

Dyfrakcja rentgenowska (XRD) w analizie fazowej

Wykład 6

1. Zasady tworzenia symboli międzynarodowych grup przestrzennych.
2. Wygaszenia systematyczne i przypadkowe.
3. Reguły wygaszeń ogólnych.
4. Możliwość określenia typu sieci Bravais'a na podstawie wywskaźnikowanych rentgenogramów.
5. Reguły wygaszeń seryjnych.
6. Reguły wygaszeń pasowych.
7. Reguły wygaszeń – podsumowanie.

Symbol międzynarodowy grupy przestrzennej składa się z:

- dużej litery alfabetu (P, I, F, A, B, C, R) oznaczającej typ sieci przestrzennej (charakteryzuje sposób rozmieszczenia węzłów w komórce elementarnej),
- trójpozycyjnej sekwencji elementów symetrii, w której kierunki elementów symetrii z poszczególnych pozycji są charakterystyczne dla każdego z układów krystalograficznych.

Rozpoznawanie układów krystalograficznych na podstawie symbolu H-M grupy przestrzennej

Układ kryst.	Rodzaj i pozycja elementów symetrii sieci	Przykład
Regularny	Osie trójrotne właściwe lub inwersyjne na pozycji drugiej	$I a \bar{3} d, F d \bar{3}, P 4_3 2$
Heksagonalny	Osie trójrotne lub sześciokrotne (właściwe, inwersyjne lub śrubowe) na pozycji pierwszej	$P 3_1, P 6/m c c, R \bar{3} c$
Tetragonalny	Osie czterokrotne (właściwe, inwersyjne lub śrubowe) na pozycji pierwszej	$P 4 b m, P \bar{4} 2_1 c, I 4/m$
Ortorombowy	Osie dwukrotne (właściwe lub śrubowe) lub płaszczyzny (zwierciadlane lub ślizgowe) na wszystkich trzech pozycjach	$C m m 2, P 2 2 2_1, F d d d$
Jednoskośny	Osie dwukrotne (właściwe lub śrubowe) lub płaszczyzny (zwierciadlane lub ślizgowe) wyłącznie na jednej pozycji, jako jedyne elementy symetrii grupy	$P 2_1/m, C c, P 2$
Trójskośny	Brak jakichkolwiek elementów symetrii oprócz osi jednokrotnych właściwych lub inwersyjnych	$P 1, P \bar{1}$

Zasady tworzenia międzynarodowych symboli krystalograficznych klas symetrii

Układ krystalograficzny	Pozycja w symbolu		
	1	2	3
Trójskośny	1 lub $\bar{1}$		
Jednoskośny	2 do osi Y albo m \perp do osi Y albo 2 do osi Y i m \perp do osi Y		
Ortorombowy	2 do osi X albo m \perp do osi X albo 2 i m \perp do osi X	2 do osi Y albo m \perp do osi Y albo 2 i m \perp do osi Y	2 do osi Z albo m \perp do osi Z albo 2 i m \perp do osi Z
Tetragonalny	4 lub $\bar{4}$ do osi Z albo 4 do osi Z i m \perp do osi Z	2 do osi X i Y albo m \perp do osi X i Y albo 2 i m \perp do osi X i Y	2 do [110] albo m \perp do [110] albo 2 i m \perp do [110] (*)
Heksagonalny	6, $\bar{6}$, 3 lub $\bar{3}$ do osi Z albo główna oś sym. do osi Z i m \perp do osi Z	2 do osi X i Y albo m \perp do osi X i Y albo 2 i m \perp do osi X i Y (*)	2 albo m \perp albo 2 i m \perp do kierunku podwusiecznej osi X i Y— (*)
Regularny	4, $\bar{4}$, 2 do osi X, Y i Z albo m \perp do osi X, Y i Z albo oś i m \perp do X, Y, Z	3 do [111] lub $\bar{3}$ do [111] (*)	2 do [110] albo m \perp do [110] albo 2 i m \perp do [110] (*)

(*) oraz do kierunków symetrycznie równoważnych w danym układzie krystalograficznym np.: dla [111] w ukł. regularnym – [$\bar{1}11$], [1 $\bar{1}1$] i [11 $\bar{1}$]; dla [110] w ukł. regularnym – [$\bar{1}10$], [101], [$\bar{1}01$], [011] i [0 $\bar{1}1$]; dla [110] w ukł. tetragonalnym – [$\bar{1}10$].

Kierunki symetrycznie równoważne

układ	kierunek	kierunki symetrycznie równoważne	ilość
regularny	[001]	[001], [010], [100]	3
	[110]	[110], [$\bar{1}10$], [101], [$\bar{1}01$], [011] i [0 $\bar{1}1$]	6
	[111]	[111], [$\bar{1}11$], [1 $\bar{1}1$] i [11 $\bar{1}$]	4
heksagonalny	[001]	[001]	1
	[010]	[010], 0X i kierunek dwusiecznej 0X i 0Y	3
	dwus. 0X i 0Y ⁻	dwusieczna 0X i 0Y ⁻ oraz kierunki powstałe przez obrót o 60° i 120° wokół osi Z	3
tetragonalny	[001]	[001]	1
	[010]	[010], [100]	2
	[110]	[110], [$\bar{1}10$]	2

Od czego zależy intensywność refleksów?

- Rozmieszczenie węzłów (atomów) w komórce elementarnej – czynnik strukturalny F_{hkl} (w tym rodzaj atomów w komórce elementarnej – czynnik atomowy f_n),
- Liczebność płaszczyzn $p_{(hkl)}$,
- Czynniki zależne od sposobu przygotowania próbki,
- Czynniki aparaturowe: natężenie wiązki pierwotnej, długość fali,
- Temperatura,
- Absorpcja,
- Kąt dyfrakcji – czynnik polarny i Lorentza,

Natężenie wiązki promieni rentgenowskich odbitych od płaszczyzny (hkl)

$$I_{hkl} = I_o \cdot \lambda^3 \cdot N^2 \cdot C \cdot F_{hkl}^2 \cdot T \cdot A \cdot PL \cdot P_{(hkl)}$$

- I_{hkl} - natężenie wiązki
- I_o - natężenie wiązki pierwotnej
- λ - długość fali
- N - liczba komórek elementarnych w 1 cm²
- C - czynnik uwzględniająca ładunek, masę i odległość elektronu od punktu pomiaru natężenia
- F_{hkl} - czynnik struktury
- T - czynnik temperaturowy
- A - absorpcja
- PL - czynnik polaryzacji promieniowania i Lorentza
- $P_{(hkl)}$ - liczebność odbijającej płaszczyzny

Liczebność płaszczyzn – ilość płaszczyzn symetrycznie równoważnych (o takiej samej odległości d_{hkl})

Sprawdzenie czy płaszczyzny są symetrycznie równoważne jest możliwe na podstawie wzoru kwadratowego

**Wysoka liczebność (wysoka symetria próbki)
– mała ilość refleksów o znacznej intensywności**

Wybrane kierunki symetrycznie równoważne

Układ kryst.	Kierunek	Kierunki symetrycznie równoważne	p
trójskośny	—	—	—
jednoskośny	[010]	[010]	1
ortorombowy	[100]	[100]	1
	[010]	[010]	1
	[001]	[001]	1
tetragonalny	[001]	[001]	1
	[010]	[010], [100]	2
	[110]	[110], [$\bar{1}10$]	2
heksagonalny	[001]	[001]	1
	[010]	[010], [100], [110] – dwusieczna X i Y	3
	dwusieczna X i (-Y)	dwusieczna X i (-Y) oraz kierunki otrzymane przez jej obrót o 60° lub 120°	3
regularny	[001]	[001], [100], [010]	3
	[111]	[111], [$\bar{1}11$], [$1\bar{1}1$], [$11\bar{1}$]	4
	[110]	[110], [$\bar{1}10$], [$0\bar{1}1$], [$10\bar{1}$], [011], [101]	6

Wybrane kierunki symetrycznie równoważne

Układ kryst.	Kierunek	Kierunki symetrycznie równoważne	p
tetragonalny	[210]	[210], [120], [$\bar{2}10$], [$\bar{1}20$], [2 $\bar{1}0$], [1 $\bar{2}0$]	6
	[201]	[201], [021], [$\bar{2}01$], [0 $\bar{2}1$], [20 $\bar{1}$], [02 $\bar{1}$]	6
	[102]	[102], [012], [$\bar{1}02$], [0 $\bar{1}2$], [10 $\bar{2}$], [01 $\bar{2}$]	6
regularny	[210]	[210], [201], [102], [120], [021], [012], [$\bar{2}10$], [$\bar{2}01$], [$\bar{1}02$], [$\bar{1}20$], [0 $\bar{2}1$], [0 $\bar{1}2$], [2 $\bar{1}0$], [20 $\bar{1}$], [10 $\bar{2}$], [1 $\bar{2}0$], [02 $\bar{1}$], [01 $\bar{2}$]	18
	[211]	[211], [121], [112], [$\bar{2}11$], [1 $\bar{2}1$], [11 $\bar{2}$], [2 $\bar{1}1$], [$\bar{1}21$], [$\bar{1}12$], [21 $\bar{1}$], [12 $\bar{1}$], [11 $\bar{2}$]	12

$$I_{hkl} = I_o \cdot \lambda^3 \cdot N^2 \cdot C \cdot F_{hkl}^2 \cdot T \cdot A \cdot PL \cdot P_{(hkl)}$$

Wygaszenia – brak refleksów pochodzących od niektórych rodzajów płaszczyzn sieciowych:

- systematyczne,
- przypadkowe.

$$I_{hkl} \sim F_{hkl}^2$$

Jeżeli $F_{hkl}=0$ następuje wygaszenie systematyczne refleksu (dla płaszczyzn o określonych wskaźnikach (hkl)).

Wygaszenia systematyczne:

ogólne (integralne);

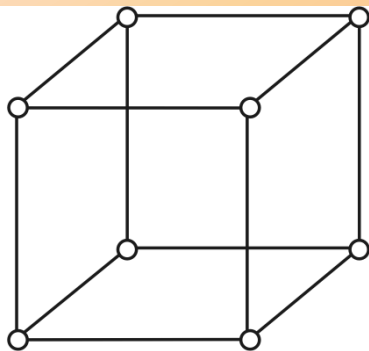
występują w sieciach o komórkach centrowanych;
dotyczą refleksów pochodzących od wszystkich
płaszczyzn sieciowych (hkl),

seryjne;

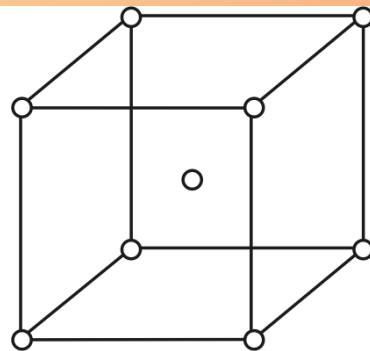
związane są z obecnością w sieci osi śrubowych;
dotyczą refleksów pochodzących od płaszczyzn
sieciowych prostopadłych do osi śrubowej, dotyczą
refleksów typu (h00), (0k0), (00l) lub (hh0),

pasowe;

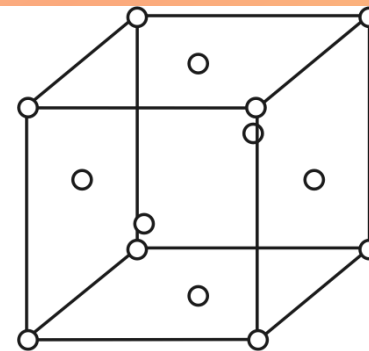
dotyczą refleksów powstających w wyniku odbicia wiązki
rentgenowskiej od płaszczyzn sieciowych należących do
jednego pasa płaszczyzn, oś pasa jest prostopadła do
danej płaszczyzny poślizgu, dotyczą refleksów typu (hk0),
(0kl), (h0l), (hhl).



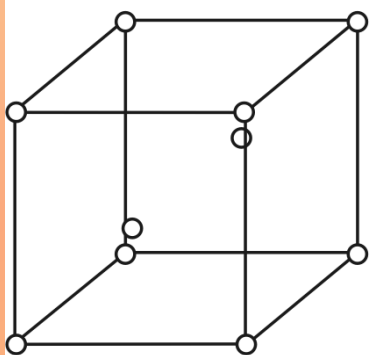
komórka prymitywna (P)



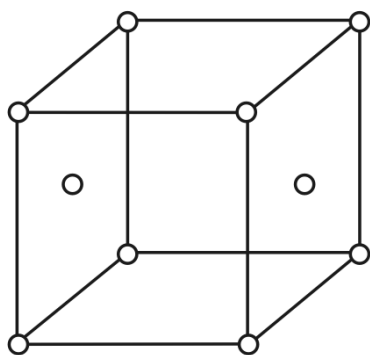
komórka
przestrzennie centrowana (I)



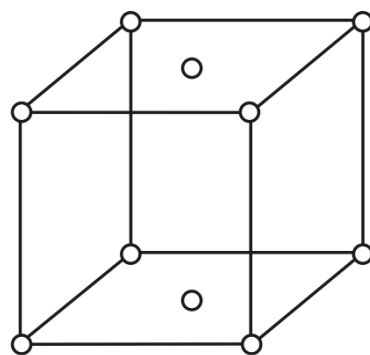
komórka
płasko centrowana (F)



A

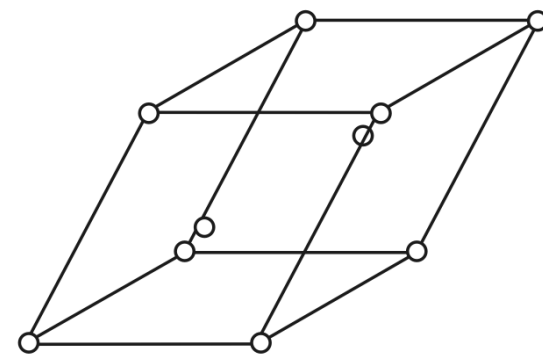


B



C

komórki centrowane na jednej parze ścian



komórka romboedryczna (R)

Czynnik struktury $F_{hkl} = f_n e^{i\varphi_n}$

f_n - czynnik atomowy n-tego atomu w komórce

φ_n - kąt fazowy promieniowania rozproszonego od n-tego atomu
 $\varphi_n = 2\pi(hx_n + ky_n + lz_n)$

$$e^{i\varphi_n} = \cos \varphi_n + i \sin \varphi_n$$

$$F_{hkl} = \sum f_n \cos 2\pi(hx_n + ky_n + lz_n)$$

Podstawiając za x_n, y_n i z_n położenia węzłów w konkretnej sieci przestrzennej możemy sprawdzić, dla poszczególnych płaszczyzn sieciowych (hkl) ile wynosi czynnik struktury F_{hkl} .

Jeżeli $F_{hkl} = 0$ refleks ulega całkowitemu wygaszeniu (od danej płaszczyzny nie ma refleksu na rentgenogramie), jeżeli F_{hkl} jest wielokrotnością f_n mówimy o wzmocnieniu refleksu (refleks jest obserwowany na rentgenogramie).

Dla sieci typu P, obsadzonej jednym typem atomów w pozycji 0,0,0:

$$F_{hkl} = f_n \cos 2\pi (h \cdot 0 + k \cdot 0 + l \cdot 0) = f_n$$

brak wygaszeń

Dla sieci typu P, obsadzonej dwoma typami atomów;

w pozycji 0,0,0 oraz 1/2, 1/2, 1/2

$$F_{hkl} = f_{n1} \cos 2\pi (h \cdot 0 + k \cdot 0 + l \cdot 0) + f_{n2} \cos 2\pi (h/2 + k/2 + l/2) = \\ = f_{n1} + f_{n2} \cos \pi (h+k+l)$$

dla $h+k+l=2n$ (parzyste)

$$F_{hkl} = f_{n1} + f_{n2} \text{ *wzmocnienie*}$$

dla $h+k+l=2n+1$ (nieparzyste)

$$F_{hkl} = f_{n1} - f_{n2} \text{ *osłabienie*}$$

Dla sieci typu J, obsadzonej jednym typem atomów w pozycjach 0,0,0 oraz 1/2,1/2,1/2:

$$F_{hkl} = f_n \cos 2\pi (h \cdot 0 + k \cdot 0 + l \cdot 0) + f_n \cos 2\pi (h/2 + k/2 + l/2) = \\ = f_n [1 + \cos \pi (h+k+l)]$$

dla $h+k+l=2n$ (parzyste)

$$F_{hkl} = 2 f_n \text{ *wzmocnienie*}$$

dla $h+k+l=2n+1$ (nieparzyste)

$$F_{hkl} = 0 \text{ *wygaszenie*}$$

Dla sieci typu F (jeden typ atomów) w pozycjach 0,0,0; 1/2,1/2,0; 1/2,0,1/2; 0,1/2,1/2:

$$F_{hkl} = f_n [1 + \cos \pi (h+k) + \cos \pi (h+l) + \cos \pi (k+l)]$$

dla h, k, l niemieszane

$$F_{hkl} = 4 f_n \text{ *wzmocnienie*}$$

dla h, k, l mieszane

$$F_{hkl} = 0 \text{ *wygaszenie*}$$

Dla sieci typu F (dwa typy atomów) w pozycjach:

0,0,0; 1/2,1/2,0; 1/2,0,1/2; 0,1/2,1/2

oraz 1/2,1/2, 1/2; 1/2, 0, 0; 0, 1/2, 0; 0, 0, 1/2.

$$F_{hkl} = f_{n1} [1 + \cos \pi (h + k) + \cos \pi (h + l) + \cos \pi (k + l)] + \\ + f_{n2} [\cos \pi (h + k + l) + \cos h \pi + \cos k \pi + \cos l \pi]$$

dla h, k, l wszystkie parzyste

$$F_{hkl} = 4 f_{n1} + 4 f_{n2}$$

dla h, k, l wszystkie nieparzyste

$$F_{hkl} = 4 f_{n1} - 4 f_{n2}$$

dla h, k, l mieszane

$$F_{hkl} = 0$$

Sprawdzić działanie reguły wygaszeń ogólnych na przykładzie struktury **metalicznego wanadu (krystalizuje w grupie **Im3m**)**

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta[°]	I [%]
1	1	1	0	2,14000	42,195	100,0
2	2	0	0	1,51000	61,345	7,0
3	2	1	1	1,23800	76,956	20,0
4	2	2	0	1,07400	91,652	3,0
5	3	1	0	0,96000	106,719	3,0
6	2	2	2	0,87700	122,884	1,0
7	3	2	1	0,81200	143,116	3,0

Sprawdzić działanie reguły wygaszeń ogólnych na przykładzie struktury **KBr (krystalizuje w grupie **Fm3m**)**

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta[deg]	I [%]
1	1	1	1	3,81000	23,329	15,0
2	2	0	0	3,30000	26,998	100,0
3	2	2	0	2,33300	38,559	57,0
4	3	1	1	1,98900	45,571	7,0
5	2	2	2	1,90500	47,702	16,0
6	4	0	0	1,64900	55,697	10,0
7	3	3	1	1,51400	61,166	2,0
8	4	2	0	1,47500	62,965	17,0
9	4	2	2	1,34600	69,820	8,0
10	5	1	1	1,26900	74,748	2,0
11	4	4	0	1,16660	82,645	3,0
12	6	0	0	1,09900	89,000	5,0

Sprawdzić działanie reguły wygaszeń ogólnych na przykładzie struktury AgClO_4 (krystalizuje w grupie I $\bar{4}2m$)

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta[deg]	I [%]
1	1	0	1	4,00447	22,181	23,8
2	1	1	0	3,51856	25,292	100,0
3	0	0	2	3,37300	26,403	31,5
4	2	0	0	2,48800	36,071	16,0
5	1	1	2	2,43491	36,885	49,5
6	2	1	1	2,11332	42,753	19,7
7	1	0	3	2,04915	44,161	10,4
8	2	0	2	2,00223	45,253	22,1
9	2	2	0	1,75928	51,934	7,0
10	0	0	4	1,68650	54,355	1,0
11	3	0	1	1,61069	57,141	4,2
12	2	1	3	1,58173	58,287	3,1
13	3	1	0	1,57355	58,619	4,9
14	2	2	2	1,55986	59,185	7,0
15	1	1	4	1,52082	60,862	5,0
16	3	1	2	1,42601	65,392	8,7
17	2	0	4	1,39600	66,980	4,9

Reguły wygaszeń ogólnych (integralnych)

Typ sieci Bravais'a	Układ krystalograficzny	Typ refleksu	Refleks występuje, gdy
P	wszystkie układy	hkl	h, k, l - dowolne
A	jednoskośny, ortorombowy	hkl	$k+l=2n$
B	ortorombowy	hkl	$h+l=2n$
C	jednoskośny, ortorombowy	hkl	$h+k=2n$
I	ortorombowy, tetragonalny, regularny	hkl	$h+k+l=2n$
F	ortorombowy, regularny	hkl	$h+k=2n, k+l=2n, h+l=2n$
R	heksagonalny	hkl	$-h+k+l=3n$

Warunki wygaszeń dotyczą również refleksów o wskaźnikach szczególnych np.: $0k0$, $0kl$, hkk itp.

$N=h^2+k^2+l^2$	<i>hkl</i> – typ P	<i>hkl</i> – typ F	<i>hkl</i> – typ I
1	100		
2	110		110
3	111	111	
4	200	200	200
5	210		
6	211		211
8	220	220	220
9	221		
9	300		
10	310		310
11	311	311	
12	222	222	222
13	320		
14	321		321
16	400	400	400
17	410		
17	322		
18	330		330
18	411		411
19	331	331	
20	420	420	420
21	421		
22	332		332
24	422	422	422
25	430		
25	500		

XRD

Wygaszenia seryjne występują na rengenogramach faz krystalizujących w grupach przestrzennych, w których występują osie śrubowe np.: $I4_132$, $Pca2_1$, $P3_112$ itd..

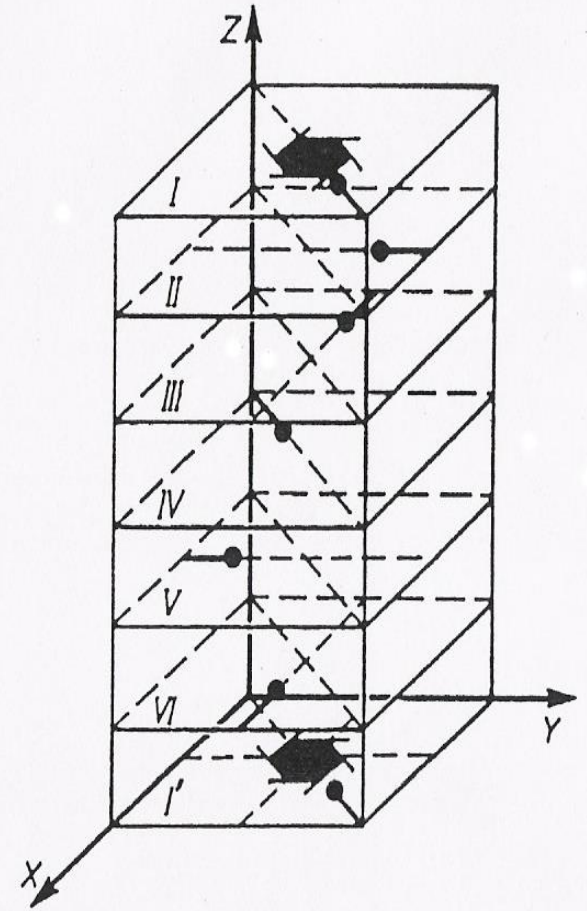
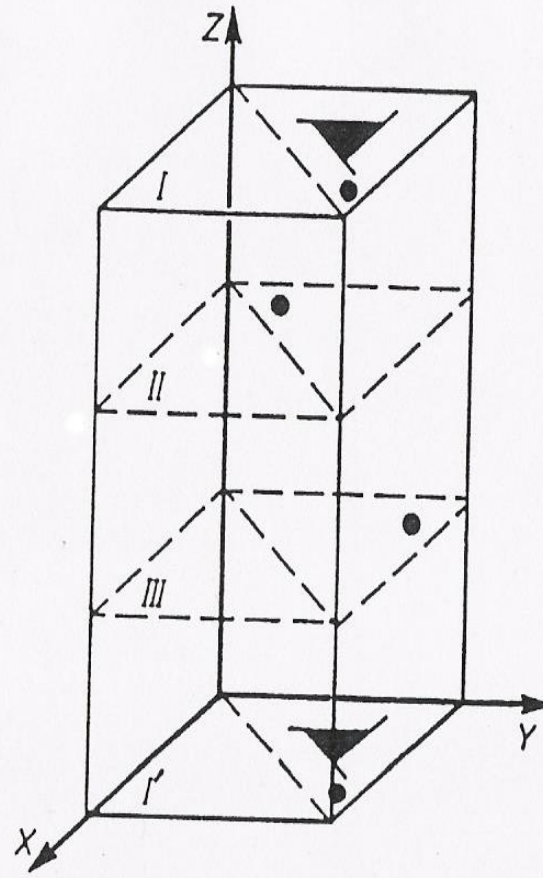
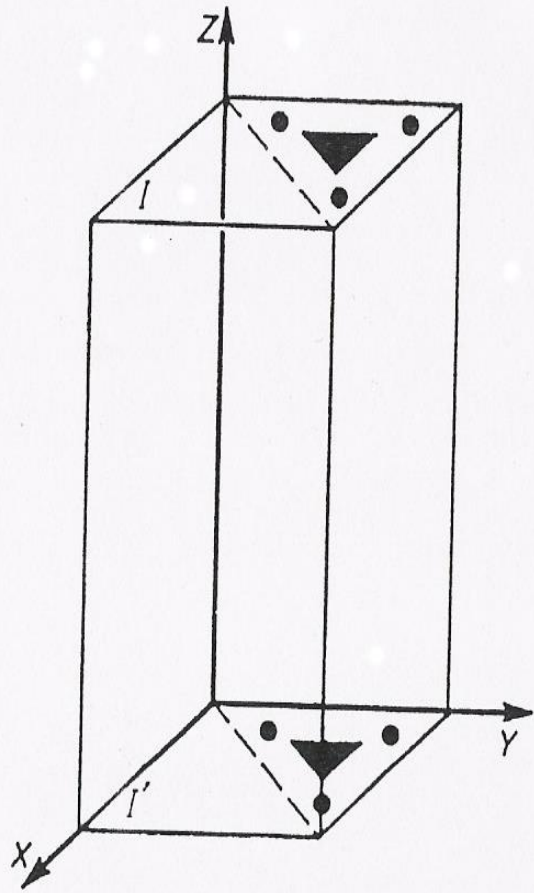
Ilość i kierunek rodzin osi śrubowych determinuje odpowiednie wygaszenia seryjne.

Wygaszenia pasowe występują na rengenogramach faz krystalizujących w grupach przestrzennych, w których występują płaszczyzny ślizgowe np.: $Ia\bar{3}d$, $Pca2_1$, $Cmma$ itd..

Ilość i kierunek rodzin płaszczyzn ślizgowych determinuje odpowiednie wygaszenia pasowe.

Reguły wygaszeń seryjnych

oś śrubowa	translacja	kierunek osi	typ refleksu	refleks występuje, gdy
$2_1, 4_2, 6_3$	$1/2 t_z$	[001]	00l	$l=2n$
$3_1, 3_2, 6_2, 6_4$	$1/3 t_z$	[001]	00l	$l=3n$
$4_1, 4_3$	$1/4 t_z$	[001]	00l	$l=4n$
$6_1, 6_5$	$1/6 t_z$	[001]	00l	$l=6n$
$2_1, 4_2$	$1/2 t_x$	[100]	h00	$h=2n$
$4_1, 4_3$	$1/4 t_x$	[100]	h00	$h=4n$
$2_1, 4_2$	$1/2 t_y$	[010]	0k0	$k=2n$
$4_1, 4_3$	$1/4 t_y$	[010]	0k0	$k=4n$
2_1	$1/2 t_x + 1/2 t_y$	[110]	hh0	$h=2n$



W sieci przestrzennej której z wymienionych faz spodziewamy się wygaszeń seryjnych? Jakiego typu refleksy powinny ulegać wygaszaniu?

LiAlSi₃O₈ (P 4₃2₁2)

4₃ o kierunku [001] – wygaszenia są dla refleksów typu (00l), dla których l nie jest podzielne przez 4 np.: (001), (002),

2₁ o kierunku [100] – wygaszenia są dla refleksów typu (h00), dla h nieparzystych np.: (100), (300),

2₁ o kierunku [010] – wygaszenia są dla refleksów typu (0k0), dla k nieparzystych np.: (010), (030)

ZnO (P 6₃mc)

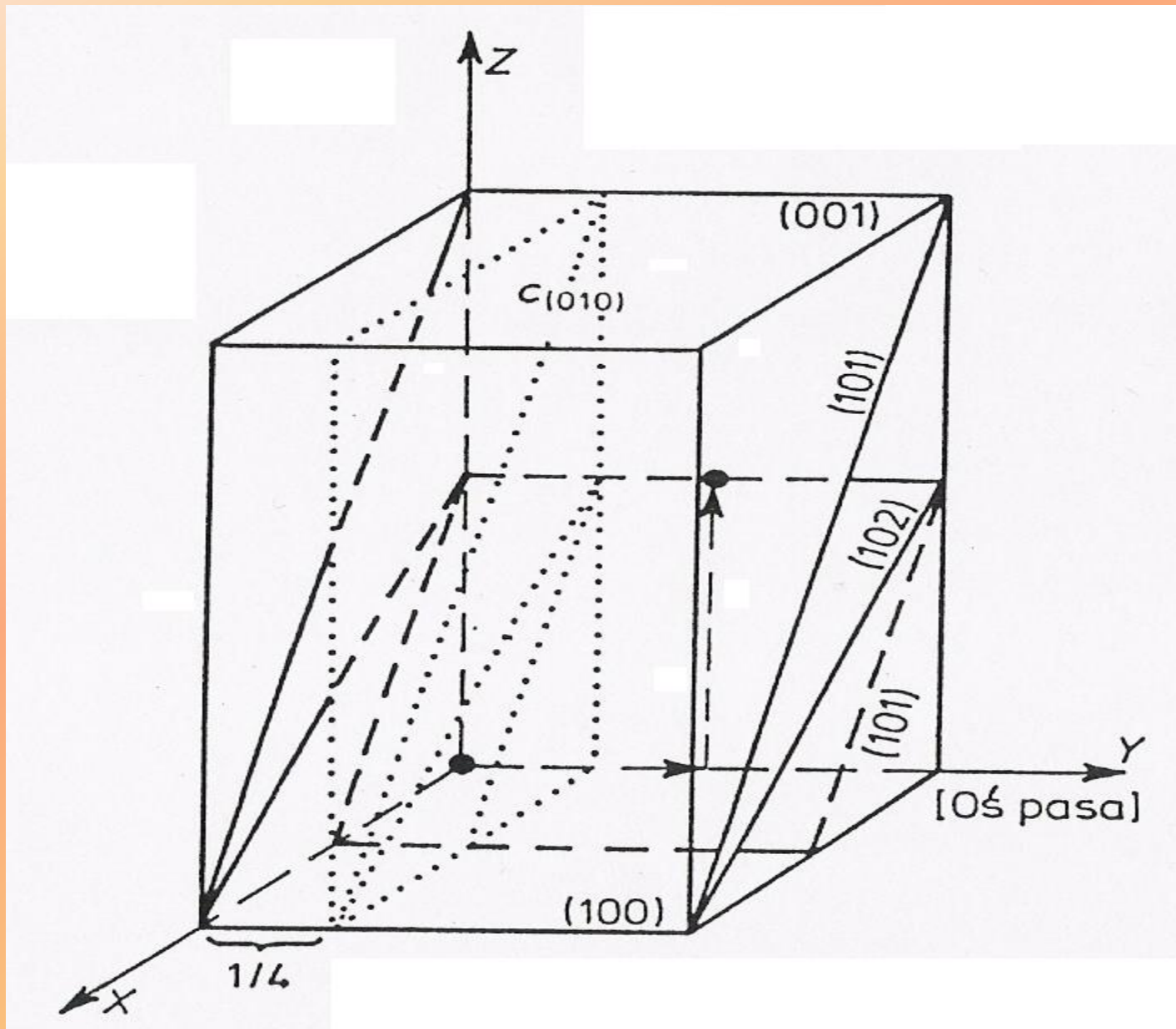
6₃ o kierunku [001] – wygaszenia są dla refleksów typu (00l), dla l nieparzystych np.: (001), (003)

Ag₃PO₄ (P $\bar{4}3n$)

brak wygaszeń seryjnych (brak osi śrubowych)

Niektóre reguły wygaszeń pasowych

układ kryst.	płaszczyzna ślizgu i jej kierunek	składowa translacji	typ sieci	typ refleksu	występuje, gdy...
jednoskośny, ortorombowy, tetragonalny, regularny	a ₍₀₁₀₎	$\tau_x / 2$	P, A, I	h 0 l	h = 2n
	c ₍₀₁₀₎	$\tau_z / 2$	P, A, C	h 0 l	l = 2n
ortorombowy, tetragonalny, regularny	n ₍₀₁₀₎	$(\tau_x + \tau_z) / 2$	P	h 0 l	h + l = 2n
ortorombowy, regularny	d ₍₀₁₀₎	$(\tau_x + \tau_z) / 4$	F, B	h 0 l	h + l = 4n
ortorombowy, tetragonalny, regularny	b ₍₁₀₀₎	$\tau_y / 2$	P, B, C	0 k l	k = 2n
	c ₍₁₀₀₎	$\tau_z / 2$	P, C, I	0 k l	l = 2n
	n ₍₁₀₀₎	$(\tau_y + \tau_z) / 2$	P	0 k l	k + l = 2n
ortorombowy, regularny	d ₍₁₀₀₎	$(\tau_y + \tau_z) / 4$	F	0 k l	k + l = 4n
ortorombowy, tetragonalny, regularny	a ₍₀₀₁₎	$\tau_x / 2$	P, B, I	h k 0	h = 2n
	b ₍₀₀₁₎	$\tau_y / 2$	P, A, B	h k 0	k = 2n
	n ₍₀₀₁₎	$(\tau_x + \tau_y) / 2$	F	h k 0	h + k = 2n
ortorombowy, regularny	d ₍₀₀₁₎	$(\tau_x + \tau_y) / 4$	F	h k 0	h + k = 2n
tetragonalny, regularny	c ₍₁₁₀₎	$\tau_z / 2$	P, F	hhl	l = 2n
	d ₍₁₁₀₎	$(\tau_y + \tau_z) / 4$	I	hhl	2h+l=4n



W sieci przestrzennej której z wymienionych faz spodziewamy się wygaszeń pasowych? Jakiego typu refleksy powinny ulegać wygaszaniu?

CaPb(OH)₆ (P n $\bar{3}$)

n (001) – wygaszenia są dla refleksów typu (hk0), dla których h+k nieparzyste np.: (210), (320),

n (010) – wygaszenia są dla refleksów typu (h0l), dla których h+l nieparzyste np.: (201), (302),

n (100) – wygaszenia są dla refleksów typu (0kl), dla których k+l nieparzyste np.: (021), (032)

ZrO₂ (P 12/c1)

c (010) – wygaszenia są dla refleksów typu (h0l), wygaszenia dla l nieparzystych np.: (101), (201)

FeBr₂ (P 3m1)

brak wygaszeń pasowych (brak płaszczyzn ślizgowych)

Reguły wygaszeń - podsumowanie

Wyprowadzając regułę wygaszeń ogólnych oraz uwzględniając reguły wygaszeń pasowych i seryjnych określ, dla których płaszczyzn sieciowych (hkl) powinny wystąpić wygaszenia dla fazy, krystalizującej w określonej grupie przestrzennej, o znanych parametrach sieciowych.

1. Reguły wygaszeń ogólnych – jeśli sieć przestrzenna nie jest prymitywna, należy na podstawie wzoru:
$$F_{hkl} = \sum f_n \cos 2\pi (h x_n + k y_n + l z_n)$$
 sprawdzić, które refleksy hkl ulegną wygaszeniu.
2. Reguły wygaszeń pasowych – jeśli w symbolu sieci przestrzennej występują płaszczyzny ślizgowe, należy spodziewać się wygaszeń, wg reguł podanych w tabeli.
3. Reguły wygaszeń seryjnych – jeśli w symbolu sieci przestrzennej występują osie śrubowe, należy spodziewać się wygaszeń, wg reguł podanych w tabeli.

Wypełnić poniższą tabelę:

wyprowadzając regułę wygaszeń ogólnych oraz uwzględniając reguły wygaszeń pasowych i seryjnych określić, dla których płaszczyzn sieciowych (hkl) powinny wystąpić wygaszenia dla fazy, krystalizującej w określonej grupie przestrzennej, o znanych parametrach sieciowych.

Refleksy od płaszczyzn symetrycznie równoważnych (jeżeli występują) należy uwzględnić tylko raz.

Podać w jakiej kolejności i dla jakich kątów ugięcia pojawią się poszczególne refleksy na rentgenogramie, jeżeli wiadomo, że zastosowano lampę Cu ($\lambda_{\text{Cu}} = 1,5406 \text{ \AA}$).

hkl	d[Å]/wygaszenie(jakie)	2θ/wygaszenie(dlaczego)	kolejność refleksów
100			
010			
001			
110			
101			
011			
111			
200			
020			
002			
210			
201			
021			
012			
120			
102			
211			
120			
112			
220			
022			
202			