หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทที่ 3

การขาดหายไปของจุดสะท้อนเนื่องจากหมู่สมมาตร

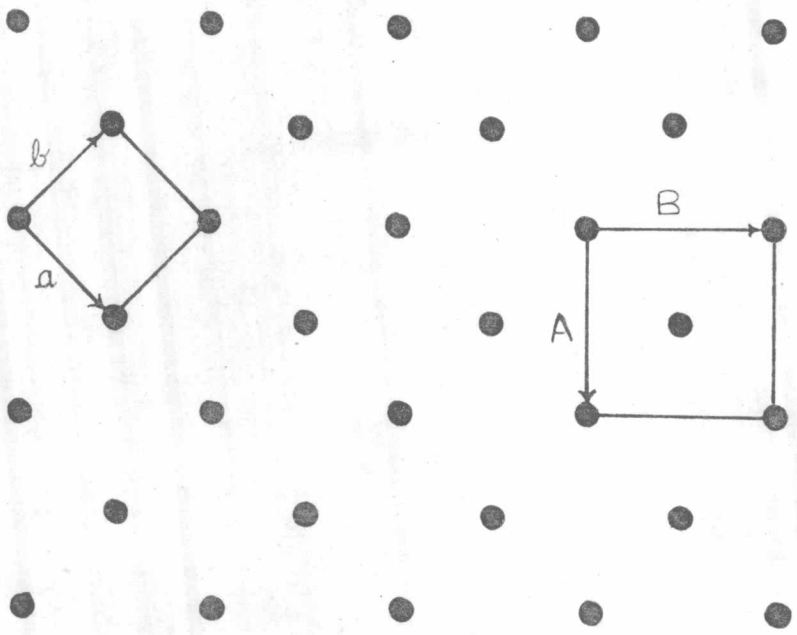
ผลึกทุกชนิดจะถูกแบ่งเป็นกลุ่มตามหมู่สมมาตร[6] ซึ่งมีอยู่ด้วยกันทั้งหมด 230 กลุ่ม โดยที่หมู่สมมาตรนี้เกิดจากการรวมกัน (combination) ของบราเวสแลททิส (Bravias lattices) กับกลุ่มจุด (point groups) ในบทนี้ จะได้กล่าวถึงที่มาของเงื่อนไขของการเกิด หรือการขาดหายไปของจุดสะท้อน ซึ่งสืบเนื่องมาจากหมู่สมมาตร สำหรับจุดสะท้อนนี้จะสมนัยกับชุดของระนาบในผลึก เช่น ระนาบ (hkℓ) สะท้อนรังสีเอ็กซ์ ก็จะเกิดจุดสะท้อน (hkℓ) บนฟิล์มที่นำมารับรังสีเอ็กซ์

ในหมู่สมมาตรทั้ง 230 กลุ่มนั้น จะประกอบด้วยแลททิสแบบต่าง ๆ แลททิสบางแบบเป็นแลททิสที่มีหน่วยเซลล์ซึ่งมีจุดแลททิสมากกว่า 1 จุด เรียกว่าแลททิสแบบนอนพริมิทีพ (non-primitive lattices) อันเป็นสาเหตุหนึ่งที่ทำให้เกิดเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อน และนอกจากนี้ ยังมีสาเหตุเนื่องจากองค์สมมาตรบางอย่างอีก คือระนาบเลื่อน (glide planes) และแกนเกลียว (screw axes)

3.1 การขาดหายไปเนื่องจากแลททิสแบบนอนพริมิทีพ[11]

ในบทที่ 2 ตอนที่กล่าวถึงเงื่อนไขของลาวอีนั้น แลททิสที่ใช้หาเงื่อนไขดังกล่าว มีหน่วยเซลล์แบบพริมิทีพ (primitive, P) ดังนั้นในกรณีที่แลททิสเป็นแบบนอนพริมิทีพ เช่น แบบ A (A - centered lattice), แบบ B (B - centered lattice), แบบ C (C - centered lattice), แบบ I (body centered lattice), แบบ F (face - centered lattice) และแบบ R (rhombohedral centering) จะเกิดเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อน

เงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อนนี้หาได้จากความสัมพันธ์ระหว่างหน่วยเซลล์แบบนอนพริมิทีพ กับแบบพริมิทีพ ในแลททิสเดียวกัน เช่น แลททิสในรูป 3-1 ซึ่งแสดงหน่วยเซลล์สองมิติไว้สองแบบ แบบแรกทางซ้ายมือ เป็นแบบพริมิทีพ มี a, b เป็นมิติของเซลล์ และแบบที่สองเป็นแบบนอนพริมิทีพ มี A, B เป็นมิติของเซลล์



รูป 3-1 แสดงหน่วยเซลล์แบบพริมิทีพและแบบนอนพริมิทีพ ในแลททิสเดียวกัน

จากรูป 3-1 ได้ว่า

$$A = a - b \qquad (3\text{-}1)$$

และ

$$B = a + b$$

ซึ่งจะได้ว่า

$$\begin{pmatrix} 1 & \bar{1} \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

เป็นแมทริกของการทรานส์ฟอร์ม ของมิติของเซลล์ทั้ง 2 แบบ แต่เนื่องจากดัชนีมิลเลอร์และมิติของเซลล์มีการเปลี่ยนแปลงตามกัน หรือมีแมทริกของการทรานส์ฟอร์มอันเดียวกัน ดังนั้นจะได้ว่า

$$\left.\begin{aligned} H &= h - k \\ \text{และ} \quad K &= h + k \end{aligned}\right\} \qquad (3\text{-}2)$$

โดยที่ h, k เป็นดัชนีของหน่วยเซลล์แบบพริมิทีพ

และ H, K เป็นดัชนีของหน่วยเซลล์แบบนอนพริมิทีพ

จากสมการ (3-2) ได้ว่า

$$H + K = 2h \qquad (3\text{-}3)$$

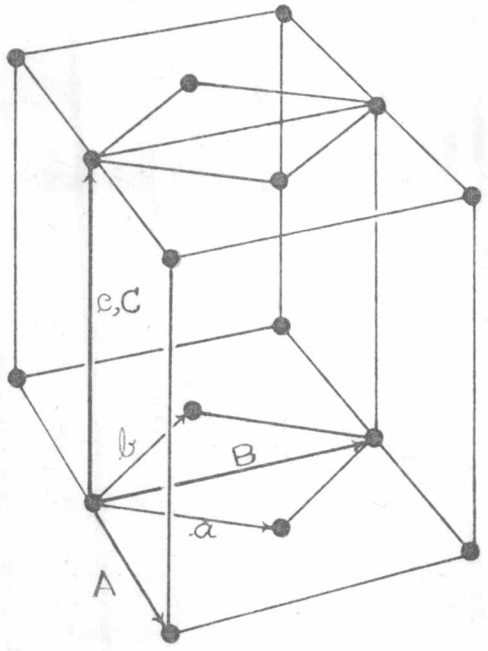
เนื่องจาก h ต้องเป็นเลขจำนวนเต็ม จึงจะเกิดการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ตามเงื่อนไขของลาวอี ดังนั้น

$$H + K = \text{เลขคู่}$$

เท่านั้น จึงจะเกิดการสะท้อนของรังสีเอ็กซ์ และในกรณีที่ H + K เป็นเลขคี่ ก็จะไม่เกิดการสะท้อน H + K เท่ากับเลขคู่นี้ เรียกว่าเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อน ส่วน H + K เท่ากับเลขคี่ เรียกว่าเงื่อนไขของการขาดหายไปของจุดสะท้อน

จากที่กล่าวมาทั้งหมดนี้ ได้แสดงให้เห็นว่าแลททิสแบบนอนพริมิทีพทำให้เกิดเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อน และต่อจากนี้ไป จะได้แสดงการหาเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อนสำหรับแลททิสแบบนอนพริมิทีพแบบต่าง ๆ

3.1.1 <u>แลททิสแบบ A, แบบ B และแบบ C</u> แลททิสทั้ง 3 แบบนี้ มีหน่วยเซลล์แบบเดียวกัน คือมีจุดแลททิสอยู่ตรงกลางของระนาบปิดหัวท้ายคู่ใดคู่หนึ่ง ของหน่วยเซลล์ แลททิสแบบ A, แบบ B และแบบ C จะมีจุดแลททิสอยู่ตรงกลางระนาบ BC, ระนาบ AC และระนาบ AB ตามลำดับ ตัวอย่าง เช่น รูป 3-2 แสดงแลททิสแบบ C



รูป 3-2 แสดงแลททิสแบบ C ซึ่งได้แสดงหน่วยเซลล์แบบพริมิทีฟไว้ด้วย

จากรูป 3-2 ได้ว่า

$$\left.\begin{aligned} A &= a - b \\ \text{และ} \quad B &= a + b \\ \text{และ} \quad C &= c \end{aligned}\right\} \qquad (3\text{-}4)$$

ซึ่งอาจเขียนความสัมพันธ์ของดัชนีของหน่วยเซลล์ทั้งสองแบบ ได้ดังนี้

$$\left.\begin{aligned} H &= h - k \\ \text{และ} \quad K &= h + k \end{aligned}\right\} \qquad (3\text{-}5)$$

และ $L = \ell$

จากสมการ (3-5) ได้ว่า

$$H + K = 2h$$

หรือ $H + K =$ เลขคู่ (3-6)

นั่นคือ ถ้าผลึกใดมีแลททิสแบบ C ผลึกนั้นก็จะมีเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อนสำหรับจุดสะท้อน (HKL) คือ H + K เท่ากับเลขคู่

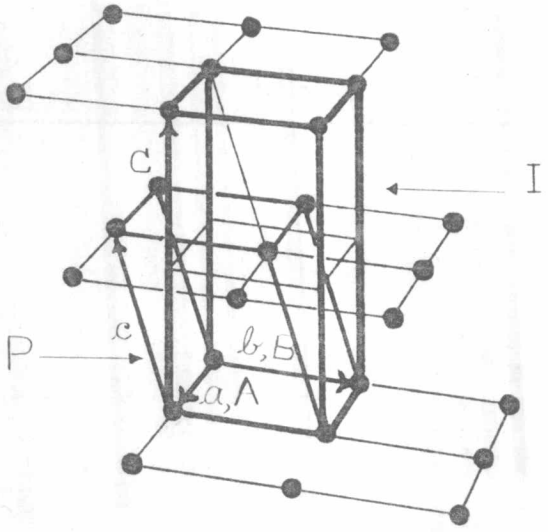
ในทำนองเดียวกัน แลททิสแบบ B และแบบ A จะมีเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อนดังนี้ คือ

$H + L =$ เลขคู่

และ $K + L =$ เลขคู่

ตามลำดับ

3.1.2 <u>แลททิสแบบ I</u> หน่วยเซลล์ของแลททิสแบบ I จะมีจุดแลททิสอีกหนึ่งจุดอยู่ตรงกลางของหน่วยเซลล์ ดังรูป 3-3



รูป 3-3 แสดงแลททิสแบบ I ซึ่งแสดงหน่วยเซลล์แบบพริมิทีพไว้ด้วย

จากรูป 3-3 ได้ว่า

$$\left.\begin{aligned} A &= a \\ \text{และ} \quad B &= b \\ \text{และ} \quad C &= a + b + 2c \end{aligned}\right\} \qquad (3\text{-}7)$$

ซึ่งอาจเขียนความสัมพันธ์ของดัชนีของหน่วยเซลล์ทั้งสองแบบ ได้ดังนี้

$$\left.\begin{aligned} H &= h \\ \text{และ} \quad K &= k \\ \text{และ} \quad L &= h + k + 2\ell \end{aligned}\right\} \qquad (3\text{-}8)$$

จากสมการ (3-8) ได้ว่า

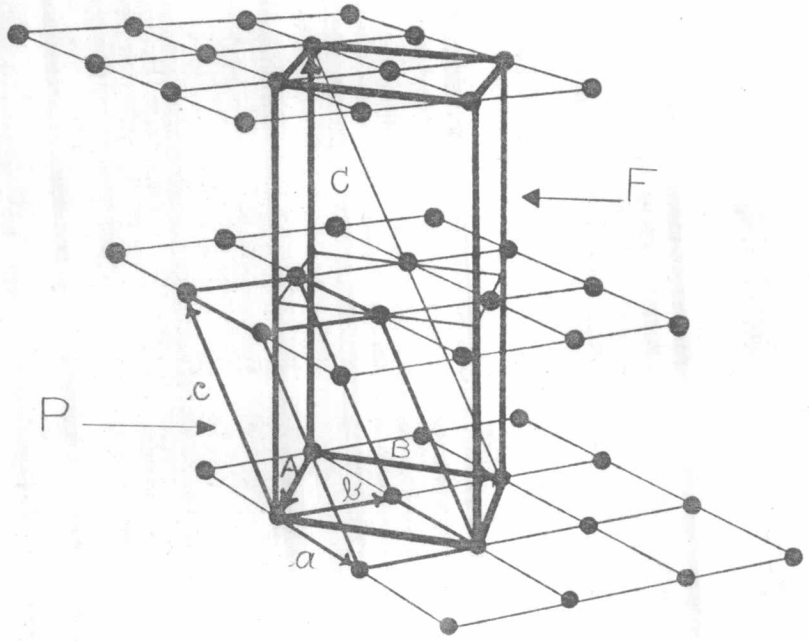
$$H + K + L = 2(h + k + \ell)$$

หรือ

$$H + K + L = \text{เลขคู่} \qquad (3\text{-}9)$$

สมการ (3-9) นี้ คือเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อน สำหรับแลททิสแบบ I

3.1.3 <u>แลททิสแบบ F</u> หน่วยเซลล์ของแลททิสแบบ F จะมีจุดแลททิสอยู่ตรงกลางของทุกระนาบที่ปิดล้อมหน่วยเซลล์ ดังรูป 3-4



รูป 3-4 แสดงแลททิสแบบ F ซึ่งแสดงหน่วยเซลล์แบบพริมิทีฟไว้ด้วย

จากรูป 3-4 ได้ว่า

$$\left.\begin{aligned} A &= a - b \\ \text{และ}\quad B &= a + b \\ \text{และ}\quad C &= a + b + 2c \end{aligned}\right\} \qquad (3\text{-}10)$$

ซึ่งอาจเขียนความสัมพันธ์ของหน่วยเซลล์ทั้งสองแบบ ได้ดังนี้

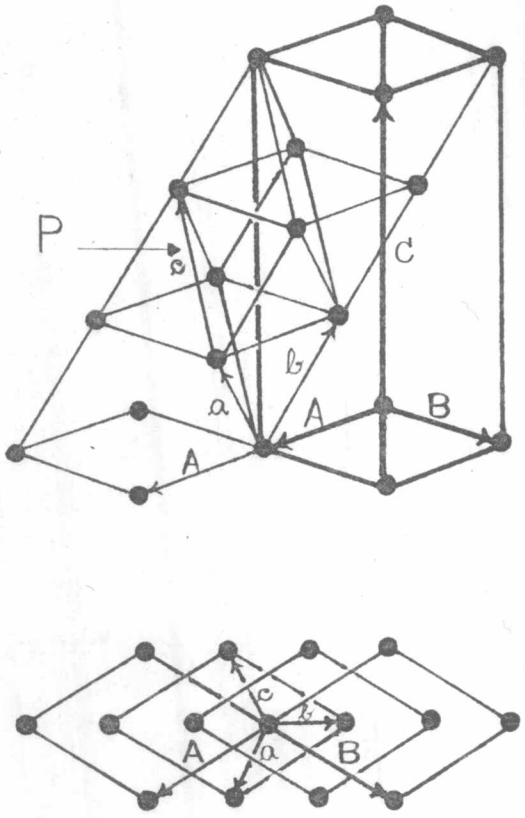
$$\left.\begin{aligned} H &= h - k \\ \text{และ}\quad K &= h + k \\ \text{และ}\quad L &= h + k + 2\ell \end{aligned}\right\} \qquad (3\text{-}11)$$

จากสมการ (3-11) ได้ว่า

$$\left.\begin{aligned} H + K &= 2h &&= \text{เลขคู่} \\ \text{และ}\quad H + L &= 2(h + \ell) &&= \text{เลขคู่} \\ \text{และ}\quad K + L &= 2(h + k + \ell) &&= \text{เลขคู่} \end{aligned}\right\} \qquad (3\text{-}12)$$

สมการ (3-12) นี้ คือเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อน สำหรับแลททิสแบบ F

3.1.4 <u>แลททิสแบบ R</u> ในแลททิสแบบ R จะเลือกหน่วยเซลล์ได้ 2 แบบ คือแบบพริมิทีพ มีหน่วยเซลล์ระบบรอมบอฮีดรอล และมีค่าพารามิเตอร์ตามนี้ คือ $a = b = c$ และ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^{\circ}$ ส่วนอีกแบบหนึ่งเป็นแบบนอนพริมิทีพ มีหน่วยเซลล์ระบบเฮกแซกโกนอล และมีค่าพารามิเตอร์ตามนี้ คือ $A = B \neq C$ และ $\alpha = \beta = 90^{\circ}$; $\gamma = 120^{\circ}$ รูป 3-5 เป็นการเลือกหน่วยเซลล์ระบบเฮกแซกโกนอลในแลททิสแบบ R



รูป 3-5 แสดงแลททิสแบบ R ซึ่งแสดงหน่วยเซลล์ระบบเฮกแซกโกนอลไว้ด้วย

จากรูป 3-5 ได้ว่า

$$\left.\begin{aligned} A &= a - b \\ \text{และ}\quad B &= b - c \\ \text{และ}\quad C &= a + b + c \end{aligned}\right\} \qquad (3\text{-}13)$$

ซึ่งอาจเขียนความสัมพันธ์ของดัชนีของหน่วยเซลล์ทั้งสองแบบ ได้ดังนี้

$$\left.\begin{aligned} H &= h - k \\ \text{และ} \quad K &= k - \ell \\ \text{และ} \quad L &= h + k + \ell \end{aligned}\right\} \qquad (3\text{-}14)$$

จากสมการ (3-14) ได้ว่า

$$-H + K + L = 3k \qquad (3.15)$$

ซึ่งมีความหมายว่า ถ้าเลือกแกนของหน่วยเซลล์ระบบเฮกแซกโกนอล (แกน C) ในแลททิสแบบ R เป็นแกนหมุนของผลึก จะเกิดเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อนตามสมการ (3-15) สำหรับหน่วยเซลล์แบบรอมบอฮีดรอล ซึ่งเป็นหน่วยเซลล์แบบพริมิทีพจะไม่มีเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อน

ในทำนองเดียวกัน ถ้ามีแลททิสแบบ H (hexagonal centering) ซึ่งเป็นแลททิสที่เลือกหน่วยเซลล์ได้ 2 แบบ คือแบบพริมิทีพ มีหน่วยเซลล์ระบบเฮกแซกโกนอล และมีค่าพารามิเตอร์ตามนี้ คือ $a = b \neq c$ และ $\alpha = \beta = 90^{\circ}$; $\gamma = 120^{\circ}$ ส่วนอีกแบบหนึ่งเป็นแบบนอนพริมิทีพ มีหน่วยเซลล์ระบบรอมบอฮีดรอล และมีค่าพารามิเตอร์ตามนี้ คือ $A = B = C$ และ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^{\circ}$ เมื่อเลือกหน่วยเซลล์แบบรอมบอฮีดรอล ในแลททิสแบบ H นี้ จะเกิดเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อน ดังนี้ คือ

$$H + K + L = 3\ell \qquad (3\text{-}16)$$

แต่ในหมู่สมมาตรทั้ง 230 กลุ่ม ใน International Table Vol I ไม่มีแลททิสแบบ H นี้

3.2 การขาดหายไปเนื่องจากระนาบเลื่อน (11)

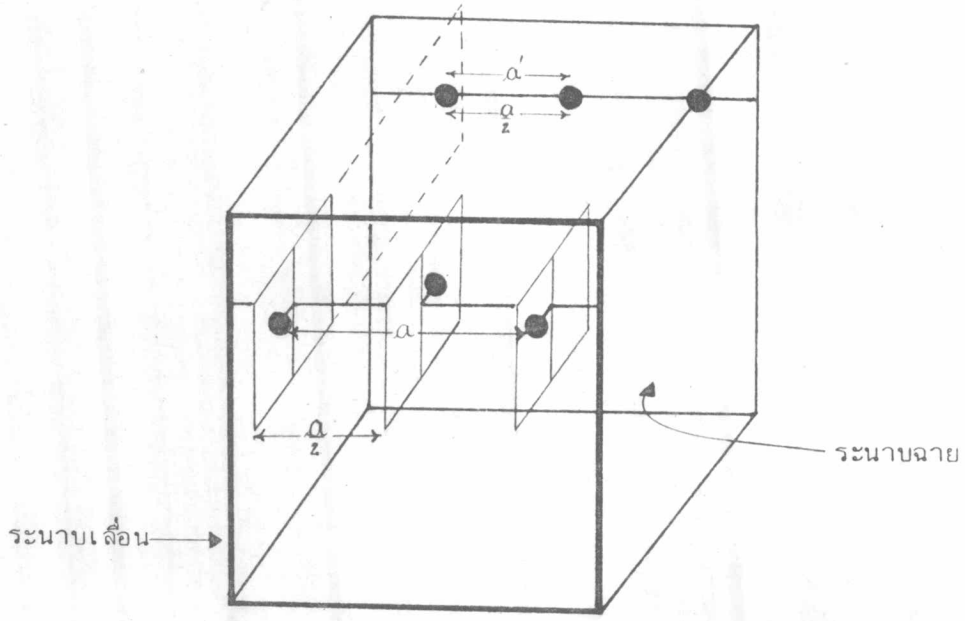
การปฏิบัติด้วยองค์สมมาตรแบบระนาบเลื่อน มีการปฏิบัติ 2 อย่างรวมกัน โดยอย่างแรกจะเป็นการเคลื่อนที่ของจุดแลททิสหรืออะตอมขนานไปกับระนาบเลื่อน ซึ่งการเคลื่อนที่หรือการเลื่อนนี้ยังแบ่งออกเป็นชนิดต่าง ๆ อีก ดังแสดงไว้ในตาราง 3-1 และอย่างที่สองเป็นการสะท้อนของจุดแลททิสกับระนาบเลื่อน

ตาราง 3-1 แสดงชนิดของการเลื่อนแบบต่าง ๆ

ชนิดของการเลื่อน	สัญญลักษณ์	ระยะในการเลื่อน
ตามแกน (axial glide)	a	a/2
	b	b/2
	c	c/2
ตามเส้นทแยงมุม (diagonal glide)	n	(a+b)/2 หรือ (a+c)/2 หรือ (b+c)/2
แบบเพชร (diamond glide)	d	(a+b)/4 หรือ (a+c)/4 หรือ (b+c)/4

ในการพิจารณาถึงสาเหตุที่ระนาบเลื่อน ทำให้เกิดเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อน อาจพิจารณาจากรูป 3-6 ซึ่งแสดงการปฏิบัติของระนาบเลื่อนที่มีการเลื่อนตามแกน a และจากความคิดของแบรกก์ ซึ่งเขาคิดว่ารังสีเอ็กซ์สะท้อนกับชุดของระนาบของอะตอม ดังนั้นชุดระนาบของอะตอมหรือชุดระนาบการสะท้อนที่ตั้งฉากกับแกน a และมีระยะระหว่างระนาบ (d) เท่ากับ $\frac{a}{2}$ จะสอดคล้องกับการสะท้อนของรังสีเอ็กซ์ แทนชุดระนาบการสะท้อน (100) ซึ่งมีระยะระหว่างระนาบเท่ากับ a เสมือนว่า มิติของเซลล์ที่สอดคล้องกับการสะท้อนของรังสีเอ็กซ์ จะมีค่าเป็น a' โดยที่

$$a = 2a' \qquad (3\text{-}17)$$

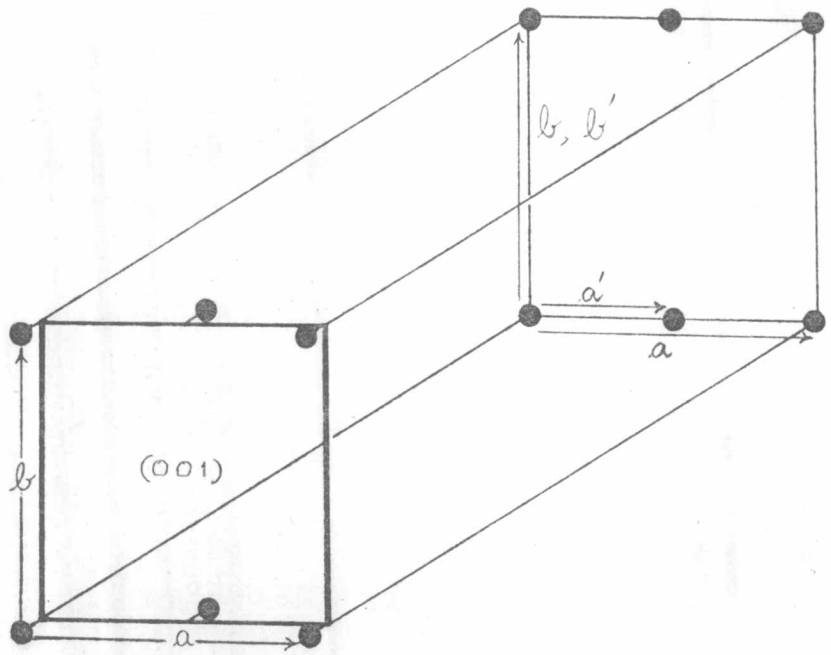


รูป 3-6 แสดงการปฏิบัติของระนาบเลื่อนที่มีการเลื่อนตามแกน a ใน 1 มิติ

จะเป็นสาเหตุทำให้เกิดเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อน ซึ่งรายละเอียดจะปรากฏอยู่ในการหาเงื่อนไขของการสะท้อน เนื่องจากระนาบเลื่อนที่มีการเลื่อนแบบต่าง ๆ

ค่ามิติของเซลล์ใหม่ (a') นี้อาจหาได้จากภาพฉายบนระนาบที่ขนานกับระนาบเลื่อน สำหรับระนาบการสะท้อนที่ไม่ได้ตั้งฉากกับระนาบเลื่อน จะไม่มีผลดังกล่าวเกิดขึ้น คือ a ยังสอดคล้องกับการสะท้อนของรังสีเอ็กซ์

3.2.1 ระนาบเลื่อนที่มีการเลื่อนตามแกน รูป 3-7 กำหนดให้ ระนาบ (001) เป็นระนาบเลื่อนที่มีการเลื่อนตามแกน a



รูป 3-7 แสดงการปฏิบัติของระนาบเลื่อนที่มีการเลื่อนตามแกน a ใน 2 มิติ

จากภาพฉายบนระนาบที่ขนานกับระนาบเลื่อน ได้ว่า

$$\left.\begin{aligned} a &= 2a' \\ \text{และ} \quad b &= b' \end{aligned}\right\} \qquad (3\text{-}18)$$

ซึ่งจะได้ว่า $\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

เป็นแมทริกของการทรานส์ฟอร์มของมิติของเซลล์ทั้งสองแบบ ดังนั้นอาจเขียนความสัมพันธ์ระหว่างดัชนีของหน่วยเซลล์ทั้งสองแบบ ได้ดังนี้ คือ

$$\begin{aligned} h &= 2h' \\ \text{และ} \quad k &= k' \end{aligned} \tag{3-19}$$

จากสมการ (3-19) ได้เงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อน คือ

$$h = 2h'$$

หรือ $$h = \text{เลขคู่} \tag{3-20}$$

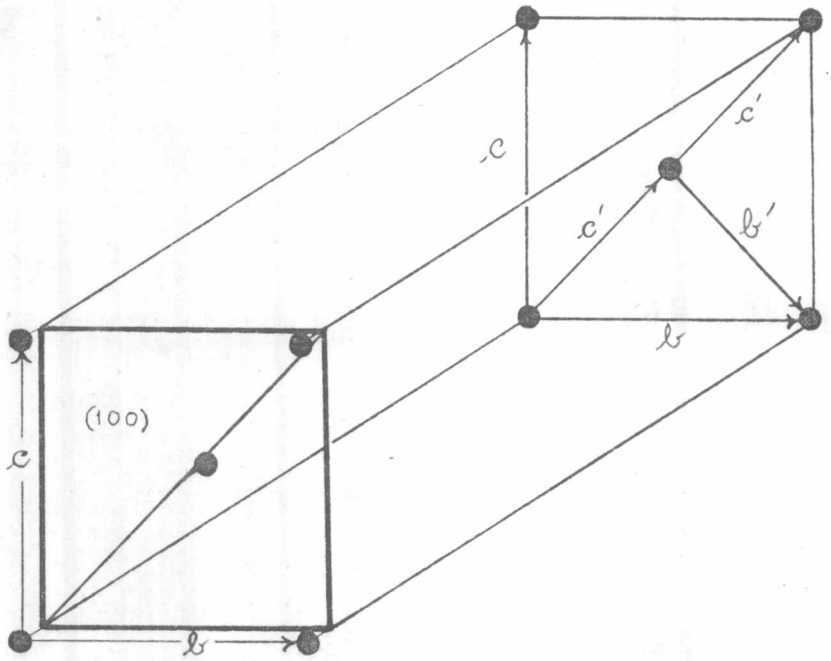
ซึ่งมีความหมายว่า ถ้ามีระนาบเลื่อน (001) ที่มีการเลื่อนตามแกน a เป็นองค์สมมาตรของผลึกใด ผลึกนั้นก็จะมีเงื่อนไขสำหรับจุดสะท้อนที่มีดัชนี (hko) เพราะจุดสะท้อนเหล่านี้สมนัยกับระนาบที่ตั้งฉากกับระนาบ (001) และเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อน คือ h ต้องเท่ากับเลขคู่

ในกรณีที่มีการเลื่อนตามแกน b หรือแกน c ก็จะหาเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อนได้ในทำนองเดียวกัน ซึ่งเงื่อนไขต่าง ๆ ได้แสดงไว้ในตาราง 3-2

3.2.2 <u>ระนาบเลื่อนที่มีการเลื่อนแบบ n</u> รูป 3-8 กำหนดให้ ระนาบ (100) เป็นระนาบเลื่อนที่มีการเลื่อนแบบ n และมีระยะในการเลื่อนเท่ากับ (b+c)/2 (ซึ่งอาจเรียกว่าการเลื่อนแบบ n ตั้งฉากกับแกน a)

จากภาพฉายบนระนาบที่ขนานกับระนาบเลื่อน ได้ว่า

$$\begin{aligned} b &= b' + c' \\ \text{และ} \quad c &= -b' + c' \end{aligned} \tag{3-21}$$



รูป 3-8 แสดงการปฏิบัติของระนาบเลื่อนที่มีการเลื่อนแบบ n

ซึ่งอาจเขียนความสัมพันธ์ของดัชนีของหน่วยเซลล์ทั้งสองแบบ ได้ดังนี้

$$\left.\begin{aligned} k &= k' + \ell' \\ \ell &= -k' + \ell' \end{aligned}\right\} \qquad (3\text{-}22)$$

จากสมการ (3-22) ได้เงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อน คือ

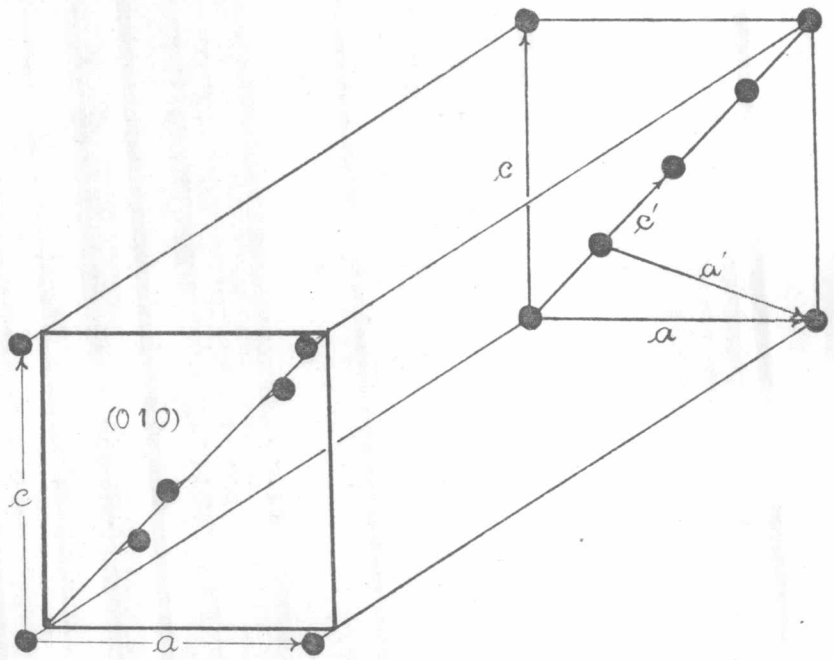
$$k + \ell = 2\ell'$$

หรือ $$k + \ell = \text{เลขคู่} \qquad (3\text{-}23)$$

ซึ่งมีความหมายว่า ถ้ามีระนาบเลื่อน (100) ที่มีการเลื่อนแบบ n เป็นองค์สมมาตรของผลึกใด ผลึกนั้นก็จะมีเงื่อนไขสำหรับจุดสะท้อนที่มีดัชนี (okℓ) และเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อน คือ k + ℓ ต้องเท่ากับเลขคู่

ในกรณีที่มีการเลื่อนแบบ n ตั้งฉากกับแกนอื่น ก็จะสามารถหาเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อนได้ ในทำนองเดียวกัน ซึ่งเงื่อนไขต่าง ๆ ได้แสดงไว้ในตาราง 3-2

3.2.3 <u>ระนาบเลื่อนที่มีการเลื่อนแบบ d</u> รูป 3-9 กำหนดให้ ระนาบ (010) เป็นระนาบเลื่อนที่มีการเลื่อนแบบ d และมีระยะในการเลื่อนเท่ากับ (a + c)/4 (ซึ่งอาจเรียกว่าการเลื่อนแบบ d ตั้งฉากกับแกน b)



รูป 3-9 แสดงการปฏิบัติของระนาบเลื่อนที่มีการเลื่อนแบบ d

จากภาพฉายบนระนาบที่ขนานกับระนาบเลื่อน ได้ว่า

$$\left.\begin{aligned} a &= a' + c' \\ \text{และ} \quad c &= -a' + 3c' \end{aligned}\right\} \qquad (3-24)$$

ดังนั้นอาจเขียนความสัมพันธ์ของดัชนีของหน่วยเซลล์ทั้งสองแบบ ได้ดังนี้ คือ

$$\left.\begin{aligned} h &= h' + \ell' \\ \ell &= -h' + 3\ell' \end{aligned}\right\} \qquad (3-25)$$

จากสมการ (3-25) ได้เงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อน คือ

$$h + \ell = 4\ell' \qquad (3-26)$$

ซึ่งมีความหมายว่า ถ้ามีระนาบเลื่อน (010) ที่มีการเลื่อนแบบ d เป็นองค์สมมาตรของผลึกใด ผลึกนั้นก็จะมีเงื่อนไขสำหรับจุดสะท้อนที่มีดัชนี $(h0\ell)$ และเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อน คือ ค่าของ $h + \ell$ ต้องสามารถหารด้วย 4 ได้ลงตัว

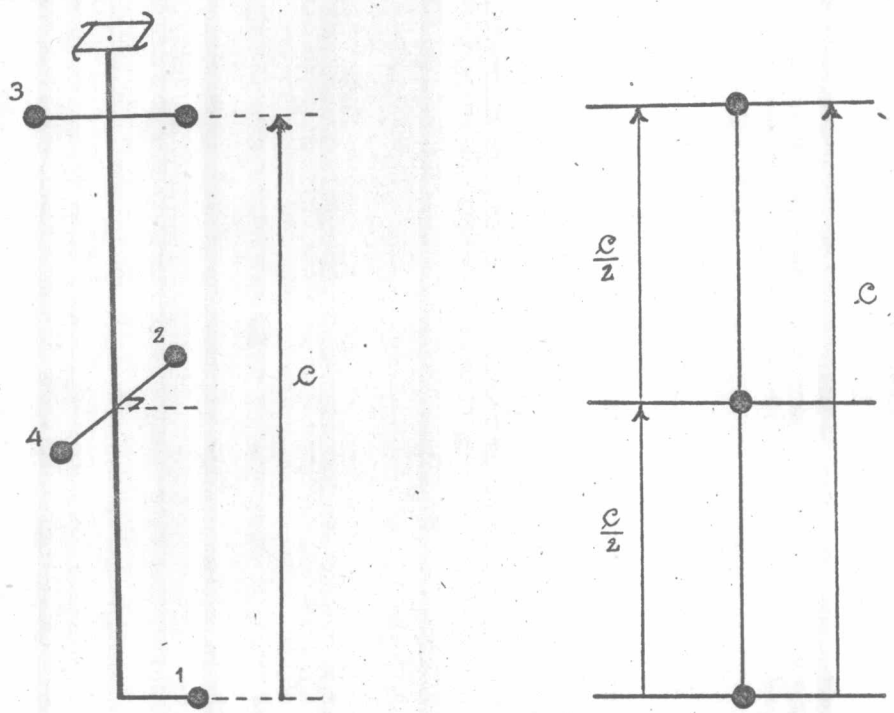
ในกรณีที่มีการเลื่อนแบบ d ตั้งฉากกับแกนอื่น ก็จะสามารถหาเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อนได้ ในทำนองเดียวกัน ซึ่งเงื่อนไขต่าง ๆ ได้แสดงไว้ในตาราง 3-2

ตาราง 3-2 แสดงเงื่อนไขการเกิดจุดสะท้อนเนื่องจากระนาบเลื่อน

ระนาบเลื่อน	จุดสะท้อน	เงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อน	สัญญลักษณ์
(100)	(ckℓ)	$k = 2n$	b
		$\ell = 2n$	c
		$k + \ell = 2n$	n
		$k + \ell = 4n$	d
(010)	(hoℓ)	$h = 2n$	a
		$\ell = 2n$	c
		$h + \ell = 2n$	n
		$h + \ell = 4n$	d
(001)	(hko)	$h = 2n$	a
		$k = 2n$	b
		$h + k = 2n$	n
		$h + k = 4n$	d

3.3 การขาดหายไปเนื่องจากแกนเกลียว (6, 11)

องค์สมมาตรแบบแกนเกลียว มีสัญญลักษณ์ดังนี้ คือ n_m ซึ่งมีความหมายว่า จุดแลททิสหรืออะตอมที่ถูกปฏิบัติด้วยแกนเกลียว จะหมุนรอบแกนเกลียวด้วยมุม $\frac{360^o}{n}$ และมีการเคลื่อนที่ขนานกับแกนเกลียวด้วยระยะ $\frac{m}{n}$ ของมิติของหน่วยเซลล์ที่ขนานกับแกนเกลียว เช่น องค์สมมาตร 4_2 จะมีการปฏิบัติ ดังรูป 3-10



รูป 3-10 แสดงการปฏิบัติของแกนเกลียว 4_2 โดยที่แกนเกลียวนี้ขนานกับแกน c

จากรูป 3-10 ได้ว่า ชุดระนาบการสะท้อนที่ตั้งฉากกับแกน c และมีระยะระหว่างระนาบเท่ากับ $\frac{c}{2}$ จะสอดคล้องกับการสะท้อนของรังสีเอ็กซ์ แทนชุดระนาบการสะท้อน (001) เสมือนว่า มิติของเซลล์ที่สอดคล้องกับการสะท้อนของรังสีเอ็กซ์ จะมีค่าเป็น c' โดยที่

$$c = 2c' \tag{3-27}$$

ซึ่งอาจเขียนความสัมพันธ์ของดัชนีของหน่วยเซลล์ทั้งสองแบบ ได้ดังนี้ คือ

$$\ell = 2\ell'$$

หรือ $$\ell = \text{เลขคู่} \tag{3-28}$$

สมการ (3-28) นี้ เป็นเงื่อนไขการเกิดจุดสะท้อน ซึ่งมีความหมายว่า ถ้าผลึกใดมีองค์ลมมาตรแกนเกลียว 4_2 ขนานกับแกน c ผลึกนั้นก็จะมีเงื่อนไขสำหรับจุดสะท้อน (00ℓ) และเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อน คือ ℓ ต้องเท่ากับเลขคู่

ในกรณีของแกนเกลียวชนิดอื่น ก็จะสามารถหาเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อนได้ ในทำนองเดียวกัน ซึ่งเงื่อนไขต่าง ๆ ได้แสดงไว้ในตาราง 3-3

ตาราง 3-3 แสดงเงื่อนไขการเกิดจุดสะท้อนเนื่องจากแกนเกลียว

ตามแกน	จุดสะท้อน	เงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อน	องค์สมมาตร
a	(hoo)	h = 2n	2_1 , 4_2
		h = 4n	4_1 , 4_3
b	(oko)	k = 2n	2_1 , 4_2
		k = 4n	4_1 , 4_3
c	(ooℓ)	ℓ = 2n	2_1 , 4_1, 6_3
		ℓ = 3n	3_1, 3_2, 6_2, 6_4
		ℓ = 4n	4_1 , 4_3
		ℓ = 6n	6_1

ทั้งหมดที่ได้กล่าวมานี้ เป็นเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อนหรือเงื่อนไขของการขาดหายไปของจุดสะท้อน ซึ่งเกิดจากแลททิสแบบนอนพริมิทีพ องค์สมมาตรแบบระนาบเลื่อน และแกนเกลียว ถ้าหมู่สมมาตรใดมีองค์สมมาตรหรือแลททิสดังกล่าว หมู่สมมาตรนั้นจะมีเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อน และในทำนองกลับกัน เมื่อทราบเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อน จากการทดลองก็จะทราบว่า ผลึกที่กำลังศึกษาอยู่มีหมู่สมมาตรเป็นกลุ่มใด สำหรับเงื่อนไขอย่างละเอียดของหมู่สมมาตรทั้ง 230 กลุ่ม ดูได้จาก International Table Vol. I