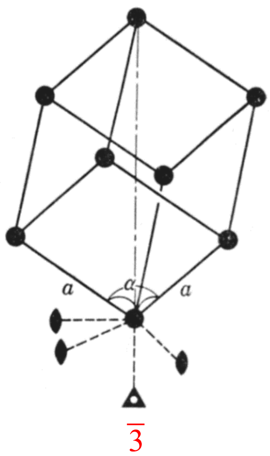
（ａ）単純正方格子（P）　（ｂ）体心正方格子（I）　（ｃ）底心斜方格子は単純正方格子と同等　（ｄ）面心正方格子は体心正方格子と同等

菱面体格子（rhombohedral）（三方晶； trigonal）　と　六方格子（hexagonal）

3 回回反軸が単純格子の対角線になっている

$a = b = c$， $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$

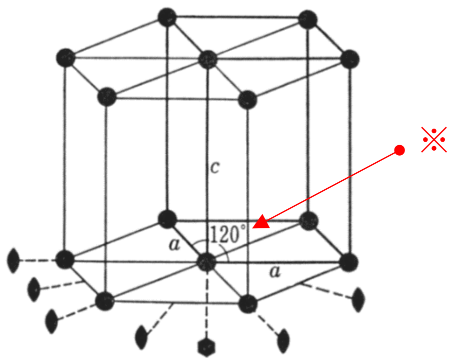
3 本の 2 回軸がそれぞれ m と直交，点群は $\bar{3}m$



空間格子のある軸が 6 回軸　　$\gamma = 120^\circ$

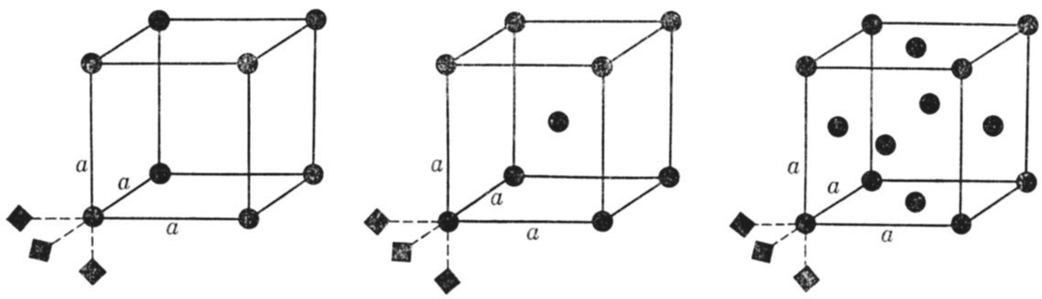
6 に垂直な 2 は 6 本　$a = b \neq c$　$\alpha = \beta = 90^\circ$

点群は $6/mmm$　記号は P で，格子点は(000)



立方格子（cubic）

3 本の直交した 4 回軸をそれぞれ軸とした立方格子　$a = b = c$， $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$　点群は $m3m$



（ａ） 単純立方格子（P）　（ｂ） 体心立方格子（I）　（ｃ） 面心立方格子（F）

空間格子のまとめ

格子	種別*	格子定数（異なるもののみ示す）	軸間角（90° 以外のみ示す）	対称軸 2	3	4	6	対称面	点群
三斜	P	$a\ b\ c$	$\alpha\ \beta\ \gamma$	0	0	0	0	0	$\bar{1}$
単斜	$P\ C$	$a\ b\ c$	β	1	0	0	0	1	$2/m$
斜方	$P\ C\ I\ F$	$a\ b\ c$		3	0	0	0	3	mmm
正方	$P\ I$	$a\ c$		4	0	1	0	5	$4/mmm$
菱面体	R	a	α	3	1	0	0	3	$\bar{3}\,m$
六方	P	$a\ c$	120°	6	0	0	1	7	$6/mmm$
立方	$P\ I\ F$	a	※ 実空間	6	4	3	0	9	$m\,3\,m$

* P：単純格子（格子点 000），C：底心格子 $\left(\text{格子点 } 000\,;\,\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right)$，$I$：体心格子 $\left(\text{格子点 } 000\,;\,\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)$，$F$：面心格子 $\left(\text{格子点 } 000\,;\,\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\,;\,\frac{1}{2}0\frac{1}{2}\,;\,0\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)$

自習

https://www.youtube.com/watch?v=WcImy34NPVQ 13:35
01. Bravais Lattices and Crystal Families. Ch 3

https://www.youtube.com/watch?v=61Lgo56bBbg　23:19
Bravais Lattices and Crystalline Solids || in HINDI

注　二次元ブラベー格子
https://www.youtube.com/watch?v=h7rmIe4HP-Q　3:39
表面ブラベー格子と表面緩和【物理化学，固体物理】

幾何学的諸量の公式

単位格子の体積：v_c，　面間隔：d，　原点と点 $x\,y\,z$ までの距離：r

Bragg 反射　$2d\sin\theta=\lambda$　ここで　θ は Bragg 角と呼ぶ！　　回折角は＿＿＿＿＿＿＿である！

(1) 三斜格子

$$v_c = abc\sqrt{1-\cos^2\alpha-\cos^2\beta-\cos^2\gamma+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma}$$

$$\frac{1}{d^2}=\frac{h^2\sigma_{11}+k^2\sigma_{22}+l^2\sigma_{33}+2kl\sigma_{23}+2lh\sigma_{31}+2hk\sigma_{12}}{v_c^2}$$

$$\sigma_{11}=b^2c^2\sin^2\alpha,\qquad \sigma_{22}=c^2a^2\sin^2\beta,$$

$$\sigma_{33}=a^2b^2\sin^2\gamma,\qquad \sigma_{23}=a^2bc(\cos\beta\cos\gamma-\cos\alpha),$$

$$\sigma_{31}=ab^2c(\cos\gamma\cos\alpha-\cos\beta),\quad \sigma_{12}=abc^2(\cos\alpha\cos\beta-\cos\gamma)$$

$$r^2=x^2a^2+y^2b^2+z^2c^2+2yzbc\cos\alpha+2zxca\cos\beta+2xyab\cos\gamma$$

(2) 単斜格子

$$v_c=abc\sin\beta,$$

$$r^2=x^2a^2+y^2b^2+z^2c^2+2zxca\cos\beta$$

$$\frac{1}{d^2}=\frac{h^2}{(a\sin\beta)^2}+\frac{k^2}{b^2}+\frac{l^2}{(c\sin\beta)^2}-\frac{2lh\cos\beta}{ca\sin^2\beta}$$

(3) 斜方格子　$v_c=abc$,　$\dfrac{1}{d^2}=\dfrac{h^2}{a^2}+\dfrac{k^2}{b^2}+\dfrac{l^2}{c^2}$,　$r^2=x^2a^2+y^2b^2+z^2c^2$

(4) 正方格子　$v_c=a^2c$,　$\dfrac{1}{d^2}=\dfrac{h^2+k^2}{a^2}+\dfrac{l^2}{c^2}$,　$r^2=(x^2+y^2)a^2+z^2c^2$

(5) 菱面体格子

$$v_c=a^3\sqrt{1-3\cos^2\alpha+2\cos^3\alpha}$$

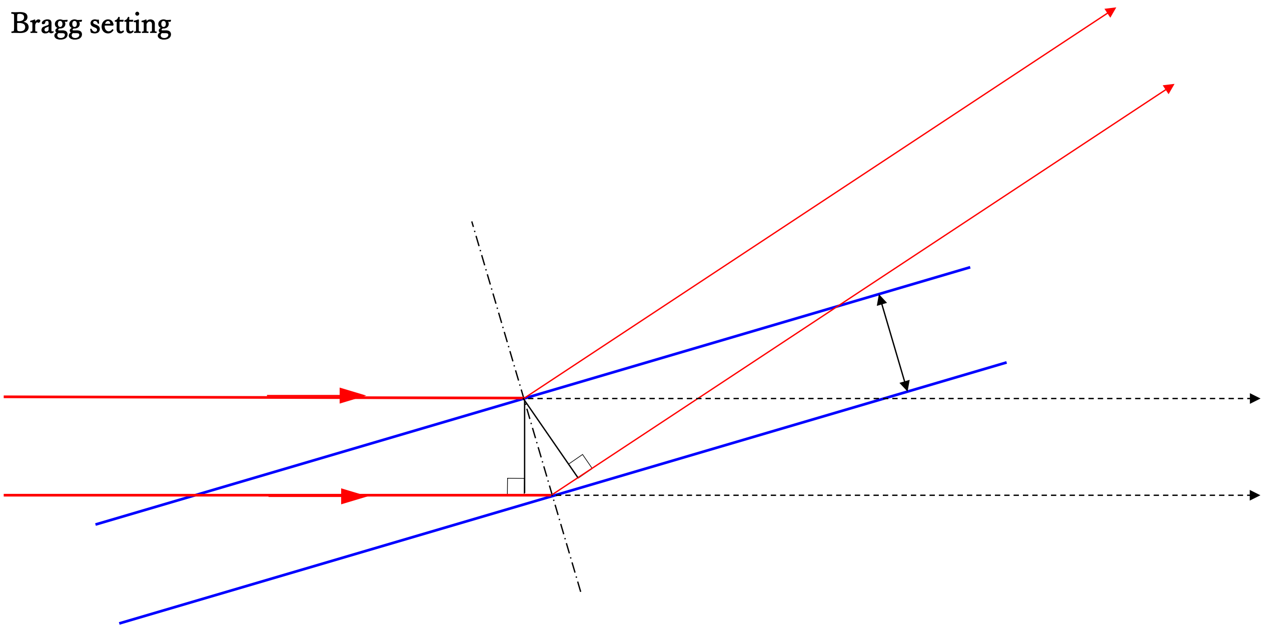
$$\frac{1}{d^2}=\frac{(h^2+k^2+l^2)\sin^2\alpha+2(kl+lh+hk)(\cos^2\alpha-\cos\alpha)}{a^2(1-3\cos^2\alpha+2\cos^3\alpha)}$$

$$r^2=\left\{(x^2+y^2+z^2)+2(yz+zx+xy)\cos\alpha\right\}a^2$$

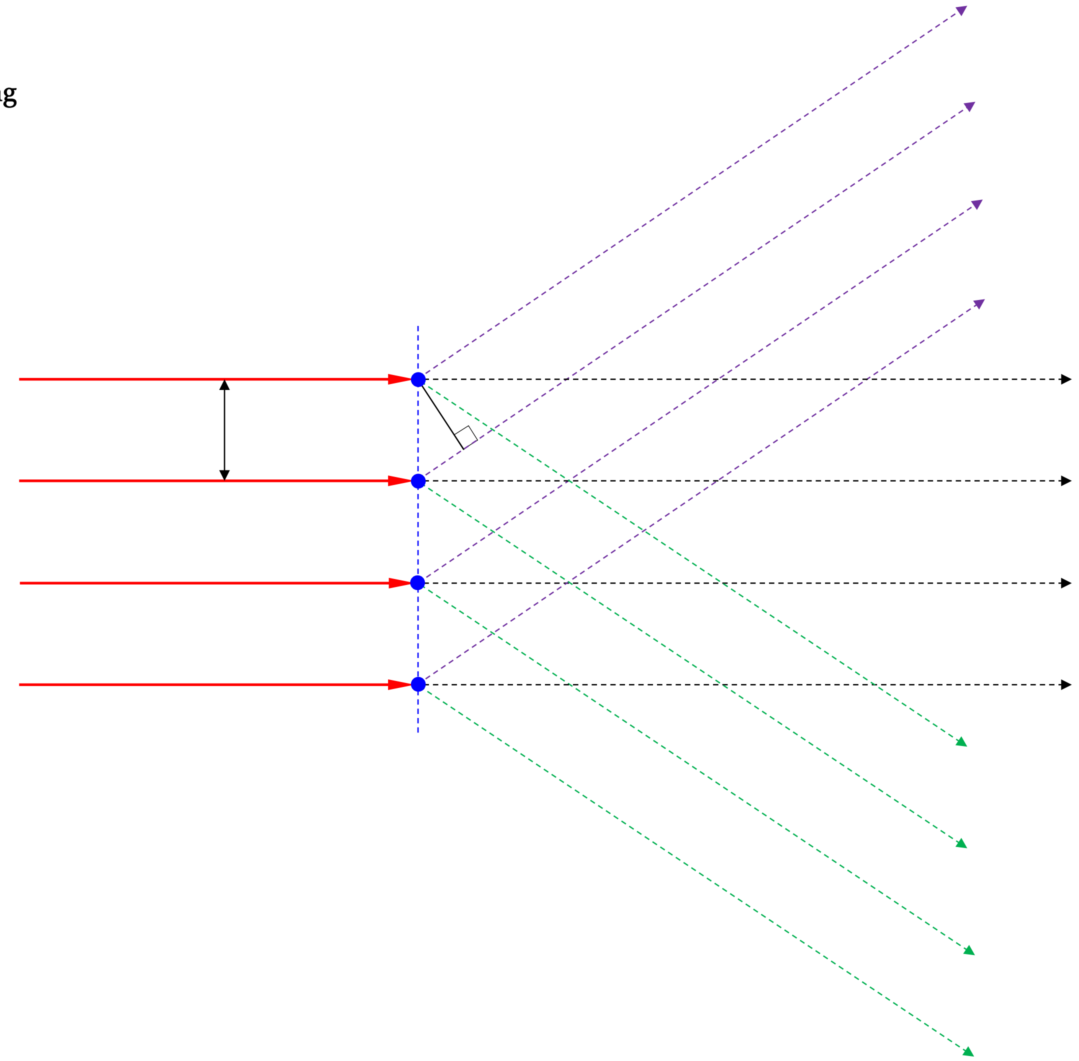
(6) 六方格子　$v_c=\sqrt{3}a^2c/2$,　$\dfrac{1}{d^2}=\dfrac{4}{3}\cdot\dfrac{h^2+k^2+hk}{a^2}+\dfrac{l^2}{c^2}$,　$r^2=(x^2+y^2-xy)a^2+z^2c^2$

(7) 立方格子　$v_c=a^3$,　$\dfrac{1}{d^2}=\dfrac{h^2+k^2+l^2}{a^2}$,　$r^2=(x^2+y^2+z^2)a^2$

Bragg setting



Laue setting



§　格子と逆格子

格子(lattice)とは格子点(lattice point)の周期的な集合である．
三次元の格子の場合は 14 種類のブラベー(Bravais)格子しかない．

結晶構造とは？
　ブラベー格子の格子点は“対称の中心”である．
　ブラベー格子の格子点に basis（単位構造）を置くと，basis の並進操作を行ったことになる．
　その結果が結晶構造である．
　　　　　　　　　　　　　※　basis：　原子あるいは原子団の単位構造　例えば適当な点群対称性の分子

次に格子の数学的表現を考える．
$\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$ を格子の基本ベクトル(basis vector)とすると，任意の並進ベクトル $\boldsymbol{R}_{n_1 n_2 n_3}$ は

$$\boldsymbol{R}_{n_1 n_2 n_3} = n_1 \boldsymbol{a}_1 + n_2 \boldsymbol{a}_2 + n_3 \boldsymbol{a}_3 \quad \text{ここで，} \; n_1,\; n_2,\; n_3 \text{ は任意の整数} \tag{1}$$

この $\boldsymbol{R}_{n_1 n_2 n_3}$ ベクトルに対して，次のような関係にある $\boldsymbol{G}^*$ ベクトルを考える．

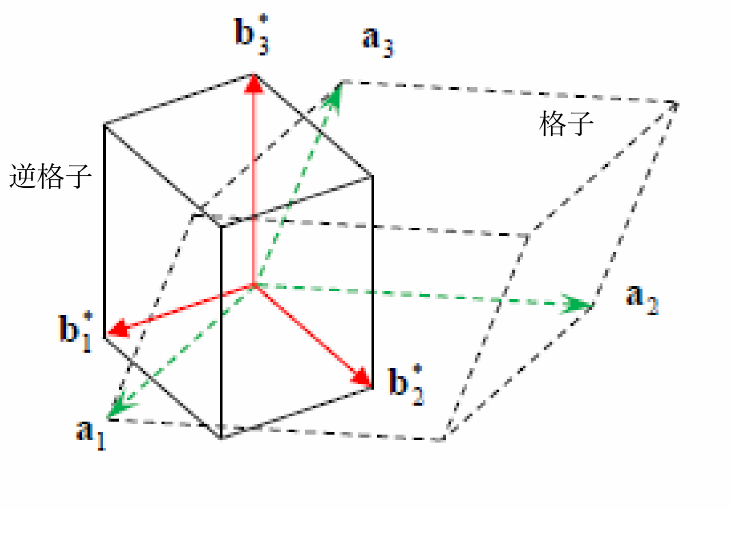
$$\boldsymbol{R}_{n_1 n_2 n_3} \cdot \boldsymbol{G}^* = N \qquad \text{ここで，} \; N \text{ は任意の整数} \tag{2}$$

この $\boldsymbol{G}^*$ ベクトルを逆格子ベクトル(reciprocal lattice vector)と呼ぶ．
$\boldsymbol{R}_{n_1 n_2 n_3}$ ベクトルの大きさは長さの次元を持っている．右辺 N は無次元であるから，
$\boldsymbol{G}^*$ ベクトルの大きさは長さの逆数の次元を持つ．

逆格子の基本ベクトルを $\boldsymbol{b}_1^*$, $\boldsymbol{b}_2^*$, $\boldsymbol{b}_3^*$ とすると

$$\boldsymbol{G}^* = h_1 \boldsymbol{b}_1^* + h_2 \boldsymbol{b}_2^* + h_3 \boldsymbol{b}_3^* \equiv \boldsymbol{G}^*_{h_1 h_2 h_3} \quad \text{ここで，} \; h_1,\; h_2,\; h_3 \text{ は任意の整数} \tag{3}$$

この $\boldsymbol{G}^*$ ベクトルの集合が逆格子(reciprocal lattice)である．



格子の基本ベクトル$\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$と逆格子の基本ベクトル$\boldsymbol{b}_1^*$, $\boldsymbol{b}_2^*$, $\boldsymbol{b}_3^*$の間の関係は

$$\boldsymbol{b}_1^* = \frac{1}{V_C}\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3, \quad \boldsymbol{b}_2^* = \frac{1}{V_C}\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1, \quad \boldsymbol{b}_3^* = \frac{1}{V_C}\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2 \quad \text{ここで} \quad V_C = \boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3) \text{：単位胞の体積} \tag{4}$$

直交関係は，$\boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{b}_j^* = \delta_{ij}$　ここで　$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & for \;\; i = j \\ 0 & for \;\; i \neq j \end{cases}$　(5)

注　$$\frac{\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3}{V_C} = \frac{\cancel{\boldsymbol{a}_2} \times \cancel{\boldsymbol{a}_3}}{\boldsymbol{a}_1 \cdot (\cancel{\boldsymbol{a}_2} \times \cancel{\boldsymbol{a}_3})} = \frac{1}{\boldsymbol{a}_1}$$ ←　ベクトルは約分できない！

問題：

（１）上記関係を用いて，$\boldsymbol{b}_1^* \cdot (\boldsymbol{b}_2^* \times \boldsymbol{b}_3^*) = \dfrac{1}{V_C}$　であることを証明せよ．

解

（２）$\dfrac{1}{\Omega^*}\boldsymbol{b}_2^* \times \boldsymbol{b}_3^* = \boldsymbol{a}_1$　であることを証明せよ．ここで，$\dfrac{1}{V_C} \equiv \Omega^*$とする．

解

同様に，$$\boldsymbol{a}_2 = \frac{\boldsymbol{b}_3^* \times \boldsymbol{b}_1^*}{\Omega^*}, \quad \boldsymbol{a}_3 = \frac{\boldsymbol{b}_1^* \times \boldsymbol{b}_2^*}{\Omega^*} \tag{6}$$

下記の式を各自計算を確認してみよ！

スカラー四重積　（ビネ・コーシーの恒等式）

$$(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot(\boldsymbol{c}\times\boldsymbol{d})=(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c})(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{d})-(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{d})(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{c})=\det\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c} & \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{d}\\ \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{c} & \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{d}\end{pmatrix}=\begin{vmatrix}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c} & \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{d}\\ \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{c} & \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{d}\end{vmatrix}$$

ベクトル四重積

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\times(\boldsymbol{c}\times\boldsymbol{d})&=(\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{d}))\boldsymbol{c}-(\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c}))\boldsymbol{d}\\&=(\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{c}\times\boldsymbol{d}))\boldsymbol{b}-(\boldsymbol{b}\cdot(\boldsymbol{c}\times\boldsymbol{d}))\boldsymbol{a}\end{aligned}$$

ベクトル三重積　（ラグランジュの公式）

$$\begin{cases}\boldsymbol{a}\times(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})=(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c})\boldsymbol{b}-(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})\boldsymbol{c}\\(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\times\boldsymbol{c}=(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c})\boldsymbol{b}-(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{c})\boldsymbol{a}\end{cases}$$

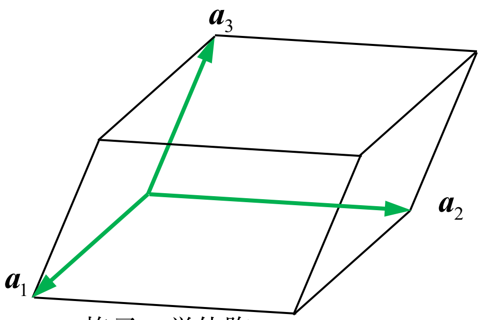
$$\boldsymbol{a}\times(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})+\boldsymbol{b}\times(\boldsymbol{c}\times\boldsymbol{a})+\boldsymbol{c}\times(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})=\boldsymbol{0}$$

$$\because\quad \boldsymbol{a}\times(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})+\boldsymbol{b}\times(\boldsymbol{c}\times\boldsymbol{a})+\boldsymbol{c}\times(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})=\cancel{(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c})\boldsymbol{b}}-\cancel{(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})\boldsymbol{c}}+\cancel{(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{a})\boldsymbol{c}}-\cancel{(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{c})\boldsymbol{a}}+\cancel{(\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{b})\boldsymbol{a}}-\cancel{(\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{a})\boldsymbol{b}}=\boldsymbol{0}$$

↑←ラグランジュの公式

§ 三次元格子の幾何学

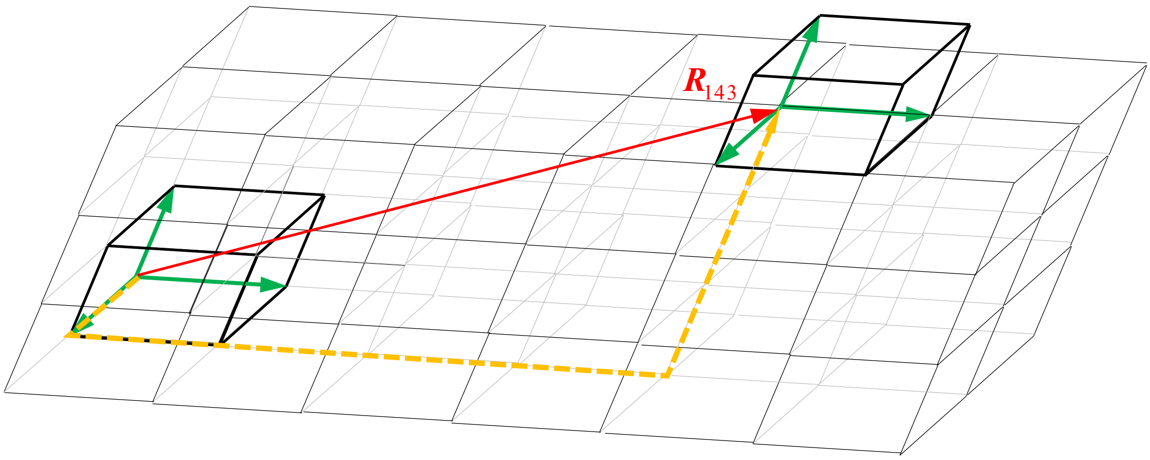
格子と逆格子



格子の単位胞

格子の並進ベクトル：

$$\boldsymbol{R}_{n_1 n_2 n_3} = n_1 \boldsymbol{a}_1 + n_2 \boldsymbol{a}_2 + n_3 \boldsymbol{a}_3, \qquad n_1,\ n_2,\ n_3 \text{ は整数} \tag{7}$$



単位胞の並進による空間格子の形成

三次元空間に無限に広がっている格子は，$\boldsymbol{R}_{n_1 n_2 n_3} = n_1 \boldsymbol{a}_1 + n_2 \boldsymbol{a}_2 + n_3 \boldsymbol{a}_3$ の並進操作に対して不変である．これを並進対称性という．

向きの定義：　$[uvw]$ は，$u\boldsymbol{a}_1 + v\boldsymbol{a}_2 + w\boldsymbol{a}_3$ のベクトルの向き　(8)

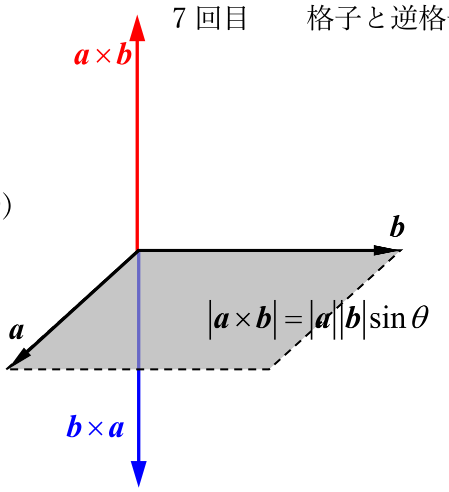
※　特定の向きは $[\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ ]$ の括弧を使う．等価な向きは $\langle\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \rangle$ の括弧を使う．

※　**向きの定義は（実）格子の　基本並進ベクトルを用いて定義すること！！！**

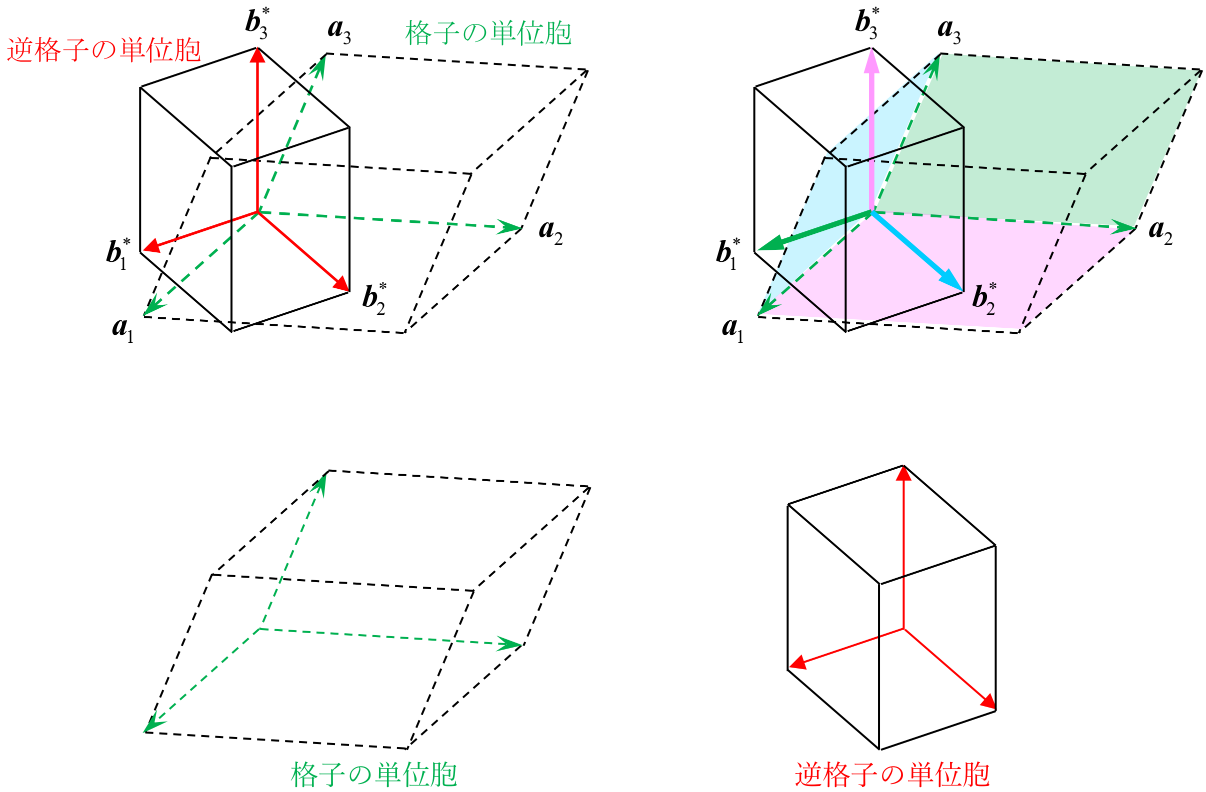
例　立方晶　$[100]$　　　$\langle 100 \rangle = [100],\ [010],\ [001],\ [\bar{1}00],\ [0\bar{1}0],\ [00\bar{1}]$

逆格子の基本並進ベクトルは

$$\boldsymbol{b}_1^* = \frac{\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)}, \quad \boldsymbol{b}_2^* = \frac{\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1}{\boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)}, \quad \boldsymbol{b}_3^* = \frac{\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)} \qquad (9)$$



幾何学的な関係は下図のようになっている．
格子の単位胞は**実空間**にあり，**逆格子**の単位胞は**逆空間**にある．
実空間は長さで測る空間であり，逆空間は 1/長さで測る空間である．
実空間と逆空間は**向きを共有**している．



格子の単位胞と逆格子の単位胞の関係

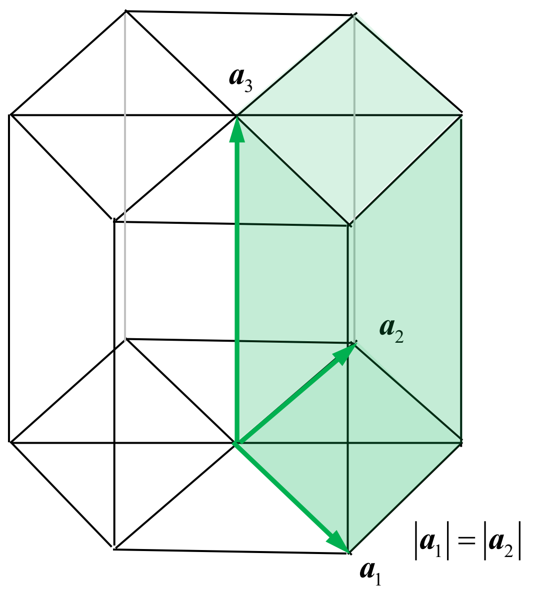
逆格子の並進ベクトル：

$$\boldsymbol{G}^* = h_1 \boldsymbol{b}_1^* + h_2 \boldsymbol{b}_2^* + h_3 \boldsymbol{b}_3^* \equiv \boldsymbol{G}^*_{h_1 h_2 h_3}, \qquad h_1,\ h_2,\ h_3 \text{ は整数} \qquad (10)$$

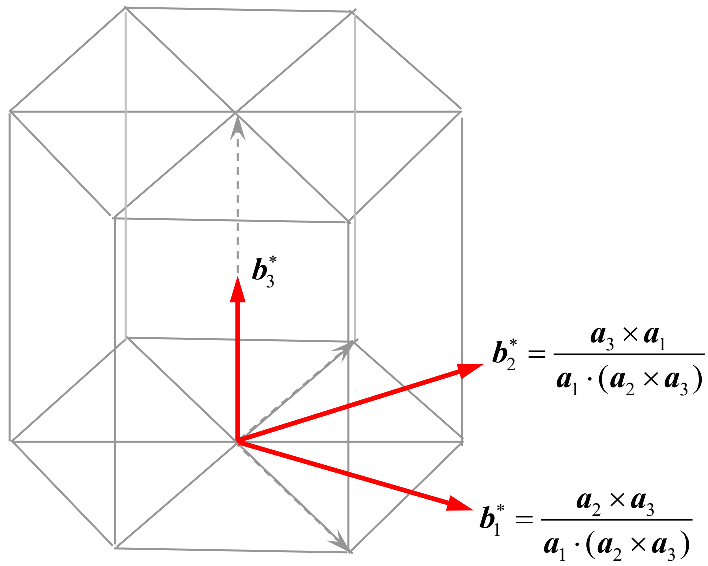
格子と逆格子の基本並進ベクトルの直交関係は

$$\boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{b}_j^* = \delta_{i,j} \qquad (11)$$

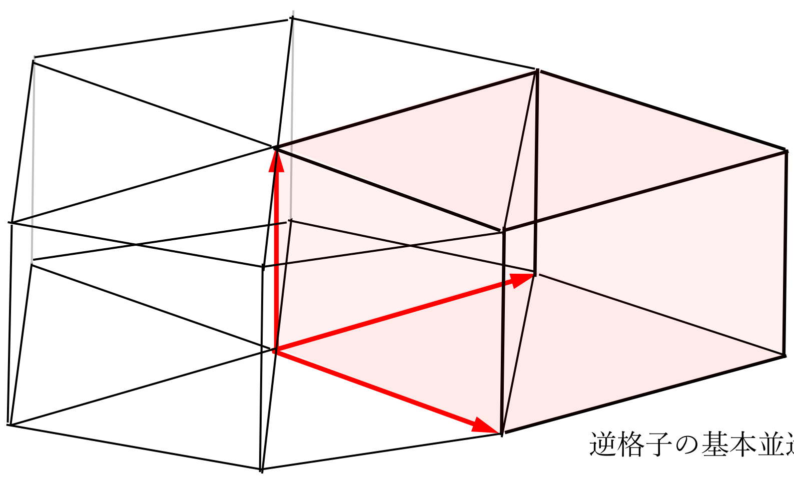
六方晶の場合に注意すべきこと



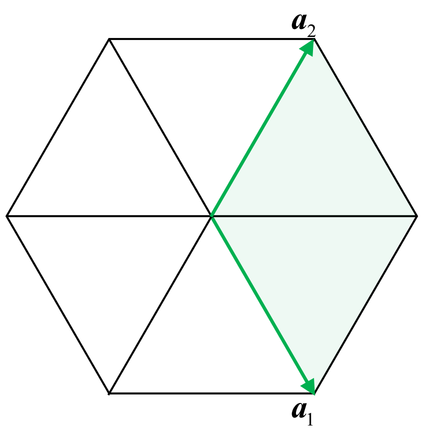
格子の基本並進ベクトルと単位胞

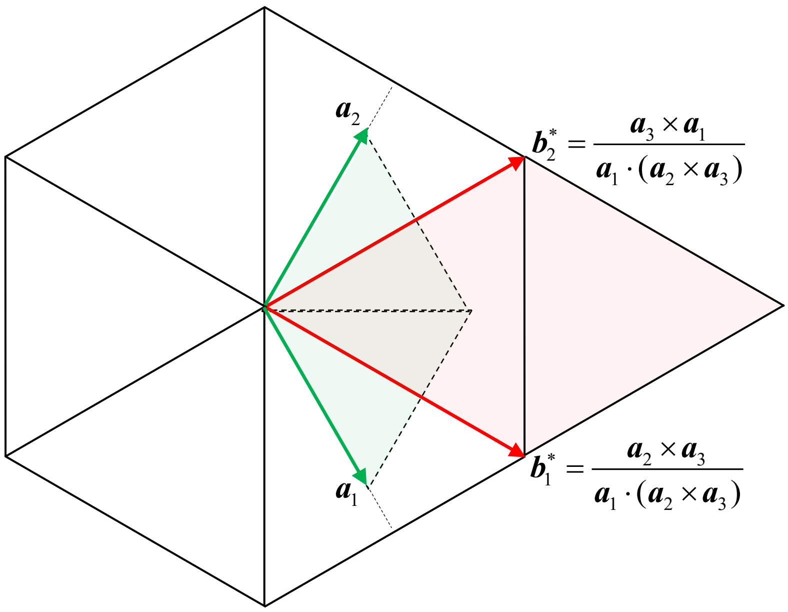


逆格子の基本並進ベクトル

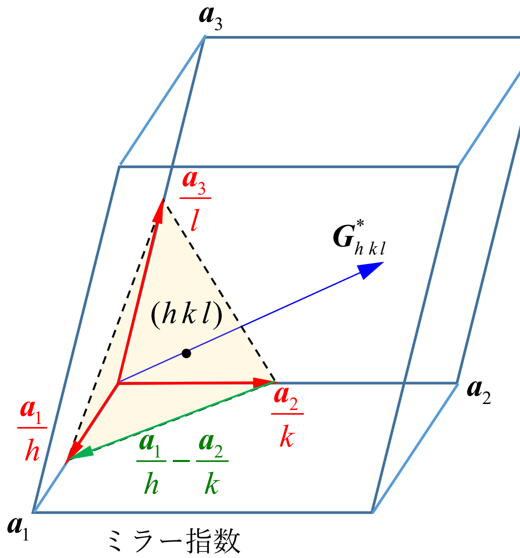


逆格子の基本並進ベクトルと単位胞





格子面と Miller 指数



ミラー指数

$\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$ のベクトルをそれぞれ $\dfrac{1}{h}, \dfrac{1}{k}, \dfrac{1}{l}$,　$\dfrac{2}{h}, \dfrac{2}{k}, \dfrac{2}{l}$,　$\dfrac{3}{h}, \dfrac{3}{k}, \dfrac{3}{l}$ で交差する面を考える．

このような面は互いに等間隔で平行な面の組となる．この面の組を $h\,k\,l$ 面と呼ぶ．

$h\,k\,l$ を Miller 指数と呼ぶ．$(h\,k\,l)$ 面と $\boldsymbol{G}^*_{hkl}$ は常に垂直となる．

※　特定の面は $(h\,k\,l)$ の括弧を使う．等価な面は $\{h\,k\,l\}$ の括弧を使う．

問題：　$\boldsymbol{G}^*_{hkl}$ は $(h\,k\,l)$ に垂直となることを証明せよ．

逆格子ベクトルと面間隔

$$d_{hkl} = \frac{\boldsymbol{a}_1}{h}\cdot\frac{\boldsymbol{G}^*_{hkl}}{\left|\boldsymbol{G}^*_{hkl}\right|} = \frac{\boldsymbol{a}_1}{h}\cdot\frac{h\,\boldsymbol{b}_1^* + k\,\boldsymbol{b}_2^* + l\,\boldsymbol{b}_3^*}{\left|\boldsymbol{G}^*_{hkl}\right|} = \frac{1}{\left|\boldsymbol{G}^*_{hkl}\right|}$$

すなわち，$\left|\boldsymbol{G}^*_{hkl}\right| = \dfrac{1}{d_{hkl}}$　　逆格子ベクトルの大きさは対応する面間隔の逆数！　　(12)