МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ УКРАЇНИ
ЛЬВІВСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ім. Ів. ФРАНКА

Й. В. КАВИЧ, О. Г. МИКОЛАЙЧУК

РОЗСІЮВАННЯ РЕНТГЕНІВСЬКИХ ПРОМЕНІВ І СТРУКТУРА РЕЧОВИН

Львів ЛДУ 1992

К а в и ч Й. В., М и к о л а й ч у к О.Г.
Розсіювання рентгенівських променів і структура речовин:
Текст лекцій.- Львів: Ред.-вид.відділ Львів.ун-ту, 1992.-с.126.

Розглянуто розсіювання рентгенівських променів ідеальними і реальними кристалами, звернуто увагу на фактори, які впливають на інтенсивність дифрагованих променів, зокрема на величину структурної амплітуди. Дано аналіз методів визначення знаків структурних амплітуд, розглянуто застосування рядів Фур"є в рентгеноструктурному аналізі для дослідження структури кристалів, зокрема при визначенні координати атомів і міжатомних відстаней. Описано метод міжатомної /паттерсонівської/ функції, метод послідовних наближень електронної густини, прийоми уточнення координат атомів і проаналізовано точності визначення міжатомних відстаней.

Для студентів старших курсів фізичних спеціальностей університетів, для працівників, які займаються дослідженням атомної будови кристалів.

Бібліогр.: 11 назв., рис.15.

Рецензенти: Блажієвський Л.Д. д-р.фіз.-мат.наук, проф.
Прохоренко В.Я. д-р.фіз.-мат.наук, проф.

(С)Львівський державний університет
ім.Ів.Франка

З М І С Т

ВСТУП 3

I. РОЗСІЮВАННЯ РЕНТГЕНІВСЬКИХ ПРОМЕНІВ ІДЕАЛЬНИМИ КРИСТАЛАМИ 4

I.I.Геометричні умови дифракції рентгенівських променів на кристалі 4
I.2.Розсіювання електроном 7
I.2.I.Класична теорія розсіювання 7
I.2.2.Квантова теорія розсіювання I2
I.3.Розсіювання атомом I3
I.4. f -крива і функція радіального розподілу електронів I7
I.5.Розсіювання рентгенівських променів групою атомів /молекулою/.Молекулярний структурний фактор I9
I.6.Структурний фактор інтенсивності 23

2. РОЗСІЮВАННЯ РЕНТГЕНІВСЬКИХ ПРОМЕНІВ РЕАЛЬНИМ КРИСТАЛОМ 26

2.I.Тепловий рух атомів і його вплив на інтенсивність дифракційних променів 26
2.I.I.Температурний фактор 26
2.I.2.Розрахунок температурного фактора 28
2.2.Інтегральна інтенсивність дифракції.Фактор інтегральності 30
2.2.I.Інтегральна інтенсивність 3I
2.2.2.Фактор інтегральності /кутовий фактор/ 32
2.3.Поглинання рентгенівських променів.Фактор поглинання 33
2.4.Фактор повторюваності 34
2.5.Первинна і вторинна екстинція 36

3. СТРУКТУРНА АМПЛІТУДА 39

3.I.Структурна амплітуда.Алгебрична і інтегральна формули 39
3.2.Формули структурної амплітуди для різних просторових груп симетрії 43

4. ДОСЛІДЖЕННЯ РОЗМІЩЕННЯ АТОМІВ В ЕЛЕМЕНТАРНІЙ КОМІРЦІ КРИСТАЛА 46

4.I.Два етапи структурного аналізу 46

5. МЕТОДИ ВИЗНАЧЕННЯ ЗНАКІВ СТРУКТУРНИХ АМПЛІТУД 50

5.I.Залежність знаків структурних амплітуд від вибору початку координат в елементарній комірці 5I
5.2.Достовірність визначення знаків структурних амплітуд 54
5.3.Метод структурних добутків А.І.Китайгородського 56
5.4.Метод нерівностей Харкера-Каспера..... 6I
5.4.I.Найпростіша нерівність $2U(H)^2 \leq 1 + U(2H)$ ... 6I
5.4.2.Нерівності для різних випадків симетрії кристала 63
5.4.3.Нерівність $[U(H') \pm U(H'')]^2 \leq [1 \pm U(H'+H'')][1 \pm U(H'-H'')]$ для загального випадку центросиметричної структури 66
5.5.Детермінант зв"язку структурних амплітуд..... 70

6. ЗАСТОСУВАННЯ РЯДІВ ФУР"Є В РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОМУ АНАЛІЗІ КРИСТАЛІВ 73

6.I.Розклад періодичної функції у тригонометричний ряд.. 73
6.2.Розклад електронної густини в ряд Фур"є 75
6.3.Фізичний зміст розкладу електронної густини в ряд Фур"є 77
6.3.I.Визначення фаз дифрагованих променів 79
6.4.Перерізи і проекції електронної густини 80
6.4.I.Плоскі перерізи елементарної комірки, паралельні координатним площинам 8I
6.4.2.Лінійні перерізи 82
6.4.3.Проекція електронної густини на координатну площину 83
6.5.Загальна характеристика формул розкладу в ряд Фур"є електронної густини 86
6.6.Загальна характеристика методів сумування рядів Фур"є 88

7. МЕТОД МІЖАТОМНОЇ ФУНКЦІЇ /ФУНКЦІЇ ПАТТЕРСОНА/ 90

7.1.Векторний простір і міжатомна функція 92
7.I.I.Аналогія між структурною амплітудою і структурним фактором.Простір міжатомних векторів 92
7.I.2.Міжатомна функція 94
7.2.Розклад міжатомної функції в ряд Фур"є 97
7.3.Особливості міжатомної функції 99
7.3.I.Особливості, які утруднюють аналіз 99
7.3.2.Способи підвищення роздільної здатності розподілу міжатомної функції I00

8. ВИЗНАЧЕННЯ СТРУКТУРИ КРИСТАЛА ЗА РОЗПОДІЛОМ ЕЛЕКТРОННОЇ ГУСТИНИ МЕТОДОМ ПОСЛІДОВНИХ НАБЛИЖЕНЬ I06

8.I.Дослідження структури кристала з центрами інверсії і без центрів інверсії I08

9. МЕТОДИ УТОЧНЕННЯ КООРДИНАТ АТОМІВ III

9.I.Метод електронної густини /метод F -рядів/ II2
9.I.I.Поправка на обрив ряду Фур"є II2
9.2.Метод диференціального синтезу /метод Д -рядів/ II4
9.3.Метод різницевих рядів /метод R -рядів/ II8
9.3.I.Нульовий синтез.Особливості нульового синтезу II8
9.4.Точність визначення координат атомів. Основні джерела похибок I22

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ I23

ЗМІСТ I24