

Werk

Label: Article

PURL: https://resolver.sub.uni-goettingen.de/purl?31311028X_0067|log91

Kontakt/Contact

Digizeitschriften e.V.
SUB Göttingen
Platz der Göttinger Sieben 1
37073 Göttingen

✉ info@digizeitschriften.de

Vliv nedokonalé štěpnosti na přesnost měření ve spektroskopii paprsků X.

A. Němejcová-Kochanovská, Praha.

(Došlo 6. května 1938.)

U některých krystalů vyznačujících se velkou reflekcí mohutností paprsků X, na př. u sfaleritu, nesouhlasí přirozená povrchová plocha krystalu s rovinou Braggovy reflexe. Tento případ je analogií krystalů s plochou uměle sbroušenou. Byly odvozeny podmínky reflexe na takových krystalech a udána metoda, kterou lze i takových krystalů použití k přesnému měření.

Poukazuje se na možnost výskytu reflexí na jiných krystalografických plochách než na rovinách štěpných. Tyto reflexe mohou vésti k omylu při spektrální analýze zvláště při použití velmi světelných metod, na př. fokačních.

Hodnocení krystalů při jejich použití jako mřížek ve spektroskopii paprsků X nebylo dosud dobře možné, neboť výsledky získané s nimi různými autory vedou k protichůdným závěrům. Tak na př. za nevhodné byly označovány i t. zv. mosaikové krystaly.

Lze to říci zvláště o krystalech dvou nerostů s velkou reflekcí mohutností, a to o krystalech kamenné soli (NaCl) a o krystalech sfaleritu (ZnS). O krystalech kamenné soli je známo, že mají asi 19—29násobnou reflekcí mohutnost než jaká plyne z teorie reflexe pro dokonalé krystaly¹⁾ (totéž platí i o krystalu ferrocyanidu, který používal Moseley²⁾). Tyto krystaly kamenné soli, které byly s počátku používány ve spektroskopii paprsků X jako normály s mřížkovou konstantou $d = 2,81400 \text{ \AA}$, byly později opuštěny jako krystaly nehodící se k přesnému měření.

Vysokou reflekcí mohutnost mají rovněž krystaly sfaleritu, jak ukázali Dolejšek a Engelmannová ve své práci o jiskrových liniích v K-serii.³⁾ Rovněž Faessler a Küpferle,⁴⁾ kteří srovnávali

¹⁾ Bragg, James, Besanquet, Phil. Mag., 41 (1921), 309; 42 (1921), 1.

²⁾ Moseley, Phil. Mag., 26 (1931), 300.

³⁾ Dolejšek-Engelmannová, C. R., Séance du 21. janvier (1929).

⁴⁾ Faessler, Küpferle, ZS f. Phys., 3 (1935), 237.

reflekční mohutnost krystalů různých nerostů, našli pro sfalerit velmi výhodnou reflexi. Jak ukázali Feifer a Ježek,⁵⁾ sfalerit má ještě větší mosaikovou strukturu než kamenná sůl podle měření Kirkpatricka a Rosse.⁶⁾

Vysoká reflekční mohutnost krystalů kamenné soli a sfaleritu je způsobena, jak ukázali Dolejšek, Jahoda, Ježek a Rozsívál⁷⁾ tím, že tyto krystaly mají značnou pravidelnou mosaiku, jejíž velikost w_σ zvyšuje koeficient reflexe jednotlivých „singlekrystalů“, který plyne z Darwinovy teorie disperse a označuje se r_c , takže celkový koeficient reflexe mosaikového krystalu je pak $R = r_c \cdot w_\sigma$.

Je tedy užití mosaikových krystalů výhodné pro jejich velkou reflekční mohutnost, neboť s druhé strany, jak ukázal Bačkovský,⁸⁾ lze v symetrickém uspořádání užitím mosaikových krystalů docílit rozlišovací mohutnosti stejně velké jako krystaly dokonalými. Příklad docílení značné rozlišovací mohutnosti na krystalu kamenné soli (dokonce plasticky deformované) podali Dolejšek a Bačkovský.⁹⁾

Z těchto výsledků je zřejmo, že lze za určitých podmínek dokonce výhodně použít pro přesná měření řadu krystalů, které, protože nebyly pokládány za ideálně dokonalé, nebyly dosud ve spektroskopii paprsků X používány.

U takových krystalů, na př. u sfaleritu, je ovšem nutno, má-li jich býti použito k přesnému měření, překonati určité obtíže vznikající nedokonalou štěpností. Následkem nedokonalé štěpnosti (která podmiňuje povrchovou mosaiku), nesouhlasí u takových krystalů někdy povrchová plocha s rovinou Braggovy reflexe. Případ je stejný jako u krystalů s povrchovou plochou opticky zdokonalenou (zbrúšenou, leštěnou). Platí tedy všechny úvahy v následujícím uvedené pro krystaly nedokonale štěpné stejně, jako pro krystaly s plochou uměle zdokonalenou.

Následkem nedokonalé štěpnosti nevznikne při štípnutí nerostu dokonalá plocha, nýbrž krystal se štípe schodovitě (tyto schůdky jsou ovšem málokdy tak velké, aby byly patrné), takže vzniklá povrchová plocha nesouhlasí s rovinou Braggovy reflexe. Ve velmi značné míře jsme pozorovali tento zjev u sfaleritu (ZnS), ale jak ukazuje práce Manningova,¹⁰⁾ není vyloučeno tvoření takových schůdků ani u krystalu vápence, který patří mezi nerosty velmi dokonale štěpné.

⁵⁾ V tisku.

⁶⁾ Kirkpatrick, Ross, Phys. Rev., **43** (1933), 596.

⁷⁾ V tisku.

⁸⁾ Bačkovský, Nature, **5** (1938).

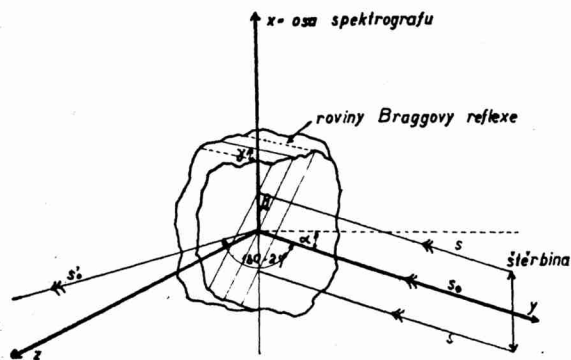
⁹⁾ Dolejšek, Bačkovský, Čas. pro přest. mat. a fys., **67** (1938), 211.

¹⁰⁾ Manning, Review of Sc. Instr., **5** (1934), 316.

Nejdříve odvodíme matematické vztahy pro reflexi na takových nedokonalých krystalech, u nichž povrchová rovina svírá s rovinou Braggovy reflexe úhel γ , příslušné posuvy čar a velikosti

Předpokládejme ideální rovinný svazek rovnoběžných paprsků. Soustavu souřadnou volme takto: Ro-

vinu dopadajícího svazku paprsků volně za rovinu $z = 0$. Paprsek jdoucí středem lineární šterbiny s_0 volně za osu y . Počátek O v průsečíku s_0 a povrchové plochy krystalu. Osu x totožnou



s osou spektrografu, ležící v povrchové ploše krystalu (viz obr. 1).

290

svíratí s paprskem dopadajícím s_0 úhel $180 - 2\varphi$, ale v rovině, která není totožná s rovinou $x = 0$.

Polohu reflektovaného paprsku s_0' určíme jednak úhlem $180 - 2\varphi'$, který svírá jeho průmět s_0' do roviny $x = 0$ s paprskem dopadajícím s_0 a jednak souřadnicí x průsečíku reflektovaného paprsku s_0' s fotografickým filmem, upraveným po obvodu spektrografu o poloměru r .

Kdyby se jednalo jen o nesprávnou justaci dokonalé reflexní plochy do osy spektrografu, nenastávala by reflexe všech paprsků uvažovaného svazku v bodech osy spektrografu a obraz čáry na filmu (část kuželoščky) by nebyl rovnoběžný s osou spektrografu. Naproti tomu v uvažovaném případě, poněvadž reflexe všech paprsků svazku nastává (na rozdíl od chybné justace) v bodech krystalu ležících na ose spektrografu, zůstane i obraz vzniklé čáry (části přímky) rovnoběžný s osou spektrografu, která je totožná s osou x . Následkem toho úhel, který čára svírá se stopou primárního svazku, bude $2\varphi'$ a nikoli 2φ . Rovněž při proměrování čar budou se uplatňovati úhly φ' a nikoli φ .*)

Úhel reflektovaných paprsků a souřadnici x průsečíku reflektovaného paprsku s_0' určíme následujícím postupem: Dopadají-li paprsky s na povrchovou plochu krystalu procházející osou spektrografu pod úhlem α , je rovnice povrchové plochy v soustavě souřadné volené shora uvedeným způsobem:

$$y \sin \alpha + z \cos \alpha = 0. \quad (1)$$

Roviny Braggovy reflexe necht' svírají s povrchovou rovinou krystalu úhel γ a krystal necht' je stočen tak, že směr jejich průsečnic s povrchovou plochou krystalu svírá s osou x úhel β (viz obr. 1).

Pak rovnice roviny Braggovy reflexe jdoucí počátkem má tvar:

$$-x \sin \beta \sin \gamma + y (\cos \gamma \sin \alpha - \cos \alpha \sin \gamma \cos \beta) + z (\cos \alpha \cos \gamma + \sin \alpha \sin \gamma \cos \beta) = 0. \quad (2)$$

Paprsek s_0 totožný s osou y svírá tudíž s touto Braggovou rovinou úhel ω , pro který platí:

$$\sin \omega = \cos \gamma \sin \alpha - \cos \alpha \sin \gamma \cos \beta.$$

Má-li nastati reflexe, musí se ω rovnati úhlu φ určenému z Braggovy rovnice, čili úhel α musí býti volen tak, aby platilo:

$$\sin \varphi = \cos \gamma \sin \alpha - \cos \alpha \sin \gamma \cos \beta. \quad (3)$$

*) Při této úvaze nebylo respektováno vnikání paprsků do krystalu. Lze však snadno nahlédnouti, že vnikáním paprsků do krystalu se na předchozích úvahách v podstatě mění jen to, že nastane rozšíření čáry směrem ke kratším vlnovým délkám.

Rovnice roviny reflektovaného paprsku s'_0 a dopadajícího paprsku s_0 je určena dopadajícím paprskem s_0 totožným s osou y a kolmicí v bodě dopadu k rovině Braggovy reflexe (2):

$$x (\cos \alpha \cos \gamma + \sin \alpha \sin \gamma \cos \beta) + z \sin \beta \sin \gamma = 0. \quad (4)$$

Tato rovina svírá s rovinou $x = 0$ úhel η daný následujícím výrazem:

$$\cos \eta = \frac{\cos \alpha \cos \gamma + \sin \alpha \sin \gamma \cos \beta}{\sqrt{(\cos \alpha \cos \gamma + \sin \alpha \sin \gamma \cos \beta)^2 + \sin^2 \beta \sin^2 \gamma}}.$$

Paprsek reflektovaný s'_0 svírá s paprskem dopadajícím s_0 úhel $180 - 2\varphi$ (kde φ je Braggův úhel). Při měření polohy čáry se neměří však v tomto případě úhel $180 - 2\varphi$, nýbrž průmět tohoto úhlu do roviny $x = 0$, pro který platí vztah:

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} (180 - 2\varphi') &= \cos \eta \operatorname{tg} (180 - 2\varphi), \text{ je-li } (180 - 2\varphi) < 90^\circ, \\ \operatorname{tg} 2\varphi' &= \cos \eta \operatorname{tg} 2\varphi, \text{ je-li } (180 - 2\varphi) > 90^\circ. \end{aligned} \quad (5)$$

Při stejném γ bude míti úchylka φ' od φ maximální hodnotu pro $\beta = 90, 270^\circ$. φ' bude rovno φ pro $\beta = 0, 180^\circ$. Existují tedy pro každý krystal dvě charakteristické polohy, ve kterých nenastává posuv čáry.

Průsek reflektovaného paprsku s filmem se posune nad nebo pod rovinu $x = 0$ o délku:

$$x = \frac{r \sin 2\varphi \sin \eta}{\sqrt{\cos^2 2\varphi + \cos^2 \eta \sin^2 2\varphi}}. \quad (6)$$

kde r je poloměr spektrografu.

Jak patrně z uvedeného vzorce, x má maximální hodnotu při témž γ pro $\beta = 90, 270^\circ$. Je rovno 0 pro $\beta = 0, 180^\circ$, což jsou obě již zmíněné charakteristické polohy. V dalším uvidíme, že tyto polohy jsou také charakteristické pro intenzitu reflexe.

V následující tabulce jsou uvedeny číselně maximální velikosti chyb Δd v určení mřížkové konstanty krystalu sfaleritu pro $\gamma = 1^\circ$ a $\gamma = 30'$ při poloze $\beta = 90, 270^\circ$. Mřížková konstanta je určena z druhého a čtvrtého řádu $\text{Cu } K\alpha_{12}$, jednak metodou φ

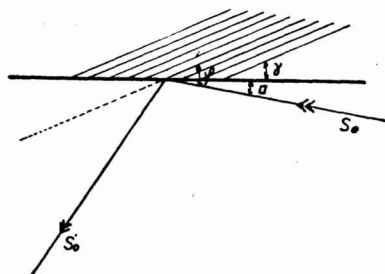
Tabulka č. 1.

γ	φ'	d	Δd	$d_{\text{II, IV}}$	Δd
1°	$23^\circ 42' 5,5''$	3,82439	+0,39	3,82355	-0,45
	$53^\circ 31' 11,5''$	3,82384	-0,16		
$30'$	$23^\circ 42' 12,5''$	3,82410	+0,10	3,82393	-0,07
	$53^\circ 31' 00,0''$	3,82399	-0,01		

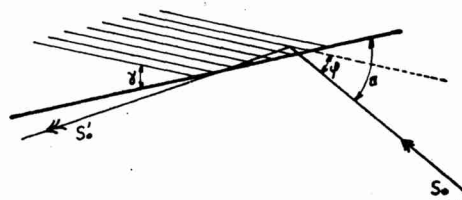
a jednak metodou κ . Při tom za správnou je vzata pro mřížkovou konstantu hodnota $d = 3,82400 \text{ \AA}$, pro vlnovou délku $\text{Cu } K\alpha_1 = 1537,30 \text{ X. J.}$; z těchto hodnot vychází $\varphi_{\text{II}} = 23^\circ 42' 15''$ a $\varphi_{\text{IV}} = 53^\circ 30' 59''$.

Z uvedené tabulky je viděti, že chyby, kterých se můžeme dopustiti v určení mřížkové konstanty u takových vadných krystalů, sahají až do desetin X. J. Dále je viděti, že metoda κ neskýtá v tomto případě žádné výhody oproti metodě φ . Proto nelze v těchto případech také použití korekční metody navržené Inanandou¹¹⁾ pro přesný výpočet mřížkové konstanty, neboť jeho metoda se zakládá právě na tom, že veškeré justační chyby se mnohem méně projeví v metodě κ než v metodě φ , což v námi uvažovaném případě neplatí.

Jak patrně z uvedeného závisí posuvy čar a z nich plynoucí chyby při přesném určení mřížkové konstanty nejen na velikosti odklonu povrchové roviny od roviny Braggovy reflexe (γ), nýbrž u jednoho a téhož krystalu také na orientaci průsečnic rovin Braggovy reflexe s povrchovou rovinou vůči ose spektrografu (β). Pro každý krystal existují však dvě polohy ($\beta = 0, 180^\circ$), ve kterých nenastane žádný posuv reflektované čáry, způsobený ve všech ostatních polohách odchylkou roviny Braggovy od povrchové roviny krystalu.



Obr. 2.



Obr. 3.

Pokud se týče intenzit čar reflektovaných uměle zbrošenými nebo nedokonale štěpnými plochami, lze očekávat, že nebude lhostejno, jak při témž úhlu dopadu takovou plochu orientujeme vůči dopadajícímu svazku paprsků, neboť reflektovaný paprsek probíhá různě dlouhou dráhu prostředím krystalu. Největší případně nejmenší intenzitu lze očekávat tehdy, jsou-li průsečnice rovin Braggovy reflexe s povrchovou rovinou krystalu rovnoběžné s osou spektrografu (příp. s průsečnicí rovinného svazku paprsků s povrchovou plochou krystalu) a svírá-li rovina dopadajících paprsků s povrchovou rovinou krystalu úhel $\alpha = \varphi - \gamma$ (obr. 2,

¹¹⁾ Inananda, Inaugural Dissertation, Spectroscopic Inst. Charles University, Čas. pro pěst. mat. a fys. 65 (1936), 33.

reflektovaný paprsek probíhá nejkratší dráhu prostředím krystalu), resp. $\alpha = \varphi + \gamma$ (obr. 3, reflektovaný paprsek probíhá nejdelší dráhu prostředím krystalu). Bude se tedy intensita reflektovaného záření při otáčení krystalem kol osy kolmé k ose spektrografu a k povrchové ploše krystalu během otáčení o úhel 360° měnit a nabývatí jednoho maxima a jednoho minima navzájem o 180° vzdálených. Při tom ovšem předpokládáme, že současně měníme příslušně i úhel dopadu α (podle vzorce 3), který také nabývá jednoho maxima $\alpha = \varphi + \gamma$ a jednoho minima $\alpha = \varphi - \gamma$.

Při použití takových krystalů k přesnému měření lze tudíž vyloučiti zmíněné chyby tím, že takový vadný krystal orientujeme vůči ose spektrografu do polohy znázorněné v obr. 2, t. j. tak, aby průsečnice rovin Braggovy reflexe s povrchovou rovinou krystalu byly rovnoběžné s osou spektrografu. Při poloze v obr. 3 jsou sice také vyloučeny úchyly čar vzniklé z nesouhlasu povrchové roviny s rovinou Braggovy reflexe, nastávají však značné úchyly čar zvětšeným lomem.¹²⁾

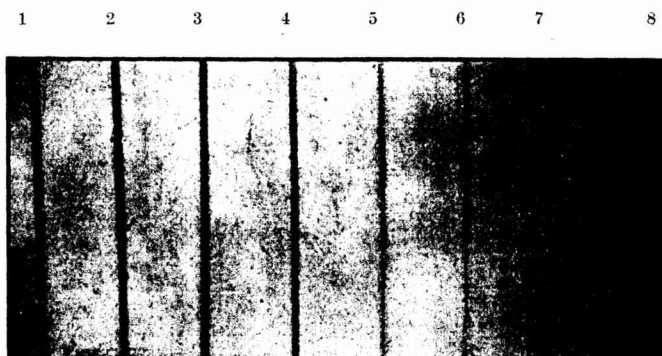
Stanoviti obě charakteristické polohy krystalu lze dosti přesně tím způsobem, že krystalem otáčíme kolem osy kolmé k ose spektrografu a k povrchové rovině a při tom měříme úhly dopadu α pro některou čáru. Tyto úhly se u vadných krystalů mění s úhlem otočení podle již uvedeného vzorce (3), nabývajíce jednou hodnoty maximální $\alpha = \varphi + \gamma$ pro $\beta = 0$ a jednou hodnoty minimální $\alpha = \varphi - \gamma$ pro $\beta = 180^\circ$. Tyto dvě význačné polohy jsou právě polohy hledané. Která z obou nalezených poloh se hodí k přesnému měření, rozhodne se podle intensity reflexe.

Takové odchylky rovin Braggovy reflexe jsme zjistili ve značné míře u sfaleritu (až 3°) při podrobném studiu reflektčních vlastností některých krystalů sfaleritu s přirozenou plochou a některých krystalů téhož nerostu, které pro makroskopickou nedokonalost přirozené plochy byly uměle přibroušeny a vyleštěny.

Za tím účelem jsme provedli takovou úpravu, aby krystal bylo možno otáčet také kol osy kolmé k ose spektrografu a k povrchové ploše krystalu. Krystal byl najustován svou povrchovou plochou do osy spektrografu, takže poloha odštípnuté plochy zůstávala při otáčení kol osy kolmé k ose spektrografu a k povrchové ploše krystalu vůči dopadajícímu svazku paprsků neproměnná. Ukázalo se, že jestliže rovina Braggovy reflexe nesouhlasila s povrchovou plochou krystalu, tu, ačkoliv tato zůstávala při otáčení kol osy kolmé k ose spektrografu a k povrchové rovině krystalu neproměnná, nezůstával Braggův úhel sklonu φ konstantní. Následkem toho, že v různých polohách krystalu při otáčení kol osy kolmé k ose spektrografu a k povrchové ploše krystalu neodpovídá úhel dopadu α skutečnému Braggovu úhlu φ , mění se při otáčení

¹²⁾ Davis, Nardroff, Phys. Rev., 23 (1924), 291.

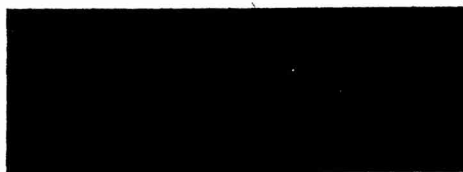
kol této osy při konstantním úhlu dopadu α intenzita čáry. Jak dalece to závisí na úhlu β , je patrné z obr. 4 a 5. V obr. č. 4 jsou reprodukovány snímky druhého řádu dubletu $\text{Cu } K\alpha_1\alpha_2$ na sfale-
ritu, který byl zmíněným způsobem otáčen kol osy kolmé k ose



Obr. 4.

Ubývání intenzit reflexí dubletu $\text{Cu } K\alpha_1\alpha_2$ na nedokonalém krystalu sfale-
ritu ($\gamma = 3^\circ$) při konstantním úhlu dopadu a měnícím se nastavení krystalu
kol osy kolmé k ose spektrografu a povrchové rovině krystalu.

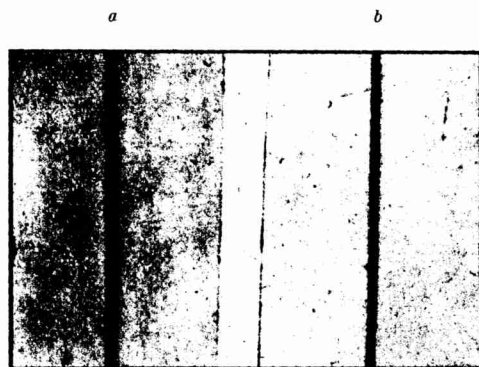
spektrografu a k povrchové ploše krystalu postupně vždy o $2,5^\circ$,
při čemž byl současně vždy poněkud posunut film tak, aby se
jednotlivé obrazy čar nepřekrývaly. Z jednotlivých snímků ozna-
čených 1—7 je viděti značné postupné ubývání intenzity, takže
v poloze 7, která odpovídá otočení krystalu o $\theta = 17,5^\circ$ obraz
dubletu takřka mizí. Snímek 8 je opět návrat do původní polohy
pro kontrolu, zda se in-
tensita záření nezměnila
a odpovídá snímku 1.
Ovšem uvedená změna
intensity (resp. změna
Braggova úhlu φ) odpo-
ovídá velmi značné úchl-
ce rovin Braggovy reflexe
od povrchové plochy kry-
stalu, $\gamma = 3^\circ$. Naproti
tomu na obr. č. 5, kde
jsou reprodukovány sním-
ky reflektovaného duble-
tu $\text{Cu } K\alpha_1\alpha_2$ na přirozené štěpné ploše velmi dokonalého krystalu
vápence, není v celém rozmezí otočení $\beta = 0 - 360^\circ$ patrné
žádné ubývání intenzity (změna Braggova úhlu sklonu).



Obr. 5.

Reflexe dubletu $\text{Cu } K\alpha_1\alpha_2$ na dokonalém kry-
stalu kalcitu při konstantním úhlu dopadu
a měnícím se nastavení kol osy kolmé k ose
spektrografu a povrchové ploše krystalu.

V obr. 6 jsou reprodukovány snímky čar opět pro zmíněný krystal sfaleritu pro obě polohy charakterisované úhlem dopadu $\alpha = \varphi + \gamma$ (a) a $\alpha = \varphi - \gamma$ (b). Ve shodě s tím, co bylo výše



Obr. 6.
Intensity reflexí dubletu $\text{Cu } K\alpha_{12}$ na krystalu sfaleritu ($\gamma = 3^\circ$) v obou charakteristických nastaveních krystalu.

obou charakteristických poloh o 90° , takže navzájem jsou opět vzdáleny o 180° . Jsou to obě polohy, ve kterých svírají průsečnice rovin Braggovy reflexe a povrchové plochy krystalu s osou spektrografu úhel 90° . V těchto polohách jsou chyby při přesném určení mřížkové konstanty největší. Snímek a představuje reflexi v jedné z těchto poloh, snímek b ve druhé poloze (při posunutí filmem) a snímek c reflexi a i b současně při nepohnutém filmu. Při tom byla z krystalu nehybnou clonkou vymezena vždy stejně velká reflektční plocha. Jak patrně ze snímku c oba obrazy se dokonale kryjí, takže se nemůže jednat o chybnou justaci do osy (v případě chýbné justace by se oba obrazy dubletu křížily). Obrazy dubletu se v obou případech navzájem vertikálně (ve směru osy spektrografu) posunou, jak je rovněž dobře patrné z reprodukcí snímků a i b. Ve směru kratších vlnových délek se sice také posunou, ale tento posuv je pro obě polohy stejně velký a ve stejném smyslu.

Podrobným experimentálním propracováním nalezených podmínek pro přesné měření mřížkové konstanty takových krystalů se zabývá R. Faus na krystalu kamenné soli, který docílil přesnosti úhlového odečtení 0,1 vteřiny, takže bude moci spolehlivě verifikovati i nepatrné odklony Braggových reflektčních rovin od povrchové plochy krystalu.

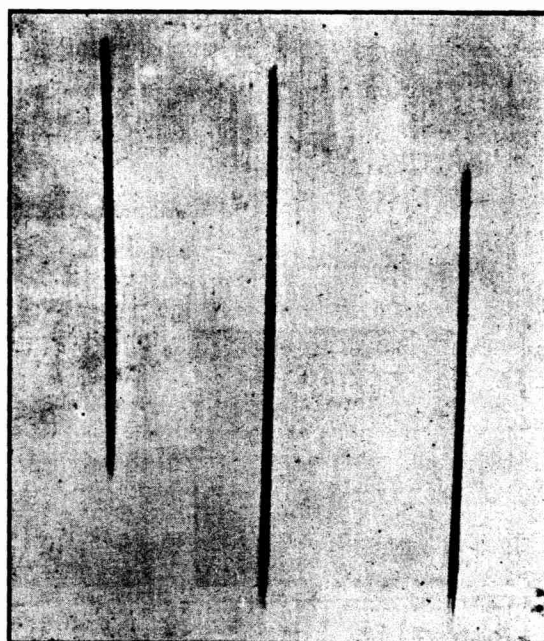
Při fokusačních metodách a při analýze nejedná se zase ani tak o posuvy čar jako o vznik „nedovolených reflexí“, které mohou vésti k mylným závěrům.

uvedeno, je jasné patrná odlišná intenzita u obou snímků. V tomto případě, na rozdíl od předchozího, je však změna intenzity způsobena tím, že v jedné poloze krystalu probíhá reflektovaný paprsek delší dráhu v prostředí krystalu než ve druhém.

Že se nejedná v tomto případě o chybnou justaci do osy spektrografu, dokazují snímky v obr. 7. Jsou to opět reflexe dubletu $\text{Cu } K\alpha_{12}$ na sfaleritu ve dvou polohách odchýlených od

Je na snadě, že při větších odklonech povrchové plochy krystalu od Braggovy reflekční plochy se mohou objeviti za určitých postavení krystalu reflexe paprsků X také od jiných krystalografických ploch než roviny štěpné. Tak na př. za určitých postavení krystalu sfaleritu najustovaného do osy plochou (110) lze obdržeti reflexe od plochy (111). Tyto plochy svírají navzájem

a b c



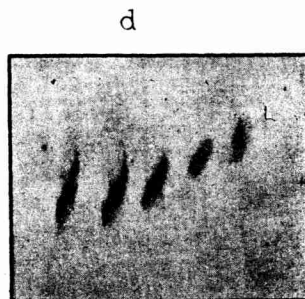
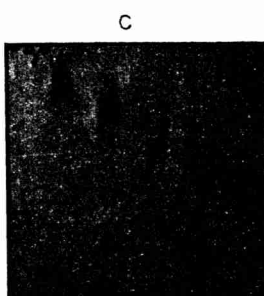
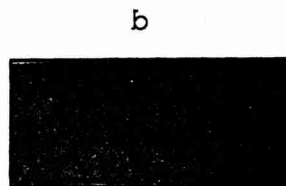
Obr. 7.

Reflexe dubletu $\text{Cu } K\alpha_1\alpha_2$ na krystalu sfaleritu ($\gamma = 3^\circ$) ve dvou různých nastaveních $\beta = 90^\circ$ a $\beta = 270^\circ$.

úhel $35^\circ 16'$, při čemž jak známo, plocha (110) dává jen reflexe sudých řádů, kdežto plocha (111) dává reflexe všechny. Tento případ je analogií svrchu uvedeného případu pro velká γ .

V těchto případech se reflexe od plochy (111) objeví za určitého postavení kol osy spektrografu a za určitého postavení kol osy kolmé k ose spektrografu a povrchové rovině krystalu, při nichž je právě splněna pro dopadající paprsky a plochu (111) Braggova podmínka. Čáry takto vzniklé jsou pak ovšem skutečné a mohou vésti k záměně při identifikaci jednotlivých čar. Rovněž posuvy čar v tomto případě velkého γ jsou daleko větší, jak je zřejmo

z obr. 8, kde jsou reprodukovány snímky reflexe dubletu $\text{Cu } K\alpha_1\alpha_2$ v prvním řádu na ploše (111). V obr. 8 jsou reprodukovány 3 polohy tohoto dubletu při konstantním úhlu dopadu α a třech různých nastaveních kol osy kolmé k ose spektrografu a k povrchové ploše krystalu.



Obr. 8.

Obr. 9.

Obr. 8. Posuv dubletu $\text{Cu } K\alpha_1\alpha_2$ reflektovaného na ploše (111) sfaleritu při třech různých nastaveních krystalu.

Obr. 9. Různý charakter reflexí dubletu $\text{Cu } K\alpha_1\alpha_2$ v I. a III. řádu na ploše (111) vadného krystalu sfaleritu při různých nastaveních krystalu.

Tyto reflexe mohou mít vzhled zcela normálních ostře definovaných čar, jako v obr. 9a, který představuje také reflexi prvního řádu dubletu $\text{Cu } K\alpha_1\alpha_2$ od této plochy, ale při jiném nastavení krystalu, nebo v obr. 9b, kde je reprodukován snímek třetího řádu také na ploše (111).

V jiných polohách naopak ztrácejí tyto reflexe charakter čar a podobají se „duchům“ vyskytujícím se u optických spekter, jak patrně z obr. 9c a 9b, na nichž je reprodukováno několik snímků prvního řádu dubletu $\text{Cu } K\alpha_1\alpha_2$ na ploše (111) v jiných nastaveních