Korean J. Crystallography
Vol. 11, No. 4, pp.241~246, 2000

Structure Factor와 Electron Density間의 關係

徐 日 煥
충남대학교 물리학과, 대전 305-746

Structure factor는 位置를 包含한 electron density를 알면 計算되고 逆으로 electron density는 phase를 包含한 structure factor를 알면 作圖할수 있으므로 structure factor와 electron density는 서로 Fourier transform이다.

1. Fourier Series

Single crystal內의 electron density는 unit cell의 a, b, c-軸 方向으로 連續的이며 單一價를 週期函數이다.

Fourier's theorem에 의하면 continuous, single-valued, periodic function인 $\psi(X/a)$는 a가 週期일 때 sine 과 cosine으로 이루어진 다음 같은 series로 표현된다.

$$\psi\left(\frac{X}{a}\right) = \frac{2}{a}\sum_{h=-\infty}^{\infty}\left[C(h)\cos 2\pi\frac{hX}{a} + S(h)\sin 2\pi\frac{hX}{a}\right] \tag{1}$$

이 方程式에서 h는 integer이다. Coefficient $C(h)$ and $S(h)$는 다음식으로 계산된다.

$$C(h) = \int_0^a \psi\left(\frac{X}{a}\right)\cos 2\pi\frac{hX}{a}dX \tag{2}$$

(proof)

$$\int_0^a \psi\left(\frac{X}{a}\right)\cos 2\pi\frac{h'X}{a}dX = \int_0^a \frac{2}{a}[C(h)\cos 2\pi\frac{hX}{a} + S(h)\sin 2\pi\frac{hX}{a}]\cos 2\pi\frac{h'X}{a}dX$$

$$= \frac{2}{a}\int_0^a [C(h)\cos 2\pi\frac{hX}{a}\cos 2\pi\frac{h'X}{a} + S(h)\sin 2\pi\frac{hX}{a}\cos 2\pi\frac{h'X}{a}]dX$$

公式 $\cos A\ \cos B = 1/2\ [\cos(A+B) + \cos(A-B)]$

$\sin A\ \cos B = 1/2[\sin(A+B) + \sin(A-B)]$

에 의하여 sine과 cosine이 섞여 있는 항은 zero가 되며 cosine만 있는 項도 $h \neq h'$ 일때는 zero이고 $h = h'$ 일 때 다음같이 $C(h)$가 된다

$$= \frac{2}{a}\int_0^a C(h)\left(\cos 2\pi\frac{hX}{a}\right)^2 dX$$

$$= \frac{2}{a}\int_0^a C(h)\frac{1}{2}\left(1 + \cos 4\pi\frac{hX}{a}\right)dX = C(h)$$

Coefficient $S(h)$도 다음같이 얻어진다.

$$S(h) = \int_0^a \psi\left(\frac{X}{a}\right)\sin 2\pi\frac{hX}{a}dX \tag{3}$$

(proof)

$$\int_0^a \psi\left(\frac{X}{a}\right)\sin 2\pi\frac{h'X}{a}dX = \int_0^a \frac{2}{a}[C(h)\cos 2\pi\frac{hX}{a} + S(h)\sin 2\pi\frac{hX}{a}]\sin 2\pi\frac{h'X}{a}dX$$

$$= \frac{2}{a}\int_0^a [C(h)\cos 2\pi\frac{hX}{a}\sin 2\pi\frac{h'X}{a} + S(h)\sin 2\pi\frac{hX}{a}\sin 2\pi\frac{h'X}{a}]dX$$

첫째항은 cosine과 sine이 섞여 있어 zero이며 둘째항은

公式 $\sin A\ \sin B = 1/2[\cos(A-B) - \cos(A+B)]$

에 의하여 $h \neq h'$ 일 때 zero이며 $h = h'$ 일 때

$$= \frac{2}{a}\int_0^a S(h)\left(\sin 2\pi\frac{hX}{a}\right)^2 dX$$

$$= \frac{2}{a}\int_0^a S(h)\frac{1}{2}\left(1 - \cos 4\pi\frac{hX}{a}\right)dX = S(h)$$

따라서 function $\psi(X/a)$가 알려지면, $C(h)$와 $S(h)$는 h에 대하여 계산할 수 있다.

Euler's theorem $\cos\theta = \dfrac{e^{i\theta}+e^{-i\theta}}{2}$, $\sin\theta = \dfrac{e^{i\theta}-e^{-i\theta}}{2i}$ 를 이용하고 (1)式 $\psi(X/a)$에서 2를 除去하면 다음같이 써진다.

$$\psi\left(\frac{X}{a}\right) = \frac{1}{2a}\sum_{h=-\infty}^{\infty} C(h)\left\{\left[\exp\left(2\pi i\frac{hX}{a}\right) + \exp\left(-2\pi i\frac{hX}{a}\right)\right] - iS(h)\left[\exp\left(2\pi i\frac{hX}{a}\right) - \exp\left(-2\pi i\frac{hX}{a}\right)\right]\right\}$$

$$= \frac{1}{2a}\sum_{h=-\infty}^{\infty}\left\{\exp 2\pi i\frac{hX}{a}[C(h)-iS(h)] + \exp\left(-2\pi i\frac{hX}{a}\right)[C(h)+iS(h)]\right\}$$

$$= \frac{1}{2a}\sum_{h=-\infty}^{\infty}\left\{G(-h)\exp\left(2\pi i\frac{hX}{a}\right) + G(h)\exp\left(-2\pi i\frac{hX}{a}\right)\right\}$$

여기서 $G(-h) = C(h) - iS(h)$, $G(h) = C(h) + iS(h)$이고 h의 범위는 $-\infty$에서 ∞이므로 右邊의 두 項은 같은 값을 가지므로 다음같이 된다.

$$\psi\left(\frac{X}{a}\right) = \frac{1}{a}\sum_{h=-\infty}^{\infty} G(h)\exp\left(-2\pi i\frac{hX}{a}\right) \tag{4}$$

(4)식은 exponential function으로 나타낸 one dimensional Fourier series이다. (2) 및 (3)식과 같이 계수 $G(h)$는 다음같이 구해진다.

$$G(h) = \int_0^a \psi\left(\frac{X}{a}\right)\exp 2\pi i\frac{hX}{a}dX \tag{5}$$

(proof)

$$\frac{1}{a}\int_0^a G(h)\exp\left(-2\pi i\frac{hX}{a}\right)\exp\left(2\pi i\frac{h'X}{a}\right)dX$$

$$= \frac{1}{a}\int_0^a G(h)\exp\left\{2\pi i\frac{(h'-h)X}{a}\right\}dX$$

$$= \frac{1}{a}G(h)\exp\left\{2\pi i\frac{(h'-h)X}{a}\right\}\Big/\left\{2\pi i\frac{(h'-h)}{a}\right\}\Bigg|_0^a$$

$$= 0 \text{ if } h \neq h' \text{ or } G(h) \text{ if } h = h'. \tag{6}$$

(4)式을 3次元的으로 쓰면 X, Y, Z는 서로 독립이므로 서로 곱하면 다음같이 써진다.

$$\psi\left(\frac{X}{a}\frac{Y}{b}\frac{Z}{c}\right) = \frac{1}{abc}\sum_{hkl=-\infty}^{\infty} G(hkl)\exp(-2\pi i)\left(\frac{hX}{a}+\frac{kY}{b}+\frac{lZ}{c}\right) \tag{7}$$

또한 三次元的 Fourier series의 coefficient $G(hkl)$는 (5)식과 같이 다음이 된다.

$$G(hkl) = \int_0^a\int_0^b\int_0^c \psi\left(\frac{X}{a}\frac{Y}{b}\frac{Z}{c}\right)\exp\left[2\pi i\left(\frac{hX}{a}+\frac{kY}{b}+\frac{lZ}{c}\right)\right]dXdYdZ \tag{8}$$

Function들 (7)式 $\psi\left(\frac{X}{a}\frac{Y}{b}\frac{Z}{c}\right)$와 (8)式 $G(hkl)$는 서로의 Fourier transform이라 한다. 만일 $G(hkl)$이 모든 h, k, l에 대하여 알려지면 $\psi\left(\frac{X}{a}\frac{Y}{b}\frac{Z}{c}\right)$가 계산되며, 反對로 $\psi\left(\frac{X}{a}\frac{Y}{b}\frac{Z}{c}\right)$가 한 週期인 0, 0, 0으로부터 a, b, c까지의 區間에서 알려지면 $G(hkl)$이 계산된다. (7)式을 Fourier synthesis이라 하며, (8)式은 function $\psi\left(\frac{X}{a}\frac{Y}{b}\frac{Z}{c}\right)$의 Fourier analysis라 한다.

$\psi\left(\frac{X}{a}\frac{Y}{b}\frac{Z}{c}\right)$는 electron density에 해당하는 函數인데 $G(hkl)$가 crystallography에서 어떤 function과 같은지 알아보자.

2. Electron density

原子周圍의 電子分布를 電子密度 ρ라 하자. Single crystal의 lattice에서 electron density $\rho(X/a)$는 週期性을 나타내므로 periodic function인 (4)式 $\psi(X/a)$와 같다고 놓을수 있다. 一次元 電子密度函數를 생각하면 X-軸上의 매우 작은 區間 dX에서 電子密度 $\rho(X/a)$는 일정하다고 간주할 수 있고 dX內의 電子數는 $\rho(X/a)dX$이다. 그러면 unit cell內의 X/a에 있는 모든

原子들의 $\rho(X/a)$의 값이 structure factor 내의 scattering factor와 같은 것이어서 structure factor $F(h)$은 다음같이 積分으로 表示된다.[1)]

$$F(h) = \int_0^a \rho\left(\frac{X}{a}\right)\exp\left(2\pi i\frac{hX}{a}\right)dX. \tag{9}$$

$\psi(X/a)$와 $\rho(X/a)$은 같은 것이므로, 식(4)을 식(9)에 대입하면 다음이 된다.

$$F(h) = \int_0^a \frac{1}{a}\sum_{h'=-\infty}^{\infty} G(h')\exp\left(-2\pi i\frac{h'X}{a}\right) \exp\left(2\pi i\frac{hX}{a}\right)dX. \tag{10}$$

여기서 h'은 summation에만 관계되고 적분에는 무관하므로 분리하여 쓰면 다음과 같다.

$$F(h) = \frac{1}{a}\sum_{h'=-\infty}^{\infty} G(h')\int_0^a \exp\left[2\pi i\frac{(h-h')X}{a}\right]dX.$$

적분하면 (6)식과 같이 h와 h는 integer이므로 $h \neq h'$ 일 때 零이 되고 $h = h'$ 일 때 다음결과가 나온다.

$$F(h) = G(h).$$

따라서 $G(h)$는 crystallography에서 structure factor $F(h)$를 나타내므로 식(4)은 다음이 되어 one dimensional electron density를 나타내는 one dimensional Fourier series이다.

$$\rho\left(\frac{X}{a}\right) = \frac{1}{a}\sum_{h'=-\infty}^{\infty} F(h)\exp\left(-2\pi i\frac{hX}{a}\right)$$

지금부터 fractional coordinate $X/a = x$, $Y/b = y$, $Z/c = z$를 사용하면 一般的인 electron density function은 three dimensional Fourier series로 다음같이 표시된다.

$$\rho(xyz) = \frac{1}{V}\sum_{hkl=-\infty}^{\infty} F(hkl)\exp[-2\pi i(hx+ky+lz)] \tag{11}$$

여기서 V는 unit cell volume이다. $\rho(xyz)$의 x, y, z는 crystallographic axis들의 fraction을 나타내며 structure factor $F(hkl)$에 있는 x_j, y_j, z_j는 atomic coordinate이다.

(11)式은 electron density가 complex function임을 暗示하며 structure factor식을 대입하여 다음같이 표시할 수 있다.

$$\rho(xyz) = \frac{1}{V}\sum_{hkl=-\infty}^{\infty} |F(hkl)|\exp[i\alpha(hkl)] \exp[-2\pi i(hx+ky+lz)]$$

여기서

$$\alpha(hkl) = \arctan\frac{\sum_{hkl=-\infty}^{\infty}\sin(hx_j+ky_j+lx_j)}{\sum_{hkl=-\infty}^{\infty}\cos(hx_j+ky_j+lx_j)} = -\alpha(\overline{hkl})$$

인 관계가 있으므로, 윗식은 다음같이 써진다.

$$\begin{aligned}\rho(xyz) &= \frac{1}{V}\sum_{hkl=0}^{\infty}\{|F(hkl)|\exp[i\alpha(hkl)] \\ &\quad \exp[-2\pi i(hx+ky+lz)] + |F(\overline{hkl})| \\ &\quad \exp[i\alpha(\overline{hkl})\exp[-2\pi i(\bar{h}x+\bar{k}y+\bar{l}z)]\} \\ &= \frac{1}{V}\sum_{hkl=0}^{\infty}|F(hkl)|\exp i[\alpha(hkl) \\ &\quad -2\pi(hx+ky+lz)] + |F(\overline{hkl})| \\ &\quad \exp i[\alpha(\overline{hkl}) - 2\pi(\bar{h}x+\bar{k}y+\bar{l}z)]\end{aligned}$$

Friedel's law에 의하여 $|F(hkl)| = |F(\overline{hkl})|$ 이므로

$$\begin{aligned}\rho(hkl) &= \frac{1}{V}\sum_{hkl=0}^{\infty}\{|F(hkl)|\,[\cos\{-2\pi(hx+ky+lz) \\ &\quad + \alpha(hkl)\} + i\sin\{-2\pi(hx+ky+lz) \\ &\quad + \alpha(hkl)\} + \cos\{2\pi(hx+ky+lz) \\ &\quad + \alpha(\overline{hkl})\} + i\sin\{2\pi(hx+ky+lz) \\ &\quad + \alpha(\overline{hkl})\}]\end{aligned}$$

Sine 항은 零이 되며 cosine은 even function이므로 electron density는 다음으로 표시된다.

$$\rho(xyz) = \frac{1}{V}\sum_{hkl=-\infty}^{\infty}|F(hkl)| \cos[2\pi(hx+ky+lz) - \alpha(hkl)] \tag{12}$$

Electron density $\rho(xyz)$은 structure factor $F(hkl)$를 알면 作圖할수 있으며 structure factor $F(hkl)$는 electron density $\rho(xyz)$를 알면 계산될수 있어 $F(hkl)$와 $\rho(xyz)$는 서로의 Fourier transform이다. (12)式인 electron density $\rho(xyz)$를 計算하는 것을 Fourier synthesis라하며 structure factor $F(hkl)$을 구하는 것을 Fourier analysis라한다.

3. 몇 개의 space group들의 electron density equations[2)]

(a) Space group No. 1, P1

Space group $P1$에는 general equivalent position이 x, y, z한 개뿐이므로 structure factor

$$F(hkl) = \sum_{j=1}^{n} f_j \exp 2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)$$

로부터 Ewald sphere內의 8가지 Miller index 종류의 structure factor 값은 다음같이 모두 다르다.

$$F(hkl) \neq F(\overline{hkl}) \neq F(\bar{h}kl) \neq F(h\overline{kl}) \neq F(h\bar{k}l)$$
$$\neq F(\bar{h}k\bar{l}) \neq F(hk\bar{l}) \neq F(\overline{hk}l)$$

따라서 electron density equation은 다음과 같이 된다.

$$\begin{aligned}\rho(xyz) = \frac{1}{V}\sum_{h,k,l=0}^{\infty} & [|F(hkl)| \cos(2\pi(hx+ky+lz) \\ & -\alpha(hkl)) + |F(\bar{h}kl)|\cos(2\pi(-hx+ky+lz) \\ & -\alpha(\bar{h}kl)) + |F(h\bar{k}l)|\cos(2\pi(hx-ky+lz) \\ & -\alpha(h\bar{k}l)) + |F(hk\bar{l})|\cos(2\pi(hx+ky-lz) \\ & -\alpha(hk\bar{l})) + |F(\overline{hkl})|\cos(2\pi(-hx-ky-lz) \\ & -\alpha(\overline{hkl})) + |F(h\overline{kl})|\cos(2\pi(hx-ky-lz) \\ & -\alpha(h\overline{kl})) + |F(\bar{h}k\bar{l})|\cos(2\pi(-hx+ky-lz) \\ & -\alpha(\bar{h}k\bar{l})) + |F(\overline{hk}l)|\cos(2\pi(-hx-ky+lz) \\ & -\alpha(\overline{hk}l))]\end{aligned}$$

P1에는 general position이 한 개뿐이므로 phase는 $\alpha(hkl) = \arctan\dfrac{f\sin 2\pi(hx+ky+lz)}{f\cos 2\pi(hx+ky+lz)}$로 되어 Ewald sphere내의 8가지 다른 Miller index에 대하여 그 값이 모두 다르므로 다음관계가 성립한다.

$$\alpha(hkl) = -\alpha(\overline{hkl}),\ \alpha(\bar{h}kl) = -\alpha(h\overline{kl}),$$
$$\alpha(h\bar{k}l) = -\alpha(\bar{h}k\bar{l}),\ \alpha(hk\bar{l}) = -\alpha(\overline{hk}l)$$

한편 Friedel's law에 의하여 다음같은 intensity relation이 성립한다.

$$|F(hkl)| = |F(\overline{hkl})| \neq |F(\bar{h}kl)| \neq |F(h\bar{k}l)| \neq |F(hk\bar{l})|$$

이를 대입하면 cosine은 even function이므로 다음의 electron density equation을 얻는다.

$$\begin{aligned}\rho(xyz) = \frac{2}{V}\sum_{h,k,l=0}^{\infty} & [|F(hkl)| \cos(2\pi(hx+ky+lz) \\ & -\alpha(hkl)) + |F(\bar{h}kl)|\cos(2\pi(-hx+ky+lz) \\ & -\alpha(\bar{h}kl)) + |F(h\bar{k}l)|\cos(2\pi(hx-ky+lz) \\ & -\alpha(h\bar{k}l)) + |F(hk\bar{l})|\cos(2\pi(hx+ky-lz) \\ & -\alpha(hk\bar{l}))]\end{aligned}$$

(b) Space group $P\bar{1}$

Centric space group $P\bar{1}$의 equivalent positions는 $\pm x$, $\pm y$, $\pm z$가 있어 structure factor는

$$F(hkl) = \sum_{j=1}^{n} f_j \cos 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)$$

이며 phase는 $\alpha(hkl) = \arctan 0 = 0$ or π로 원자의 좌표 $\pm x$, $\pm y$, $\pm z$를 알면 phase는 structure factor에 포함된다.

따라서 Ewald sphere內의 8가지 Miller index 종류의 structure factor 값은 다음같이 쓸수 있다.

$$F(hkl) = F(\overline{hkl}) \neq F(\bar{h}kl) \neq F(h\bar{k}l) \neq F(hk\bar{l})$$

이관계를 (11)식에 대입하면 다음의 electron density equation을 얻는다.

$$\begin{aligned}\rho(xyz) = \frac{2}{V}\sum_{h,k,l=0}^{\infty} & [F(hkl)\cos(2\pi(hx+ky+lz)) \\ & + F(\bar{h}kl)\cos(2\pi(-hx+ky+lz)) \\ & + F(h\bar{k}l)\cos(2\pi(hx-ky+lz)) \\ & + F(hk\bar{l})\cos(2\pi(hx+ky-lz))]\end{aligned}$$

(c) Space group No. 3, $P2$(non-centric)

Monoclinic system에서는 다음의 intensity relation이 있고

$$|F(hkl)| = |F(\overline{hkl})| = |F(h\bar{k}l)| = |F(\bar{h}k\bar{l})|$$
$$|F(\bar{h}kl)| = |F(h\overline{kl})| = |F(\overline{hk}l)| = |F(hk\bar{l})|$$

두 개의 general positions $x, y, z; -x, y, -z$를 대입하면 다음의 phase equation이 얻어지며

$$\alpha(hkl) = \arctan\frac{f\begin{bmatrix}\sin 2\pi(hx+ky+lz) \\ +\sin 2\pi(-hx+ky-lz)\end{bmatrix}}{f\begin{bmatrix}\cos 2\pi(hx+ky+lz) \\ +\cos 2\pi(-hx+ky-lz)\end{bmatrix}}$$

$$\alpha(hkl) = \alpha(\bar{h}k\bar{l}) = -\alpha(\overline{hkl}) = -\alpha(h\bar{k}l)$$
$$\alpha(\bar{h}kl) = \alpha(hk\bar{l}) = -\alpha(\overline{hk}l) = -\alpha(h\overline{kl})$$

space group $P1$의 electron density식에 상기 intensity 및 phase 관계를 대입하면 다음식이 얻어진다.

$$\rho(xyz) = \frac{4}{V}\sum_{hkl=0}^{\infty}\{|F(hkl)|\cos 2\pi(hx+ky)$$
$$\cos[2\pi ky - \alpha(hkl)] + |F(\bar{h}kl)|$$
$$\cos 2\pi(-hx+lz)\cos[2\pi ky - \alpha(\bar{h}kl)]$$

(d) Space group No. 10, $P2/m$(centric)

Centric space group의 structure factor에는 sine항이 없어져서 phase를 포함한 structure factor에는 다음관계가 있다.

$$F(hkl) = F(\overline{hkl}) = F(h\bar{k}l) \neq F(\bar{h}kl);\ F(\bar{h}kl) = F(hk\bar{l})$$

space group $P\bar{1}$의 electron density 식에 위관계를 대입하면 다음식을 얻는다.

$$\rho(xyz) = \frac{2}{V}\sum_{h,k,l=0}^{\infty}[F(hkl)\cos(2\pi(hx+ky+lz))$$
$$+ F(\bar{h}kl)\cos(2\pi(-hx+ky+lz))$$
$$+ F(h\bar{k}l)\cos(2\pi(hx-ky+lz))$$
$$+ F(hk\bar{l})\cos(2\pi(hx+ky-lz))]$$

$$\rho(xyz) = \frac{4}{V}\sum_{h,k,l=0}^{\infty}[F(hkl)\cos(2\pi(hX+lZ)$$
$$+ F(\bar{h}kl)\cos(2\pi(-hx+lz))]\cos 2\pi ky$$

(d) Space group No. 14, $P21/c$(centric)

이 space group는 centric이므로 structure factor는 real part뿐이다. Four general equivalent coordinates를 대입하면

$$A(hkl) = \cos 2\pi(hx+ky+lz) + \cos 2\pi(-hx-ky-lz)$$
$$+ \cos 2\pi\left(-hx+ky-lz+\frac{k+l}{2}\right)$$
$$+ \cos 2\pi\left(hx-ky+lz+\frac{k+l}{2}\right)$$
$$= \cos 2\pi(hx+ky+lz) + \cos 2\pi(-hx-ky-lz)$$
$$+ \cos 2\pi(-hx+ky-lz)\cos 2\pi\left(\frac{k+l}{2}\right)$$
$$+ \cos 2\pi(hx-ky+lz)\cos 2\pi\left(\frac{k+l}{2}\right)$$
$$= 2\{\cos 2\pi(hx+ky+lz)$$
$$+ \cos 2\pi\left(hx-ky+lz+\frac{k+l}{2}\right)\}$$

公式 $\cos A + \cos B = 2\cos\frac{A+B}{2}\cos\frac{A-B}{2}$ 에 의하여

$$= 4\cos 2\pi\left(hx+lz+\frac{k+l}{4}\right)\cos 2\pi\left(ky-\frac{k+l}{4}\right)$$

Structure factor $A(hkl)$에서 $k+l$을 even과 odd로 분리하면 $k+l=2n$: $A(hkl) = 4\cos 2\pi(hx+lz)\cos 2\pi ky$이며 다음이 성립한다.

$$F(hkl) = F(\overline{hkl}) = F(h\bar{k}l) = F(\bar{h}k\bar{l})$$
$$F(\bar{h}kl) = F(h\overline{kl}) = F(hk\bar{l}) = F(\overline{hk}l)$$

$k+l=2n+1$: $A(hkl) = -4\sin 2\pi(hx+lz)\sin 2\pi ky$이며 다음이 성립한다.

$$F(hkl) = F(\overline{hkl}) = -F(h\bar{k}l) = -F(\bar{h}k\bar{l})$$
$$F(\bar{h}kl) = F(h\overline{kl}) = -F(hk\bar{l}) = -F(\overline{hk}l)$$

이결과를 대입하면 다음의 electron density equation을 얻는다.

$k+l=2n$:

$$\rho(xyz) = \frac{4}{V}\left\{\sum_{hkl=0}^{\infty}\{F(hkl)[\cos(2\pi(hx+lz)\right.$$
$$+ F(\bar{h}kl)\cos 2\pi(-hx+lz)\cos 2\pi ky\}$$

$k+l=2n+1$:

$$-\sum_{hkl=0}^{\infty}\{F(hkl)[\sin(2\pi(hx+lz)$$
$$+ F(\bar{h}kl)\sin 2\pi(-hx+lz)\sin 2\pi ky\}$$

(e) Space group No. 47, $Pmmm$(centric)

Orthorhombic system에 있는 다음의 structure factor 관계가 있다.

$$F(hkl) = F(\overline{hkl}) = F(\bar{h}kl) = F(h\bar{k}l) = F(hk\bar{l});$$

space group $P\bar{1}$의 electron density 식에 대입하면 다음관계를 얻는다.

$$\rho(xyz) = \frac{2}{V}\sum_{h,k,l=0}^{\infty} F(hkl)[\cos 2\pi(hx+ky+lz)$$
$$+\cos 2\pi(-hx+ky+lz)$$
$$+\cos 2\pi(hx-ky+lz)$$
$$+\cos 2\pi(hx+ky-lz)$$
$$= \frac{8}{V}\sum_{h,k,l=0}^{\infty} F(hkl)\cos 2\pi hx \cos 2\pi ky \cos 2\pi lz$$

참고문헌

1) The Explicit Expression of the Atomic Thermal Parameters. William P. Jensen & Il-Hwan Suh. *Korean J. Crystallography*, Vol. 9, pp. 149-152 (1998).
2) International Tables for X-Ray Crystallography. Vol. 1. edited by N. F. M. Henry and K. Lonsdale, The Kynoch Press, Birmingham, England (1979).