

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

Е. Н. БЕЛОВА и член-корреспондент АН СССР Н. В. БЕЛОВ

**УПРОЩЕННЫЕ МЕТОДЫ ПОДСЧЕТА КИНЕМАТИЧЕСКОГО  
ФАКТОРА**

Если еще 3—4 года назад большинство структурных расшифровок основывалось главным образом на двумерных синтесах Фурье — проекциях на координатные (изредка диагональные) плоскости как диаграмм электронной плотности, так и диаграмм (паттерсоновских) с междуатомными векторами, то сейчас основным методом стру-

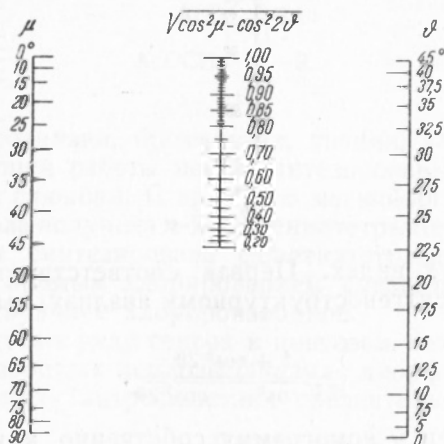


Рис. 1

ктурного исследования стали трехмерные синтесы, которые даже в простейшей форме (разрезы трехмерного синтеза по плоскостям и вдоль определенных линий) требуют знания всех возможных структурных амплитуд  $F_{hkl}$  либо их модулей. При переходе же от экспериментальных значений интенсивностей к  $|F_{hkl}|$  с  $l$ , не равным нулю, возникают затруднения с кинематическим фактором. Если для  $|F_{hkl}|$  (а только такого или близкого типа амплитуды используются в проекциях) кинематический фактор зависит лишь от вульфо-брегговского угла  $\theta$  и легко находится из соответственных таблиц, то для  $|F_{hkl}|$  с  $l$ , не равным нулю, кинематический фактор становится функцией от двух углов  $\theta$  и  $\mu$  ( $\mu$  — угол  $l$ -й слоевой линии рентгенограммы вращения вокруг оси  $z$ ) и должен вычисляться для каждого рефлекса в отдельности.

При обычном числе нетождественных рефлексов 500—800 (моноклинная структура средней трудности) суммарное количество времени, расходуемого на такие подсчеты, весьма велико. Между тем, при сравнительно небольшой нужной точности результата (не более

2—3 единиц в третьем знаке) соответственный коэффициент прямо прочитывается на номограммах (рис. 1 и 2).

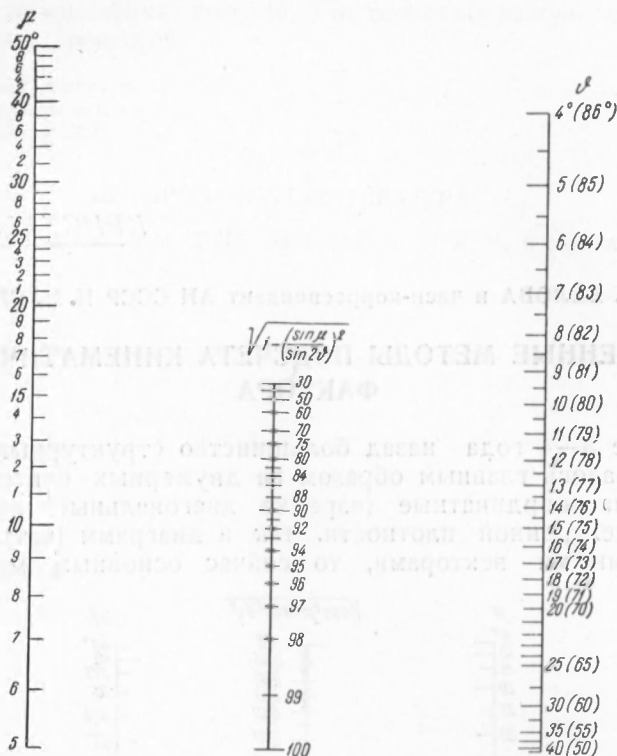


Рис. 2

Они даны в двух видах. Первая соответствует (приводимому в руководствах по рентгеноструктурному анализу) выражению углового фактора

$$\frac{1 + \cos^2 2\vartheta}{2\sqrt{\cos^2 \mu - \cos^2 2\vartheta}},$$

из которого выделен в номограмму собственно кинематический фактор  $\sqrt{\cos^2 \mu - \cos^2 2\vartheta}$  и оставлен табулированный поляризационный фактор  $\frac{1 + \cos^2 2\vartheta}{2}$ .

Вторая соответствует выражению

$$\frac{1 + \cos^2 2\vartheta}{2 \sin 2\vartheta \sqrt{1 - \left(\frac{\sin \mu}{\sin 2\vartheta}\right)^2}},$$

из которого в виде  $\sqrt{1 - \left(\frac{\sin \mu}{\sin 2\vartheta}\right)^2}$  выделен лишь поправочный множитель, который нужно ввести к табулированному значению углового фактора для  $|F_{hkl}|$ , чтобы получить угловой фактор для  $|F_{hkl}|$  (с учетом соответственно разнящихся углов  $\vartheta$ ).

Большая подробность номограммы в отношении значений поправок, близких к 1, отвечает наибольшей важности таких значений (сравнительно малые  $\mu$ ) на рентгенограммах вращения.

Поступило  
24 I 1953