

Obsah

Předmluva	9
I. Význam difrakčních metod	11
1.1. Možnosti aplikace difrakční analýzy v přírodních vědách a v technické praxi	11
1.2. Objev difrakce rentgenového záření	13
1.3. Československý příspěvek v oblasti využití difrakce záření na krystalech	14
II. Geometrická krystalografie	16
2.1. Amorfní, mezomorfni a krystalický stav látky	16
2.2. Makroskopická souměrnost krystalů	18
2.3. Bodové grupy a krystalové soustavy	21
2.4. Stereografická projekce bodových grup	25
2.5. Prostorové Bravaisovy mřížky	27
2.6. Značení uzlových bodů, přímek a rovin	31
2.7. Pojem reciproké mřížky	33
2.8. Souměrnost krystalových struktur	35
2.8.1. Mikroskopické prvky souměrnosti	35
2.8.2. Prostorové grupy	36
2.8.3. Příklady jednoduchých struktur	37
III. Základní pojmy z chemie a fyziky krystalů	40
3.1. Klasifikace struktur podle druhu vazby. Atomové a iontové poloměry	40
3.2. Tuhé roztoky	41
3.3. Izomorfie a polymorfie	43
IV. Základy teorie difrakce	45
4.1. Amplituda rozptylu	46
4.2. Funkce elektronové hustoty	48
4.3. Atomová amplituda rozptylu	50
4.4. Vliv tepelného pohybu atomů na funkci elektronové hustoty	53
4.5. Difrakce na krystalové mřížce	54
4.6. Amplituda rozptylu konečného krystalu. Nízkoúhlový rozptyl	58
4.7. Ewaldova geometrická interpretace Braggova zákona	59
4.8. Strukturální amplituda	61
4.9. Vliv rozmístění atomů na difrakční obraz	63
4.10. Teplotní difúzní rozptyl	65
4.11. Princip metod strukturální analýzy	65
4.12. Integrální intenzita reflexe podle kinematické a dynamické teorie rozptylu	67
4.13. Rozptyl na nekrystalických látkách	70

V. Rentgenová difrakční analýza	73
5.1. Rentgenové záření	73
5.1.1. Vznik rentgenového záření, vlastnosti spojitého a charakteristického spektra	73
5.1.2. Zdroje rentgenového záření	80
5.1.3. Interakce rentgenového záření s hmotou	83
5.1.4. Možnosti využití absorpce rentgenového záření	89
5.1.5. Monochromatizace rentgenového záření	104
5.1.6. Princip primární a sekundární rentgenové analýzy	106
5.1.7. Fyziologické účinky rentgenového záření	107
5.2. Metody studia monokrystalů	110
5.2.1. Klasifikace experimentálních metod difrakčního výzkumu struktury	110
5.2.2. Plošná detekce difraktovaného záření na stacionárním filmu	110
5.2.3. Plošná detekce difraktovaného záření na pohyblivém filmu	116
5.2.4. Difraktometry pro studium monokrystalů	118
5.2.5. Metoda divergentního svazku	120
5.3. Metody studia práškových a polykrystalických látek	122
5.3.1. Geometrická konstrukce difrakčního obrazu při Debyeově–Scherrerově metodě	122
5.3.2. Debyeova–Scherrerova metoda v uspořádání s tyčinkovým vzorkem a válcovým filmem	123
5.3.3. Uspořádání Debyeovy–Scherrerovy metody na průchod a na zpětný odraz	126
5.3.4. Fokusační uspořádání Debyeovy–Scherrerovy metody	127
5.3.5. Fokusační komory s monochromátorem	130
5.3.6. Semifokusační uspořádání Debyeovy–Scherrerovy metody	131
5.3.7. Difraktometry	132
5.3.8. Gandolfiho komora	137
5.3.9. Maloúhlové komory a difraktometry	138
5.3.10. Rentgenografický difrakční výzkum za vysokých a nízkých teplot, při velkých tlacích a v podmínkách „horkých“ laboratoří	140
5.4. Výpočet a experimentální určení hlavních charakteristik difrakčních linií rentgenogramů polykrystalických látek	143
5.4.1. Faktory ovlivňující intenzitu difrakčních linií	143
5.4.2. Měření integrální intenzity difrakčních linií	146
5.4.3. Aproximace skutečných profilů difrakčních linií analytickými funkcemi	149
5.4.4. Měření polohy difrakčních linií	152
5.4.5. Výpočet Debyeova spektra, indexování difrakčních linií	158
5.4.6. Pojem hloubky vnikání rentgenového záření	162
5.5. Příklady aplikací difrakčních metod	165
5.5.1. Přesné měření mřížkových parametrů polykrystalických látek	165
5.5.2. Určení hustoty, typu tuhých roztoků, identifikace hyperstruktury	169
5.5.3. Určení fázových rozhraní na fázových diagramech	171
5.5.4. Měření tloušťky tenkých vrstev	172
5.5.5. Rentgenová dilatometrie	174
5.5.6. Kvalitativní difrakční fázová analýza	176
5.5.7. Kvantitativní difrakční fázová analýza	178
5.5.8. Rentgenová tenzometrie	185
5.5.9. Měření velikosti mikroskopických napětí a rozměrů oblastí koherentního rozptylu menších než 10^{-3} mm pomocí aproximační metody	194
5.5.10. Měření velikosti krystalků větších než 10^{-3} mm	198
5.5.11. Stanovení rozměrů krystalků s využitím extinkčního efektu	202
5.5.12. Princip rentgenografického studia textur	203
5.5.13. Příklady aplikací monokrystalových metod	209

VI. Elektronová a neutronová difrakční analýza	217
6.1. Elektronová difraktografie	217
6.1.1. Základní rysy elektronové difrakční analýzy	217
6.1.2. Geometrická konstrukce elektronogramů	219
6.2. Neutronová difraktografie	221
6.2.1. Zdroje neutronů, jejich monochromatizace a detekce, metodika difrakčního experimentu	221
6.2.2. Absorpční a rozptylové vlastnosti tepelných neutronů	224
6.2.3. Příklady aplikací neutronové difrakční analýzy	226
Seznam literatury	229
Rejstřík	232