

Составители: А.Б.Либерман, А.С.Храмов, С.С.Царевский

ПРАКТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ К РАБОТЕ № 7

По рентгенограмме смеси двух веществ определить их относительное содержание в образце.

Порядок выполнения работы

1. Для заданных веществ по таблицам выбрать отражения, по интенсивности которых необходимо определить фазовый состав смеси. Рассчитать углы дифракции.
2. Построить градуировочный график по рентгенограмме заранее приготовленных смесей веществ с известным относительным содержанием эталона.
3. По дифрактограмме исследуемого образца определить с помощью градуировочного графика содержание фаз в образце.

Работа № 8. Определение размеров областей когерентного рассеяния (блоков мозаики) и микронапряжений

Ширина и форма дифракционных максимумов определяются рядом факторов:

1. Размером кристаллитов или их разбиением на малые ориентированные друг относительно друга блоки (блоки мозаики).
2. Микронапряжениями кристаллитов (под микронапряжениями понимаются обычно напряжения, которые уравновешены в объеме отдельных кристаллитов).
3. Наличием в кристаллитах дефектов упаковки.

Уширение линий, связанное с указанными выше факторами, называется физическим уширением β . Ширина интерференционной

линии зависит также от геометрических условий съёмки рентгенограммы (сходимость и расхождение первичного пучка), а также собственной ширины спектральной линии (геометрическое или экспериментальное уширение). Полная ширина дифракционного максимума будет определяться совместным действием этих двух факторов. Если выделять физическое уширение β , то довольно легко определить как размеры блоков мозаики, так и микронапряжения.

Если физическое уширение обусловлено только размерами блоков (размером кристалла), то легко получить зависимость между шириной β (2θ) и размером блока $D_{\text{НКЛ}}$.

Область, где интенсивность интерференции отлична от нуля (размер узла обратной решетки), обратна размеру кристаллита в данном направлении D^{-1} . Так максимум интерференционной функции определяется условием:

$$\psi_i = \frac{2\pi}{\lambda} (\bar{a}_i \bar{s} - \bar{s}_0) = 2\pi (\bar{a}_i \bar{H}) \quad \text{и} \quad \Delta\psi_i = \frac{2\pi}{N_i} \quad (1)$$

$|\bar{H}| = 2 \sin \theta / \lambda$, \bar{s} и \bar{s}_0 — единичные вектора в направлении дифрагированного и первичного луча.

Дифференцируя ψ_i , получим:

$$\Delta\psi = 2\pi |\bar{a}_i| \Delta|\bar{H}| \cos(\bar{a}_i \bar{H}), \quad \Delta|\bar{H}| = \frac{2 \cos \theta}{\lambda} \Delta\theta$$

$$\frac{2\pi}{N_i} = \frac{2\pi}{\lambda} |\bar{a}_i| \Delta\theta 2 \cos \theta \cos(\bar{a}_i \bar{H})$$

$$D_{\text{НКЛ}} = N_i |\bar{a}_i| \cos(\bar{a}_i \bar{H}),$$

откуда с учетом распределения кристаллитов по размерам

$$\beta = \Delta(2\theta) = \frac{m\lambda}{D_{\text{НКЛ}} \cos \theta}, \quad m=0,94 \text{ — для кубических кристаллов} \quad (2)$$

формула Семкова-Шеррера.

Если уширение β обусловлено только микронапряжениями, то это будет приводить к изменению межплоскостного расстояния на величину $\pm \Delta d$, тогда из уравнения Вульфа-Брегга получим:

$$\frac{\Delta d}{d} = \frac{\beta}{4 \tan \theta_{\text{НКЛ}}} \quad (3)$$

Пользуясь выражениями (2) и (3), легко определить как размер блоков мозаики, так и микронапряжения в случае их раздельного действия. Если же в реально изучаемом кристалле уширение

линий вызвано влиянием этих двух факторов, то необходимо установить, какова доля участия обоих факторов в физическом уширении линии β . Для решения этой задачи существует ряд методов: метод аппроксимации, метод гармонического анализа формы линии, метод моментов.

Рассмотрим метод аппроксимации, позволяющий достаточно легко получать значения величин $\Delta d/d$ и $D_{\text{НКЛ}}$ и.

Примем обозначения:

B' — экспериментальная общая ширина линии рабочего образца;

b' — то же для эталона;

B — истинная общая ширина линии рабочего образца;

b — то же для эталона (геометрическое уширение);

β — истинное физическое уширение;

m и n — части физического уширения, связанные с дисперсностью блоков мозаики и микронапряжениями, соответственно.

Экспериментальные общие ширины B' и b' , полученные при съёмке в характеристическом излучении, искажены влиянием дублетности α — излучения. Для выделения истинного значения общих ширин линий можно воспользоваться графиком поправок на $\alpha_1 - \alpha_2$ — дублет (рис. I) или методом Речингера. При использовании графика поправок на $\alpha_1 - \alpha_2$ — дублет площади под кривыми делят на высоты выбранных линий образца и эталона. Результат, выраженный в радианной мере, даст величины B' и b' . С учетом того, что междублетное расстояние δ будет определяться как

$$\delta = \frac{\lambda \alpha_2 - \lambda \alpha_1}{\lambda \alpha_1} \tan \theta \quad (4)$$

по графику (рис. I) находят величину B или b .

Определив истинные общие ширины B и b для образца и эталона, можно найти истинное физическое уширение β по формуле:

$$B = \frac{\beta \cdot b}{\int g(x) f(x) dx} \quad (5)$$

Используя различные аппроксимирующие функции, можно получить следующие соотношения для определения истинного физического уширения:

$$\beta = \sqrt{B^2 - b^2} \quad (f(x); g(x) = \exp(-\alpha x^2)) \quad (6)$$

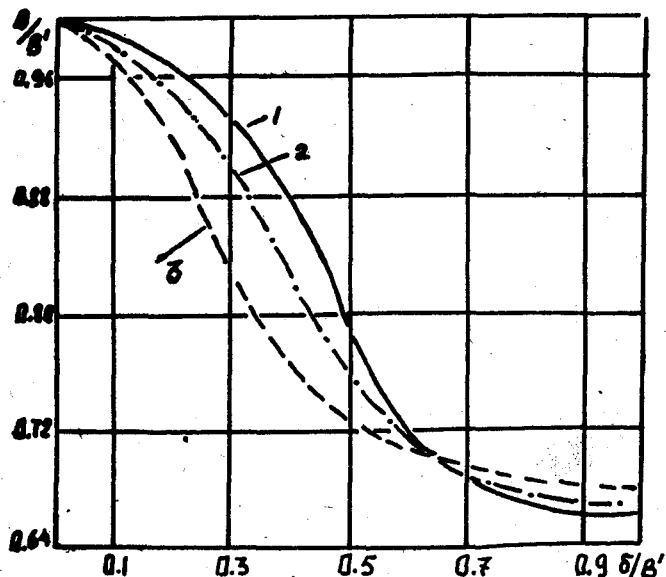


Рис.1. График поправок на α_1 - α_2 дублет для аппроксимирующих функций: I - $\exp(-\alpha x^2)$; II - $(1+\alpha x^2)^{-2}$; III - $(1+\alpha x^2)^{-1}$

$$\beta = \frac{1}{2}(B-b + \sqrt{B(B-b)}) \quad (f(x); g(x) = (1+\alpha x^2)^{-2})$$

$$\beta = B-b \quad (f(x); g(x) = (1+\alpha x^2)^{-1}) \quad (6)$$

Часто по выражениям (6) строят графики поправок на истинное геометрическое уширение (рис.2).

После определения истинного физического уширения задача сводится к выделению вкладов в β от дисперсности блоков и микронапряжений. Аналогично (5) можно записать:

$$\beta = \frac{mn}{\int N(x)M(x)dx} \quad (7)$$

Часто с большой степенью точности (особенно для кубических металлов) функции $M(x)$ и $N(x)$ задается так:

$$M(x) = (1+\alpha x^2)^{-1}, \quad N(x) = (1+\gamma x^2)^{-2}$$

Тогда из (7) получим:

$$\beta = \frac{(m+2n)^2}{m+4n} \quad (8)$$

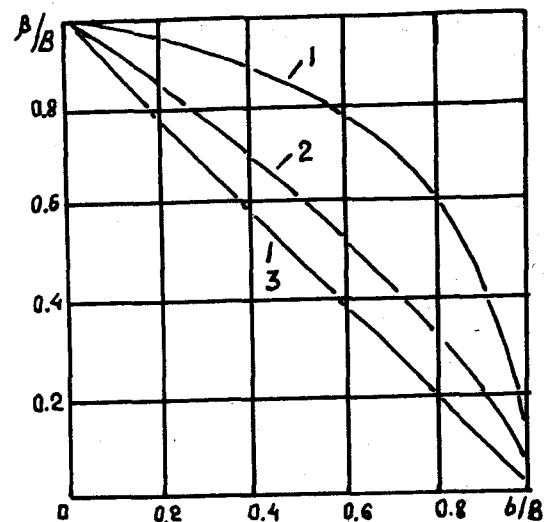


Рис.2. График поправок на геометрическое уширение. Обозначение аппроксимирующих функций как на рис.1.

Далее в методе аппроксимации для определения m и n необходимо использовать два дифракционных максимума, т.е. две линии рентгенограммы. Для повышения точности желательно, чтобы эти линии соответствовали различным кратностям отражения от семейства плоскостей. Вместо (8) будем иметь два уравнения:

$$\beta_1 = \frac{(m_1+2n_1)^2}{m_1+4n_1} \quad (9)$$

$$\beta_2 = \frac{(m_2+2n_2)^2}{m_2+4n_2} \quad (10)$$

С учетом (2) и (3) получим соотношения:

$$\frac{m_2}{m_1} = \frac{\cos \theta_1}{\cos \theta_2} \quad (11)$$

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{\operatorname{tg} \theta_2}{\operatorname{tg} \theta_1} \quad (12)$$

Совместное решение уравнений (9 + 12) позволяет определить m_1/β_1 и n_2/β_2 . Далее по уравнению (2) и (3) находят D_{HKL} и $\Delta d/d$. Удобнее найти отношения m_1/β_1 и n_2/β_2 как функции отношения β_2/β_1 .

$$\frac{m_1}{\beta_1} = \frac{1}{2} \left(1 - 4 \frac{n_1}{\beta_1} + \sqrt{8 \frac{n_1}{\beta_1} + 1} \right) \quad (13)$$

$$\frac{n_2}{\beta_2} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{m_2}{\beta_2} + \sqrt{1 - \frac{m_2}{\beta_2}} \right) \quad (14)$$

$$\frac{\beta_2}{\beta_1} = \frac{\left\{ \frac{1}{2} \frac{\cos \theta_1}{\cos \theta_2} \left(1 - 4 \frac{n_1}{\beta_1} + \sqrt{8 \frac{n_1}{\beta_1} + 1} \right) + 2 \frac{n_1}{\beta_1} \frac{\tan \theta_2}{\tan \theta_1} \right\}^2}{\frac{1}{2} \frac{\cos \theta_1}{\cos \theta_2} \left(1 - 4 \frac{n_1}{\beta_1} + \sqrt{8 \frac{n_1}{\beta_1} + 1} \right) + 4 \frac{n_1}{\beta_1} \frac{\tan \theta_2}{\tan \theta_1}} \quad (14)$$

$$\frac{\beta_2}{\beta_1} = \frac{\frac{\cos \theta_2}{\cos \theta_1} \frac{m_2}{\beta_2} + 2 \frac{\tan \theta_1}{\tan \theta_2} \left(1 - \frac{m_2}{\beta_2} + \sqrt{1 - \frac{m_2}{\beta_2}} \right)}{\left[\frac{\cos \theta_2}{\cos \theta_1} \frac{m_2}{\beta_2} + \frac{\tan \theta_1}{\tan \theta_2} \left(1 - \frac{m_2}{\beta_2} + \sqrt{1 - \frac{m_2}{\beta_2}} \right) \right]^2} \quad (15)$$

Далее для составления номограмм уширений, вызванных дисперсностью m и микронапряжениями n рассчитывают m_1/β_1 и n_2/β_2 , задавая величине n_1/β_1 и m_2/β_2 значения 0; 0,1; 0,2 ... 0,9; 1,0. Затем находят отношение β_2/β_1 , задавая величине n_1/β_1 , m_2/β_2 те же значения. По полученным данным строят номограммы, абсцисса которых представляет собой значения β_2/β_1 , а ордината n_1/β_1 или m_2/β_2 .

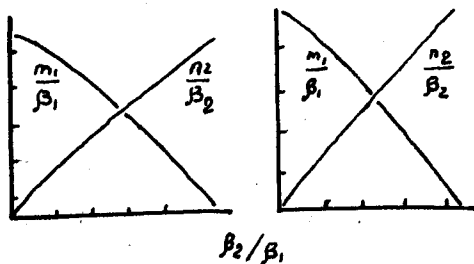


Рис. 3. Номограммы для разделения эффектов микронапряжений и размеров блоков

Отношение β_2/β_1 лежит в диапазоне $\frac{\cos \theta_1}{\cos \theta_2} < \frac{\beta_2}{\beta_1} < \frac{\tan \theta_2}{\tan \theta_1}$. Имея номограммы и зная рабочее отношение β_2/β_1 , находят величины m_1/β_1 и n_2/β_2 , а по ним, в свою очередь, D_{HKL} и $\Delta d/d$.

Отметим, что величину микронапряжений находят по линиям с большими значениями индексов, а размер ОКР — с малыми.

Практическая часть.

Определить величину блоков мозаики и относительной микродеформации в образце железа, никеля, алюминия.

Порядок выполнения работы.

1. Получить дифрактограммы двух рефлексов образца и эталона.
2. Рассчитать и построить номограммы m_1/β_1 и n_2/β_2 .
3. По номограммам определить доли физического уширения, обусловленные дисперсностью блоков m и микронапряжениями n .
4. По формулам (2) и (3) определить D_{HKL} и $\Delta d/d$. Результаты представить в виде таблицы:

N	$\frac{\beta_2}{\beta_1}$	$\frac{m_1}{\beta_1}$	m_1	D_{HKL}	$\frac{n_2}{\beta_2}$	n_2	$\frac{\Delta d}{d}$

Таблица: Расчет относительной микродеформации блоков мозаики.

Работа № 9. Анализ относительных интенсивностей рентгеновских рефлексов

Интерференция рентгеновских лучей в кристаллах приводит к возникновению дифракционной картины, интенсивность и геомет-

рическое расположение максимумов которой определяются как способом расположения (упаковки) атомов в веществе, так и видом самих атомов. Анализ относительной интенсивности дифракционных максимумов часто представляет основную задачу исследования, например, при определении структуры вещества, искажений кристаллической решетки и т.д. Интегральная интенсивность линий рентгенограммы зависит от ряда факторов.

$$I_{HKL} = I_0 c P(\theta) F_{HKL}^2 P_{HKL} A(\theta) e^{-2M} \quad (1)$$

где I_0 - интенсивность первичных лучей;

c - постоянная съемки для данного вещества;

$P(\theta)$ - угловой (поляризационный) множитель;

$P(\theta) = \frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin^2 \theta \cos \theta}$ - при съемке порошкового образца на дифрактометре;

P_{HKL} - фактор повторяемости, равен числу плоскостей в их совокупности, имеющих одинаковое межплоскостное расстояние и одинаковый структурный фактор;

e^{-2M} - тепловой множитель;

F_{HKL}^2 - структурный фактор (множитель).

Величина показателя экспоненты $2M$ определяется через характеристическую температуру тепловых колебаний θ .

$$2M = \frac{12h^2}{mk\theta} \left[\frac{1}{4} + \frac{\Phi(x)}{x} \right] \frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2} \quad (2)$$

где $\Phi(x)$ - функция Дебая.

Структурный множитель F_{HKL}^2 учитывает зависимость интенсивности рассеяния от расположения атомов в решетке:

$$F_{HKL}^2 = \left| \sum_{i=1}^N f_i \exp[-2\pi i(Hx_i + Ky_i + Lz_i)] \right|^2$$

f_i - рассеивающая способность i - узла (атомный фактор);

N - число узлов в элементарной ячейке.

В тригонометрической форме F_{HKL}^2 запишется:

$$F_{HKL}^2 = \left[\sum_{i=1}^N f_i \cos 2\pi(Hx_i + Ky_i + Lz_i) \right]^2 + \left[\sum_{i=1}^N f_i \sin 2\pi(Hx_i + Ky_i + Lz_i) \right]^2 \quad (3)$$

Для структур, имеющих центр инверсии с началом координат в цен-

тре инверсии

$$F_{HKL}^2 = \left| 2 \sum_{i=1}^{N/2} f_i \cos 2\pi(Hx_i + Ky_i + Lz_i) \right|^2 \quad (4)$$

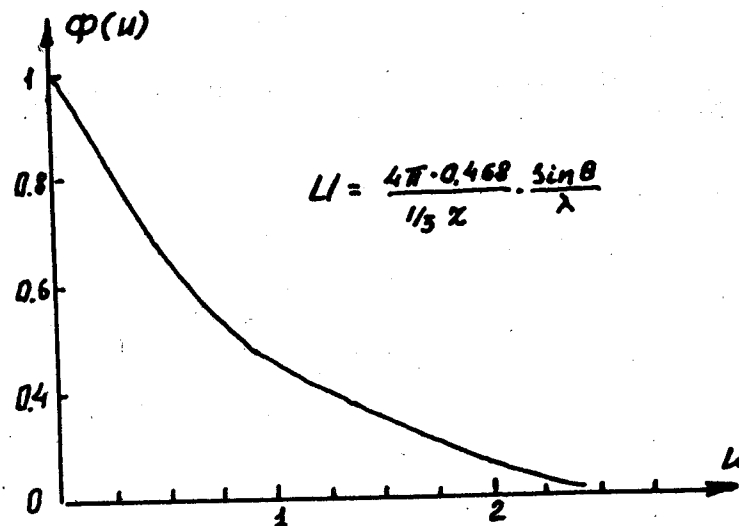
При проведении практических расчетов структурный множитель получают упрощением формул (3) и (4) для заданных HKL , затем подсчитывают $Hx + Ky + Lz$, находят $\cos 2\pi(Hx + Ky + Lz)$, группируют члены с одинаковым f_i и после умножения на f_i складывают частные суммы.

В случае решетки, состоящей из одинаковых атомов, фактор выносится за знак суммирования.

Атомный множитель f^2 учитывает распределение электронной плотности в атоме и является функцией $\sin \theta / \lambda$:

$$f^2 = z^2 \phi^2 \left(\frac{\sin \theta}{\lambda} \right) \quad (5)$$

Функция $\phi \left(\frac{\sin \theta}{\lambda} \right)$ обычно построена графическим способом и приводится в справочниках.



После определения сомножителей (2-5) по выражению (I) рассчитываются величины I_{hkl}/I_0 для каждой линии рентгенограммы.

Практическая часть

Рассчитать относительную интенсивность линий рентгенограммы элемента или соединения и сопоставить с экспериментальными данными.

Порядок выполнения работы

1. Записать исходные данные: вещество, структурный тип, пространственная группа, координаты правильной системы точек (базис), длина волны излучения.

2. Определить возможные индексы линии на рентгенограмме. Рассчитать углы θ .

3. Определить отдельные сомножители интенсивности для каждой линии и найти их произведение.

4. Приняв максимальное значение за 100, определить относительные значения интенсивности для остальных линий.

5. По дифрактограмме данного вещества определить интегральные интенсивности дифракционных максимумов и найти их относительные интенсивности.

6. Сопоставить расчетные и экспериментальные значения. Результаты представить в виде таблицы.

Таблица

Вычисление относительных интенсивностей

N	hkl	θ	f^2	$P(\theta)$	P_{hkl}	e^{-2M}	F_{hkl}^2	$\frac{I}{I_0}$ Относительная интенсивность	
								расчетная	эксперимент.

Приложения
I. Межплоскостные расстояния (d_{hkl}) и относительные интенсивности рефлексов некоторых элементов и соединений

I. Al

0,233	100	0,10781	7
0,202	40	0,10426	13
0,1430	30	0,10175	1
0,1219	30	0,09976	11
0,1168	7	0,09819	2
0,1011	2	0,09345	3
0,0928	4	0,09178	2
0,0905	4	0,09076	12
0,0826	1	0,09052	3
0,0778	1	0,08991	6

2. $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$

0,3479	72	0,08804	4
0,2552	92	0,08698	2
0,2379	41	0,08580	12
0,2165	0	0,08502	4
0,2085	100	0,08302	22
0,1740	41	0,08137	4
0,1601	83	0,08075	11

3. CdS

0,3583	75	0,3583	75
0,3357	59	0,3357	59
0,3160	100	0,3160	100
0,2450	25	0,2450	25
0,2068	57	0,2068	57
0,1898	42	0,1898	42
0,1791	17	0,1791	17
0,1761	45	0,1761	45
0,1731	18	0,1731	18
0,1679	4	0,1679	4
0,1581	7	0,1581	7
0,1520	2	0,1520	2
0,1398	15	0,1398	15

3. CdS	
0, I3536	6
0, I327I	II
0, I3032	7
0, I2572	II
0, I2247	I
0, II940	8
0, II585	I2
0, II249	8
0, I0743	6
0, I0540	I
0, I0340	4
0, 09934	4
0, 0988I	5
0, 09842	6
0, 09827	5
0, 09729	2
0, 09533	9
0, 09265	2
0, 0908I	7
0, 08956	I
0, 08878	I
0, 08804	3
0, 08653	I
0, 08624	I
0, 083I5	3
0, 08I66	4
0, 08I58	4
0, 07986	7

4. CdSe	
0,349I	
0,3026	
0,2I40	
0, I822	
0, I746	
0, I5I3	
0, I388	

4. CdSe	
0, I35I	
0, I234	
0, II64	
0, I070	
0, I023	
0, I009	
0, 0945	
0, 0922	
0, 09II	
0, 0872	
0, 0846	
0, 0838	
5. CdTe	
0,37I2	
0,32I6	
0,2273	
0, I940	
0, I852	
0, I608	
0, I477	
0, I438	
0, I3I3	
0, I238	
0, II37	
0, I087	
0, I072	
0, I0I7	
0, 098I	
0, 0970	
0, 090I	
0, 0892	
6. Cu	
0,208	I00
0, I8I	53
0, I277	33

6. Cu	
0, I089	33
0, I043	9
0, 0905	3
7. Cu ₂ O	
0,300	3
0,245	I00
0,2I2	3I
0, I5I	44
0, I283	3I
0, I228	5
0, I065	3
0, 0977	5
0, 0953	3
0, 0869	3
0, 08I9	3
8. α-Fe	
0,20268	I00
0, I4332	I9
0, II702	30
0, I0I34	9
0, 09064	I2
0, 08275	6
9. α-Fe ₂ O ₃	
0,368	I8
0,269	I00
0, I5I	75
0,220	I8
0, I84	66
0, I69	63
0, I60	I3
0, I485	50
0, I452	50
0, I35I	3
0, I308	I8

9. α-Fe ₂ O ₃	
0, I259	I3
0, I230	3
0, II90	8
0, II63	5
0, II40	I3
0, II04	I0
0, I056	8
0, 0962	I0
0, 0954	5
0, 0900	3
0, 088I	5
0, 0843	5
I0. Fe ₃ O ₄	
0,485	6
0,297	28
0,253	I00
0,2I2	II
0,2I0	32
0, I7I	I6
0, I6I	64
0, I483	80
0, I326	6
0, I279	20
0, I2I0	5
0, II2I	I0
0, I092	32
0, I049	I0
0, 0970	I6
0, 0966	8
0, 0940	6
0, 0880	I0
0, 0859	20
0, 0853	8
0, 0825	2
0, 08I4	I0
0, 0809	5

II. $TnAs$

0,3489
0,3024
0,2139
0,1821
0,1745
0,1512
0,1387
0,1350
0,1233
0,1163
0,1069
0,1022
0,1008
0,0944
0,0922
0,0911
0,0872
0,0846

12. $TnSb$

0,374 100
0,2290 80
0,1953 55
0,1620 15
0,1486 22
0,1323 25
0,1247 12
0,11453 9
0,10950 12
0,10243 9
0,09880 6
0,09349 7
0,09071 8
0,08657 12
0,08434 9
0,08093 3

13. KBr

0,329 100
0,233 42
0,189 10
0,164 7
0,1468 17
0,1343 7
0,1164 3
0,1095 3
0,1040 3

14. KCl

0,313 100
0,221 60
0,181 14
0,157 6
0,1401 12
0,1280 6
0,1108 2
0,1047 2
0,0991 2

15. MgO

0,242 6
0,210 100
0,1485 75
0,1266 6
0,1213 15
0,1050 4
0,0963 1
0,0940 10
0,0937 5
0,0860 4
0,0854 2

16. $MnFe_2O_4$

0,4893
0,4237

16. $MnFe_2O_4$

0,2996
0,2559
0,2446
0,2118
0,1895
0,1730
0,1636
0,1499
0,1432
0,1412
0,1340
0,1294
0,1278
0,1224

17. $NaCl$

0,3258 13
0,2821 100
0,1994 55
0,1701 2
0,1628 15
0,1410 6
0,1294 1
0,1261 11
0,11515 7
0,10855 1
0,09969 2
0,09533 1
0,09401 3
0,08917 4
0,08601 1
0,08503 3
0,08141 2

18. Nb

0,233 100
0,165 20

18. Nb

0,134 32
0,116 6
0,1041 10
0,0950 1
0,0879 6
0,0775 2
0,0736 1

19. Ni

0,203 100
0,176 50
0,1244 32
0,1061 32
0,1017 4
0,0808 8
0,0788 8
0,0719 8
0,0678 8

20. NiO

0,240 60
0,208 100
0,1474 60
0,333 24
0,315 2
0,255 100
0,233 40
0,200 20
0,196 6
0,187 10
0,178 24
0,167 14
0,162 2
0,158 8
0,155 3
0,151 3
0,1480 13

20. NiO	
0,143I	6
0,0,1398	24
0,1350	8
0,1309	II
0,1285	3
0,1219	3

21. Ni Fe ₂ O ₄	
0,4824	
0,4178	
0,2954	
0,2524	
0,2412	
0,2086	
0,1917	
0,1868	
0,1706	
0,1612	
0,1476	
0,1412	
0,1393	
0,1321	
0,1274	
0,1260	
0,1204	

22. NH ₄ Cl	
0,385	I5
0,272	I00
0,222	2
0,192	I2
0,172	8
0,157	25
0,1370	5
0,1288	3
0,1221	7
0,1165	I

22. NH ₄ Cl	
0,1115	I
0,1033	4
0,0912	I
0,0864	I

23. W	
0,223	I00
0,158	29
0,1290	7I
0,1117	I7
0,1000	29
0,0913	6
0,0846	34
0,0745	II
0,0707	6
0,0674	6
0,0622	6

24. Zn Fe ₂ O ₄	
0,484	20
0,298	50
0,253	I00
0,243	I0
0,210	40
0,172	40
0,162	40
0,149	80
0,133	20
0,128	40
0,127	I0
0,112	30
0,109	50
0,105	30
0,0971	40
0,0882	20
0,0859	30
0,0826	I0

24. Zn Fe ₂ O ₄	
0,0814	20.

25. ZnS	
0,3309	I00
0,3128	86
0,2925	84
0,2273	29
0,1911	74
0,1764	52
0,1654	I0
0,1630	45
0,1599	I2
0,1564	2
0,1462	5
0,1414	I
0,1296	I4
0,1251	6
0,1226	3
0,1210	I0
0,11703	4
0,11611	8
0,11364	I
0,11029	I3
0,10724	6
0,10401	5
0,09979	6
0,09766	I
0,09551	6
0,09175	5
0,09151	7
0,09080	2
0,08845	8
0,08398	9

26. Zn Se	
0,328	I00
0,1995	80

26. Zn Se	
0,1761	50
0,1410	8
0,1942	3
0,1897	32
0,1864	5
0,1823	n 3
0,1772	6
0,1737	6
0,1644	25
0,1553	4
0,1476	6
0,1389	8
0,1352	5
0,1328	5
0,1294	6
0,1196	9
0,1125	5
0,1021	3

27. Zn Te	
0,349	I00
0,303	I
0,214	67
0,1823	54
0,1513	II
0,1390	20
0,1358	4
0,1237	27
0,1169	I6
0,1075	7
0,1027	II
0,0961	8

II. Множитель повторяемости ρ

Сингония и класс	Индексы	ρ
Кубическая $\bar{2}3, m\bar{3}$	{HKL}	24
	{100}	6
	{111}	8
	{OKL}	12
$\bar{4}3m, 432, m\bar{3}m$	{HKL}	48
	{100}	6
	{111}	8
	{110}	12
	{OKL} или {HKL}	24
Тетрагональная $\bar{4}, 4, \frac{4}{m}$	{HKL}	8
	{OOI}	2
	{HKO}	4
$\bar{4}2m, 4mm, 422, \frac{4}{mmm}$	{HKL}	16
	{OOI}	2
	{100} или {110}	4
	{HKO}, {OKL}, {HKL}	8
Гексагональная $\bar{6}, 6, \frac{6}{m}$	{HKL}	2
	{OOI}	2
	{HK.O}	6
$\bar{6}2m, 6mm$	{HK.L}	24
	{OOI}	2
$622, \frac{6}{mmm}$	{11.O} или {11.O}	6
	{HK.O} или {HK.O} или {HK.L}	12
	{HK.L}	

III. Таблица для вычисления атомных множителей.

Величина атомного множителя для средних и тяжелых атомов ($Z > 17$) вычисляется по Томасу - Ферми из соотношения

$$F = Z \phi(u)$$

где $u = \frac{4\pi \cdot 0,468}{\frac{1}{3} \lambda Z} \sin \theta$, Z - атомный номер элемента.

В таблице приведены значения функций $\phi(u)$ и $\phi^2(u)$ для u от 0 до 3,11.

u	ϕ	ϕ^2	u	ϕ	ϕ^2
0,00	1,000	1,000	1,71	0,284	0,081
0,16	0,922	0,850	1,86	0,264	0,067
0,31	0,796	0,634	2,02	0,240	0,058
0,47	0,684	0,468	2,17	0,224	0,050
0,62	0,589	0,347	2,33	0,205	0,042
0,78	0,522	0,272	2,48	0,189	0,036
0,93	0,469	0,220	2,64	0,175	0,031
1,09	0,422	0,178	2,80	0,167	0,028
1,24	0,378	0,143	2,95	0,156	0,024
1,40	0,342	0,117	3,11	0,147	0,022
1,55	0,309	0,096			

IV. Значения коэффициента $B' = \frac{6h^2}{K} \left[\frac{\phi(x)}{x} + \frac{1}{4} \right]$, где

$$x = \frac{\theta}{T}$$

$$M = \frac{1}{m\theta} B' \frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2}$$

x	$B' \cdot 10^{33}$	x	$B' \cdot 10^{33}$
0		0,7	2,72
0,1	18,79	0,8	2,39
0,2	8,98	0,9	2,13
0,3	6,29	1,0	1,93
0,4	4,72	1,2	1,62
0,5	3,78	1,4	1,41
0,6	3,16	1,6	1,26

X	$B' \cdot 10^{33}$	X	$B' \cdot 10^{33}$
1,8	1,13	7,0	0,533
2,0	1,04	8,0	0,518
2,5	0,876	9,0	0,508
3,0	0,772	10,0	0,501
4,0	0,652	12,0	0,491
5,0	0,590	14,0	0,485
6,0	0,555	16,0	0,482
		20,0	0,477

Сдано в набор 14.II.89 г. Подписано в печать 27.II.89 г.
 Форм.бум. 60 x 84 1/16. Печ.л.1,4. Тираж 100. Заказ 870.
 Бесплатно.

Лаборатория оперативной полиграфии КГУ
 420008 Казань, Ленина, 4/5