

КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Институт Физики

Кафедра физики твердого тела

А.С. Храмов, И.В. Лукьянов

Рентгеноструктурный анализ поликристаллов

Часть IV

Справочник

Методическое пособие

Казанский (Приволжский) федеральный университет

2010

УДК 539.26:543

Печатается по решению Редакционно-издательского совета ГОУ ВПО

«Казанский (Приволжский) федеральный университет»

Редакционно-издательского совета Института Физики

Протокол от 01.12.2010 г.

Заседание кафедры физики твердого тела

Протокол №2 от 13.10.2010 г.

Рецензент:

к. ф.-м. н., доцент кафедры теоретической физики К(П)ФУ Деминов Р.Г.

Храмов А.С., Лукьянов И.В. Рентгеноструктурный анализ поликристаллов. Часть IV. Учебно-методическое пособие для студентов Института Физики. Казань: К(П)ФУ, 2010. - 76 с

Методическое пособие предназначено для студентов физического факультета при изучении курса «Кристаллография и рентгеноструктурный анализ». Может быть рекомендовано студентам физического, геологического и химического факультетов, специализирующихся в области физики конденсированных сред, минералогии и химии твердого тела.

Табл. 26.

© Казанский (Приволжский) федеральный университет, 2010

© Институт Физики Казанского (Приволжского) федерального университета, 2010

Содержание

Предисловие	4
Табл. 1. Длины волн К-серии характеристического рентгеновского излучения	5
Табл. 2а. Массовые коэффициенты ослабления (μ_p) для линии K_α некоторых элементов	7
Табл. 2б. Массовые коэффициенты ослабления (μ_p) для линии $K_{\beta 1}$ некоторых элементов	10
Табл. 3. Межплоскостные расстояния и интенсивности линий на рентгенограммах некоторых элементов и соединений	13
Табл. 4. Правила погасаний	30
Табл. 5а. Квадратичные формы. Кубическая сингония	37
Табл. 5б. Квадратичные формы. Тетрагональная сингония	39
Табл. 5в. Квадратичные формы. Гексагональная сингония	40
Табл. 6. Параметры элементарных ячеек некоторых химических элементов и соединений	42
Табл. 7. Расположение атомов в некоторых типах кристаллических структур	47
Табл. 8а. Вспомогательная таблица для вычисления атомных множителей	57
Табл. 8б. Атомные множители рассеяния для атомов и ионов	57
Табл. 9а. Функция Дебая	72
Табл. 9б. Значения температурного множителя при различных значениях V и ϑ	72
Табл. 9в. Значения постоянного коэффициента V' в выражении для температурного множителя	74
Табл. 10. Множители повторяемости для различных кристаллических систем	75
Литература	76

Предисловие.

В данной части пособия представлен справочный материал, необходимый при выполнении лабораторных работ в рамках спецкурса «Кристаллография и рентгеноструктурный анализ». Словесный комментарий к таблицам сведен к минимуму, так как необходимые понятия и параметры обсуждаются в соответствующих описаниях лабораторных работ. Обозначения величин и используемые сокращения такие же, что и в других частях этого пособия. Список используемых сокращений приведен в Части 5 (Краткий терминологический словарь) учебно-методического пособия «Рентгеноструктурный анализ поликристаллов».

Табл. 1. Длины волн К-серии характеристического рентгеновского излучения

Приведены значения длин волн линий α_2 , α_1 , β_1 К-серии рентгеновского излучения (в ангстремах) для некоторых элементов. Указаны атомный номер элемента (Z), потенциал возбуждения ($V_{\text{возб}}$), край поглощения (\AA) и интенсивности линий.

Z	Элемент	$V_{\text{возб}}$, кВ	α_2 сильная	α_1 оч. сильная	β средняя	Край поглощения
6	C	0,252	44,59		—	43,58
7	N	0,372	31,634		—	31,168
8	O	0,507	23,658		—	23,55
9	F	0,664	18,370		—	—
11	Na	1,07	11,9090		11,6174	—
12	Mg	1,30	9,88894		9,55827	9,5115
13	Al	1,55	8,33681		7,98109	7,9516
14	Si	1,83	7,12536		6,76814	6,7446
15	P	2,14	6,15441		5,80380	5,7866
16	S	2,46	5,37472	5,37196	5,0317	5,0184
17	Cl	2,82	4,73050	4,72760	4,4031	4,3969
19	K	3,59	3,74462	3,74122	3,4538	3,4365
20	Ca	4,00	3,26160	3,35825	3,0896	3,0702
21	Sc	4,49	3,03452	3,03114	2,7800	2,7578
22	Ti	4,95	2,75207	2,74841	2,51381	2,4973
23	V	5,45	2,50729	2,50348	2,28434	2,2690
24	Cr	5,98	2,29351	2,28962	2,08480	2,0701
25	Mn	6,54	2,10568	2,10175	1,91015	1,8964
26	Fe	7,10	1,93991	1,93597	1,75653	1,7433
27	Co	7,71	1,79278	1,78892	1,62075	1,6081
28	Ni	8,29	1,66169	1,65784	1,50010	1,4880
29	Cu	8,86	1,54433	1,54050	1,39217	1,3804
30	Zn	9,65	1,43894	1,43511	1,29522	1,2833
31	Ga	10,4	1,34394	1,34003	1,20785	1,1957
32	Ge	11,1	1,25797	1,25401	1,12890	1,1165
33	As	11,9	1,17981	1,17581	1,05726	1,0450
34	Se	12,7	1,10876	1,10471	0,99212	0,9798
35	Br	13,5	1,04376	1,03969	0,93273	0,9199

Z	Элемент	V _{возб} , кВ	α_2 сильная	α_1 оч. сильная	β средняя	Край поглощения
37	Rb	15,2	0,92963	0,92551	0,82863	0,8155
38	Sr	16,1	0,87938	0,87521	0,78288	0,7697
39	Y	17,0	0,83300	0,82879	0,74068	0,7276
40	Zr	18,0	0,79010	0,78588	0,70169	0,6888
41	Nb	19,0	0,75040	0,74615	0,66572	0,6529
42	Mo	20,0	0,71354	0,70926	0,63225	0,6198
44	Ru	22,1	0,64736	0,64304	0,57246	0,5605
45	Rh	23,2	0,61761	0,61325	0,54559	0,5338
46	Pd	24,4	0,58980	0,58542	0,52052	0,5092
47	Ag	25,5	0,56378	0,55936	0,49701	0,4858
48	Cd	26,7	0,53941	0,53498	0,47506	0,4641
49	In	27,9	0,51652	0,51209	0,45451	0,4439
50	Sn	29,1	0,49502	0,49056	0,43583	0,4248
51	Sb	30,4	0,47479	0,47032	0,41707	0,4066
52	Te	31,8	0,45575	0,45126	0,40007	0,3897
53	J	33,2	0,43781	0,43329	0,38470	0,3738
55	Cs	35,9	0,40481	0,40027	0,35508	0,3447
56	Ba	37,4	0,38965	0,38509	0,34158	0,3314
57	La	38,7	—	—	0,32875	—
58	Ce	40,3	—	—	0,31636	—
68	Er	57,5	—	—	0,22345	—
69	Tu	59,5	—	—	0,21602	—
70	Yb	61,4	—	—	0,20958	—
71	Lu	63,4	—	—	0,20293	—
73	Ta	67,4	0,22029	0,21548	0,19029	0,1839
74	W	69,3	0,21881	0,20899	0,18459	0,1784
76	Os	73,8	0,20162	0,19678	0,17360	0,1678
77	Ir	76,0	0,19588	0,1910	0,16853	0,1631
78	Pt	78,1	0,19037	0,18550	0,16366	0,1581
79	Au	80,5	0,18506	0,18018	0,15897	0,1534
81	Ti	85,2	0,17503	0,17013	—	0,1447
82	Pb	87,6	0,17028	0,16536	—	0,1408
83	Bi	90,1	0,16570	0,16077	—	0,1371
90	Th	109	0,13782	0,13280	—	0,1129
92	U	115	0,13096	0,12594	—	0,1068

Табл. 2. Массовые коэффициенты ослабления

Приведены значения массовых коэффициентов поглощения химических элементов с атомным номером Z от 1 до 94 для волн K_{α} и K_{β} рентгеновского излучения, типичного для рентгеноструктурных исследований.

Табл. 2а. Массовые коэффициенты ослабления (μ_{ρ}) для линии K_{α} некоторых элементов ($\text{см}^2/\text{г}$)

Z	Поглощающий элемент	Излучающий элемент						
		Cr	Fe	Co	Ni	Cu	Mo	W
1	H	—	—	—	—	—	—	0,327
2	He	—	—	—	—	—	—	0,25
3	Li	1,77	1,08	0,861	0,689	0,557	0,058	0,19
4	Be	4,28	2,62	2,08	1,67	1,35	0,24	0,148
5	B	8,49	5,20	4,13	3,31	2,67	0,36	0,16
6	C	14,9	9,10	7,23	5,79	4,67	0,555	0,175
7	N	28,9	14,6	11,6	9,29	7,50	0,82	0,181
8	O	35,9	22,0	17,5	14,0	11,3	1,17	0,19
9	F	51,6	31,6	25,1	20,1	16,2	1,68	0,202
10	Ne	71,3	43,7	34,7	27,8	22,4	2,33	0,214
11	Na	97,0	60,7	48,7	39,4	32,1	3,4	0,23
12	Mg	123	77,0	61,8	50,0	40,8	4,57	0,26
13	Al	153	95,8	76,8	62,1	50,7	5,21	0,27
14	Si	187	117	94,1	76,1	62,1	7,12	0,32
15	P	226	142	114	91,8	74,9	8,3	0,35
16	S	270	196	135	110	89,4	10,3	0,41
17	Cl	318	199	160	129	105	12,1	0,436
18	Ar	372	233	187	151	123	13,5	0,47
19	K	407	260	211	172	142	17,3	0,57
20	Ca	462	296	240	196	161	20,5	0,66
21	Sc	521	333	270	221	182	23,1	0,71
22	Ti	585	374	303	248	204	25,9	0,78
23	V	79,9	418	338	276	228	28,0	0,86
24	Cr	90,4	464	376	307	253	32,1	0,98
25	Mn	102	64,6	416	340	280	34,8	1,08
26	Fe	114	72,4	58,5	374	308	39,1	1,24
27	Co	127	80,8	65,3	53,2	338	42,9	1,35

Z	Поглощающий элемент	Излучающий элемент						
		Cr	Fe	Co	Ni	Cu	Mo	W
28	Ni	141	89,8	72,5	59,1	48,5	47,0	1,54
29	Cu	156	99,4	80,3	65,4	53,7	51,2	1,63
30	Zn	173	110	88,6	72,2	59,2	55,7	1,79
31	Ga	190	121	97,5	79,4	65,1	60,4	1,95
32	Ge	208	132	107	87,0	71,4	65,5	2,1
33	As	228	145	117	95,1	78,1	70,5	2,25
34	Se	248	158	127	104	85,1	75,8	2,45
35	Br	270	172	139	113	92,6	81,5	2,6
36	Kr	293	186	150	122	100	87,4	2,8
37	Rb	317	201	163	132	109	90,0	3,00
38	Sr	342	217	176	143	117	96,0	3,3
39	Y	369	234	189	154	126	100	3,5
40	Zr	397	252	204	166	136	16,7	3,7
41	Nb	426	271	219	178	146	18,0	4,00
42	Mo	456	290	234	191	157	19,3	4,3
43	Tc	488	310	251	204	168	20,7	4,6
44	Ru	522	332	268	218	179	22,0	4,85
45	Rh	557	354	286	233	191	23,5	5,15
46	Pd	593	377	304	248	204	24,5	5,4
47	Ag	631	401	324	264	217	26,6	5,8
48	Cd	670	426	344	280	230	28,3	6,1
49	In	711	452	365	298	244	30,0	6,4
50	Sn	754	479	387	315	259	32,5	6,67
51	Sb	798	507	410	334	274	33,7	7,00
52	Te	845	537	433	353	290	35,6	7,4
53	I	892	567	458	375	307	38,0	7,69
54	Xe	786	598	483	394	323	39,7	8,00
55	Cs	816	621	502	409	335	41,3	8,3
56	Ba	599	654	528	430	353	43,8	8,68
57	La	214	687	555	452	371	45,5	9,1
58	Ce	226	602	583	475	390	48,5	9,6
59	Pr	237	447	612	499	409	50,7	9,9
60	Nd	249	469	534	523	429	53,0	10,4
61	Pm	262	172	399	548	450	55,4	10,8
62	Sm	275	181	418	470	471	57,9	11,2
63	Eu	289	190	156	358	410	60,6	11,6

Z	Поглощающий элемент	Излучающий элемент						
		Cr	Fe	Co	Ni	Cu	Mo	W
64	Gd	304	200	164	374	429	64,5	12,2
65	Tb	318	209	172	142	324	67,3	12,7
66	Dy	333	219	180	149	339	70,3	13,3
67	Ho	348	229	188	156	129	73,4	13,8
68	Er	364	239	197	163	135	76,5	14,4
69	Tm	380	250	205	170	141	79,7	2,35
70	Yb	397	261	214	177	147	85,1	2,43
71	Lu	414	272	224	185	154	86,5	2,5
72	Hf	428	279	228	188	156	84,0	2,58
73	Ta	447	291	238	196	162	88,0	2,67
74	W	466	304	248	205	170	92,1	2,76
75	Re	485	317	259	213	177	96,4	2,9
76	Os	506	330	270	222	184	101	3,00
77	Ir	527	343	281	231	192	105	3,1
78	Pt	548	357	292	241	200	110	3,18
79	Au	570	372	304	251	208	115	3,3
80	Hg	593	386	316	261	216	120	3,44
81	Tl	616	402	328	271	224	125	3,55
82	Pb	640	417	341	281	233	130	3,66
83	Bi	664	433	354	292	242	136	3,8
84	Po	689	449	368	303	251	141	3,9
85	At	715	466	381	314	260	118	4,00
86	Rn	741	483	395	326	270	124	4,1
87	Fr	936	602	489	401	330	97,8	4,25
88	Ra	982	632	514	421	347	101	4,4
89	Ac	1030	663	539	442	364	104	4,5
90	Th	1080	696	565	463	382	108	4,65
91	Pa	1130	729	593	486	400	115	4,8
92	U	—	764	621	509	419	124	4,88
93	Np	—	800	650	533	439	57,6	5,00
94	Pu	—	837	681	557	459	60,3	5,15

Табл. 26. Массовые коэффициенты ослабления (μ_p) для линии K_β некоторых элементов ($\text{см}^2/\text{г}$)

Z	Поглощающий эл-т	Излучающий элемент						
		Cr	Fe	Co	Ni	Cu	Mo	W
1	H	—	—	—	—	—	0,37	0,320
2	He	—	—	—	—	—	0,32	0,245
3	Li	1,35	0,816	0,646	0,514	0,414	0,27	0,195
4	Be	3,25	1,97	1,56	1,24	1,00	0,223	0,145
5	B	6,46	3,92	3,10	2,49	1,99	0,29	0,150
6	C	11,3	6,86	5,42	4,32	3,47	0,445	0,168
7	N	18,1	11,0	8,70	6,93	5,58	0,626	0,173
8	O	27,3	16,6	13,1	10,4	8,40	0,884	0,180
9	F	39,2	29,8	18,8	15,0	12,0	1,2	0,190
10	Ne	54,2	32,9	26,0	20,7	16,7	1,6	0,195
11	Na	74,7	46,3	37,0	30,0	24,2	2,18	0,203
12	Mg	94,7	58,7	46,9	37,8	30,7	2,95	0,224
13	Al	118	73,1	58,4	47,0	38,2	3,68	0,235
14	Si	144	89,5	71,5	57,6	46,7	4,8	0,269
15	P	174	108	86,3	69,5	56,4	5,73	0,285
16	S	208	129	103	82,9	67,3	7,29	0,329
17	Cl	245	152	121	97,8	79,4	8,6	0,360
18	Ar	286	178	142	114	92,8	10,0	0,386
19	K	317	201	162	132	108	11,9	0,442
20	Ca	360	228	184	150	123	13,8	0,504
21	Sc	406	258	208	169	139	16,0	0,560
22	Ti	456	289	233	190	156	18,0	0,582
23	V	509	323	260	212	174	20,0	0,637
24	Cr	70,1	358	289	235	193	22,2	0,721
25	Mn	79,0	396	320	260	213	24,3	0,790
26	Fe	88,5	55,7	353	287	235	27,8	0,900
27	Co	98,7	62,2	50,0	315	258	32,0	1,00
28	Ni	110	69,1	55,6	45,1	282	35,1	1,11
29	Cu	121	76,5	61,5	49,9	40,8	39,0	1,18
30	Zn	134	84,4	67,9	55,1	45,0	43,5	1,29
31	Ga	147	92,8	74,7	60,6	49,5	48,0	1,40
32	Ge	162	102	81,9	66,4	54,3	51,0	1,55
33	As	177	111	89,5	72,6	59,3	55,0	1,60

Z	Поглоща- ющий эл-т	Излучающий элемент						
		Cr	Fe	Co	Ni	Cu	Mo	W
34	Se	193	121	97,6	79,9	64,7	61,0	1,80
35	Br	210	132	106	86,1	70,4	66,0	1,93
36	Kr	227	143	115	93,4	76,4	70,0	2,10
37	Rb	246	155	125	101	82,6	77,0	2,20
38	Sr	266	167	135	109	89,2	83,0	2,35
39	Y	286	180	145	118	96,1	89,0	2,50
40	Zr	308	194	156	127	103	95,0	2,10
41	Nb	331	208	168	136	111	100	2,90
42	Mo	354	223	180	146	119	14,6	3,09
43	Tc	379	239	192	156	127	15,5	3,25
44	Ru	405	255	205	167	136	16,0	3,50
45	Rh	432	272	219	178	145	17,5	3,70
46	Pd	460	290	233	189	155	18,5	3,85
47	Ag	480	309	248	201	165	19,5	4,16
48	Cd	520	328	264	214	175	20,0	4,30
49	In	552	348	280	227	186	21,0	4,60
50	Sn	585	369	297	241	197	22,0	4,76
51	Sb	620	390	314	255	208	23,0	5,00
52	Te	655	413	332	269	220	24,0	5,10
53	I	692	436	351	285	233	25,5	5,51
54	Xe	731	460	370	300	245	26,5	5,70
55	Cs	759	478	385	312	255	28,0	5,90
56	Ba	700	508	405	328	268	24,0	6,16
57	La	730	529	426	345	282	31,0	6,40
58	Ce	517	556	447	363	296	32,0	6,60
59	Pr	188	583	469	381	311	33,5	6,80
60	Nd	197	540	492	399	326	35,0	7,00
61	Pm	207	565	516	418	342	36,5	7,20
62	Sm	218	399	485	438	358	38,0	7,40
63	Eu	228	417	500	458	374	39,5	7,6
64	Gd	239	156	353	430	392	41,5	7,8
65	Tb	251	163	369	450	409	43,0	8,1
66	Dy	262	170	140	314	385	44,5	8,5
67	Ho	274	178	146	328	270	46,5	8,4
68	Er	287	186	153	126	281	48,5	8,8
69	Tm	299	195	160	131	293	50,0	8,9

Z	Поглоща- ющий эл-т	Излучающий элемент						
		Cr	Fe	Co	Ni	Cu	Mo	W
70	Yb	312	204	167	137	113	52,0	9,3
71	Lu	326	212	174	143	119	54,0	9,6
72	Hf	335	217	177	145	120	57,0	9,9
73	Ta	350	226	184	151	125	59,0	1,95
74	W	365	236	192	158	130	62,0	2,00
75	Re	380	246	200	164	136	65,0	2,05
76	Os	396	256	209	171	141	68,0	2,15
77	Ir	418	267	217	178	147	71,0	2,2
78	Pt	430	278	226	185	153	74,0	2,25
79	Au	447	289	235	193	159	77,0	2,35
80	Hg	464	300	244	201	166	81,0	2,4
81	Tl	483	312	254	208	172	82,0	2,48
82	Pb	501	324	264	216	178	86,0	2,6
83	Bi	520	336	274	225	186	89,0	2,66
84	Po	540	349	284	233	193	93,0	2,7
85	At	560	362	295	242	200	96,8	2,85
86	Rn	581	375	306	251	207	100	2,9
87	Fr	728	464	375	306	252	105	3,00
88	Ra	764	487	394	321	264	110	3,1
89	Ac	802	511	414	337	277	100	3,2
90	Th	841	536	434	354	291	76,0	3,3
91	Pa	881	562	455	371	305	79,0	3,4
92	U	923	589	476	388	319	81,0	3,49
93	Np	967	616	499	407	334	84,0	3,65
94	Pu	1010	645	522	426	350	87,0	3,8

Табл. 3. Межплоскостные расстояния и интенсивности линий на рентгенограммах некоторых элементов и соединений

Приведены значения межплоскостных расстояний и относительных интенсивностей линий на дифрактограммах некоторых неорганических веществ.

Для каждого соединения приведены следующие данные: химическая формула соединения, в скобках - излучение, на котором была получена рентгенограмма. Иногда, приводятся еще какие-либо сведения о соединениях (обозначение фазы, название минерала и т. д.). В левом столбце таблицы приведены величины межплоскостных расстояний (Å), в правом столбце – относительные интенсивности в 100-балльной шкале.

Следует иметь в виду, что данные в таблице носят приближенный характер, так как отклонения от стехиометрического состава (образование твердых растворов и т. д.) приводят к изменению межплоскостных расстояний, а переход к другому излучению и (или) изменение способа регистрации меняют соотношение интенсивностей.

Ag (Mo)	1,89	6	1,67	24	1,75	3	2,33	100	
2,36	100	1,78	43	1,422	16	1,70	13	2,02	40
2,04	53	1,64	43	1,360	3	1,66	9	1,430	30
1,445	27	1,475	1	1,179	1	1,64	7	1,219	30
1,232	53	1,422	11	1,082	2	1,58	1	1,168	7
1,179	5	1,406	11	1,054	2	1,56	9	1,011	2
1,022	1	1,345	1	0,960	1	1,53	9	0,928	4
0,938	8	1,245	5	0,907	1	1,465	5	0,905	4
0,915	5	1,211	17			1,447	1	0,826	1
0,834	3	1,164	3	Ag ₂ SO ₄ (Mo)		1,400	7	0,778	1
0,786	4	1,097	1	4,71	7	1,361	1		
0,691	3	1,075	9	3,98	27	1,330	11	α-Al ₂ O ₃ (ко-	
		1,043	1	3,17	53	1,270	4	рунд) (Mo)	
Ag ₂ MoO ₄		0,978	2	2,86	100	1,230	5	3,479	72
(Mo)		0,951	5	2,64	53	1,187	1	2,552	92
5,3	6	0,915	1	2,52	11	1,161	4	2,379	41
3,28	17			2,41	33	1,112	3	2,165	3
2,80	100	Ag ₂ O (Mo)		2,35	1	1,091	4	2,085	100
2,68	17	3,35	1	2,27	8	1,075	3	1,740	41
2,32	14	2,72	100	1,97	11			1,601	83
2,12	5	2,36	40	1,91	40	Al (Mo)		1,546	7

1,510	2	2,131	52	1,988	50	1,223	92	1,227	40
1,404	38	2,077	49	1,937	19	1,201	24	1,173	9
1,374	42	1,901	3	1,79	6	1,182	84	1,019	3
1,276	6	1,815	8	1,596	6	1,119	36	0,935	9
1,239	16	1,733	3	1,533	9	1,107	36	0,910	7
1,1898	6	1,712	15	1,497	3	1,088	56	0,832	4
1,1601	1	1,678	3	1,44	3	1,068	60	0,784	4
1,1470	4	1,633	43	1,389	100	1,041	80		
1,1382	1	1,608	12	1,285	3	1,023	96	Ba (Cu)	
1,1255	5	1,570	4	1,235	3	0,998	40	3,55	100
1,0988	6	1,522	6	1,176	3	0,955	64	2,513	20
1,0831	3	1,480	20	1,134	9	0,942	72	2,051	40
1,0781	7	1,431	7	0,990	9	0,929	44	1,776	18
1,0426	13	1,423	12			0,922	44	1,590	12
1,0175	1	1,400	6	γ -Al ₂ O ₃ (низ-		0,908	88	1,451	5
0,9976	11	1,376	16	котемп) (Mo)		0,891	52	1,343	14
0,9819	2	1,340	5	2,39	19	0,854	68	1,1852	5
0,9345	3	1,329	6	2,275	13			1,1236	4
0,9178	2	1,304	3	1,975	72	As ₂ O ₃ (Mo)		1,0717	3
0,9076	12	1,289	6	1,862	6	6,3	56	1,0257	1
0,9052	3	1,279	1	1,52	6	3,18	100	0,9856	6
0,8991	6	1,256	4	1,396	100	2,75	24	0,9174	2
0,8804	4	1,243	5	1,139	113	2,53	32	0,8615	8
0,8698	2	1,218	2	0,987	6	2,24	8		
0,8580	12	1,204	4	0,882	6	2,12	16	BaCO ₃ (Cu)	
0,8502	4	1,1783	1	0,806	6	1,95	24	4,56	9
0,8303	22	1,1739	7			1,66	16	4,45	4
0,8137	4	1,1408	3	As (Cu)		1,59	8	3,72	100
0,8075	11	1,003	1	3,555	76	1,54	16	3,68	53
		1,0923	3	3,18	100	1,438	8	3,215	15
β -Al ₂ O ₃ ·H ₂ O				2,780	4	1,343	8	3,025	4
(Mo)		γ -Al ₂ O ₃ (вы-		2,054	12	1,301	8	2,749	3
4,71	13	сокотемп)		1,891	8	1,266	8	2,656	11
3,99	100	(Mo)		1,781	16	1,205	8	2,628	24
3,214	10	2,86	6	1,764	16	1,064	8	2,590	23
2,558	30	2,72	25	1,662	48			2,281	6
2,434	3	2,595	19	1,562	32	Au (Mo)		2,226	2
2,386	5	2,445	41	1,387	20	2,35	100	2,150	28
2,356	8	2,29	31	1,368	20	2,03	53	2,104	12
2,317	56	2,16	6	1,286	28	1,439	33	2,048	10

2,019	21	0,933	10	1,67	15	Bi (Mo)		0,397	5
1,940	15	0,920	5	1,63	8	3,28	100	0,389	8
1,859	3			1,58	10	2,35	50	0,378	5
1,830	2	BaO ₂ (Cu)		1,52	25	2,27	50	0,372	5
1,737	2	3,42	59	1,465	7	2,01	7	0,363	7
1,706	1	3,33	100	1,420	20	1,96	13	0,358	20
1,677	5	2,696	68	1,255	18	1,86	30		
1,649	4	2,120	50	1,190	8	1,63	20	C (графит)	
1,633	4	1,959	46	1,093	13	1,54	3	(Mo)	
1,563	3	1,9079	21	1,028	5	1,490	20	3,38	100
1,543	<1	1,7131	6			1,440	27	2,12	5
1,521	4	1,6664	22	Be (Mo)		1,327	13	2,02	10
1,508	2	1,6556	29	1,97	20	1,180	3	1,69	10
1,484	1	1,4463	9	1,79	14	1,135	10	1,227	18
1,375	6	1,3672	22	1,73	100	1,089	7	1,150	9
1,366	4	1,3493	6	1,328	12	1,073	7	1,120	1
1,348	4	1,2900	14	1,137	12	1,045	3	1,049	1
1,335	3	1,2749	7	1,022	12	1,020	3	0,991	3
1,328	4	1,2553	8	0,983	2			0,828	1
1,295	3	1,2504	7	0,963	8	C (алмаз)		0,796	1
1,248	1	1,260	5	0,955	6	(Mo)		0,707	1
1,233	2	1,182	5			2,05	100	0,695	1
1,215	<1			BeO (Mo)		1,26	50		
1,202	<1	BaSO ₄ (Mo)		2,34	80	1,072	40	Ca (Mo)	
1,1703	1	4,35	20	2,19	50	0,885	10	3,21	100
1,1335	2	3,89	25	2,06	100	0,813	25	2,80	30
1,0951	2	3,57	10	1,59	24	0,721	40	1,97	20
		3,44	63	1,350	32	0,680	20	1,68	20
BaO (Mo)		3,31	35	1,239	32	0,625	10	1,61	10
3,20	100	3,10	63	1,170	4	0,597	20	1,28	5
2,75	88	2,83	40	1,150	20	0,558	15	1,246	3
1,95	75	2,72	45	1,130	4	0,538	6	1,238	5
1,66	50	2,47	15	1,032	3	0,507	3		
1,59	25	2,31	10	0,915	8	0,496	8	CaCO ₃ (арагонит)	
1,380	10	2,20	15	0,884	2	0,473	20	(Mo)	
1,265	20	2,10	100	0,870	2	0,462	15	3,40	100
1,231	25	2,04	10	0,822	8	0,442	5	3,29	48
1,128	15	1,92	5	0,780	3	0,432	3	3,05	2
1,060	5	1,85	15	0,758	8	0,417	12	2,88	2
0,975	5	1,74	8			0,409	8	2,70	64

2,49	48	1,112	5	0,9782	1	2,61	16	0,8951	1
2,36	48			0,9767	3	2,38	3	0,8855	4
2,19	11	CaCO ₃ (каль-		0,9655	2	2,290	10	0,8802	3
2,10	24	цит) (Cu)		0,9636	4	2,262	6	0,8790	3
1,98	100	3,86	12	0,9562	<1	1,993	5	0,8710	1
1,88	64	3,035	100	0,9429	2	1,929	30	0,8467	2
1,82	32	2,845	3	0,9376	2	1,848	13	0,8380	2
1,74	40	2,495	14			1,694	14	0,8331	2
1,63	2	2,285	18	CaCrO ₄ (Mo)		1,635	5		
1,56	6	2,095	18	4,80	6	1,588	22	CaO (Mo)	
1,53	2	1,927	5	3,63	100	1,552	9	2,76	40
1,50	6	1,913	17	2,90	15	1,438	3	2,39	100
1,470	8	1,875	17	2,70	75	1,429	2	1,69	63
1,410	8	1,626	4	2,57	15	1,386	3	1,445	20
1,362	6	1,604	8	2,39	20	1,355	4	1,382	20
1,263	6	1,587	2	2,27	8	1,339	3	1,200	10
1,240	13	1,525	5	1,86	75	1,307	4	1,100	7
1,210	6	1,518	4	1,81	20	1,260	2	1,071	25
1,190	2	1,510	3	1,62	15	1,254	7	0,979	13
1,173	8	1,473	2	1,58	2	1,249	12	0,922	3
1,130	5	1,440	5	1,50	23	1,204	5	0,847	3
1,110	2	1,422	3	1,45	18	1,188	5	0,810	3
		1,356	1	1,345	13	1,169	4	0,800	6
CaCO ₃ (вате-		1,339	2	1,293	10	1,130	3	0,759	2
рит) (Mo)		1,297	2	1,210	6	1,092	3	0,731	1
4,26	13	1,284	1	1,188	5	1,084	1	0,723	2
3,58	63	1,247	1	1,154	8	1,082	4	0,671	1
3,29	75	1,235	2	1,130	8	1,041	2	0,666	1
2,73	100	1,1795	3	1,027	8	1,0344	3		
2,31	8	1,1538	3	1,000	5	1,0087	5	CaO ₂ (Mo)	
2,06	63	1,1425	1	0,973	8	0,9670	3	5,7	5
1,866	15	1,1244	<1			0,9643	3	4,29	10
1,827	63	1,0613	1	CaMoO ₄ (Cu)		0,9555	1	3,90	3
1,65	31	1,0473	3	8,263	2	0,9527	2	3,59	38
1,55	8	1,0447	4	8,110	1	0,9504	3	3,30	75
1,48	8	1,0352	2	7,974	2	0,9402	4	3,04	50
1,367	8	1,0234	<1	7,938	4	0,9238	1	2,73	100
1,318	10	1,0118	2	4,76	28	0,9047	3	2,51	25
1,289	13	0,9895	<1	3,10	100	0,9026	5	2,30	15
1,145	8	0,9846	1	2,86	13	0,8973	1	2,11	5

2,06	63	1,970	40	CdCO ₃ (Mo)		1,171	5	2,55	100
1,99	10	1,764	35	3,77	80	1,153	6	1,86	40
1,93	18	1,673	3	2,94	100	1,111	4	1,74	30
1,87	18	1,622	30	2,46	50	1,0703	4	1,63	30
1,83	50	1,600	35	2,23	3	1,0659	7	1,51	13
1,74	5	1,495	4	2,06	45	1,0183	3	1,440	20
1,65	25	1,438	4	1,88	33	0,9950	7	1,400	20
1,54	10	1,416	7	1,83	80	0,9480	3	1,271	15
1,480	10	1,393	15	1,58	40	0,9328	2	1,165	7
1,414	5	1,321	8	1,50	17	0,9229	6	1,139	8
1,366	8	1,245	20	1,470	5	0,9113	2	1,110	13
1,315	8	1,215	3	1,419	15	0,8896	7	1,090	3
1,290	15	1,186	5	1,355	5	0,8891	7	1,028	10
		1,155	4	1,295	5	0,8771	4	1,005	3
Ca(OH) ₂ (Mo)		1,132	3	1,260	17	0,8733	7	0,980	4
4,93	50	1,096	5	1,230	5	0,8664	3	0,925	5
3,11	25	1,085	2	1,190	8	0,8592	3		
2,63	100	1,062	7	1,142	8	0,8304	3	CeO ₂ (Mo)	
1,93	50	1,049	9	1,120	8	0,8233	4	3,11	100
1,79	40			1,022	8	0,8214	5	2,69	25
1,69	30	Cd (Mo)		0,976	7	0,8151	4	1,90	80
1,55	2	2,80	40	0,942	7	0,7988	7	1,62	60
1,485	20	2,58	30	0,880	7	0,7825	8	1,55	10
1,450	20	2,34	100					1,347	10
1,315	16	1,89	20	CdMoO ₄ (Cu)		CdO (Cu)		1,237	25
1,178	2	1,51	25	3,054	100	2,712	100	1,207	16
1,145	15	1,486	18	2,798	16	2,349	88	1,101	20
1,063	10	1,400	3	2,576	21	1,661	43	1,037	18
1,035	5	1,310	27	2,259	4	1,416	28	0,954	4
1,012	8	1,286	2	2,220	4	1,355	13	0,912	14
0,955	5	1,252	20	1,896	30	1,1742	5	0,899	2
0,850	2	1,228	2	1,823	14	1,0772	9	0,853	4
		1,170	3	1,661	18	1,0499	13	0,816	2
CaSnO ₃ (Mo)		1,060	5	1,565	25	0,9584	11	0,756	4
3,98	45	1,020	4	1,528	11	0,9036	9	0,722	4
3,36	12	0,959	10	1,400	3	0,8300	5	0,703	2
3,16	3	0,921	2	1,289	4				
2,80	100	0,863	4	1,230	10	Cd(OH) ₂ (Mo)		α-Co (Mo)	
2,63	12	0,821	2	1,228	14	4,70	100	2,182	80
2,36	5			1,188	7	3,02	63	1,920	100

1,490	20	2,36	50	2,35	20	3,40	100	Cu (Mo)	
1,250	70	2,04	25	2,20	24	2,86	25	2,08	100
1,145	30	1,73	50	2,10	16	2,36	20	1,81	53
1,054	60	1,65	25	2,05	10	2,25	20	1,277	33
1,045	30	1,55	50	1,97	20	2,00	7	1,089	33
0,953	10			1,90	11	1,96	10	1,043	9
0,839	20	CoO (Mo)		1,81	13	1,84	5	0,905	3
0,788	20	2,45	67	1,74	3	1,74	15		
0,752	10	2,12	100	1,70	10	1,71	3	CuO (Mo)	
0,738	10	1,50	100	1,67	24	1,68	1	2,51	100
0,717	10	1,281	40	1,62	10	1,60	3	2,31	100
		1,227	40	1,59	13	1,56	1	1,85	20
β -Co (Mo)		1,060	10	1,56	6	1,54	1	1,70	8
2,04	100	0,975	10	1,53	5	1,50	5	1,57	8
1,77	44	0,951	30	1,498	11	1,470	1	1,50	15
1,253	22	0,869	20	1,448	8	1,431	3	1,408	20
1,066	22	0,819	7	1,412	8	1,405	5	1,370	20
1,021	5			1,360	3	1,376	2	1,298	5
0,886	3	Co(OH) ₂ (Mo)		1,329	6			1,258	10
0,813	3	4,40	100	1,282	8	Cr ₂ O ₃ (Mo)		1,159	5
0,792	3	2,44	23	1,262	10	3,62	45	1,086	3
0,723	3	2,31	83	1,194	5	2,67	70	1,007	3
0,682	3	1,80	40	1,168	5	2,47	70	0,978	3
		1,50	8			2,17	30	0,885	3
CoCO ₃ (Mo)		1,425	40	Cr (Mo)		2,03	4		
3,64	40	1,367	27	2,052	100	1,81	45	Cu ₂ O (Mo)	
2,76	100	1,215	5	1,436	40	1,67	100	3,00	3
2,34	11	1,196	1	1,172	80	1,58	6	2,45	100
2,12	11	1,162	4	1,014	50	1,465	30	2,12	31
1,96	11	1,120	4	0,909	60	1,432	45	1,51	44
1,71	71			0,829	20	1,294	16	1,283	31
1,50	11	CoSO ₄ (Mo)		0,768	70	1,236	6	1,228	5
1,415	11	4,82	64	0,718	10	1,209	6	1,065	3
1,355	6	3,80	8	0,6775	40	1,172	5	0,977	5
		3,40	100	0,6420	30	1,148	6	0,953	3
CoCrO ₄ (Mo)		3,30	16	0,6120	30	1,123	6	0,869	3
3,30	50	3,08	48	0,5865	30	1,087	12	0,819	3
3,10	50	2,57	16			1,041	10		
2,89	50	2,51	48	CrO ₃ (Mo)		1,025	2		
2,62	100	2,40	2	4,20	75	0,946	6		

α -Fe (Mo)		FeCl ₃ (Mo)		Fe ₂ O ₃ (Mo)		2,085	16	FeS (Mo)	
2,0268	100	5,9	32	3,68	18	2,01	2	2,97	33
1,4332	19	5,7	32	2,69	100	1,940	80	2,88	4
1,1702	30	5,1	5	2,51	75	1,850	12	2,65	33
1,0134	9	4,79	6	2,20	18	1,735	40	2,06	100
0,9064	12	4,50	3	1,84	63	1,570	11	1,71	33
0,8275	6	3,49	3	1,69	63	1,529	47	1,61	7
		3,09	3	1,60	13	1,490	6	1,48	4
γ -Fe (Mo)		3,03	3	1,485	50	1,457	2	1,442	9
2,07	100	2,90	3	1,452	50	1,439	14	1,321	13
1,80	50	2,68	100	1,351	3	1,392	8	1,299	5
1,26	32	2,52	2	1,308	18	1,371	16	1,179	1
1,081	32	2,40	2	1,259	13	1,330	2	1,105	13
1,018	4	2,23	2	1,230	3	1,298	3	1,050	7
		2,08	40	1,190	8	1,266	5	0,995	1
FeCl ₂ (Mo)		2,02	2	1,163	5				
5,8	63	1,96	3	1,140	13	Fe ₃ O ₄ (Mo)		FeS ₂ (Mo)	
3,06	30	1,75	32	1,104	10	4,85	6	3,12	27
2,54	100	1,67	6	1,056	8	2,97	28	2,70	75
2,32	7	1,63	16	0,962	10	2,53	100	2,42	45
2,09	7	1,460	6	0,954	5	2,42	11	2,21	35
1,949	13	1,340	5	0,900	3	2,10	32	1,91	45
1,796	63	1,300	2	0,881	5	1,71	16	1,63	100
1,718	13	1,190	3	0,843	5	1,61	64	1,56	15
1,630	2	1,116	5			1,483	80	1,50	17
1,550	4	1,080	2	γ -Fe ₂ O ₃ ·H ₂ O		1,326	6	1,450	25
1,464	20	1,063	3	(Mo)		1,279	20	1,240	10
1,418	5	1,009	2	6,35	100	1,210	5	1,210	15
1,269	3	0,985	3	4,24	6	1,121	10	1,180	10
1,171	2			3,96	2	1,092	32	1,153	5
1,136	18	FeO (Mo)		3,30	100	1,049	10	1,105	12
1,116	2	2,47	50	3,09	2	0,970	16	1,041	25
1,066	2	2,14	100	2,98	3	0,966	8	1,005	3
1,038	8	1,51	63	2,785	2	0,940	6	0,987	10
0,980	1	1,293	15	2,705	5	0,880	10	0,903	3
0,899	2	1,238	8	2,58	2	0,859	20	0,878	2
0,849	2	1,072	3	2,47	100	0,853	8	0,855	2
0,804	2	0,984	3	2,36	24	0,825	2		
		0,959	5	2,26	2	0,814	10	FeSO ₄ (Mo)	
		0,876	3	2,18	2	0,809	5	4,78	24

3,58	13	FeSi ₂ (Mo)		1,2276	5	0,9562	11	1,1503	3
3,25	100	5,1	30	1,2216	17	0,8946	6	1,0697	4
2,56	13	2,37	63	1,1928	15	0,8628	4	1,0464	1
2,40	2	1,89	30	1,1853	4	0,8166	2	1,0247	6
2,28	13	1,84	100	1,1302	5	0,7923	8	0,9917	5
2,23	10	1,78	15	1,1119	8			0,9671	2
2,05	11	1,70	8	1,0866	3	GeO ₂ (Mo)		0,9502	5
1,99	20	1,434	1	1,0540	1	4,31	20	0,9336	3
1,83	16	1,343	13	1,0496	3	3,41	100	0,8891	5
1,78	2	1,298	1	1,0355	4	2,48	14	0,8668	4
1,70	3	1,269	8	1,0111	2	2,35	25	0,8428	1
1,63	20	1,165	7	0,9976	2	2,28	16	0,8168	2
1,59	20	1,084	20	0,9775	1	2,15	20	0,8060	3
1,55	10	1,058	5	0,9735	5	2,00	2		
1,440	6	0,950	2	0,9706	7	1,87	25	HfO ₂ (Mo)	
1,420	2	0,923	2	0,9626	3	1,71	12	5,07	20
1,361	5	0,846	1	0,9515	1	1,62	2	3,68	40
1,281	13	0,775	1	0,9369	1	1,56	25	3,61	30
1,251	2			0,8986	4	1,495	8	3,15	100
1,200	8	Ga (Cu)		0,8948	2	1,445	4	2,82	100
1,140	3	3,831	28	0,8923	4	1,410	25	2,59	60
1,110	2	2,953	100	0,8817	7	1,386	8	2,52	50
1,014	2	2,925	50	0,8802	7	1,339	10	2,48	20
1,000	3	2,262	60	0,8690	4	1,301	2	2,32	50
		1,996	85	0,8654	3	1,277	10	2,196	60
		1,957	56	0,8383	8	1,248	2	2,171	30
FeSi (Mo)		1,947	17	0,8376	4	1,228	6	2,006	30
3,16	15	1,916	16	0,8247	5			1,981	40
2,59	10	1,789	21	0,8379	6	Hf (Cu)		1,838	60
2,00	100	1,763	6	0,8084	3	2,768	27	1,807	60
1,82	40	1,599	11			2,531	34	1,794	20
1,414	1	1,586	3	Ge (Cu)		2,428	100	1,768	30
1,345	10	1,476	3	3,266	100	1,866	16	1,684	50
1,238	4	1,461	14	2,000	57	1,599	14	1,653	60
1,193	20	1,406	9	1,706	39	1,440	16	1,634	40
1,116	4	1,404	8	1,414	7	1,385	2	1,600	40
1,052	1	1,391	4	1,298	10	1,351	16	1,580	30
1,023	2	1,2766	4	1,1547	17	1,336	12	1,533	50
0,974	5	1,2475	20	1,0888	7	1,265	4	1,501	40
0,875	1	1,2379	14	1,0000	3	1,214	3	1,486	40
0,830	2								

1,467	50	2,75	38	In ₂ O ₃ (Mo)	0,9899	7	J ₂ (Cr)		
1,439	30	2,40	75	4,11	12	0,9806	2	3,69	100
1,410	50	1,81	63	2,91	100	0,9720	8	3,09	100
1,352	20	1,75	8	2,69	2	0,9624	6	2,52	8
1,318	40	1,64	15	2,51	24	0,9457	8	2,44	18
1,299	10	1,60	10	2,37	6	0,9376	8	2,33	15
1,295	30	1,486	38	2,25	2	0,9292	5	2,11	15
1,263	10	1,440	20	2,142	7	0,9719	7	2,02	20
1,256	20	1,413	8	1,973	13	0,9144	5	1,97	30
1,237	10	1,378	5	1,843	4	0,9003	6	1,81	10
1,203	30	1,200	13	1,780	49	0,8931	2	1,76	10
1,172	10	1,187	10	1,729	4	0,8792	3	1,71	20
1,160	10	1,161	5	1,677	4	0,8725	3	1,51	10
1,153	10	1,148	3	1,634	7	0,8666	2	1,460	8
1,143	10	1,103	5	1,593	4	0,8602	2	1,400	5
1,134	10	1,079	3	1,552	8	0,85384	6		
1,121	10	1,050	5	1,519	42	0,84096	2	K (Mo)	
1,108	10	1,026	3	1,486	10	0,84184	3	3,75	100
1,099	10	0,982	3	1,456	10	0,83606	5	2,65	16
1,084	10	0,943	3	1,425	4	0,83061	2	2,16	30
1,070	10			1,398	3	0,82511	2	1,87	4
1,049	10	In (Mo)		1,371	4	0,81964	4	1,68	4
1,039	10	2,72	100	1,350	2	0,81407	3	1,52	2
1,025	10	2,46	25	1,281	6	0,80377	4	1,418	2
		2,29	40	1,260	6	0,79882	4		
Hg (Mo)		1,68	30	1,242	7	0,79393	2	KBr (Mo)	
2,771	80	1,62	15	1,225	3	0,78906	8	3,29	100
2,255	100	1,462	20	1,205	2	0,78439	2	2,33	42
1,750	60	1,395	30	1,189	2	0,77959	5	1,89	10
1,474	40	1,355	15	1,175	6			1,64	7
1,379	20	1,144	2	1,158	14	Ir (Cu)		1,468	17
1,235	20	1,088	10	1,129	9	2,2170	100	1,343	7
1,125	10	1,055	2	1,115	8	2,9197	50	1,164	3
1,085	10	1,040	2	1,103	2	1,3575	41	1,095	3
1,035	10	1,025	2	1,088	5	1,1574	47	1,040	3
0,943	10	0,980	2	1,065	5	1,1082	15		
		0,948	6	1,042	4	0,9598	10	KBrO ₃ (Mo)	
HgO (Mo)		0,905	2	1,031	9	0,8808	39	4,38	50
2,96	100	0,888	2	1,021	4	0,8586	39	3,20	100
2,83	75			1,009	2	0,7838	45	3,00	63

2,72	5	3,145	78	KF (Mo)		3,85	21	2,88	100
2,18	50	2,890	67	3,08	27	3,70	35	2,66	2
2,01	8	2,831	28	2,66	100	3,54	90	2,50	12
1,89	25	2,809	6	1,88	83	3,42	35	2,41	20
1,77	25	2,733	<1	1,60	10	3,20	100	2,21	24
1,73	10	2,528	14	1,54	27	2,93	82	2,08	40
1,60	10	2,515	19	1,333	8	2,86	54	2,00	5
1,50	10	2,385	3	1,223	4	2,55	37	1,94	4
1,460	8	2,290	6	1,191	20	2,28	9	1,88	10
1,412	25	2,267	8	1,089	10	2,18	65	1,85	4
1,380	5	2,215	3	1,027	1	1,91	12	1,76	3
1,358	15	2,167	24	0,943	1	1,84	22	1,68	10
1,235	15	2,158	22	0,901	1	1,81	22	1,62	4
1,178	10	2,123	7	0,889	2	1,75	7	1,57	6
1,140	10	2,118	25	0,843	1	1,73	18	1,440	10
1,100	5	2,063	4			1,71	15	1,419	3
1,074	5	1,967	3	KJ (Mo)		1,66	15	1,392	3
1,025	5	1,891	1	4,08	40	1,59	12	1,350	6
1,004	5	1,870	4	3,53	100	1,46	12	1,302	5
		1,813	1	2,50	80	1,44	12	1,285	2
		1,800	4	2,13	24	1,41	12	1,242	4
KCl (Mo)		1,792	<1	2,03	32	1,38	13	1,212	1
3,13	100	1,776	6	1,76	16			1,175	5
2,21	60	1,743	2	1,62	8	KOH (Mo)		1,141	4
1,81	14	1,696	6	1,58	32	4,00	17	1,115	1
1,57	6	1,646	7	1,442	24	3,71	13	1,094	2
1,401	12	1,633	3	1,358	5	3,13	23	1,048	2
1,280	6	1,560	5	1,247	3	2,93	67	1,019	2
1,108	2	1,528	<1	1,194	3	2,69	100	0,983	2
1,047	2	1,506	2	1,176	8	2,58	13	0,965	2
0,991	2	1,470	1	1,117	5	2,44	17		
		1,428	2	1,095	2	2,30	23	La (Mo)	
KClO ₄ (Cu)		1,416	<1	1,080	2	1,98	83	3,23	100
5,61	13	1,402	2	1,067	3			2,86	70
4,47	30	1,386	2	0,990	2	K ₂ SO ₄ (Mo)		2,27	50
4,42	9	1,356	2	0,980	2	5,0	2	1,86	50
3,98	<1	1,339	<1			4,19	24	1,70	20
3,78	13	1,275	2	KMnO ₄ (Cu)		3,73	8	1,61	20
3,629	29			5,72	21	3,38	5	1,55	40
3,487	100			4,54	50	3,00	80	1,52	10
3,359	31								

1,45	20	1,81	40	1,471	30	1,183	9	β -Mn (Mo)	
1,36	20	1,73	10	1,378	18	1,118	1	2,81	7
1,23	30	1,50	6	1,341	13	1,092	3	2,10	100
1,17	30	1,378	15	1,303	3	1,034	5	2,00	66
1,11	30	1,343	15	1,225	3	1,030	1	1,90	27
1,08	10	1,226	8	1,180	3	1,0067	7	1,68	7
0,98	30	1,157	8	1,084	4	0,9543	1	1,485	3
		1,062	1	1,030	7	0,9503	5	1,410	3
Li (Mo)		1,016	6	1,010	3	0,9455	8	1,237	30
2,48	100	0,998	2	0,974	4	0,9085	3	1,170	20
1,75	17	0,950	2	0,925	1	0,9001	<1	1,064	3
1,430	20	0,917	1	0,898	3	0,8974	1	1,051	3
1,240	3	0,907	1	0,870	1	0,8923	2		
		0,842	1	0,763	1	0,8643	5	MnCO ₃ (Mo)	
LiCl (Mo)		0,804	1	0,740	1	0,8156	3	3,65	30
2,96	100	0,783	1			0,7865	3	2,84	100
2,56	100			MgO (Mo)				2,36	14
1,81	60	LiOH (Mo)		2,42	6	α -Mn (Mo)		2,16	12
1,55	32	4,35	33	2,10	100	2,36	2	2,00	12
1,482	12	2,98	20	1,485	75	2,22	2	1,82	2
1,283	5	2,75	100	1,266	6	2,09	100	1,76	50
1,178	12	2,67	23	1,213	15	1,89	20	1,53	6
1,148	14	2,51	13	1,050	4	1,81	10	1,452	4
1,048	6	2,42	17	0,963	1	1,74'	16	1,365	4
0,989	5	2,08	3	0,940	10	1,340	2	1,298	2
0,909	2	1,97	3	0,937	5	1,283	7		
0,869	3	1,85	5	0,860	4	1,258	10	MnO (Mo)	
0,857	2	1,77	7	0,854	2	1,210	28	2,56	66
		1,74	3			1,190	2	2,22	100
LiF (Mo)		1,65	7	Mg(OH) ₂ (Cu)		1,130	3	1,57	66
2,32	67	1,490	7	4,77	90	1,048	6	1,339	23
2,00	100	1,280	3	2,725	6	0,983	2	1,281	17
1,419	23	1,257	3	2,365	100	0,960	2	1,110	7
1,211	3			1,794	56	0,936	3	1,019	7
1,160	3	Mg (Mo)		1,573	36	0,834	2	0,994	17
		2,77	30	1,494	18	0,820	2	0,906	7
LiJ (Mo)		2,60	25	1,373	16	0,813	2	0,853	3
3,47	100	2,45	100	1,363	2	0,801	2		
3,00	75	1,90	20	1,310	11	0,793	2	MnO ₂ (Mo)	
2,12	40	1,60	20	1,192	2	0,770	2	3,11	100

2,40	50	1,281	37	2,312	20	2,821	100	1,0788	10
2,21	4	1,114	17	2,277	25	1,994	55	1,0233	7
2,12	12	0,995	23	2,135	25	1,701	2	0,9872	4
1,98	4	0,908	7	1,982	40	1,628	15	0,9759	6
1,62	50	0,841	23	1,965	50	1,410	6	0,9343	2
1,56	12	0,787	3	1,907	5	1,294	1	0,9064	6
1,440	8	0,742	14	1,852	80	1,261	11	0,8975	4
1,390	4	0,704	11	1,822	35	1,1515	7	0,8650	7
1,303	16	0,672	9	1,788	20	1,0855	1	0,8427	8
1,050	4	0,643	6	1,754	5	0,9969	2		
1,001	4	0,617	14	1,735	65	0,9533	1	Na ₂ SO ₄ (Mo)	
				1,720	5	0,9401	3	4,66	73
Mn ₃ O ₄ (Mo)		MoO ₂ (Mo)		1,694	40	0,8917	4	3,84	18
4,92	20	4,78	20	1,666	70	0,8601	1	3,178	51
3,08	31	3,41	100	1,630	40	0,8503	3	3,075	47
2,87	8	2,804	30			0,8141	2	2,783	100
2,75	63	2,433	50	Na (Mo)				2,646	48
2,56	8	2,420	85	3,02	100	NaF (Mo)		2,329	21
2,48	100	2,405	40	2,13	15	2,32	100	2,211	5
2,36	13	2,398	50	1,75	20	1,64	60	1,919	4
2,22	31	2,176	30	1,51	5	1,336	16	1,891	4
2,03	15	2,171	10	1,355	5	1,158	3	1,864	31
1,79	18	2,147	30	1,246	3	1,035	8	1,841	6
1,70	5	1,833	35	1,145	3	0,946	3	1,798	4
1,64	5	1,718	55			0,821	1	1,680	12
1,57	50	1,704	80	NaBr (Mo)		0,774	1	1,662	8
1,54	50	1,692	50	3,44	45			1,605	5
1,466	3			2,96	100	NaJ (Cu)		1,589	3
1,438	18	MoO ₃ (Mo)		2,09	63	3,74	82	1,553	10
1,384	4	7,0	15	1,79	20	3,236	100	1,537	<1
1,340	8	3,82	85	1,71	20	2,289	63	1,512	2
1,300	3	3,47	20	1,487	10	1,951	41	1,497	5
1,277	13	3,44	40	1,362	5	1,868	23	1,465	<1
1,237	4	3,27	100	1,329	35	1,618	14	1,429	5
1,192	5	3,01	10	1,216	10	1,485	14	1,386	3
1,123	4	2,707	40	1,145	5	1,447	23	1,324	3
		2,657	70	1,053	5	1,321	19	1,304	3
Mo (Mo)		2,613	5			1,246	3	1,297	6
2,22	100	2,528	15	NaCl (Mo)		1,1444	5	1,279	5
1,57	56	2,377	30	3,258	13	1,0941	8	1,258	1

1,233	1	1,88	16	Os (Cu)	1,963	2	1,256	3	
1,214	1	1,490	4	2,367	34	1,850	14	1,226	4
1,1922	<1	1,450	2	2,160	33	1,797	14	1,219	5
1,1654	<1	1,420	2	2,076	100	1,724	15	1,1977	<1
1,1345	3	1,340	4	1,595	18	1,640	13	1,1462	2
		1,270	2	1,3668	20	1,596	<1	1,1232	2
Nb (Mo)		1,240	4	1,2300	20	1,534	9	1,0768	3
2,33	100			1,1840	4	1,514	2	1,0610	2
1,65	20	Ni (Mo)		1,1551	21	1,474	11	1,0386	<1
1,34	32	2,03	100	1,1416	17	1,408	<1	1,0254	<1
1,16	6	1,76	50	1,0799	3	1,372	1	0,9738	1
1,041	10	1,244	32	1,0383	4	1,363	<1	0,9462	1
0,950	1	1,061	32	0,9827	4	1,325	1	0,9365	3
0,879	6	1,017	4	0,9145	10	1,297	2	0,9200	3
0,775	2	0,808	8	0,8949	3	1,289	3		
0,736	1	0,788	8	0,8764	16	1,252	2	PbO ₂ (Mo)	
		0,719	8	0,8474	11	1,244	2	3,49	100
NH ₄ Cl (Mo)		0,678	8	0,8268	6	1,203	4	2,78	100
3,85	15			0,8116	9	1,188	3	2,46	28
2,72	100	NiO (Mo)				1,174	4	1,84	100
2,22	2	2,40	60	Pb (Mo)		1,139	2	1,74	20
1,92	12	2,08	100	2,85	100	1,120	2	1,68	8
1,72	8	1,474	60	2,47	50	1,102	4	1,56	20
1,57	25	1,258	24	1,74	50	1,091	2	1,51	24
1,370	5	1,203	12	1,490	50			1,480	24
1,288	3	1,042	2	1,428	17	PbO (красный)		1,390	12
1,221	7	0,957	4	1,134	17	(Cu)		1,268	16
1,165	1	0,933	6	1,105	17	5,018	5	1,210	8
1,115	1	0,852	3			3,115	100	1,145	8
1,033	4	0,802	2	PbO (желтый)		2,809	62	1,125	8
0,912	1			(Cu)		2,510	18	1,000	12
0,864	1	Ni(OH) ₂ (Mo)		5,893	6	2,124	1	0,948	4
		4,60	67	3,067	100	1,988	8		
NH ₄ F (Mo)		2,70	100	2,946	31	1,872	37	Pb ₃ O ₄ (Mo)	
3,85	100	2,33	67	2,744	28	1,675	24	3,35	100
3,59	60	1,75	7	2,493	<1	1,558	6	2,88	43
3,39	60	1,56	53	2,377	20	1,542	11	2,76	43
2,62	20	1,48	33	2,278	<1	1,438	2	2,62	28
2,22	60	1,348	7	2,203	<1	1,405	5	1,95	14
2,02	40	1,295	7	2,008	12	1,282	2	1,89	28

1,82	28	1,522	11	1,1540	15	1,83	18	1,639	60
1,74	43	1,335	4	1,1142	2	1,78	20	1,502	75
1,62	14	1,322	12	1,0530	3	1,73	18	1,430	100
1,58	14	1,319	22	1,0099	2	1,66	10	1,079	88
1,51	14	1,1334	5	0,9311	7	1,61	20		
1,405	14	1,0806	9	0,9033	3	1,54	3	Si (Mo)	
2,89	55	1,0761	3	0,8854	15	1,480	3	3,138	100
2,84	65	1,0072	5	0,8671	8	1,440	10	1,920	60
2,80	31	1,0035	6	0,8373	5	1,425	15	1,638	35
2,74	68	0,9977	6	0,8354	8	1,360	13	1,357	8
2,64	38	0,9966	3	0,8151	2	1,310	3	1,246	13
2,60	42	0,9623	3	0,7968	5	1,235	3	1,1083	17
2,47	30	0,9053	6					1,0450	9
2,41	46	0,8812	3	Rh (Mo)		Sb (Mo)		0,9599	5
2,35	29	0,8400	6	2,20	100	3,71	15	0,9178	11
2,05	22	0,8377	5	1,90	50	3,10	100	0,8586	9
1,95	56	0,8338	4	1,345	30	2,24	63	0,8281	5
1,89	10	0,8219	2	1,146	40	2,14	63		
1,87	24			1,099	13	1,86	15	SiO ₂	
1,84	15	Pt (Mo)		0,952	4	1,76	44	(α-кварц)	
		2,27	100	0,873	15	1,55	20	(Mo)	
		1,956	86	0,852	15	1,470	13	4,25	25
		1,385	86	0,777	8	1,410	20	3,35	100
		1,179	100	0,733	10	1,360	25	2,45	15
		1,130	57			1,310	8	2,29	10
		0,978	28	S (Mo)		1,258	15	2,23	6
		0,897	71	5,8	31	1,243	10	2,12	9
		0,875	71	3,85	100	1,215	3	1,97	8
		0,798	57	3,45	31	1,190	3	1,82	25
		0,753	43	3,21	50	1,120	3	1,66	8
				3,10	38	1,075	10	1,54	20
		Re (Cu)		2,85	38	1,047	3	1,450	2
		2,388	32	2,63	20	1,031	8	1,375	25
		2,226	34	2,50	18			1,299	4
		2,105	100	2,43	20	Se (Mo)		1,256	3
		1,629	11	2,38	15	3,71	40	1,228	3
		1,380	22	2,30	15	2,982	12	1,200	6
		1,262	16	2,12	25	2,070	25	1,180	8
		1,1948	3	2,00	3	1,998	25	1,155	1
		1,1730	20	1,90	25	1,761	50	1,080	4

1,048	2	1,262	15	1,489	20	1,494	11	1,213	10
1,035	1	1,204	27	1,325	21	1,484	12	1,180	2
1,015	1	1,126	10	1,249	11	1,382	3	1,150	6
		0,994	5	1,1470	6	1,344	5	1,110	3
SiO ₂ (α- кristобалит) (Mo)		0,950	7	1,0968	10	1,225	4	1,085	8
		0,925	4	1,0260	9	1,209	3	1,057	3
		0,839	2	0,9895	4	1,202	4	1,035	2
4,04	100			0,9365	3	1,1747	6	0,948	8
3,13	16	SiO ₂		0,9087	7	1,1697	8	0,929	1
2,85	20	(α-тридимит)		0,8671	13	1,1520	1	0,905	4
2,48	32	(Mo)		0,8450	12	1,1026	4	0,880	4
2,11	5	4,30	100			1,0766	6	0,845	2
2,02	5	4,08	33	β-Sn (Mo)		1,0303	4		
1,93	12	3,81	67	2,91	100	1,0201	3	Sr (Mo)	
1,87	12	3,43	1	2,79	80	0,9965	1	3,50	100
1,69	5	3,21	1	2,05	32	0,9852	1	3,03	60
1,61	12	2,96	17	2,01	80	0,9674	<1	2,14	20
1,57	1	2,80	3	1,65	24	0,9507	3	1,83	100
1,53	4	2,49	27	1,480	24	0,9371	3	1,74	20
1,494	6	2,305	11	1,450	20	0,9056	4		
1,430	5	2,08	5	1,298	16	0,8988	4	Ta (Mo)	
1,400	2	1,84	3	1,200	20	0,8824	5	2,33	100
1,370	3	1,69	8	1,092	11	0,8524	4	1,65	20
1,339	3	1,635	4	1,040	8	0,8503	4	1,346	30
1,300	3	1,598	4	1,022	6	0,8405	6	1,165	5
1,279	3	1,53	5	0,980	3	0,8062	1	1,042	5
1,235	1	1,439	3	0,927	6	0,8020	<1	0,881	5
1,203	1	1,399	7	0,885	2	0,8002	1		
1,181	2	1,36	3	0,847	3			Te (Mo)	
1,095	3	1,305	4	0,805	2	SnO ₂ (Mo)		5,8	19
		1,244	3			3,34	100	3,86	14
SiO ₂ (β- кristобалит) (Mo)		1,192	5	SnO (Cu)		2,64	63	3,24	100
		1,153	3	4,85	10	2,36	18	2,34	48
		1,097	1	2,989	100	1,75	63	2,22	32
4,142	100			2,688	37	1,67	10	2,08	14
2,527	45	α-Sn (Mo)		2,418	14	1,58	5	1,96	14
2,072	7	3,751	100	2,039	1	1,492	10	1,83	28
1,639	35	2,294	83	1,901	13	1,435	10	1,77	10
1,456	30	1,956	53	1,797	27	1,412	15	1,61	20
1,374	10	1,622	12	1,604	25	1,315	6	1,470	28

1,418	13	α -Tl (Mo)		1,218	2	2,077	100	0,9382	4
1,380	16	3,00	40	1,193	2	1,684	20	0,9069	12
1,309	8	2,75	23	1,170	6	1,339	100	0,8826	6
1,258	5	2,62	100	1,125	3	1,332	100	0,8675	1
1,175	14	2,02	23	1,093	6	1,235	5	0,8369	6
1,119	5	1,73	29	1,057	6	1,172	70	0,8290	2
1,045	5	1,56	29			1,152	5	0,8237	2
1,005	5	1,460	23	V_2O_5 (Mo)		1,121	40	0,8125	5
0,968	2	1,445	17	5,7	33	1,088	5		
0,866	2	1,158	11	4,38	100	1,044	10	$Zn(OH)_2$	
		1,105	17	4,09	13	0,947	20	(Mo)	
Th (Mo)		1,074	6	3,39	83	0,910	20	4,38	100
2,92	100	0,962	6	2,87	53	0,859	30	3,27	80
2,53	50			2,76	13	0,827	10	2,71	50
1,79	38	V (Mo)		2,68	7	0,773	20	2,57	4
1,52	31	2,14	100	2,61	13	0,756	10	2,15	16
1,460	13	1,51	7	2,18	7	0,737	20	2,35	4
1,265	8	1,236	20	1,99	7	0,717	5	2,26	24
1,60	15	1,072	3	1,92	13	0,703	5	2,20	24
1,133	8	0,958	3	1,86	7			2,14	24
1,033	5	0,875	1	1,77	10	ZnO (Cu)		1,964	6
0,975	4	0,810	3	1,65	7	2,816	71	1,900	6
0,895	3	0,759	1	1,56	7	2,602	56	1,850	6
		0,714	1			2,476	100	1,740	16
Ti (Mo)				W (Mo)		1,911	29	1,638	12
2,556	40	V_2O_3 (Mo)		2,23	100	1,626	40	1,595	20
2,341	40	3,65	60	1,58	29	1,477	35	1,550	16
2,241	100	2,70	80	1,290	71	1,407	6	1,527	20
1,728	40	2,47	60	1,117	17	1,379	28	1,408	6
1,477	40	2,32	2	1,000	29	1,359	14	1,360	8
1,336	50	2,18	20	0,913	6	1,301	3	1,307	6
1,249	40	2,03	2	0,846	34	1,225	5	1,254	4
1,233	30	1,83	25	0,745	11	1,1812	3	1,234	4
1,176	10	1,69	100	0,707	6	1,0929	10	1,190	4
1,125	10	1,61	2	0,674	6	1,0639	4	1,170	4
1,065	20	1,57	3	0,622	6	1,0422	10	1,099	6
0,989	30	1,470	25			1,0158	5	1,068	8
0,942	30	1,429	30	Zn (Mo)		0,9848	4	1,032	4
0,917	30	1,330	10	2,472	30	0,9764	7	1,000	4
0,880	10	1,235	4	2,293	10	0,9555	1		

ZnSO ₄ (Mo)	1,976	25	1,222	1	1,463	18	0,9783	2	
4,16	68	1,803	15	1,185	1	1,399	3	0,9660	4
3,61	15	1,761	25	1,147	1	1,368	18	0,9474	2
3,53	33	1,682	13	1,083	5	1,350	12	0,9327	3
3,37	5	1,612	2			1,287	4	0,9003	5
2,61	100	1,587	5	Zr (Cu)		1,2296	4	0,8771	3
2,43	33	1,559	23	2,798	33	1,1689	3	0,8577	1
2,37	10	1,450	15	2,573	32	1,0842	4	0,8292	2
2,30	10	1,413	10	2,459	100	1,0588	2	0,8201	2
2,08	5	1,382	15	1,894	17	1,0360	6		
2,03	5	1,277	2	1,616	17	1,0063	3		

Табл. 4. Правила погасаний

Таблица предназначена для определения рентгеновских групп, то есть пространственных групп симметрии, обладающих общим законом погасаний. Приведены лауэвские классы симметрии, пространственные группы симметрии и законы погасаний, характерные для них. Тире означает отсутствие погасаний. Индексы h, k, l и их суммы дают законы погасаний. Там, где нет особых указаний, индексы, приведенные в графе погасаний, означают, что интерференции, для которых h, k, l или их суммы равны нечетному числу, будут погашены. Погасания специального типа оговорены в таблице. Σ означает закон погасания для гранецентрированной решетки:

$$h + k = 2n + 1; k + l = 2n + 1; l + h = 2n + 1.$$

В прямоугольниках выделены независимые погасания, необходимые и достаточные для определения данных групп. Невыделенные погасания вытекают из независимых погасаний.

I. Триклинная сингония (Лауэ-класс 1)

№	Пространственные группы	Погасания
1	$P_1; P\bar{1}$	

II. Моноклинная сингония (Лауэ-класс 2/m)

№	Пространственные группы	Погасания		
		hkl	$h0l$	$0k0$
2	$P2/m; P2; Pm$	—	—	—
3	$P2_1/m; P2_1$	—	—	k
4	$P2/c; Pc$	—	l	—
5	$P2_1/c$	—	l	k
6	$C2/m; C2; Cm$	$h + k$	h	k
7	$C2/c; Cc$	$h + k$	$h l$	k

III. Ромбическая сингония (Лауэ-класс $m\bar{3}m$)

№	Пространств. группы	Погасания						
		hkl	$0kl$	$h0l$	$hk0$	$h00$	$0k0$	$00l$
8	$Pmmm; P222; Fmm2$	—	—	—	—	—	—	—

№	Пространств. группы	Погасания						
		hkl	$0kl$	$h0l$	$hk0$	$h00$	$0k0$	$00l$
9	$P2_122$	—	—	—	—	\boxed{h}	—	—
10	$P2_12_12$	—	—	—	—	\boxed{h}	\boxed{k}	—
11	$P2_12_12_1$	—	—	—	—	\boxed{h}	\boxed{k}	\boxed{l}
12	$Pcmm$; $Pcm2$; $Pc2m$	—	\boxed{l}	—	—	—	—	l
13	$Pnmm$; $Pnm2$	—	$\boxed{k+l}$	—	—	—	k	l
14	$Pbam$; $Pba2$	—	\boxed{k}	\boxed{h}	—	h	k	—
15	$Pcam$; $Pca2$	—	\boxed{l}	\boxed{h}	—	h	—	l
16	$Pccm$; $Pcc2$	—	\boxed{l}	\boxed{l}	—	—	—	l
17	$Pnam$; $Pna2$	—	$\boxed{k+l}$	\boxed{h}	—	h	k	l
18	$Pncm$; $Pnc2$	—	$\boxed{k+l}$	\boxed{l}	—	—	k	l
19	$Pnmm$; $Pnn2$	—	$\boxed{k+l}$	$\boxed{h+l}$	—	h	k	l
20	$Pbca$	—	\boxed{k}	\boxed{l}	\boxed{h}	h	k	l
21	$Pcca$	—	\boxed{l}	\boxed{l}	\boxed{h}	h	—	l
22	$Pban$	—	\boxed{k}	\boxed{h}	$\boxed{h+k}$	h	k	—
23	$Pbcn$	—	\boxed{k}	\boxed{l}	$\boxed{h+k}$	h	k	l
24	$Pccn$	—	\boxed{l}	\boxed{l}	$\boxed{h+k}$	h	k	l
25	$Pnna$	—	$\boxed{k+l}$	$\boxed{h+l}$	\boxed{h}	h	k	l
26	$Pnnn$	—	$\boxed{k+l}$	$\boxed{h+l}$	$\boxed{h+k}$	h	k	l
27	$Ammm$; $A222$; $A2mm$; $Amm3$	$\boxed{k+l}$	$k+l$	l	k	—	k	l
28	$A2_122$	$\boxed{k+l}$	$k+l$	l	k	\boxed{h}	k	l
29	$Amam$; $Ama2$; $A2am$	$\boxed{k+l}$	$k+l$	$\boxed{h} l$	k	h	k	l
30	$Abmm$; $Abm2$	$\boxed{k+l}$	$\boxed{k} l$	l	k	—	k	l
31	$Abam$; $Aba2$	$\boxed{k+l}$	$\boxed{k} l$	$\boxed{h} l$	k	h	k	l
32	$Amaa$; $A2aa$	$\boxed{k+l}$	$k+l$	$\boxed{h} l$	$\boxed{h} k$	h	k	l
33	$Abaa$	$\boxed{k+l}$	$\boxed{k} l$	$\boxed{h} l$	$\boxed{h} k$	h	k	l
34	$Immm$; $I222$; $I2_12_12_1$; $Imm2$	$\boxed{h+k+l}$	$k+l$	$h+l$	$h+k$	h	k	l

№	Пространств. группы	Погасания						
		hkl	$0kl$	$h0l$	$hk0$	$h00$	$0k0$	$00l$
35	Ibmm; Ibm2	$\boxed{h+k+l}$	$\boxed{k} l$	$h+l$	$h+k$	h	k	l
36	Ibam; Iba2	$\boxed{h+k+l}$	$\boxed{k} l$	$\boxed{h} l$	$h+k$	h	k	l
37	Ibca	$\boxed{h+k+l}$	$\boxed{k} l$	$h \boxed{l}$	$\boxed{h} k$	h	k	l
38	Fmmm; F222; Fmm2	$\boxed{\Sigma}$	$k+l$	$h+l$	$h+k$	h	k	l
39	Fdd2	$\boxed{\Sigma}$	$\boxed{k+l=4n}$	$\boxed{h+l=4n}$	$h+k$	h	k	l
40	Fddd	$\boxed{\Sigma}$	$\boxed{k+l=4n}$	$\boxed{h+l=4n}$	$\boxed{h+k=4n}$	h	k	l

IV. Тетрагональная сингония (Лауэ-класс $4/m$)

№	Пространственные группы	Погасания		
		hkl	$hk0$	$00l$
41	P4/m; P4; $P\bar{4}$	—	—	—
42	P4 ₂ /m; P4 ₂	—	—	\boxed{l}
43	P4 ₁ [P4 ₃]	—	—	$\boxed{l=4n}$
44	P4/n	—	$\boxed{h+k}$	—
45	P4 ₂ /n	—	$\boxed{h+k}$	\boxed{l}
46	I4/m; I4; $I\bar{4}$	$\boxed{h+k+l}$	$h+k$	l
47	I4 ₁	$\boxed{h+k+l}$	$h+k$	$\boxed{l}=4n$
48	I4 ₁ /a	$\boxed{h+k+l}$	$\boxed{h} k$	$\boxed{l}=4n$

V. Тетрагональная сингония (Лауэ-класс $4/m\bar{m}2$)

№	Пространственные группы	Погасания					
		hkl	$hk0$	$0kl$	hhl	$h00$	$00l$
49	P4/mmm; P4 ₂ m; P4 ₂ m2; P4mm; P42	—	—	—	—	—	—
50	P4 ₂ 1m; P42 ₁	—	—	—	—	\boxed{h}	—
51	P4 ₂ 2	—	—	—	—	—	\boxed{l}
52	P4 ₁ 2 [P4 ₃ 2]	—	—	—	—	—	$\boxed{l=4n}$
53	P4 ₂ 2 ₁	—	—	—	—	\boxed{h}	\boxed{l}

№	Пространственные группы	Погасания					
		hkl	$hk0$	$0kl$	hhl	$h00$	$00l$
54	$P4_12_1 [P4_32_1]$	—	—	—	—	h	$l = 4n$
55	$P4/mbm; P\bar{4}b2; P4bm$	—	—	k	—	h	—
56	$P4/mcm; P\bar{4}c2; P4cm$	—	—	l	—	—	l
57	$P4/mnm; P\bar{4}n2; P4nm$	—	—	$k + l$	—	h	l
58	$P4/nmm$	—	$h + k$	—	—	h	—
59	$P4/mmc; P\bar{4}2c; P4mc$	—	—	—	l	—	l
60	$P\bar{4}2_1c$	—	—	—	l	h	l
61	$P4/mbc; P4bc$	—	—	k	l	h	l
62	$P4/mcc; P4cc$	—	—	l	l	—	l
63	$P4/mnc; P4nc$	—	—	$k + l$	l	h	l
64	$P4/nbm$	—	$h + k$	k	—	h	—
65	$P4/ncm$	—	$h + k$	l	—	h	l
66	$P4/nnm$	—	$h + k$	$k + l$	—	h	l
67	$P4/nmc$	—	$h + k$	—	l	h	l
68	$P4/nbc$	—	$h + k$	k	l	h	l
69	$P4/ncc$	—	$h + k$	l	l	h	l
70	$P4/nnc$	—	$h + k$	$k + l$	l	h	l
71	$I4/mmm; I4m2; I\bar{4}2m; I4mm; I42$	$h + k + l$	$h + k$	$k + l$	$2h + l$	h	l
72	$I4_12$	$h + k + l$	$h + k$	$k + l$	$2h + l$	h	$l = 4n$
73	$I4/mcm; I\bar{4}c2; I4cm$	$h + k + l$	$h + k$	$k \quad l$	$2h + l$	h	l
74	$I\bar{4}2d; I4md$	$h + k + l$	$h + k$	$k + l$	$2h + l = 4n$	h	$l = 4n$
75	$I4cd$	$h + k + l$	$h + k$	$k \quad l$	$2h + l = 4n$	h	$l = 4n$
76	$I4/amd$	$h + k + l$	$h \quad k$	$k + l$	$2h + l = 4n$	h	$l = 4n$
77	$I4/acd$	$h + k + l$	$h \quad k$	$k \quad l$	$2h + l = 4n$	h	$l = 4n$

VI. Ромбоэдрическая сингония (Лауэ-класс $\bar{3}$)

№	Пространственные группы	Погасания		
		$hkil$	$h\bar{h}0l$	$000l$
78	$C\bar{3}$; $C3$	—	—	—
79	$C3_1$; $[C3_2]$	—	—	$l = 3n$
80	$R\bar{3}$; $R3$	$h - k + l = 3n$	$2h + l = 3n$	$l = 3n$

VII. Ромбоэдрическая сингония (Лауэ-класс $\bar{3}m$)

№	Пространственные группы	Погасания		
		$hkil$	$h\bar{h}0l$	$000l$
81	$C\bar{3}1m$; $C312$; $C3m1$; $C\bar{3}m1$; $C321$; $C31m$	—	—	—
82	$C3_112$; $[C3_212]$ $C3_121$; $[C3_221]$	—	—	$l = 3n$
83	$C\bar{3}c$; $C3c$	—	—	l
84	$H\bar{3}m$; $H3c$	$h - k = 3n$	$l, h = 3n$	l
85	$R\bar{3}m$; $R32$; $R3m$	$h - k + l = 3n$	$2h + l = 3n$	$l = 3n$
86	$R\bar{3}c$; $R3c$	$h - k + l = 3n$	$2h + l = 3n$	$l = 6n$

VIII. Гексагональная сингония (Лауэ-класс $6/m$)

№	Пространственные группы	Погасания
		$000l$
87	$C6/m$; $C6$; $C\bar{6}$	—
88	$C6_3/m$; $C6_3$	l
89	$C6_2$; $[C6_4]$	$l = 3n$
90	$C6_1$; $[C6_5]$	$l = 6n$

IX. Гексагональная сингония (Лауэ-класс $6/mmm$)

№	Пространственные группы	Погасания		
		$hh2\bar{h}l$	$\bar{h}h0l$	$000l$
91	$C6/mmm$; $C62$; $C6mm$; $C\bar{6}m2$; $C\bar{6}2m$	—	—	—
92	$C6_32$	—	—	l

№	Пространственные группы	Погасания		
		$hh2\bar{h}l$	$\bar{h}h0l$	$000l$
93	$C6_2$; $[C6_4]$	—	—	$l = 3n$
94	$C6_1$; $[C6_5]$	—	—	$l = 6n$
95	$C6/mmc$; $C6mc$; $C\bar{6}2c$	l	—	l
96	$C6/mcm$; $C6cm$; $C\bar{6}c2$	—	l	l
97	$C6/mcc$; $C6cc$	l	l	l

X. Кубическая сингония (Лауэ-класс $m\bar{3}$)

№	Пространственные группы	Погасания		
		hkl	$hk0$	$h00$
98	$Pm\bar{3}$; $P2_1\bar{3}$	—	—	—
99	$P2_1\bar{3}$	—	—	h
100	$Pa\bar{3}$	—	h	h
101	$Pn\bar{3}$	—	$h + k$	h
102	$Im\bar{3}$; $I2_1\bar{3}$; $I2_1\bar{3}$	$h + k + l$	$h + k$	h
103	$Ia\bar{3}$	$h + k + l$	h k	h
104	$Fm\bar{3}$; $F2_1\bar{3}$	Σ	h k	h
105	$Fd\bar{3}$	Σ	$h + k = 4n$	$h = 4n$

XI. Кубическая сингония (Лауэ-класс $m\bar{3}m$)

№	Пространственные группы	Погасания			
		hkl	$hk0$	hhl	$h00$
106	$Pm\bar{3}m$; $P4_3\bar{2}$; $P\bar{4}3m$	—	—	—	—
107	$P4_3\bar{2}$	—	—	—	h
108	$P4_3\bar{2}$ [$P4_3\bar{2}$]	—	—	—	$h = 4n$
109	$Pn\bar{3}m$	—	$h + k$	—	h
110	$Pm\bar{3}n$; $P\bar{4}3n$	—	—	l	—
111	$Pn\bar{3}n$	—	$h + k$	l	h
112	$Im\bar{3}m$; $I4_3\bar{2}$; $I\bar{4}3m$	$h + k + l$	$h + k$	$2h + l$	h
113	$I4_3\bar{2}$	$h + k + l$	$h + k$	$2h + l$	$h = 4n$

№	Пространственные группы	Погасания			
		hkl	$hk0$	hhl	$h00$
114	$I\bar{4}3d$	$h + k + l$	$h + k$	$2h + l = 4n$	h
115	$Ia3d$	$h + k + l$	h k	$2h + l = 4n$	h
116	$Fm3m; F43; F\bar{4}3m$	Σ	h k	$h + l$	h
117	$F4_13$	Σ	h k	$h + l$	$h = 4n$
118	$Fm3c; F\bar{4}3c$	Σ	h k	h l	h
119	$Fd3m$	Σ	$h + k = 4n$	$h + l$	$h = 4n$
120	$Fd3c$	Σ	$h + k = 4n$	h l	$h = 4n$

Табл. 5. Квадратичные формы

Табл. 5а. Кубическая сингония

Квадратичная форма для кубической системы имеет вид

$$Q = \frac{1}{d^2} = \frac{1}{a^2} (h^2 + k^2 + l^2).$$

Приведены значения индексов (hkl) плоскостей кубической системы, которые могут быть определены из значений $(h^2 + k^2 + l^2)$. Приведены также значения $\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$ и $\lg(h^2 + k^2 + l^2)$. Индексы расположены в последовательности $h \geq k \geq l$.

Звездочка у $(h^2 + k^2 + l^2)$, показывает, что предшествующее число не может быть представлено суммой квадратов трех целых чисел. Несколько значений (hkl) , соответствующих одному значению $(h^2 + k^2 + l^2)$, показывают, что данное число может быть разбито на сумму квадратов трех целых чисел несколькими способами.

$(h^2 + k^2 + l^2)$	$\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$	$\lg(h^2 + k^2 + l^2)$	h, k, l
1	1,000	0,0000	1,0,0
2	.414	.3010	1,1,0
3	.732	.4771	1,1,1
4	2,000	.6021	2,0,0
5	.236	.6990	2,1,0
6	.449	.7782	2,1,1
8*	.828	.9031	2,2,0
9	3,000	.9542	3,0,0 2,2,1
10	.162	1,0000	3,1,0
11	.317	.0414	3,1,1
12	.464	.0792	2,2,2
13	.606	.1139	3,2,0
14	.742	.1461	3,2,1
16*	4,000	.2041	4,0,0
17	.123	.2304	4,1,0 3,2,2
18	.243	.2553	4,1,1 3,3,0
19	.359	.2788	3,3,1
20	.472	.3010	4,2,0
21	.583	.3222	4,2,1
22	.690	.3424	3,3,2

$(h^2+k^2+l^2)$	$\sqrt{h^2+k^2+l^2}$	$lg(h^2+k^2+l^2)$	h, k, l		
24*	.899	.3802	4,2,2		
25	5,000	.3979	5,0,0	4,3,0	
26	.099	.4150	5,1,0	4,3,1	
27	5,196	1,4314	5,1,1	3,3,3	
29*	.385	.4624	5,2,0	4,3,2	
30	.477	.4771	5,2,1		
32*	.657	.5051	4,4,0		
33	.745	.5185	5,2,2	4,4,1	
34	.831	.5315	5,3,0	4,3,3	
35	.916	.5441	5,3,1		
36	6,000	.5563	6,0,0	4,4,2	
37	.083	.5682	6,1,0		
38	.164	.5798	6,1,1	5,3,2	
40*	.325	.6021	6,2,0		
41	.403	.6128	6,2,1	5,4,0	4,4,3
42	.481	.6232	5,4,1		
43	.557	.6335	5,3,3		
44	.633	.6435	6,2,2		
45	.708	.6532	6,3,0	5,4,2	
46	.782	.6628	6,3,1		
48*	.928	.6812	4,4,4		
49	7,000	.6902	7,0,0	6,3,2	
50	.071	.6990	7,1,0	5,5,0	5,4,3
51	.141	.7076	7,1,1	5,5,1	
52	.211	.7160	6,4,0		
53	.280	.7243	7,2,0	6,4,1	
54	.348	.7324	7,2,1	6,3,3	5,5,2
56*	.483	.7482	6,4,2		
57	.550	.7559	7,2,2	5,4,4	
58	.616	.7634	7,3,0		
59	.681	.7709	7,3,1	5,5,3	
61*	.810	.7853	6,5,0	6,4,3	
62	.874	.7924	7,3,2	6,5,1	
64*	8,000	.8062	8,0,0		
65	.062	.8129	8,1,0	7,4,0	6,5,2
66	.124	.8195	8,1,1	7,4,1	5,5,4
67	.185	.8261	7,3,3		

$(h^2+k^2+l^2)$	$\sqrt{h^2+k^2+l^2}$	$lg(h^2+k^2+l^2)$	h, k, l			
68	.246	.8325	8,2,0	6,4,4		
69	.307	.8388	8,2,1	7,4,2		
70	.367	.8451	6,5,3			
72*	.485	.8573	8,2,2	6,6,0		
73	.544	.8633	8,3,0	6,6,1		
74	.602	.8692	8,3,1	7,5,0	7,4,3	
75	.660	.8751	7,5,1	5,5,5		
76	.718	.8808	6,6,2			
77	.775	.8865	8,3,2	6,5,4		
78	.832	.8921	7,5,2			
80*	.944	.9031	8,4,0			
81	9,000	.9085	9,0,0	8,4,1	7,4,4	6,6,3
82	.055	.9138	9,1,0	8,3,3		
83	.110	.9191	9,1,1	7,5,3		
84	.165	.9243	8,4,2			
85	.220	.9294	9,2,0	7,6,0		
86	.274	.9345	9,2,1	7,6,1	6,5,5	
88*	.381	.9445	6,6,4			
89	.434	.9494	9,2,2	8,5,0	8,4,3	7,6,2
90	.487	.9542	9,3,0	8,5,1	7,5,4	
91	.539	.9590	9,3,1			
93*	.644	.9685	8,5,2			
94	9,695	1,9731	9,3,2	7,6,3		
96*	.798	.9823	8,4,4			
97	.849	.9868	9,4,0	6,6,5		
98	.899	.9912	9,4,1	8,5,3	7,7,0	
99	950	.9956	9,3,3	7,7,1	7,5,5	
100	10,00	2,0000	10,0,0	8,6,0		

Табл. 5б. Тетрагональная сингония

Квадратичная форма для тетрагональной системы имеет вид

$$Q = \frac{1}{d^2} = \frac{1}{a^2} \left[(h^2 + k^2) + \left(\frac{a}{c}\right)^2 l^2 \right],$$

где a и c – периоды кристаллической решетки в направлениях Ox и Oz . В таблице приведены значения h и k для интервала h^2+k^2 от 1 до 200.

h^2+k^2	h	k	h^2+k^2	h	k	h^2+k^2	h	k	h^2+k^2	h	k
1	1	0	49	7	0	100	10	0	149	10	7
2	1	1	50	7	1	100	8	6	153	12	3
4	2	0	50	5	5	101	10	1	157	11	6
5	2	1	52	6	4	104	10	2	160	12	4
8	2	2	53	7	2	106	9	5	162	9	9
9	3	0	58	7	3	109	10	3	164	10	8
10	3	1	61	6	5	113	8	7	169	13	0
13	3	2	64	8	0	116	0	4	169	12	5
16	4	0	65	8	1	117	19	6	170	13	1
17	4	1	65	7	4	121	11	0	170	11	7
18	3	3	68	8	2	122	11	1	173	13	2
20	4	2	72	6	6	125	11	2	178	13	3
25	5	0	73	8	3	125	10	5	180	12	6
25	4	3	74	7	5	128	8	8	181	10	9
26	5	1	80	8	4	130	11	3	185	13	4
29	5	2	81	9	0	130	9	7	185	11	8
32	4	4	82	9	1	136	10	6	193	12	7
34	5	3	85	9	2	137	11	4	194	13	5
36	6	0	85	7	6	144	12	0	196	14	0
37	6	1	89	8	5	145	12	1	197	14	1
40	6	2	90	9	3	145	9	8	200	14	2
41	5	4	97	9	4	146	11	5	200	10	10
45	6	3	98	7	7	148	12	2			

Табл. 5в. Гексагональная сингония

Квадратичная форма для гексагональной системы имеет вид

$$Q = \frac{1}{d^2} = \frac{1}{a^2} \left[\frac{4}{3} (h^2 + k^2 + hk) + \frac{l^2}{\left(\frac{c}{a}\right)^2} \right] = \frac{1}{a^2} \left[\frac{4}{3} s + \frac{l^2}{\left(\frac{c}{a}\right)^2} \right],$$

где $s = h^2 + k^2 + hk = k^2 + i^2 + ki = i^2 + h^2 + ih$, $i = -(h + k)$.

В таблице приведены значения s , $4s/3$ и индексов, соответствующих квадратичным формам для каждого s . Таблица составлена для s от 1 до 211.

s	$4s/3$	h	k	i
1	1,3	1	0	$\bar{1}$
3	4,0	1	1	$\bar{2}$

s	$4s/3$	h	k	i
4	5,3	2	0	$\bar{2}$
7	9,3	2	1	$\bar{3}$

s	$4s/3$	h	k	i
9	12,0	3	0	$\bar{3}$
12	16,0	2	2	$\bar{4}$
13	17,3	3	1	$\bar{4}$
16	21,3	4	0	$\bar{4}$
19	25,3	3	2	$\bar{5}$
21	28,0	4	1	$\bar{5}$
25	33,3	5	0	$\bar{5}$
27	36,0	3	3	$\bar{6}$
28	37,3	4	2	$\bar{6}$
31	41,3	5	1	$\bar{6}$
36	48,0	6	0	$\bar{6}$
37	49,3	4	3	$\bar{7}$
39	52,0	5	2	$\bar{7}$
43	57,3	6	1	$\bar{7}$
48	64,0	4	4	$\bar{8}$
49	65,3	7	0	$\bar{7}$
49	65,3	5	3	$\bar{8}$
52	69,3	6	2	$\bar{8}$
57	76,0	7	1	$\bar{8}$
61	81,3	5	4	$\bar{9}$
63	84,0	6	3	$\bar{9}$
64	85,3	8	0	$\bar{8}$
67	89,3	7	2	$\bar{9}$
73	97,3	8	1	$\bar{9}$
75	100,0	5	5	$\bar{10}$
76	101,3	6	4	$\bar{10}$
79	105,3	7	3	$\bar{10}$
81	108,0	9	0	$\bar{9}$
84	112,0	8	2	$\bar{10}$
91	121,3	6	5	$\bar{11}$
91	121,3	9	1	$\bar{10}$
93	124,0	7	4	$\bar{11}$
97	129,3	8	3	$\bar{11}$
100	133,3	10	0	$\bar{10}$
103	137,3	9	2	$\bar{11}$
108	144,0	6	6	$\bar{12}$

s	$4s/3$	h	k	i
109	145,3	7	5	$\bar{12}$
111	148,0	10	1	$\bar{11}$
112	149,3	8	4	$\bar{12}$
117	156,0	9	3	$\bar{12}$
121	161,3	11	0	$\bar{11}$
124	165,3	10	2	$\bar{12}$
127	169,3	7	6	$\bar{13}$
129	172,0	8	5	$\bar{13}$
133	177,3	11	1	$\bar{12}$
133	177,3	9	4	$\bar{13}$
139	185,3	10	3	$\bar{13}$
144	192,0	12	0	$\bar{12}$
147	196,0	11	2	$\bar{13}$
147	196,0	7	7	$\bar{14}$
148	197,3	8	6	$\bar{14}$
151	201,3	9	5	$\bar{14}$
156	208,0	10	4	$\bar{14}$
157	209,3	12	1	$\bar{13}$
163	217,3	11	3	$\bar{14}$
169	225,3	13	0	$\bar{13}$
169	225,3	8	7	$\bar{15}$
171	228,0	9	6	$\bar{15}$
172	229,3	12	2	$\bar{14}$
175	233,3	10	5	$\bar{15}$
181	241,3	11	4	$\bar{15}$
183	244,0	13	1	$\bar{14}$
189	252,0	12	3	$\bar{15}$
192	256,0	8	8	$\bar{16}$
193	257,3	9	7	$\bar{16}$
196	261,3	14	0	$\bar{14}$
196	261,3	10	6	$\bar{16}$
199	265,3	13	2	$\bar{15}$
201	268,0	11	5	$\bar{16}$
208	277,3	12	4	$\bar{16}$
211	281,3	14	1	$\bar{15}$

Табл. 6. Параметры элементарных ячеек некоторых химических элементов и соединений

№	Вещество	Периоды решетки (Å)			Углы α или β
		a	b	c	
1	Ag	4,08624	—	—	—
2	Ag ₂ MoO ₄	9,279	—	—	—
3	Ag ₂ O	4,73	—	—	—
4	Ag ₂ SO ₄	5,831	12,676	10,271	—
5	Al	4,0496	—	—	—
6	α -Al ₂ O ₃	5,140	—	—	55°6'
7	β -Al ₂ O ₃	5,571	—	22,645	—
8	γ -Al ₂ O ₃	7,926	—	—	—
9	As	4,131	—	—	54°10'
10	As ₂ O ₃	11,08	—	—	—
11	Au	4,07856	—	—	—
12	Ba	5,019	—	—	—
13	BaCO ₃	8,852	6,562	5,266	—
14	BaO	5,534	—	—	—
15	BaO ₂	5,351	—	6,784	—
16	BaSO ₄	8,881	5,452	7,154	—
17	Be	2,28606	—	3,58429	—
18	BeO	2,700	—	4,384	—
19	Bi	4,7459	—	—	57°14'
20	C	3,5668	—	—	—
21	C	3,642	—	—	39°30'
22	Ca	5,576	—	—	—
23	Ca	3,988	—	6,533	—
24	CaCO ₃	7,956	5,732	4,95	—
25	CaCO ₃	6,374	—	—	46°6'
26	CaMoO ₄	5,24	—	11,46	—
27	CaO	4,807	—	—	—
28	CaO ₂	5,02	—	5,932	—
29	Ca(OH) ₂	8,5916	—	4,9060	—
30	CaSnO ₃	3,928	—	—	—
31	Cd	2,9851	—	5,6206	—
32	CdCO ₃	6,124	—	—	47°24'
33	CdMoO ₄	5,150	—	11,192	—

№	Вещество	Периоды решетки (Å)			Углы α или β
		a	b	c	
34	CdO	4,698	—	—	—
35	Cd(OH) ₂	3,487	—	4,679	—
36	Ce	5,150	—	—	—
37	Ce	3,657	—	5,972	—
38	CeO ₂	5,420	—	—	—
39	Co	3,561	—	—	—
40	Co	2,519	—	4,113	—
41	CoCO ₃	5,685	—	—	48°14'
42	CoCrO ₄	5,516	8,298	6,219	—
43	CoO	4,259	—	—	—
44	Co(OH) ₂	3,179	—	4,609	—
45	CoSO ₄	4,660	6,723	8,467	—
46	Cr	2,885	—	—	—
47	Cr	2,722	—	4,427	—
48	CrO ₃	8,477	4,78	5,711	—
49	Cr ₂ O ₃	5,391	—	—	54°50'
50	Cu	3,6149	—	—	—
51	CuO	4,662	3,417	5,118	99°29'
52	Cu ₂ O	4,263	—	—	—
53	α -Fe	2,86647	—	—	—
54	γ -Fe	3,637	—	—	—
55	FeCl ₂	6,212	—	—	33°33'
56	FeCl ₃	6,703	—	—	52°30'
57	FeO	8,357	—	—	—
58	α -Fe ₂ O ₃	5,4243	—	—	55°17'
59	γ -Fe ₂ O ₃	8,337	—	—	—
60	Fe ₃ O ₄	8,391	—	—	—
61	FeS	3,460	—	5,681	—
62	FeS ₂	5,416	—	—	—
63	FeS ₂	4,445	5,425	3,388	—
64	FeSO ₄	15,37	13,00	20,06	104°15'
65	FeSi	4,447	—	—	—
66	FeSi ₂	2,692	—	5,140	—
67	Ga	4,526	4,520	7,660	—
68	Ge	5,631	—	—	—
69	GeO ₂	4,403	—	2,866	—

№	Вещество	Периоды решетки (Å)			Углы α или β
		a	b	c	
70	Hf	3,327	—	5,471	—
71	HfO ₂	5,125	—	—	—
72	Hg	3,016	—	—	70°32'
73	HgO	3,303	3,520	5,515	—
74	In	4,592	—	4,940	—
75	In ₂ O ₃	10,14	—	—	—
76	Ir	3,83886	—	—	—
77	J	4,805	7,269	9,800	—
78	K	5,211	—	—	—
79	KBr	6,599	—	—	—
80	KBrO ₃	4,409	—	—	86°
81	KCl	6,283	—	—	—
82	KClO ₄	7,515	—	—	—
83	KClO ₄	9,840	6,012	7,806	—
84	KF	5,351	—	—	—
85	KJ	7,066	—	—	—
86	KMnO ₄	9,108	5,731	7,425	—
87	KOH	5,792	—	—	—
88	K ₂ SO ₄	10,028	7,435	4,743	—
89	La	5,305	—	—	—
90	La	3,758	—	6,072	—
91	Li	3,5087	—	—	—
92	LiCl	5,1398	—	—	—
93	LiF	4,025	—	—	—
94	LiJ	6,012	—	—	—
95	LiOH	3,557	—	4,349	—
96	Mg	3,2092	—	5,2102	—
97	MgO	4,211	—	—	—
98	Mg(OH) ₂	3,116	—	4,780	—
99	α -Mn	8,908	—	—	—
100	β -Mn	6,303	—	—	—
101	MnCO ₃	5,852	—	—	47°45'
102	MnO	4,444	—	—	—
103	MnO ₂	4,449	—	2,896	—
104	Mn ₃ O ₄	5,762	—	9,439	—
105	Mo	3,147	—	—	—

№	Вещество	Периоды решетки (Å)			Углы α или β
		a	b	c	
106	MoO ₂	4,870	—	2,796	—
107	MoO ₃	3,928	13,968	3,667	—
108	Na	4,2906	—	—	—
109	NaBr	5,973	—	—	—
110	NaCl	6,63995	—	—	—
111	NaF	4,629	—	—	—
112	NaJ	6,433	—	—	—
113	Na ₂ SO ₄	5,862	12,315	9,770	—
114	Nb	3,301	—	—	—
115	Ni	3,5238	—	—	—
116	Ni	2,655	—	4,329	—
117	NiO	4,1767	—	—	—
118	Ni(OH) ₂	3,123	—	4,604	—
119	NH ₄ Cl	3,874	—	—	—
120	NH ₄ F	4,399	—	7,034	—
121	Os	2,7353	—	4,3190	—
122	P (черный)	3,317	4,389	10,52	—
123	Pb	4,9497	—	—	—
124	PbO	3,955	—	4,999	—
125	PbO (желтый)	5,470	4,733	5,871	—
126	PbO ₂	4,941	—	3,374	—
127	Pb ₃ O ₄	8,806	—	6,564	—
128	Pd	3,8902	—	—	—
129	PdO	3,035	—	5,325	—
130	Pt	3,9236	—	—	—
131	Re	2,7608	—	—	—
132	Rh	2,8012	—	—	—
133	S	10,922	10,982	11,042	83°16'
134	S	10,501	12,946	24,048	—
135	Sb	4,5066	—	—	57°66'
136	α -Se	9,010	8,991	11,543	91°34'
137	Si	5,4306	—	—	—
138	SiO ₂ (α -кварц)	4,910	—	5,401	—
139	SiO ₂ (α -кристобалит)	4,970	—	6,934	—
140	SiO ₂ (β -кристобалит)	7,134	—	—	—
141	SiO ₂ (α -тридимит)	9,900	17,134	16,333	—

№	Вещество	Периоды решетки (Å)			Углы α или β
		a	b	c	
142	Sn (белое)	5,831	—	3,176	—
143	Sn (серое)	6,473	—	—	—
144	SnO	3,804	—	4,826	—
145	SnO ₂	4,747	—	3,191	—
146	Sr	6,087	—	—	—
147	Ta	3,303	—	—	—
148	Te	4,456	—	5,922	—
149	Th	5,090	—	—	—
150	α -Ti	2,959	—	4,689	—
151	Tl	3,4565	—	5,5249	—
152	Tl	4,851	—	—	—
153	U	2,858	5,877	4,955	—
154	V	3,0399	—	—	—
155	V ₂ O ₃	5,441	—	—	53°53'
156	V ₂ O ₅	11,503	4,369	3,557	—
157	W	3,1647	—	—	—
158	Zn	2,6648	—	4,9456	—
159	ZnO	3,2491	—	5,2052	—
160	Zn(OH) ₂	5,170	8,547	4,930	—
161	ZnSO ₄	11,874	12,114	6,844	—
162	α -Zr	3,237	—	5,150	—

Табл.7. Расположение атомов в некоторых типах кристаллических структур

Приведены данные о координатах атомов, числе атомов в элементарной ячейке и пространственные группы симметрии для некоторых структурных типов кубической, тетрагональной и гексагональной систем.

Структурный тип	Пространственная группа	Число атомов в ячейке	Координаты атомов
Кубическая система			
Объемно-центрированный кубический	$Im\bar{3}m$	2	$(0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$.
Гранецентрированный кубический	$Fm\bar{3}m$	4	$(0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$.
CsCl	$Pm\bar{3}m$	1	Cs: $(0,0,0)$; Cl: $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$.
ZnS (сфалерит)	$F\bar{4}3m$	4	$(0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$, +4Zn: $(0,0,0)$, +4S: $\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$.
NaCl	$Fm\bar{3}m$	4	4Na: $(0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$, 4Cl: $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(1, 1, \frac{1}{2}\right)$.
CaF ₂	$Fm\bar{3}m$	4	$(0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$, +4Ca: $(0,0,0)$, +8F: $\pm \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$.
Cu ₂ O (куприт)	$Pn\bar{3}m$	2	2O: $(0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$; 4Cu: $\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right), \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}\right)$.
SiO ₂ (β-кristобалит)	$Fd\bar{3}m$	8	$(0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$

Структурный тип	Пространственная группа	Число атомов в ячейке	Координаты атомов
			+8Si: $(0,0,0), \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right);$ +16O: $\left(\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}\right), \left(\frac{1}{8}, \frac{3}{8}, \frac{3}{8}\right).$
FeS ₂ (пирит)	Pa3	4	4Fe: $(0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right) \cdot (d)$ 8S: $\pm (x, x, x), \pm \left(\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - x, \bar{x}\right),$ $x = 0,386$
Al ₂ MgO ₄ (шпинель)	Fd3m	8	$(0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right),$ +8Mg: $(0,0,0), \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right),$ +16Al: $\left(\frac{5}{8}, \frac{5}{8}, \frac{5}{8}\right), \left(\frac{5}{8}, \frac{7}{8}, \frac{7}{8}\right),$ +32O: $(x, x, x), (x, \bar{x}, \bar{x}),$ $\left(\frac{1}{4} - x, \frac{1}{4} - x, \frac{1}{4} - x\right),$ $\left(\frac{1}{4} - x, \frac{1}{4} + x, \frac{1}{4} + x\right),$ $x = -1/8$
K ₂ PtCl ₆	Fm3m	4	$(0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right),$ +4Pt: $(0,0,0),$ +8K: $\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right), \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}\right),$ +24Cl: $\pm(x, 0, 0).$
β-Mn	$\begin{cases} P4_33 \\ P4_13 \end{cases}$	20	8Mn: $(x, x, x), \left(\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - x, x\right),$ $\left(\frac{3}{4} - x, \frac{3}{4} - x, \frac{3}{4} - x\right),$ $\left(\frac{1}{4} - x, \frac{3}{4} + x, \frac{1}{4} + x\right).$ 12Mn: $\left(\frac{3}{8}, \bar{y}, \frac{3}{4} + y\right),$ $\left(\frac{7}{8}, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{4} - y\right),$

Структурный тип	Пространственная группа	Число атомов в ячейке	Координаты атомов
			$\left(\frac{1}{8}, y, \frac{1}{y} + y\right),$ $\left(\frac{5}{8}, \frac{1}{2} - y, \frac{3}{4} - y\right).$ $x = 0,061, y = 0,206$
SnJ ₄	Pa3		8Sn: $\pm (x, x, x),$ $\left(x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - x, \bar{x}\right),$ 8J: $\pm (y, y, y),$ $\left(y + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - y, \bar{y}\right),$ 24J: $\pm (u, v, w), \left(u + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - u, \bar{w}\right),$ $\left(\bar{u}, v + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - w\right), \left(\frac{1}{2} - u, \bar{v}, w + \frac{1}{2}\right),$ $(w, u, v), \left(\bar{w}, u + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - v\right),$ $\left(\frac{1}{2} - w, \bar{u}, w + \frac{1}{2}\right), \left(w + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - u, \bar{v}\right),$ $(v, w, u), \left(\frac{1}{2} - v, \bar{w}, u + \frac{1}{2}\right),$ $\left(v + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - w, \bar{u}\right),$ $\left(\bar{v}, w + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - u\right),$ $x = 0,129, y = 0,253, u = 0,009,$ $v = 0,001, w = 0,253$
α -Mn	I43m	58	$(0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ +2Mn: $(0,0,0),$ +8Mn: $(x, x, x), (\bar{x}, \bar{x}, x),$ +24Mn: $(x, x, y), (\bar{x}, \bar{x}, y)$ $(\bar{x}, x, \bar{y}), (x, \bar{x}, \bar{y}),$ +24Mn: те же координаты, но другой параметр (y), $x = 0,317, y = 0,356.$

Структурный тип	Пространственная группа	Число атомов в ячейке	Координаты атомов
FeSi	P2 ₁ 3	4	4Fe: (x, x, x), $\left(\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - x, \bar{x}\right)$, 4Si: те же координаты, но другой параметр, $x_{\text{Fe}} = 0,137, x_{\text{Si}} = 0,842$.
Mn ₂ O ₃	Ia3	16	(0,0,0), $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$, +8Mn: $\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right), \left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}\right)$. +24Mn: $\pm\left(x, 0, \frac{1}{4}\right), \pm\left(x, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}\right)$, +48O: $\pm(x, y, z), \pm\left(x, \bar{y}, \frac{1}{2} - z\right)$, $\pm\left(x, \frac{1}{2} + y, \bar{z}\right)$. $x = 0,385, y = 0,145, z = 0,380$
CaB ₆	Pm3m	1	1Ca: (0,0,0), 6B: $\pm\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, x\right)$, $x = 0,207$.
CaTiO ₃	Pm3m		1Ca: (0,0,0), 1Ti: $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$, 3O: $\left(\frac{1}{2}, 0, 0\right)$.
NaClO ₃	P2 ₁ 3	4	4Na: (x, x, x), $\left(x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - x, \bar{x}\right)$, 4Cl: (y, y, y), $\left(y + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - y, \bar{y}\right)$, 12O: $\pm(u, v, w), \left(u + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - v, \bar{w}\right)$, $\left(\bar{u}, v + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - w\right), \left(\frac{1}{2} - u, \bar{v}, w + \frac{1}{2}\right)$, (w, u, v), $\left(\bar{w}, u + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - v\right)$,

Структурный тип	Пространственная группа	Число атомов в ячейке	Координаты атомов
			$\left(\frac{1}{2} - w, \bar{u}, v + \frac{1}{2}\right), \left(w + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - u, \bar{v}\right),$ $(v, w, u), \left(\frac{1}{2} - v, \bar{w}, u + \frac{1}{2}\right),$ $\left(v + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - w, \bar{u}\right), \left(\bar{v}, w + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - u\right).$
NiSbS (CoAsS)	P2 ₁ 3	4	4Ni: $(x, x, x), \left(\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - x, x\right).$ 4Sb и 4S: те же координаты, но другой параметр.
NaTl	Fd3m	8	$(0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right),$ +8Na: $(0,0,0), \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right),$ +8Tl: $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}\right).$
β -Cu ₂ Mg	Fd3m	8	$(0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$ +8Mg: $(0,0,0), \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right),$ +16Cu: $\left(\frac{5}{8}, \frac{5}{8}, \frac{5}{8}\right), \left(\frac{7}{8}, \frac{7}{8}, \frac{7}{8}\right).$
Cu ₂ AlMn	Fm3m		$(0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right),$ +4Al: $(0,0,0),$ +8Cu: $\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right), \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}\right).$ +4Mn: $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right).$
Fe ₃ Zn ₁₀ (γ -фаза)	I43m	4	$(0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ +12Fe: $\pm(x, 0, 0)$ +16Zn: $\pm(y, y, y), (y, \bar{y}, \bar{y})$ +24Zn: $\pm(z, z, 0), (z, \bar{z}, 0)$ $x = 0,355, y = 0,172, y_z = 0,110,$ $z_1 = 0,313, z_2 = 0.$

Структурный тип	Пространственная группа	Число атомов в ячейке	Координаты атомов
Тетрагональная система			
β -Sn	I4/amd	4	4Sn: $(0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4}\right), \left(0, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}\right)$.
Zn (γ -Mn)	I4/mmm	2	4Zn: $(0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$
Pb (SnO)	P4/nmm	2	2Pb: $\left(0, \frac{1}{2}, z\right), \left(\frac{1}{2}, 0, z\right),$ $z = 0,238$ 2O: $(0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$.
K ₂ PtCl ₄	P4/mmm	2	Pt: $(0,0,0),$ 2K: $\left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right);$ 4Cl: $(x, x, 0), (x, \bar{x}, 0), (\bar{x}, x, 0), (\bar{x}, \bar{x}, 0)$
KJO ₄ (NH ₄ JO ₄)	T4 ₁ /a	4	4K: $\left(0,0, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4}\right), \pm \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right),$ 4J: $(0,0,0), \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}\right),$ $\pm \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right),$ 16O: $(x, y, z), (\bar{x}, \bar{y}, z), (\bar{y}, x, \bar{z}), (y, \bar{x}, \bar{z}),$ $\left(x, y + \frac{1}{2}, \frac{1}{4} - z\right), \left(\bar{x}, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{4} - z\right),$ $\left(\bar{y}, x + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{4}\right),$ $\left(y, \frac{1}{2} - x, z + \frac{1}{4}\right), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$.
PbFCl	P4/nmm	2	2F: $(0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right),$ 2Cl: $\left(0, \frac{1}{2}, x\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \bar{x}\right),$ 2Pb: $\left(0, \frac{1}{2}, y\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \bar{y}\right)$.
Zn ₃ P ₂	P4/nmc	8	4P: $\pm (0,0, z_1), \pm \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + z_1\right),$

Структурный тип	Пространственная группа	Число атомов в ячейке	Координаты атомов
			<p>4P: $\left(0, \frac{1}{2}, z_2\right), \left(\frac{1}{2}, 0, z_2\right),$ $\left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + z_2\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} - z_2\right),$</p> <p>8P: $\pm (x, x, 0), (\bar{x}, x, 0),$ $\left(\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2}\right),$</p> <p>8Zn: $(0, x_2, z_3), (0, \bar{x}_2, z_3),$ $(x_2, 0, \bar{z}_3), (\bar{x}_2, 0, \bar{z}_3),$ $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} + x_2, \frac{1}{2} - z_3\right),$ $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} - x_2, x_2 - z_3\right),$</p> <p>16Zn: удвоенные координаты с другим параметром, $z_1 = 0,25, z_2 = 0,239, x = 0,261,$ $x_2 = 0,283, z_3 = 0,386.$</p>
Гексагональная система			
Гексагональная плотная упаковка (Mg)	C6/mmc	2	2Mg: $\left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 0\right), \left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{3}\right)$
CdJ ₂	C3m	1	<p>1Cd: (0,0,0),</p> <p>2J: $\left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z\right), \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \bar{z}\right),$ $z \cong 0,25$</p>
ZnS (вюрцит)	C6mc	2	<p>2Zn: $\left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0\right), \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right);$</p> <p>2S: $\left(\frac{1}{2}, \frac{2}{3}, z\right), \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2} + z\right),$ $z = 0,375$</p>
NiAs		2	<p>2Ni: (0,0,0), $\left(0,0, \frac{1}{2}\right),$</p> <p>2As: $\left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{4}\right), \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{3}{4}\right).$</p>

Структурный тип	Пространственная группа	Число атомов в ячейке	Координаты атомов
MoSr		2	$2\text{Mo}: \left(\frac{1}{2}, \frac{2}{3}, \frac{1}{3}\right), \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}\right),$ $4\text{Sr}: \left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z\right), \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \bar{z}\right),$ $\left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{3} - z\right), \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2} + z\right),$ $z = 0,379.$
Al ₂ O ₃ (корунд)	R $\bar{3}c$	2	$4\text{Al}: (x, x, x), (\bar{x}, \bar{x}, x),$ $\pm \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right),$ $6\text{O}: (y, \bar{y}, 0), (\bar{y}, 0, y), (0, y, \bar{y}),$ $\left(\frac{1}{2} - y, y + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(y + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, y - \frac{1}{2}\right),$ $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} - y, y + \frac{1}{2}\right),$ $x = 0,105, y = 0,303.$
CaCO ₃	R $\bar{3}c$	2	$2\text{Ca}: \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right), \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}\right),$ $2\text{C}: (0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right),$ $6\text{O}: (x, \bar{x}, 0),$ $\left(\frac{1}{2} - x, x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right).$
As	R $\bar{3}m$	2	$2\text{As}: \pm(x, x, x), \quad x = 0,226$
Se (серое)	$\begin{cases} C3_12 \\ C3_22 \end{cases}$	3	$3\text{Se}: \left(x, 0, \frac{1}{3}\right), \left(0, x, \frac{2}{3}\right), (\bar{x}, \bar{x}, 0),$ $x = 0,217.$
SiO ₂ (β-кварц)	$\begin{cases} C6_22 \\ C6_42 \end{cases}$	3	$3\text{Si}: \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}\right), \left(\frac{1}{2}, 0, 0\right), \left(0, \frac{1}{2}, \frac{2}{3}\right),$ $6\text{O}: \left(x, \bar{x}, \frac{5}{6}\right), \left(\bar{x}, x, \frac{5}{6}\right), \left(x, 2x, \frac{1}{2}\right), \left(\bar{x}, 2\bar{x}, \frac{1}{2}\right),$ $\left(2x, x, \frac{1}{6}\right), \left(2\bar{x}, \bar{x}, \frac{1}{6}\right), \quad x = 0,197$
WC (МоС)	C6/mmm	1	$1\text{W}: (0,0,0),$ $1\text{C}: \left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2}\right).$

Структурный тип	Пространственная группа	Число атомов в ячейке	Координаты атомов
MgZn ₂	C6/mmc	4	$4\text{Mg}: \pm \left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z\right), \pm \left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2} - z\right),$ $2\text{Zn}: (0,0,0), \left(0,0, \frac{1}{2}\right),$ $6\text{Zn}: \pm \left(x, 2x, \frac{1}{4}\right), \left(2\bar{x}, \bar{x}, \frac{1}{4}\right), \pm \left(x, \bar{x}, \frac{1}{4}\right),$ $z = 0,062, x = -0,170.$
Na ₃ As	C6/mmc	2	$2\text{As}: \pm \left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{4}\right),$ $2\text{Na}: \pm \left(0,0, \frac{1}{4}\right),$ $4\text{Na}: \pm \left(\frac{1}{2}, \frac{2}{3}, z\right), \pm \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2} + z\right),$ $z = 0,583$
La ₂ O ₃	$\bar{3}m$	1	$2\text{La}: \left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z\right), \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \bar{z}\right),$ $1\text{O}: (0,0,0),$ $2\text{O}: \left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, y\right), \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \bar{y}\right),$ $z = 0,23, y = 0,63$
FeF ₃	$\begin{cases} R32 \\ R\bar{3}C \end{cases}$	2	$2\text{Fe}: (x, x, x), (\bar{x}, \bar{x}, \bar{x}),$ $3\text{F}: (0, y, \bar{y}),$ $3\text{F}: \left(\frac{1}{2}, z, \bar{z}\right),$ $x = 0,250, y = 0,333, z = 0,167.$
BiI ₃	$R\bar{3}$	2	$2\text{Bi}: \pm (u, u, u),$ $6\text{I}: \pm (x, y, z),$ $u = \frac{1}{6}, x = \frac{5}{12}, y = \frac{1}{12}, z = \frac{1}{4}.$
CdCl ₂	$R\bar{3}m$	1	$1\text{Cd}: (0,0,0),$ $2\text{Cl}: (x, x, x), (\bar{x}, \bar{x}, \bar{x}),$ $x = 0,25$
AlB ₂	C6/mmn		$1\text{Al}: (0,0,0),$ $2\text{B}: \left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right).$

Структурный тип	Пространственная группа	Число атомов в ячейке	Координаты атомов
CsJCl_2	$R\bar{3}m$	1	$1\text{Cs}: (0,0,0),$ $1\text{J}: \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right),$ $2\text{Cl}: \pm (x, x, x)$
Mg_3Cd	$C6/mmc$	2	$2\text{Cd}: \pm \left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{4}\right),$ $6\text{Mg}: \pm \left(2x, x, \frac{1}{3}\right), \pm \left(\bar{x}, x, \frac{1}{3}\right),$ $\pm \left(\bar{x}, 2x, \frac{1}{4}\right), x = \frac{5}{6}.$

Табл. 8. Атомный множитель интенсивности

Табл. 8а. Вспомогательная таблица для вычисления атомных множителей

Величину атомного множителя для средних и тяжелых атомов ($Z > 17$) можно вычислить по формуле $f = Z\Phi(U)$, где $U = (4\pi \cdot 0,468)/(1/3 \lambda Z) \sin \vartheta$, Z – атомный номер элемента.

В таблице приведены значения функций $\Phi(U)$ и $\Phi^2(U)$ для U от 0 до 3,11.

U	Φ	Φ^2	U	Φ	Φ^2
0,00	1,000	1,000	1,71	0,284	0,081
0,16	0,922	0,850	1,86	0,264	0,067
0,31	0,796	0,634	2,02	0,240	0,058
0,47	0,684	0,468	2,17	0,224	0,050
0,62	0,589	0,347	2,33	0,205	0,042
0,78	0,522	0,272	2,48	0,189	0,036
0,93	0,469	0,220	2,64	0,175	0,031
1,09	0,422	0,178	2,80	0,167	0,028
1,24	0,378	0,143	2,95	0,156	0,024
1,40	0,342	0,117	3,11	0,147	0,022
1,55	0,309	0,096			

Табл. 8б. Атомные множители рассеяния для атомов и ионов

В таблице (стр.58–71) приведены значения атомных множителей рассеяния рентгеновских лучей f_0 для нейтральных атомов, положительных и отрицательных ионов элементов с Z от 1 до 100 для $\sin \vartheta/\lambda$ от 0 до 1,30.

$\frac{\sin \vartheta}{\lambda}$	0,00	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,50	0,60	0,70	0,80	0,90	1,00	1,10	1,20	1,30
H	1,00	0,945	0,802	0,638	0,481	0,350	0,250	0,180	0,132	0,078	0,040	0,023	0,018	0,01	0	—	—	—
He	2,00	1,945	1,850	1,700	1,510	1,306	1,104	0,920	0,766	0,512	0,345	0,236	0,167	0,120	0,085	0,063	0,048	0,036
Li ⁺	2,0	1,98	1,96	1,88	1,8	1,7	1,5	1,4	1,3	1,0	0,8	0,6	0,5	0,4	0,3	0,3	—	—
Li	3,000	2,710	2,215	1,904	1,741	1,627	1,512	1,394	1,269	1,032	0,823	0,650	0,513	0,404	0,320	0,255	0,205	0,164
Be ²⁺	2,0	2,0	2,0	1,9	1,9	1,8	1,7	1,7	1,6	1,4	1,2	1,0	0,9	0,7	0,6	0,5	—	—
Be	4,000	3,706	3,065	2,462	2,059	1,827	1,693	1,600	1,520	1,362	1,195	1,030	0,877	0,739	0,621	0,521	0,438	0,369
B ³⁺	2,0	2,0	1,99	1,95	1,9	1,9	1,8	1,8	1,7	1,6	1,4	1,3	1,2	1,0	0,9	0,7	—	—
B	5,00	4,752	4,063	3,348	2,601	2,162	1,864	1,772	1,620	1,501	1,399	1,283	1,168	1,036	0,901	0,795	0,696	0,600
C	6,000	5,764	5,141	4,362	3,612	3,003	2,538	2,212	1,983	1,707	1,548	1,423	1,313	1,202	1,096	0,992	0,896	0,802
N ⁵⁺	2,0	2,0	2,0	2,0	2,0	2,0	1,9	1,9	1,9	1,8	1,7	1,6	1,5	1,4	1,3	1,16	—	—
N ³⁺	4,0	3,9	3,7	3,4	3,0	2,7	2,4	2,2	2,0	1,8	1,66	1,56	1,49	1,39	1,28	1,17	—	—
N	7,000	6,781	6,203	5,420	4,600	3,856	3,241	2,760	2,397	1,944	1,698	1,550	1,444	1,350	1,263	1,175	1,083	1,005
O	8,000	7,796	7,250	6,482	5,634	4,814	4,094	3,492	3,010	2,338	1,944	1,714	1,566	1,462	1,374	1,296	1,220	1,144
O ²⁻	10,0	9,0	8,0	6,8	5,5	4,7	3,8	3,3	2,7	2,1	1,8	1,5	1,5	1,4	1,35	1,26	—	—
F	9,000	8,790	8,208	7,396	6,501	5,625	4,837	4,160	3,598	2,769	2,252	1,926	1,725	1,587	1,484	1,404	1,333	1,263
F ⁻	10,000	9,630	8,733	7,656	6,597	5,643	4,820	4,129	3,566	2,751	2,237	1,921	1,723	1,583	1,485	1,406	1,334	1,264
Ne	10,000	9,812	9,295	8,546	7,665	6,768	5,905	5,128	4,454	3,403	2,692	2,234	1,934	1,737	1,601	1,496	1,418	1,345
Na ⁺	10,0	9,8	9,5	8,9	8,2	7,5	6,7	5,98	5,25	4,05	3,2	2,65	2,25	1,95	1,75	1,6	—	—
Na	11,000	10,56	9,76	9,02	8,34	7,62	6,89	6,16	5,47	4,29	3,40	2,76	2,31	2,00	1,78	1,63	1,52	1,44
Mg ²⁺	10,00	9,91	9,66	9,26	8,75	8,15	7,51	6,85	6,20	4,99	4,03	3,28	2,71	2,30	2,01	1,81	1,65	1,54
Mg	12,0	11,3	10,5	9,6	8,6	7,6	7,25	6,60	5,95	4,8	3,85	3,15	2,55	2,2	2,0	1,8	—	—
Al ³⁺	10,00	9,93	9,72	9,38	8,94	8,42	7,85	7,26	6,65	5,51	4,53	3,72	3,10	2,62	2,27	2,01	1,82	1,68
Al	13,0	12,0	11,0	9,98	8,95	8,35	7,75	7,18	6,6	5,5	4,5	3,7	3,1	2,65	2,3	2,0	—	—
Si ⁴⁺	10,00	9,95	9,79	9,54	9,20	8,79	8,33	7,83	7,31	6,26	5,28	4,42	3,71	3,13	2,68	2,33	2,06	1,86

$\frac{\sin \vartheta}{\lambda}$	0,00	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,50	0,60	0,70	0,80	0,90	1,00	1,10	1,20	1,30
Si	14,0	12,68	11,35	10,38	9,4	8,8	8,2	7,68	7,15	6,1	5,1	4,2	3,4	2,95	2,6	2,3	—	—
P ⁵⁺	10,0	9,9	9,8	9,53	9,25	8,85	8,45	7,98	7,5	6,55	5,65	4,8	4,05	3,4	3,0	2,6	—	—
P	15,0	13,7	12,4	11,2	10,0	9,23	8,45	7,95	7,45	6,5	5,65	4,8	4,05	3,4	3,0	2,6	—	—
P ³⁺	18,0	15,4	12,7	11,3	9,8	9,1	8,4	7,9	7,45	6,5	5,65	4,85	4,05	3,4	3,0	2,6	—	—
S ⁶⁺	10,0	9,93	9,85	9,63	9,4	9,1	8,7	8,2	7,85	6,85	6,05	5,25	4,5	3,9	3,35	2,9	—	—
S	16,00	15,8	15,0	14,1	12,3	10,7	8,95	8,40	7,85	6,85	6,05	5,25	4,5	3,9	3,35	2,9	—	—
S ²⁻	18,0	16,2	14,3	12,5	10,7	9,8	8,9	8,38	7,85	6,85	6,0	5,25	4,5	3,9	3,35	2,9	—	—
Cl	17,0	15,8	14,6	13,0	11,3	10,3	9,25	8,65	8,05	7,25	6,5	5,75	5,05	4,4	3,85	3,35	—	—
Cl ⁻	18,00	17,33	15,68	13,74	11,97	10,57	9,51	8,74	8,15	7,30	6,60	5,91	5,24	4,60	4,01	3,49	3,06	2,69
Ar	18,00	17,54	16,30	14,65	12,93	11,42	10,20	9,25	8,54	7,56	6,86	6,23	5,61	5,01	4,43	3,90	3,43	3,03
K ⁻	18,00	17,65	16,68	15,30	13,76	12,27	10,96	9,89	9,04	7,86	7,11	6,51	5,94	5,39	4,84	4,43	3,83	3,40
K	19,0	17,8	16,5	14,9	13,3	12,1	10,8	9,0	9,2	7,9	6,7	5,9	5,2	4,6	4,2	3,7	3,3	—
Ca ²⁺	18,0	17,4	16,8	15,4	14,0	12,8	11,5	10,4	9,3	8,1	7,35	6,7	6,2	5,7	5,1	4,6	—	—
Ca	20,00	19,09	17,33	15,73	14,32	12,98	11,71	10,59	9,64	8,26	7,38	6,75	6,21	5,70	5,19	4,69	4,21	3,77
Sc ³⁺	18,0	17,4	16,7	15,4	14,0	12,7	11,4	10,4	9,4	8,3	7,6	6,9	6,4	5,8	5,35	4,85	—	—
Sc	21,00	19,08	17,21	15,80	14,29	13,02	11,79	10,71	9,80	8,41	7,52	6,85	6,30	5,80	5,37	4,91	4,45	4,02
Ti ⁴⁺	18,0	17,5	17,0	15,7	14,4	13,2	11,9	10,9	9,9	8,5	7,85	7,3	6,7	6,15	5,65	5,05	—	—
Ti	22,00	20,05	18,05	16,42	14,97	13,52	12,23	11,22	10,23	8,77	7,81	7,12	6,52	6,05	5,70	5,19	4,77	4,38
V	23,00	21,30	19,19	17,62	15,81	14,22	12,90	11,76	10,79	9,19	8,09	7,41	6,77	6,28	5,82	5,42	5,03	4,64
Cr ²⁺	22,00	21,65	20,67	19,27	17,67	16,04	14,50	13,10	11,87	9,93	8,60	7,69	7,06	6,56	6,13	5,72	5,31	4,91
Cr	24,0	22,6	21,1	19,3	17,4	15,8	14,2	13,2	12,1	10,6	9,2	8,0	7,1	6,3	5,7	5,1	4,6	—
Mn	25,00	24,38	22,77	20,78	18,88	17,25	15,84	14,56	13,41	11,54	10,04	8,84	7,85	7,03	6,34	5,75	5,25	4,82
Mn ⁺	24,00	23,59	22,44	20,82	19,02	17,30	15,79	14,51	13,42	11,55	10,04	8,84	7,85	7,03	6,34	5,75	5,25	4,82
Mn ²⁺	23,00	22,70	21,84	20,55	19,01	17,42	15,90	14,55	13,38	11,53	10,06	8,84	7,85	7,03	6,34	5,75	5,25	4,82

$\frac{\sin \vartheta}{\lambda}$	0,00	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,50	0,60	0,70	0,80	0,90	1,00	1,10	1,20	1,30
Mn ³⁺	22,06	21,77	21,10	20,08	18,80	17,40	15,99	14,65	13,45	11,50	10,03	8,85	7,85	7,03	6,34	5,75	5,25	4,82
Mn ⁴⁺	21,00	20,82	20,30	19,47	18,42	17,23	15,97	14,72	13,54	11,53	1,000	8,82	7,85	7,03	6,34	5,75	5,25	4,82
Fe	26,00	25,36	23,71	21,66	19,71	18,03	16,56	15,24	14,05	12,11	10,54	9,29	8,25	7,39	6,67	6,06	5,53	5,08
Fe ⁺	25,00	24,57	23,39	21,71	19,85	18,08	16,52	15,20	14,05	12,12	10,54	9,29	8,25	7,39	6,67	6,06	5,53	5,08
Fe ²⁺	24,00	23,68	22,79	21,44	19,85	18,19	16,62	15,22	14,02	12,09	10,56	9,29	8,25	7,39	6,67	6,06	5,53	5,08
Fe ³⁺	23,00	22,76	22,06	20,98	19,65	18,19	16,71	15,33	14,08	12,06	10,54	9,30	8,25	7,39	6,67	6,06	5,53	5,08
Fe ⁴⁺	22,00	21,81	21,26	20,39	19,28	18,03	16,71	15,40	14,18	12,09	10,50	9,28	8,25	7,39	6,67	6,06	5,53	5,08
Co	27,00	26,34	24,65	22,55	20,54	18,81	17,29	15,92	14,69	12,67	11,05	9,74	8,66	7,77	7,01	6,37	5,82	5,34
Co ⁺	26,00	25,56	24,33	22,60	20,68	18,85	17,25	15,88	14,70	12,68	11,04	9,74	8,66	7,77	7,01	6,37	5,82	5,34
Co ²⁺	25,00	24,67	23,74	22,34	20,69	18,97	17,35	15,90	14,66	12,66	11,07	9,74	8,66	7,77	7,01	6,37	5,82	5,34
Co ³⁺	24,00	23,75	23,01	21,87	20,50	18,97	17,44	16,01	14,72	12,63	11,04	9,76	8,66	7,77	7,01	6,37	5,82	5,34
Co ⁴⁺	23,00	22,80	22,22	21,30	20,14	18,82	17,45	16,09	14,81	12,65	11,00	9,73	8,66	7,77	7,01	6,37	5,82	5,34
Ni	28,00	27,33	25,60	23,44	21,37	19,59	18,03	16,61	15,34	13,25	11,56	10,20	9,08	8,14	7,35	6,68	6,11	5,61
Ni ⁺	27,00	26,54	25,28	23,49	21,52	19,63	17,98	16,57	15,34	13,25	11,55	10,20	9,08	8,14	7,35	6,68	6,11	5,61
Ni ²⁺	26,00	25,66	24,69	23,24	21,53	19,75	18,08	16,59	15,30	13,24	11,58	10,19	9,08	8,14	7,35	6,68	6,11	5,61
Ni ³⁺	25,00	24,73	23,97	22,80	21,35	19,76	18,18	16,69	15,36	13,20	11,56	10,21	9,08	8,14	7,35	6,68	6,11	5,61
Ni ⁴⁺	24,00	23,79	23,18	22,22	21,00	19,63	18,19	16,78	15,45	13,22	11,52	10,19	9,08	8,14	7,35	6,68	6,11	5,61
Cu	29,00	28,31	26,54	24,33	22,10	20,38	18,76	17,30	15,98	13,82	12,07	10,66	9,49	8,52	7,70	7,00	6,40	5,88
Cu ⁺	28,00	27,53	26,22	24,38	22,35	20,42	18,71	17,26	15,99	13,83	12,07	10,66	9,49	8,52	7,70	7,00	6,40	5,88
Cu ²⁺	27,00	26,64	25,64	24,14	22,37	20,54	18,81	17,27	15,95	13,81	12,09	10,65	9,49	8,52	7,70	7,00	6,40	5,88
Cu ³⁺	26,00	25,72	24,93	23,71	22,20	20,56	18,91	17,38	16,00	13,77	12,07	10,68	9,49	8,52	7,70	7,00	6,40	5,88
Cu ⁴⁺	25,00	24,78	24,14	23,13	21,86	20,43	18,93	17,47	16,10	13,79	12,03	10,66	9,49	8,52	7,70	7,00	6,40	5,88
Se	34,00	33,23	31,26	28,80	26,42	24,34	22,49	20,80	19,28	16,75	14,69	13,02	11,62	10,46	9,47	8,63	7,91	7,27
Se ⁺	33,00	32,46	30,97	28,87	26,57	24,37	22,43	20,76	19,29	16,76	14,69	13,02	11,62	10,46	9,47	8,63	7,91	7,27

$\frac{\sin \vartheta}{\lambda}$	0,00	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,50	0,60	0,70	0,80	0,90	1,00	1,10	1,20	1,30
Se ²⁺	32,00	31,58	30,41	28,66	26,61	24,50	22,52	20,76	19,24	16,75	14,71	13,01	11,62	10,46	9,47	8,63	7,91	7,27
Se ³⁺	31,00	30,67	29,71	28,26	26,47	24,54	22,63	20,86	19,28	16,71	14,70	13,03	11,62	10,46	9,47	8,63	7,91	7,27
Se ⁴⁺	30,00	29,73	28,94	27,72	26,18	24,46	22,68	20,96	19,37	16,70	14,66	13,03	11,62	10,46	9,47	8,63	7,91	7,27
Br	35,00	34,22	32,21	29,70	27,27	25,14	23,24	21,51	19,95	17,35	15,22	13,50	12,06	10,86	9,84	8,97	8,21	7,56
Br ⁺	34,00	33,45	31,92	29,77	27,41	25,17	23,18	21,47	19,96	17,35	15,22	13,50	12,06	10,86	9,84	8,97	8,21	7,56
Br ²⁺	33,00	32,57	31,36	29,57	27,46	25,30	23,27	21,47	19,91	17,35	15,24	13,49	12,06	10,86	9,84	8,97	8,21	7,56
Br ³⁺	32,00	31,66	30,67	29,17	27,33	25,35	23,38	21,56	19,94	17,30	15,24	13,51	12,06	10,86	9,84	8,97	8,21	7,56
Br ⁴⁺	31,00	30,72	29,90	28,64	27,05	25,27	23,44	21,67	20,03	17,29	15,20	13,51	12,06	10,86	9,84	8,97	8,21	7,56
Kr	36,00	35,21	33,16	30,60	28,12	25,94	24,00	22,22	20,62	17,95	15,76	13,98	12,50	11,26	10,21	9,31	8,53	7,85
Kr ⁺	35,00	34,43	32,87	30,67	28,26	25,97	23,94	22,18	20,63	17,95	15,76	13,99	12,50	11,26	10,21	9,31	8,53	7,85
Kr ²⁺	34,00	33,56	32,31	30,47	28,31	26,10	24,02	22,18	20,58	17,95	15,78	13,97	12,50	11,26	10,21	9,31	8,53	7,85
Kr ³⁺	33,00	32,65	31,63	30,08	28,19	26,15	24,14	22,27	20,61	17,90	15,78	14,00	12,50	11,26	10,21	9,31	8,53	7,85
Kr ⁴⁺	32,00	31,71	30,87	29,56	27,91	26,08	24,19	22,37	20,70	17,89	15,73	14,00	12,50	11,26	10,21	9,31	8,53	7,85
Rb	37,00	36,19	34,11	31,50	28,97	26,75	24,75	22,93	21,29	18,55	16,30	14,47	12,94	11,66	10,58	9,65	8,84	8,14
Rb ⁺	36,00	35,42	33,82	31,58	29,11	26,77	24,70	22,90	21,31	18,55	16,30	14,48	12,94	11,66	10,58	9,65	8,84	8,14
Rb ²⁺	35,00	34,55	33,27	31,38	29,17	26,90	24,78	22,89	21,26	18,55	16,32	14,46	12,94	11,66	10,58	9,65	8,84	8,14
Rb ³⁺	34,00	33,63	32,59	31,00	29,05	26,96	24,89	22,98	21,28	18,50	16,32	14,48	12,94	11,66	10,58	9,65	8,84	8,14
Rb ⁴⁺	33,00	32,70	31,83	30,48	28,78	26,89	24,95	23,09	21,37	18,49	16,28	14,49	12,94	11,66	10,58	9,65	8,84	8,14
Zn	30,00	29,30	27,48	25,22	23,05	21,17	19,50	17,99	16,64	14,40	12,59	11,12	9,91	8,90	8,05	7,32	6,70	6,15
Zn ⁺	29,00	28,51	27,17	25,28	23,19	21,20	19,45	17,95	16,65	14,41	12,58	11,13	9,91	8,90	8,05	7,32	6,70	6,15
Zn ²⁺	28,00	27,63	26,59	25,04	23,22	21,33	19,55	17,97	16,60	14,40	12,61	11,12	9,91	8,90	8,05	7,32	6,70	6,15
Zn ³⁺	27,00	26,71	25,88	24,61	23,05	21,35	19,65	18,07	16,65	14,35	12,59	11,14	9,91	8,90	8,05	7,32	6,70	6,15
Zn ⁴⁺	26,00	25,77	25,10	24,05	22,73	21,23	19,68	18,16	16,75	14,36	12,55	11,12	9,91	8,90	8,05	7,32	6,70	6,15
Ga	31,00	30,28	28,43	26,11	23,89	21,96	20,25	18,69	17,29	14,98	13,11	11,59	10,33	9,29	8,40	7,64	6,99	6,43

$\frac{\sin \vartheta}{\lambda}$	0,00	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,50	0,60	0,70	0,80	0,90	1,00	1,10	1,20	1,30
Ga ⁺	30,00	29,50	28,12	26,17	24,03	21,99	20,19	18,65	17,30	14,99	13,10	11,60	10,33	9,29	8,40	7,64	6,99	6,43
Ga ²⁺	29,00	28,62	27,54	25,95	24,06	22,12	20,29	18,66	17,26	14,98	13,13	11,59	10,33	9,29	8,40	7,64	6,99	6,43
Ga ³⁺	28,00	27,70	26,84	25,52	23,90	22,14	20,39	18,76	17,30	14,93	13,11	11,61	10,33	9,29	8,40	7,64	6,99	6,43
Ga ⁴⁺	27,00	26,76	26,06	24,97	23,59	22,04	20,42	18,86	17,40	14,94	13,07	11,60	10,33	9,29	8,40	7,64	6,99	6,43
Ge	32,00	31,26	29,37	27,00	24,73	22,75	20,99	19,39	17,95	15,57	13,63	12,06	10,76	9,68	8,76	7,97	7,29	6,71
Ge ⁴⁺	28,00	27,75	27,02	25,89	24,45	22,84	21,18	19,55	18,05	15,53	13,60	12,07	10,76	9,68	8,76	7,97	7,29	6,71
As	33,00	32,25	30,32	27,90	25,58	23,54	21,74	20,09	18,61	16,16	14,16	12,54	11,19	10,07	9,11	8,30	7,60	6,99
As ⁺	32,00	31,47	30,02	27,97	25,72	23,57	21,68	20,06	18,63	16,16	14,16	12,54	11,19	10,07	9,11	8,30	7,60	6,99
As ²⁺	31,00	30,60	29,45	27,76	25,76	23,70	21,77	20,06	18,58	16,16	14,18	12,53	11,19	10,07	9,11	8,30	7,60	6,99
As ³⁺	30,00	29,68	28,75	27,35	25,62	23,74	21,88	20,16	18,61	16,11	14,17	12,55	11,19	10,07	9,11	8,30	7,60	6,99
As ⁴⁺	29,00	28,74	27,98	26,80	25,32	23,65	21,93	20,26	18,71	16,11	14,13	12,55	11,19	10,07	9,11	8,30	7,60	6,99
Sr	38,00	37,18	35,06	32,40	29,83	27,55	25,51	23,65	21,96	19,15	16,84	14,96	13,39	12,07	10,95	9,99	9,16	8,44
Sr ⁺	37,00	36,41	34,77	32,48	29,97	27,57	25,45	23,61	21,98	19,15	16,84	14,97	13,39	12,07	10,95	9,99	9,16	8,44
Sr ²⁺	36,00	35,54	34,23	32,29	30,03	27,71	25,53	23,61	21,93	19,16	16,86	14,95	13,39	12,07	10,95	9,99	9,16	8,44
Sr ³⁺	35,00	31,62	33,55	31,91	29,91	27,77	25,65	23,69	21,95	19,11	16,86	14,97	13,39	12,07	10,95	9,99	9,16	8,44
Sr ⁴⁺	34,00	33,69	32,79	31,40	29,65	27,71	25,72	23,80	22,04	19,09	16,82	14,98	13,39	12,07	10,95	9,99	9,16	8,44
Y	39,00	38,16	36,00	33,30	30,68	28,36	26,28	24,37	22,64	19,76	17,39	15,46	13,84	12,48	11,32	10,34	9,48	8,73
Y ⁺	38,00	37,39	35,73	33,39	30,82	28,38	26,22	24,33	22,66	19,76	17,39	15,46	13,84	12,48	11,32	10,34	9,48	8,73
Y ²⁺	37,00	36,52	35,18	33,20	30,88	28,51	26,29	24,32	22,61	19,77	17,41	15,45	13,84	12,48	11,32	10,34	9,48	8,73
Y ³⁺	36,00	35,61	34,51	32,83	30,78	28,58	26,41	24,41	22,63	19,72	17,41	15,47	13,84	12,48	11,32	10,34	9,48	8,73
Y ⁴⁺	35,00	34,68	33,75	32,32	30,52	28,52	26,48	24,51	22,71	19,70	17,37	15,47	13,84	12,48	11,32	10,34	9,48	8,73
Zr	40,00	39,15	36,96	34,21	31,54	29,17	27,04	25,09	23,32	20,37	17,94	15,95	14,29	12,89	11,70	10,68	9,80	9,03
Zr ⁺	39,00	38,38	36,68	34,29	31,68	29,19	26,98	25,06	23,35	20,37	17,93	15,96	14,29	12,89	11,70	10,68	9,80	9,03
Zr ²⁺	38,00	37,51	36,14	34,11	31,74	29,32	27,05	25,04	23,29	20,38	17,95	15,94	14,29	12,89	11,70	10,68	9,80	9,03

$\frac{\sin \vartheta}{\lambda}$	0,00	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,50	0,60	0,70	0,80	0,90	1,00	1,10	1,20	1,30
Zr ³⁺	37,00	36,60	35,47	33,74	31,64	29,39	27,17	25,13	23,31	20,33	17,96	15,96	14,29	12,89	11,70	10,68	9,80	9,03
Zr ⁴⁺	36,00	35,67	34,72	33,24	31,39	29,34	27,25	25,23	23,39	20,31	17,92	15,97	14,29	12,89	11,70	10,68	9,80	9,03
Nb	41,00	40,14	37,91	35,11	32,40	29,98	27,81	25,81	24,01	20,98	18,49	16,45	14,74	13,31	12,08	11,04	10,13	9,33
Nb ⁺	40,00	39,37	37,63	35,20	32,53	30,00	27,74	25,78	24,03	20,98	18,49	16,46	14,74	13,31	12,08	11,04	10,13	9,33
Nb ²⁺	39,00	38,50	37,10	35,02	32,60	30,13	27,82	25,77	23,98	20,99	18,50	16,44	14,74	13,31	12,08	11,04	10,13	9,33
Nb ³⁺	38,00	37,59	36,43	34,66	32,51	30,20	27,94	25,85	23,99	20,94	18,51	16,46	14,74	13,31	12,08	11,04	10,13	9,33
Nb ⁴⁺	37,00	36,66	35,68	34,16	32,26	30,16	28,01	25,95	24,07	20,92	18,47	16,47	14,74	13,31	12,08	11,04	10,13	9,33
Mo	42,00	41,12	38,86	36,02	33,25	30,79	28,57	26,53	24,69	21,60	19,04	16,95	15,20	13,73	12,46	11,39	10,45	9,64
Mo ⁺	41,00	40,36	38,59	36,11	33,39	30,81	28,51	26,51	24,72	21,59	19,04	16,96	15,20	13,73	12,46	11,39	10,45	9,64
Mo ²⁺	40,00	39,49	38,05	35,94	33,46	30,94	28,58	26,49	24,66	21,61	19,06	16,94	15,20	13,73	12,46	11,39	10,45	9,64
Mo ³⁺	39,00	38,58	37,39	35,58	33,37	31,02	28,70	26,57	24,67	21,56	19,07	16,96	15,20	13,73	12,46	11,39	10,45	9,64
Mo ⁴⁺	38,00	37,65	36,64	35,08	33,14	30,98	28,78	26,68	24,75	21,53	19,03	16,97	15,20	13,73	12,46	11,39	10,45	9,64
Tc	43,00	42,11	39,81	36,92	34,12	31,61	29,34	27,26	25,38	22,21	19,60	17,46	15,65	14,15	12,85	11,74	10,78	9,94
Tc ⁺	42,00	41,34	39,54	37,02	34,25	31,62	29,28	27,24	25,41	22,21	19,60	17,46	15,65	14,15	12,85	11,74	10,78	9,94
Tc ²⁺	41,00	40,48	39,01	36,85	34,33	31,75	29,35	27,22	25,35	22,22	19,61	17,45	15,65	14,15	12,85	11,74	10,78	9,94
Tc ³⁺	40,00	39,57	38,35	36,49	34,24	31,83	29,47	27,29	25,36	22,18	19,62	17,46	15,65	14,15	12,85	11,74	10,78	9,94
Tc ⁴⁺	39,00	38,64	37,60	36,01	34,01	31,80	29,55	27,40	25,43	22,15	19,59	17,48	15,65	14,15	12,85	11,74	10,78	9,94
Ru ²⁺	42,00	41,47	39,97	37,76	35,19	32,57	30,12	27,94	26,04	22,84	20,17	17,95	16,12	14,57	13,24	12,10	11,11	10,25
Ru ³⁺	41,00	40,56	39,31	37,41	35,11	32,65	30,24	28,02	26,05	22,80	20,18	17,97	16,12	14,57	13,24	12,10	11,11	10,25
Ru ⁴⁺	40,00	39,63	38,57	36,93	34,88	32,62	30,32	28,13	26,12	22,77	20,15	17,98	16,12	14,57	13,24	12,10	11,11	10,25
Rh	45,00	44,08	41,72	38,74	35,84	33,24	30,89	28,72	26,76	23,46	20,72	18,47	16,58	14,99	13,63	12,46	11,45	10,56
Rh ⁺	44,00	43,32	41,45	38,84	35,98	33,25	30,83	28,70	26,79	23,45	20,72	18,48	16,58	14,99	13,63	12,46	11,45	10,56
Rh ²⁺	43,00	42,46	40,93	38,68	36,06	33,38	30,89	28,67	26,74	23,47	20,73	18,46	16,58	14,99	13,63	12,46	11,45	10,56
Rh ³⁺	42,00	41,55	40,27	38,33	35,98	33,47	31,01	28,75	26,74	23,42	20,75	18,48	16,58	14,99	13,63	12,46	11,45	10,56

$\frac{\sin \vartheta}{\lambda}$	0,00	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,50	0,60	0,70	0,80	0,90	1,00	1,10	1,20	1,30
Rh ⁴⁺	41,00	40,62	39,53	37,85	35,76	33,45	31,10	28,86	26,81	23,39	20,71	18,49	16,58	14,99	13,63	12,46	11,45	10,56
Pd	46,00	45,07	42,67	39,65	36,70	34,06	31,67	29,46	27,46	24,08	21,28	18,98	17,05	15,42	14,02	12,82	11,78	10,87
Pd ⁺	45,00	44,31	42,41	39,75	36,84	34,07	31,60	29,43	27,49	24,08	21,28	18,99	17,05	15,42	14,02	12,82	11,78	10,87
Pd ²⁺	44,00	43,45	41,89	39,59	36,92	34,20	31,66	29,41	27,43	24,09	21,30	18,97	17,05	15,42	14,02	12,82	11,78	10,87
Pd ³⁺	43,00	42,54	41,23	39,25	36,85	34,29	31,78	29,48	27,43	24,05	21,31	18,99	17,05	15,42	14,02	12,82	11,78	10,87
Pd ⁴⁺	42,00	41,61	40,50	38,78	36,63	34,27	31,87	29,59	27,50	24,01	21,28	19,01	17,05	15,42	14,02	12,82	11,78	10,87
Ag	47,00	46,06	43,63	40,56	37,57	34,88	32,44	30,19	28,16	24,71	21,85	19,50	17,52	15,85	14,42	13,19	12,12	11,19
Ag ⁺	46,00	45,30	43,37	40,66	37,71	34,89	32,38	30,17	28,18	24,70	21,85	19,50	17,52	15,85	14,42	13,19	12,12	11,19
Ag ²⁺	45,00	44,44	42,85	40,51	37,79	35,02	32,44	30,14	28,13	24,72	21,86	19,49	17,52	15,85	14,42	13,19	12,12	11,19
Ag ³⁺	44,00	43,53	42,19	40,17	37,72	35,11	32,56	30,21	28,13	24,68	21,88	19,50	17,52	15,85	14,42	13,19	12,12	11,19
Ag ⁴⁺	43,00	42,60	41,46	39,70	37,51	35,10	32,65	30,32	28,19	24,64	21,85	19,52	17,52	15,85	14,42	13,19	12,12	11,19
Cd	48,00	47,04	44,58	41,47	38,44	35,71	33,22	30,93	28,85	25,34	22,42	20,02	17,99	16,28	14,81	13,56	12,46	11,51
Cd ⁺	47,00	46,28	44,32	41,58	38,57	35,71	33,16	30,91	28,88	25,33	22,42	20,02	17,99	16,28	14,81	13,56	12,46	11,51
Cd ²⁺	46,00	45,42	43,80	41,43	38,66	35,84	33,22	30,88	28,83	25,35	22,43	20,00	17,99	16,28	14,81	13,56	12,46	11,51
Cd ³⁺	45,00	44,52	43,16	41,09	38,59	35,93	33,34	30,95	28,82	25,31	22,45	20,02	17,99	16,28	14,81	13,56	12,46	11,51
Cd ⁴⁺	44,00	43,59	42,43	40,63	38,39	35,92	33,43	31,05	28,89	25,27	22,42	20,04	17,99	16,28	14,81	13,56	12,46	11,51
In	49,00	48,03	45,53	42,39	39,31	36,53	34,00	31,67	29,56	25,97	22,99	20,53	18,46	16,71	15,21	13,93	12,80	11,82
In ⁺	48,00	47,27	45,28	42,49	39,44	36,53	33,94	31,65	29,58	25,96	22,99	20,54	18,46	16,71	15,21	13,93	12,80	11,82
In ²⁺	47,00	46,41	44,76	42,34	39,53	36,66	33,99	31,62	29,53	25,98	23,00	20,52	18,46	16,71	15,21	13,93	12,80	11,82
In ³⁺	46,00	45,51	44,12	42,01	39,47	36,76	34,11	31,68	29,52	25,94	23,02	20,54	18,46	16,71	15,21	13,93	12,80	11,82
In ⁴⁺	45,00	44,59	43,39	41,55	39,27	36,75	34,21	31,79	29,59	25,90	22,99	20,55	18,46	16,71	15,21	13,93	12,80	11,82
Sn	50,00	49,02	46,49	43,30	40,17	37,36	34,78	32,41	30,26	26,60	23,56	21,05	18,93	17,15	15,61	14,30	13,15	12,14
Sn ⁺	49,00	48,26	46,24	43,41	40,31	37,36	34,72	32,39	30,29	26,60	23,56	21,06	18,93	17,15	15,61	14,30	13,15	12,14
Sn ²⁺	48,00	47,40	45,72	43,26	40,40	37,49	34,77	32,36	30,26	26,61	23,57	21,04	18,93	17,15	15,61	14,30	13,15	12,14

$\frac{\sin \vartheta}{\lambda}$	0,00	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,50	0,60	0,70	0,80	0,90	1,00	1,10	1,20	1,30
Sn ³⁺	47,00	46,50	45,08	42,94	40,34	37,58	34,89	32,42	30,22	26,57	23,59	21,06	18,93	17,15	15,61	14,30	13,15	12,14
Sn ⁴⁺	46,00	45,58	44,35	42,48	40,15	37,58	34,99	32,53	30,28	26,53	23,56	21,08	18,93	17,15	15,61	14,30	13,15	12,14
Sb	51,00	50,01	47,45	44,21	41,05	38,18	35,57	33,15	30,96	27,24	24,14	21,58	19,41	17,59	16,02	14,67	13,49	12,47
Sb ⁺	50,00	49,25	47,20	44,32	41,18	38,18	35,50	33,13	30,99	27,23	24,14	21,58	19,41	17,59	16,02	14,67	13,49	12,47
Sb ²⁺	49,00	48,39	46,69	44,18	41,27	38,31	35,56	33,10	30,94	27,25	24,15	21,57	19,41	17,59	16,02	14,67	13,49	12,47
Sb ³⁺	48,00	47,49	46,04	43,86	41,22	38,41	35,67	33,16	30,93	27,21	24,17	21,58	19,41	17,59	16,02	14,67	13,49	12,47
Sb ⁴⁺	47,00	46,57	45,32	43,40	41,03	38,41	35,77	33,27	30,99	27,17	24,14	21,60	19,41	17,59	16,02	14,67	13,49	12,47
Te	52,00	51,00	48,40	45,13	41,92	39,01	36,35	33,90	31,67	27,87	24,71	22,10	19,89	18,03	16,42	15,05	13,84	12,79
Te ⁺	51,00	50,24	48,15	45,24	42,05	39,01	36,29	33,88	31,70	27,87	24,71	22,11	19,89	18,03	16,42	15,05	13,84	12,79
Te ²⁺	50,00	49,38	47,65	45,10	42,14	39,14	36,34	33,84	31,64	27,89	24,72	22,09	19,89	18,03	16,42	15,05	13,84	12,79
Te ³⁺	49,00	48,48	47,01	44,78	42,09	39,24	36,46	33,90	31,63	27,85	24,74	22,10	19,89	18,03	16,42	15,05	13,84	12,79
Te ⁴⁺	48,00	47,56	46,28	44,33	41,91	39,24	36,56	34,01	31,69	27,81	24,72	22,12	19,89	18,03	16,42	15,05	13,84	12,79
J	53,00	51,98	49,36	46,05	42,79	39,84	37,14	34,64	32,38	28,51	25,29	22,63	20,37	18,47	16,83	15,42	14,19	13,12
J ⁺	52,00	51,23	49,11	46,15	42,92	39,84	37,08	34,62	32,41	28,51	25,29	22,63	20,37	18,47	16,83	15,42	14,19	13,12
J ²⁺	51,00	50,37	48,61	46,02	43,02	39,97	37,12	34,59	32,35	28,53	25,30	22,62	20,37	18,47	16,83	15,42	14,19	13,12
J ³⁺	50,00	49,47	47,97	45,70	42,97	40,07	37,24	34,65	32,34	28,49	25,32	22,63	20,37	18,47	16,83	15,42	14,19	13,12
J ⁴⁺	49,00	48,55	47,25	45,26	42,79	40,08	37,35	34,75	32,39	28,45	25,30	22,65	20,37	18,47	16,83	15,42	14,19	13,12
Xe	54,00	52,97	50,32	46,96	43,66	40,67	37,93	35,39	33,09	29,16	25,87	23,16	20,86	18,92	17,24	15,80	14,54	13,44
Xe ⁺	53,00	52,22	50,07	47,07	43,80	40,67	37,86	35,37	33,12	29,15	25,88	23,16	20,86	18,92	17,24	15,80	14,54	13,44
Xe ²⁺	52,00	51,36	49,57	46,94	43,89	40,80	37,91	35,34	33,06	29,17	25,88	23,15	20,86	18,92	17,24	15,80	14,54	13,44
Xe ³⁺	51,00	50,46	48,93	46,63	43,85	40,90	38,03	35,39	33,05	29,13	25,90	23,16	20,86	18,92	17,24	15,80	14,54	13,44
Xe ⁴⁺	50,00	49,54	48,22	46,18	43,67	40,91	38,13	35,50	33,10	29,09	25,88	23,18	20,86	18,92	17,24	15,80	14,54	13,44
Cs	55,00	53,96	51,27	47,88	44,54	41,50	38,72	36,14	33,80	29,80	26,46	23,69	21,34	19,36	17,65	16,18	14,90	13,77
Cs ⁺	54,00	53,21	51,03	47,99	44,67	41,50	38,65	36,12	33,83	29,79	26,46	23,69	21,34	19,36	17,65	16,18	14,90	13,77

$\frac{\sin \vartheta}{\lambda}$	0,00	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,50	0,60	0,70	0,80	0,90	1,00	1,10	1,20	1,30
Cs ²⁺	53,00	52,35	50,53	47,86	44,77	41,63	38,70	36,08	33,78	29,81	26,47	23,68	21,34	19,36	17,65	16,18	14,90	13,77
Cs ³⁺	52,00	51,45	49,90	47,55	44,72	41,73	38,81	36,14	33,76	29,77	26,49	23,69	21,34	19,36	17,65	16,18	14,90	13,77
Cs ⁴⁺	51,00	50,53	49,18	47,11	44,55	41,75	38,92	36,24	33,81	29,73	26,47	23,71	21,34	19,36	17,65	16,18	14,90	13,77
Ba	56,00	54,95	52,23	48,80	45,41	42,33	39,51	36,89	34,51	30,44	27,04	24,22	21,83	19,81	18,07	16,57	15,25	14,11
Ba ⁺	55,00	54,20	51,99	48,91	45,54	42,33	39,44	36,87	34,54	30,43	27,04	24,23	21,83	19,81	18,07	16,57	15,25	14,11
Ba ²⁺	54,00	53,34	51,49	48,78	45,64	42,46	39,49	36,83	34,49	30,46	27,05	24,21	21,83	19,81	18,07	15,57	15,25	14,11
Ba ³⁺	53,00	52,44	50,86	48,48	45,60	42,56	39,60	36,89	34,47	30,42	27,07	24,22	21,83	19,81	18,07	16,57	15,25	14,11
Ba ⁴⁺	52,00	51,52	50,15	48,04	45,43	42,58	39,71	36,99	34,52	30,38	27,05	24,24	21,83	19,81	18,07	16,57	15,25	14,11
La	57,00	55,94	53,19	49,71	46,29	43,17	40,30	37,64	35,23	31,09	27,63	24,76	22,32	20,26	18,48	16,95	15,61	14,44
La ⁺	56,90	55,18	52,95	49,83	46,42	43,16	40,23	37,63	35,26	31,08	27,63	24,76	22,32	20,26	18,48	16,95	15,61	14,44
La ²⁺	55,00	54,33	52,45	49,71	46,52	43,29	40,28	37,59	35,20	31,10	27,64	24,75	22,32	20,26	18,48	16,95	15,61	14,44
La ³⁺	54,00	53,43	51,82	49,40	46,48	43,39	40,39	37,64	35,18	31,07	27,66	24,76	22,32	20,26	18,48	16,95	15,61	14,44
La ⁴⁺	53,00	52,51	51,11	48,97	46,32	43,42	40,50	37,74	35,23	31,02	27,64	24,78	22,32	20,26	18,48	16,95	15,61	14,44
Ce	58,00	56,93	54,15	50,63	47,16	44,00	41,09	38,40	35,94	31,74	28,22	25,30	22,81	20,71	18,90	17,34	15,97	14,77
Ce ⁺	57,00	56,17	53,91	50,75	47,49	43,99	41,03	38,38	35,97	31,73	28,22	25,30	22,81	20,71	18,90	17,34	15,97	14,77
Ce ²⁺	56,00	55,32	53,42	50,63	47,40	44,12	41,07	38,34	35,92	31,75	28,23	25,29	22,81	20,71	18,90	17,34	15,97	14,77
Ce ³⁺	55,00	54,42	52,69	50,33	47,37	44,23	41,19	38,39	35,90	31,72	28,25	25,29	22,81	20,71	18,90	17,84	15,97	14,77
Ce ⁴⁺	54,00	53,50	52,08	49,90	47,20	44,26	41,29	38,49	35,95	31,67	28,23	25,32	22,81	20,71	18,90	17,34	15,97	14,77
Pr	59,00	57,91	55,11	51,55	48,04	44,84	41,89	39,15	36,66	32,39	28,81	25,84	23,31	21,17	19,32	17,72	16,33	15,11
Pr ⁺	58,00	57,16	54,87	51,67	48,17	44,83	41,82	39,14	36,69	32,38	28,81	25,84	23,31	21,17	19,32	17,72	16,33	15,11
Pr ²⁺	57,00	56,31	54,38	51,55	48,28	44,96	41,86	39,10	36,64	32,40	28,82	25,83	23,31	21,17	19,32	17,72	16,33	15,11
Pr ³⁺	56,00	55,42	53,75	51,25	48,25	45,07	41,98	39,14	36,62	32,37	28,84	25,83	23,31	21,17	19,32	17,72	16,33	15,11
Pr ⁴⁺	55,00	54,50	53,05	50,83	48,09	45,09	42,09	39,25	36,66	32,32	28,83	25,85	23,31	21,17	19,32	17,72	16,33	15,11
Nd	60,00	58,90	56,07	52,47	48,92	45,68	42,69	39,91	37,28	33,04	29,40	26,38	23,80	21,62	19,74	18,11	16,69	15,45

$\frac{\sin \vartheta}{\lambda}$	0,00	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,50	0,60	0,70	0,80	0,90	1,00	1,10	1,20	1,30
Nd ⁺	59,00	58,15	55,83	52,59	49,05	45,66	42,62	39,89	37,41	33,03	29,40	26,38	23,80	21,62	19,74	18,11	16,69	15,45
Nd ²⁺	58,00	57,30	55,34	52,48	49,16	45,79	42,66	39,85	37,36	33,06	29,41	26,37	23,80	21,62	19,74	18,11	16,69	15,45
Nd ³⁺	57,00	56,41	54,72	52,18	49,13	45,90	42,77	39,90	37,34	33,02	29,43	26,37	23,80	21,62	19,74	18,11	16,69	15,45
Nd ⁴⁺	56,00	55,49	54,01	51,76	48,97	45,94	42,88	40,00	37,38	32,98	29,42	26,39	23,80	21,62	19,74	18,11	16,69	15,45
Pm	61,00	59,89	57,02	53,39	49,80	46,51	43,48	40,67	38,10	33,69	29,99	26,92	24,30	22,08	20,16	18,51	17,05	15,79
Pm ⁺	60,00	59,14	56,79	53,51	49,93	46,50	43,42	40,65	38,13	33,68	30,00	26,92	24,30	22,08	20,16	18,51	17,05	15,79
Pm ²⁺	59,00	58,29	56,31	53,40	50,04	46,63	43,45	40,61	38,08	33,71	30,00	26,91	24,30	22,08	20,16	18,51	17,05	15,79
Pm ³⁺	58,00	57,40	55,68	53,11	50,01	46,74	43,57	40,66	38,06	33,68	30,03	26,91	24,30	22,08	20,16	18,51	17,05	15,79
Pm ⁴⁺	57,00	56,48	54,98	52,69	49,86	46,78	43,68	40,76	38,10	33,63	30,01	26,94	24,30	22,08	20,16	18,51	17,05	15,79
Sm	62,00	60,88	57,98	54,32	50,68	47,35	44,28	41,43	38,82	34,35	30,59	27,46	24,80	22,54	20,58	18,90	17,42	16,13
Sm ⁺	61,00	60,13	57,75	54,43	50,81	47,34	44,21	41,41	38,86	34,34	30,59	27,46	24,80	22,54	20,58	18,90	17,42	16,13
Sm ²⁺	60,00	59,28	57,27	54,33	50,92	47,47	44,25	41,37	38,81	34,37	30,60	27,45	24,80	22,54	20,58	18,90	17,42	16,13
Sm ³⁺	59,00	58,39	56,65	54,04	50,90	47,58	44,37	41,41	38,78	34,33	30,62	27,46	24,80	22,54	20,58	18,90	17,42	16,13
Sm ⁴⁺	58,00	57,47	55,95	53,62	50,75	47,62	44,48	41,51	38,82	34,29	30,61	27,48	24,80	22,54	20,58	18,90	17,42	16,13
Eu	63,00	61,87	58,94	55,24	51,56	48,19	45,08	42,19	39,55	35,01	31,19	28,01	25,30	23,00	21,01	19,29	17,79	16,47
Eu ⁺	62,00	61,12	58,72	55,36	51,69	48,18	45,01	42,17	39,58	34,99	31,19	28,01	25,30	23,00	21,01	19,29	17,79	16,47
Eu ²⁺	61,00	60,27	58,23	55,25	51,80	48,31	45,05	42,13	39,53	35,02	31,19	28,00	25,30	23,00	21,01	19,29	17,79	16,47
Eu ³⁺	60,00	59,38	57,61	54,96	51,78	48,42	45,16	42,17	39,50	34,99	31,22	28,00	25,30	23,00	21,01	19,29	17,79	16,47
Eu ⁴⁺	59,00	58,46	56,92	54,55	51,64	48,46	45,28	42,27	39,54	34,94	31,21	28,03	25,30	23,00	21,01	19,29	17,79	16,47
Gd	64,00	62,86	59,91	56,16	52,45	49,03	45,88	42,95	40,27	35,66	31,79	28,56	25,80	23,46	21,44	19,69	18,16	16,81
Gd ⁺	63,00	62,11	59,68	56,28	52,57	49,02	45,81	42,94	40,31	35,65	31,79	28,56	25,80	23,46	21,44	19,69	18,16	16,81
Gd ²⁺	62,00	61,26	59,20	56,18	52,68	49,15	45,85	42,89	40,26	35,68	31,79	28,55	25,80	23,46	21,44	19,69	18,16	16,81
Gd ³⁺	61,00	60,37	58,58	55,89	52,67	49,26	45,96	42,93	40,23	35,65	31,82	28,55	25,80	23,46	21,44	19,69	18,16	16,81
Gd ⁴⁺	60,00	59,45	57,88	55,48	52,52	49,30	46,08	43,03	40,27	35,60	31,81	28,57	25,80	23,46	21,44	19,69	18,16	16,81

$\frac{\sin \vartheta}{\lambda}$	0,00	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,50	0,60	0,70	0,80	0,90	1,00	1,10	1,20	1,30
Tb	65,00	63,85	60,87	57,08	53,33	49,88	46,68	43,71	41,00	36,33	32,39	29,11	26,31	23,93	21,87	20,09	18,53	17,16
Tb ⁺	64,00	63,10	60,64	57,20	53,45	49,86	46,62	43,70	41,03	36,31	32,39	29,11	26,31	23,93	21,87	20,09	18,53	17,16
Tb ²⁺	63,00	62,25	60,16	57,10	53,57	49,99	46,65	43,66	40,98	36,34	32,39	29,10	26,31	23,93	21,87	20,09	18,53	17,16
Tb ³⁺	62,00	61,36	59,55	56,82	53,55	50,10	46,76	43,69	40,95	36,31	32,42	29,10	26,31	23,93	21,87	20,09	18,53	17,16
Tb ⁴⁺	61,00	60,45	58,85	56,42	53,41	50,15	46,88	43,79	40,99	36,26	32,41	29,12	26,31	23,93	21,87	20,09	18,53	17,16
Dy ⁴⁺	62,00	61,44	59,82	57,35	54,30	50,99	47,68	44,55	41,72	36,93	33,02	29,67	26,81	24,39	22,30	20,49	18,90	17,51
Ho	67,00	65,83	62,79	58,93	55,10	51,56	48,29	45,24	42,46	37,65	33,59	30,21	27,32	24,86	22,73	20,89	19,27	17,86
Ho ⁺	66,00	65,08	62,57	59,06	55,22	51,55	48,22	45,23	42,49	37,63	33,60	30,21	27,32	24,86	22,73	20,89	19,27	17,86
Ho ²⁺	65,00	64,23	62,09	58,96	55,34	51,67	48,26	45,19	42,44	37,67	33,60	30,20	27,32	24,86	22,73	20,89	19,27	17,86
Ho ³⁺	64,00	63,34	61,48	58,68	55,33	51,79	48,37	45,22	42,41	37,64	33,63	30,20	27,32	24,86	22,73	20,89	19,27	17,86
Ho ⁴⁺	63,00	62,43	60,79	58,28	55,19	51,84	48,48	45,32	42,45	37,59	33,62	30,23	27,32	24,86	22,73	20,89	19,27	17,86
Er	68,00	66,82	63,75	59,86	55,98	52,41	49,10	46,01	43,19	38,31	34,20	30,76	27,83	25,33	23,17	21,29	19,65	18,21
Er ⁺	67,00	66,07	63,53	59,98	56,11	52,39	49,03	46,00	43,22	38,30	34,21	30,77	27,83	25,33	23,17	21,29	19,65	18,21
Er ²⁺	66,00	65,23	63,05	59,88	56,22	52,52	49,06	45,95	43,18	38,33	34,21	30,76	27,83	25,33	23,17	21,29	19,65	18,21
Er ³⁺	65,00	64,34	62,45	59,61	56,22	52,64	49,17	45,99	43,14	38,30	34,23	30,76	27,83	25,33	23,17	21,29	19,65	18,21
Er ⁴⁺	64,00	63,42	61,75	59,21	56,08	52,69	49,29	46,08	43,17	38,26	34,23	30,78	27,83	25,33	23,17	21,29	19,65	18,21
Tu	69,00	67,80	64,71	60,78	56,87	53,26	49,90	46,78	43,92	38,98	34,81	31,32	28,34	25,80	23,60	21,70	20,03	18,56
Tu ⁺	68,00	67,06	64,49	60,91	56,99	53,24	49,84	46,77	43,96	38,96	34,82	31,32	28,34	25,80	23,60	21,70	20,03	18,56
Tu ²⁺	67,00	66,22	64,02	60,81	57,11	53,36	49,87	46,72	43,91	39,00	34,81	31,31	28,34	25,80	23,60	21,70	20,03	18,56
Tu ³⁺	66,00	65,33	63,41	60,54	57,10	53,48	49,97	46,76	43,88	38,97	34,84	31,31	28,34	25,80	23,60	21,70	20,03	18,56
Tu ⁴⁺	65,00	64,41	62,72	60,15	56,98	53,53	50,09	46,85	43,90	38,92	34,84	31,34	28,34	25,80	23,60	21,70	20,03	18,56
Yb	70,00	68,79	65,67	61,71	57,75	54,10	50,71	47,55	44,66	39,65	35,42	31,88	28,85	26,28	24,04	22,11	20,40	18,91
Yb ⁺	69,00	68,05	65,46	61,83	57,88	54,08	50,64	47,54	44,69	39,35	35,43	31,88	28,85	26,28	24,04	22,11	20,40	18,91
Yb ²⁺	68,00	67,21	64,98	61,74	58,00	54,21	50,67	47,49	44,64	39,66	35,42	31,87	28,85	26,28	24,04	22,11	20,40	18,91

$\frac{\sin \vartheta}{\lambda}$	0,00	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,50	0,60	0,70	0,80	0,90	1,00	1,10	1,20	1,30
Yb ³⁺	67,00	66,32	64,38	61,47	57,99	54,33	50,78	47,52	44,61	39,64	35,45	31,87	28,85	26,28	24,04	22,11	20,40	18,91
Yb ⁴⁺	66,00	65,40	63,69	61,08	57,87	54,38	50,90	47,62	44,64	39,59	35,45	31,89	28,85	26,28	24,04	22,11	20,40	18,91
Lu	71,00	69,78	66,64	62,63	58,64	54,95	51,52	48,32	45,39	40,32	36,03	32,44	29,37	26,75	24,48	22,51	20,78	19,27
Lu ⁺	70,00	69,04	66,42	62,76	58,76	54,93	51,45	48,31	45,43	40,30	36,04	32,44	29,37	26,75	24,48	22,51	20,78	19,27
Lu ²⁺	69,00	68,20	65,95	62,67	58,88	55,06	51,48	48,26	45,38	40,33	36,03	32,43	29,37	26,75	24,48	22,51	20,78	19,27
Lu ³⁺	68,00	67,31	65,35	62,41	58,88	55,18	51,59	48,29	45,34	40,31	36,06	32,43	29,37	26,75	24,48	22,51	20,78	19,27
Lu ⁴⁺	67,00	66,40	64,66	62,01	58,76	55,23	51,71	48,39	45,37	40,26	36,06	32,45	29,37	26,75	24,48	22,51	20,78	19,27
Hf	72,00	70,77	67,60	63,56	59,53	55,80	52,33	49,09	46,13	40,99	36,64	33,00	29,88	27,23	24,92	22,92	21,17	19,62
Hf ⁺	71,00	70,03	67,38	63,69	59,65	55,78	52,26	49,08	46,16	40,97	36,65	33,00	29,88	27,23	24,92	22,92	21,17	19,62
Hf ²⁺	70,00	69,19	66,91	63,60	59,77	55,90	52,29	49,03	46,12	41,00	36,64	32,99	29,88	27,23	24,92	22,92	21,17	19,62
Hf ³⁺	69,00	68,30	66,31	63,34	59,77	56,02	52,40	49,06	46,08	40,98	36,67	32,99	29,88	27,23	24,92	22,92	21,17	19,62
Hf ⁴⁺	68,00	67,39	65,63	62,95	59,65	56,08	52,51	49,16	46,10	40,93	36,67	33,01	29,88	27,23	24,92	22,92	21,17	19,62
Ta	73,00	71,76	68,56	64,49	60,42	56,65	53,14	49,86	46,86	41,66	37,25	33,56	30,40	27,70	25,36	23,33	21,55	19,98
Ta ⁺	72,00	71,02	68,35	64,62	60,54	56,63	53,07	49,86	46,90	41,64	37,26	33,56	30,40	27,70	25,36	23,33	21,55	19,98
Ta ²⁺	71,00	70,18	67,88	64,53	60,66	56,75	53,10	49,81	46,85	41,68	37,26	33,56	30,40	27,70	25,36	23,33	21,55	19,98
Ta ³⁺	70,00	69,29	67,28	64,27	60,67	56,87	53,20	49,84	46,82	41,65	37,29	33,55	30,40	27,70	25,36	23,33	21,55	19,98
Ta ⁴⁺	69,80	68,38	66,60	63,88	60,55	56,93	53,32	49,93	46,84	41,61	37,29	33,58	30,40	27,70	25,36	23,33	21,55	19,98
W	74,00	72,75	69,52	65,42	61,31	57,50	53,95	50,64	47,60	42,33	37,87	34,12	30,92	28,18	25,80	23,74	21,93	20,34
W ⁺	73,00	72,01	69,31	65,54	61,43	57,48	53,88	50,63	47,64	42,32	37,88	34,13	30,92	28,18	25,80	23,74	21,93	20,34
W ²⁺	72,00	71,17	68,85	65,46	61,55	57,60	53,91	50,58	47,59	42,35	37,87	34,12	30,92	28,18	25,80	23,74	21,93	20,34
W ³⁺	71,00	70,28	68,25	65,20	61,56	57,72	54,01	50,61	47,56	42,33	37,90	34,11	30,92	28,18	25,80	23,74	21,93	20,34
W ⁴⁺	70,00	69,37	67,57	64,82	61,44	57,78	54,13	50,70	47,58	42,28	37,90	34,14	30,92	28,18	25,80	23,74	21,93	20,34
Re	75,00	73,74	70,49	66,34	62,20	58,35	54,76	51,41	48,34	43,01	38,48	34,69	31,44	28,66	26,25	24,16	22,32	20,70
Re ⁺	74,00	73,00	70,28	66,47	62,32	58,33	54,70	51,41	48,38	42,99	38,49	34,69	31,44	28,66	26,25	24,16	22,32	20,70

$\frac{\sin \vartheta}{\lambda}$	0,00	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,50	0,60	0,70	0,80	0,90	1,00	1,10	1,20	1,30
Re ²⁺	73,00	72,16	69,81	66,39	62,44	58,45	54,72	51,36	48,33	43,02	38,49	34,68	31,44	28,66	26,25	24,16	22,32	20,70
Re ³⁺	72,00	71,27	69,22	66,13	62,45	58,57	54,83	51,38	48,29	43,00	38,52	34,68	31,44	28,66	26,25	24,16	22,32	20,70
Re ⁴⁺	71,00	70,36	68,54	65,75	62,34	58,64	54,95	51,47	48,32	42,95	38,52	34,70	31,44	28,66	26,25	24,16	22,32	20,70
Os	76,00	74,73	71,45	67,27	63,09	59,20	55,58	52,19	49,08	43,68	39,10	35,26	31,96	29,14	26,70	24,57	22,70	21,06
Os ⁺	75,00	73,99	71,24	67,40	63,21	59,18	55,51	52,19	49,12	43,67	39,11	35,26	31,96	29,14	26,70	24,57	22,70	21,06
Os ²⁺	74,00	73,15	70,78	67,32	63,33	59,30	55,53	52,13	49,07	43,70	39,11	35,25	31,96	29,14	26,70	24,57	22,70	21,06
Os ³⁺	73,00	72,27	70,18	67,07	63,34	59,43	55,64	52,16	49,04	43,68	39,13	35,25	31,96	29,14	26,70	24,57	22,70	21,06
Os ⁴⁺	72,00	71,35	69,51	66,69	63,23	59,49	55,76	52,25	49,06	43,63	39,14	35,27	31,96	29,14	26,70	24,57	22,80	21,06
Ir	77,00	75,72	72,42	68,20	63,98	60,06	56,39	52,96	49,83	44,36	39,72	35,82	32,48	29,63	27,14	24,99	23,09	21,43
Ir ⁺	76,00	74,98	72,21	68,33	64,10	60,03	56,33	52,96	49,86	44,34	39,73	35,83	32,48	29,63	27,14	24,99	23,09	21,43
Ir ²⁺	75,00	74,14	71,75	68,25	64,22	60,15	56,35	52,91	49,82	44,38	39,72	35,82	32,48	29,63	27,14	24,99	23,09	21,43
Ir ³⁺	74,00	73,26	71,15	68,00	64,24	60,28	56,45	52,94	49,78	44,36	39,75	35,81	32,48	29,63	27,14	24,99	23,09	21,43
Ir ⁴⁺	73,00	72,35	70,48	67,63	64,13	60,34	56,57	53,02	49,80	44,31	39,76	35,84	32,48	29,63	27,14	24,99	23,09	21,43
Pt	78,00	76,71	73,38	69,13	64,87	60,91	57,21	53,74	50,57	45,04	40,34	36,39	33,01	30,11	27,59	25,41	23,48	21,79
Pt ⁺	77,00	75,97	73,17	69,26	64,99	60,88	57,14	53,74	50,61	45,02	40,35	36,40	33,01	30,11	27,59	25,41	23,48	21,79
Pt ²⁺	76,00	75,13	72,71	69,18	65,12	61,01	57,16	53,69	50,56	45,05	40,35	36,39	33,01	30,11	27,59	25,41	23,48	21,79
Pt ³⁺	75,00	74,25	72,12	68,94	65,13	61,13	57,26	53,71	50,52	45,04	40,37	36,38	33,01	30,11	27,59	25,41	23,48	21,79
Pt ⁴⁺	74,00	73,34	71,45	68,56	65,03	61,20	57,39	53,80	50,54	44,99	40,38	36,41	33,01	30,11	27,59	25,41	23,48	21,79
Au	79,00	77,70	74,35	70,06	65,77	61,76	58,02	54,52	51,31	45,72	40,96	36,96	33,53	30,60	28,04	25,83	23,87	22,16
Au ⁺	78,00	76,97	74,14	70,19	65,88	61,74	57,96	54,52	51,35	45,70	40,97	36,97	33,53	30,60	28,04	25,83	23,87	22,16
Au ²⁺	77,00	76,13	73,68	70,12	66,01	61,86	57,98	54,47	51,31	45,73	40,97	36,96	33,53	30,60	28,04	25,83	23,87	22,16
Au ³⁺	76,00	75,24	73,09	69,87	66,03	61,99	58,08	54,49	51,27	45,72	41,00	36,95	33,53	30,60	28,04	25,83	23,87	22,16
Au ⁴⁺	75,00	74,33	72,42	69,50	65,92	62,05	58,20	54,54	51,28	45,67	41,00	36,98	33,53	30,60	28,04	25,83	23,87	22,16
Hg	80,00	78,69	75,31	70,99	66,66	62,62	58,84	55,30	52,06	46,40	41,59	37,54	34,06	31,08	28,50	26,25	24,27	22,52

$\frac{\sin \vartheta}{\lambda}$	0,00	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,50	0,60	0,70	0,80	0,90	1,00	1,10	1,20	1,30
Hg ⁺	79,00	77,96	75,10	71,12	66,78	62,59	58,78	55,30	52,10	46,38	41,60	37,54	34,06	31,08	28,50	26,25	24,27	22,52
Hg ²⁺	78,00	77,12	74,65	71,05	66,90	62,71	58,79	55,25	52,05	46,41	41,59	37,53	34,06	31,08	28,50	26,25	24,27	22,52
Hg ³⁺	77,00	76,23	74,06	70,81	66,92	62,84	58,90	55,27	52,01	46,40	41,62	37,53	34,06	31,08	28,50	26,25	24,27	22,52
Hg ⁴⁺	76,00	75,32	73,38	70,43	66,82	62,91	59,02	55,36	52,03	46,35	41,63	37,55	34,06	31,08	28,50	26,25	24,27	22,52
Tl	81,0	78,3	75,5	71,1	66,7	62,7	58,7	55,0	51,2	45,0	41,1	37,4	34,1	31,1	28,3	26,0	24,1	—
Pb	82,0	79,3	76,5	72,0	67,5	63,5	59,5	55,7	51,9	45,7	41,6	37,9	34,6	31,5	28,8	26,4	24,5	—
Bi	83,0	80,3	77,5	73,0	68,4	64,4	60,4	56,6	52,7	46,4	42,2	38,5	35,1	32,0	29,2	26,8	24,8	—
Po	84,0	81,2	78,4	73,9	69,4	65,4	61,3	57,4	53,5	47,1	42,8	39,1	35,6	32,6	29,7	27,2	25,2	—
At	85,0	82,2	79,4	74,9	70,3	66,2	62,1	58,2	54,2	47,7	43,4	39,6	36,2	33,1	30,1	27,6	25,6	—
Rn	86,0	83,2	80,3	75,8	71,3	67,2	63,0	59,1	55,1	48,4	44,0	40,2	36,8	33,5	30,5	28,0	26,0	—
Fr	87,0	84,2	81,3	76,8	72,2	68,0	63,8	59,8	55,8	49,1	44,5	40,7	37,3	34,0	31,0	28,4	26,4	—
Ra	88,0	85,1	82,2	77,7	73,2	68,9	64,6	60,6	56,5	49,8	45,1	41,3	37,8	34,6	31,5	28,8	26,7	—
Ac	89,0	86,1	83,2	78,7	74,1	69,8	65,5	61,4	57,3	50,4	45,8	41,8	38,3	35,1	32,0	29,2	27,1	—
Th	90,0	87,1	84,1	79,6	75,1	70,7	66,3	62,2	58,1	51,1	46,5	42,4	38,8	35,5	32,4	29,6	27,5	—
Pa	91,0	88,1	85,1	80,6	76,0	71,6	67,1	63,0	58,8	51,7	47,1	43,0	39,3	36,0	32,8	30,1	27,9	—
U	92,0	89,0	86,0	81,5	76,9	72,4	67,9	63,8	59,6	52,4	47,7	43,5	39,8	36,5	33,3	30,6	28,3	—
Np	93	90	87	83	78	74	69	65	60	53	48	44	40	37	34	31	29	—
Pu	94	91	88	84	79	74	69	65	61	54	49	44	41	38	34	31	29	—
Am	95	92	89	84	79	75	70	66	62	55	50	45	42	38	35	32	30	—
Cm	96	93	90	85	80	76	71	67	62	55	50	46	42	39	35	32	30	—
Bk	97	94	91	86	81	77	72	68	63	56	51	46	43	39	36	33	30	—
Cf	98	95	92	87	82	78	73	69	64	57	52	47	43	40	36	33	31	—
Es	99	96	93	88	83	79	74	70	65	57	52	48	44	40	37	34	31	—
Fm	100	97	94	89	84	80	75	71	66	58	53	48	44	41	37	34	31	—

Табл. 9. Температурный множитель интенсивности

Температурный множитель интенсивности имеет вид

$$e^{-2M} = e^{-2B} \left(\frac{\sin \theta}{\lambda} \right)^2,$$

где $B = 8\pi^2 \bar{u}^2$, \bar{u}^2 — среднеквадратичное смещение атомов из идеальных положений в решетке за счет теплового движения. Величина B подсчитывается из соотношения

$$B = \frac{6h^2}{m_a k \Theta} \left[\frac{\Phi(x)}{x} + \frac{1}{4} \right] = B' \frac{1}{m_a \Theta},$$

где m_a — атомная масса исследуемого вещества, h — постоянная Планка, k — постоянная Больцмана, Θ — характеристическая температура кристалла, которая может быть представлена как $\Theta = h\nu_{max}/k$, $x = \Theta/T$, $\Phi(x)$ — функция Дебая, равная

$$\Phi(x) = \frac{1}{x} \int_0^x \frac{\xi d\xi}{(e^\xi - 1)}.$$

Табл. 9а. Функция Дебая

Функция Дебая используется при расчетах динамических смещений атомов в узлах кристаллической решетки и расчете температурного множителя интенсивности. В таблице даны значения функции Дебая $\Phi(x)$ для x от 0 до 20.

$\frac{\Theta}{T}$	$\Phi\left(\frac{\Theta}{T}\right)$	$\frac{\Theta}{T}$	$\Phi\left(\frac{\Theta}{T}\right)$	$\frac{\Theta}{T}$	$\Phi\left(\frac{\Theta}{T}\right)$	$\frac{\Theta}{T}$	$\Phi\left(\frac{\Theta}{T}\right)$
0	1,000	1,2	0,740	3	0,483	9	0,183
0,2	0,951	1,4	0,704	4	0,388	10	0,164
0,4	0,904	1,6	0,669	5	0,321	12	0,137
0,6	0,860	1,8	0,637	6	0,271	14	0,114
0,8	0,818	2,0	0,607	7	0,234	16	0,103
1,0	0,778	2,5	0,540	8	0,205	20	0,0022

Табл. 9б. Значения температурного множителя при различных значениях B и ϑ

В таблице приведены значения $e^{-2M} = e^{-2B} \left(\frac{\sin \vartheta}{\lambda} \right)^2$ для $B \cdot 10^{16}$ от 0,0 до 10,0 и $(\sin \vartheta/\lambda) \cdot 10^{-8}$ от 0,0 до 1,2.

$B \cdot 10^{16}$	$\left(\frac{\sin \vartheta}{\lambda}\right) \cdot 10^{-8}$												
	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0	1,1	1,2
0,0	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
0,1	.000	0,999	0,996	0,991	0,984	0,975	0,964	0,952	0,938	0,923	0,905	0,886	0,866
0,2	.000	.998	.992	.982	.968	.951	.931	.906	.880	.850	.819	.785	.750
0,3	.000	.997	.988	.973	.953	.928	.898	.863	.826	.784	.741	.695	.649
0,4	.000	.996	.984	.964	.938	.905	.866	.821	.774	.724	.670	.616	.562
0,5	.000	.995	.980	.955	.924	.882	.834	.782	.726	.667	.607	.548	.487
0,6	.000	.994	.976	.947	.909	.860	.804	.745	.681	.615	.549	.484	.421
0,7	.000	.993	.972	.939	.894	.839	.776	.710	.639	.567	.497	.429	.365
0,8	.000	.992	.968	.931	.880	.818	.750	.676	.599	.523	.449	.380	.314
0,9	.000	.991	.964	.923	.866	.798	.724	.644	.561	.482	.406	.336	.273
1,0	.000	.990	.960	.915	.852	.779	.698	.613	.527	.445	.368	.298	.236
1,1	.000	.989	.957	.907	.839	.759	.672	.584	.494	.410	.333	.264	.205
1,2	.000	.988	.953	.898	.826	.740	.649	.556	.464	.378	.301	.234	.178
1,3	.000	.987	.950	.890	.813	.722	.626	.529	.435	.349	.273	.207	.154
1,4	.000	.986	.946	.882	.800	.704	.604	.503	.408	.322	.247	.184	.133
1,5	.000	.985	.942	.874	.787	.687	.582	.479	.383	.297	.223	.167	.116
1,6	.000	.984	.938	.866	.774	.670	.562	.458	.359	.274	.202	.144	.100
1,7	.000	.983	.935	.858	.762	.654	.543	.436	.337	.252	.183	.128	.086
1,8	.000	.982	.931	.850	.750	.638	.523	.414	.316	.233	.165	.113	.075
1,9	.000	.981	.927	.842	.739	.622	.505	.394	.296	.215	.149	.100	.065
2,0	.000	.980	.924	.834	.727	.607	.487	.375	.278	.198	.135	.089	.056
2,2	.000	.978	.916	.820	.719	.577	.452	.340	.245	.169	.110		
2,4	.000	.976	.908	.806	.698	.549	.421	.327	.215	.144	.090		
2,6	.000	.974	.901	.791	.677	.522	.391	.283	.190	.122	.074		
2,8	.000	.972	.894	.777	.657	.497	.361	.254	.167	.108	.060		
3,0	.000	.970	.887	.763	.638	.472	.348	.230	.147	.089	.049		
3,5	.000	.966	.869	.730	.592	.419	.284	.180	.106	.059	.036		
4,0	.000	.961	.852	.698	.549	.368	.237	.141	.078	.039	.018		
4,5	.000	.956	.835	.667	.487	.325	.198	.111	.056				
5,0	.000	.951	.819	.638	.449	.287	.165	.106	.041				
5,5	.000	.946	.793	.610	.415	.253	.138	.068	.027				

$B \cdot 10^{16}$	$\left(\frac{\sin \vartheta}{\lambda}\right) \cdot 10^{-8}$												
	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0	1,1	1,2
6,0	.000	.942	.786	.583	.383	.223	.115	.054	.011				
7,0	.000	.932	.763	.533	.326	.174	.080						
8,0	.000	.923	.726	.487	.278	.135	.056						
9,0	.000	.914	.698	.445	.237	.105	.039						
10,0	.000	.905	.670	.407	.202	.082	.027						

Табл. 9в. Значения постоянного коэффициента B' в выражении для температурного множителя

В таблице приведены значения $B' = \frac{6h^2}{k} \left[\frac{\Phi(x)}{x} + \frac{1}{4} \right]$, где $x = \Theta/T$, для x от 0 до 20.

x	$B' \cdot 10^{36}$	x	$B' \cdot 10^{36}$	x	$B' \cdot 10^{36}$	x	$B' \cdot 10^{36}$
0	∞	0,7	2,72	1,8	1,13	7,0	0,533
0,1	18,79	0,8	2,39	2,0	1,04	8,0	0,518
0,2	8,98	0,9	2,13	2,5	0,876	9,0	0,508
0,3	6,29	1,0	1,93	3,0	0,772	10,0	0,501
0,4	4,72	1,2	1,62	4,0	0,652	12,0	0,491
0,5	3,78	1,4	1,41	5,0	0,590	14,0	0,485
0,6	3,16	1,6	1,26	6,0	0,555	16,0	0,482
						20,0	0,477

Табл. 10. Множители повторяемости для различных кристаллических систем

Множитель повторяемости p какого-либо отражения для метода Дебая численно равен количеству семейств плоскостей, принадлежащих данной форме. Величина его зависит от лауэвского класса симметрии и сочетания индексов семейства отражающих плоскостей. В таблице приведены значения p для различных форм и систем кристаллов.

Кристаллическая система	Символ семейства плоскостей						
	(hkl)	(hhl)	$(0kl)$	$(0kk)$	(hhh)	$(00l)$	—
<i>Кубическая</i>							
$m\bar{3}m, 432, \bar{4}3m$	48	24	24	12	8	6	—
$m\bar{3}, 23$	24	24	12	12	8	6	—
<i>Гексагональная</i>	$(hkil)$	$(hh2\bar{h}l)$	$(0k\bar{k}l)$	$(hki0)$	$(hh2\bar{h}0)$	$(0k\bar{k}0)$	$(000l)$
$6/mmm, 622, 6mm, \bar{6}m2$	24	12	12	12	6	6	2
$6/m, 6, \bar{6}$	12	12	12	6	6	6	2
<i>Ромбоэдрическая</i>	$(hkil)$	$(hh2\bar{h}l)$	$(0\bar{k}kl)$	$(hki0)$	$(hh2\bar{h}0)$	$(0k\bar{k}0)$	$(000l)$
$\bar{3}m, 32, 3m$	12	12	6	12	6	6	2
$\bar{3}, 3$	6	6	6	6	6	6	2
<i>Тетрагональная</i>	(hkl)	(hhl)	$(0kl)$	$(hk0)$	$(hh0)$	$(0k0)$	$(00l)$
$4/mmm, 422, 4mm, \bar{4}2m$	16	8	8	8	4	4	2
$4/m, 4, \bar{4}$	8	8	8	4	4	4	2
<i>Ромбическая</i>	(hkl)	$(0kl)$	$(h0l)$	$(hk0)$	$(h00)$	$(0k0)$	$(00l)$
$mmm, 222, mm2$	8	4	4	4	2	2	2
<i>Моноклинная</i>	(hkl)	$(0kl)$	$(hk0)$	$(h0l)$	$(h00)$	$(0k0)$	$(00l)$
$2/m, 2, m$	4	4	4	2	2	2	2
<i>Триклинная</i>	(hkl)	—	—	—	—	—	—
$\bar{1}, 1$	2	—	—	—	—	—	—

Литература

1. Миркин. Л.И. Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов. М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1961, 864 с.
2. Васильев Д.М. Физическая кристаллография. М.: Наука, 1972, 248 с.
3. Блохин М.А., Швейцер И.Г. Рентгеноспектральный справочник. М.:Наука, 1982, 376 с.
4. Crystallography Open Database – URL: <http://www.crystallography.net>. Дата обращения: 1.10.2010.
5. Mineralienatlas – URL: <http://www.mineralienatlas.de>. Дата обращения: 1.10.2010.
6. The RRUFF Project – URL: <http://rruff.info>. Дата обращения: 1.10.2010.
7. The mineral and locality database – URL: <http://www.mindat.org>. Дата обращения: 1.10.2010.
8. The Mineralogy Database – URL: <http://www.webmineral.com>. Дата обращения: 1.10.2010