

1.6.5 Закономерные погасания рефлексов и определение пространственной группы

Анализ законов погасания можно провести и с несколько других позиций. Рассмотрим двумерную модель этого явления. Предположим, что некая модельная плоская структура содержит 4 одинаковых атома в элементарной ячейке, один из которых в начале координат 0 (он повторяется во всех углах элементарной ячейки), а другие в произвольных позициях А, В, С (Рис.14). Как найти результирующую амплитуду волны, рассеиваемой этими четырьмя атомами?

Рассмотрим отдельные рефлексы. Выберем сначала плоскости (120) (Рис.14б). Т.к. третье измерение не принимается во внимание, индекс $l = 0$. Атомы, расстояния между которыми равны трансляции (ребру элементарной ячейки), должны рассеивать в фазе, т.е. разность хода лучей, отраженных от них должна равняться 2π . В данном случае этому условию отвечают атомы О и С. Тогда атомы А и В - атомы, лежащие почти точно между плоскостями, дадут волны с противоположной по знаку фазой. Таким образом, рассеяние от атомов О и С почти полностью нейтрализует рассеяние от атомов А и В и рефлекс (120) будет отсутствовать.

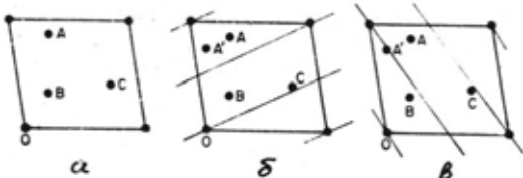


Рис. 14. Расположение атомов А, В, С, 0 на проекции элементарной ячейки (а). Положение этих атомов относительно плоскостей (120) (б). Положение этих атомов относительно плоскостей (210) (в).

Выберем другой набор плоскостей (210) (рис. 12в). Теперь мы видим, что атомы В и С рассеивают почти с той же фазой, что и атом О, а атом А с противоположной фазой. Итоговый результат эквивалентен когерентному рассеянию двумя атомами. Так образуется сильный рефлекс. Если представить, что атом А сдвинут в позицию А', то на отражении ~ 120 это почти не скажется, а интенсивность рефлекса 210 возрастет до максимально возможной.

Поскольку усиление или ослабление интенсивности рефлексов зависит от положения атомов в элементарной ячейке кристалла, то выявление законов ослабления интенсивностей или правил погасаний помогает решить вопрос о типе ячейки, о присутствии плоскостей скользящего отражения и винтовых осей. С помощью анализа законов погасания удалось проверить и подтвердить правильность теории пространственных групп, развитой немецким математиком Шенфлисом, русским кристаллографом Федоровым и английским химиком Барлоу. Рассмотрим законы погасаний при наличии определенных элементов симметрии.

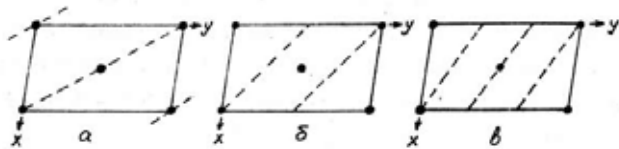


Рис. 15. Расположение трансляционных узлов в С-ячейке относительно плоскостей (100) (а), (120) (б) и (130) (в).

Погасания в случае С-центрировки (Рис.15)

Сетки (110) содержат трансляционные атомы, которые при попадании сеток в отражающее положение, должны рассеивать в фазе. Таким образом рефлекс 110 будет сильным. Отражения от сетки (120) будут отсутствовать, так как атомы, находящиеся между ними, рассеивают X-лучи в противофазе и это приведет к погасанию данного рефлекса. Сетки (130) отсекают на осях х и у отрезки равные одной и одной трети трансляции соответственно. Атом в центре ячейки попадает на эту систему плоскостей, которые будут рассеивать X-лучи в фазе. Таким образом в ячейке с С - центрировкой сохранятся рефлексы, у которых сумма $h + k = 2n$ или целое число.

Погасания при наличии в структуре оси 21 (рис. 16)

Сетки, которые разделяют трансляцию вдоль винтовой оси на 3 части (003), не будут создавать рефлексы, т.к. атом, расположенный на $1/2$ трансляции, окажется между ними и ослабит рефлекс. Наоборот, все плоскости, делящие трансляцию на четное число частей, пройдут через атом, лежащий на $1/2$ трансляции, и соответствующие рефлексы будут яркими. Таким образом, сохранятся рефлексы (001), у которых индекс l будет четным.



Рис. 15. Расположение атомов, связанных осью 2_1 , относительно плоскостей 003

Погасания при наличии плоскостей скользящего отражения (Рис.16)

Сплошные линии на Рис.16 - следы плоскостей (120). Они проходят через трансляционные атомы и будут рассеивать в фазе. Штриховые линии - следы плоскостей (100). Атомы, связанные плоскостями b , окажутся между этими плоскостями и погасят соответствующий рефлекс. Таким образом сохранятся рефлексы, у которых в индексах hkl $k = 2n$.

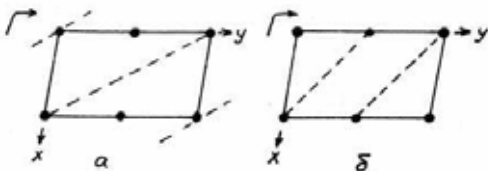


Рис.16. Расположение атомов, связанных плоскостями скольжения b , относительно плоскостей (110) (а) и (120) (б)