

### 1.6.3 Интенсивность отражений от поликристаллических образцов и фактор повторяемости

При измерении отражения от поликристаллических образцов по сравнению с монокристаллом возникает дополнительная особенность, связанная с тем, что поликристаллический образец состоит из монокристаллов, хаотически ориентированных относительно друг друга и, следовательно, относительно рассеивающей поверхности образца. В этом случае поверхность образца, соответствующая условию отражения Вульфа-Брэгга и облучаемая пучком рентгеновских лучей, оказывается не полностью покрытой кристаллографическими плоскостями (hkl), от которых должно наблюдаться отражение. Вместе с этими плоскостями на поверхность будут выходить другие кристаллографические плоскости с другими индексами, которые при данном угле  $\Theta$  не дают отражения. Естественно, что число отражающих плоскостей будет зависеть от симметрии кристалла и числа таких плоскостей {hkl} в элементарной ячейке с данной симметрией. Возможное число плоскостей, выходящих на отражающую поверхность образца, должно сказываться на величине наблюдаемой интегральной интенсивности отражения от поликристаллического образца. Этот факт учитывается в дифрактометрии поликристаллов с помощью фактора повторяемости  $m$ . Величина этого фактора, как уже отмечалось, зависит от сингонии кристалла и должна быть различна для разных hkl рефлексов в одной сингонии. Так, например, в случае кристаллов кубической сингонии  $m$  меняется следующим образом: для рефлекса {200}, включающего отражения от плоскостей 200, -200, 020, 0-20, 002, 00-2,  $m = 6$ ; для рефлекса {330}, включающего отражения от плоскостей 330, -330, 3-30, -3-30, 303, 30-3, -303, -30-3, 033, 0-33, 03-3, 0-3-3,  $m = 12$ . Вообще, для рефлексов {h00}  $m = 6$ , {hh0}  $m = 12$ , {hhh}  $m = 8$ , {hk0}  $m = 24$ , {hhl}  $m = 24$ , {hkl}  $m = 48$ .

Подставляя множитель  $L$  и фактор повторяемости  $m$  в выражение для интенсивности рефлекса с индексом  $H=hkl$  и учитывая, что чем больше объем узла обратной решетки, тем выше интенсивность соответствующего рефлекса, получаем

$$I_H \sim F_H^2 LP m N^2 (\lambda^3/V) \quad (27),$$

где  $N = v/V$ :  $V$  - объем элементарной ячейки, а  $v$  - объем кристалла. После преобразования этого выражения выводим:

$$I_H \sim F_H^2 LP v m \lambda^3 / V^2.$$

Из этого выражения, кроме зависимости интегральной интенсивности рефлекса от структурного фактора, следует, что:

- интенсивность отражения пропорциональна объему рассеивающего кристалла;
- интенсивность увеличивается пропорционально квадрату уменьшения объема элементарной ячейки кристалла;
- интенсивность отражения пропорциональна длине волны в кубе.

Эти заключения приводят к важному выводу: при съемке кристалла с малым размером, дающим небольшое число отражений, лучше использовать длинноволновое излучение.