

1.6.6 Закон Фриделя

Мы рассмотрели, как на основе индексов отражений удается определить структурные элементы симметрии. Однако, связь дифракционной картины с пространственной группой кристалла не всегда однозначна. Связано это с равенством интенсивностей отражений hkl и $-h-k-l$ (закон Фриделя):

$$I_{hkl} \sim F_{hkl}^2 = F_{hkl} \cdot F_{hkl}^* = F_{hkl} \cdot F_{-h-k-l}$$

$$F_{hkl}^* = \sum_j f_j [\cos(hx+ky+lz) - i \sin(hx + ky + lz)] = \sum_j f_j [\cos(-hx-ky-lz) + i \sin(-hx - ky -lz)] = F_{-h-k-l}$$

$h-k-l$.

$$I_{-h-k-l} \sim F_{-h-k-l}^2 = F_{-h-k-l} \cdot F_{-h-k-l}^* = F_{-h-k-l} \cdot F_{hkl}$$

Равенство I_{hkl} и I_{-h-k-l} означает, что нельзя различить дифракционные картины от centrosymmetric и acentric кристаллов. Эта закономерность получила название закона Фриделя. Поскольку среди точечных групп имеется лишь 11 centrosymmetric, то именно ими описывается дифракционная симметрия.