وعلية فإن:

$$\vec{r}_j.\vec{G}=(s_j\vec{a}_1+t_j\vec{a}_2+u_j\vec{a}_3).(h\vec{g}_1+k\vec{g}_2+l\vec{g}_3)$$
$$\vec{r}_j.\vec{G}=2\pi(s_j h+t_j k+u_j l) \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(2.21)$$

وبالتعويض في المعادلة 2.20 نجد أن معامل البناء الذري:

$$SF=\sum f_j e^{2\pi i(s_j h+t_j k+u_j l)} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (2.22)$$

وعندما يكون هذا العامل يساوي صفرًا فلا نحصل على انعكاس في هذا الاتجاه، أي أن عامل البناء البلوري يمكن أن يُلغي بعض الانعكاسات المسموح بها باعتبار الفضاء البلوري المنتظم وحدَه.

ولو أخذنا، على سبيل المثال، بلورة من النوع bcc فإن الخلية الأولية فيها تشتمل على نقطتين وفي كل نقطة ذرة واحدة (كما هي الحال في فلز الصوديوم مثلاً). أما إحداثيات الذرتين فهي:

الذرة الأولى $(s_1,t_1,u_1)\equiv(0,0,0)$

الذرة الثانية $(s_2,t_2,u_2)=(\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2})$

وحيث أن الذرتين متشابهتان فإن $f_1=f_2$ ، وعليه فإن

$$SF=f\left(1+e^{i\pi(h+k+l)}\right)$$

وتكون قيمة SF تساوي صفرًا عندما يكون $e^{i\pi(h+k+l)}=-1$ ، ويحصل ذلك عندما يكون المجموع (h,k,l) يساوي عددًا فرديًا. اي

$$\begin{aligned} SF &= 0 \qquad (h+k+l)=\text{odd Integer} \\ &= 2f \qquad (h+k+l)=\text{even Integer.} \end{aligned}$$

أي أن طيف حيود أشعة اكس للبلورة bcc لا يشتمل على الانعكاسات $(100),(111),(300),(221)$ ، بل يشتمل على الانعكاسات $(110),(200),(222),(400)$.
هذا إذا كانت الذرتان متشابهتين، أما إذا كانتا مختلفتين (كما في بلورة CsCl) فإن جميع خطوط طيف الحيود تكون موجودة ولكن شدة هذه الخطوط متباينة:

$$SF = f_1 - f_2 \qquad (h+k+l) = odd.$$
$$SF = f_1 + f_2 \qquad (h+k+l) = even.$$

ولذا فإن النسبة بين شدة المجموعة الأولى إلى شدة المجموعة الثانية تساوي $\frac{|f_1 - f_2|^2}{|f_1 + f_2|^2}$. وفوق هذا الاختلاف في الشدة يضاف أيضًا تغير f التدريجي مع زاوية الحيود لكل خط من خطوط الطيف.

أما البلورة المكعبة البسيطة (sc) فإن الخلية الأولية لها تشتمل على نقطة واحدة، وعليه فإن $SF = fe^{2\pi i(0)} = f$ باعتبار بأن الذرة الواحدة موجودة في نقطة الأصل (0,0,0). وتكون جميع قيم h,k,l ممكنة وجميع الانعكاسات مسموح بها $(100),(110),(200),(111),(210),(211),(220),$ ......

وباستخدام قانون براغ $2d\sin\theta = \lambda$ نستطيع تحديد قيمة θ لكل انعكاس من الانعكاسات المسموح بها.

وللبلورات المكعبة يمكن إثبات أن:

$$d_{hkl}^2 = \frac{a^2}{\left(h^2 + k^2 + l^2\right)}$$

وبالتعويض في قانون براغ نجد أن

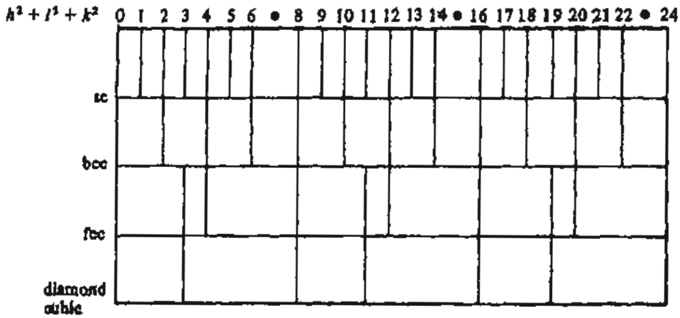
$$\sin^2\theta = \frac{\lambda^2}{4a^2}\left(h^2 + k^2 + l^2\right) \qquad (2.23)$$

وحيث أن h,k,l أعداد صحيحة فإن القيم الممكنة للمقدار $\left(h^2+k^2+l^2\right)$ تساوي

$$\left(h^2+k^2+l^2\right)=0,1,2,3,4,5,6 \qquad 8,9,10,11,12,13,14 \quad 16,17,18.....$$

(لاحظ غياب القيم ....,7,15,23)

واليك الشكل التالي (2.9) الذي يبين الانعكاسات الممكنة لكل نوع من أنواع البلورات المكعبة



شكل (2.9): الانعكاسات المسموح بها لكل نوع من أنواع البلورات المكعبة. لاحظ أن عدد هذه الانعكاسات يقل كلما زاد عدد الذرات في الخلية الأولية.

ومن المعادلة (2.23) يمكن إيجاد قيمة الزاوية لكل خط من خطوط طيف الحيود.

وكمثال آخر على بيان أهمية المعامل SF في تحديد الخطوط التي تظهر في طيف الحيود، نأخذ بلورة من النوع (fcc). وفي هذا النوع (fcc) تشتمل الخلية الأولية على أربع نقاط من نقاط الشبيكة، وفي كل نقطة ذرة من الذرات. ومواضع هذه الذرات الأربع هي:

j (رقم الذرة)	s	t	u
1	0	0	0
2	½	½	0
3	½	0	½
4	0	½	½

وبناء على ذلك فإن المعامل SF يساوي

$$SF = f\left(1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}\right)$$

عندما تكون h,k,l كلها فردية $= 4f$

أو كلها زوجية (مثلاً $(111),(200),(113),(220).....$)

عندما تكون h,k,l مختلطة من الأعداد $SF = 0$

الفردية والزوجية ($(100),(110),(211)........$)

هذا إذا كانت جميع الذرات في النقاط الأربعة متشابهة. أما إذا كانت نقاط الشبيكة مشغولة بذرات مختلفة، كما هي الحال في بلورات ملح الطعام NaCl، فإن المعامل SF يختلف بعض الشيء عما ذكر أعلاه. إذ تتألف شبيكة NaCl من شبيكتين من النوع fcc متداخلتين في كل منهما نوع واحد من الذرات وهما منزاحتان عن بعضهما بمقدار $\left(\frac{a}{2}\right)$. وعليه توجد أربع ذرات من Na في الخلية الأولية للشبيكة الأولى، وأربع ذرات من Cl في الخلية الأولية للشبيكة الثانية:

j (رقم الذرة)	s	t	u
1	0	0	0
2	½	½	0
3	½	0	½
4	0	½	½
5	½	½	½
6	½	0	0
7	0	½	0
8	0	0	½

وعليه فإن معامل البناء الذري يساوي

$$SF = f_1\left(1+e^{i\pi(h+k)}+e^{i\pi(h+l)}+e^{i\pi(k+l)}\right)+f_2\left(e^{i\pi(h+k+l)}+e^{i\pi h}+e^{i\pi k}+e^{i\pi l}\right)$$
$$=\left(f_1+f_2e^{i\pi(h+k+l)}\right)\left(1+e^{i\pi(h+k)}+e^{i\pi(h+l)}+e^{i\pi(k+l)}\right)$$

إذا كانت h,k,l مختلطة $=0$

إذا كانت h,k,l زوجية $=4(f_1+f_2)$

إذا كانت h,k,l فردية $=4(f_1-f_2)$