1.3　倒易点阵和布里渊区：Bravais 格子的 Fourier 变换

倒易空间
倒格子点阵
倒易点阵例子
布里渊区

晶体里的波

- 物质运动随空间和时间改变，很多情况下可以把这种运动通过 Fourier 变换分解为不同波矢和频率的波的叠加。
- 在线性区间，不同波之间互不影响，可以分开来独立考虑。不同波随空间、时间的变化完全由其波矢和频率决定，这样可以极大简化问题。
- 周期结构中波的传播问题是固体物理的第一个范式，也是这门课的主要内容。
  - 机械波：原子/分子的整体振动
  - 电磁波：红外、可见光、X-射线 $\cdots$
  - 物质波：电子波、中子波
- 描述晶体里的波涉及固体物理里中最重要的一个概念：倒易空间
  倒易空间就是波矢空间，实空间描述经过 Fourier 变换就变成波矢空间描述，也就是倒易空间描述。
- 我们可以很容易地把这些波量子化，从而得到量子力学描述。量子力学中动量和波矢关系：$\boldsymbol{p} = \hbar \boldsymbol{k}$，因此倒易空间和动量空间等价。

一、倒易空间
一维情况

- 一维周期性函数：离散 Fourier 变换

$$V(x) = V(x+na), \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2$$

$$V(x) = \sum_n V_n e^{ik_n x} \qquad k_n = \frac{2n\pi}{a} \qquad e^{ik_n ma} = e^{i2nm\pi} = 1$$

$$V_n = \frac{1}{a}\int_0^a V(x) e^{-ik_n x} dx$$

- 在实空间里，只需要在一个周期里 $0 \le x < a$ 里描述即可，其它位置上的函数值可以通过平移 na 来获得。这些平移矢量构成一维的 Bravais 格矢。
- 在波矢空间里，只需要知道波矢为 $k = k_n = 2n\pi/a$ 时振幅 V_n 即可。这些波矢在波矢空间也是等间隔分布，同样构成 Bravais 格矢。
- 倒空间：波矢空间；倒格矢：$e^{ik_n ma} = 1 \Rightarrow k_n = nb$，$b = 2\pi/a$ 为倒空间基矢。

倒易空间：三维情况

- 类似的，三维空间里的周期函数同样可以用离散 Fourier 变换表示

$$V(\boldsymbol{r}) = V(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}_n) \qquad \boldsymbol{R}_n = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3$$

$$= \sum_m \tilde{V}(\boldsymbol{k}_m) e^{i\boldsymbol{k}_m\cdot\boldsymbol{r}} \qquad = \sum_m \tilde{V}(\boldsymbol{k}_m) e^{i\boldsymbol{k}_m\cdot\boldsymbol{R}_n} e^{i\boldsymbol{k}_m\cdot\boldsymbol{r}}$$

$$1 = e^{i\boldsymbol{k}_m\cdot\boldsymbol{R}_n}$$

  - 在实空间里，只需要在一个原胞里描述即可，其它位置上的函数值可以通过平移 $\boldsymbol{R}_n$ 来获得。这些平移矢量构成三维 Bravais 格矢。
  - 在倒空间（或者波矢空间）里，只需要知道波矢为 $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}_m$ 时振幅 $V(\boldsymbol{k}_m)$ 即可，$\boldsymbol{k}_m$ 满足 $e^{i\boldsymbol{k}_m\cdot\boldsymbol{R}_n} = 1$。
  - 这些波矢在倒空间同样构成三维 Bravais 格矢，称为倒格矢。其端点在倒空间等间隔分布，构成 Bravais 点阵，称为倒易点阵。

二、倒格子点阵

倒易点阵的基矢

$$2n\pi = \boldsymbol{k}_m \cdot \boldsymbol{R}_n = (m_1\boldsymbol{b}_1 + m_2\boldsymbol{b}_2 + m_3\boldsymbol{b}_3)\cdot(n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3)$$

$$= \sum_{ij=1}^{3} m_i n_j \boldsymbol{b}_i \cdot \boldsymbol{a}_j \qquad \Rightarrow$$

$$\boldsymbol{b}_i \cdot \boldsymbol{a}_j = 2\pi\delta_{ij} \qquad \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

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

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

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

$$\Omega = \boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3) = \boldsymbol{a}_2 \cdot (\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1) = \boldsymbol{a}_3 \cdot (\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2)$$ 原胞体积

$$\Omega^* = \boldsymbol{b}_1 \cdot (\boldsymbol{b}_2 \times \boldsymbol{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}$$ 倒格子原胞体积

☞实空间原胞体积越大，倒空间原胞体积越小；反之亦然

倒格矢

- 在固体物理里，一般用 G 来表示倒格矢

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{G}_m = m_1\boldsymbol{b}_1 + m_2\boldsymbol{b}_2 + m_3\boldsymbol{b}_3 \\
&\boldsymbol{G}_m \cdot \boldsymbol{R}_n = (m_1\boldsymbol{b}_1 + m_2\boldsymbol{b}_2 + m_3\boldsymbol{b}_3)\cdot(n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3) \\
&= \sum\nolimits_{ij} m_i n_j \boldsymbol{b}_i \cdot \boldsymbol{a}_j = \sum\nolimits_{ij} m_i n_j 2\pi\delta_{ij} = 2\pi(n_1m_1 + n_2m_2 + n_3m_3)
\end{aligned}
$$

- 正格子在实空间（又称坐标空间）里，其量纲是长度 l；倒格子在波矢空间（或者倒空间)，其量纲是长度的倒数 l^{-1}。
- 量子力学中，$\hbar\boldsymbol{k}$ 具有动量的量纲，因此倒空间和动量空间具有同样的物理意义。
- 1848 年 Bravais 引入 polar lattice 用来描述晶体里的平面，这是倒格子的前生。polar lattice 和倒格子相差一个系数，和正常格子具有相同的量纲。
- 1902 年 Gibbs 引入倒格子的概念，作为一个数学工具来处理矢量运算。
- 1913 年 Ewald 用倒格子来解释 X 射线衍射图案，此后固体物理里得到广泛的应用。

倒易点阵

- 倒易点阵是 Bravais 点阵的 Fourier 变换

$$\sum_l \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_l) \Rightarrow \int \sum_l \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_l) e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} d\boldsymbol{r} = \sum_l e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}_l}$$

$$\propto \sum_m \delta(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{G}_m)$$

- 晶格周期函数

$$V(\boldsymbol{r}) = V(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}_l) = v(\boldsymbol{r}) * \sum_l \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_l) \boxed{\text{实空间里卷积}}$$

$$\Rightarrow V(\boldsymbol{q}) = v(\boldsymbol{q}) \sum_m \delta(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{G}_m) = \sum_m v(\boldsymbol{G}_m)\delta(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{G}_m)$$

$\boxed{☞\text{倒空间里乘积}}$

- 倒易点阵只和晶体的 Bravais 点阵有关，和晶体的化学成分、原子/分子在晶胞里的排列没有任何关系。

倒易点阵

- 倒易点阵的倒易点阵是 Bravais 点阵。

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{c}_1 &= \frac{2\pi \boldsymbol{b}_2 \times \boldsymbol{b}_3}{\boldsymbol{b}_1 \cdot (\boldsymbol{b}_2 \times \boldsymbol{b}_3)} = \frac{2\pi}{\Omega^*}(\boldsymbol{b}_2 \times \boldsymbol{b}_3) \boxed{\boldsymbol{a} \times (\boldsymbol{b} \times \boldsymbol{c}) = (\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{c})\boldsymbol{b} - (\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b})\boldsymbol{c}} \\
&= \frac{2\pi}{(2\pi)^3/\Omega}\left(\frac{2\pi}{\Omega}\right)^2 (\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1) \times (\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2) \\
&= \frac{1}{\Omega}\{[(\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1) \cdot \boldsymbol{a}_2]\boldsymbol{a}_1 - [(\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1) \cdot \boldsymbol{a}_1]\boldsymbol{a}_2\} \\
&= \frac{1}{\Omega}\{\Omega \boldsymbol{a}_1 - 0\} = \boldsymbol{a}_1
\end{aligned}
$$

$$\boldsymbol{c}_2 = \boldsymbol{a}_2 \qquad \boldsymbol{c}_3 = \boldsymbol{a}_3$$

☞倒易点阵和 Bravais 点阵互为 Fourier（逆）变换

- 倒易点阵和 Bravais 点阵是一一对应的。二维中有 5 类 Bravais 点阵，因此有 5 类倒易点阵；三维空间中有 14 类 Bravais 点阵，因此对应的也就有 14 类倒易点阵。

倒易点阵例子

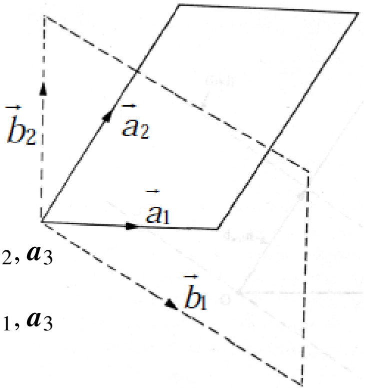
- 二维斜方格子的倒易点阵
  正空间基矢：

$$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3 = \hat{z}$$

倒空间基矢

$$\boldsymbol{b}_1 = 2\pi\frac{\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3}{\Omega} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{b}_1 \perp \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$$

$$\boldsymbol{b}_2 = 2\pi\frac{\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1}{\Omega} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{b}_2 \perp \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_3$$



倒易格子和正格子在同一个平面内，仍然是斜方格子

倒易点阵例子：二维长方格子

- 二维长方格子，晶格常数分别为 a, b

$$\boldsymbol{a}_1 = a\hat{x} \qquad \boldsymbol{a}_2 = b\hat{y} \qquad \boldsymbol{a}_3 = \hat{z} \qquad \Omega = ab$$

$$\boldsymbol{b}_1 = \frac{2\pi}{ab}(\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3) = \frac{2\pi}{a}\hat{x}$$

$$\boldsymbol{b}_2 = \frac{2\pi}{b}\hat{y}$$

☞ 长方格子的倒易格子仍然是长方格子，但是长短边换位

倒易点阵例子：三维简单立方格子

- 简立方格子，晶格常数为 a

$$\boldsymbol{a}_1 = a\hat{x} \qquad \boldsymbol{a}_2 = a\hat{y} \qquad \boldsymbol{a}_3 = a\hat{z} \qquad \Omega = a^3$$

$$\boldsymbol{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega}\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3 = \frac{2\pi}{a}\hat{x}$$

$$\boldsymbol{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\hat{y} \qquad \boldsymbol{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\hat{z}$$

☞ 边长为 a 的简立方格子，其倒易格子也是简立方格子，边长为 $2\pi/a$。

☞ 倒格矢：

$$G_{HKL} = H\boldsymbol{b}_1 + K\boldsymbol{b}_2 + L\boldsymbol{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(H\hat{x} + K\hat{y} + L\hat{z})$$

倒易点阵例子：面心立方格子

- 面心立方 FCC，晶格常数为 a，原胞体积 $\Omega = a^3/4$

$$\boldsymbol{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z}) \qquad \boldsymbol{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{z}+\hat{x}) \qquad \boldsymbol{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y})$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{b}_1 &= \frac{2\pi}{\Omega}\frac{a^2}{4}(\hat{z}+\hat{x})\times(\hat{x}+\hat{y}) = \frac{2\pi}{a}(\hat{z}\times\hat{x}+\hat{z}\times\hat{y}+\hat{x}\times\hat{x}+\hat{x}\times\hat{y}) \\ &= \frac{2\pi}{a}(-\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})\end{aligned}$$

$$\boldsymbol{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\hat{x}-\hat{y}+\hat{z}) \qquad \boldsymbol{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\hat{x}+\hat{y}-\hat{z})$$

☞ 这是晶格常数为 $4\pi/a$ 的 BCC 结构。

☞ 倒格矢：

$$\begin{aligned}G_{hkl} &= h\boldsymbol{b}_1 + k\boldsymbol{b}_2 + l\boldsymbol{b}_3 = \frac{2\pi}{a}[(-h+k+l)\hat{x}+(h-k+l)\hat{y}+(h+k-l)\hat{z}] \\ &= \frac{2\pi}{a}[H\hat{x}+K\hat{y}+L\hat{z}]\end{aligned}$$

☞ 以惯用晶胞的倒格子基矢来表示，H, K, L 具有相同的奇偶性，全是奇数或全是偶数 $\Rightarrow$ X 射线衍射中的系统消光问题。

倒易点阵例子：体心立方格子

- 体心立方 BCC，晶格常数为 a，原胞体积 $\Omega = a^3/2$

$$\boldsymbol{a}_1 = \frac{a}{2}(-\hat{x}+\hat{y}+\hat{z}) \qquad \boldsymbol{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x}-\hat{y}+\hat{z}) \qquad \boldsymbol{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}-\hat{z})$$

$$\boldsymbol{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\hat{y}+\hat{z}) \qquad \boldsymbol{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\hat{z}+\hat{x}) \qquad \boldsymbol{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\hat{x}+\hat{y})$$

☞ 这是晶格常数为 $4\pi/a$ 的面心立方格子。

☞ 倒格矢

$$\begin{aligned} G_{hkl} &= h\boldsymbol{b}_1 + k\boldsymbol{b}_2 + l\boldsymbol{b}_3 = \frac{2\pi}{a}[(k+l)\hat{x} + (l+h)\hat{y} + (h+k)\hat{z}] \\ &= \frac{2\pi}{a}[H\hat{x} + K\hat{y} + L\hat{z}] \end{aligned}$$

☞ 以惯用晶胞倒格矢基矢来表示的话，$H+K+L = 2(h+k+l)$ 为偶数。$\Rightarrow$ X 射线衍射中的系统消光问题。

☞ 正点阵为简单点阵，倒易点阵也是简单点阵。正点阵为有心点阵时，倒易点阵也是有心点阵，但有心类型可能不同，例如：体心立方点阵的倒格子为面心立方点阵。

倒易点阵例子：六方晶格

- 六方晶格，惯用晶胞晶格常数为 a 和 c，原胞体积 $\Omega = \sqrt{3}a^2c/2$

$$\boldsymbol{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{x} - \sqrt{3}\hat{y}) \qquad \boldsymbol{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y}) \qquad \boldsymbol{a}_3 = c\hat{z}$$

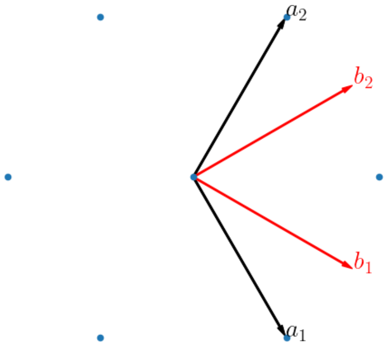
$$\boldsymbol{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega}\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a^2c/2}\frac{ac}{2}(\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y}) \times \hat{z}$$

$$= \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(\sqrt{3}\hat{x} - \hat{y})$$

$$\boldsymbol{b}_2 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(\sqrt{3}\hat{x} + \hat{y})$$

$$\boldsymbol{b}_3 = \frac{2\pi}{c}\hat{z}$$

☞仍然是六方格子，
绕 C 轴逆时针旋转了 30°

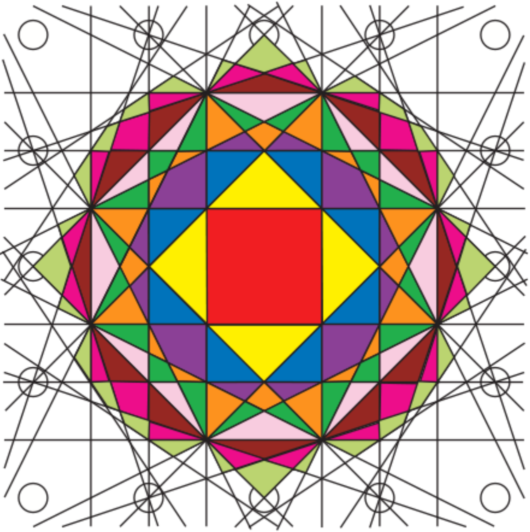


布里渊区

- 倒易点阵同样有原胞，通过平移倒格矢，可以用原胞把整个倒空间无空隙、不重复的覆盖。
- 倒易点阵的 Wigner-Seitz 原胞称为第一布里渊区，它在固体物理里具有非常重要的物理意义。
- 布里渊区的构造方法：
  - 以某个格点为原点，做所有倒格矢的垂直平分面。这些把倒易空间分成不同的多面体区域。
  - 最靠近原点的平面围成的区域称为第一布里渊区。
    ☞$\boldsymbol{k}$ 属于第一布里渊区 $\Rightarrow$ 原点是离 $\boldsymbol{k}$ 最近的倒格点。
  - 第一布里渊区边界和次远垂直面围成的区域称为第二布里渊区。
    ☞$\boldsymbol{k}$ 属于第二布里渊区 $\Rightarrow$ 原点是离 $\boldsymbol{k}$ 第二近的倒格点。
  - 第三、四 $\cdots$ 布里渊区
    ☞$\boldsymbol{k}$ 属于第 n 布里渊区 $\Rightarrow$ 原点是离 $\boldsymbol{k}$ 第 n 近的倒格点。

布里渊区例子：2D 正方格子

二维正方格子的倒格子也是正方格子，第一布里渊区是一个正方形，边长为 $2\pi/a$，其中 a 为晶格常数。



- ☞ 第一布里渊区是连续的多面体区域。
- ☞ 高阶布里渊区不连续，分成很多小块，阶数越高，小块数目越大。
- ☞ 所有阶数的布里渊区具有相同的体积（面积），而且总是可以通过平移倒格矢到第一布里渊区里，把第一布里渊区不留空隙、不重叠地填满。

第二到第九 BZ 平移到第一 BZ

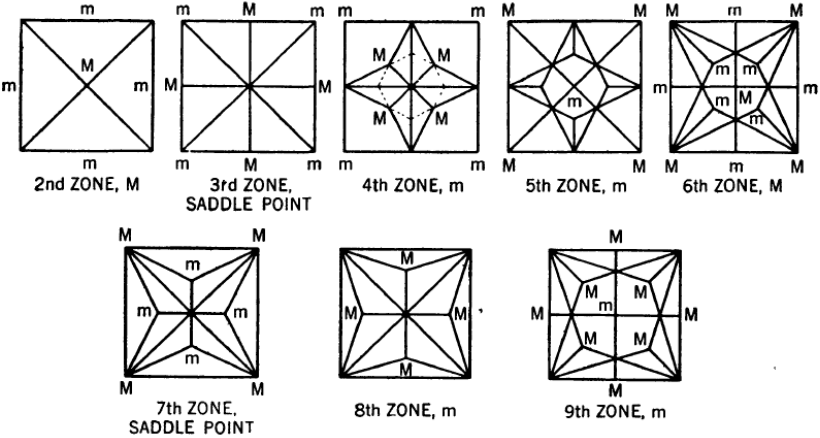
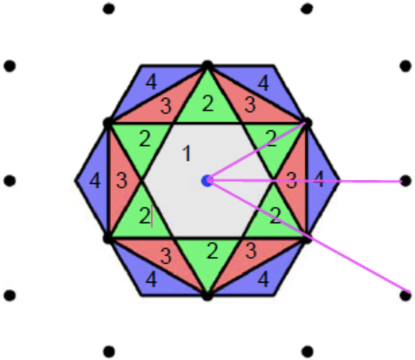


FIG. 31.6.—Square lattice, reduction of the first zones.

L. Brillouin, “Wave propagation in periodic structures”

二维六角格子的 BZ



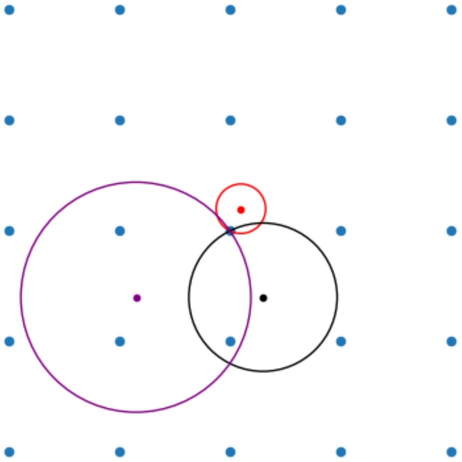
Harrison 法

可以不画出布里渊区直接判断倒空间中的点 $\boldsymbol{k}$ 处在哪个区

- 以 $\boldsymbol{k}$ 为圆（球）心，$|\boldsymbol{k}|$ 为半径做圆（球）
- 数出这个圆（球）里包含的倒格点（包含原点）数目 n

$\Rightarrow$ $\boldsymbol{k}$ 处于第 n 个 BZ

红点在第一 BZ;
黑点在第二 BZ;
紫点在第四 BZ。



布里渊区边界

由于布里渊区界面是某倒格矢的垂直平分面，如果用表示从原点出发、端点落在布里渊区界面上的倒易空间矢量，它必然满足方程：

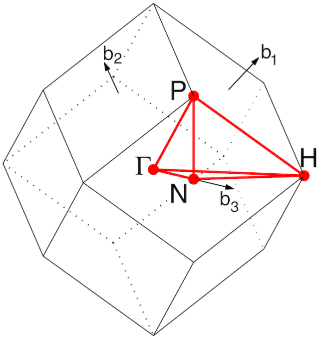
$$|\boldsymbol{k}| = |\boldsymbol{k} - \boldsymbol{G}_m|$$

$$\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{k} = (\boldsymbol{k} - \boldsymbol{G}_m) \cdot (\boldsymbol{k} - \boldsymbol{G}_m) = \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{k} - 2\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{G}_m \boldsymbol{G}_m \cdot \boldsymbol{G}_m$$

$$\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{G}_m = \boldsymbol{G}_m \cdot \boldsymbol{G}_m / 2$$

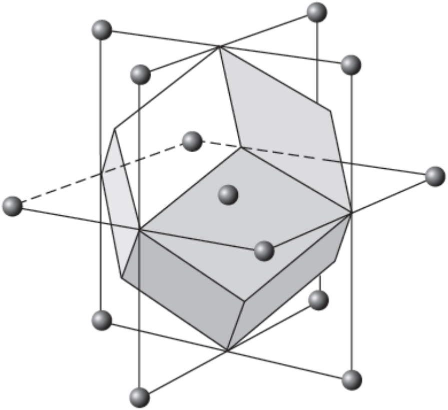
该方程称作布里渊区的界面方程。

BCC 的第一布里渊区



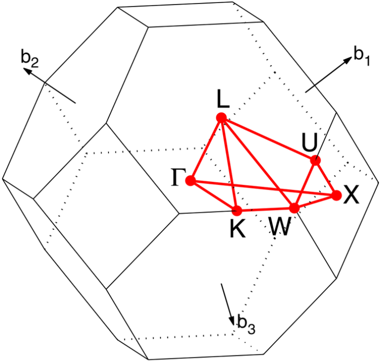
BCC path: Γ-H-N-Γ-P-H|P-N

[Setyawan & Curtarolo, DOI: 10.1016/j.commatsci.2010.05.010]



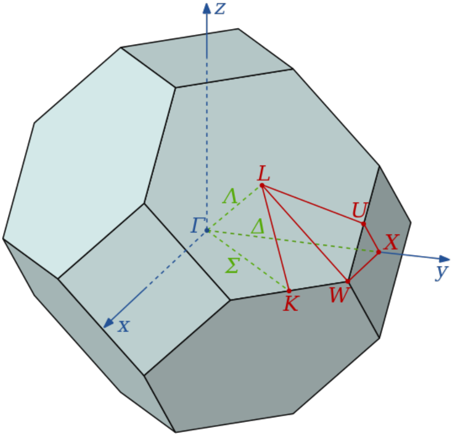
BCC 的倒格子为 FCC，第一布里渊区为正 12 面体。

FCC 的第一布里渊区



FCC path: Γ-X-W-K-Γ-L-U-W-L-K|U-X

[Setyawan & Curtarolo, DOI: 10.1016/j.commatsci.2010.05.010]



FCC 的倒格子为 BCC，第一布里渊区为截面八面体。

倒格矢和 Miller 指数之间的关系

- 倒格矢 $\boldsymbol{G}_{hkl} = h\boldsymbol{b}_1 + k\boldsymbol{b}_2 + l\boldsymbol{b}_3$ 和晶面 (hkl) 垂直，和这个晶面的法线方向平行。

$$\overline{CA} = \frac{\boldsymbol{a}_1}{h_1} - \frac{\boldsymbol{a}_3}{h_3}$$

$$\overline{CA} \cdot \boldsymbol{G}_{h_1h_2h_3}$$

$$= (h_1\boldsymbol{b}_1 + h_2\boldsymbol{b}_2 + h_3\boldsymbol{b}_3) \cdot (\frac{\boldsymbol{a}_1}{h_1} - \frac{\boldsymbol{a}_3}{h_3})$$

$$= \boldsymbol{b}_1 \cdot \boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{b}_3 \cdot \boldsymbol{a}_3 = 2\pi - 2\pi$$

$$= 0$$

$$\overline{CB} = \frac{\boldsymbol{a}_2}{h_2} - \frac{\boldsymbol{a}_3}{h_3}$$

$$\overline{CB} \cdot \boldsymbol{G}_{h_1h_2h_3} = \boldsymbol{b}_2 \cdot \boldsymbol{a}_2 - \boldsymbol{b}_3 \cdot \boldsymbol{a}_3 = 0$$

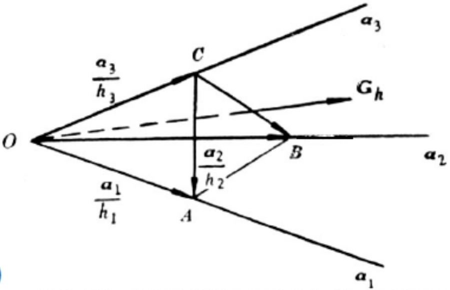


图1-18 晶面与倒易点阵位矢关系示意图

- 晶面法向向量和主轴的夹角

$$\cos\theta_i = \frac{\boldsymbol{G}_{h_1h_2h_3} \cdot \boldsymbol{a}_i}{|\boldsymbol{G}_{h_1h_2h_3}| \cdot |\boldsymbol{a}_i|} = \frac{2\pi h_i}{|\boldsymbol{G}_{h_1h_2h_3}| \cdot |\boldsymbol{a}_i|}$$

倒格矢和 Miller 指数之间的关系

- ☞ 晶面距离 $d = 2\pi/|\boldsymbol{G}_{hkl}|$
  晶面系的面间距就是原点到 ABC 面的距离，$\boldsymbol{G}_{hkl} \perp ABC \Rightarrow$

$$d_{hkl} = \overline{OA} \cdot \boldsymbol{G}_{hkl}/|\boldsymbol{G}_{hkl}| = \frac{2\pi}{|\boldsymbol{G}_{hkl}|}$$

  倒易点阵的一个基矢是和正点阵晶格中的一族晶面相对应的，它的方向是该族晶面的法线方向，而它的大小是该族晶面面间距倒数的 2π 倍。又因为倒易点阵基矢对应一个阵点，因而可以说：晶体点阵中的晶面取向和晶面面间距这 2 个参量在倒易点阵里只用一个点阵矢量（或说阵点）就能综合地表达出来。

- 两个晶面夹角

$$\cos\theta = \frac{\boldsymbol{G}_{hkl} \cdot \boldsymbol{G}_{h'k'l'}}{|\boldsymbol{G}_{hkl}||\boldsymbol{G}_{h'k'l'}|} \tag{1}$$