$(h\,k\,l\,)$ 面の面間隔導出で用いた定理について

ミラー指数が $(h\,k\,l)$ な格子面は、原点を起点にして描いた $\overrightarrow{a_1}$, $\overrightarrow{a_2}$, $\overrightarrow{a_3}$ に平行な各軸と $\alpha_1\overrightarrow{a_1}$, $\alpha_2\overrightarrow{a_2}$, $\alpha_3\overrightarrow{a_3}$ で交わるとすると、$h\alpha_1 = k\alpha_2 = l\alpha_3$ を満たす。$(h\,k\,l)$ 面に該当する平行な格子面は多数あるが、このうち「1. 原点を含まず」、「2. 原点に最も近い」という条件を満たすものでは、この等号で結ばれる値は 1 となる。この文書ではこの事情について説明する。

まずミラー指数の定義より、

$$\frac{1}{\alpha_1} : \frac{1}{\alpha_2} : \frac{1}{\alpha_3} = h : k : l \quad \Leftrightarrow \quad \alpha_1 h = \alpha_2 k = \alpha_3 l \left(\equiv A \text{ と定義}\right) \tag{1}$$

が成立する。ただし h, k, l のいずれかが 0 になる場合（面が $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ のいずれかに平行な場合)、その成分は除外する。この A は面に固有の定数で、原点を通らない面では $A \neq 0$ である。

ここで平面上にある 2 つのベクトル

$$\vec{s}_1 = \alpha_1\,\vec{a}_1 - \alpha_3\,\vec{a}_3$$
$$\vec{s}_2 \equiv \alpha_2\,\vec{a}_2 - \alpha_3\,\vec{a}_3$$

を定義すると、平面上のある点 P に対応する位置ベクトル $\vec{p}$ は、β_1, β_2 を実数として

$$\vec{p} = \beta_1\,\vec{s}_1 + \beta_2\,\vec{s}_2 + \alpha_3\,\vec{a}_3 = \beta_1\alpha_1\,\vec{a}_1 + \beta_2\alpha_2\,\vec{a}_2 + (1 - \beta_1 - \beta_2)\alpha_3\,\vec{a}_3 \tag{2}$$

と書ける。

このような $\vec{p}$ は、格子点になる場合があるはず。このとき整数 m_1, m_2, m_3 を用いて、$\vec{p}$ は

$$\vec{p} = m_1\,\overrightarrow{a_1} + m_2\,\overrightarrow{a_2} + m_3\,\overrightarrow{a_3} \tag{3}$$

とも表されるはずである。

いま $\overrightarrow{a_1}$, $\overrightarrow{a_2}$, $\overrightarrow{a_3}$ は 1 次独立だから、(2) および (3) 両者における基本並進ベクトルの係数は等しくなる。従って

$$m_1 = \beta_1\,\alpha_1$$
$$m_2 = \beta_2\,\alpha_2$$
$$m_3 = (1 - \beta_1 - \beta_2)\alpha_3$$

が成立する。ここに (1) 式右側の関係を用い、さらに β_2, β_3 を消去すると、

$$\frac{m_3 l}{A} = 1 - \frac{m_1 h}{A} - \frac{m_2 k}{A} \;\Rightarrow\; A = m_1 h + m_2 k + m_3 l$$

となる。すなわち格子点を通る平面では A は整数でなければならない。

$A \neq 0$ なので、原点を含まず、原点に最も近く、格子点を含む平面では、A は最小値の 1 をとるはずである。実際、h, k, l が規約化されていれば $m_1 h + m_2 k + m_3 l = 1$ となるような整数 m_1, m_2, m_3 は必ず選べる（参考：https://qr.ae/pvFLbl)。よって (1) より $\alpha_1 h = \alpha_2 k = \alpha_3 l = 1$ で、

$$\alpha_1 = \frac{1}{h}, \qquad \alpha_2 = \frac{1}{k}, \qquad \alpha_3 = \frac{1}{l}$$

が成立する（なお P 以外のブラベー格子ではもうちょっと考察が必要ですが、そこは割愛)。