

Рис. 6. Минерал баотит $Ba_4Ti_4(Ti,Nb)_2[Si_4O_{12}]O_{18}Cl$; а — функция межатомных векторов, проекция на плоскость ab , линии равного уровня значений функции проведены через равные произвольные интервалы; б — проекция распределения электронной плотности на плоскость ab , полученная путём интерпретации функции межатомных векторов и уточнения атомной модели, сгущения линий равного уровня отвечают положениям атомов в структуре; в — проекция атомной модели структуры на плоскость ab в полингровских полиэдрах. Атомы Si расположены внутри тетраэдров из атомов кислорода, атомы Ti и Nb находятся в октаэдрах из атомов кислорода. Тетраэдры $[SiO_4]$ и октаэдры $[Ti(Nb)O_6]$ в структуре баотита соединены, как показано на рисунке. Атомы Ba и Cl показаны чёрными и светлыми кружками. Часть элементарной ячейки кристалла, изображённая на рисунках а и б, отвечает на рисунке в квадрату, выделенному штриховыми линиями.

пики выделяют одно или несколько из N исходных изображений структуры. Как правило, для единств. изображения структуры приходится использовать дополнит. копии $P(u,v,w)$. Проблема сводится к поиску необходимых взаимных смещений этих копий. После локализации на суперпозиц. синтезе приближённого распределения атомов в структуре этот синтез может быть подвергнут обращению Фурье и т. о. он позволяет получить фазы структурных амплитуд. Последние вместе с эксперим. значениями $|F_{hkl}|$ используются для построения $\rho(x,y,z)$. Все процедуры суперпозиц. методов алгоритмизированы и реализованы в автоматич. режиме на ЭВМ. На рис. 6 изображено атомное строение кристалла, установленное суперпозиционными методами по ф-ции Патерсона.

Разрабатываются эксперим. методы определения фаз структурных амплитуд. Физ. основой этих методов служит эффект Реннингера — многолучевая рентг. дифракция. При наличии одновр. рентг. дифракц. отражений имеет место перекачка энергии между ними, к-рая зависит от фазовых соотношений между данными дифракц. пучками. Вся картина изменения интенсивностей при этом ограничена угл. секундами и для массовых структурных исследований эта методика практич. значения пока не приобрела.

В самостоят. раздел Р. с. а. выделяют прецизионные структурные исследования кристаллов, позволяющие получать по дифракц. данным не только модели атомного строения исследуемых соединений, но и количеств. характеристики тепловых колебаний атомов, включая анизотропию этих колебаний (рис. 7) и их отклонения от гармонич. закона, а также пространственное распределение валентных электронов в кристаллах. Последнее важно для исследования связи между атомным строением и физ. свойствами кристаллов. Для прецизионных исследований разрабатываются спец. методы эксперим. измерений и обработки дифракц. данных. В этом случае необходимы учёт одновр. отражений, отклонений от кинематичности дифракции, принятие во внимание динамич. поправок теории дифракции и др. тонких эффектов взаимодействия излучения с веществом. При уточнении структурных параметров используют метод наим. квадратов, причём важнейшее значение имеет учёт корреляции между уточняемыми параметрами.

Р. с. а. используют для установления связи атомного строения с физ. свойствами сегнетоэлектриков,

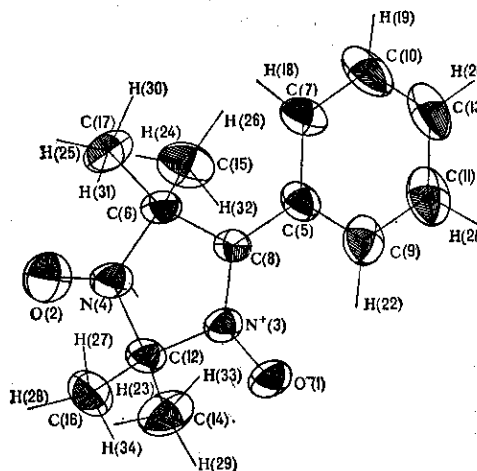


Рис. 7. Эллипсоиды анизотропных тепловых колебаний атомов стабильного нитроксильного радикала $C_{18}H_{17}N_3O_2$.

суперионных проводников, лазерных и нелинейных оптич. материалов, высокотемпературных сверхпроводников и др. Методами Р. с. а. получены уникальные результаты при исследовании механизмов фазовых переходов в твёрдом теле и биол. активности макромолекул. Так, анизотропия поглощения акустич. волн в монокристаллах парателлурита $\alpha-TeO_2$ связана с агармонизмом тепловых колебаний атомов Te (рис. 8). Упругие свойства тетрабората лития $Li_2B_4O_7$, открывающие для него перспективы применения в качестве детектора акустич. волн, обусловлены характером хим. связей в этом соединении. С помощью Р. с. а. исследуют распределение в кристалле валентных электронов, реализующих межатомные связи в нём. Эти связи могут исследоваться с помощью распределения деформационной электронной плотности, представляющей собой разность

$$\delta\rho(x,y,z) = \rho(x,y,z) - \sum \rho_i(x-x_i, y-y_i, z-z_i),$$

где $\rho(x,y,z)$ — распределение электронной плотности в кристалле, $\sum \rho_i(x-x_i, y-y_i, z-z_i)$ — сумма сфе-