ɵ1

ɵ2

ɵ1

ɵ2

**r**

**ki**

**ks**

**ki**

**Q=ki-ks**

l1

l2

图一 两点布拉格散射示意图

由图一给出的信息可以计算出射波与入射波的相位差， ，定义Q≡称为散射矢量（scattering vector），对于图一而言，不妨将上面的原子位置定义为原点，则位矢为的第二个原子对散射波相位的影响为，也即**Q**，用复数的形式表示波，则第二个原子对波函数的影响为exp(i**Q**)，将结构中所有原子考虑进来，则散射波的相移可以写成，这意味着给定入射波的强度，可以据此公式计算出射波强度，这一求和公式建立的基础是上述的“原子”是一些孤立的实体，换句话说，如果入射光是X射线，那么这里所指的“原子”周围是没有电子的，也即X射线仅是在格点上进行了简单的反射，如果将原子核周围的电子环境考虑进来，就应该在上述求和的基础上引入一个反应原子核周围电子分布对散射波强度的影响，这时上述求和公式变为，其中称为原子结构因子，F(**Q**)称为几何结构因子，而的计算方法与几何结构因子的计算方法类似，仍以X射线为例，因为此时只有X射线与电子发生作用影响散射波相位，而不再有电子下一层级的粒子与X射线作用，不必再考虑在计算结果前加上一个因子进行修正，设第i个原子的电子云密度为，则位矢为**r**（相对于第i个电子的原点）处应该有dV个电子，而每个电子对散射波相位的影响于上述孤立的核的影响相同，原子结构因子的计算公式即为。这里有一个自洽的循环论证值得指出，将晶格的格点看成是完全孤立的“核”，其周围没有电子，那么按照一开始的计算，可以直接得到几何结构因子，紧接着，可以将整个晶格看成是一团电子云，于是整个晶格就有了相应的“电子密度”分布，只不过此时的密度函数是，其中是晶格结构中第i个格点的位矢，再根据原子结构因子的计算方法，将δ函数形式的密度函数带入到f因子的计算公式中，很容易得到的整个晶格结构的几何结构因子！

得到了理想晶格结构的几何结构因子，就可以计算得到散射波的强度，这样对于给定的晶格结构就可以讨论散射强度随散射矢量**Q**的变化规律。首先，散射强度，其中i,j取遍晶格的每一个格点，这样就有一个重要的信息值得注意，当i与j互换位置时，如果**Q**的取值是普通的，那么前后两个值相加为零，对于所有的晶格格点都是如此，只有当**Q**对于每一对总是与之垂直时才可以使计算几何结构因子的求和不为零，这就说明，并不是所有的**Q**取值都是有意义的，至少**Q**只能出现在与每一对垂直的方向上，而这个要求并不针对某一具体的晶格结构而是由每个格点对散射波相移的影响一步步计算得到的结果！在此基础上继续讨论，对于每一对而言，此矢量可以处于或平行于多个晶面，同样对于另外一组格矢而言，同样应该有**Q**⊥，而三个矢量可以确定一个晶面，这也就意味着**Q**垂直于上述三个格矢确定的晶面，对于晶格结构来说，这一条结论具有非常的意义，这意味着给定晶格结构，可以确定在哪些方向上可以得到，给定晶面组，那么对于这组晶面而言可以确定散射信号存在的方向一定是垂直于这组晶面的，接着，可以假定指定的这组晶面的晶面间距为d，则根据Bragg衍射定律：，以及可以得到|**Q**|=，至此在确定**Q**方向的基础上又得到了**Q**的大小，于是就可以完全确定晶格结构与散射矢量**Q**之间的关系！由于晶格结构参数（晶面指数，晶面间距）的离散型，因此也就有了散射矢量**Q**取值的离散性，也就是说相应于晶格结构的格点，在**Q**空间中同样存在一系列的格点，这些格点构成了一个新的“晶格”结构，如果将真实的晶格结构称为正格子，那么由散射信号形成的“晶格”结构称为倒格子！

另外一种对于倒格子的理解则较为简单，将正格子进行傅里叶变换就可以得到相应的倒格子，这种理解实际上只是进行了数学上的处理，而且计算的方法上文已经给出了，即将正格子结构写成形式，从而经过傅里叶变换之后得到，之后根据晶格结构的周期性便可以得到满足条件的**Q**只能出现在倒格子的格点上，这一点在所有有关晶格结构的教科书上都有比较详细的阐述，此处不详述！至此，可以讲倒格子结构与散射信号的分布建立起了完整的联系！实际上这是一种一一对应的关系！