

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

Член-корреспондент АН СССР Н. В. БЕЛОВ

УСКОРЕННЫЕ МЕТОДЫ ПОДСЧЕТА СТРУКТУРНОГО ФАКТОРА

Просмотр выражений структурного фактора для всех 59 пространственных групп ромбической системы показывает, что в упрощенном виде⁽¹⁾ все они представляют собой произведения трех синусов или косинусов от hx , ky , lz . Для отражений hko , hol и okl , которыми сейчас пользуются почти исключительно в структурном анализе (в частности, при синтезах Фурье — Брэгга или Фурье — Патерсона), мы имеем произведения только двух либо косинусов либо синусов. То же имеет место и для триклинных и моноклинных групп, а кристаллы этих и ромбических групп по Баркеру⁽²⁾ составляют основную массу кристаллического царства. Быстрые методы расчета этих факторов — один из способов облегчения необычно трудоемкого повторного расчета интенсивностей при определении кристаллической структуры. Брэггом и Липсоном⁽³⁾ для облегчения этих расчетов (но также и для других целей — например для нахождения наиболее чувствительных направлений к изменяющимся параметрам) предложены двумерные графики, особые для каждой пары значений h и k (вообще любой пары индексов). Построение этих графиков достаточно кропотливо и до сих пор ни в одной лаборатории до конца не выполнено⁽²⁾. Между тем одна единственная номограмма дает нужные произведения для всех пар. Если учесть особенности структурных расчетов, для которых наиболее удобен аргумент не в градусах и не в радианах, но в сотых долях целой окружности, то номограмма для косинусов имеет следующий вид (рис. 1).

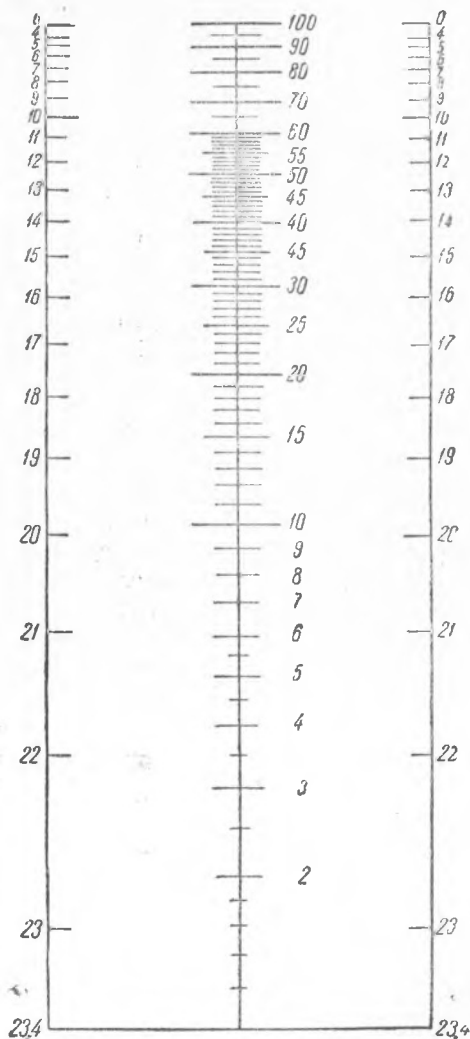


Рис. 1

Точность ее 0,01, т. е. не меньше той, которую могут дать графики Брэгга—Липсона. Аргументы даны для первого квадранта.

Нетрудно рядом приписать аргументы и из остальных квадрантов. Номограмма для синусов та же, но соответственно передвигаются аргументы.

Т а б л и ц а 1

		cos 2 π x				sin 2 π x					
	x	x	x	x	x	x	x	x	x		
100	100	0	50	-100	50	0	0	50	50	0	100
99	100	1	49	-100	51	1	6	49	51	-6	99
98	99	2	48	-99	52	2	13	48	52	-13	98
97	98	3	47	-98	53	3	19	47	53	-19	97
96	97	4	46	-97	54	4	25	46	54	-25	96
95	95	5	45	-95	55	5	31	45	55	-31	95
94	93	6	44	-93	56	6	37	44	56	-37	94
93	90	7	43	-90	57	7	43	43	57	-43	93
92	88	8	42	-88	58	8	48	42	58	-48	92
91	84	9	41	-84	59	9	54	41	59	-54	91
90	81	10	40	-81	60	10	59	40	60	-59	90
89	77	11	39	-77	61	11	64	39	61	-64	89
88	73	12	38	-73	62	12	68	38	62	-68	88
87	68	13	37	-68	63	13	73	37	63	-73	87
86	64	14	36	-64	64	14	77	36	64	-77	86
85	59	15	35	-59	65	15	81	35	65	-81	85
84	54	16	34	-54	66	16	84	34	66	-84	84
83	48	17	33	-48	67	17	88	33	67	-88	83
82	43	18	32	-43	68	18	90	32	68	-90	82
81	37	19	31	-37	69	19	93	31	69	-93	81
80	31	20	30	-31	70	20	95	30	70	-95	80
79	25	21	29	-25	71	21	97	29	71	-97	79
78	19	22	28	-19	72	22	98	28	72	-98	78
77	13	23	27	-13	73	23	99	27	73	-99	77
76	6	24	26	-6	74	24	100	26	74	-100	76
75	0	25	25	-0	75	25	100	25	75	-100	75

Наиболее просто, однако, использовать одну изображенную номограмму и для косинусов и для синусов, беря для косинусов ближайший вычет из 0,50 или 100, для синусов же — ближайший вычет из 25 или 75. Знак произведения определяется по квадрантам. Для контроля, а также для случая, когда аргумент близок к 23 (косинусы) или больше, служит табличка (табл. 1), при воспроизведении которой следует отрицательные значения делать красными.

Поступило
18 XI 1947

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ K. Lonsdale, Simplified Structure Factor and Electron Density, Formulae for 230 Space Groups, London, 1936. ² C. W. Bunn, Chemical Crystallography Oxford, 1945. ³ W. L. Bragg and H. Lipson, Z. Kristallogr., 90, 323 (1935)