1.6.4 Закономерные погасания рефлексов

Итак, интенсивность рентгеновских отражений от кристалла определяется структурным фактором. Интересным свойством этой зависимости является возможность сильного или полного гашения интенсивности некоторых рефлексов, которые имеют право появляться в соответствии с условием Вульфа-Брэгга. Рассмотрим это явление на примере рассеяния кристаллами с простыми элементарными ячейками, состоящими из атомов одного сорта.

Объемоцентрированная кубическая ячейка

Пусть в ОЦК ячейке одинаковые атомы занимают позиции в узлах с координатами (0,0,0) и (1/2,1/2,1/2). Согласно выражению (14), структурный фактор для нее равен

$F^2_{hkl} = f^2\{\mathrm{Cos}\ 2\pi * 0 + \mathrm{Cos} 2\pi * (h/2 + k/2 + l/2)\}^2 + f^2\{\mathrm{Sin} 2\pi * 0 + \mathrm{Sin} 2\pi * (h/2 + k/2 + l/2)\}^2 = f^2\{1 + \mathrm{Cos}\pi * (h + k + l)\}^2 + f^2 * \mathrm{Sin}^2\ \pi(h + k + l)$.

Из полученного выражения следуют два случая:

а) если сумма индексов отражающих плоскостей (h+k+l) четное число, то $F^2_{hkl} = 4\pi$ и отражение наблюдается;

б) если (h+k+l) есть число нечетное, то $F^2_{hkl} = 0$ и отражение имеет нулевую интенсивность. Обращает на себя внимание то, что при любых индексах hkl синусная часть в приведенном выражении для F^2_{hkl} равна 0.

Гранецентрированная кубическая ячейка

Координаты атомов в узлах этой ячейки равны: (0,0,0), (1/2,1/2.0), (1/2,0,1/2), (0,1/2,1/2), а выражение для структурного фактора будет иметь вид

$F^2_{hkl} = f^2\{1 + \mathrm{Cos}\pi\ (h+k) + \mathrm{Cos}\pi * (k + l) + \mathrm{Cos}\pi * (h + l)\}^2 + f^2\{\mathrm{Sin}\pi * (h+k) + \mathrm{Sin}\pi * (k + l) + \mathrm{Sin}\pi * (h + l)\}^2$.

В данном случае структурный фактор F2hkl будет отличен от нуля только в случае, если все индексы либо четные, либо нечетные. Для смешанных индексов отражения наблюдаться не будут, так как синусные слагаемые в любом случае станут равными 0, а из косинусных - одно будет равно 1, а два других -1 и таким образом F^2_{hkl} окажется равным 0.