

固体電子工学

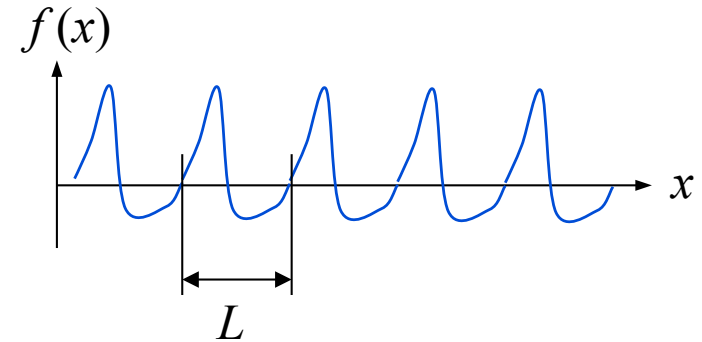
第6回 逆格子と回析

Fourier 変換

周期的な関数 $f(x + L) = f(x)$

$f(x)$ は周期 L の三角関数で展開できる

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{2\pi n}{L} x\right) + \sum_{n=0}^{\infty} B_n \cos\left(\frac{2\pi n}{L} x\right)$$



オイラーの公式 $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$ $i = \sqrt{-1}$

を用いて

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\frac{2\pi n}{L} x} f_n$$

$$f_n = (A_n - iB_n)/2$$

$$f_{-n} = f_n^* = (A_n + iB_n)/2$$

f_n は次で与えられる

$$\int_0^{2\pi} e^{i(n-m)x} dx = 2\pi \delta_{n,m} \quad \text{から}$$

$$f_n = \frac{1}{L} \int_0^L e^{-i\frac{2\pi n}{L} x} f(x) dx$$

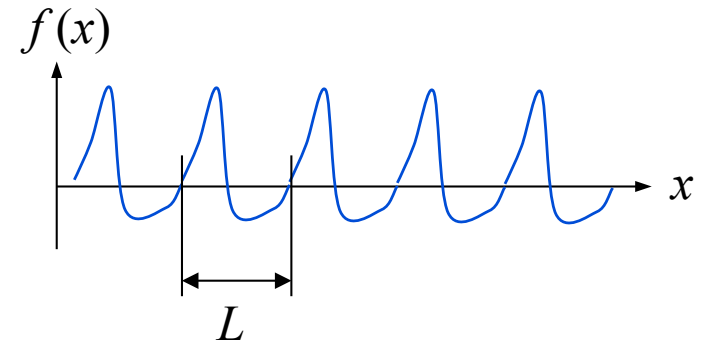
Fourier 変換

周期的な関数 $f(x + L) = f(x)$

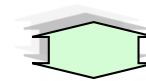
$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\frac{2\pi n}{L}x} f_n$$



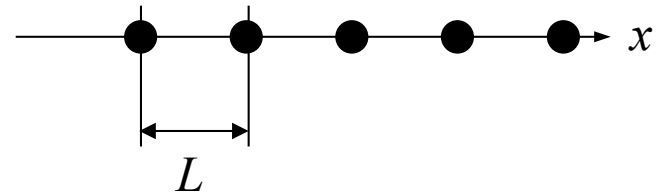
e^{ikx} と書く と $k = \frac{2\pi}{L}n$



実空間

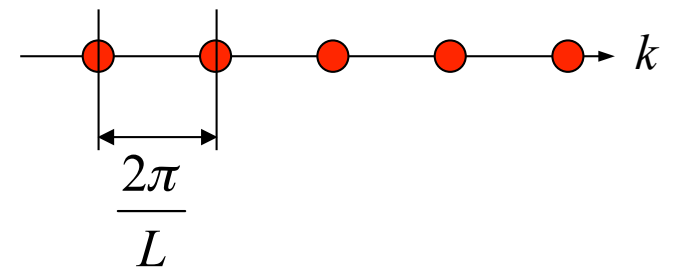


格子点



k 空間

逆格子点



Fourier 変換

3次元の場合

$$f(x + L_x, y, z) = f(x, y, z)$$

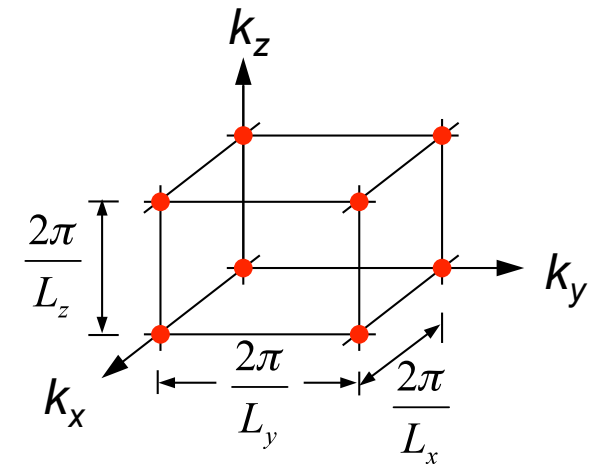
$$f(x, y + L_y, z) = f(x, y, z)$$

$$f(x, y, z + L_z) = f(x, y, z)$$

$$f(x, y, z) = \sum_{h=-\infty}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{i\left(\frac{2\pi h}{L_x}x + \frac{2\pi k}{L_y}y + \frac{2\pi l}{L_z}z\right)} f_{hkl}$$

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} \quad \text{とすると}$$

$$\vec{k} = \left(\frac{2\pi}{L_x} h, \frac{2\pi}{L_y} k, \frac{2\pi}{L_z} l \right) \quad h, k, l: \text{整数}$$



結晶の逆格子

結晶格子の並進対称性

$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ の周期性

$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ は必ずしも直交しない $(i \neq j)$

格子点 $\vec{r}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$ n_1, n_2, n_3 : 整数

逆格子点 $\vec{G}_h = h_1 \vec{g}_1 + h_2 \vec{g}_2 + h_3 \vec{g}_3$ h_1, h_2, h_3 : 整数

$$\vec{a}_i \cdot \vec{g}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$$



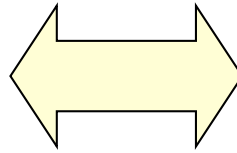
$$\vec{g}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{V_C} \quad \vec{g}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{V_C} \quad \vec{g}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{V_C}$$

$$V_C = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \quad \text{単位胞の体積}$$

$$\vec{r}_n \cdot \vec{G}_h = 2\pi (n_1 h_1 + n_2 h_2 + n_3 h_3) \quad e^{i\vec{r}_n \cdot \vec{G}_h} = 1$$

逆格子点

\vec{G}_h が逆格子点



すべての格子点 \vec{r}_n に対し

$$\vec{r}_n \cdot \vec{G}_h = 2\pi m$$

となる整数 m が存在する

逆格子による Fourier 変換

関数 $f(\vec{r})$ が結晶の並進対称性を持つとき
すなわち

$$f(\vec{r} + \vec{r}_n) = f(\vec{r})$$

を満たすとき、

$$f(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} f_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}$$

と展開できる。ここに和は逆格子点について行う。

$f_{\vec{G}}$ は次で与えられる。

$$f_{\vec{G}} = \frac{1}{V_C} \int_{V_C} d\vec{r} e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} f(\vec{r})$$

ここに積分は1つの単位胞について行う。

関数の例：結晶中の基底状態の電子密度、電荷密度、等

逆格子は 固体の性質を記述する 基本的な概念

- 格子と同じ周期を持つ物理量のFourier 変換
- 格子面
- ブラッグ反射
- バンド構造

結晶格子面との関係

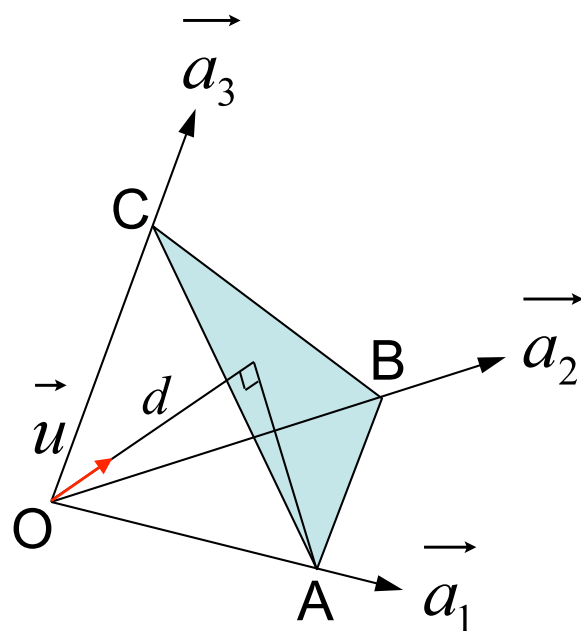
格子点 $\vec{r}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$ n_1, n_2, n_3 : 整数

格子面 直線上にない少なくとも3つの格子点を含んでいる面

格子面が3軸を切る点をA, B, Cとし、原点Oからそれらの点に至る距離を \overline{OA} , \overline{OB} , \overline{OC} とする

$$h_1 = \frac{a_1}{OA} \quad h_2 = \frac{a_2}{OB} \quad h_3 = \frac{a_3}{OC}$$

$$\vec{G}_h = h_1 \vec{g}_1 + h_2 \vec{g}_2 + h_3 \vec{g}_3 \quad \text{とすると}$$



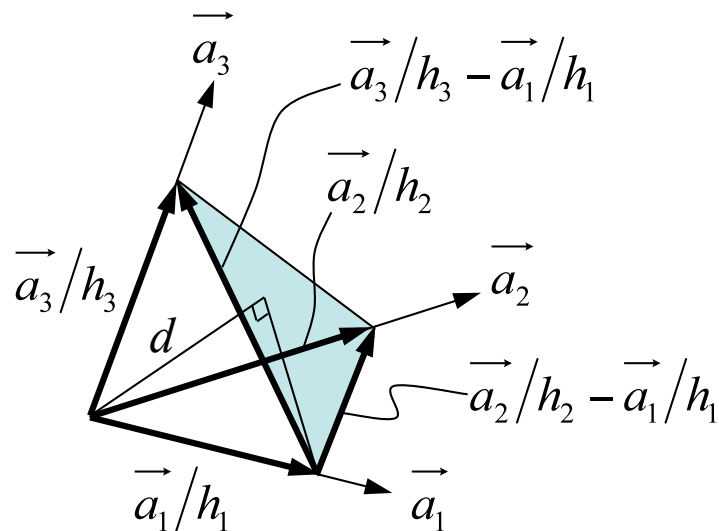
$$\vec{G}_h = \frac{2\pi}{d} \vec{u}$$

\vec{u} : 格子面に垂直な単位ベクトル

d : 原点から格子面までの距離

注意: h_1, h_2, h_3 は整数とは限らない
(逆格子点とは限らない)

証明



格子面に垂直なベクトル

$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{\vec{a}_2}{h_2} - \frac{\vec{a}_1}{h_1} \right) \times \left(\frac{\vec{a}_3}{h_3} - \frac{\vec{a}_1}{h_1} \right) \\
 &= \frac{\vec{a}_2}{h_2} \times \frac{\vec{a}_3}{h_3} - \frac{\vec{a}_1}{h_1} \times \frac{\vec{a}_3}{h_3} - \frac{\vec{a}_2}{h_2} \times \frac{\vec{a}_1}{h_1} \\
 &= \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left(h_1 \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 + h_2 \vec{a}_3 \times \vec{a}_1 + h_3 \vec{a}_1 \times \vec{a}_2 \right) \\
 &= \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \frac{V_C}{2\pi} \left(h_1 \vec{g}_1 + h_2 \vec{g}_2 + h_3 \vec{g}_3 \right) \\
 &= \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \frac{V_C}{2\pi} \vec{G}_h
 \end{aligned}$$

従って \vec{G}_h は格子面に垂直である

原点から格子面までの距離は

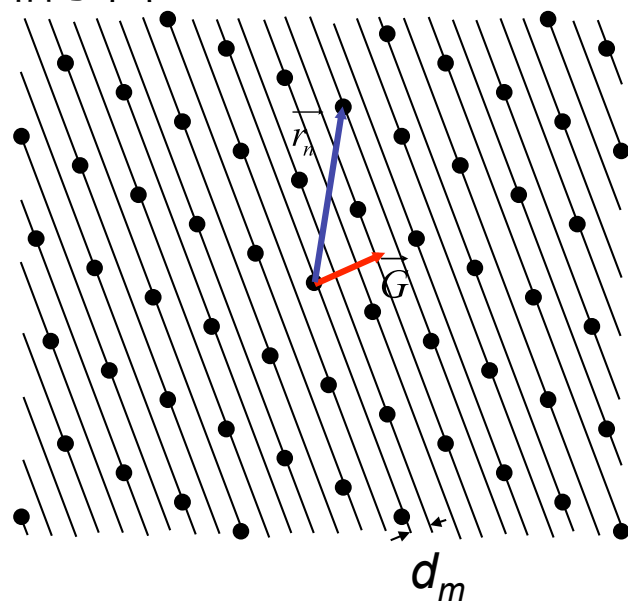
$$d = \frac{\vec{a}_1}{h_1} \cdot \frac{\vec{G}_h}{|\vec{G}_h|} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_h|}$$

平行な格子面の中で原点に最も近い格子面を考える。
 原点とこの格子面の距離を d_m としたとき、

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{d_m} \vec{u}$$

は逆格子点である。

格子面



\vec{r}_n を格子点とすると

$$\vec{r}_n \cdot \vec{u} = md_m \quad m: \text{整数}$$

⇒ すべての格子点に対して $\vec{r}_n \cdot \vec{G} = 2\pi m$
 となる整数 m が存在する

⇒ \vec{G} は逆格子点

d_m は格子面の間隔でもある

$\vec{G} = h_1 \vec{g}_1 + h_2 \vec{g}_2 + h_3 \vec{g}_3$ としたとき、 h_1, h_2, h_3 が整数となる

\vec{G}_h を逆格子点としたとき

$$\vec{G}_h = \frac{2\pi}{d} \vec{u} \quad d = \frac{d_m}{l} \quad l: \text{整数}$$

\vec{G}_h は逆格子点

\Rightarrow すべての格子点に対して $\vec{r}_n \cdot \vec{G} = 2\pi m$ となる整数 m が存在する

$$\vec{G}_h = \frac{2\pi}{d} \vec{u} \quad \text{から} \quad \vec{r}_n \cdot \vec{u} = md \quad \text{が成り立つ}$$

一方、 $\vec{r}_n \cdot \vec{u} / d_m$ はすべての整数値をとる

両者が成り立つためには

$$d = \frac{d_m}{l} \quad \text{となる整数 } l \text{ が存在しなければならない}$$

原点から逆格子点を結ぶベクトルの中で、最も長さの短いものが原点に最も近い格子面に対応する

ミラー指数に対応する格子面は原点に最も近い格子面

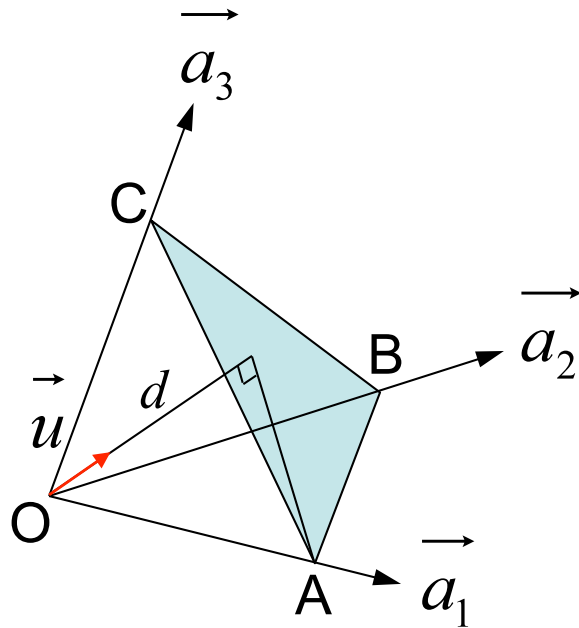
面

格子面が3軸を切る点をA, B, Cとし、原点Oからそれらの点に至る距離を \overline{OA} , \overline{OB} , \overline{OC} とする

$$h'_1 = \frac{a_1}{OA} \quad h'_2 = \frac{a_2}{OB} \quad h'_3 = \frac{a_3}{OC}$$

$$\vec{G}_{h'} = h'_1 \vec{g}_1 + h'_2 \vec{g}_2 + h'_3 \vec{g}_3$$

この段階で h'_1, h'_2, h'_3 は整数とは限らない
(逆格子点とは限らない)



⇒ h'_1, h'_2, h'_3 は有理数なので、適当な整数 m を掛けて、 $h_1 = mh'_1, h_2 = mh'_2, h_3 = mh'_3$ が最小の整数の組となるようにする
(h_1, h_2, h_3 は整数で互いに素の組)

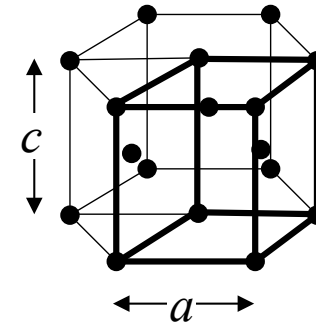
$\vec{G}_h = h_1 \vec{g}_1 + h_2 \vec{g}_2 + h_3 \vec{g}_3$ は原点に最も近い格子面に対応

元のABCの面は原点から m 番目の格子面

応用

図は六方晶を示したものである。

ミラー指数 (hkl) をもつ格子面の面間隔を求めよ。

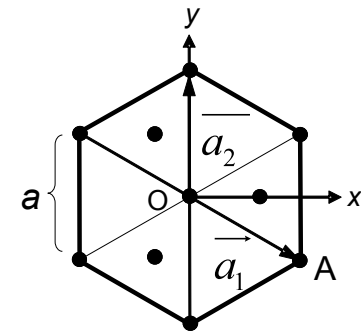


六方晶の格子ベクトルは

$$\vec{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, -\frac{1}{2}a, 0 \right) \quad \vec{a}_2 = (0, a, 0) \quad \vec{a}_3 = (0, 0, c)$$

逆格子ベクトルは

$$\vec{b}_1 = \left(\frac{4\sqrt{3}\pi}{3a}, 0, 0 \right) \quad \vec{b}_2 = \left(\frac{2\sqrt{3}\pi}{3a}, \frac{2\pi}{a}, 0 \right) \quad \vec{b}_3 = \left(0, 0, \frac{2\pi}{c} \right)$$



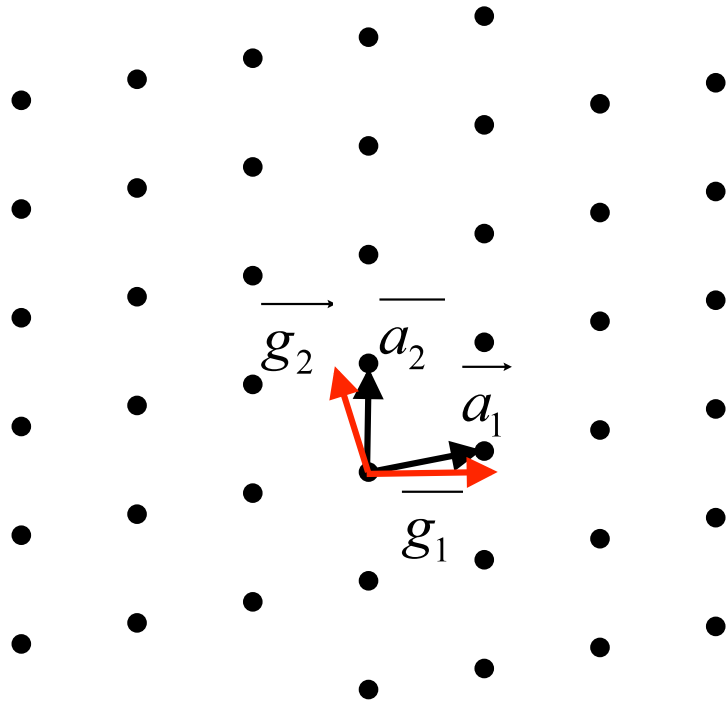
ミラー指数 (hkl) をもつ格子面に対応する逆格子ベクトル $\vec{G}_{hkl} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$ で

$$|\vec{G}_{hkl}| = 2\pi \sqrt{\frac{(2h+k)^2 + k^2}{3a^2} + \frac{l^2}{c^2}}$$

面間隔は

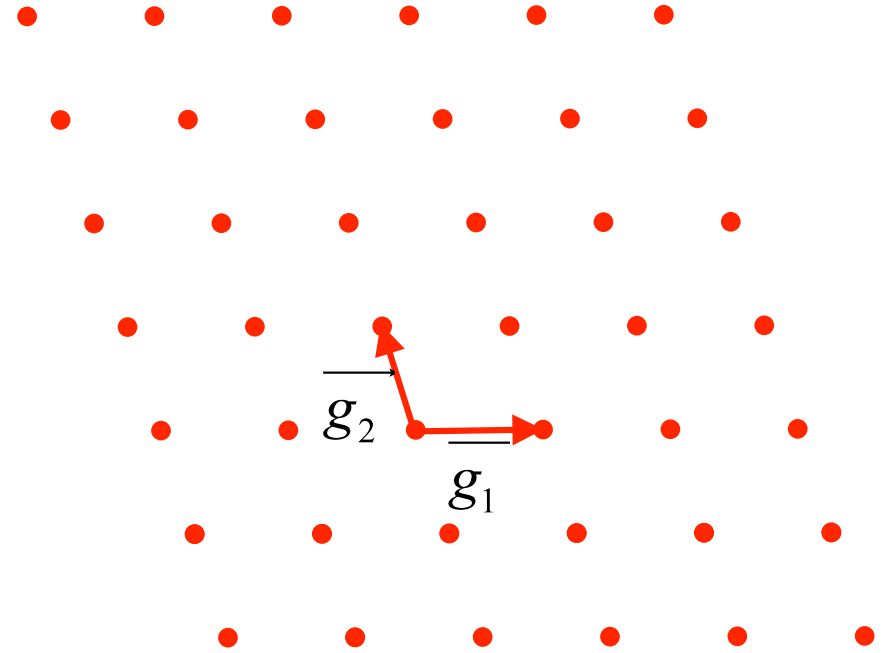
$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|} = \frac{1}{\sqrt{\frac{(2h+k)^2 + k^2}{3a^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$$

2次元格子の例



格子

$$\vec{r}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2$$



逆格子

$$\vec{G}_h = h_1 \vec{g}_1 + h_2 \vec{g}_2$$

3次元格子

格子

逆格子

単純

単純

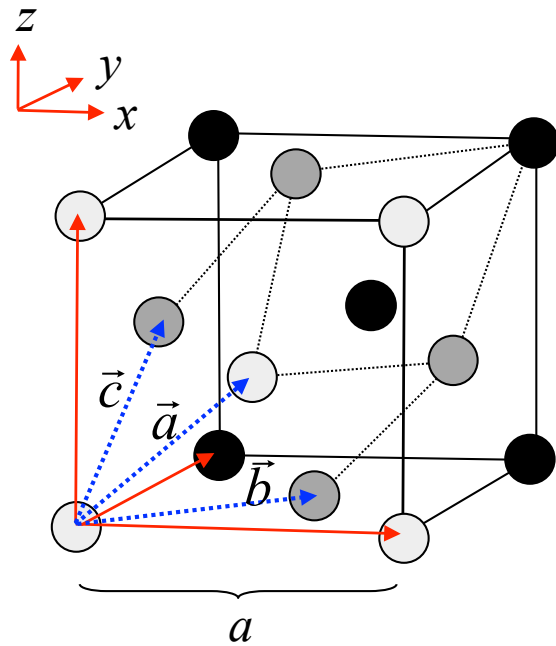
面心

体心

体心

面心

fcc 格子

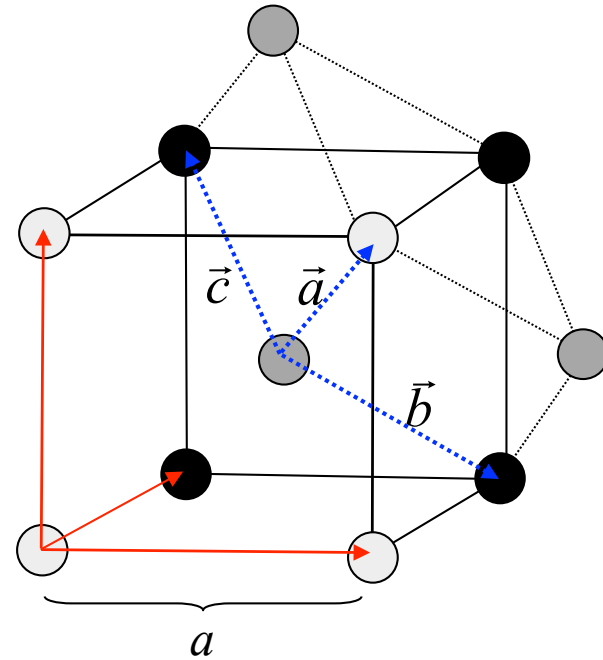


$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} (1 \ 0 \ 1) \quad \vec{g}_1 = \frac{2\pi}{a} (1 \ -1 \ 1)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2} (1 \ 1 \ 0) \quad \vec{g}_2 = \frac{2\pi}{a} (1 \ 1 \ -1)$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2} (0 \ 1 \ 1) \quad \vec{g}_3 = \frac{2\pi}{a} (-1 \ 1 \ 1)$$

bcc 格子



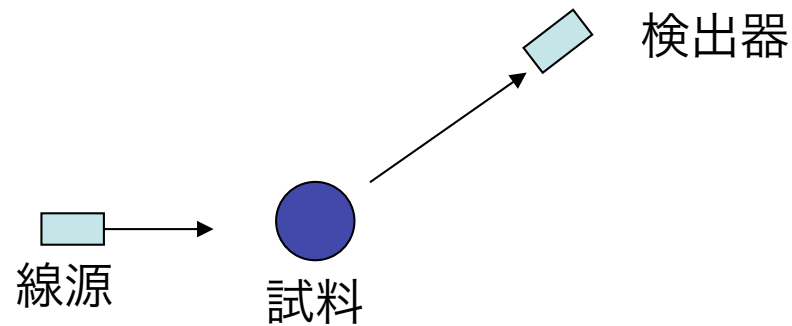
$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} (1 \ -1 \ 1) \quad \vec{g}_1 = \frac{2\pi}{a} (1 \ 0 \ 1)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2} (1 \ 1 \ -1) \quad \vec{g}_2 = \frac{2\pi}{a} (1 \ 1 \ 0)$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2} (-1 \ 1 \ 1) \quad \vec{g}_3 = \frac{2\pi}{a} (0 \ 1 \ 1)$$

回析実験

未知の構造の決定や構造パラメータの正確な測定
回析過程が固体の原子構造の周期的性質に最も敏感



線源 : X線
電子線
中性子線
原子線

線源と試料の間の相互作用

弾性的 elastic エネルギー交換を伴う

非弾性的 inelastic エネルギー交換を伴わない

構造解析の方法

測定線源 : X線、電子線、中性子線、原子線

線源の波長 λ : 分解能を決める

波長 λ とエネルギー E の関係

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \text{ド・ブロイ(de Braglie) の関係} \quad h: \text{プランク定数、} \quad p: \text{運動量}$$

質量を持つ粒子 (電子線、中性子線、原子線)

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

電子 $m = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$
 中性子 $m_n = 1.7 \times 10^{-27} \text{ kg}$
 α 線(He原子) $m = 4m_n$

光(質量=0)

$$E = pc \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{hc}{E} \quad c: \text{光速}$$

$\lambda = 1 \text{ \AA}$

電子 150 eV
 中性子 0.082 eV
 α 線 0.02 eV
 光 12000 eV

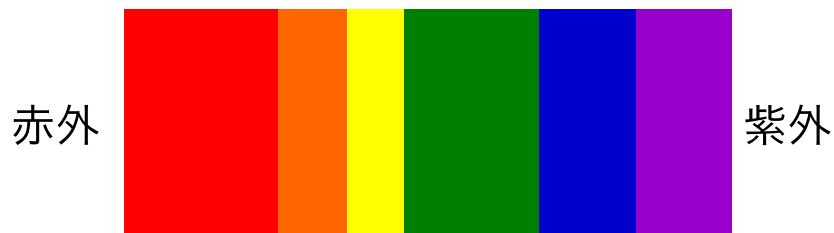
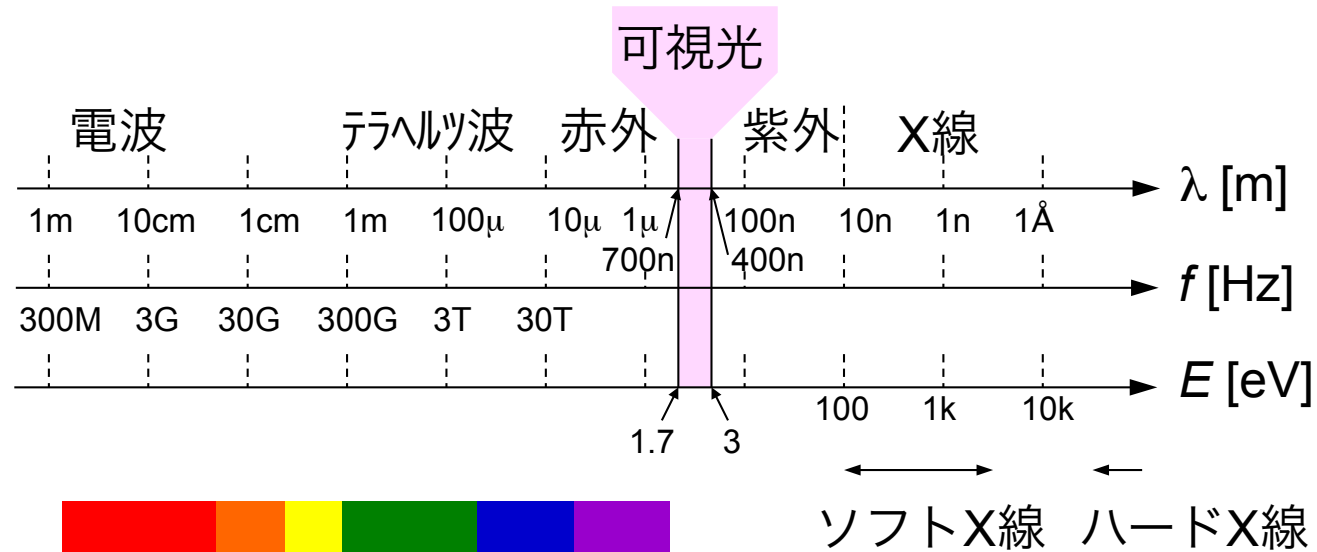
電子	10 eV ~ 1 keV	固体表面の構造(10~50 Å)
中性子 軽い原子	10 meV ~ 1 eV	固体表面の構造(10~50 Å) 異なる原子番号の原子の区別
光	1 keV ~ 100 keV	固体内部構造 (~数mm)

X線

周波数 f

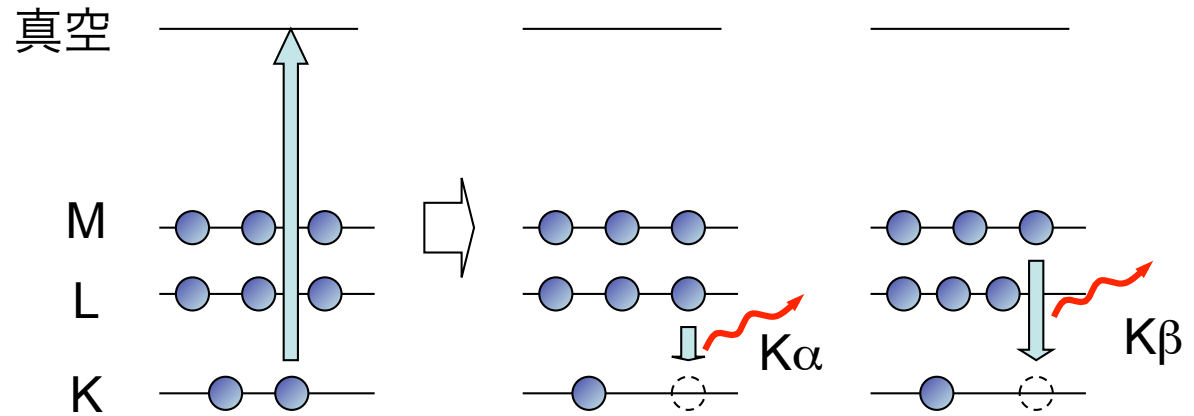
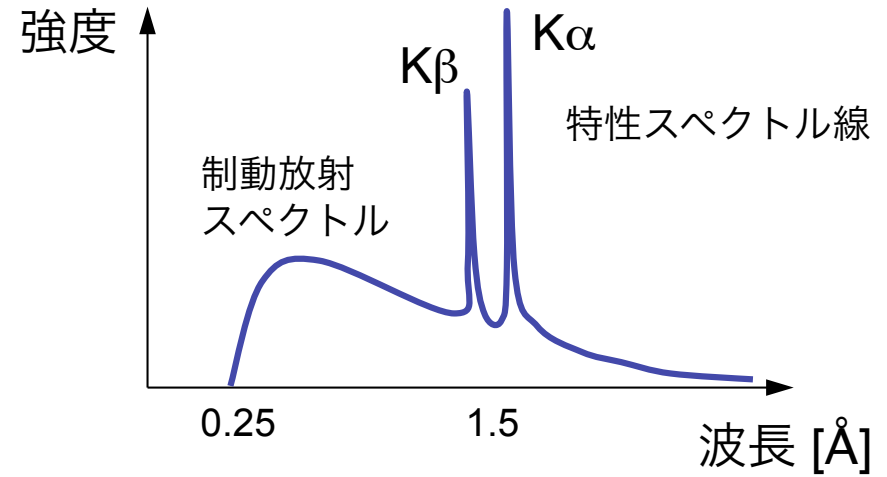
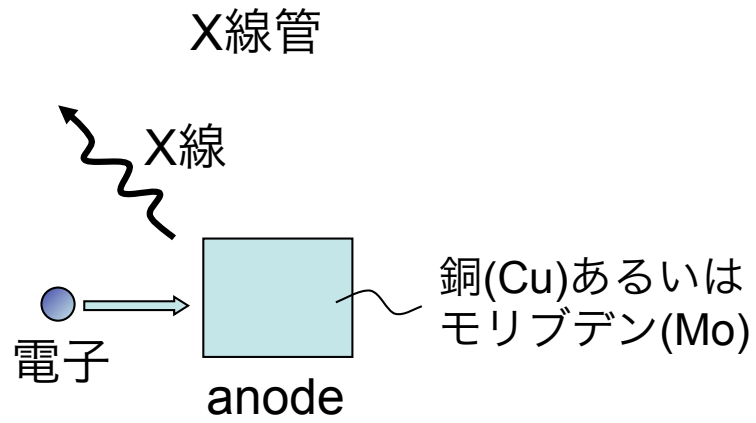
波長 $\lambda = \frac{c}{f}$ 光速 $c = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$

エネルギー $E = hf$ プランク定数 $h = 6.6 \times 10^{-34} \text{ Js}$

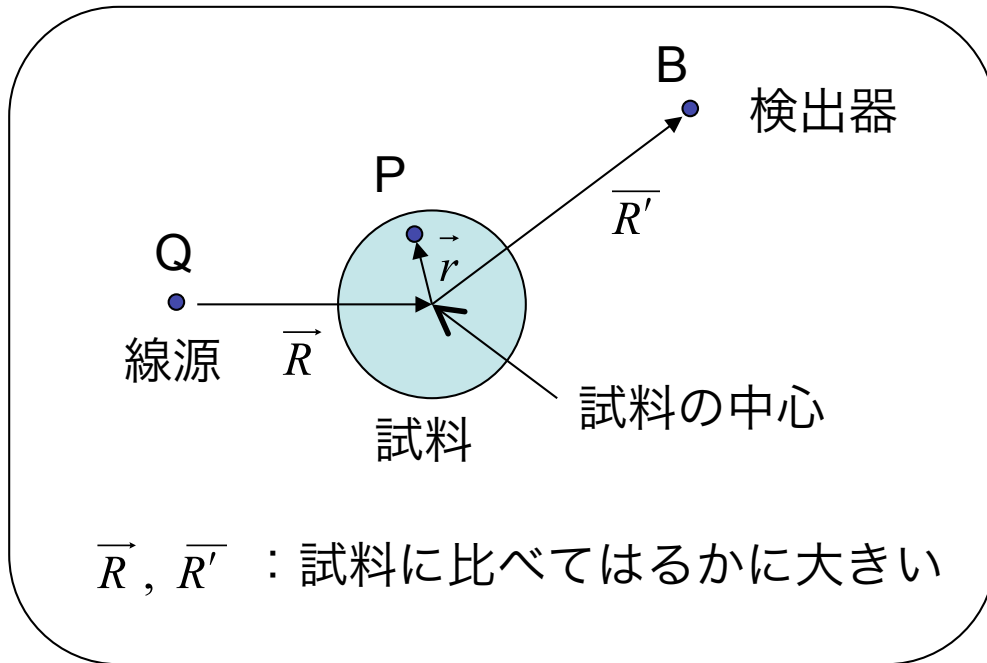


λ (nm)	700	600	578	500	446	400
E (eV)	1.77	2.06	2.15	2.5	2.8	3.1

X線源



回析の運動学的理論

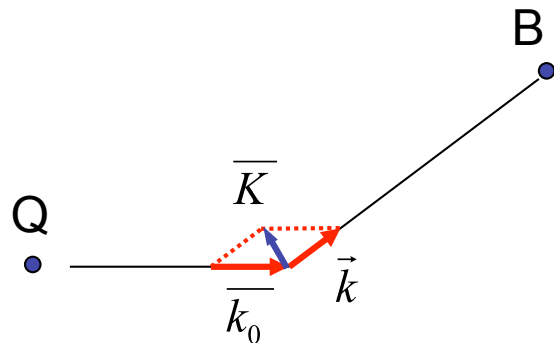


点Pにおける入射波の振幅

$$A_p = \frac{A_0}{|\vec{R}|} e^{i\vec{k}_0 \cdot (\vec{R} + \vec{r}) - i\omega_0 t}$$

点Pで散乱した波の点Bにおける振幅

$$A_B = \int d\vec{r} \frac{A_p}{|\vec{R}' - \vec{r}|} \rho(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}' - \vec{r}) - i\omega_0 t}$$



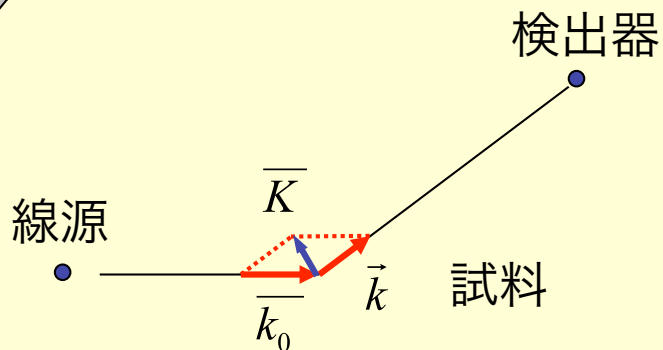
$$|\vec{k}| = |\vec{k}'| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$A_B = \frac{A_0}{RR'} e^{i(\vec{k}_0 \cdot \vec{R} + \vec{k} \cdot \vec{R}') - \omega_0 t} \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{K} \cdot \vec{r}}$$

$$\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}_0$$

検出器での測定量 = 波の強度

$$I \propto |A_B|^2 \propto \left| \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{K} \cdot \vec{r}} \right|^2$$



$$|\vec{k}| = |\vec{k}'| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}_0$$

検出器での信号

$$I \propto |\rho_{\vec{K}}|^2$$

$$\rho_{\vec{K}} = \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{K} \cdot \vec{r}}$$

$\rho(\vec{r})$ 試料の電荷密度

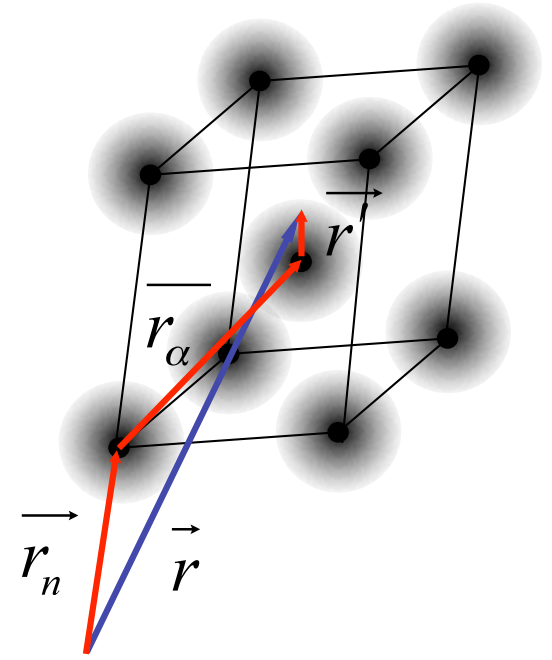
$\rho(\vec{r})$ は結晶の併進対称性を持つ

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \rho_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}$$

検出器での信号は \vec{K} が逆格子点 のとき大きな値をとる

$$I \propto |\rho_{\vec{K}}|^2 \quad \rho_{\vec{K}} = \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}}$$

電荷密度 $\rho(\vec{r})$: 原子の周りに集中



$$\vec{r} = \vec{r}_n + \vec{r}_\alpha + \vec{r}'$$

\uparrow \uparrow
 格子点 原子位置

$$\rho_{\vec{K}} = \sum_n e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}_n} \sum_\alpha e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}_\alpha} f_{\alpha\vec{K}}$$

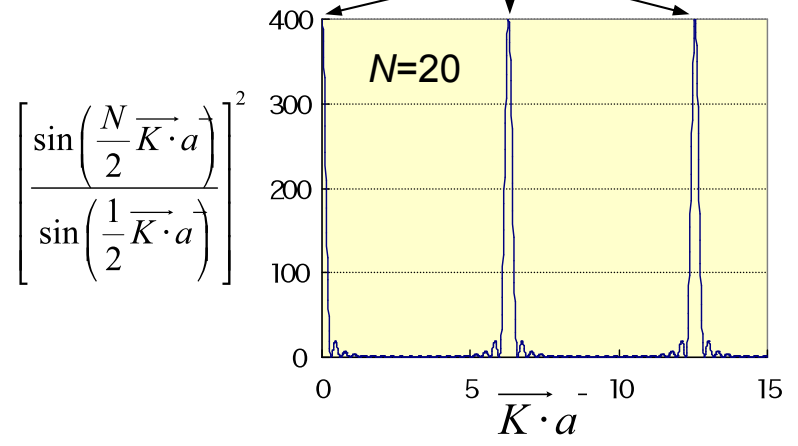
$$f_{\alpha\vec{K}} = \int d\vec{r}' \rho(\vec{r}') e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}'}$$

原子 α の周りでの積分

$$|\rho_{\vec{K}}|^2 = \left| \sum_n e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}_n} \right|^2 \left| \sum_\alpha e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}_\alpha} f_{\alpha\vec{K}} \right|^2$$

$$= \left[\frac{\sin\left(\frac{N_1}{2}\vec{K}\cdot\vec{a}_1\right)}{\sin\left(\frac{1}{2}\vec{K}\cdot\vec{a}_1\right)} \right]^2 \left[\frac{\sin\left(\frac{N_2}{2}\vec{K}\cdot\vec{a}_2\right)}{\sin\left(\frac{1}{2}\vec{K}\cdot\vec{a}_2\right)} \right]^2 \left[\frac{\sin\left(\frac{N_3}{2}\vec{K}\cdot\vec{a}_3\right)}{\sin\left(\frac{1}{2}\vec{K}\cdot\vec{a}_3\right)} \right]^2$$

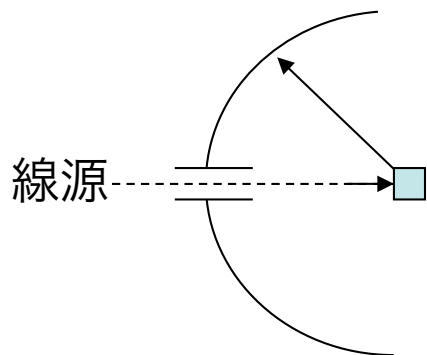
Laue関数 $\vec{K} = \vec{G}$ (逆格子点)



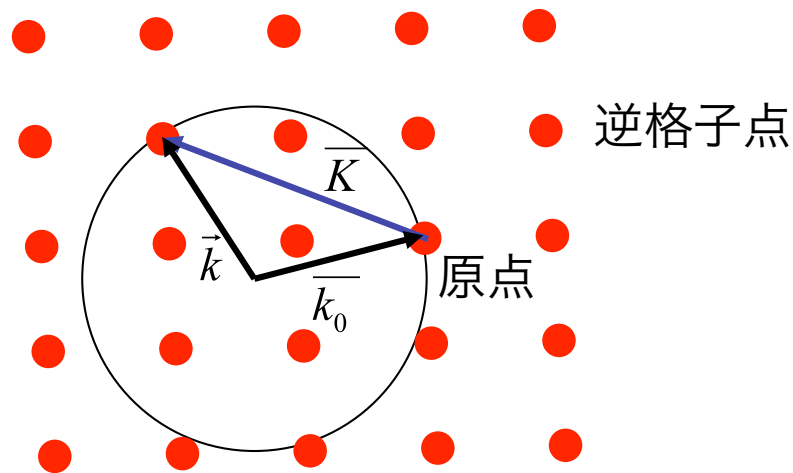
$$I \propto |\rho_{\vec{K}}|^2 \quad \rho_{\vec{K}} = \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}}$$

$$|\rho_{\vec{K}}|^2 \propto \begin{cases} N^2 |\rho_{\vec{G}}|^2 & \vec{K} = \vec{G} \text{ (逆格子点) の時} \\ \sim 1 & \vec{K} \neq \vec{G} \text{ の時} \end{cases} \quad N = N_1 N_2 N_3 : \text{格子点の数}$$

ラウエの条件: $\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{G}$ (逆格子点) を満たす特別な点で強度が大きくなる



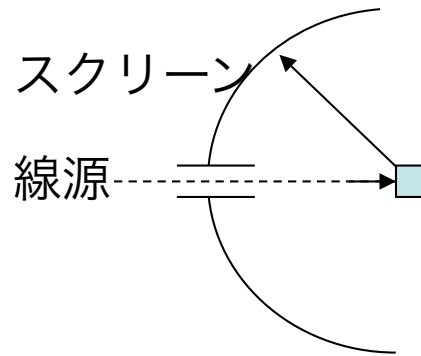
スクリーン



エバルト (Ewald) 球

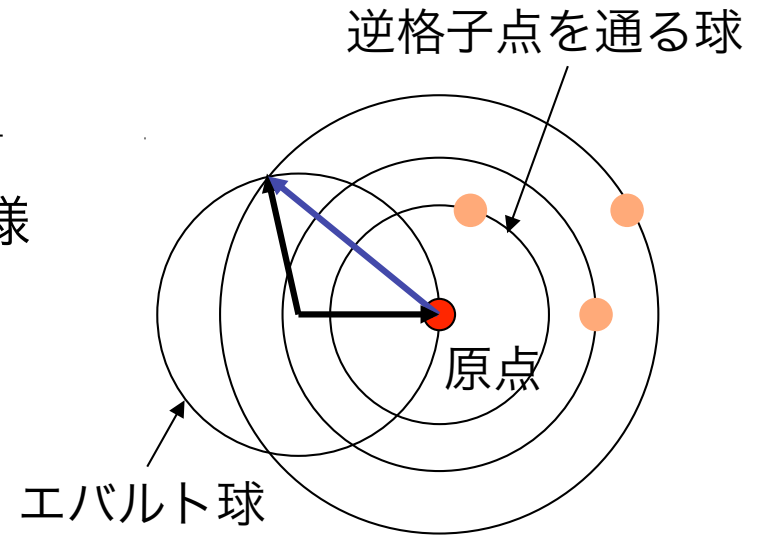
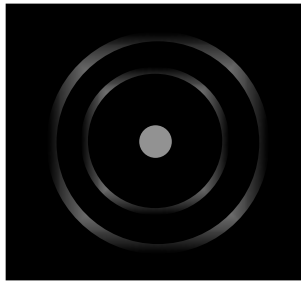
逆格子空間の原点が乗った半径 k の球を描く。この球上に他の逆格子点に乗っているとき散乱強度が大きい

X線回折実験法



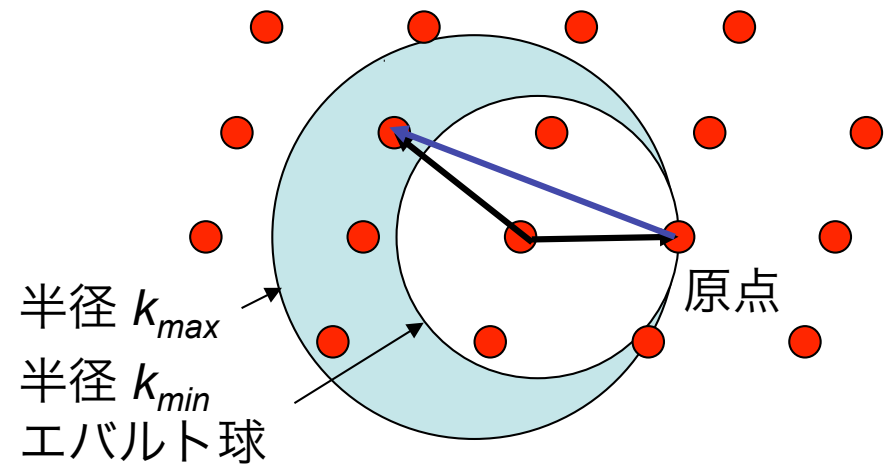
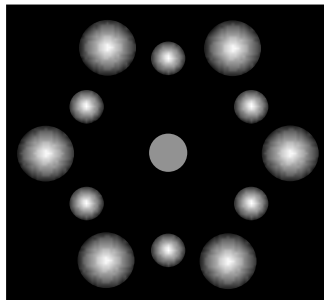
粉末試料解析法

結晶 \Rightarrow 粉末 結晶の向きが一様

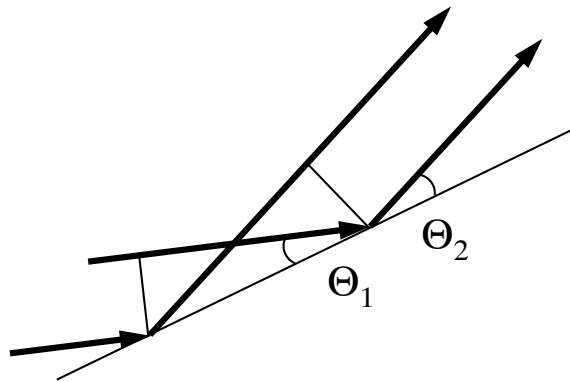


ラウエ法

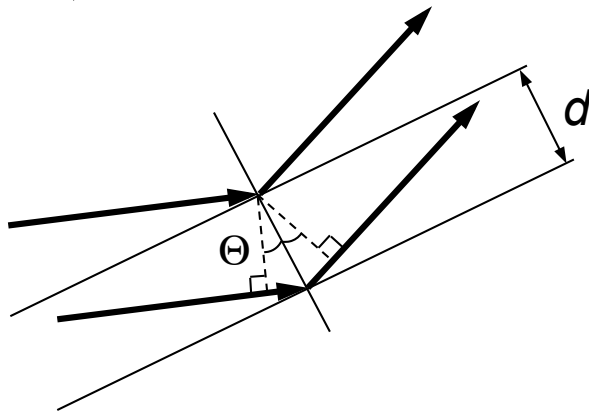
波数 $k_{min} < k < k_{max}$ に連続的に分布したX線を用いる



ブラッグ反射



$\theta_1 = \theta_2$ のとき、面での反射波の位相は常に揃う



2つの面での反射が強め合う条件

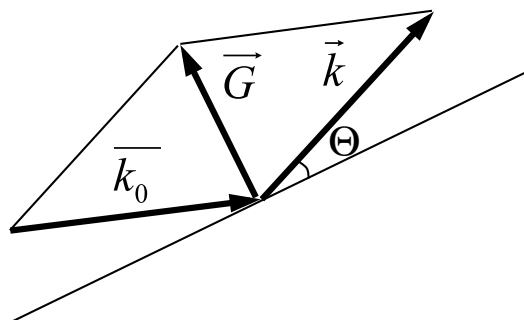
$$2d \sin \Theta = n\lambda$$

$\vec{G} = \vec{k} - \vec{k}_0$ に対する条件で表すと

$$G = 2k \sin \Theta = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \Theta$$

$$\Rightarrow G = \frac{2\pi n}{d}$$

$$\vec{G} = \frac{2\pi n}{d} \vec{u}$$



これは正に逆格子点

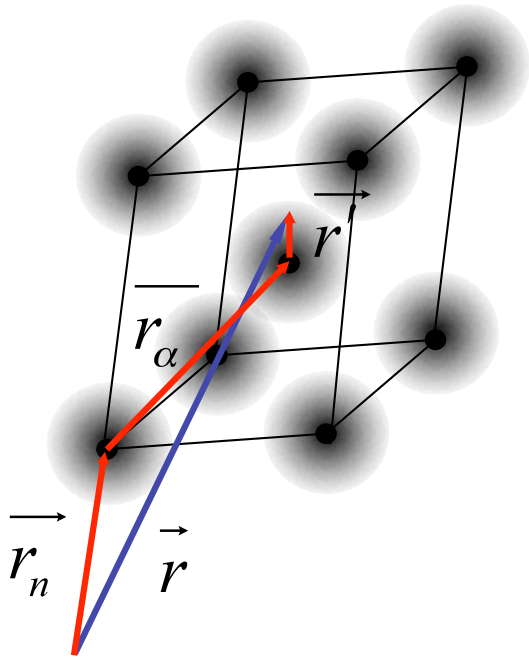
結晶構造因子

$$I \propto |\rho_{\vec{K}}|^2 \quad \rho_{\vec{K}} = \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}} = \sum_n e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}_n} \sum_{\alpha} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}_{\alpha}} f_{\alpha\vec{K}}$$

電荷密度 $\rho(\vec{r})$: 原子の周りに集中

$$f_{\alpha\vec{K}} = \int d\vec{r}' \rho(\vec{r}') e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}'}$$

原子 α の周りでの積分



$$\vec{r} = \vec{r}_n + \vec{r}_{\alpha} + \vec{r}'$$

↑ ↑
格子点 原子位置

$$|\rho_{\vec{K}}|^2 = \left| \sum_n e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}_n} \right|^2 \left| \sum_{\alpha} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}_{\alpha}} f_{\alpha\vec{K}} \right|^2$$

結晶構造因子

$$F_{\vec{K}} = \sum_{\alpha} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}_{\alpha}} f_{\alpha\vec{K}}$$

すべて同じ原子で構成されている場合には

$$S_{hkl} = \sum_{\alpha} e^{-i2\pi(h\alpha_1 + k\alpha_2 + l\alpha_3)}$$

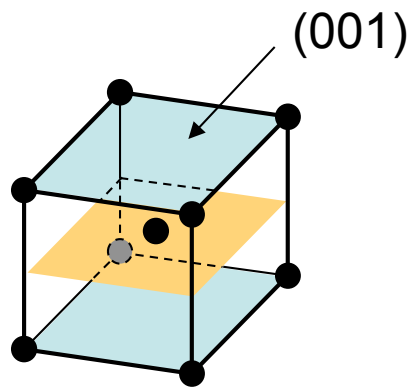
$$\vec{K} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3 \quad h, k, l: \text{整数}$$

$$\vec{r}_{\alpha} = \alpha_1\vec{a}_1 + \alpha_2\vec{a}_2 + \alpha_3\vec{a}_3 \quad 0 \leq \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 < 1$$

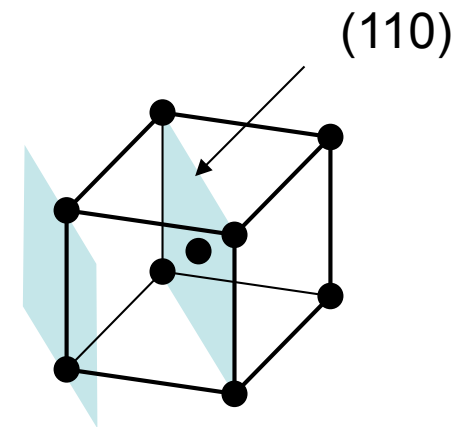
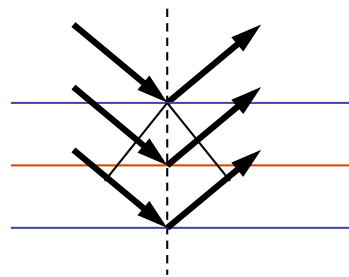
体心立方格子の場合

原子位置 $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = (0, 0, 0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$

$$S_{hkl} = 1 + e^{-i\pi(h+k+l)}$$
$$= \begin{cases} 2 & (h+k+l = \text{偶数}) \\ 0 & (h+k+l = \text{奇数}) \end{cases}$$



間に格子面があり、この面での反射による干渉で消える

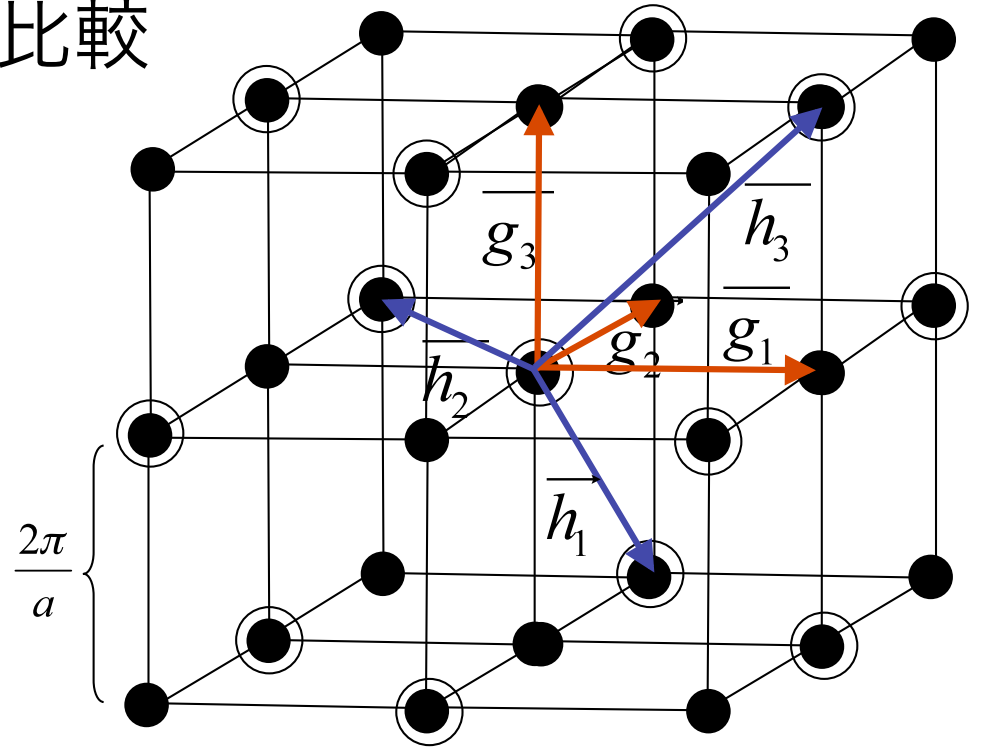
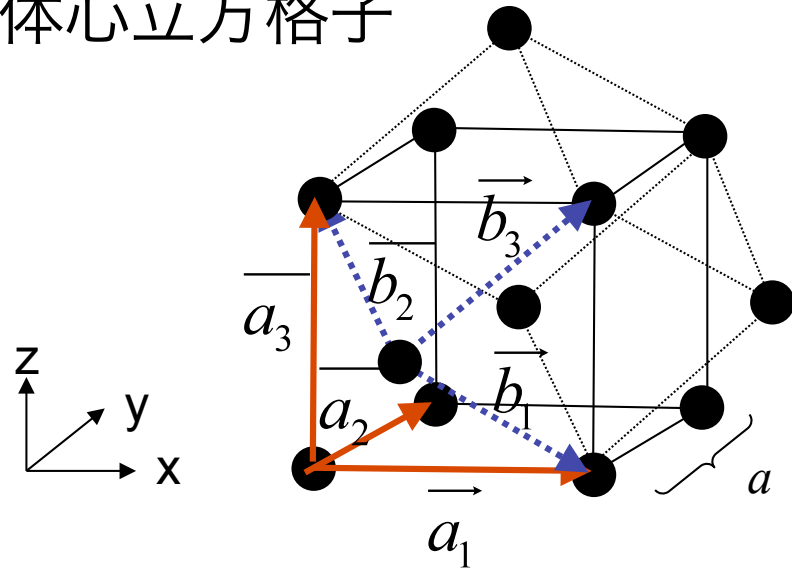


間に格子面が無いのでブラッグ反射がそのまま適用できる

慣用単位胞で考えたための問題、基本単位胞をとればおこらない

慣用単位胞と基本単位胞の比較

体心立方格子



	格子ベクトル	逆格子ベクトル	逆格子点
慣用 単位胞	$\vec{a}_1 = (a, 0, 0)$	$\vec{g}_1 = \left(\frac{2\pi}{a}, 0, 0\right)$	●
	$\vec{a}_2 = (0, a, 0)$	$\vec{g}_2 = \left(0, \frac{2\pi}{a}, 0\right)$	
	$\vec{a}_3 = (0, 0, a)$	$\vec{g}_3 = \left(0, 0, \frac{2\pi}{a}\right)$	
基本 単位胞	$\vec{b}_1 = \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, -\frac{a}{2}\right)$	$\vec{h}_1 = \left(0, \frac{2\pi}{a}, -\frac{2\pi}{a}\right)$	○
	$\vec{b}_2 = \left(-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right)$	$\vec{h}_2 = \left(-\frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{a}, 0\right)$	
	$\vec{b}_3 = \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right)$	$\vec{h}_3 = \left(\frac{2\pi}{a}, 0, \frac{2\pi}{a}\right)$	

- 基本単位胞で見ると逆格子は面心立方
- 慣用単位胞では基本単位胞の逆格子点の他に別の逆格子点が追加されている
- 追加された逆格子点は $S_{hkl} = 0$ の点に対応