

PŘEDMLUVA	3
1.0 ÚVOD	5
2.0 ELEMENTÁRNÍ KRYSTALOGRAFIE	6
2.1 Mřížka	6
2.1.1 Prostorová mřížka	6
2.1.2 Základní buňka	8
2.1.3 Mřížkové přímky a mřížkové roviny	10
2.1.4 Transformace buňky	11
2.2 Symetrie krystalů	12
2.2.1 Operace symetrie	12
2.2.2 Bodové grupy symetrie	15
2.2.3 Bodové grupy a morfologie krystalů	18
2.3 Určení středu symetrie	18
2.3.1 Rozpouštění a leptání krystalů	18
2.3.2 Piezoelektrický a pyroelektrický jev	19
2.4 Symetrie mřížky	19
2.4.1 Typy symetrických plošných mřížek	19
2.4.2 Interakce plošné mřížky s rotační osou	21
2.4.3 Typy symetrických prostorových mřížek	22
2.4.4 Laueho grupy symetrie - Friedelův zákon	25
2.4.5 Osový systém - krystalografické soustavy	25
2.4.5.1 Poznámky k základním buňkám a krystalografickým soustavám	27
2.4.6 Mřížkové parametry a mezirovinné vzdálenosti	32
2.5 Prostorové grupy symetrie	34
2.5.1 Prvky symetrie prostorových grup	34
2.5.1.1 Šroubové osy	34
2.5.1.2 Skluzné roviny	36
2.5.2 Grafická reprezentace prvků symetrie a symbolika prostorových grup	36
2.5.3 Odvození prostorových grup	38
2.5.4 Grafická reprezentace prostorových grup	39
2.5.5 Prostorové grupy a krystalová struktura	43
3.0 DIFRAKCE RTG. ZÁŘENÍ KRYSTALU	46
3.1 Rentgenovo záření	46
3.1.1 Vznik Roentgenova záření	46
3.1.2 Monochromatisace rtg. záření	48
3.1.3 Zdroje rtg. záření	50
3.1.4 Bezpečnost práce s rtg. zářením	52

3.2	Geometrie difrakce rtg. paprsků krystaly	53
3.2.1	Laueho rovnice	53
3.2.2	Braggova rovnice	55
3.3	Reciproká mřížka	57
3.4	Reciproká mřížka a Braggův zákon	60
3.5	Difrakce rtg. záření krystalovou strukturou	62
3.5.1	Strukturní faktor	62
3.5.2	Systematické absence	66
3.5.3	Určení prostorové grupy ze systematických absencí	72
3.6	Intensita rtg. difrakcí	74
3.6.1	Fyzikální podstata difrakce	74
3.6.2	Faktory ovlivňující intenzitu difrakcí	77
3.6.2.1	Primární a sekundární atenuace	77
3.6.2.2	Absorpce rtg. záření v krystalech	79
3.6.2.3	Teplotní kmity	79
3.6.2.4	Multiplicita	80
4.0	RENTGENOVÉ DIFRAKČNÍ METODY	81
4.1	Úvod	81
4.1.1	Fotografické účinky rtg. záření	81
4.2	Práškové metody	83
4.2.1	Metoda Debye-Scherrerova	83
4.2.1.1	Princip metody	83
4.2.1.2	Příprava práškového vzorku	64
4.2.1.3	Práce s komorou a její kalibrace	86
4.2.1.4	Jevy ovlivňující polohu difrakčních linií	90
4.2.1.5	Proměrování Debye-Scherrerových snímků	92
4.2.1.6	Intensita difrakcí	93
4.2.2	Parafokusační metoda Seemann-Bohlinova	93
4.2.3	Metoda Guinier-de Wolffova	94
4.2.4	Vysoko a nízkoteplotní komory	96
4.2.5	Vysokotlaké komory	97
4.2.6	Metoda zpětného paprsku	98
4.2.7	Práškový difraktograf	99
4.2.8	Interpretace práškových diagramů	102
4.2.8.1	Indexování snímků kubické mřížky	102
4.2.8.2	Indexování snímků tetragonálních a hexagonálních mřížek	193
4.2.8.3	Grafické metody indexování	105
4.2.8.4	Indexování na bázi triklinické buňky	107
4.2.8.4.1	Ito-ova metoda indexace	107
4.2.8.4.2	Redukce triklinické buňky a odvození typu Bravaisovy mřížky	110
4.2.8.5	Výpočet mřížkových parametrů a jejich zpřesnění ...	113

4.2.8.5.1	Výpočet mřížkového parametru kubické mřížky	113
4.2.8.5.2	Výpočet mřížkových parametrů dvouparametrových mřížek	115
4.2.8.5.3	Výpočet parametrů víceparametrových mřížek a jejich zpřesnění obecnou metodou nejmenších čtverců	116
4.2.9	Praktické aspekty práškových metod	117
4.2.9.1	Identifikace krystalických látek	117
4.2.9.2	Rtg. kvantitativní fázová analýsa	119
4.2.9.3	Určení rozměrů částic z rozšíření difrakčních linií	121
4.2.9.4	Měření elastického napětí v kovech	121
4.2.9.5	Stanovení přednostní orientace	122
4.2.9.6	Studium nekrystalických materiálů	123
4.2.10	Shrnutí práškových metod	124
4.3	Monokrystalové metody	124
4.3.1	Příprava monokrystalů	124
4.3.2	Výběr vhodného krystalu	126
4.3.3	Fixace krystalu	127
4.3.4	Laueho metoda	129
4.3.5	Precesní metoda	130
4.3.5.1	Zhotovení precesních snímků	132
4.3.5.2	Interpretace precesních snímků	134
4.3.6	Metoda otáčeného a oscilujícího krystalu	136
4.3.6.1	Oscilační snímky a difrakční symetrie krystalu	138
4.3.6.2	Oscilační snímky a justace krystalu	140
4.3.7	Weissenbergova metoda	144
4.3.7.1	Weissenbergovy snímky	145
4.3.7.2	Indexování Weissenbergových fotografií	150
4.3.7.3	Výpočet mřížkových parametrů	154
4.3.7.4	Intensita difrakcí Weissenbergova snímku	155
4.3.7.5	Praktické použití Weissenbergova goniometru	156
4.3.7.6	Integrační Weissenbergův goniometr	157
Příloha I.	Mezirovinná vzdálenost d_{hkl} jako funkce mřížkových parametrů a indexů hkl	159
Příloha II.	230 prostorových grup	160
Příloha III.	Převodní vztahy mezi přímými a reciprokými parametry	172
Příloha IV.	Přehled systematického vyhasínání	174
Příloha V.	Klíč pro určování prostorových grup ze systematických absencí	175
Příloha VI.	Anisotropní teplotní faktory	188

Příloha VII. Součet čtverců Millerových indexů jako funkce indexů	189
Příloha VIII. Nomogramy pro indexování krychlové mřížky	190
Příloha IX. Určení nejpravděpodobnější hodnoty měřené veličiny a odhad její chyby	192
Příloha X. Vyrovnání měření metodou nejmenších čtverců	199
Příloha XI. Hodnoty Nelsonovy-Rileyovy funkce	201
Seznam obrázků	205
Doporučená literatura	209
Obsah	211