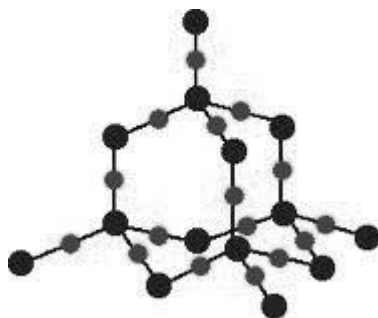


Slovenská kryštalografická terminológia

Definície termínov s vysvetleniami, komentármi
a anglickými ekvivalentmi



Ivan Červeň, Edmund Dobročka, Pavel Fejdi, Iveta Vančová

VEDA, vydavateľstvo Slovenskej akadémie vied

Jazykovedný ústav Ľudovíta Štúra Slovenskej akadémie vied

Bratislava 2014

Recenzenti: Ing. Marian Čerňanský, CSc.,
RNDr. Dušan Korytár, CSc.

Venované pamiatke Paľa Fejdiho

© doc. RNDr. Ivan Červeň, CSc., doc. RNDr. Edmund Dobročka, CSc.,

doc. RNDr. Pavel Fejdi, CSc.,

 Mgr. Iveta Vančová, 2014

© Jazykovedný ústav Ľudovíta Štúra SAV, 2014

© VEDA, vydavateľstvo SAV, 2014

ISBN 978-80-224-1361-9

Obsah

	Na úvod	4
A	Geometria kryštálov a štruktúr kryštalických látok	
A 1	Kryštál, kryštálová mriežka, kryštálová štruktúra	6
A 2	Morfologická kryštalografia	19
A 3	Symetria kryštálov a kryštálových štruktúr	25
A 4	Bodová symetria a fyzikálne vlastnosti kryštálov	33
A 5	Zrasty kryštálov	40
A 6	Poruchy kryštálovej štruktúry	43
B	Rozptyl a difrakcia žiarenia	
B 1	Rozptyl žiarenia a amplitúdy rozptylu	52
B 2	Difrakcia žiarenia	59
B 3	Kinematická a dynamická teória difrakcie	65
C	Metódy štruktúrnej analýzy	
C 1	Difrakčné metódy	83
C 2	Určovanie a spresňovanie štruktúry monokryštálov	92
C 3	Fázová analýza polykryštalických látok	101
C 4	Textúra polykryštalických látok	106
C 5	Difrakčná tenzometria a difrakčná topografia	109
D	Experimentálne zariadenia difrakčných metód	
D 1	Práškové komôrky	114
D 2	Difraktometre a goniometre	118
D 3	Monochromátory	124
D 4	Zdroje a charakteristiky žiarenia	128
D 5	Detektory röntgenového žiarenia	134
	Tabuľky	138
	Dodatky	
	Komentár k termínu intenzita žiarenia	141
	Jazykový komentár	142
	Komentáre autorov Československého kryštalografic- kého názvoslovía	145
	Použité pramene	152
	Abecedný index a slovník slovensko-anglický	154
	Abecedný index a slovník anglicko-slovenský	181

Na úvod

Táto kniha vychádza predovšetkým z publikácie *Československé krystalografické názvosloví* zostavovanej v rokoch 1985 – 1989 terminologickou komisiou Československej kryštalografickej spoločnosti. Autormi publikácie boli S. Ďurovič (predseda komisie), M. Čerňanský, I. Červeň, P. Fejdi, J. Fiala, B. Gruber, J. Hašek, V. Holý, J. Ječný, D. Korytár, I. Kraus, J. Kuběna, J. Maďar, F. Pavelčík, L. Smrčok, V. Trnovcová, V. Valvoda a L. Žák a obsahovala súvislý text písaný ešte písacím strojom, v ktorom boli termíny zvýraznené podčiarknutím. V roku 2011 bola publikácia prepísaná do elektronickej podoby a je prístupná na adrese www.x-ray.cz. Neobsahuje explicitné definície termínov a je vhodná iba na overovanie správnosti termínov. Preto vznikla myšlienka spísať terminológiu v štandardnom tvare aj s definíciami.

Keďže samotné definície musia byť presné a stručné, často neposkytujú dostatočný výklad potrebný na osvetlenie súvislostí a pochopenie obsahu termínu. Preto sa autori tejto knihy rozhodli doplniť definície stručnými vysvetľujúcimi komentármi. Na pozadí tohto rozhodnutia bol aj úmysel sprístupniť kryštalografickú terminológiu študentom, ktorí sa s ňou stretávajú prvýkrát. Aby sa dosiahlo aj vizuálne oddelenie definície od komentára, komentár nasleduje v samostatnom odseku.

Termíny nie sú zoradené v abecednom, ale vo vecnom poradí, aby vynikla ich vzájomná súvislosť. Preto je kniha rozdelená na viac častí, na navzájom súvisiace celky. Toto rozdelenie sa uvádza v obsahu, preto ho tu netreba osobitne komentovať. Abecedné registre – slovenský aj anglický – doplnené ekvivalentmi v druhom jazyku, sú súčasťou knihy, takže môžu slúžiť ako slovníky kryštalografických termínov. Používanie niektorých anglických skratiek (napr. RHEED, LEED) je natoľko rozšírené, že autori nepovažovali za potrebné navrhovať slovenský ekvivalent.

Text obsahuje viaceré termíny používané v širších súvislostiach (napr. difrakcia, symetria, grupa, izomorfizmus), ale v definíciách sa zohľadňuje len ich kryštalografický význam. Termíny, ktoré autori neodporúčajú používať, ale aj niektoré poznámky, sú napísané *kurzívou*.

Kostru knihy tvorí súbor termínov z publikácie *Československé krystalografické názvosloví*, je však rozšírený najmä o termíny týkajúce sa symetrie kryštálov. Navyše bolo potrebné zohľadniť výrazný rozvoj experimentálnej techniky používanej na difrakčnú analýzu kryštalických látok za posledné štvrtstoročie.

Autori sa pri tvorbe definícií opierali aj o ďalšie publikácie týkajúce sa kryštalografie a difrakčných metód štruktúrnej analýzy, najmä napísané v slovenčine. V tejto súvislosti treba osobitne spomenúť *Chemický náučný slovník*, ktorého precízne formulácie fakticky nebolo možné meniť, ale iba prevziať.

Túto publikáciu zostavili a definície s poznámkami sformulovali Ivan Červeň (do r. 2008 Katedra fyziky FEI STU, Bratislava), Edmund Dobročka (Elektrotechnický ústav SAV, Bratislava) a Pavel Fejdi (Katedra mineralógie a petrológie PriFUK, Bratislava), ktorý sa vydania publikácie, žiaľ, nedožil. Z jazykového hľadiska sa na tvorbe publikácie podieľala Iveta Vančová (Jazykovedný ústav Ľ. Štúra SAV).

Autori ďakujú recenzentom, ktorí významnou mierou prispeli ku kvalite textu.

Bratislava 2014

A Geometria kryštálov a štruktúr kryštalických látok

A 1 Kryštál, kryštálová mriežka, kryštálová štruktúra

štruktúra látky

usporiadanie stavebných častíc, stavebných jednotiek alebo kryštalických zŕn v látke; podľa spôsobu usporiadania stavebných častíc sa rozlišujú najmä kryštalické látky a amorfné látky

stavebné častice

atómy, ióny alebo molekuly, z ktorých sú vytvorené kryštalické i amorfné látky

stavebné jednotky

skupiny nevel'kého počtu stavebných častíc spojených do väčších celkov; môžu to byť trojrozmerné **bloky**, dvojrozmerné **vrstvy** alebo jednorozmerné **stĺpce**

kryštalická látka

látka, ktorá má trojrozmernú translačne periodickú vnútornú stavbu; charakterizujú ju dva súbory parametrov: chemické zloženie a kryštálová štruktúra

Podľa všeobecnejšej definície vnútornú stavbu kryštalických látok určuje malý počet druhov stavebných jednotiek a ich konfigurácií. Touto definíciou sa rozširuje množina látok, ktoré možno považovať za kryštalické (napr. ternárne a kvaternárne polovodiče...). Rozlišujú sa kryštálové jedince – **monokryštály** a **polykryštalické látky** – skladajúce sa z veľkého počtu drobných kryštálov. Od látok s trojrozmernou periodicitou sa odlišujú polytypné štruktúry, neusporiadané tuhé roztoky, kvázikryštály, parakryštály a kvapalné kryštály

amorfná látka

v užšom význame tuhá látka, ktorá nemá kryštálovú štruktúru, t. j. nevyznačuje sa trojrozmernou periodickým usporiadaním stavebných častíc

Z hľadiska usporiadania stavebných častíc sú amorfné aj tekutiny.

stupeň kryštalinity

číslo vyjadrujúce zlomok objemu pripadajúci na kryštalickú fázu vo vzorke, ktorá sa skladá z kryštalickej a amorfnej fázy; udáva sa aj v percentách

kryštál

konečné trojrozmerné teleso s teoreticky nekonečne veľkou kryštálovou štruktúrou

Teleso kryštálu môže byť ohraničené kryštálovými plochami úplne (**idiomorfný kryštál**), čiastočne (**hypidiomorfný kryštál**) alebo môže byť bez akýchkoľvek kryštálových plôch (**alotriomorfný kryštál**)

neusporiadaný kryštál

kryštál, v ktorom existujú závažné odchýlky od trojrozmerné periodického usporiadania stavebných častíc; opakom je **usporiadaný kryštál**

ideálny kryštál

idealizovaný kryštál, pri ktorom sa predpokladá dokonale trojrozmerné periodické usporiadanie stavebných častíc, bez porúch kryštálovej štruktúry

Ak sa za poruchu považujú aj kmity mriežky, potom ide o stav pri absolútne nulovej teplote.

reálny kryštál

kryštál, v ktorom sa vyskytujú poruchy štruktúry rôzneho druhu, pričom odchýlky od ideálne periodického usporiadania stavebných častíc sa môžu pokladať za nepodstatné; považuje sa za usporiadaný kryštál.

mozaikový kryštál

zjednodušený model reálneho kryštálu pozostávajúci z **mozaikových blokov** s rozmermi $\sim 10^{-7}$ m s predpokladanou ideálnou štruktúrou, ktoré majú mierne odlišnú priestorovú orientáciu a z hľadiska difrakcie röntgenového žiarenia predstavujú oblasť, v ktorej sú splnené kritériá podmienujúce vznik prísne koherentných difraktovaných vln

Takýto kryštál má **mozaikovú štruktúru**. Rozličná orientácia blokov veľkosti zlomku uhlových minút narúša konštruktívnu interferenciu žiarenia difraktovaného rôznymi blokmi. Bloky sú od seba oddelené poruchami, v reálnych kryštáloch napr. dislokáciami. Takéto kryštály sa označujú aj ako **ideálne mozaikové kryštály**.

nanokryštál

častica s kryštalickou štruktúrou, s rozmermi približne od 1 nm po 100 nm

Počet stavebných častíc nachádzajúcich sa na povrchu nanokryštálov začína byť vzhľadom na celkový počet častíc významný a výrazne ovplyvňuje vlastnosti materiálu

parakryštál

tuhá látka vyznačujúca sa usporiadanosťou nablízko, prípadne na stredné vzdialenosti, ale bez usporiadanosti na diaľku, ktorá chýba aspoň v jednom smere

Táto štruktúra sa do istej miery podobá štruktúre kvapalných kryštálov.

kvázikryštál

tuhá látka, ktorej štruktúra sa vyznačuje nekryštalografickými prvkami bodovej symetrie (napr. 5-, 8-, 10- alebo 12-násobné osi symetrie), ale chýba jej transláčná symetria

Napriek absencii translačnej symetrie poskytuje ostré difrakčné maximá pri difrakčných experimentoch (s využitím rtg žiarenia, neutrónov alebo elektrónov).

tuhý roztok

zdanlivo homogénna kryštalická fáza zložená z rôznych druhov atómov zastúpených v rôznych koncentráciách a obsadzujúcich určité polohy v kryštálovej štruktúre

Najčastejšie ide o zliatiny dvoch kovov alebo kovu a nekovu. Ak je obsadzovanie polôh náhodné, ide o **neusporiadaný tuhý roztok**, v opačnom prípade vzniká **usporiadaný tuhý roztok**. Ak sú v kryštálovej štruktúre prímesovými atómami nahradzané pôvodné atómy, ide o **substitučný tuhý roztok**, ak sa prímesové atómy nachádzajú v intersticiálnych polohách, vzniká **intersticiálny tuhý roztok**. Tuhý roztok sa v niektorých prípadoch dá chápať aj ako zmes dvoch alebo viacerých izomorfných fáz.

kvapalný kryštál

látka, ktorej vlastnosti tvoria prechod medzi vlastnosťami tuhých a kvapalných látok; môže tiecť ako kvapalina, ale súčasne sa vyznačuje istou usporiadanosťou molekúl a anizotropiou fyzikálnych vlastností ako kryštály; štruktúra tohto typu sa nazýva **mezomorfna štruktúra**

Podľa usporiadania molekúl sa rozlišujú **nematické**, **cholesterické** a **smectické kvapalné kryštály**. Používajú sa napr. v displejoch (LCD).

zrno kryštálu (syn. kryštalické zrno)

kompaktný kryštalický jedinec

Môže ísť o monokryštál alebo zrast. Termín zrno je zaužívaný najmä v metalografii v súvislosti s pozorovaním morfológie povrchu optickým mikroskopom. Môže pozostávať z viacerých koherentných oblastí, pre ktoré je v difraktometrii zaužívaný pojem kryštalit.

kryštalit

z morfologického hľadiska kostrovitý kryštalický útvar, ktorý sa nestihol vyvinúť do podoby kryštálu (napr. snehová vločka); v kinematickej teórii difrakcie rtg žiarenia sa týmto termínom označuje aj časť zrna kryštálu – koherentná oblasť, v ktorej sú splnené kritériá na vznik prísne koherentných difraktovaných vln

V angličtine sa v tejto súvislosti používa aj termín crystalline particle – **kryštalická častica**.

polykryštalický agregát

súbor kryštálov rôznych veľkostí, tvarov i orientácie vyskytujúcich sa buď vo forme prášku, alebo ako kompaktný materiál

kryštálová štruktúra

teoreticky nekonečne veľké trojrozmerné periodické usporiadanie konkrétnych stavebných častíc (atómov, iónov, molekúl) súmerné podľa niektorej z 230 priestorových grúp, tvoriace vnútornú stavbu kryštálov; opisuje sa aj pomocou priestorovej mriežky a štruktúrneho motívu

V reálnej kryštálovej štruktúre sa vyskytujú rôzne → poruchy.

ideálna kryštálová štruktúra

kryštálová štruktúra ideálneho kryštálu

usporiadaná štruktúra

kryštálová štruktúra, v ktorej rozdelenie základných stavebných častíc môžeme z hľadiska cieľa považovať za trojrozmerné periodické

neusporiadaná štruktúra

kryštálová štruktúra, v ktorej existujú závažné odchýlky od trojrozmerného periodického usporiadania základných stavebných častíc

Rozlišuje sa **substitučná neusporiadanosť** a **pozičná neusporiadanosť**. Pri substitučnej neusporiadanosti sú v základných bunkách tie isté polohy obsadzované rozličnými druhmi atómov. Pri pozičnej neusporiadanosti sa daným druhom atómu môžu obsadzovať viaceré polohy v základnej bunke, alebo sú daným druhom atómu v rôznych základných bunkách obsadené rozličné polohy. Medzi štruktúry neusporiadané iným spôsobom patria OD-štruktúry.

kryštálová mriežka

teoreticky nekonečne veľká abstraktná reprezentácia kryštálových štruktúr pomocou periodického rozmiestnenia mriežkových bodov (bodové zobrazenie) alebo sústavou troch osnôv mriežkových priamok (priamkové zobrazenie)

Bodovým zobrazením sa reprezentuje periodicitu kryštálovej štruktúry – všetky mriežkové body sa vyznačujú rovnakými hodnotami ľubovoľnej fyzikálnej alebo geometrickej vlastnosti kryštálu. **Priestorová mriežka** vyjadruje periodicitu v trojrozmerných periodických štruktúrach, **rovinná mriežka** v ich rovinných rezoch a **priamková mriežka** pozdĺž význačných smerov takýchto štruktúr.

mriežkový bod

jeden z množiny jedno-, dvoj- alebo trojrozmerných periodicky rozmiestnených bodov tvoriacich kryštálovú mriežku a vyznačujúcich sa tým, že v každom z nich ľubovoľná fyzikálna alebo geometrická vlastnosť kryštálu nadobúda rovnaké hodnoty

Všetky mriežkové body majú identické a rovnako orientované okolie. Množina všetkých mriežkových bodov tvorí priamkovú (v jednom rozmere), rovinnú (v dvoch rozmeroch) alebo priestorovú mriežku. V niektorej staršej slovenskej literatúre sa ako synonymum mriežkového bodu používa termín **uzol**.

priama mriežka

mriežka reprezentujúca kryštálovú štruktúru v reálnom trojrozmernom priestore, prípadne jej rez v rovine (rovinná mriežka); komplementárnou k priamej mriežke je $\rightarrow$ reciproká mriežka

podmriežka

mriežka, ktorá vznikne pravidelným vynechávaním niektorých mriežkových bodov priestorovej mriežky, teda jej zriedením

Translačná grupa podmriežky je podgrupou translačnej grupy mriežky.

nadmriežka

mriežka, ktorá vznikne pravidelným pridávaním mriežkových bodov do priestorovej mriežky

Translačná grupa nadmriežky je nadgrupou translačnej grupy mriežky.

priamy priestor

reálny trojrozmerný priestor, v ktorom sa opisuje štruktúra kryštálu pomocou súradníc atómov, prípadne elektrónovou hustotou ako funkciou frakčných súradníc

Komplementárnym priestorom je $\rightarrow$ reciproký priestor.

štruktúrny motív

skupina atómov alebo iónov, ktorá sa v štruktúre kryštálu opakuje pri každom mriežkovom bode, zachovávajúc svoj tvar i orientáciu

mriežková priamka

priamka prechádzajúca dvoma ľubovoľnými mriežkovými bodmi v priestorovej mriežke

Jej smer jednoznačne určuje symbol mriežkovej priamky $[uvw]$. V niektorej staršej slovenskej literatúre sa ako synonymum mriežkovej priamky používa termín **uzlová priamka**.

perióda identity

vzdialenosť medzi dvoma najbližšími mriežkovými bodmi na mriežkovej priamke

osnova mriežkových priamok

množina navzájom rovnobežných mriežkových priamok danej priestorovej mriežky, pričom každý mriežkový bod leží na niektorej z nich

mriežková rovina

rovina prechádzajúca tromi ľubovoľnými mriežkovými bodmi v priestorovej mriežke neležiacimi na jednej priamke

Jej orientáciu jednoznačne určujú Millerove, resp. Bravaisove indexy mriežkovej roviny (hkl), resp. ($hkil$). V niektorej staršej slovenskej literatúre sa ako synonymum mriežkovej roviny používa termín **uzlová rovina**.

osnova mriežkových rovín

množina navzájom rovnobežných mriežkových rovín danej priestorovej mriežky, pričom každý mriežkový bod leží na niektorej z nich

Každú osnovu mriežkových rovín charakterizuje medzirovinná vzdialenosť d_{hkl} a retikulárna hustota.

medzirovinná vzdialenosť d_{hkl}

vzdialenosť medzi dvoma najbližšími rovinami osnovy mriežkových rovín

retikulárna hustota

počet mriežkových bodov na príslušnej mriežkovej rovine pripadajúci na jednotku plošného obsahu

mriežkový vektor

vektor spájajúci dva ľubovoľné mriežkové body

kryštalografický smer

významný smer v kryštálovej mriežke zhodný so smerom niektorého mriežkového vektora

báza mriežky

ľubovoľná trojica nekomplanárnych mriežkových vektorov (**vektorov bázy, báзовých vektorov**), ktorých celočíselnou lineárnou kombináciou možno vybudovať teoreticky nekonečne veľkú priestorovú mriežku

Vybudovanie rovnakej mriežky sa môže dosiahnuť pomocou rôznych trojíc báзовých vektorov. Báзовé vektory sa zvyčajne označujú symbolmi $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$, všeobecne $\mathbf{a}_i$, pričom $i = 1, 2$ alebo 3 .

základné vektory

trojica mriežkových vektorov vybraná na základe konvenčných medzinárodných pravidiel tak, aby boli spravidla najkratšie, zvierali maximálny počet pravých uhlov a vytvárali základnú bunku s minimálnym objemom; zvyčajne sa označujú písmenami $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$

Medzinárodné konvenčné pravidlá výberu sa niekedy označujú aj ako **Bravaisove pravidlá**.

mriežkový parameter

niektorý z parametrov charakterizujúcich metriku mriežky

Mriežkovými parametrami sú veľkosti základných vektorov $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ a uhly α , β , γ , ktoré základné vektory navzájom zvierajú. V niektorej staršej literatúre sa používa nesprávny termín **mriežková konštanta**.

základná perióda identity

perióda identity pozdĺž niektorého zo smerov určených základnými vektormi; zhoduje sa s veľkosťou základných vektorov

základná bunka

rovnobežnosten vytvorený pomocou troch základných vektorov ***a, b, c***, ktorého postupnými transláciami o ich celočíselné násobky možno bez zvyšku vyplniť celý, teoreticky nekonečne veľký priestor kryštálu

Ak má základná bunka mriežkové body len vo vrcholoch, ide o **primitívnu** (*P*) alebo **romboédrickú** (*R*) základnú bunku, v opačnom prípade ide o **centrované** základné bunky, ktoré môžu byť **bázicky centrované** (*A, B* alebo *C*), **priestorovo centrované** (*I*) a **plošne centrované** (*F*).

ortohexagonálna bunka

základná bunka v hexagonálnych a trigonálnych priestorových mriežkach zvolená tak, aby sa dodržala podmienka maximálneho počtu pravých uhlov medzi základnými vektormi, ale nezachová sa podmienka vyžadujúca najmenší objem ($V_{hex} = \frac{1}{2} V_{ortohex}$)

redukovaná bunka

primitívna základná bunka tvorená tromi najkratšími mriežkovými vektormi, ktorá jednoznačne reprezentuje danú priestorovú mriežku, ale nezohľadňuje medzinárodné (Bravaisove) podmienky výberu, takže nemá bodovú symetriu priestorovej mriežky; označuje sa aj ako **Niggliho bunka**

Wignerova-Seitzova bunka

primitívna bunka s tvarom polyédra predstavujúca oblasť okolo mriežkového bodu tvorenú množinou bodov priameho priestoru, ktoré sú k nemu bližšie než k iným mriežkovým bodom

Vo všeobecnosti nemá tvar rovnobežnostena, ale na rozdiel od Niggliho bunky má bodovú symetriu priestorovej mriežky

Bravaisova mriežka

jedna zo štrnástich priestorových mriežok líšiacich sa vzájomnými vzťahmi mriežkových parametrov a spôsobom centrácie, pričom sa rešpektujú medzinárodné pravidlá výberu základných buniek ($\rightarrow$ základné vektory, základná bunka)

Bravaisove mriežky možno zatriediť do siedmich kategórií, ktoré súčasne definujú maximálnu symetriu v siedmich kryštalografických sústavách. Zatriedenie do jednotlivých sústav s vyznačením centrácie základných buniek je takéto: triklinická – *P*; monoklinická – *P* a *C*; rombická – *P*, *C*, *I* a *F*; tetragonálna – *P* a *I*; trigonálna – *R*; hexagonálna – *P*; kubická – *P*, *I* a *F* ($\rightarrow$ základná bunka). Symetria Bravaisovej mriežky kryštálovej štruktúry nie je postačujúcou, ale len

nevyhnutnou podmienkou na zaradenie kryštalickej látky do niektorej zo siedmich kryštalografických sústav.

kryštalografická sústava

kategória na klasifikáciu kryštalických látok určená metrikou a symetriou; rozlišuje sa týchto sedem sústav vytvorených kryštalografmi: triklinická, monoklinická, rombická, tetragonálna, trigonálna, hexagonálna a kubická sústava

Vzťahy $a \neq b$ a $\beta > 90^\circ$ používané pri definovaní metriky kryštalografických sústav majú tento význam: „ a sa vo všeobecnosti nerovná b “ a „uhol β je vo všeobecnosti väčší než 90° “, takže v špecifických prípadoch môže platiť rovnosť. Prehľad metriky jednotlivých kryštalografických sústav je v tab. 1.

triklinická sústava (syn. trojklonná sústava)

sústava, ktorú charakterizuje metrika $a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$; uplatňuje sa v nej nanajvýš symetria podľa stredu súmernosti

Za základné vektory sa vyberajú najkratšie mriežkové vektory a všetky uhly medzi nimi sú ostré (tzv. **normálny výber**).

monoklinická sústava (syn. jednoklonná sústava)

sústava, ktorú charakterizuje metrika $a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta > 90^\circ$ (pre 2. postavenie); z prvkov súmernosti ju jednoznačne určuje prítomnosť jednej dvojnásobnej osi, jedinej roviny súmernosti, alebo ich kombinácia

Sú možné tri výbery súradnicovej sústavy: **prvé postavenie**, pri ktorom $2 \equiv X$, **druhé postavenie**, pri ktorom $2 \equiv Y$, alebo **tretie postavenie**, pri ktorom $2 \equiv Z$; konvenčným je druhé postavenie.

rombická sústava (syn. kosoštvorcová sústava)

sústava, ktorú charakterizuje metrika $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$; z prvkov súmernosti ju jednoznačne určuje prítomnosť troch rovín súmernosti alebo troch dvojnásobných osí, alebo kombinácia dvoch rovín súmernosti s jednou dvojnásobnou osou

Často sa pod vplyvom anglosaskej literatúry používa na jej pomenovanie nie celkom správny výraz **ortorombická sústava**.

tetragonálna sústava (syn. štvorcová sústava)

sústava, ktorú charakterizuje metrika $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$; z prvkov súmernosti ju jednoznačne určuje jedna štvornásobná os alebo jedna štvornásobná rotoinverzná os

trigonálna sústava (syn. trojuholníková sústava)

sústava, ktorú charakterizuje metrika $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$; z prvkov súmernosti ju jednoznačne určuje jedna trojnásobná os alebo jedna trojnásobná rotoinverzná os bez prítomnosti roviny súmernosti kolmej na osi

Za trigonálne sa považujú tie kryštalické látky, pre ktoré možno použiť aj romboédrické, aj hexagonálne súradnicové osi, pričom sú možné dva výbery súradnicovej sústavy pre romboédrickú základnú bunku: **obverzný výber** ($R_{obverzná}$) alebo **reverzný výber** ($R_{reverzná}$). Na označenie tejto sústavy sa používa aj nevhodný termín **romboédrická sústava**.

hexagonálna sústava (syn. šesťuholníková sústava)

sústava, ktorú charakterizuje metrika $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$; z prvkov súmernosti ju jednoznačne určuje jedna šesťnásobná os alebo jedna šesťnásobná rotoinverzná os

Za hexagonálne sa považujú tie kryštalické látky, pre ktoré možno použiť len hexagonálne alebo ortohehexagonálne súradnicové osi. V špeciálnych prípadoch sa v hexagonálnej sústave vyberajú bunky C ($V_C = 3V_P$) a H , pri ktorej tiež $V_H = 3V_P$, kde V_P je objem primitívnej bunky, V_C a V_H sú objemy buniek typu C a H .

kubická sústava (syn. kocková sústava)

sústava, ktorú charakterizuje metrika $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$; z prvkov súmernosti ju jednoznačne určuje prítomnosť štyroch trojnásobných osí

reciproké vektory

trojica vektorov $\mathbf{a}^j$ súvisiaca s trojicou báзовých vektorov $\mathbf{a}_i$ definovaná vzťahmi $\mathbf{a}^j \cdot \mathbf{a}_i = \delta_{ij}$, kde $\delta_{ij} = +1$, ak $i = j$, a $\delta_{ij} = 0$, ak $i \neq j$, pričom indexy i, j nadobúdajú hodnoty 1, 2 alebo 3; ak vektory $\mathbf{a}_i$ sú trojicou základných vektorov, potom vektory $\mathbf{a}^j$ tvoria trojicu základných reciprokých vektorov

Z definičného vzťahu vyplýva, že reciproký vektor $\mathbf{a}^1$ je kolmý na rovinu vektorov $\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$; v prípade, že vektory $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ sú na seba kolmé, jeho veľkosť sa rovná prevrátenej (reciprokej) veľkosti vektora $\mathbf{a}_1$ priamej mriežky. Analogické vzťahy platia pre ostatné reciproké vektory. Reciproké vektory sú základom metriky v reciprokom priestore.

reciproká mriežka

konštrukcia abstraktnej teoreticky nekonečne veľkej mriežky vybudovaná pomocou celočíselnej lineárnej kombinácie reciprokých vektorov

Každému mriežkovému vektoru reciprokej mriežky je jednoznačne priradená osnova mriežkových rovín priameho priestoru, na ktorú je kolmý. Mriežkovým bodom reciprokej mriežky sa priradujú hodnoty štruktúrnych faktorov, čím sa vytvára osobitný druh reprezentácie difrakčného obrazu.

reciproký priestor

komplementárny priestor k priamemu priestoru, ktorého metrika je určená bárou tvorenou trojicou reciprokých vektorov

Interpretujú sa v ňom difrakčné obrazy, Fourierovými transformáciami sa prevádzajú hodnoty štruktúrnych faktorov priradené jednotlivým bodom reciprokej mriežky na elektrónovú hustotu v priamom priestore.

koeficient zaplnenia

číselný faktor udávajúci pomer medzi objemom atómov reprezentovaných nestlačiteľnými rovnako veľkými guľami a objemom priestoru, v ktorom sa atómy nachádzajú

Pri najtesnejšom usporiadaní dosahuje hodnotu 0,74, v ostatných usporiadaniach je nižší.

najtesnejšie usporiadanie

priestorové usporiadanie rovnako veľkých stavebných častíc v kryštálových štruktúrach, pri ktorom – v porovnaní s inými možnými usporiadaniami – zaberajú minimálny objem

V tomto usporiadaní sa vyskytujú tetraédrické a oktaédrické medzery, ktoré môžu vyplňať atómy iného druhu s vhodnými polomermi. V rovine najtesnejšiemu usporiadaniu zodpovedá len hexagonálna metrika a symetria, v priestore mu zodpovedá hexagonálna (*hcp* štruktúry) aj kubická metrika a symetria (*fcc* štruktúry).

tesné usporiadanie

priestorové usporiadanie rovnako veľkých stavebných častíc v kryštálových štruktúrach, pri ktorom – v porovnaní s najtesnejším usporiadaním – nezaberajú minimálny objem a koeficient zaplnenia dosahuje nižšie hodnoty

V rovine tesnému usporiadaniu zodpovedá len tetragonálna metrika a symetria, v priestore kubická metrika a symetria (*bcc* štruktúry). Voľné medzery môžu využívať intersticiálne atómy.

usporiadanosť nablízko

usporiadanosť stavebných častíc v štruktúre tuhej alebo kvapalnej látky, uplatňujúca sa iba na vzdialenostiach porovnateľných s medziatómovými vzdialenosťami; v priestorovej korelácii sú iba susedné častice

Prejavuje sa istou pravidelnosťou v rozložení susedných atómov alebo molekúl. Pri **topologickej usporiadanosti** nablízko ide o atómy rovnakého druhu, pri **chemickej usporiadanosti** ide o atómy iného, ale určitého druhu.

usporiadanosť na diaľku

usporiadanosť vzájomných polôh stavebných častíc, pri ktorej sa určité ich zoskupenie pravidelne opakuje v ľubovoľnej vzdialenosti od východiskovej polohy; navzájom sú v priestorovej korelácii nielen susedné, ale aj ľubovoľne od seba vzdialené atómy či molekuly

parameter usporiadanosti na diaľku

číselný faktor S z intervalu $\langle 0, 1 \rangle$, ktorým sa charakterizuje miera usporiadanosti binárneho tuhého roztoku na diaľku

Ak v tuhom roztoku pozostávajúcom z dvoch druhov atómov A a B obsadzujúcich dve polohy α a β je R počet správne umiestnených atómov a W je počet nesprávne umiestnených atómov, tak $S = (R - W)/N$, kde $N = R + W$ je celkový počet atómov. Pri dokonalom usporiadaní $R = N$, $W = 0$ a $S = 1$; pri úplnej neusporiadanosti $R = W$ a $S = 0$. Parameter je možné zovšeobecniť pre prípad nestechiometrických tuhých roztokov.

parameter usporiadanosti nablízko

číselný faktor s z intervalu $\langle 0, 1 \rangle$, ktorým sa charakterizuje miera usporiadanosti binárneho tuhého roztoku nablízko

Parametrom sa vyjadruje relatívny podiel správne umiestnených susediacich atómov A a B . Je zavedený tak, aby vzťah $(1/2)(1 + s)$ udával pravdepodobnosť, že susedom atómu A je atóm B , a aby vzťah $(1/2)(1 - s)$ udával pravdepodobnosť, že jeho susedom je atóm A . Pri dokonalom usporiadaní $s = 1$, pri úplne náhodnom rozdelení $s = 0$.

izoštruktúrne látky

kryštalické látky so štruktúrami symetrickými podľa identických priestorových grup s blízkymi frakčnými súradnicami jednotlivých atómov líšiace sa chemickým zložením, mriežkovými parametrami, medziatómovými vzdialenosťami a väzbovými uhlami

izomorfizmus

vzájomná podobnosť štruktúr viacerých kryštalických látok; odlišnosť vzniká nahradením atómu alebo celej molekuly v štruktúre iným atómom alebo molekulou, alebo pridaním atómov do voľných miest v štruktúre, pričom sa typ pôvodnej kryštálovej štruktúry zachová

Podľa spôsobu nahradenia existuje substitučná izomorfia, subtrakčná izomorfia a adičná izomorfia. Pri substitučnej izomorfii sa vzájomne zastupujú izoštruktúrne látky tvoriace tak substitučný tuhý roztok. Pri subtrakčnej izomorfii sa vzájomne zastupujú rozlične valentné ióny toho istého chemického prvku. Pri adičnej izomorfii sa zastupujúci atóm umiestňuje do intersticiálnych polôh, čím vznikajú intersticiálne tuhé roztoky. V staršej literatúre sa používa aj termín **diadochia**.

polymorfizmus

schopnosť niektorých látok vytvárať viacero typov kryštálových štruktúr rovnakého chemického zloženia, t. j. rôzne **polymorfne modifikácie**

Z polymorfných modifikácií je pri daných podmienkach stabilná iba jedna, ostatné sú metastabilné.

polytypizmus

špeciálny druh polymorfizmu typický pre niektoré kryštály s vrstevnatou štruktúrou

Polytypické modifikácie sa navzájom líšia tým, že štruktúrne zhodné vrstvy alebo skupiny vrstiev sa ukladajú na seba navzájom rôzne posunuté alebo potočené, čím môžu stratiť periodicitu v jednom smere. Rôzne polytypy toho istého kryštálu sa navzájom odlišujú periódou identity v kolmom smere na vrstvy.

OD-štruktúra

štruktúra skladajúca sa z vrstiev s vlastnou parciálnou symetriou; výsledná štruktúra môže byť usporiadaná – ordered (ak je ukladanie vrstiev periodické), čiastočne usporiadaná alebo úplne neusporiadaná – disordered

Skratka OD je utvorená z anglického názvu Order-Disorder.

iónový polomer

polomer prisudzovaný iónu s predpokladaným guľovým tvarom

Iónové polomery sú poloempirické hodnoty vypočítané zo vzdialenosti ťažísk atómov, ktorých súradnice sa získajú pri riešení kryštálových štruktúr. Pri tom sa vychádza z predpokladu, že polomer iónu $^{VI}O^{2-}$ $r = 1,40 \text{ \AA}$ a polomer iónu $^{VI}F^{-}$ $r = 1,33 \text{ \AA}$.

kovalentný polomer (syn. atómový polomer)

príspevok atómu k dĺžke kovalentnej väzby medzi dvoma atómami v kovalentnej štruktúre alebo v molekule

koordinácia

spôsob geometrického usporiadania atómov (iónov) okolo centrálného atómu (iónu) v kryštálovej štruktúre; závisí od polomerov atómov (iónov) a od druhu chemickej väzby

V kryštálových štruktúrach kovov je vzájomné usporiadanie atómov (počet najbližších susediacich atómov) zvyčajne identické s najtesnejším usporiadaním (koordinačné číslo 12). V iónových kryštálických látkach sú katióny tesne obklopené aniónmi.

koordinačné číslo

počet atómov alebo iónov viazaných na určitý centrálny atóm alebo ión

Hlavným kritériom podmieňujúcim koordinačné číslo v iónových kryštáloch je pomer polomerov stavebných častíc (atómov, katiónov a aniónov). Najbežnejšie koordinácie charakterizujú tieto koordinačné čísla: 3 (plošná koordinácia, rovnostranný trojuholník), 4 (tetraédrická koordinácia), 6 (oktaédrická koordinácia), 8 (kubická koordinácia), v kryštálových štruktúrach kovov aj 12 (kubooktaédrická koordinácia). V kryštáloch s kovalentnou väzbou je koordinačné číslo určené väzbovosťou atómov.

homodesmická štruktúra

druh kryštálovej štruktúry, v ktorej sa uplatňuje alebo výrazne prevláda len jeden druh chemickej väzby

Podľa typu väzby sa rozlišujú **iónová štruktúra**, **kovalentná štruktúra** a **kovová štruktúra**.

homometrické štruktúry

dve alebo viaceré kryštálové štruktúry tvorené rovnakými atómami, vyznačujúce sa zhodnými množinami medziatómových vzdialeností a odlišujúce sa iba vzájomnou orientáciou štruktúrnych motívov

Majú rovnaké difrakčné obrazy, preto ich nemožno rozlíšiť difrakčnými metódami.

izovektorové štruktúry

kryštálové štruktúry so zhodnou množinou medziatómových vektorov bez ohľadu na druh atómov

enantiomorfné štruktúry

špeciálny prípad dvojíc homometrických štruktúr, v ktorých sú smery všetkých medziatómových vektorov vzájomnými zrkadlovými obrazmi

superštruktúra

štruktúra, v ktorej sa na základnú periódu identity superponuje dodatočná perióda usporiadania stavebných častíc

Jej vznik je podmienený napr. magnetickým alebo chemickým usporiadaním, pričom sa mení symetria štruktúry ako celku alebo veľkosť základnej bunky.

modulovaná štruktúra

štruktúra, ktorá sa dá opísať modelom s periodickými zmenami v geometrii alebo v chemickom zložení na vzdialenosti väčšie než niektorý mriežkový parameter

Periodicita zmien je násobkom niektorej periódy identity kryštálovej štruktúry.

súmerateľná štruktúra

modulovaná štruktúra, v ktorej sa vyskytujú len také periodicity usporiadania atómov, ktoré sú racionálnym násobkom niektorej periódy identity kryštálovej štruktúry

nesúmerateľná štruktúra

modulovaná štruktúra, v ktorej sa vyskytujú také periodicity usporiadania atómov, ktoré sú iracionálnym násobkom niektorej periódy identity kryštálovej štruktúry

A 2 Morfológická kryštalografia

kryštalový tvar

súbor súmerne združených kryštalových plôch

Rozlišujú sa **uzavreté kryštalové tvary** a **otvorené kryštalové tvary**. Uzavreté kryštalové tvary (U) celkom uzatvárajú priestor a môžu sa na kryštáloch nachádzať samostatne bez kombinácie s inými tvarmi. Ak kryštalové tvary neuzatvárajú priestor, sú otvorené (O) a musia sa vždy navzájom kombinovať. Pomenovania kryštalových tvarov sú odvodené zo starogréčtiny. Existujú tieto kryštalové tvary: pedión (O), pinakoid (O), dóma (O), sfenoid (O), disfenoid (U), prizma (monoklinická, rombická, ditetragonálna, tetragonálna, ditrigonálna, trigonálna, dihexagonálna, hexagonálna) (O), pyramída (monoklinická, rombická, ditetragonálna, tetragonálna, ditrigonálna, trigonálna, dihexagonálna, hexagonálna) (O), dipyramída (monoklinická, rombická, ditetragonálna, tetragonálna, ditrigonálna, trigonálna, dihexagonálna, hexagonálna) (U), skalenoéder (tetragonálny, trigonálny) (U), trapezoéder (tetragonálny, trigonálny, hexagonálny) (U), romboéder (U). V kubickej sústave sa vyskytujú len uzavreté kryštalové tvary, ktoré nemajú obdobu v iných kryštalografických sústavách. Sú to: hexaoktaéder, tetragón-tri oktaéder, trigón-tri oktaéder, tetrahexaéder, oktaéder, rombododekaéder, pentagóndodekaéder, hexaéder, pentagón-tri oktaéder, didodekaéder, hexatetraéder, tetraéder, trigón-tri tetraéder, tetragón-tri tetraéder.

tvar kryštálu (syn. **habitus kryštálu**)

vzhľad kryštálu, ktorý určujú prevládajúce kryštalové plochy (napr. vzhľad izometrický, tabuľkovitý, stĺpcovitý, ihličkovitý, vlákнитý)

pedión

otvorený kryštalový tvar tvorený jedinou plochou tvaru ľubovoľného n -uholníka bez súmerne združených ekvivalentných plôch

pinakoid

otvorený kryštalový tvar tvorený dvoma rovnobežnými plochami tvaru ľubovoľného n -uholníka, súmerne združenými podľa roviny súmernosti, dvojnásobnej osi alebo stredu súmernosti

dóma

otvorený kryštalový tvar tvorený dvoma rôznobežnými plochami tvaru ľubovoľného n -uholníka, súmerne združenými rovinou súmernosti

sfenoid

otvorený kryštalový tvar tvorený dvoma rôznobežnými plochami tvaru ľubovoľného n -uholníka, súmerne združenými dvojnásobnou osou

disfenoid

uzavretý kryštalový tvar, ktorý vzniká spojením dvojice sfenoidov súmerne združených podľa dvoch ďalších dvojnásobných osí

prizma

otvorený kryštalový tvar tvorený najmenej tromi plochami pretínajúcimi sa v rovnobežných hranách

Podľa súmernosti a metriky prizma môže byť monoklinická, rombická, ditetragonálna, tetragonálna, ditrigonálna, trigonálna, dihexagonálna a hexagonálna.

pyramída

otvorený kryštalový tvar tvorený najmenej tromi plochami pretínajúcimi sa vo vrchole

Podľa súmernosti a metriky pyramída môže byť monoklinická, rombická, ditetragonálna, tetragonálna, ditrigonálna, trigonálna, dihexagonálna a hexagonálna.

dipyramída

uzavretý kryštalový tvar, ktorý tvoria dve súmerne združené pyramídy (rovinou súmernosti alebo súborom dvojnásobných osí)

Podľa súmernosti a metriky dipyramída môže byť monoklinická, rombická, ditetragonálna, tetragonálna, ditrigonálna, trigonálna, dihexagonálna a hexagonálna.

skalenoéder

uzavretý kryštalový tvar zložený zo všeobecných trojuholníkov (po starogrécky skalénos) súmerne združených podľa kombinácií rotoinverzných osí, rovín a dvojnásobných osí súmernosti ($\bar{4} + m + 2$ alebo $\bar{3} + m + 2$)

Podľa súmernosti a metriky skalenoéder môže byť tetragonálny alebo trigonálny.

trapezoéder

uzavretý kryštalový tvar zložený zo všeobecných štvoruholníkov (po starogrécky trapézos) súmerne združených podľa kombinácie rotačných osí súmernosti ($4 + 2$, $3 + 2$ alebo $6 + 2$)

Podľa súmernosti a metriky trapezoéder môže byť tetragonálny, trigonálny alebo hexagonálny.

romboéder

uzavretý kryštalový tvar tvorený šiestimi kosoštvorcovými plochami

Vyskytuje sa len v trigonálnej sústave v bodových grupách obsahujúcich rotoinverznú os $\bar{3}$ (grupy $\bar{3}2/m$ a $\bar{3}$) a v bodovej grupe 32.

oktaéder

uzavretý kryštálový tvar tvorený ôsmimi plochami tvaru rovnostranného trojuholníka

hexaoktaéder

uzavretý kryštálový tvar tvorený 48 plochami tvaru všeobecného trojuholníka vztýčenými v šesticiach nad každou plochou oktaédra

tetragón-tri oktaéder

uzavretý kryštálový tvar tvorený 24 plochami tvaru deltooidového štvoruholníka vztýčenými v trojiciach nad každou plochou oktaédra

trigón-tri oktaéder

uzavretý kryštálový tvar tvorený 24 plochami tvaru rovnoramenného trojuholníka vztýčenými v trojiciach nad každou plochou oktaédra

hexaéder (syn. kocka)

uzavretý kryštálový tvar tvorený šiestimi plochami tvaru štvorca

tetrahexaéder

uzavretý kryštálový tvar tvorený 24 plochami tvaru rovnoramenného trojuholníka vztýčenými v štvoriciach nad každou plochou hexaédra

rombododekaéder

uzavretý kryštálový tvar tvorený 12 plochami tvaru kosoštvorca

pentagóndodekaéder

uzavretý kryštálový tvar tvorený 12 plochami tvaru nepravidelného päťuholníka

pentagón-tri oktaéder

uzavretý kryštálový tvar tvorený 24 plochami tvaru nepravidelného päťuholníka vztýčenými v trojiciach nad každou plochou oktaédra

didodekaéder

uzavretý kryštálový tvar tvorený 24 plochami tvaru nepravidelného štvoruholníka

tetraéder

uzavretý kryštálový tvar tvorený štyrmi plochami tvaru rovnostranného trojuholníka

hexatetraéder

uzavretý kryštálový tvar tvorený 24 plochami tvaru všeobecného trojuholníka vztýčenými v šesticiach nad každou plochou tetraédra

trigón-tri tetraéder

uzavretý kryštalový tvar tvorený 12 plochami tvaru rovnoramenného trojuholníka vztýčenými v trojiciach nad každou plochou tetraédra

tetragón-tri tetraéder

uzavretý kryštalový tvar tvorený 12 plochami tvaru deltooidového štvoruholníka vztýčenými v trojiciach nad každou plochou tetraédra

pentagón-tri tetraéder

uzavretý kryštalový tvar tvorený 12 plochami tvaru všeobecného päťuholníka vztýčenými v trojiciach nad každou plochou tetraédra

Millerove indexy

trojica nesúdeliteľných celých čísel h, k, l , ktoré udávajú orientáciu kryštalovej plochy alebo mriežkovej roviny v súradnicovej sústave určenej tromi základnými vektormi

Tieto indexy sú úmerné prevráteným hodnotám skutočných úsekov vytínaných plochou na základných vektoroch, pričom pre jedinú kryštalovú plochu alebo mriežkovú rovinu sa používa **Millerov symbol** (hkl) a pre kryštalový tvar, resp. pre súbor všetkých ekvivalentných mriežkových rovín Millerov symbol $\{hkl\}$.

Bravaisove indexy

štvorica nesúdeliteľných celých čísel h, k, i, l , ktoré udávajú orientáciu kryštalovej plochy alebo mriežkovej roviny v súradnicovej sústave určenej základnými vektormi

Tieto indexy sa používajú len v trigonálnej a hexagonálnej sústave, v ktorých sú zavedené štyri základné vektory. Platí medzi nimi vzťah $h + k + i = 0$. Tieto indexy sú úmerné prevráteným hodnotám skutočných úsekov vytínaných plochou na základných vektoroch, pričom pre jedinú kryštalovú plochu sa používa **Bravaisov symbol** ($hkil$) a pre kryštalový tvar, resp. pre súbor všetkých ekvivalentných mriežkových rovín Bravaisov symbol $\{hkil\}$.

zóna

súbor najmenej troch kryštalových plôch pretínajúcich sa v rovnobežných hranách, s ktorými je rovnobežná jediná mriežková priamka prechádzajúca začiatkom súradnicovej sústavy – **os zóny** $[uvw]$

goniometer na meranie kryštálov

prístroj používaný na meranie uhlov, v kryštalografii na meranie uhlov medzi kolmicami na kryštalové plochy

Jestvujú menej presné mechanické príložné goniometre, ale používajú sa presnejšie optické goniometre založené na meraní uhlov medzi svetelnými lúčmi odrazenými od jednotlivých kryštalových plôch. Goniometre sa používajú aj na meranie difrakčných uhlov v difraktometroch.

kryštalografická projekcia

geometrická konštrukcia na spracovanie výsledkov goniometrických meraní, pri ktorej sa jednotlivé plochy kryštálu reprezentujú **pozičnými bodmi** na projekčnej rovine

Používa sa guľová, gnómonická a stereografická projekcia.

guľová projekcia

abstraktná trojrozmerná konštrukcia slúžiaca na zobrazenie orientácie kryštálových plôch pomocou projekčných bodov na projekčnej guľi

Kryštál sa virtuálne umiestňuje do stredu projekčnej guľe s polomerom podstatne väčším než veľkosť kryštálu, pričom **projekčnými bodmi** sú priesečníky normál na jednotlivé plochy kryštálu s povrchom projekčnej guľe. Poloha projekčného bodu na projekčnej guľi je jednoznačne určená dvomi uhlovými súradnicami: súradnicou ϕ (udáva uhol od nultého poludníka) a súradnicou ρ (uhol meraný od pólu S). Projekčné body všetkých kryštálových plôch patriacich do jednej zóny sa v guľovej projekcii premietajú na veľké kružnice (t. j. kružnice s rovnakým polomerom ako guľová plocha). Táto projekcia slúži ako východisko pre ostatné typy projekcií.

projekčná guľa

guľová plocha používaná pri guľovej, gnómonickej i stereografickej projekcii, do ktorej stredu sa virtuálne vkladá kryštál a na ktorej sa zobrazujú projekčné body reprezentujúce plochy kryštálu, ale môžu sa zobraziť aj grafické symboly reprezentujúce prvky súmernosti kryštálu

Na projekčnej guľi podobne ako na glóbose sa vyznačuje severný pól (S), južný pól (J), rovník, rovnobežky a poludníky.

Ide o zaužívaný kryštalografický termín, v ktorom sa pod pojmom guľa nerozumie teleso, ale len jeho povrchová plocha.

gnómonická projekcia

dnes málo používaná kryštalografická projekcia, pri ktorej sa body ležiace na projekčnej guľi premietajú z jej stredu na tangenciálnu projekčnú rovinu dotýkajúcu sa guľovej plochy v niektorom jej póle

Vzdialenosť l medzi pólom a pozičným bodom sa vyjadruje vzťahom $l = r \operatorname{tg} \rho$ ($\rightarrow$ guľová projekcia), kde r je polomer projekčnej guľe.

stereografická projekcia

kryštalografická projekcia, pri ktorej sa body ležiace na jednej polovici projekčnej guľe premietajú na ekvatoriálnu projekčnú rovinu spojnicou s protíľahlým pólom

Vzdialenosť l medzi začiatkom súradnicovej sústavy a projekčným bodom sa v tejto najpoužívanejšej projekcii vyjadruje vzťahom $l = r \operatorname{tg} (\rho/2)$. Stereografická projekcia zachováva pomerné vzdialenosti medzi projekčnými bodmi.

Graficky sa projekčné body zobrazujú pomocou → Wulfovej siete. Projekčné body môžu ležať vo **všeobecných polohách** (neležia na žiadnom prvku súmernosti), v **špeciálnych polohách** (ležia na niektorom prvku súmernosti alebo na ich kombinácii) alebo v **limitných polohách** (reprezentujúcich plochy so špeciálnym vzťahom k súradnicovým osiam, napr. sú s nimi rovnobežné).

Wulffova sieť

grafická pomôcka na spracovanie goniometrických meraní v stereografickej projekcii predstavujúca projekciu poludníkov a rovnobežiek z projekčnej guľovej plochy

A 3 Symetria kryštálov a kryštálových štruktúr

symetria (syn. **súmernosť**)

vlastnosť kryštalických látok a kryštálov, ich vonkajších tvarov i štruktúry zachovávať si tvar aj usporiadanie atómov pri istých priestorových transformáciách – operáciách symetrie

pseudosymetria

vlastnosť objektov podobná symetrii a odlišujúca sa od nej tým, že jednotlivé časti útvaru sa pri transformáciách stotožňujú iba približne

operácia symetrie (syn. **operácia súmernosti**)

ortogonálna transformácia, ktorou sa objekty transformujú tak, že pôvodný a transformovaný objekt sú geometricky i fyzikálne ekvivalentné

Ide o otočenie, zrkadlenie, inverziu a pri kryštálových štruktúrach aj o mriežkovú transláciu, ako aj o kombináciu týchto operácií. Pri zložených operáciách symetrie je translácia zlomkom periódy identity.

ortogonálna transformácia

transformácia objektu, pri ktorej sa zachovávajú vzdialenosti medzi ľubovoľnými dvomi bodmi objektu

Determinant matice ortogonálnej transformácie má hodnoty $+1$ alebo -1 .

kryštalografická operácia symetrie

operácia symetrie týkajúca sa kryštalických látok; podmienená je trojrozmernou periodicitou usporiadania ich stavebných častíc

nekryštalografická operácia symetrie

operácia symetrie uplatňujúca sa v objektoch, v ktorých chýba trojrozmerná periodicitu usporiadania ich stavebných častíc

Ide najmä o otočenia okolo 5-násobných a viac než 6-násobných osí vrátane otočení o ľubovoľne malý uhol pri objektoch s guľovou či valcovou symetriou ($\rightarrow$ kvázikryštály).

operácia antisymetrie

operácia symetrie uplatňujúca sa pri interpretácii štruktúr niektorých druhov kryštalických látok, pri ktorej sa transformovanému atómu priradí nielen nová poloha, ale aj opačná hodnota dodatkového parametra, napr. opačný smer magnetického momentu ($\rightarrow$ Šubnikovove grupy)

totálna operácia symetrie

operácia symetrie, pri ktorej sa celý útvar transformuje do geometricky a fyzikálne ekvivalentnej polohy

parciálna operácia symetrie

kryštalografická operácia symetrie, pri ktorej sa iba časť útvaru transformuje do geometricky a fyzikálne ekvivalentnej polohy

Parciálne operácie symetrie sa vyskytujú napríklad pri symetrii vrstiev v polytypných štruktúrach.

lokálna operácia symetrie

operácia symetrie, ktorá sa uplatňuje len v časti kryštálovej štruktúry; môže byť kryštalografická aj nekryštalografická

Lokálnu symetriu môže mať napríklad molekula, časť základnej bunky alebo časť štruktúry kvázikryštálov.

jednoduchá operácia symetrie

operácia symetrie pozostávajúca z jedinej transformácie; môže ísť o inverziu, zrkadlenie, rotáciu a transláciu

zložená operácia symetrie

kombinácia aspoň dvoch transformácií, ktorá v prípade konkrétnej štruktúry kryštálu je ako celok operáciou symetrie, ale jednotlivé transformácie samostatne ňou nemusia byť

Môže ísť o rotoinverziu, rotoflexiu, sklznú a skrutkovú operáciu symetrie s translačnými zložkami, ktoré sú zlomkami periódy identity ($\rightarrow$ otvorená operácia symetrie).

vlastná operácia symetrie (syn. operácia symetrie 1. druhu, kongruentná operácia symetrie, vlastná rotácia)

operácia symetrie predstavujúca len rotáciu, pri ktorej nedochádza ku kombinácii so zrkadlením alebo inverziou; determinant jej transformačnej matice má hodnotu $+1$

nevlastná operácia symetrie (syn. operácia symetrie 2. druhu, enantiomorfная operácia symetrie, nevlastná rotácia)

operácia symetrie predstavujúca zrkadlenie, inverziu alebo ich kombináciu s rotáciou; determinant jej transformačnej matice má hodnotu -1

uzavretá operácia symetrie

operácia symetrie, ktorej určitá viacnásobná aplikácia je zhodná s identickou operáciou, t. j. privedie transformovaný útvar do východiskovej polohy

Pri kryštáloch ide o rotácie s násobnosťami $n = 2, 3, 4$ a 6 , o inverziu a o zrkadlenie. Pri rotáciách sa dostane útvar do východiskovej polohy n -násobnou aplikáciou, pri inverzii a zrkadlení dvojnásobnou aplikáciou operácie.

otvorená operácia symetrie

operácia symetrie, ktorej žiadnym viacnásobným aplikovaním nie je možné útvar priviesť do východiskovej polohy, ale iba do polohy geometricky ekvivalentnej, posunutej o niektorý zo základných vektorov alebo o výsledok ich lineárnej kombinácie

Pri kryštáloch ide o zložené operácie symetrie – kombináciu niektorej rotácie s násobnosťou $n = 2, 3, 4$ a 6 s transláciou o zlomok periódy identity ($1/2$, $1/3$, $1/4$ alebo $1/6$). Pri zrkadlení prichádzajú do úvahy translácie o polovicu základného vektora (osové sklzné roviny), o polovicu alebo štvrtinu súčtu základných vektorov (diagonálne sklzné roviny a diamantové sklzné roviny).

bodová operácia symetrie

operácia symetrie, ktorá zachováva polohu aspoň jedného bodu transformovaného objektu

Môže ísť o otočenie (rotáciu), zrkadlenie a inverziu.

otočenie (syn. rotácia)

bodová operácia symetrie, pri ktorej sa útvar dostane do zhodnej polohy otočením okolo osi symetrie o určitý uhol; pri kryštáloch ide len o uhly 60° , 90° a ich celočíselné násobky

zrkadlenie (syn. reflexia)

bodová operácia symetrie, pri ktorej sa body priestoru prezrkadlia na opačnú stranu roviny súmernosti pozdĺž priamok kolmých na túto rovinu, pri zachovaní vzdialenosti od nej

inverzia

bodová operácia symetrie, pri ktorej sa body so súradnicami (xyz) transformujú do novej polohy so súradnicami s opačnými znamienkami $(\bar{x}\bar{y}\bar{z})$

Táto definícia platí, keď stred súmernosti leží v začiatku súradnicovej sústavy.

mriežková translácia

operácia symetrie predstavujúca súčasné posunutie všetkých bodov kryštálu o niektorý mriežkový vektor

rotoinverzia

zložená operácia symetrie predstavujúca kombináciu rotácie okolo osi symetrie a inverzie vzhľadom na bod ležiaci na tejto osi

rotoreflexia

zložená operácia symetrie predstavujúca kombináciu rotácie okolo osi symetrie a zrkadlenia podľa roviny kolmej na túto os

identita

prvok grupy operácií symetrie, ktorý z algebrického hľadiska má význam neutrálneho prvku; identita nemení polohu objektu, objekt sa netransformuje (napr. rotácia o 0° alebo o 360°)

grupa symetrie

množina všetkých operácií symetrie objektu z algebrického hľadiska tvoriaca grupu, v ktorej je binárnou operáciou postupné vykonanie dvoch operácií symetrie za sebou, výsledkom čoho je vo všeobecnosti iná operácia symetrie

kryštalografická grupa symetrie

grupa symetrie kryštálu alebo kryštálovej štruktúry, v ktorej prvkami grupy sú rôzne kryštalografické operácie symetrie – otočenie, zrkadlenie, translácia, inverzia a ich kombinácie

Rozhodujúci vplyv na možné operácie symetrie, na ich počet a kombinácie má translačná periodicita kryštálových štruktúr. V kryštalografii sa rozlišujú translačné, bodové, rovinné a priestorové grupy symetrie.

supergrupa symetrie (syn. nadgrupa symetrie)

grupa symetrie obsahujúca podgrupy symetrie

podgrupa symetrie

grupa, ktorá je podmnožinou niektorej grupy symetrie

prvok symetrie

množina bodov (bod, priamka alebo rovina), podľa ktorej sa vykonávajú operácie symetrie

Prvkami symetrie sú **rotačné osi** (s násobnosťou 1, 2, 3, 4 a 6), **rotoinverzné osi** ($\bar{3}$, $\bar{4}$ a $\bar{6}$), **skrutkové osi** (2_1 , 3_1 , 3_2 , 4_1 , 4_2 , 4_3 , 6_1 , 6_2 , 6_3 , 6_4 , 6_5), **zrkadlové roviny** (m), **osové sklzné roviny** (a , b , c), **diagonálne sklzné roviny** (n), **diamantové sklzné roviny** (d) a **stred súmernosti** ($\bar{1}$). Prvky symetrie nemožno zamieňať s prvkami grúp symetrie!

kryštalografická bodová grupa

grupa symetrie, ktorej prvkami sú len bodové kryštalografické operácie symetrie

Pri dvojrozmerných objektoch s periodickou štruktúrou sa rozlišuje 10 rovinných bodových grúp, pri trojrozmerných objektoch je počet bodových grúp opisujúcich symetriu kryštálov 32. Ide o konečné grupy, v ktorých počet operácií symetrie udáva rád grupy, a tým aj násobnosť všeobecnej polohy, ktorá môže dosiahnuť hodnotu najviac 48. Bodová grupa charakterizuje symetriu smerovo závislých fyzikálnych a geometrických vlastností kryštálov. Rozlišujú sa bodové grupy $\rightarrow$ centrosymetrické, $\rightarrow$ enantiomorfné a $\rightarrow$ polárne, pričom grupy $\bar{6}$, $\bar{4}2m$, $\bar{4}$ nepatria do žiadnej z týchto skupín. Bodové grupy s maximálnou ná-

sobnosťou všeobecnej polohy v sústavách sa označujú ako **holoédrické** (sú totožné s bodovými grupami mriežok). V **meroédrických** bodových grupách, ktoré sa delia na **hemiédrické**, **tetartoédrické** a **ogdoédrické**, klesá násobnosť všeobecnej polohy na polovicu, štvrtinu, resp. osminu. Prehľad všetkých bodových grúp spolu s $\rightarrow$ Laueho grupami je v tab. 2. Dve z bodových grúp, a to $\bar{6}$ a 432, nemajú medzi kryštalickými látkami nespochybniteľných zástupcov.

centrosymetrická bodová grupa

bodová grupa obsahujúca inverziu

Ide o jedenásť grúp s medzinárodnými symbolmi $\bar{1}$, $2/m$, mmm , $4/mmm$, $4/m$, $6/mmm$, $6/m$, $\bar{3}2/m$, $\bar{3}$, $m\bar{3}m$ a $m\bar{3}$; sú totožné s $\rightarrow$ Laueho grupami. Grupy neobsahujúce inverziu sa nazývajú **necentrosymetrické bodové grupy**.

enantiomorfná bodová grupa

bodová grupa, ktorej prvkami sú len vlastné rotácie

Ide o grupy s medzinárodnými symbolmi 1, 2, 222, 4, 422, 3, 32, 6, 622, 432 a 23.

polárna bodová grupa

bodová grupa, v ktorej sa nevyskytuje kombinácia vlastnej rotácie s inverziou, so zrkadlením v rovine kolmej na rotačnú os alebo s rotáciou okolo dvojnásobnej osi kolmej na túto os

Ide o grupy s medzinárodnými symbolmi 1, 2, 3, 4, 6, m , $mm2$, $3m$, $4mm$ a $6mm$, ktoré sa označujú aj ako hemimorfne. Polárnymi bodovými grupami sa charakterizuje symetria kryštálov s polárnymi vlastnosťami.

polárny smer

smer v kryštálovej štruktúre, ktorý nie je ekvivalentný so smerom k nemu opačným

Polárne smery sa vyskytujú len v štruktúrach s necentrosymetrickou bodovou grupou symetrie. Polárnych smerov v týchto štruktúrach je nekonečne veľa. Smery, ktoré nie sú polárne, sa vyznačujú špecifickou orientáciou vzhľadom na prvky symetrie, napr. sú kolmé na rotačné osi s násobnosťou 2, alebo na zrkadlové roviny.

jedinečný smer (syn. jedinečná polárna os)

smer v kryštálovej štruktúre, ktorý je jediný a ktorý je invariantný vzhľadom na všetky operácie symetrie bodovej grupy danej štruktúry

Jedinečný smer v danej štruktúre môže byť len jeden, preto sa nevyskytuje v štruktúrach s polárnymi bodovými grupami 1 (invariantnými sú všetky smery) a m (invariantnými sú všetky smery ležiace v zrkadlovej rovine). Nachádzajú sa len v ôsmich polárnych bodových grupách 2, 3, 4, 6, $mm2$, $3m$, $4mm$ a $6mm$ a sú

rovnobežné s príslušnými rotačnými osami s násobnosťou 2, 3, 4 a 6. Jedinečný smer je vždy aj polárny.

nekryštalografická bodová grupa

bodová grupa, v ktorej sa vyskytujú nekryštalografické bodové operácie symetrie

translačná grupa

množina všetkých mriežkových translácií priestorovo neohraničenej kryštálovej štruktúry

Jestvuje 14 rôznych typov translačných grúp priestorových mriežok a päť typov translačných grúp rovinných mriežok. Z hľadiska bodovej symetrie sa zaraďujú do kryštalografických sústav – priestorové do siedmich, rovinné do štyroch.

rovinná bodová grupa

grupa symetrie predstavujúca množinu operácií symetrie rovinného objektu, ktorá obsahuje len bodové operácie symetrie

Pri kryštáloch sa rozlišuje 10 rovinných bodových grúp: 1, 2, 3, 4, 6, m , $2mm$, $4mm$, $3m$, $6mm$. Podľa nich sú súmerné jednotlivé plochy kryštálových tvarov idiomorfných kryštálov, tvar a usporiadanie leptových obrazcov na nich, lauegramy, precesné snímky, SAED, CBED a Kikučiho obrazce.

rovinná grupa

grupa symetrie predstavujúca množinu operácií symetrie neohraničenej rovinatej štruktúry s dvojrozmernou periodicitou; obsahuje bodové i translačné operácie symetrie, ako aj ich kombinácie

Pomocou rovinných grúp sa posudzuje symetria rezov a projekcií kryštálovej štruktúry. Rovinných grúp je 17 a spolu s bodovými rovinnými grupami sa uvádzajú v tab. 2.

priestorová grupa

grupa symetrie predstavujúca množinu operácií symetrie neohraničenej štruktúry s trojrozmernou periodicitou; obsahuje bodové i translačné operácie symetrie, ako aj ich kombinácie vrátane kombinácií s určitými nemriežkovými transláciami; označuje sa symbolom priestorovej grupy

Jestvuje 230 priestorových grúp kryštálových štruktúr (pozri tab. 3) vrátane 11 enantiomorfných párov. Po ich zohľadnení zostáva 219 afinity grúp.

symbol priestorovej grupy

symbol charakterizujúci danú priestorovú grupu

Symbolom priestorovej grupy môže byť poradové číslo grupy, Schoenfliesov symbol (napr. T_d^2) alebo Hermannov-Mauguinov (medzinárodný) symbol

(napr. $F\bar{4}3m$). Prvé dve možnosti prakticky neobsahujú informácie o prvkoch symetrie priestorovej grupy, zatiaľ čo z medzinárodných symbolov sa v obmedzenej miere dajú získať.

kryštalografická oblasť

množina všetkých bodov v kryštálovej štruktúre, ktoré z niektorého zvoleného bodu vzniknú transformáciami zodpovedajúcimi všetkým operáciám symetrie príslušnej priestorovej grupy

Vzhľadom na existenciu translačnej symetrie je to nekonečne početná množina bodov.

grupa symetrie polohy

podgrupa priestorovej grupy obsahujúca len tie operácie symetrie, vzhľadom na ktoré je uvažovaná poloha invariantná

Príslušná vlastnosť uvažovanej polohy (bodu) v kryštálovej štruktúre sa nazýva **symetria polohy**. S ohľadom na prvky súmernosti danej štruktúry body môžu ležať na niektorom z nich, t. j. v špeciálnej polohe, alebo na žiadnom z nich, t. j. vo všeobecnej polohe.

Wyckoffova poloha

množina bodov v kryštálovej štruktúre, ktorých grupy symetrie polohy sú združenými podgrupami príslušnej priestorovej grupy

Počet Wyckoffových polôh v každej priestorovej grupe je konečný, dosahuje maximálne číslo 27. Každá poloha v základnej bunke je charakterizovaná násobnosťou polohy, **Wyckoffovým symbolom** (pomocou neho sa rozlišujú rozličné polohy s rovnakou násobnosťou) a symbolom prvku (prvkov) súmernosti, na ktorom (ktorých) sa daná poloha nachádza. Napríklad v priestorovej grupe $Pnma$ jestvuje všeobecná poloha $8d$, špeciálne polohy $4c$, $4b$ a $4a$.

všeobecná poloha

poloha v základnej bunke zodpovedajúca bodu, ktorý nie je umiestnený na žiadnom z prvkov symetrie príslušnej kryštálovej štruktúry

Takýto bod pri každej operácii symetrie mení svoju polohu, pričom počet rôznych polôh, ktoré postupne môže zaujať, sa nazýva **násobnosť polohy**. Tá závisí od priestorovej grupy opisujúcej symetriu príslušnej kryštálovej štruktúry, môže nadobúdať maximálnu hodnotu 192.

špeciálna poloha

poloha v základnej bunke zodpovedajúca bodu umiestnenému aspoň na jednom z prvkov symetrie konkrétnej kryštálovej štruktúry, napr. na osi, rovine súmernosti alebo ich kombinácii

A3 Symetria kryštálov a ich štruktúr

Pri transformáciách spojených s prvkami súmernosti, na ktorých bod leží, sa jeho poloha nemení, takže násobnosť takejto polohy je menšia než násobnosť všeobecnej polohy.

symorfná grupa

niektorá zo 73 priestorových grúp, ktoré neobsahujú skrutkové osi ani sklznú roviny

Symorfné priestorové grupy popri operáciách translačnej grupy obsahujú len bodové operácie symetrie – rotáciu, zrkadlenie, inverziu alebo rotoinverziu.

izogonálne priestorové grupy

súbor priestorových grúp, ktoré obsahujú rovnakú množinu bodových operácií (majú rovnakú bodovú grupu) vrátane takých bodových operácií, ktoré sú v priestorovej grupe súčasťou zložených operácií symetrie

Šubnikovove grupy (syn. magnetické grupy, čiernobiele grupy)

zovšeobecnené bodové, translačné a priestorové grupy symetrie kryštalických látok rozšírené o operáciu antisymetrie a zohľadňujúce nielen polohu atómov, ale aj niektorý ich ďalší parameter, ktorý môže nadobúdať dve rôzne hodnoty (napr. dva možné smery magnetického momentu, dve komplementárne farby)

Týchto grúp je 1651.

farebné grupy (syn. Belovove grupy)

zovšeobecnenie Šubnikovových grúp na prípad, keď dodatkový parameter charakterizujúci niektoré z atómov kryštálu môže nadobúdať viac než dve hodnoty

A 4 Bodová symetria a fyzikálne vlastnosti kryštálov

grupa symetrie fyzikálnej vlastnosti

množina takých ortogonálnych transformácií kryštálu, ktoré vo všetkých bodoch vzťahnej sústavy zachovávajú hodnoty veličiny charakterizujúcej túto vlastnosť kryštálu

Pritom môže ísť o vlastnosť opísanú skalárnou veličinou (napr. hustotu kryštálu), vektorovou veličinou (napr. elektrickú polarizáciu) alebo tenzorovou veličinou druhého i vyšších stupňov (napr. permitivitu, moduly pružnosti).

Neumannov princíp

princíp, podľa ktorého grupa symetrie každej fyzikálnej vlastnosti kryštálu musí obsahovať všetky operácie symetrie jeho bodovej grupy

Bodová grupa symetrie kryštálovej štruktúry je podgrupou grupy symetrie ktorejkoľvek jeho fyzikálnej vlastnosti. Matematickým vyjadrením Neumannovho princípu je Voigtov princíp. Zistenie prítomnosti určitej vlastnosti kryštálu napomáha pri určení jeho symetrie, umožňuje vylúčiť niektoré bodové grupy. Napr. piezoelektrické, pyroelektrické alebo opticky aktívne kryštály nemôžu mať stred súmernosti. Neumannov princíp vyjadruje nevyhnutnú, ale nie postačujúcu podmienku na prítomnosť určitej vlastnosti.

Voigtov princíp

princíp, podľa ktorého tenzor ľubovoľnej fyzikálnej vlastnosti kryštálu musí byť invariantný voči transformáciám zodpovedajúcim bodovej grupe tohto kryštálu

Princíp sa vzťahuje na tenzory všetkých stupňov, teda na skalárne veličiny, vektorové veličiny aj na tenzorové veličiny druhého a vyšších stupňov.

Curieho princíp

princíp, podľa ktorého kryštál pod vplyvom vonkajšieho účinku mení svoju symetriu tak, že si zachováva tie prvky bodovej symetrie, ktoré sú spoločné s prvkami symetrie vonkajšieho účinku

Vplyvom vonkajšieho pôsobenia zostane z pôvodnej bodovej grupy kryštálu len jej podgrupa, ktorá predstavuje najvyššiu spoločnú podgrupu operácií symetrie kryštálu a pôsobiaceho účinku; pritom sa musí zohľadniť aj ich vzájomná priestorová orientácia.

pyroelektrická bodová grupa

niektorá z bodových grúp symetrie kryštálov, v ktorých sa vzhľadom na Neumannov princíp môže uplatniť **pyroelektrický jav**, t. j. vznik elektrickej polarizácie pri homogénnej zmene teploty

Pyroelektrický jav patrí medzi polárne vlastnosti kryštálov, takže príslušné bodové grupy musia byť podgrupami grupy symetrie polárnej vektorovej veličiny. Túto podmienku spĺňa 10 polárnych bodových grúp: 1, 2, 3, 4, 6, m , $mm2$, $3m$, $4mm$, $6mm$.

piezoelektrická bodová grupa

niektorá z bodových grúp symetrie kryštálov, v ktorých sa vzhľadom na Neumannov a Curieho princíp môže uplatniť **piezoelektrický jav**, t. j. vznik elektrickej polarizácie, keď sú kryštály mechanicky deformované

Piezoelektrický jav patrí medzi polárne vlastnosti kryštálov, preto príslušné bodové grupy musia byť podgrupami grupy symetrie polárnej vektorovej veličiny. Ide o 20 bodových grúp neobsahujúcich inverziu, ktoré sa delia na dve skupiny. Pri kryštáloch so spontánnou elektrickou polarizáciou je to 10 polárnych grúp: 1, 2, 3, 4, 6, m , $mm2$, $3m$, $4mm$, $6mm$. Pri kryštáloch, v ktorých polarizácia môže vzniknúť vplyvom vonkajšieho elektrického poľa (v súlade s Curieho princípom), sú to grupy 222 , $\bar{4}$, 422 , $\bar{4}2m$, 32 , $\bar{6}$, $\bar{6}m2$, 622 , $\bar{4}3m$, 23 . Osobitným prípadom je necentrosymetrická grupa 432 , ktorá neobsahuje inverziu, ale kombinácia ostatných operácií symetrie vylučuje vznik piezoelektrického javu. Táto grupa zároveň nemá medzi kryštalickými látkami nespochybniteľného zástupcu.

Optické vlastnosti kryštálov

prírodné svetlo

svetlo, ktoré je zmesou lineárne polarizovaných elektromagnetických vln s frekvenciami z viditeľnej oblasti spektra a z jej blízkych oblastí, pričom všetky roviny kmitov vektora intenzity elektrického poľa sú zastúpené s rovnakou pravdepodobnosťou

Pre takéto svetlo sa používa aj pomenovanie **nepolarizované svetlo**.

polarizované svetlo

svetlo, ktorého elektromagnetická vlna je lineárne, kruhovo alebo elipticky polarizovaná

Pri **lineárnej polarizácii** vektor intenzity elektrického poľa tejto vlny kmitá v danom mieste stále v jednej priamke (kolmej na smer šírenia vlny), pri **eliptickej polarizácii** sa jeho smer mení tak, že koncový bod vektora opisuje elipsu, a pri **kruhovej polarizácii** opisuje kružnicu.

lom svetla

jav na rozhraní dvoch prostredí s rôznymi indexmi lomu, pri ktorom časť svetla prechádza rozhraním a mení svoj smer

Významnou charakteristikou z hľadiska lomu svetla je index lomu. Osobitným prípadom lomu svetla je dvojlom, ku ktorému dochádza na rozhraní s anizotropnými látkami.

opticky izotropné prostredie

prostredie, v ktorom rýchlosť svetla nezávisí od smeru jeho šírenia

Opticky izotropné sú amorfné látky a kubické kryštály.

opticky anizotropné prostredie

prostredie, v ktorom rýchlosť svetla závisí od smeru jeho šírenia

Smerová závislosť indexu lomu sa zobrazuje pomocou elipsoidu indexu lomu. Opticky anizotropné sú všetky kryštalické látky s výnimkou tých, ktoré patria do kubickej kryštalografickej sústavy.

dvojlom svetla

rozštiepenie lúča prirodzeného svetla pri vstupe do opticky anizotropného prostredia na dva lúče – riadny lúč a mimoriadny lúč –, ktoré sú lineárne polarizované v navzájom kolmých rovinách; miera dvojlomu sa hodnotí rozdielom veľkostí indexov lomu zodpovedajúcich týmto lúčom

Riadnemu lúču zodpovedá index lomu n_o , mimoriadnemu n_e , pričom podľa rozdielu týchto indexov sa posudzuje optický charakter kryštálu. Dvojlom sa prejavuje pri kryštáloch, ktoré sú opticky jednoosové alebo opticky dvojosové. Veľkosť rozštiepenia závisí od smeru svetelného lúča vzhľadom na optické osi kryštálu, pri šírení v smere optickej osi dvojlom nevzniká.

riadny lúč

jeden z lúčov vznikajúcich pri dvojlome, ktorý sa podriaduje zákonu lomu – nevybočuje z roviny dopadu

Index lomu riadneho lúča sa zvyčajne označuje ako n_o .

mimoriadny lúč

jeden z lúčov vznikajúcich pri dvojlome, ktorý sa nepodriaduje zákonu lomu, napr. vybočuje z roviny dopadu

Index lomu mimoriadneho lúča sa zvyčajne označuje ako n_e .

optický charakter kryštálu

kvalitatívny parameter charakterizujúci dvojlomný kryštál určený znamienkom rozdielu indexov lomu $n_e - n_o$ mimoriadneho a riadneho lúča

Pri jednoosových kryštáloch sú dva indexy lomu označované v súlade so značkami optických smerov ako n_ε a n_ω . Ak $n_\varepsilon > n_\omega$, tak optický charakter kryštálu sa považuje za kladný, v opačnom prípade za záporný. Pri dvojosových kryštáloch sú indexy lomu zodpovedajúce trom optickým smerom označované ako n_α, n_β a n_γ . Ak $n_\gamma > n_\alpha$, tak optický charakter kryštálu sa považuje za kladný, v opačnom prípade za záporný. Optický charakter sa zisťuje pomocou

polarizačného mikroskopu určením vzťahu medzi orientáciou optických smerov elipsoidu indexu lomu a dominantnými morfológickými smermi kryštálu.

elipsoid indexu lomu (syn. indikatrix)

plocha tvaru elipsoidu, pri ktorej vzdialenosť ľubovoľného bodu A na povrchu plochy od jej stredu O je úmerná indexu lomu pri takej svetelnej vlne, ktorej vektor elektrickej indukcie kmitá rovnobežne so spojnicou týchto bodov

Tvar a orientácia elipsoidu indexu lomu vzhľadom na osi kryštálu závisí od symetrie kryštálu a metriky mriežky. V kubickej sústave má tvar guľovej plochy, v hexagonálnej, trigonálnej a tetragonálnej sústave tvar plochy rotačného elipsoidu s rotačnou osou rovnobežnou v hexagonálnej sústave so šesťnásobnou osou symetrie, v trigonálnej sústave s trojnásobnou a v tetragonálnej sústave so štvornásobnou osou symetrie. V ostatných sústavách má tvar plochy všeobecného, t. j. trojosového elipsoidu.

Ide o zaužívaný kryštalografický termín, v ktorom sa pod pojmom elipsoid nerozumie teleso, ale len jeho povrchová plocha.

optický smer

jeden zo smerov totožných s osami elipsoidu indexu lomu

V kryštáloch s rotačne symetrickým elipsoidom indexu lomu sú významné dva optické smery – smer rotačnej osi a ľubovoľný smer na ňu kolmý, pre ktoré sa používajú označenia ε a ω . Pri všeobecnom elipsoide ide o tri smery na seba kolmé s označením α , β a γ .

optická os kryštálu

smer v kryštáli, v ktorom nedochádza k dvojlomu šíriaceho sa svetla; používa sa aj názov smer izotropie

Pri $\rightarrow$ opticky jednoosových kryštáloch existuje jediná optická os vždy totožná s niektorým optickým smerom (ε alebo ω). Pri $\rightarrow$ opticky dvojosových kryštáloch zvierajú optické osi určitý uhol, ktorého osou sú optické smery α alebo γ . Optický smer β je vždy kolmý na rovinu určenú optickými osami a je označovaný ako **optická normála**.

opticky jednoosový kryštál

kryštál s rotačne symetrickým elipsoidom indexu lomu, v ktorom existuje iba jediný hlavný rez s kruhovým tvarom; smer optickej osi kryštálu je kolmý na rovinu hlavného rezu a je totožný s rotačnou osou elipsoidu

K jednoosovým patria kryštály zaradené do hexagonálnej, trigonálnej alebo tetragonálnej kryštalografickej sústavy.

opticky dvojosový kryštál

kryštál so všeobecným (trojosovým) elipsoidom indexu lomu, v ktorom existujú dva hlavné rezy s tvarom kruhu; smery kolmé na roviny týchto rezov sú optickými osami kryštálu

K dvojsovým patria kryštály zaradené do rombickej, monoklinickej alebo triklinickej kryštalografickej sústavy.

polarizačný mikroskop

optický mikroskop slúžiaci na štúdium optických vlastností kryštálov v polarizovanom svetle

Okrem bežnej optickej sústavy (objektívu a okuláru) má otočný stolík, dva kryštálové hranoly nazývané aj nikoly (spodný sa označuje ako polarizátor a horný ako analyzátor), Bertrandovu šošovku a ako príslušenstvo sa používajú kompenzátory. Polarizačný mikroskop umožňuje študovať priesvitné kryštály (mikroskopia v prechádzajúcom svetle), ale aj nepriesvitné (opacitné) kryštály v odrazenom svetle (mikroskopia v odrazenom svetle). Pri nepriesvitných kryštáloch možno na základe dvojodrazu rozlíšiť len to, či ide o izotropný alebo anizotropný kryštál.

polarizátor

polarizačný hranol (spodný nikol), ktorým sa vytvára lineárne polarizované svetlo

V polarizačnom mikroskope je umiestnený medzi zdroj prirodzeného svetla a vzorku.

analyzátor

polarizačný hranol (horný nikol) umiestňovaný medzi vzorku a okulár, ktorý sa môže nastaviť tak, aby jeho polarizačná rovina s polarizačnou rovinou polarizátora zvierala uhol od 0° po 90°

Najčastejšie sa používa konfigurácia so skríženými nikolmi, pri ktorej ich polarizačné roviny zvierajú uhol 90° . Umožňuje rozlíšiť opticky izotropné a opticky anizotropné (jednoosové a dvojsové) kryštály, určovať spôsob zhášania, charakter zóny a optický charakter kryštálu. Konfigurácia s rovnobežnými nikolmi umožňuje určiť len morfológiu kryštálov a pleochroizmus.

Bertrandova šošovka

optický prvok umožňujúci premenu mikroskopického obrazu na interferenčný obrazec

Používa sa na rozlišovanie opticky jednoosových a opticky dvojsových látok a pri určovaní optického charakteru kryštálu.

kompenzátor

optický prvok, ktorý sa zasúva medzi vzorku a analyzátor tak, aby jeho významný optický smer zvieral s polarizačnou rovinou uhol 45° ; slúži na určovanie interferenčnej farby a jej rádu, ako aj optického charakteru kryštálu

Ako kompenzátory sa používajú planparalelné platničky zo sadrovca a sludy alebo kremenná platnička klinovitého tvaru.

pleochroizmus

zmena farby kryštálu pozorovaná v prechádzajúcom svetle pri zmene smeru alebo roviny polarizácie svetelnej vlny

Pozoruje sa v polarizačnom mikroskope pri rovnobežných nikoloch otáčaním kryštálu. Nevyskytuje sa pri všetkých kryštalických látkach, preto má diagnostický význam.

interferenčná farba

farba vznikajúca interferenciou jednotlivých zložiek bieleho svetla na dvojlomnom kryštáli, ktorú ovplyvňuje výraznosť dvojlomu a hrúbka kryštálu

zhášanie

postupné tmavnutie až úplné sčernanie celého obrazu kryštálu v zornom poli polarizačného mikroskopu pri rotácii stolíka mikroskopu; opakuje sa po otočení o 90° ; úplné sčernanie vzniká vtedy, keď niektorý optický smer kryštálu leží v polarizačnej rovine polarizátora alebo analyzátora

S ohľadom na morfológiu kryštálov a metriku kryštalografickej sústavy môže zhášanie nastať vtedy, keď dominantný morfológický smer kryštálu je s rovinou polarizátora rovnobežný (rovnobežné zhášanie) alebo s ňou zvierá určitý uhol (šikmé zhášanie). Jednoosové látky sú pri pohľade v smere $[001]$ stále tmavé, pri pohľade v iných smeroch nastáva rovnobežné zhášanie. Dvojosové kryštály z rombickej sústavy majú rovnobežné zhášanie v ľubovoľnej orientácii, monoklinické kryštály majú šikmé zhášanie pri pohľade v smere $[010]$ a rovnobežné zhášanie pri pohľade v ostatných smeroch, triklinické kryštály zhášajú v ľubovoľnej orientácii šikmo. Veľkosť uhla zhášania má diagnostický význam.

undulózne zhášanie

typ zhášania, pri ktorom otáčaný kryštál stmavne len v nepravidelne ohraničených častiach zhášajúcich pri mierne sa líšiacich uhloch

Spôsobujú ho plastické deformácie kryštálov; môže mať diagnostický význam (je typické pre α -kremeň).

agregátne zhášanie

typ zhášania, pri ktorom otáčaným kryštálom prechádza len tmavý pruh

Vyskytuje sa pri nedokonale rekryštalizovaných géloch.

konoskopický interferenčný obrazec

interferenčný obrazec, ktorý možno získať z obrazu vytvoreného v polarizačnom mikroskope pri skrížených nikoloch pomocou Bertrandovej šošovky; na jeho zviditeľnenie je potrebné maximálne zväčšenie obrazu a zbiehavé primárne svetlo

Pri jednoosových látkach má tvar maltézskeho kríža, ktorý sa pri pohľade v smere optickej osi počas otáčania stolíka mikroskopu nepohybuje a nemení.

Pri dvojsoových látkach má pri pohľade v optickom smere α alebo γ tvar dvojice hyperbol umiestnených v protiláhlých kvadrantoch, ktoré sa pri otáčaní stolíka mikroskopu pohybujú a po rotácii o 90° sa premiestnia do ďalších dvoch kvadrantov.

optická aktívnosť

vlastnosť látky (optického prostredia) prejavujúca sa tým, že rovina polarizácie lineárne polarizovaného svetla prechádzajúceho prostredím sa postupne otáča; smer šírenia svetla sa pri tom nemení

Opticky aktívne kryštály nemajú stred súmernosti, pričom nemusia byť dvojločné. Medzi takéto patria kryštály charakterizované niektorou z 15 necentrosymetrických bodových grúp, z toho 11 enantiomorfných grúp (1, 2, 222, 422, 4, 3, 32, 6, 622, 432 a 23) a štyroch ďalších, ktoré nie sú enantiomorfné (m , $mm2$, $\bar{4}$ a $\bar{4}2m$). V kryštáloch s inými necentrosymetrickými bodovými grupami optická aktívnosť nie je možná.

optická otáčavosť

veličina definovaná ako podiel veľkosti uhla pootočenia polarizačnej roviny a dĺžky, ktorú prešlo optickým prostredím lineárne polarizované svetlo počas pootočenia

V opticky izotropných prostrediach je to skalárna veličina (pseudoskalár), v opticky anizotropných prostrediach jej veľkosť závisí od smeru šírenia svetla a vyjadruje sa pomocou axiálneho tenzora druhého stupňa nazývaného **gyračný tenzor**. Počet nezávislých súradníc tohto tenzora závisí od bodovej grupy kryštálu. V triklinickej grupe 1 má šesť nezávislých súradníc, v grupe 2 má štyri nezávislé súradnice, v grupe 222 tri nezávislé súradnice, v grupách 4, $\bar{4}$, 3, 32, 6, 622 má dve nezávislé súradnice a v grupách $\bar{4}2m$, 432, 23 je len jedna nezávislá súradnica, t. j. tenzor tam degeneruje na skalárnu veličinu. V prípade centrosymetrických grúp sú všetky súradnice nulové, lebo takéto kryštály nemôžu byť opticky aktívne. Všetky súradnice sú nulové aj v necentrosymetrických grupách $4mm$, $\bar{4}3m$, $3m$, $6mm$, $\bar{6}$ a $\bar{6}m2$.

leptový obrazec

obrazec, ktorý vzniká na plochách kryštálov pri ich odparovaní alebo rozpúšťaní pri použití slabých, opticky neaktívnych rozpúšťadiel; poskytuje informáciu o rovinnej bodovej symetrii plochy

Tvar a rozloženie leptových obrazcov je symetrické podľa niektorej z 10 rovinných bodových grúp. Leptové obrazce sa využívajú pri určovaní Millerových indexov plôch a pri zisťovaní, či ide o plochu vo všeobecnej, v špeciálnej alebo limitnej polohe.

A 5 Zrasty kryštálov

zrast kryštálov

tesné zoskupenie dvoch alebo viacerých kryštálových jedincov tej istej fázy, prípadne aj rozličných fáz

Podľa spôsobu zrastania sa rozlišujú náhodné zrasty, rovnobežné narastania a kryštalograficky orientované zrasty (penetračné, meroédrické, pseudomeroédrické, racemické); spôsoby zrastania sa označujú aj ako zrastové zákony. Podľa spôsobu vzniku sa rozlišujú rastové, transformačné a deformačné typy zrastov. Od monokryštálov sa zrasty dajú odlíšiť možnou prítomnosťou dutých uhlov medzi kryštálovými plochami a rozličnou orientáciou optických smerov a optických osí zrastených jedincov. V angličtine sa pre všetky typy zrastov bez ohľadu na počet jedincov používa výraz crystal twin – **dvojča** a pre proces zrastania výraz twinning – **dvojčatenie**.

náhodný zrast

zrast, pri ktorom kryštály navzájom náhodne zrastajú bez akýchkoľvek obmedzení a bez akýchkoľvek vplyvov ich kryštálovej štruktúry

rovnobežné narastanie

narastanie, pri ktorom sú jednotlivé kryštálové jedince orientované tak, že všetky geometricky ekvivalentné plochy (plochy s rovnakými Millerovými indexmi) sú rovnobežné

Zároveň sú rovnobežné alebo totožné aj prvky súmernosti jednotlivých kryštálov zodpovedajúce ich operáciám súmernosti.

zrastová operácia

operácia, ktorou sú zrastajúce jedince navzájom súmerne združené; môže ísť o zrkadlenie rovinou, rotáciu okolo osi (rotácia o 180°, 120°, 90° alebo 60°) alebo o inverziu, pričom tieto operácie nie sú prvkami bodovej grupy príslušnej fázy

V angličtine sa pre všetky zrastové operácie bez ohľadu na počet jedincov používa výraz twin operation. V niektorej slovenskej literatúre sa pod týmto vplyvom používa výraz **operácia dvojčatenia**.

kryštalograficky orientovaný zrast

typ zrastu, ktorý je jednoznačne definovaný zrastovou operáciou a rovinou styku označovanou ako kompozičná rovina

Dva zrastajúce kryštály vytvárajú **dvojča**, tri kryštály trojča atď., maximálny počet zrastajúcich jedincov je 48. Spôsoby takéhoto zrastania sa často (ale nie veľmi vhodne) označujú ako zrastové zákony.

kompozičná rovina

rovina styku zrastajúcich kryštálových jedincov

Ako ekvivalentný termín sa používa aj označenie **rovina dvojčatenia**

zrastový zákon

spôsob zrastania pomenovaný podľa miesta výskytu (napr. karlovarský, baven-
ský, manebašský, brazílsky, japonský zákon), podľa tvaru (kolienkový zrast ru-
tilu a kasiteritu) a podľa typickej kryštalickej fázy (spinelový zákon)

kontaktný zrast

zrast, pri ktorom sa kryštálové jedince (dva alebo viac) stýkajú v jednej rovine;
jednoznačne ho definuje zrastová operácia a kompozičná rovina

penetračný zrast (syn. prerastlica)

zrast, ktorý je tvorený navzájom prerastajúcimi kryštálovými jedincami; jedno-
značne ho definuje zrastová operácia a kompozičná rovina

cyklický zrast

zrast viacerých jedincov podľa tej istej zrastovej operácie, pričom kompozičné
roviny nie sú rovnobežné, ale patria do jednej zóny

polysyntetický zrast

mnohonásobne opakovaný zrast s rovnakou zrastovou operáciou a rovnobež-
nými kompozičnými rovinami

mimetický zrast

kryštalograficky orientovaný zrast, pri ktorom v porovnaní s monokryštálom
dochádza k zdanlivému zvýšeniu symetrie zrastením jedincov tvoriacich agregát

meroédrický zrast

zrast, pri ktorom zrastová operácia patrí do bodovej grupy priestorovej mriežky
zrastajúcich jedincov, ale nepatrí do jej podgrupy opisujúcej symetriu ich kryš-
tálovej štruktúry

V takomto prípade sa reciproké mriežky zrastajúcich jedincov úplne stotož-
nia, takže jedince nie je možné rozlíšiť na základe difraktogramov. Tieto zrasty,
ktoré sa neprejavujú navonok, sa dajú zistiť len pri riešení a spresňovaní kryštá-
lových štruktúr.

pseudomeroédrický zrast

zrast, pri ktorom zrastová operácia patrí do bodovej grupy, ktorá opisuje symet-
riu štruktúr patriacich do kryštalografickej sústavy s vyššou symetriou, než je
symetria štruktúry zrastajúcich jedincov

Podobne ako pri meroédrických zrastoch môže takýto prípad nastať vtedy,
keď symetria mriežky zrastajúcich jedincov je vyššia než symetria ich štruktúry.
V závislosti od miery realizácie vyššej symetrie môže nastať situácia, že reci-

proké mriežky zrastajúcich jedincov sa natoľko stotožnia, že ich nie je možné rozlíšiť na základe difraktogramov. V porovnaní s meroédrickými zrastmi sa v tomto prípade môže uplatniť omnoho väčší počet zrastových zákonov.

racemický zrast

špeciálny prípad meroédrického zrastu, keď zrastovou operáciou je inverzia

Bežný je v kryštáloch, ktorých bodová symetria je opísaná nepolárnymi a ne-centrosymetrickými grupami, zriedkavý je v prípade polárnych grup.

epitaxný zrast

zrast vznikajúci pri kryštalograficky orientovanom zrašťaní kryštálov rozličných fáz, ktorých podmienkou vzniku je dvojrozmerná štruktúrna analógia v rovine styku

Tento zrast môže byť kontaktný alebo penetračný. Na jeho jednoznačné určenie je potrebné definovať Millerovými indexmi zrastovú rovinu hostiteľa, zrastovú rovinu epitaxne narastajúceho kryštálu a dva mriežkové vektory udávajúce vzájomnú orientáciu významných kryštalografických smerov v týchto rovinách.

kryštalizačný zrast

zrast vznikajúci pri kryštalizácii, keď náhodne vznikne spoločná množina mriežkových bodov dvoch alebo viacerých jedincov, ktorých orientácia sa líši od orientácie pôvodného kryštálu

transformačný zrast

zrast, ktorý môže vznikať pri fázových prechodoch z jednej polymorfnej modifikácie na inú

deformačný zrast

zrast vznikajúci pri deformácii, keď sa atómy vychýlia z pôvodného miesta v kryštálovej štruktúre tak, že pri tom vznikne usporiadanie zodpovedajúce niektorej zrastovej operácii

A 6 Poruchy kryštálovej štruktúry

štruktúrna porucha

narušenie geometrickej pravidelnosti ideálnej štruktúry

Rozlišujú sa bodové, čiarové, plošné a objemové poruchy. Namiesto termínu štruktúrna porucha sa často používa nevhodný termín mriežková porucha, ktorý adekvátne nevystihuje skutočnosť.

Bodové poruchy

bodová porucha

lokálna štruktúrna porucha, ktorá vzniká chybným umiestnením, neprítomnosťou alebo zámenou jedného, nanajvýš niekoľkých atómov v kryštálovej štruktúre

Z geometrického hľadiska ide o bezrozmerné poruchy. Pri posudzovaní energie (resp. entalpie) vzniku bodových porúch sa rešpektuje princíp zachovania celkového počtu atómov kryštálu, napr. pri vzniku vakancie sa predpokladá umiestnenie odstráneného atómu na povrch kryštálu.

vakancia

bodová porucha, pri ktorej niektoré miesto zodpovedajúce polohe v ideálnej štruktúre nie je obsadené

Schottkyho porucha

bodová porucha predstavujúca elektricky neutrálnu dvojicu aniónovej a kationovej vakancie v iónových kryštáloch

intersticiálna poloha

poloha v ideálnej štruktúre, ktorá lokálne nezodpovedá polohám určeným rozmiestnením atómov štruktúrneho motívu v okolí niektorého mriežkového bodu

intersticiálny atóm (syn. intersticiál)

atóm v intersticiálnej polohe

vlastný intersticiál

atóm identický s atómami tvoriacimi kryštál, ktorý sa nachádza v intersticiálnej polohe

Ak ide o atóm iného druhu, vzniká **prímesový intersticiál**.

Frenkelova porucha

bodová porucha predstavujúca elektricky neutrálnu dvojicu vakancia – intersticiál, ktorá vznikne prenesením katiónu z polohy určenej štruktúrnym motívom do intersticiálnej polohy

antifrenkelovská porucha

aniónová Frenkelova porucha

Schottkyho neusporiadanosť

kryštálová štruktúra, v ktorej dominantnými poruchami sú Schottkyho poruchy

Frenkelova neusporiadanosť

kryštálová štruktúra, v ktorej dominantnými poruchami sú Frenkelove poruchy

vlastná neusporiadanosť (syn. **intrinzická neusporiadanosť**)

kryštálová štruktúra so Schottkyho alebo s Frenkelovou neusporiadanosťou

substitučný atóm

bodová porucha, v ktorej niektorý atóm štruktúrneho motívu je nahradený iným atómom nazývaným nečistota, prímes alebo dopant

dvojakancia

bodová porucha tvorená dvojicou vakancií bez elektrického náboja, ktoré sa spojili v dôsledku elastickej interakcie

dvojitý intersticiál

bodová porucha tvorená dvojicou intersticiálov, ktoré sa spojili v dôsledku elastickej interakcie

zhluk bodových porúch

porucha vytvorená spojením viacerých bodových porúch (vakancií, intersticiálov)

Pri dosiahnutí potrebnej veľkosti sa zhluk bodových porúch pretransformuje na dvojrozmernú poruchu (→ extrinzické alebo intrinzické vrstevné chyby) alebo trojrozmernú poruchu (→ precipitáty).

farebné centrum

bodová porucha, ktorá vzniká interakciou vakancií a intersticiálnych atómov v iónových kryštáloch a spôsobuje ich sfarbenie

radiačná porucha

bodová porucha (prevažne Frenkelova), ktorá vzniká v kryštáloch pri ožarovaní ionizujúcim žiarením

Čiarové poruchy

čiarová porucha

súvislá porucha lokalizovaná pozdĺž krivky ľubovoľného tvaru vedenej kryštálom

Z geometrického hľadiska ide o jednorozmerné poruchy. Krivka je buď uzavretá, alebo sa končí na povrchu kryštálu, na inej čiarovej poruche, alebo na poruche väčšieho rozsahu. Nemôže sa končiť voľne vo vnútri bezporuchovej časti kryštálu.

dislokácia

čiarová porucha predstavujúca hranicu medzi neporušenou oblasťou v kryštáli a oblasťou, v ktorej došlo ku sklzu jeho dvoch častí pozdĺž niektorej mriežkovej roviny

Rozlišujú sa dva základné typy dislokácií – hranová a skrutková. Dislokácie vznikajú napr. pri plastickej deformácii.

jadro dislokácie

oblasť, pre ktorú je charakteristické výrazné posunutie atómov z pôvodných do nových rovnovážnych polôh

Deformácia mriežky v jadre dislokácie sa nedá opísať v rámci lineárnej teórie elasticity.

dislokačná čiara

geometrická idealizácia jadra dislokácie

Burgersov vektor

vektorová veličina charakterizujúca geometrické vlastnosti dislokácie, rovnobežná so smerom, v ktorom došlo k vzájomnému sklzu dvoch častí kryštálu pri plastickej deformácii; jej veľkosť sa rovná veľkosti sklzu

Smer Burgersovho vektora sa zachováva pozdĺž celej dislokačnej čiary. Jeho veľkosť môže byť násobkom, ale aj zlomkom najmenšieho mriežkového vektora (→ úplná dislokácia, parciálna dislokácia).

hranová dislokácia

čiarová porucha, ktorej vznik sa dá formálne opísať čiastočným rozrezaním kryštálu pozdĺž niektorej mriežkovej roviny a následným vložením polroviny atómov do rezu

Po následnom spojení plôch rezu je porucha lokalizovaná v blízkosti hranice rezu – dislokačnej čiary. Burgersov vektor hranovej dislokácie je kolmý na smer dislokačnej čiary.

skrutková dislokácia

čiarová porucha, ktorej vznik sa dá formálne opísať čiastočným rozrezaním kryštálu pozdĺž niektorej mriežkovej roviny a vzájomným posunutím plôch rezu v smere hranice rezu

Po následnom spojení plôch rezu je porucha lokalizovaná v blízkosti hranice rezu – dislokačnej čiary. Burgersov vektor skrutkovej dislokácie je rovnobežný so smerom dislokačnej čiary.

zmiešaná dislokácia

dislokácia, ktorej segmenty sú rôzne orientované, pričom niektoré majú charakter hranovej dislokácie, iné charakter skrutkovej dislokácie

Burgersov vektor zmiešanej dislokácie zvierá so smerom dislokačnej čiary uhol z intervalu od 0° do 90° .

plastická deformácia

nevratný proces, ktorý vedie k trvalej zmene tvaru kryštálu v dôsledku vonkajšieho silového pôsobenia

Medzi procesy, ktoré sprevádzajú, resp. sprostredkujú plastickú deformáciu, patrí vznik, multiplikácia a pohyb dislokácií.

sklzová rovina

rovina, v ktorej pri pohybe dislokácie dochádza k vzájomnému posunu dvoch častí kryštálu

Je určená smerom dislokačnej čiary a smerom Burgersovho vektora. V tejto rovine môže prebiehať pohyb dislokácie sklzom.

sklz

pohyb dislokácie v sklzovej rovine, pri ktorom sa zachováva celkový počet bodov priestorovej mriežky celého kryštálu

Tento typ pohybu dislokácie sa označuje ako konzervatívny.

šplhanie

pohyb dislokácie, pri ktorom sa dislokačná čiara dostáva mimo pôvodnej sklzovej roviny

Proces je sprevádzaný záchytným a emisiou bodových porúch (vakancií a vlastných intersticií) v jadre dislokácie. Interakcia s bodovými poruchami spôsobuje, že sa nezachováva celkový počet bodov priestorovej mriežky celého kryštálu. Tento typ pohybu dislokácie sa označuje ako nekonzervatívny.

stupeň na dislokácii

schodíkovitá nerovnosť na dislokačnej čiare mimo sklzovej roviny; vzniká pri šplhaní dislokácie

vybočenie na dislokácii (syn. ohyb na dislokácii)

schodíkovitá nerovnosť na dislokačnej čiare ležiacej v sklzovej rovine; vzniká pri sklze dislokácie

úplná dislokácia

dislokácia, ktorej Burgersov vektor sa rovná celočíselnému násobku najmenšieho mriežkového vektora

parciálna dislokácia (syn. neúplná dislokácia)

dislokácia, ktorej Burgersov vektor je menší než najmenší mriežkový vektor

Neúplná dislokácia tvorí vždy hranicu plošnej poruchy – vrstevnej chyby.

Shockleyho dislokácia

sklzová parciálna dislokácia v kryštáloch s kubickou plošne centrovanou priestorovou mriežkou (*fcc*) s Burgersovými vektormi ležiacimi v rovine vrstevnej chyby

Môže sa pohybovať sklzom.

Frankova dislokácia

parciálna dislokácia v kryštáloch s kubickou plošne centrovanou priestorovou mriežkou (*fcc*) s Burgersovým vektorom kolmým na rovinu vrstevnej chyby

disociovaná dislokácia (syn. rozštiepená dislokácia)

dvojica parciálnych dislokácií spojených úzkym pásom vrstevnej chyby

kútová dislokácia

konfigurácia vznikajúca interakciou dvoch rovnobežných disociovaných dislokácií patriacich k rôznym sklzovým systémom v kryštáloch s kubickou plošne centrovanou priestorovou mriežkou (*fcc*)

Lomerova-Cottrellova dislokácia

nepohyblivá parciálna dislokácia v kryštáloch s kubickou plošne centrovanou priestorovou mriežkou (*fcc*)

Vzniká spojením dvoch Shockleyho parciálnych dislokácií v priesečníci ich sklzových rovín. Má hranový charakter a jej Burgersov vektor neleží ani v jednej zo sklzových rovín pôvodných Shockleyho dislokácií. Tvorí neprekonateľnú bariéru pre pohyb ostatných dislokácií v pôvodných sklzových rovinách a významne prispieva k spevneniu kryštálov.

dislokačná slučka

dislokácia tvoriaca uzavretú krivku

Obyčajne vzniká kondenzáciou vakancií alebo intersticiálov a následným zánikom vrstevnej chyby.

závitnicová dislokácia

dislokácia v tvare priestorovej špirály

Vzniká šplhaním skrutkovej dislokácie.

Volterrova dislokácia

čiarová porucha zavedená v rámci mechaniky kontinua

Vysvetľuje sa pomocou modelu nekonečne dlhého dutého valca (Volterrovej trubice), ktorý je na jednej strane pozdĺžne rozrezaný, pričom plochy rezu sú po vzájomnom posunutí, resp. pootočení opäť spojené. Existuje šesť základných typov takýchto porúch. Poruchy vzniknuté posunutím zodpovedajú dislokáciám, pootočenia vedú k disklináciám.

disklinácia

čiarová porucha zodpovedajúca pootočeniu plôch rezu Volterrovej trubice

Vznik tejto poruchy je spojený s podstatne vyššou hodnotou elastickej energie než vznik dislokácie, preto sa v reálnych kryštáloch s pevnou priestorovou mriežkou nevyskytuje. Možno ju pozorovať v kvapalných kryštáloch a v dvojrozmerných vírových mriežkach v supravodičoch.

dislokácia nezhody (syn. misfitová dislokácia)

typ dislokácie vyskytujúcej sa na rozhraní medzi podložkou a epitaxnou vrstvou; vzniká v systémoch s veľkým mriežkovým neprispôsobením

Dislokácia nezhody znižuje elastickejšiu energiu epitaxnej vrstvy.

sklzový pás

zhluk dislokácií vznikajúci a pohybujúci sa v tej istej sklzovej rovine

Sklzové pásy svedčia o nehomogenite plastickej deformácie. Pôvodcom veľkého počtu dislokácií s rovnakým Burgersovým vektorom môže byť Frankov-Readov zdroj.

Frankov-Readov zdroj

úsek dislokácie ukotvený na oboch koncoch

Pôsobením šmykového napätia sa úsek dislokácie v sklzovej rovine začne vydúvať a predlžovať. Vydúvajúc sa slučka postupne obopne obidva kotviace body, vytvorí sa uzavretá dislokačná slučka vzdľahujúca sa od zdroja a celý proces sa zopakuje. Po vytvorení istého počtu dislokácií sa tvorba ďalších dislokácií skončí.

dislokačná stena

zhluk dislokácií nachádzajúcich sa v rôznych sklzových rovinách toho istého sklzového systému

Sú usporiadané približne v rovine, ktorá je kolmá na ich sklzové roviny. Dislokačné steny vznikajú ako dôsledok elastickej interakcie medzi rovnobežnými dislokáciami jedného sklzového systému.

sklzový systém

systém, ktorý vzniká kombináciami sklzových rovín $\{hkl\}$ so smermi sklzu $\langle uvw \rangle$; označuje sa kombináciou symbolov $\{hkl\}/\langle uvw \rangle$

Rôzne typy priestorových mriežok sa vyznačujú rôznymi sklzovými systémami aj ich rôznym počtom.

dislokačný les

neusporiadaný zhluk dislokácií pretínajúcich sklzovú rovinu pod istým uhlom a patriacich iným sklzovým systémom

Dislokačný les tvorí prekážku pre dislokácie pohybujúce sa v sklzovej rovine. Pretínanie sa dislokácií z rôznych sklzových systémov zvyšuje šmykové napätie potrebné pri plastickej deformácii.

dekorovaná dislokácia

dislokácia, v ktorej jadre alebo okolí je zvýšená koncentrácia atómov prímiesí

Cottrellova atmosféra (syn. Cottrellov oblak)

oblasť okolo dislokácie so zvýšenou koncentráciou atómov prímiesí zabudovaných v substitučných polohách

Snoekova atmosféra (syn. Snoekov oblak)

oblasť okolo dislokácie so zvýšenou koncentráciou atómov prímiesí zabudovaných v intersticiálnych polohách

nabitá dislokácia

dislokácia s nenulovým elektrickým nábojom vyskytujúca sa najmä v iónových kryštáloch

Náboj sa sústreďuje na dislokačných stupňoch.

Plošné poruchy

hranica zrna

plocha tvoriaca rozhranie medzi kryštalickým zrnom a jeho okolím

Zvyčajne ide o rozhranie medzi dvoma zrnami.

malouhlová hranica

rozhranie medzi dvoma časťami kryštálu, ktorých priestorové mriežky sú navzájom pootočené najviac o niekoľko stupňov

Malouhlovú hranicu možno opísať pomocou dislokácií na rozhraní.

náklonová hranica

malouhlová hranica medzi zrnami, ktorých priestorové mriežky sú navzájom pootočené okolo osi ležiacej v rovine rozhrania

Možno ju opísať pomocou súboru hranových dislokácií ležiacich v rovine rozhrania.

skrutová hranica

malouhlová hranica medzi zrnami, ktorých priestorové mriežky sú navzájom pootočené okolo osi kolmej na rovinu rozhrania

Možno ju opísať pomocou skrutkových dislokácií ležiacich v rovine rozhrania.

koherentná hranica

rozhranie medzi dvoma zrastenými kryštálmi, na ktorého oboch stranách sa medziatómové vzdialenosti a geometrické usporiadanie atómov približne zhodujú; opačným prípadom je **nekoherentná hranica**

Ak sú rovnovážne medziatómové vzdialenosti na opačných stranách koherentnej hranice odlišné, v blízkosti rozhrania vzniká vnútorné mechanické napätie. Nekoherentná hranica zvyčajne oddeľuje dve rozličné kryštalické fázy, napr. precipitát od hostiteľskej fázy.

antifázová doména

usporiadaná oblasť v kryštáli binárneho tuhého roztoku, v ktorej sú v porovnaní so susednou doménou aspoň dva rôzne druhy stavebných častíc navzájom zamenené

antifázová hranica

rozhranie medzi dvoma antifázovými doménami v rámci jedného kryštálu

Antifázové hranice možno pozorovať aj v zložitejších ako binárnych štruktúrach, napr. v ternárnych polovodičoch InGaP, kde dochádza k usporiadaniu na diaľku v podmriežke obsahujúcej prvky In a Ga.

fázová hranica

rozhranie medzi dvoma odlišnými fázami prítomnými v materiáli viacfázového systému

polygonizácia

usporiadanie dislokácií do polygonálnej siete ohraničujúcej oblasti kryštálu bez dislokácií

vrstevná chyba

narušenie pravidelnej postupnosti ukladania štruktúrne rovnakých vrstiev stavebných častíc kryštálu

intrinzičná vrstevná chyba

vrstevná chyba, ktorú možno formálne opísať pomocou jednej chýbajúcej vrstvy stavebných častíc v pravidelnej postupnosti vrstiev

V kryštáloch s *fcc* štruktúrou vynechanie roviny *A* v postupnosti ~~ABC~~ABCABC rovín (111) vedie k intrinzickej vrstvej chybe. Porucha môže vzniknúť kondenzáciou vakancií, v tomto prípade je vrstevná chyba ohraničená Frankovou parciálnou dislokáciou alebo rozštiepením úplnej dislokácie na dve

Shockleyho parciálne dislokácie. Úzky pás vrstevnej chyby má podľa definície intrinzičný charakter, aj keď žiadny úbytok stavebných častíc v štruktúre nenastal a k rozštiepeniu dislokácie došlo sklzom.

extrinzičná vrstevná chyba

vrstevná chyba, ktorú možno formálne opísať pomocou jednej nadbytočnej vrstvy stavebných častíc v pravidelnej postupnosti vrstiev

V kryštáloch s *fcc* štruktúrou vloženie roviny *A* do postupnosti *ABCABACABC* rovín (111) vedie k extrinzičkej vrstevnej chybe. Porucha vzniká kondenzáciou vlastných intersticiálov.

Objemové poruchy

precipitát

fáza s odlišným chemickým zložením a s odlišnou kryštálovou štruktúrou nachádzajúca sa v hostiteľskej fáze

K vzniku precipitátov dochádza aj vtedy, keď koncentrácia atómov prímiesí prekročí hranicu rozpustnosti v danom systéme. Tento proces (precipitáciu) urýchľuje zvýšená teplota.

koherentný precipitát

precipitát, ktorého všetky hranice s hostiteľskou fázou sú koherentné

čiastočne koherentný precipitát

precipitát, ktorý má aspoň jednu hranicu s hostiteľskou fázou koherentnú

nekoherentný precipitát

precipitát, ktorý má všetky hranice s hostiteľskou fázou nekoherentné

mikroskopická porucha (syn. mikrodefekt)

súhrnné označenie precipitátov, dislokačných slučiek a vrstevných chýb, ktorých rozmer neprevyšuje $\sim 1 \mu\text{m}$

makroskopická porucha (syn. makrodefekt)

súhrnné označenie inklúzií, štiepných a šmykových trhlín, ktorých rozmer prevyšuje $\sim 1 \mu\text{m}$

B Rozptyl a difrakcia žiarenia

B 1 Rozptyl žiarenia a amplitúdy rozptylu

primárne žiarenie

žiarenie dopadajúce na skúmaný objekt

Pri difrakčných metódach ide najmä o röntgenové žiarenie, neutrónové žiarenie a elektrónové žiarenie. Podľa použitého experimentálneho usporiadania môže žiarenie vychádzať priamo zo zdroja alebo z optických prvkov zaradených medzi zdroj a skúmanú vzorku, ktorými sa upravuje smer šírenia alebo spektrálne zloženie žiarenia.

rozptyl žiarenia

proces, pri ktorom časť žiarenia mení smer svojho šírenia v dôsledku interakcie s rozptylovými centrami skúmaného objektu

Rozptyl môže byť pružný alebo nepružný, pri neutrónovom žiarení sa navyše rozlišuje rozptyl jadrový a magnetický.

rozptýlené žiarenie

žiarenie vznikajúce rozptylom primárneho žiarenia na rozptylových centrách skúmaného objektu

rozptylové centrum

objekt, na ktorom dochádza k rozptylu žiarenia

Röntgenové žiarenie sa rozptyľuje v podstate len na elektrónoch v obaloch atómov, ale za rozptylové centrá je vhodné v niektorých súvislostiach považovať celé atómy, prípadne základné bunky kryštálu. Pri neutrónovom žiarení sú rozptylovými centrami jadrá atómov ($\rightarrow$ jadrový rozptyl) alebo elektróny atómov, ktoré sa vyznačujú nenulovým magnetickým momentom ($\rightarrow$ magnetický rozptyl). Zväzky elektrónov sa rozptyľujú v elektrickom poli atómových jadier a elektrónových obalov.

pružný rozptyl (syn. elastický rozptyl)

rozptyl žiarenia na rozptylových centrách, pri ktorom energia, resp. vlnová dĺžka rozptýlených fotónov alebo častíc zostáva nezmenená

Pri pružnom rozptyle je definovaný vzťah medzi fázami primárnej vlny a rozptýlenej vlny.

nepružný rozptyl (syn. neelastický rozptyl)

rozptyl žiarenia na rozptylových centrách, pri ktorom sa mení energia, resp. vlnová dĺžka rozptýlených fotónov alebo častíc

Pri nepružnom rozptyle nie je definovaný vzťah medzi fázou primárnej vlny a rozptýlenej vlny, nepružne rozptýlené žiarenie je nekoherentné.

Bornova aproximácia

iteratívna metóda výpočtu amplitúdy A rozptýlenej vlny vo všeobecnej teórii rozptylu pre prípady, keď amplitúda rozptýlenej vlny je malá v porovnaní s amplitúdou dopadajúcej vlny

Riešenie rovnice $(\Delta + k^2 - \varphi V(\mathbf{r}))A(\mathbf{r}) = 0$ opisujúcej rozptylový proces s rozptylovým potenciálom $V(\mathbf{r})$ sa hľadá vo forme nekonečného Bornovho radu

$$A(\mathbf{r}) = A^{(0)} + A_{sc}^{(1)} + A_{sc}^{(2)} + \dots,$$

kde $A^{(0)} = A_{in}$ je amplitúda dopadajúcej vlny, $A_{sc}^{(1)}$ je amplitúda jedenkrát rozptýlenej vlny, $A_{sc}^{(2)}$ je amplitúda dvakrát rozptýlenej vlny atď. V prípade rtg žiarenia parameter $\varphi = 1$ a rovnica nadobúda tvar klasickej vlnovej rovnice. Pre elektróny a neutróny platí $\varphi = 2m/\hbar^2$, kde m je hmotnosť rozptylovanej častice, $\hbar$ je redukovaná Planckova konštanta a rovnica nadobudne tvar Schrödingrovej rovnice. Amplitúdu $A_{sc}^{(1)}$ možno v dostatočnej vzdialenosti r od rozptylového centra aproximovať guľovou vlnou

$$A_{sc}^{(1)} = -A_{in}b(\phi)\frac{\exp(-2\pi ikr)}{r},$$

kde parameter $b(\phi)$ je **amplitúda rozptylu** a vo všeobecnosti závisí od rozptylového uhla ϕ . Priblíženie, ktoré zanedbáva viacnásobný rozptyl, t. j. $A_{sc}^{(n)} = 0$ pre $n > 1$, je známe ako prvá Bornova aproximácia. Pri opise difrakčných javov jej zodpovedá kinematická teória difrakcie. Keďže vo všeobecnosti konvergenca Bornovho radu je slabá, aproximácie vyšších rádov nie sú vhodné na opis javov, kde sa uplatňuje viacnásobná difrakcia.

rozptylová dĺžka b

amplitúda rozptylu pre oblasť energií charakteristických pre rozptyl a difrakciu rtg žiarenia, elektrónov a neutrónov využívaných v metódach štruktúrnej analýzy

Vzťah vyjadrujúci rozptylovú dĺžku, ktorý platí pri rozptylových centrách s rozmermi porovnateľnými alebo väčšími než vlnová dĺžka, má tvar

$$b(\mathbf{S}) = \frac{\varphi}{4\pi} \int V(\mathbf{r}) \exp(2\pi i \mathbf{S} \cdot \mathbf{r}) d^3\mathbf{r},$$

kde $\mathbf{S}$ je rozptylový alebo difrakčný vektor, parameter $\varphi = 1$ pre rtg žiarenie a $\varphi = 2m/\hbar^2$ pre elektróny a neutróny, m je hmotnosť rozptylovanej častice, $\hbar$ je

redukovaná Planckova konštanta, $V(\mathbf{r})$ je rozptylový potenciál a integruje sa cez objem rozptylového centra. Rozptylové dĺžky rtg žiarenia, elektrónov a neutrónov možno získať dosadením výrazov pre príslušné rozptylové potenciály.

diferenciálny účinný prierez rozptylu $d\sigma/d\Omega$

základný parameter používaný v teórii rozptylu, ktorý je definovaný ako podiel relatívneho počtu častíc $d\sigma = dN/N$ rozptýlených v danom smere do malého priestorového uhla $d\Omega$ a tohto uhla, kde N je hustota toku častíc, t. j. celkový počet častíc dopadajúcich na jednotku plochy

Číselná hodnota tejto veličiny vyjadruje pravdepodobnosť rozptylu častice v danom smere pripadajúcu na jednotkový priestorový uhol. V rámci difrakčných techník sa používa pri rozptyle neutrónov, je identický s druhou mocninou absolútnej hodnoty rozptylovej dĺžky, $d\sigma/d\Omega = |b|^2$. Účinný prierez sa vzťahuje na hustotu toku dopadajúcich častíc; zaužívanou jednotkou je 1 barn = 10^{-28} m^2 .

celkový účinný prierez rozptylu σ

základný parameter používaný v teórii rozptylu; vyjadruje pravdepodobnosť rozptylu častice do ľubovoľného smeru

V rámci difrakčných techník sa používa pri rozptyle neutrónov, pre izotropný rozptyl na jadrách platí $\sigma = 4\pi|b|^2$. Účinný prierez sa vzťahuje na hustotu toku dopadajúcich častíc, zaužívanou jednotkou je 1 barn = 10^{-28} m^2 .

Thomsonov rozptyl

pružný rozptyl elektromagnetického žiarenia na voľnej elektricky nabitej častici opísaný metódami klasickej teórie elektromagnetického poľa

V prípade rtg žiarenia ide o rozptyl na slabo viazaných elektrónoch v atómoch. Fáza vln rozptýleného žiarenia je opačná v porovnaní s fázou primárneho žiarenia, rozptylová dĺžka je kladná.

Rayleighov rozptyl

pružný rozptyl elektromagnetického žiarenia na časticiach, ktorých vlastná frekvencia je oveľa vyššia než frekvencia žiarenia

Pôvodne bol zavedený pre rozptyl viditeľného svetla na atómoch a molekulách. V prípade rtg žiarenia ide o rozptyl na silne viazaných elektrónoch v atómoch, pričom jeho rozptylová dĺžka je záporná a fáza rozptýleného žiarenia je identická s fázou primárneho žiarenia.

Comptonov rozptyl

nepružný rozptyl rtg žiarenia alebo γ žiarenia, pri ktorom dochádza k ionizácii rozptylových centier, pričom časť energie fotónu sa odovzdá emitovanému elektrónu

Formálne sa opisuje ako zrážka dopadajúceho fotónu s voľným elektrónom. Vlnová dĺžka rozptýleného žiarenia je pri tomto rozptyle väčšia než vlnová dĺžka primárneho žiarenia.

difúzny rozptyl

rozptyl žiarenia zapríčinený odlišnosťou rozptyľujúceho objektu od dokonalého translačne symetrického stavu a absenciou priestorovej alebo časovej korelácie dostatočného dosahu medzi jeho časťami; znižuje intenzitu difrakčných maxím a zvyšuje pozadie medzi nimi

Prítomnosť akýchkoľvek štruktúrnych porúch vedie k statickému vychýleniu stavebných častíc z ideálnych polôh, a tým prispieva k difúznemu rozptylu. Náhodná fluktuácia polôh, ktorá je dôsledkom tepelného pohybu stavebných častíc, je príčinou **tepelného difúzneho rozptylu**. Tepelný rozptyl je v prípade neutrónov zároveň aj nepružný, keďže energia dopadajúcich tepelných neutrónov je porovnateľná s energiou kmitov mriežky. Ďalšou príčinou difúzneho rozptylu je náhodná fluktuácia rozptylových dĺžok, ktorá nastáva v neusporiadaných tuhých roztokoch. Tento druh difúzneho rozptylu sa v angličtine označuje ako **disorder diffuse scattering**.

Thomsonova rozptylová dĺžka b_e

rozptylová dĺžka pre rozptyl rtg žiarenia na voľnom (neviazanom) elektróne

Zhoduje sa s klasickým (Lorentzovým) polomerom elektrónu $r_e = e^2 / (4\pi\epsilon_0 mc^2)$ zavedeným v teórii elektromagnetického poľa. e je elementárny náboj, ϵ_0 elektrická konštanta, m hmotnosť elektrónu a c rýchlosť svetla. Elektrón je reprezentovaný bodovým nábojom, v dôsledku čoho rozptylová dĺžka je izotropná, t. j. nezávislá od rozptylového vektora $\mathbf{S}$. Pre vlnenie s s -polarizáciou platí $b_e = r_e$, pre vlnenie s p -polarizáciou $b_e = r_e \cos\phi$, kde ϕ je rozptylový uhol.

atómový rozptylový faktor (syn. atómový faktor)

rozptylová dĺžka pre rozptyl žiarenia na atóme

V prípade rtg žiarenia k rozptylu dochádza takmer výlučne na elektrónovom obale atómov. Ak je rozptylový potenciál $V(\mathbf{r}) \sim \rho(\mathbf{r})b_e$, kde $\rho(\mathbf{r})$ je rozdelenie hustoty elektrónov v atómovom obale a b_e je Thomsonova rozptylová dĺžka, potom rozptylový faktor

$$f_{rtg}(\mathbf{S}) = b_e \int_{\text{atóm}} \rho(\mathbf{r}) \exp(2\pi i \mathbf{S} \cdot \mathbf{r}) d^3\mathbf{r}$$

je vyjadrený v **absolútnych jednotkách** a má rozmer [m]. Ak v rozptylovom potenciáli $V(\mathbf{r})$ vystupuje len rozdelenie hustoty $\rho(\mathbf{r})$ bez Thomsonovej rozptylovej dĺžky b_e , rozptylový faktor f_{rtg} je vyjadrený v **elektrónových jednotkách**. V tomto prípade je to bezrozmerná veličina a udáva, koľkokrát je ampli-

túda vlny rozptýlenej od celého atómu väčšia než amplitúda vlny rozptýlenej jedným elektrónom.

V prípade elektrónov je rozptylovým potenciálom potenciál elektrického poľa atómového jadra obsahujúceho Z protónov a elektrónového obalu s rozdelením hustoty elektrónov $\rho(\mathbf{r})$. Rozptylový faktor má tvar

$$f_{el}(\mathbf{S}) = \frac{me^2}{8\pi\epsilon_0 h^2} \left(\frac{\lambda}{\sin\theta} \right)^2 (Z - f_{rtg}),$$

kde m je hmotnosť elektrónu, ϵ_0 je elektrická konštanta (permitivita vákua), h je Planckova konštanta, λ vlnová dĺžka elektrónov, θ polovičný rozptylový uhol a f_{rtg} atómový rozptylový faktor pre rtg žiarenie vyjadrený v elektrónových jednotkách.

Na charakterizáciu rozptylu neutrónov sa používajú veličiny $\rightarrow$ rozptylová dĺžka jadrového rozptylu a $\rightarrow$ rozptylová dĺžka magnetického rozptylu.

Cromerove-Mannove koeficienty

deväť koeficientov a_i, b_i, c ($i = 1 \dots 4$) slúžiacich na výpočet atómového rozptylového faktora f_{rtg} pre rtg žiarenie ako funkcie premennej $(\sin\theta)/\lambda$ podľa vzťahu

$$f_{rtg} \left(\frac{\sin\theta}{\lambda} \right) = \sum_{i=1}^4 a_i \exp \left[-b_i \left(\sin \frac{\theta}{\lambda} \right)^2 \right] + c$$

Analogické koeficienty sú k dispozícii aj na výpočet parametrov f_m vystupujúcich v rozptylovej dĺžke pre magnetický rozptyl neutrónov.

anomálna disperzia

odchýlka od monotónneho priebehu závislosti atómového rozptylového faktora od vlnovej dĺžky žiarenia v blízkosti absorpčnej hrany rozptyľujúceho atómu

Anomálna disperzia sa uplatňuje hlavne pri rozptyle rtg žiarenia. Opisuje sa pomocou dvoch korekčných faktorov f' a f'' , ktoré sú tabelované pre jednotlivé vlnové dĺžky charakteristického rtg žiarenia. Pri zohľadnení anomálnej disperzie sa atómový rozptylový faktor vyjadruje ako komplexné číslo:

$$f_{rtg} = f_{rtg}^0 + f' + if'',$$

kde f_{rtg}^0 je rozptylový faktor pri zanedbaní anomálnej disperzie. Imaginárna časť korekcie f'' zohľadňuje zmenu fázy rozptýlenej vlny a súvisí s lineárnym koeficientom zoslabovania μ .

rozptylová dĺžka jadrového rozptylu b_N

amplitúda rozptylu neutrónov na atómových jadrách

V rámci prvej Bornovej aproximácie je rozptylovým potenciálom atómových jadier Fermiho pseudopotenciál

$$V(\mathbf{r}) = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right) b_N \delta(\mathbf{r}),$$

kde $\delta(\mathbf{r})$ je Diracova funkcia, $\hbar$ redukovaná Planckova konštanta, m hmotnosť neutrónu a $\mathbf{r}$ polohový vektor jadra. Rozmery jadier sú podstatne menšie než vlnová dĺžka tepelných neutrónov, preto rozptylová dĺžka b_N nezávisí od rozptylového uhla. Závislosť rozptylovej dĺžky od energie dopadajúcich neutrónov opisuje Breitov-Wignerov vzťah, ktorý zohľadňuje potenciálový aj rezonančný rozptyl. Na praktické účely je však potrebné používať experimentálne získané hodnoty. Rozptylová dĺžka b_N nie je monotónnou funkciou atómového čísla, čo je jednou z výhod neutrónovej difrakcie.

spinová inkoherencia

nekoherentný pružný rozptyl neutrónov na jadrách s nenulovým spinom

Pri interakcii neutrónov s jadrami so spinom I vznikajú stavy so spinmi $I + 1/2$ a $I - 1/2$ s rozdielnymi rozptylovými dĺžkami, čo spôsobuje nekoherenciu rozptýlených neutrónov. Účinný prierez pre nekoherentný rozptyl môže pre niektoré prvky značne prevyšovať účinný prierez pre koherentný rozptyl, čo vedie k enormnému zvýšeniu pozadia. Jav nemá ekvivalent v oblasti rozptylu rtg žiarenia.

izotopová inkoherencia

nekoherentný pružný rozptyl neutrónov na jadrách rôznych izotopov toho istého prvku

Rozptylové dĺžky jednotlivých izotopov sa vo všeobecnosti líšia, čo vedie k nekoherencii rozptýlených neutrónov. Jav prispieva k zvýšeniu pozadia pri difrakčných experimentoch, nemá ekvivalent v oblasti rozptylu rtg žiarenia.

rozptylová dĺžka magnetického rozptylu b_m

amplitúda rozptylu neutrónov na tých elektrónoch atómového obalu, ktoré prispievajú k magnetickému momentu atómu

Rozptylová dĺžka pre magnetický rozptyl závisí od rozptylového vektora $\mathbf{S}$, od celkového magnetického momentu atómu a od rozdelenia hustoty tých elektrónov v atómovom obale, ktoré k tomuto momentu prispievajú.

paramagnetický difúzny rozptyl

magnetický rozptyl neutrónov na paramagnetickej látke

Magnetické momenty atómov paramagnetika sú náhodne orientované, preto rozptýlené neutróny nie sú koherentné a prispievajú k zvýšeniu pozadia. Diferenciálny účinný prierez rozptylu na atómoch závisí od celkového spinového

kvantového čísla atómu a od rozdelenia hustoty tých elektrónov, ktoré prispievajú k magnetickému momentu atómu.

koherentný magnetický rozptyl

magnetický rozptyl neutrónov na feromagnetickkej, ferimagnetickej alebo antiferomagnetickkej látke

Magnetické momenty atómov sú v rámci jednej magnetickej domény paralelne alebo antiparalelne orientované, rozptýlené neutróny sú koherentné a môžu vytvárať difrakčné maximá. Diferenciálny účinný prierez rozptylu na atómoch s nenulovým magnetickým momentom závisí od vzájomnej orientácie rozptylového vektora a vektora magnetizácie, a tak umožňuje analyzovať magnetický stav vzorky.

B 2 Difrakcia žiarenia

Všeobecné pojmy

koherentná vlna

elektromagnetická vlna alebo vlna iného druhu vyznačujúca sa stálym, nemienniacim sa rozdielom fáz medzi ľubovoľnými dvoma bodmi priestoru, ktorým sa šíri

V prenesenom význame sa v prípade žiarenia s vlnovými vlastnosťami používa pomenovanie **koherentné žiarenie**. Koherentné môže byť iba také vlnenie, ktoré sa vyznačuje teoreticky jedinou vlnovou dĺžkou λ , reálne veľmi úzkym intervalom vlnových dĺžok $\Delta\lambda$, s čím súvisí priestorové ohraničenie koherencie na vzdialenosti menšie než koherenčná dĺžka. Koherentnosť vlny je nevyhnutnou podmienkou na to, aby mohla prispievať k pozorovateľnej interferencii. Pre žiarenie, ktoré nespĺňa podmienku koherencie, sa používa pomenovanie **nekoherentné žiarenie**.

koherenčná dĺžka

vzdialenosť Δl , v ktorej rozmedzí zostáva vlna koherentnou

Je nepriamoúmerná šírke intervalu vlnových dĺžok $\Delta\lambda$ a priamoúmerná druhej mocnine strednej vlnovej dĺžky λ z tohto intervalu: $\Delta l \approx \lambda^2 / \Delta\lambda$. K pozorovateľnej interferencii dochádza iba vtedy, keď je dráhový rozdiel vln z rôznych rozptylových centier menší než ich koherenčná dĺžka.

koherencia vln

vlastnosť vln prichádzajúcich do daného miesta aspoň z dvoch rôznych rozptylových centier žiarenia, ktorá sa v tomto mieste prejavuje stálosťou rozdielu ich fáz

V takom prípade ide o **koherentné vlny**; táto ich vlastnosť je nevyhnutným predpokladom vzniku pozorovateľnej interferencie, resp. difrakcie.

oblasť koherentného rozptylu (syn. koherentná oblasť)

súvislá časť kryštálu, ktorej všetky základné bunky prispievajú k určitému difrakčnému maximu pružne rozptýlenými vlnami s rovnakou fázou

Oblasť koherentného rozptylu v kinematickej teórii difrakcie zodpovedá oblasti sumácie pri výpočte mriežkového faktora. Tvar, prípadne aj veľkosť oblasti koherentného rozptylu závisí od zvolenej difrakcie. Dve koherentné oblasti môžu byť navzájom posunuté alebo pootočené takým spôsobom, že k niektorým difrakčným maximám prispievajú vlnami s rovnakou fázou, kým k iným maximám nie. Rozdelenie kryštálu na koherentné oblasti vhodného tvaru sa využíva pri posudzovaní vplyvu veľkosti kryštálov a štruktúrnych porúch (napr. vrstevných chýb) na rozšírenie difrakčných maxím. Vo všeobecnosti je difrakcia

elektrónov menej citlivá na presné polohy a orientácie základných buniek (stavbných jednotiek) než difrakcia röntgenového a neutrónového žiarenia.

vlnový vektor k

vektorová veličina, ktorá sa svojím smerom zhoduje so smerom šírenia vlnenia a má veľkosť $k = 1/\lambda$, kde λ je jeho vlnová dĺžka

V Norme ISO-31 je zavedená aj veličina $2\pi/\lambda$, ktorá sa uvádza pod názvom **uhlový vlnový vektor**. V kinematickej teórii difrakcie nie je rozdiel medzi vlnovým vektorom vo vákuu a v kryštáli.

difrakcia

jav typický pre všetky druhy žiarenia vlnovej povahy vznikajúci ako dôsledok interferencie koherentných vln, ktoré vznikli rozptylom na pravidelne rozmiestnených rozptylových centrách, pričom dochádza k zmene smeru šírenia a k priestorovej redistribúcii intenzity žiarenia spojenej so vznikom difrakčných maxím a miním

Pojem difrakcie je známy najmä z optiky. V kryštalografii sa na opis difrakčných javov takmer výhradne používa Fraunhoferova teória difrakcie, v niektorých špeciálnych prípadoch je potrebné použiť všeobecnejšiu Fresnelovu teóriu difrakcie. Termín difrakcia sa v kryštalografii často používa ako skrátenie termínu difrakčné maximum.

difraktované žiarenie

pružne rozptýlené žiarenie, ktorého intenzita sa v dôsledku interferencie vln šíriacich sa od rôznych rozptylových centier v niektorých smeroch zoslabuje až zaniká, v iných sa zosilňuje a vznikajú difrakčné maximá

Význam má najmä pri rozptyle na kryštalických látkach. Smery, v ktorých vznikajú difrakčné maximá, sú určené difrakčnými podmienkami.

difrakčné maximum

oblasť v poli difraktovaného žiarenia, v ktorej je výrazné zvýšenie jeho intenzity vyvolané konštruktívnou interferenciou vln prichádzajúcich z rozptylových centier skúmaného objektu

Podľa spôsobu detekcie môže mať podobu difrakčnej škvrny (pri registrácii dvojrozmerným detektorom) alebo lokálneho maxima na krivke závislosti intenzity od parametra charakterizujúceho polohu detektora, prípadne natočenie vzorky vzhľadom na smer primárneho zväzku. Často sa používa skrátený termín difrakcia alebo aj termín **reflexia**.

rozptylová rovina

rovina určená smerom zväzku primárneho žiarenia a smerom, v ktorom sa deteguje rozptýlené žiarenie

difrakčná rovina

rovina určená smerom zväzku primárneho žiarenia a smerom, v ktorom sa deteguje difraktované žiarenie

rozptylový uhol ϕ

uhol medzi smerom primárneho žiarenia a smerom, v ktorom sa deteguje rozptýlené žiarenie

difrakčný uhol θ (syn. Braggov uhol)

polovičný uhol medzi smerom primárneho žiarenia a smerom, v ktorom sa deteguje difraktované žiarenie; $\theta = \phi/2$

rozptylový vektor S

vektorová veličina, ktorá sa rovná rozdielu vlnového vektora k rozptýleného žiarenia a vlnového vektora k_0 primárneho žiarenia: $S = k - k_0$

Pre jeho veľkosť platí $S = 2 \sin(\phi/2)/\lambda$, kde ϕ je rozptylový uhol.

difrakčný vektor

rozptylový vektor, ktorý je totožný s niektorým vektorom reciprokej mriežky

Vyjadruje sa vzťahom $S = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$, kde $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$ je trojica základných vektorov reciprokej mriežky a h, k, l sú difrakčné indexy. Veľkosť difrakčného vektora $S = 2 \sin\theta/\lambda$, kde θ je difrakčný uhol. Ak je rozptylový vektor totožný s niektorým vektorom reciprokej mriežky, sú splnené difrakčné podmienky pre osnovu mriežkových rovín prislúchajúcich danému vektoru reciprokej mriežky.

difraktovaný zväzok

zväzok žiarenia, do ktorého je sústredená energia rozptýleného žiarenia pri konštruktívnej interferencii vln rozptýlených skúmaným objektom

Pri difrakcii na polykryštalických látkach vznikajú súčasne viaceré difraktované zväzky tvoriace $\rightarrow$ difrakčné kužele, pri monokryštalových monochromatických metódach jednotlivé difraktované zväzky vznikajú postupne vhodným nastavením orientácie monokryštálu vzhľadom na zväzok primárneho žiarenia.

difrakčný obraz

priestorové rozloženie množiny difraktovaných zväzkov

Difrakčný obraz sa opisuje súborom difrakčných indexov a intenzít jednotlivých difraktovaných zväzkov. V reciprokom priestore sa opisuje prostredníctvom váženej reciprokej mriežky. Pri jednotlivých experimentálnych metódach vzniká buď naraz, alebo postupne.

geometria difrakčného obrazu

rozloženie zväzkov difraktovaného žiarenia v priamom priestore

Je funkciou len geometrie priestorovej mriežky a vlnovej dĺžky žiarenia.

symetria difrakčného obrazu

príslušnosť trojrozmerného difrakčného obrazu k niektorej z Laueho grúp

Vzhľadom na Friedelov zákon je difrakčný obraz vždy centrosymetrický.

Laueho grupa (syn. Friedelova grupa)

niektorá z 11 centrosymetrických bodových grúp (→ centrosymetrické bodové grupy, tab. 2)

difrakčný záznam

analogový alebo číslicový výsledok registrácie difrakčného obrazu, t. j. difraktogram alebo difraktometrický záznam súboru údajov o polohách a intenzite registrovaného žiarenia

Pri monokryštálových metódach sa z difrakčných záznamov získava súbor integrálnych intenzít jednotlivých difrakčných maxím s priradenými difrakčnými indexmi. Tento proces je na moderných monokryštálových difraktometroch automatizovaný. V transmisnom elektrónovom mikroskope sa pozoruje, resp. registruje vždy dvojrozmerný difraktogram. Pri röntgenových a neutrónových difraktometrických metódach sa v závislosti od typu detektora registruje jednorozmerný difraktometrický záznam (bodový alebo lineárny detektor) alebo dvojrozmerný difraktogram (plošný detektor).

difraktogram (syn. difrakčný obrazec)

dvojrozmerný obrazec reprezentujúci difrakčný obraz zachytený na filme alebo plošnom detektore

Difraktogram je tvorený množinou priesečníkov jednotlivých difraktovaných zväzkov s plochou filmu alebo detektora.

difraktometrický záznam

jednorozmerný záznam intenzity žiarenia registrovaného bodovým alebo lineárnym detektorom difraktometra

Nezávislou premennou difraktometrického záznamu býva parameter, ktorý charakterizuje polohu detektora, resp. natočenie vzorky vzhľadom na smer primárneho zväzku, prípadne trajektóriu v reciprokom priestore pri všeobecnejších typoch skenov. Pri práškových metódach sa väčšinou zaznamenáva intenzita ako funkcia dvojnásobku difrakčného uhla, pričom sa sníma uhlový rozsah niekoľko desiatok stupňov vrátane pozadia. V minulosti boli difraktometrické záznamy takmer výlučne analogové (lineárny zapisovač), moderné difraktometre registrujú záznam v digitálnej podobe. Konverziou pomocou fotometra sa z difrakčných snímok (napr. z debyegramu) dal získať **fotometrický záznam**.

difrakčná snímka

vyvolaný film s dvojrozmerným analogovým záznamom difrakčného obrazu získaný v komôrkach s filmovou registráciou difraktovaného žiarenia

Pri moderných difraktometroch vybavených plošným detektorom je analógiou k difrakčnej snímke difrakčný obrazec zobrazený na monitore, ktorý je možné uchovať v elektronickej podobe.

difrakčná stopa (syn. **difrakčná škvrna**)
stopa po zväzku difraktovaných lúčov na difraktograme

Difrakčné podmienky

difrakčná podmienka
matematický vzťah, ktorý vyjadruje nevyhnutnú geometrickú podmienku na vznik pozorovateľného difrakčného maxima v rámci kinematickej teórie difrakcie

Difrakčné podmienky sú vyjadrené Braggovou rovnicou a Laueho rovnicami. Geometricky sa dajú znázorniť pomocou Ewaldovej konštrukcie.

difrakčná poloha
taká poloha a orientácia kryštálu vzhľadom na zväzok primárneho žiarenia, pri ktorej vzniká aspoň jedno difrakčné maximum

difrakčné indexy (syn. **Laueho indexy**)
celé čísla h, k, l vystupujúce v Laueho difrakčných podmienkach

Pri trigonálnych a hexagonálnych kryštáloch je účelné používať štyri difrakčné indexy h, k, i, l , pričom platí $h + k + i = 0$. Na rozdiel od indexov v Millerových a Bravaisových symboloch môžu mať spoločného deliteľa, ktorý udáva **rád difrakcie**. Zapisujú sa v tvare hkl , resp. $hkil$ bez zátvoriek. Požíva sa aj zápis, kde je tretí index i v štvorindexovom zápise nahradený bodkou, $hk.l$.

Laueho rovnice (syn. **Laueho difrakčné podmienky**)
tri difrakčné podmienky pre rozptylový vektor $\mathbf{S}$, ktorých splnenie je nevyhnutné na vznik difrakcie

Sú vyjadrené rovnicami $\mathbf{S} \cdot \mathbf{a} = h$, $\mathbf{S} \cdot \mathbf{b} = k$, $\mathbf{S} \cdot \mathbf{c} = l$, kde $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ sú základné vektory priamej mriežky. Celočíselné koeficienty h, k, l sú difrakčné indexy. Riešenia rovníc možno vyjadriť v tvare

$$\mathbf{S}_{hkl} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*,$$

kde $\mathbf{a}^*$, $\mathbf{b}^*$, $\mathbf{c}^*$ je trojica základných vektorov reciprokej mriežky. Laueho podmienky sú splnené, keď sa rozptylový vektor $\mathbf{S}$ rovná niektorému vektoru reciprokej mriežky. Do vzťahov vstupuje vlnová dĺžka žiarenia prostredníctvom vektora $\mathbf{S} = (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0)/\lambda$, kde $\mathbf{s}_0$ a $\mathbf{s}$ sú jednotkové vektory, ktoré majú smer primárneho, resp. difraktovaného žiarenia.

Ewaldova konštrukcia

geometrická konštrukcia v reciprokom priestore, ktorá slúži na znázornenie riešenia Laueho rovníc

Ewaldova konštrukcia je základnou schémou pri interpretácii väčšiny difrakčných experimentov. Jej základom je **Ewaldova guľová plocha** (v reze kružnica) s polomerom $1/\lambda$, na ktorej je umiestnený začiatok reciprokej mriežky. Difrakčné podmienky sú splnené, keď sa koncový bod niektorého vektora reciprokej mriežky dostane do kontaktu s guľovou plochou. Jednotkové vektory $\mathbf{s}_0$ a $\mathbf{s}$ primárneho a difraktovaného lúča mieria zo stredu guľovej plochy do koncových bodov príslušného reciprokeho vektora $\mathbf{G}_{hkl}$, teda je splnená podmienka $\mathbf{G}_{hkl} = (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0)/\lambda$.

limitujúca guľová plocha

guľová plocha v reciprokom priestore s polomerom rovnajúcim sa dvojnásobku polomeru Ewaldovej guľovej plochy $2/\lambda$, ktorej stred je umiestnený do začiatku reciprokej mriežky

Polomer limitujúcej guľovej plochy je daný maximálnou možnou hodnotou veľkosti rozptylového vektora $\mathbf{S}$ pre danú vlnovú dĺžku. Do kontaktu s Ewaldovou guľovou plochou sa môžu dostať len tie body reciprokej mriežky, ktoré sa nachádzajú vo vnútri limitujúcej guľovej plochy. Difrakcie zodpovedajúce bodom mimo guľovej plochy nemôžu vzniknúť.

Braggova rovnica

difrakčná podmienka, ktorá vyjadruje vzťah medzi vlnou dĺžkou λ použitého žiarenia, medzirovinnou vzdialenosťou d_{hkl} osnovy difraktujúcich mriežkových rovín a difrakčným uhlom θ

Rovnica má základný tvar

$$2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda,$$

kde n vyjadruje rád difrakcie. V tomto prípade indexy hkl sú Millerove indexy príslušnej osnovy mriežkových rovín. Pri interpretácii difrakčných experimentov sa rovnica používa v tvare $2d_{hkl}\sin\theta = \lambda$. Rád difrakcie n je zahrnutý do medzirovinnej vzdialenosti a Millerove indexy sú nahradené difrakčnými indexmi.

B 3 Kinematická a dynamická teória difrakcie

Základné pojmy

extinkčná dĺžka ξ_h

základný parameter charakterizujúci mohutnosť interakcie vlnenia s látkou; približne sa rovná vzdialenosti, pri ktorej prejde nadobudne amplitúda difraktovanej vlny hodnotu porovnateľnú s amplitúdou primárnej vlny

Pri prechode vlnenia cez monokryštál nachádzajúci sa v difrakčnej polohe dochádza k modulácii amplitúd prechádzajúcej a difraktovanej vlny. Maximá amplitúd ležia v rovinách rovnobežných s povrchovou rovinou kryštálu, pričom extinkčná dĺžka je definovaná ako vzdialenosť dvoch susedných maxim amplitúdy ľubovoľnej z týchto vln. Extinkčná dĺžka je nepriamoúmerná absolútnej hodnote štruktúrneho faktora vyjadreného v absolútnych jednotkách, takže je menšia pri intenzívnych difrakciách.

kinematická teória difrakcie

teória opisujúca difrakciu v rámci prvej Bornovej aproximácie vo všeobecnej teórii rozptylu

Je založená na predpokladoch, že prechádzajúca vlna nie je ovplyvnená difraktovanou vlnou a je totožná s primárnou vlnou, difraktovaná vlna opätovne nedifraktuje a vystupuje z kryštálu, teda sa zanedbáva viacnásobná difrakcia. Tieto predpoklady sú splnené, ak sú rozmery oblastí koherentného rozptylu menšie než je extinkčná dĺžka pre daný typ žiarenia. Teória je vhodná na opis difrakcie röntgenového žiarenia alebo neutrónov na polykryštalických materiáloch. V prípade difrakcie elektrónov je jej použiteľnosť ohraničená. Výsledky kinematickej teórie nevyhovujú zákonu zachovania energie.

dynamická teória difrakcie

teória, ktorá pri opise difrakcie zohľadňuje viacnásobný rozptyl žiarenia vo vnútri kryštálu, ako aj interakciu difraktovaných vln s primárnym žiarením a vplyv $\rightarrow$ indexu lomu prostredia

Používa sa pri opise difrakcie na dokonalých monokryštáloch, ktorých rozmery oblastí koherentného rozptylu sú väčšie ako extinkčná dĺžka pre daný typ žiarenia.

Kinematická teória difrakcie

Thomsonov vzťah

v teórii difrakcie vzťah pre intenzitu rtg žiarenia I_e pružne rozptýleného voľným elektrónom

Má tvar

$$I_e = I_0 \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2} \right)^2 \frac{1}{R^2} \frac{1 + \cos^2\phi}{2},$$

kde I_0 je intenzita primárneho nepolarizovaného zväzku žiarenia, R vzdialenosť detektora od elektrónu, ϕ rozptylový uhol, ϵ_0 elektrická konštanta, m hmotnosť elektrónu a c rýchlosť svetla. Výraz v zátvorke je klasický polomer elektrónu r_e .

integrálna intenzita I_{hkl} difrakčného maxima

veličina úmerná celkovému počtu fotónov rtg žiarenia alebo častíc difraktovaných kryštálom pri jeho prechode cez difrakčnú polohu

Integrálna intenzita je úmerná časovému integrálu toku fotónov alebo častíc prechádzajúceho štrbinou detektora. V kinematickej teórii je priamoúmerná druhej mocnine štruktúrnej amplitúdy, ožiarenému objemu vzorky a nepriamoúmerná efektívnej uhlovej rýchlosti otáčania vzorky. Veličina nie je totožná s $\rightarrow$ integrálnou intenzitou difrakčnej čiary ani s $\rightarrow$ integrálnou reflexnou mohutnosťou definovanou v dynamickej teórii.

integrálna reflexia R_{hkl} difrakčného maxima

modifikovaná integrálna intenzita, ktorá nezávisí od intenzity primárneho žiarenia ani od rýchlosti otáčania vzorky, ale len od vlastností kryštálu

Definovaná je vzťahom

$$R_{hkl} = \frac{\omega}{I_0} I_{hkl},$$

kde ω je efektívna uhlová rýchlosť otáčania vzorky, I_0 intenzita primárneho žiarenia a I_{hkl} integrálna intenzita difraktovaného žiarenia.

geometrický faktor

faktor, ktorý ovplyvňuje intenzitu difraktovaného žiarenia a ktorý závisí len od difrakčného uhla

Medzi geometrické faktory patrí Lorentzov faktor a polarizačný faktor, ktoré sa obyčajne spájajú do Lorentzovho-polarizačného faktora.

fyzikálny faktor

faktor, ktorý ovplyvňuje intenzitu difraktovaného žiarenia a ktorý závisí od fyzikálnych vlastností skúmaného objektu

Medzi fyzikálne faktory patrí faktor násobnosti, teplotný faktor a absorpčný faktor.

Lorentzov faktor L

geometrický faktor ovplyvňujúci intenzitu difraktovaného žiarenia, ktorý zohľadňuje časový interval prechodu bodu reciprokej mriežky zodpovedajúceho difraktujúcej osnove rovín cez Ewaldovu guľovú plochu

Pri monokryštalových metódach sa vyjadruje vzťahom $L = 1/\sin^2\theta$. Pri Debyeovej-Scherrerovej metóde zohľadňuje aj podiel kryštálov nachádzajúcich sa v difrakčnej polohe a má tvar $1/(\sin^2\theta \sin\theta)$, kde θ je difrakčný uhol.

polarizačný faktor

geometrický faktor, ktorý vyjadruje pokles amplitúdy, resp. intenzity rozptýleného rtg žiarenia a ktorý súvisí s jeho polarizáciou

Pre amplitúdu žiarenia s s -polarizáciou má hodnotu 1, s p -polarizáciou hodnotu $\cos\phi$, kde ϕ je rozptylový uhol. Polarizačný faktor vyjadrujúci pokles intenzity nepolarizovaného žiarenia má tvar $(1 + \cos^2 2\theta)/2$, kde θ je polovičný rozptylový uhol. Uvedený vzorec platí pre prípad, keď nie je použitý monochromátor.

faktor násobnosti

fyzikálny faktor ovplyvňujúci intenzitu difraktovaného žiarenia pri polykryštalických vzorkách; rovná sa počtu osnôv kryštalograficky ekvivalentných rovín

S rastúcou násobnosťou sa intenzita difraktovaného zväzku zväčšuje o celočíselné násobky (tab. 4). V niektorých prípadoch aj osnôvám takých rovín, ktoré nie sú kryštalograficky ekvivalentné, zodpovedajú rovnaké difrakčné uhly, a teda koincidujúce difrakčné stopy.

absorpčný faktor

fyzikálny faktor ovplyvňujúci intenzitu rtg alebo neutrónového žiarenia, ktorým sa zohľadňuje absorpcia žiarenia pri prechode kryštálom

Závisí od koeficientu zoslabenia a od celkovej dráhy, ktorú prejde primárny zväzok a difraktovaný zväzok vzorkou, pri vzorkách v tvare tenkej vrstvy závisí aj od hrúbky vrstvy. Pri Braggovej-Brentanovej metóde rtg difrakcie a pri dostatočne hrubých vzorkách absorpčný faktor nezávisí od difrakčného uhla a je rovnaký pre všetky registrované difrakčné maximá.

Debyeova rozptylová rovnica

vzťah vyjadrujúci intenzitu rozptýleného rtg alebo neutrónového žiarenia v prípade, keď látka pozostáva z rovnakých a relatívne samostatných, v priestore náhodne umiestnených a náhodne orientovaných častíc pozostávajúcich z rovnakého počtu atómov

Uplatňuje sa pri rozptyle žiarenia v plynách, kvapalinách a amorfných látkach. Je vyjadrená ako

$$I(S) = \sum_m \sum_n f_m(S) f_n^*(S) \frac{\sin(2\pi S r_{mn})}{2\pi S r_{mn}},$$

kde r_{mn} je vzdialenosť medzi m -tým a n -tým atómom častice, f_m a f_n sú ich atómové faktory, resp. rozptylové dĺžky a S je veľkosť rozptylového vektora.

vážená reciproká mriežka

reciproká mriežka, ktorá má ku každému mriežkovému bodu so súradnicami (h, k, l) priradenú druhú mocninu absolútnej hodnoty štruktúrneho faktora $|F(hkl)|^2$

Reprezentuje difrakčný obraz v reciprokom priestore a v prípade platnosti Friedelovho zákona je centrosymetrická.

systematické vyhasínanie

absencia difrakcií, pre ktoré sú splnené difrakčné podmienky, ale príslušný štruktúrny faktor sa rovná nule

Nepritomnosť niektorých geometricky možných difrakčných maxím v difrakčnom obraze je zapríčinená deštruktívnou interferenciou zväzkov šíriacich sa od rozptylových centier uložených symetricky podľa istých prvkov symetrie prítomných v kryštálovej štruktúre. Dôvodom systematického vyhasínania býva istý druh centrácie základnej bunky alebo prítomnosť sklzných rovín, alebo skrutkových osí.

reflexné podmienky

algebraické vzťahy pre difrakčné indexy alebo ich kombinácie, ktorých splnenie je nevyhnutnou podmienkou na vznik difrakčného maxima

V Medzinárodných kryštalografických tabuľkách sa uvádzajú pri jednotlivých Wyckoffových polohách. Delia sa na všeobecné, ktoré platia pre všetky Wyckoffove polohy, a špeciálne, ktoré platia len pre vybrané Wyckoffove polohy. Ak nie sú splnené reflexné podmienky týkajúce sa danej priestorovej grupy, dochádza k systematickému vyhasínaniu difrakcií. Reflexné podmienky nie sú identické s difrakčnými podmienkami!

difrakčný symbol

symbol skladajúci sa zo symbolu Laueho grupy a z extinkčného symbolu

Existuje 122 rozličných difrakčných symbolov pre 230 priestorových grúp. V 72 prípadoch zodpovedá difrakčný symbol viac než jednej priestorovej grupe, len v 50 prípadoch je priestorová grupa určená difrakčným symbolom jednoznačne.

extinkčný symbol

súčasť difrakčného symbolu, ktorá reprezentuje reflexné podmienky; obsahuje typ priestorovej mriežky a prvky symetrie, ktoré spôsobujú systematické vyhasínanie difrakčných maxím (skrutkové osi, sklznú roviny)

takmer zakázaná difrakcia

difrakčné maximum s veľmi slabou, ale nenulovou intenzitou, pre ktoré nie sú splnené reflexné podmienky; jej štandardný štruktúrny faktor predpokladajúci guľovú symetriu rozptylových centier má nulovú hodnotu

Jedným z dôvodov existencie takmer zakázaných difrakcií je prítomnosť anharmonických príspevkov v tepelných kmitoch atómov nachádzajúcich sa v nesymetrickom silovom poli okolitých atómov.

teplotný faktor (syn. Debyeov-Wallerov faktor)

bezrozmerná veličina, ktorá vyjadruje vplyv tepelného pohybu atómov na pokles intenzity difraktovaných zväzkov v rámci kinematickej teórie difrakcie

Teplotný faktor vystupuje vo výraze pre amplitúdu difraktovaného žiarenia ako multiplikatívny faktor $\exp(-M)$, ktorý platí presne v prípade, keď kryštál pozostáva z jedného druhu atómov. V opačnom prípade sú teplotné faktory $\tau_j = \exp(-M_j)$ pre každý druh atómu v základnej bunke zahrnuté v štruktúrnych faktoroch jednotlivých difrakcií.

izotropný teplotný faktor

teplotný faktor zohľadňujúci izotropný tepelný pohyb atómov

V prípade, že látka obsahuje rôzne druhy atómov, ktoré však kmitajú izotropne, atómový faktor f_j j -teho atómu v základnej bunke je vyjadrený ako

$$f_j = f_j^0 \exp(-M_j) = f_j^0 \exp(-8\pi^2 \overline{u_j^2} \sin^2 \theta / \lambda^2) = f_j^0 \exp(-B_j \sin^2 \theta / \lambda^2),$$

kde f_j^0 je atómový faktor pri teplote 0 K a $\overline{u_j^2}$ je stredná kvadratická výchylka j -teho atómu v smere difrakčného vektora, ale nezávislá od smeru difrakčného vektora. B_j je **teplotný parameter** (syn. **Debyeov parameter**) j -teho atómu. Podobne sú modifikované rozptylové dĺžky pri difrakcii neutrónov. Vzhľadom na smerovú nezávislosť rozptylovej dĺžky pre jadrový rozptyl sú neutróny mimoriadne užitočné pri štúdiu kmitov kryštálovej mriežky.

anizotropný teplotný faktor

teplotný faktor zohľadňujúci anizotropný tepelný pohyb atómov

Anizotropia kmitov jednotlivých atómov sa charakterizuje symetrickým tenzorom druhého rádu, ktorého bezrozmerné zložky β_{ij} sú vyjadrené v súradnicovej sústave (vo všeobecnosti neortogónálnej) spojenej s kryštalografickými osami daného kryštálu. Označujú sa aj ako **anizotropné teplotné parametre**. Anizotropný teplotný faktor má tvar

$$\exp[-(\beta_{11}h^2 + \beta_{22}k^2 + \beta_{33}l^2 + 2\beta_{23}kl + 2\beta_{13}hl + 2\beta_{12}hk)],$$

kde h, k, l sú difrakčné indexy. Pre atómy ležiace v špeciálnych polohách sa niektoré anizotropné teplotné parametre rovnajú nule.

štruktúrny faktor F

rozptylová dĺžka pre rozptyl žiarenia na základnej bunke

Vo všeobecnom prípade je vyjadrený pomocou atómových rozptylových parametrov pri ľubovoľnej hodnote rozptylového vektora $\mathbf{S}$ v tvare

$$F(\mathbf{S}) = \sum_{j=1}^N f_j(\mathbf{S}) \tau_j(\mathbf{S}) \exp[2\pi i(\mathbf{S} \cdot \mathbf{r}_j)],$$

kde $f_j(\mathbf{S})$ je amplitúda rozptylu j -teho atómu v polohe $\mathbf{r}_j$, $\tau_j(\mathbf{S})$ jeho teplotný faktor, pričom sumácia prebieha cez všetkých N atómov základnej bunky. V prípade rtg žiarenia parametre f_j predstavujú atómové rozptylové faktory vyjadrené v elektrónových jednotkách. Štruktúrny faktor potom vyjadruje pomer amplitúdy pružne rozptýlenej vlny všetkými atómami základnej bunky a amplitúdy vlny rozptýlenej v tom istom smere jedným elektrónom. V prípade neutrónov sú parametre f_j nahradené rozptylovými dĺžkami b_j pre jadrový, resp. magnetický rozptyl. Ak sú splnené difrakčné podmienky, štruktúrny faktor nadobúda štandardný tvar

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^N f_j \tau_j \exp[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)],$$

kde x_j, y_j, z_j sú frakčné súradnice j -teho atómu v základnej bunke. Štruktúrny faktor sa vo všeobecnosti vyjadruje ako komplexné číslo, ktoré sa môže zapísať v tvare $|F|\exp(i\varphi)$, kde $|F|$ je **absolútna hodnota štruktúrneho faktora** (syn. **modul štruktúrneho faktora, štruktúrna amplitúda**) a φ je **fáza štruktúrneho faktora**.

mriežkový faktor L

multiplikatívny faktor vo výraze pre amplitúdu rozptylu od celého kryštálu v rámci kinematickej teórie difrakcie, ktorý zohľadňuje rozmery kryštálu

Pre kryštál v tvare rovnobežnostena, ktorý obsahuje $N_1 \times N_2 \times N_3$ základných buniek so základnými vektormi $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$, má tvar

$$L(\mathbf{S}) = \sum_{m=0}^{N_1-1} \sum_{n=0}^{N_2-1} \sum_{p=0}^{N_3-1} \exp[2\pi i \mathbf{S} \cdot (m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c})],$$

kde $\mathbf{S}$ je rozptylový vektor.

interferenčná funkcia

funkcia $\sin^2(M\pi x)/\sin^2(\pi x)$, ktorá pre prirodzené čísla M nadobúda maximálnu hodnotu M^2 v prípade, že aj premenná x má celočíselné hodnoty; pre ostatné hodnoty x sa hodnota funkcie blíži k nule

Názov funkcie pochádza z optiky, kde sa využíva pri opise interferencie v rámci Fraunhoferovej difrakcie. V kinematickej teórii difrakcie vystupuje vo výraze pre intenzitu žiarenia a rovná sa LL^* , kde L je mriežkový faktor. Pre kryštál v tvare rovnobežnostena, ktorý obsahuje $N_1 \times N_2 \times N_3$ základných buniek so základnými vektormi $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$, má tvar

$$\frac{\sin^2(N_1\pi \mathbf{S} \cdot \mathbf{a})}{\sin^2(\pi \mathbf{S} \cdot \mathbf{a})} \frac{\sin^2(N_2\pi \mathbf{S} \cdot \mathbf{b})}{\sin^2(\pi \mathbf{S} \cdot \mathbf{b})} \frac{\sin^2(N_3\pi \mathbf{S} \cdot \mathbf{c})}{\sin^2(\pi \mathbf{S} \cdot \mathbf{c})},$$

kde $\mathbf{S}$ je rozptylový vektor. Funkcia nadobúda maximálne hodnoty $(N_1 N_2 N_3)^2$, ak sú splnené Laueho rovnice, t. j. ak sa vektor $\mathbf{S}$ rovná niektorému mriežkovému vektoru reciprokej mriežky.

Fourierova transformácia

integrálna transformácia, ktorá vyjadruje vzťah medzi vzájomne združenými veličinami V a F priameho a reciprokého priestoru

Transformácia má všeobecný tvar

$$F(\mathbf{S}) = \int V(\mathbf{r}) \exp[2\pi i(\mathbf{S} \cdot \mathbf{r})] d\mathbf{r},$$

kde $\mathbf{r}$ a $\mathbf{S}$ sú vektory z priameho, resp. reciprokého priestoru. V kinematickej teórii difrakcie sú vzájomne združenými veličinami rozptylový potenciál $V(\mathbf{r})$ pre jednotlivé druhy žiarenia (rtg, elektróny, neutróny) a príslušná amplitúda rozptylu $F(\mathbf{S})$, kde $\mathbf{S}$ je rozptylový vektor. Ak je oblasťou integrácie jeden atóm, výslednými veličinami transformácie sú atómové rozptylové faktory, resp. rozptylové dĺžky. Ak sa integruje cez objem základnej bunky, výslednými veličinami sú príslušné štruktúrne faktory. V rámci modelu bodovej štruktúry sa rozptylový potenciál nahrádza rozptylovými faktormi bodových atómov v príslušných polohách a integrovanie sa redukuje na súčet cez všetky atómy v základnej bunke, čo vedie k štandardnému vyjadreniu štruktúrneho faktora.

Fourierov rad

rad, pomocou ktorého je možné vyjadriť periodickú funkciu ako súčet komplexných exponenciálnych funkcií

V kinematickej teórii difrakcie je rozptylový potenciál jednotlivých druhov žiarení periodickou funkciou priestorových súradníc. Možno ho vyjadriť pomocou Fourierovho radu, ktorého koeficientmi sú príslušné štruktúrne faktory. V prípade difrakcie rtg žiarenia je elektrónová hustota $\rho(\mathbf{r})$ daná vzťahom

$$\rho(x, y, z) = \frac{1}{V} \sum_h \sum_k \sum_l F_{hkl} \exp[-2\pi i(hx + ky + lz)],$$

kde V je objem základnej bunky a štruktúrne faktory F_{hkl} sú vyjadrené v elektrónových jednotkách, h, k, l sú difrakčné indexy a x, y, z sú frakčné súradnice v základnej bunke. Analogický vzťah platí aj v prípade elektrónov a neutrónov. Vzhľadom na to, že experimentálne sa dá určiť len absolútna hodnota štruktúrnych faktorov, rozloženie rozptylových potenciálov nie je možné určiť ako súčet Fourierovho radu.

Bijvoetov pár (syn. Friedelov pár)

dvojica difrakcií s difrakčnými indexmi hkl a $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$; v reciprokej mriežke sú reprezentované mriežkovými bodmi symetricky združenými podľa začiatku mriežky

Friedelov zákon

pravidlo, podľa ktorého druhé mocniny absolútnych hodnôt štruktúrnych faktorov zodpovedajúcich Bijvoetovmu páru sú rovnako veľké aj pri necentrosymetrických štruktúrach, a preto je difrakčný obraz vždy centrosymetrický

Matematickým vyjadrením Friedelovho zákona je rovnosť $|F(hkl)|^2 = |F(\bar{h}\bar{k}\bar{l})|^2$. Zákon platí len v prípade, keď je zanedbateľná absorpcia žiarenia, resp. anomálna disperzia. Vo všeobecnosti prítomnosť absorpcie vedie k nenulovej imaginárnej zložke atómových faktorov a k následnému porušeniu Friedelovho zákona pre necentrosymetrické štruktúry. Vhodnou voľbou vlnovej dĺžky je možné efekt zosilniť, čo sa využíva pri riešení fázového problému.

Dynamická teória difrakcie

dynamické difrakčné javy

experimentálne potvrdené javy, ktoré nie je možné vysvetliť na základe kinematickej teórie difrakcie

Medzi najbežnejšie pozorované javy patria: primárna a sekundárna extinkcia, nižšia intenzita difraktovaných zväzkov pri difrakcii na veľmi dokonalých monokryštáloch, Borrmannov jav, pendellösung a Renningerov jav.

primárna extinkcia

zoslabenie intenzity difraktovaného žiarenia v dôsledku viacnásobnej difrakcie na tej istej osnove mriežkových rovín v rámci jedného mozaikového bloku

Efekt sa zosilňuje s rastúcim rozmerom oblasti koherentného rozptylu a je výraznejší pri intenzívnejších difrakciách, ktoré majú väčšie hodnoty štruktúrneho faktora. Jav ovplyvňuje intenzitu difraktovaných zväzkov pri difrakcii röntgenového žiarenia a neutrónov.

sekundárna extinkcia

zoslabenie intenzity difraktovaného žiarenia zapríčinené odtienením hlbšie uložených mozaikových blokov blokmi, ktoré sa nachádzajú bližšie k povrchu kryštálu a sú v difrakčnej polohe

Primárne žiarenie, ktoré preniká do hlbšie položených blokov, je oslabované difrakciou v blokoch, ktorými prechádza. Kinematická teória neuvažuje s úbytkom intenzity primárneho žiarenia v dôsledku difrakcie, ale len s úbytkom v dôsledku absorpcie. Jav ovplyvňuje intenzitu difraktovaných zväzkov pri difrakcii rtg žiarenia a neutrónov.

viacnásobná difrakcia

súčasná difrakcia na viacerých sústavách mriežkových rovín, ktorá vzniká, keď sa tieto roviny dostanú do difrakčných polôh vhodným nastavením orientácie monokryštálu vzhľadom na primárny zväzok žiarenia (→ Renningerov jav)

Jav nastáva, keď sa viac než dva mriežkové body reciprokej mriežky súčasne nachádzajú na Ewaldovej guľovej ploche. Pojem viacnásobnej difrakcie sa používa aj na názorné vysvetlenie rozdielu medzi kinematickou a dynamicou teóriou difrakcie. Viacnásobná difrakcia sa v tomto prípade chápe ako postupná difrakcia od mriežkových rovín tej istej osnovy, čo vedie k zníženiu intenzity príslušnej difrakcie. Je zanedbateľná v kryštáloch, ktorých rozmery sú menšie než extinkčná dĺžka. Kinematická teória takúto viacnásobnú difrakciu zanedbáva, dynamická, naopak, zohľadňuje.

Borrmannov jav (syn. anomálna transmisia)

dynamický difrakčný jav, ktorý spočíva v anomálnom zvýšení priepustnosti pre rtg žiarenie alebo pre neutróny cez dokonalý monokryštál v Laueho geometrii, ak je nastavený v presnej difrakčnej polohe

V dvojvlnovej aproximácii dynamickej teórie prechádzajú kryštálom v okolí difrakčnej polohy dve Blochove vlny s amplitúdami modulovanými v smere difrakčného vektora. Tok energie žiarenia smeruje do kryštálu pozdĺž difraktujúcich rovín. Efektívny absorpčný koeficient pre jednu vlnu výrazne vzrastá a pre druhú sa výrazne znižuje oproti štandardnému absorpčnému koeficientu daného kryštálu. Kryštálom prechádza vlna s nižším absorpčným koeficientom. Jav bol objavený pri difrakcii rtg žiarenia a neskôr potvrdený aj pri neutrónoch. V prípade rtg žiarenia je Borrmannov jav slabší pri p -polarizácii. V niektorej literatúre je jav označovaný „komplementárne“ ako **anomálna absorpcia**.

pendellösung (syn. kyvadlové riešenie)

dynamický difrakčný jav, ktorý súvisí s moduláciou amplitúdy prechádzajúcej a difraktovanej vlny v kolmom smere na vstupný povrch kryštálu

Amplitúdy prechádzajúcej a difraktovanej vlny sú modulované v kolmom smere na vstupný povrch kryštálu s periódou rovnajúcou sa extinkčnej dĺžke. Poloha maxím (t. j. vzdialenosť od povrchu kryštálu) prechádzajúcej vlny sa

prítom zhoduje s polohou miním difraktovanej vlny. Pri prechode vlnenia kryštálom v difrakčnej polohe tak dochádza k periodickému „prelievaní“ energie z prechádzajúcej vlny do difraktovanej a naopak. Jav spôsobuje typický pruho-
vitosť kontrast pozorovaný pri prechode žiarenia klinovitým kryštálom.

Borrmannov trojuholník (syn. Borrmannov vejár)

oblasť v kryštáli, ktorá je ohraničená smermi prechádzajúcej a difraktovanej vlny v Laueho geometrii a v ktorej dochádza k viacnásobnej difrakcii žiarenia

V prípade, že zväzok rtg žiarenia alebo neutrónov je užší než hrúbka kryštálu, oblasť má v reze vedenom difrakčnou rovinou typický tvar trojuholníka s jedným vrcholom v mieste dopadu žiarenia. Pri difrakcii elektrónov táto podmienka obyčajne nie je splnená, okrem toho je difrakčný uhol malý (jednotky stupňov), preto sa v tomto prípade označenie nepoužíva.

Renningerov jav

dynamický difrakčný jav pozorovaný na dokonalých monokryštáloch; ide o ovplyvnenie intenzity difraktovaného zväzku v dôsledku súčasnej excitácie ďalšej difrakcie v rámci toho istého kryštálu

Jav nie je možné vysvetliť v rámci kinematickej teórie difrakcie, ktorá nezohľadňuje zákon zachovania energie. V dynamickej teórii sa interpretuje pomocou viacvlnovej aproximácie. Vybudenie druhej difrakcie pri zachovaní difrakčnej polohy pre prvú difrakciu možno dosiahnuť otáčaním kryštálu okolo difrakčného vektora prvej difrakcie. Tento typ difrakčného experimentu je označovaný ako **Renningerov sken**.

faktor asymetrie

geometrický faktor, ktorý charakterizuje mieru odklonu difrakcie od symetrického usporiadania

Faktor asymetrie je definovaný pomocou smerových kosínusov vlnových vektorov dopadajúceho a difraktovaného rtg alebo neutrónového žiarenia vzhľadom na povrchovú normálu kryštálu. V prípade Braggovej geometrie pre jeho absolútnu hodnotu platí

$$\frac{\sin \omega}{\sin (2\theta - \omega)},$$

kde ω je uhol, ktorý zvierá smer dopadajúcej vlny s povrchom kryštálu. Význam má v dynamickej teórii difrakcie, kde ovplyvňuje okrajové podmienky pre vlnové pole v kryštáli.

Laueho geometria (syn. transmisné usporiadanie)

jedno z dvoch základných usporiadaní experimentu v rámci štúdia dynamických difrakčných javov, pri ktorom difraktovaný lúč postupuje do vnútra monokryštálu a vystupuje z jeho zadnej strany

Monokryštál sa najčastejšie upravuje do tvaru tenkej planoparalelnej alebo klinovitej doštičky s kvalitnými povrchovými rovinami, pričom difraktovaný zväzok vystupuje zo zadnej strany vzorky. Modifikáciou je **Laueho-Braggova geometria**, kde difraktovaný zväzok smeruje do vnútra vzorky a nevystupuje zadnou stenou, ale niektorou z bočných povrchových stien kryštálu.

Braggova geometria (syn. reflexné usporiadanie)

jedno z dvoch základných usporiadaní experimentu v rámci štúdia dynamických difrakčných javov, pri ktorom difraktovaný lúč vystupuje z monokryštálu cez tú istú povrchovú rovinu, na ktorú dopadá primárny zväzok

Ak ide o dokonalý monokryštál, na realizáciu experimentu postačuje jedna kvalitne upravená povrchová rovina, pričom na hrúbku kryštálu nie sú zhora kladené obmedzenia. Modifikáciou je **Braggova-Laueho geometria**, kde prechádzajúci lúč nevystupuje zadnou stenou, ale niektorou z bočných povrchových stien.

symetrická difrakcia

skrátene označenie geometrie usporiadania difrakčného experimentu na monokryštáli s definovanou povrchovou rovinou, v ktorej normálový vektor povrchovej roviny je rovnobežný s difrakčným vektorom zvolenej difrakcie

Pri difrakčných experimentoch sa z praktických dôvodov za symetrickú považuje aj difrakcia, pri ktorej normálový vektor je odchýlený od difrakčného vektora nanajvýš o niekoľko stupňov. Monokryštály používané v súčasných technológiách majú vždy istú odchýlku od udávanej orientácie, takže normála na povrchovú rovinu nie je vždy rovnobežná s difrakčným vektorom.

asymetrická difrakcia

skrátene označenie geometrie usporiadania difrakčného experimentu na monokryštáli s definovanou povrchovou rovinou, v ktorej normálový vektor povrchovej roviny leží v difrakčnej rovine, ale zvierá s difrakčným vektorom zvolenej difrakcie nenulový uhol

Uhol odklonu je určený metrikou kryštálovej mriežky a výberom difrakcie, je vždy menší ako Braggov uhol. Pri interpretácii merania sa štandardne tretí bázový vektor reciprokej mriežky stotožňuje s normálovým vektorom povrchovej roviny vzorky.

komplanárna difrakcia

skrátene označenie geometrie usporiadania difrakčného experimentu na monokryštáli s definovanou povrchovou rovinou, v ktorej normálový vektor povrchovej roviny leží v difrakčnej rovine

Symetrická aj asymetrická difrakcia sú komplanárne.

nekomplanárna difrakcia

skrátene označenie geometrie usporiadania difrakčného experimentu na monokryštáli s definovanou povrchovou rovinou, v ktorej normálový vektor povrchovej roviny neleží v difrakčnej rovine

Nekomplanárna difrakcia môže byť symetrická, ak normálový vektor povrchovej roviny leží v rovine, ktorá je kolmá na difrakčnú rovinu a v ktorej leží aj difrakčný vektor. V opačnom prípade ide o nekomplanárnu asymetrickú difrakciu.

základné rovnice dynamickej teórie

nekonečný homogénny systém algebrických rovníc pre amplitúdy vln šíriacich sa v periodickom prostredí

Pri difrakcii elektrónov a neutrónov ide o rovnice pre amplitúdy vlnovej funkcie, v prípade rtg žiarenia môžu byť formulované pre amplitúdy vektora intenzity elektrického poľa $\mathbf{E}$ alebo pre amplitúdy vektora elektrickej indukcie $\mathbf{D}$. V prípade vektora $\mathbf{D}$ môžu byť napísané v tvare

$$(K^2 - |\mathbf{k}_h|^2)\mathbf{D}_h = \sum_p \mathbf{k}_h \times (\mathbf{k}_h \times \mathbf{D}_p) \chi_{h-p},$$

kde K je veľkosť vlnového vektora vo vákuu, $\mathbf{k}_h = \mathbf{k}_o + \mathbf{h}$ a $\mathbf{k}_h$, $\mathbf{k}_o$ sú vlnové vektory v kryštáli smerujúce do začiatku $\mathbf{o}$ a do bodov $\mathbf{h}$ reciprokej mriežky, χ sú koeficienty Fourierovho rozvoja dielektrickej susceptibility kryštálu. Systém rovníc je homogénny, takže netriviálne riešenie existuje len v prípade, keď sa determinant systému rovná nule. Dôsledkom tejto požiadavky je $\rightarrow$ disperzná podmienka. Riešenia systému rovníc majú tvar Blochových vln.

Blochova vlna

riešenie vlnovej rovnice v periodickom prostredí; má tvar súčinu rovinnej vlny charakterizovanej vlnovým vektorom $\mathbf{k}$ a funkcie, ktorá má periodicitu kryštálovej mriežky; v dynamickej teórii difrakcie pre amplitúdy vektora elektrickej indukcie $\mathbf{D}$ môže byť vyjadrená v tvare

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \sum_{\mathbf{h}} \mathbf{D}_{\mathbf{h}} \exp(-2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r})$$

V dynamickej teórii difrakcie rtg žiarenia do vlnovej rovnice vstupuje dielektrická susceptibilita prostredia χ , ktorá je periodickou funkciou súradníc. V prípade dynamickej teórie difrakcie elektrónov má podobnú úlohu potenciálna energia elektrónov, v prípade jadrového rozptylu neutrónov Fermiho pseudopotenciál.

disperzná podmienka

algebraická rovnica $2n$ -tého stupňa, ktorá vyjadruje požiadavku nulovej hodnoty determinantu systému základných rovníc dynamickej teórie

Prirodzené číslo n sa zhoduje s rádom aproximácie a zodpovedá počtu bodov reciprokej mriežky, ktoré sa nachádzajú na Ewaldovej guľovej ploche alebo v jej blízkosti. Riešením je nekonečná množina prípustných veľkostí vlnových vektorov, z ktorých sa uplatňujú len tie, ktoré vyhovujú okrajovým podmienkam.

disperzná plocha

geometrické znázornenie riešení disperznej podmienky v reciprokom priestore

Je to plocha tvorená množinou začiatkových bodov všetkých prípustných vlnových vektorov získaných pri riešení rovnice zodpovedajúcej disperznej podmienke. Koncové body vlnových vektorov $\mathbf{k}_o$ dopadajúcej vlny ležia v začiatku $\mathbf{o}$, koncové body vlnových vektorov $\mathbf{k}_h = \mathbf{k}_o + \mathbf{h}$ difraktovaných vln ležia v príslušnom bode $\mathbf{h}$ reciprokej mriežky.

dvojvlnová disperzná plocha

geometrické znázornenie riešení disperznej podmienky pre prípad dvojvlnovej aproximácie

Disperzná plocha pozostáva z dvoch oddelených častí približne v tvare dvoch pretínajúcich sa guľových plôch s polomerom k , ktorých stredu sa nachádzajú v začiatku $\mathbf{o}$ a v príslušnom bode $\mathbf{h}$ reciprokej mriežky. Obidve časti disperznej plochy sa od guľových plôch líšia len v bezprostrednej blízkosti ich priesečníkovej kružnice. V tejto oblasti sa používa zjednodušený tvar disperznej podmienky

$$(k_o - k)(k_h - k) = \frac{1}{4} K^2 C^2 \chi_h \chi_{-h},$$

kde $C = 1$ pre elektrónové, neutrónové a rtg žiarenie s s -polarizáciou a $C = \cos 2\theta$ pre rtg žiarenie s p -polarizáciou. V reze vedenom bodmi $\mathbf{o}$ a $\mathbf{h}$ reciprokeho priestoru sa dve časti disperznej plochy nahrádzajú hyperbolami a guľové plochy s polomerom k priamkami. Priesečník týchto priamok sa označuje ako **Lorentzov bod**. V grafickom diagrame sa zvyčajne znázorňujú aj priamky zodpovedajúce guľovým plochám s polomerom K (veľkosť vlnového vektora vo vákuu), ich priesečník býva označený ako **Laueho bod**. Je totožný so stredom Ewaldovej kružnice prechádzajúcej bodmi $\mathbf{o}$ a $\mathbf{h}$ v Ewaldovej konštrukcii používanej v kinematickej teórii difrakcie.

jednovlnová aproximácia

približné riešenie základných rovníc dynamickej teórie pre prípad, keď v kryštáli nedochádza k difrakcii rtg žiarenia

Aproximácia opisuje situáciu, keď všetky body reciprokej mriežky sú dostatočne vzdialené od Ewaldovej guľovej plochy. Nekonečný systém základných

rovníc sa redukuje na jednu rovnicu s triviálnym riešením, kryštálom sa šíri len jedna vlna približne v smere primárneho žiarenia. Disperzná plocha má tvar guľovej plochy so stredom v začiatku reciprokej mriežky s polomerom $k = nK$, kde n je index lomu prostredia a K je veľkosť vlnového vektora vo vákuu. V grafickom znázornení disperznej plochy sa obyčajne zakresľuje aj guľová plocha s polomerom K zodpovedajúca vlnovému vektoru vo vákuu.

dvojjvlnová aproximácia

približné riešenie základných rovníc dynamickej teórie pre prípad, keď sú splnené geometrické podmienky na vznik jednej difrakcie

Aproximácia opisuje situáciu, keď sa na Ewaldovej guľovej ploche nachádza okrem začiatku ešte jeden bod reciprokej mriežky. Nekonečný systém základných rovníc sa redukuje na dve rovnice, kryštálom sa šíria dve vlny s nezanedbateľnou amplitúdou. Dvojjvlnová disperzná plocha má približne tvar dvoch pretínajúcich sa guľových plôch. Dvojjvlnová aproximácia je najčastejší a najpodrobnejšie analyzovaný prípad riešený v rámci dynamickej teórie difrakcie.

$(n + 1)$ -vlnová aproximácia

približné riešenie základných rovníc dynamickej teórie pre prípad, keď sú splnené geometrické podmienky na vznik n difrakcií, pričom $n > 1$

Aproximácia opisuje situáciu, keď sa na Ewaldovej guľovej ploche nachádzajú okrem začiatku ešte aspoň dva body reciprokej mriežky. Nekonečný systém základných rovníc sa redukuje na $n + 1$ rovníc, kryštálom sa šíri $n + 1$ vln s nezanedbateľnou amplitúdou. Aproximácia sa uplatňuje pri interpretácii Renningerovho javu.

okrajové podmienky

algebraické vzťahy, ktoré vyjadrujú požiadavku spojitosti príslušných zložiek vlnových vektorov a amplitúd vln na vstupnom a výstupnom povrchu kryštálu

Okrajové podmienky sú dôsledkom Maxwellových rovníc a všeobecných požiadaviek platných pri prechode elektromagnetického vlnenia rozhraním dvoch prostredí.

uzlový bod

priesečník disperznej plochy a kolmice na povrchovú rovinu kryštálu

Okrajové podmienky pre danú povrchovú rovinu spĺňajú len tie vlnové vektory $\mathbf{k}_o$ a $\mathbf{k}_h$, ktoré vychádzajú z uzlových bodov. Otáčaniu kryštálu vzhľadom na smer primárnej vlny zodpovedá posúvanie kolmice v smere rovnobežnom s povrchovou rovinou. V prípade zjednodušenej dvojjvlnovej aproximácie, keď je disperzná plocha nahradená hyperbolami, existujú pre každú polarizáciu dva uzlové body. V Laueho geometrii ležia na dvoch vetvách hyperboly,

v Braggovej geometrii ležia obidva uzlové body na tej istej vetve a existuje istý uhlový interval, pre ktorý neexistuje žiadny uzlový bod.

Upozornenie: V niektorej literatúre sa body reciprokej mriežky označujú ako uzly. Ide o dva odlišné pojmy!

parameter odchýlky η

redukovaný uhlový parameter, ktorý sa používa na vyjadrenie odklonu kryštálu od smeru, ktorý zodpovedá difrakčnej polohe

Je priamoúmerný odklonu $\Delta\theta$ kryštálu od difrakčnej polohy vyjadrenom v radiánoch a nepriamoúmerný absolútnej hodnote štruktúrneho faktora $|F|$. Zavedený je tak, aby šírka reflexných kriviek vyjadrených ako funkcia parametera odchýlky nezávisela od veľkosti štruktúrnych faktorov jednotlivých difrakcií. V prípade difrakcie elektrónov sa parameter odchýlky definuje v reciprokom priestore ako priemet vzdialenosti bodu reciprokej mriežky od Ewaldovej guľovej plochy do smeru primárneho zväzku.

reflexná krivka R

závislosť pomeru toku difraktovaného žiarenia k toku primárneho žiarenia (rtg alebo neutrónov) vyjadrená ako funkcia odchýlky primárneho zväzku od smeru zodpovedajúceho difrakčnej polohe

Vlastnosti reflexných kriviek rôznych difrakcií sa dajú jednotne opísať, ak je odklon vyjadrený pomocou parametra odchýlky η . V prípade Braggovej geometrie a pri zanedbaní absorpcie sa šírka oblasti úplného odrazu na reflexnej krivke rovná 2η . V prípade Laueho geometrie a pri zanedbaní absorpcie sa polšírka reflexnej krivky rovná 2η .

difrakčná krivka

krivka závislosti intenzity difraktovaného žiarenia od uhla ω odklonenia kryštálu od difrakčnej polohy

Na rozdiel od kinematickej teórie sa v dynamickej teórii difrakcie intenzita difraktovaného žiarenia nespája so smerom šírenia žiarenia, a teda s polohou detektora. Pri meraní s dostatočne širokou detektorovou štrbinou môže byť detektor nepohyblivý. Keďže pri meraní difrakcie na monokryštáloch sa používa monochromatizované žiarenie, a teda dvojkrýštálové usporiadanie, uhol ω vyjadruje vzájomnú uhlovú polohu dvoch po sebe difraktujúcich kryštálov a výsledná difrakčná krivka je konvolúciou reflexných kriviek prvého a druhého kryštálu. Tento typ merania, tzv. ω -sken, sa využíva aj pri analýze textúry v polykryštalických vzorkách.

Darwinova krivka

teoretická reflexná krivka rtg alebo neutrónového žiarenia v Braggovej geometrii zanedbávajúca absorpciu

Darwinova krivka je symetrická a pre hodnoty parametra odchýlky η z intervalu $\langle -1, 1 \rangle$ má hodnoty rovnajúce sa jednej (**Darwinovo plateau**), čo zodpovedá úplnému odrazu žiarenia. Prípady s absorpciou zodpovedá **Darwinova-Prinsova krivka**. Absorpcia potláča úplný odraz žiarenia a narúša symetriu reflexnej krivky.

transmisná krivka T

závislosť pomeru toku prechádzajúceho žiarenia k toku primárneho žiarenia (rtg alebo neutrónov) vyjadrená ako funkcia odchýlky primárneho zväzku od smeru zodpovedajúceho difrakčnej polohe

Odklon sa štandardne vyjadruje pomocou parametra odchýlky η . V prípade zanedbania absorpcie sú transmisná a reflexná krivka pre Laueho geometriu komplementárne.

integrálna reflexná mohutnosť

veličina definovaná ako integrál reflexnej krivky: $\int_{-\infty}^{\infty} R(\eta) d\eta$

Číselne sa rovná ploche pod reflexnou krivkou. Na rozdiel od integrálnej intenzity definovanej v kinematickej teórii difrakcie v dynamickej teórii je integračnou premennou uhol dopadu primárneho žiarenia, resp. parameter odchýlky η . Pre túto veličinu sa používa aj termín **integrálna intenzita difrakcie**, ktorý má však iný význam než integrálna intenzita difrakčného maxima definovaná v kinematickej teórii difrakcie.

integrálna intenzita transmisie

veličina definovaná ako integrál transmisnej krivky: $\int_{-\infty}^{\infty} [T(\eta) - T(\eta \rightarrow \infty)] d\eta$

Číselne sa rovná ploche pod transmisnou krivkou. Člen $T(\eta \rightarrow \infty)$ zohľadňuje nenulovú intenzitu žiarenia prechádzajúcu kryštálom ďaleko od difrakčnej polohy. Na rozdiel od integrálnej intenzity definovanej v kinematickej teórii difrakcie v dynamickej teórii je integračnou premennou uhol dopadu primárneho žiarenia, resp. parameter odchýlky η .

stojatá vlna röntgenového žiarenia

vlna vznikajúca interferenciou vln s amplitúdami D_o a D_h vlnového poľa zodpovedajúceho uzlovému bodu na jednej vetve dvojvlnovej disperznej plochy

Vzdialenosť susedných kmitní stojatej vlny sa rovná medzirovinnej vzdialenosti difraktujúcich rovín. Stojaté vlny sa využívajú pri štúdiu porúch kryštálovej štruktúry.

C Metódy štruktúrnej analýzy

štruktúrna analýza

v širšom význame štúdium štruktúry tuhých látok, kvapalín a plynov pomocou rtg žiarenia, neutrónov alebo elektrónov, prípadne inými metódami; v užšom význame štúdium kryštálovej štruktúry

štruktúrny parameter

kvantitatívny parameter charakterizujúci štruktúru amorfnej alebo kryštalickej látky

Pri amorfných látkach ide o údaje štatisticky charakterizujúce štruktúru danej amorfnej látky; patria medzi ne radiálna atómová hustota, párová korelačná funkcia a radiálna distribučná funkcia. Pri kryštalických látkach sú to údaje charakterizujúce ideálnu štruktúru danej kryštalickej látky, medzi ktoré patria mriežkové parametre, frakčné súradnice atómov, obsadzovacie faktory, teplotné faktory, vzorcová jednotka v asymetrickej časti základnej bunky, počet vzorcových jednotiek v základnej bunke, medziatómové vzdialenosti a väzbové uhly.

Štruktúrne parametre amorfných a kryštalických látok

radiálna atómová hustota $\rho(r)$

veličina vyjadrujúca stredný počet atómov pripadajúci na objemovú jednotku (t. j. hustotu počtu atómov) ako funkciu vzdialenosti r od štatisticky náhodne zvoleného vzťažného atómu

párová korelačná funkcia $W(r)$

podiel radiálnej atómovej hustoty a priemernej hustoty počtu atómov ρ_o vo vzorke amorfnej látky: $W(r) = \rho(r)/\rho_o$

radiálna distribučná funkcia $RDF(r)$

funkcia vyjadrujúca počet atómov pripadajúci na jednotkovú hrúbku guľovej vrstvy s polomerom r , $RDF(r) = 4\pi r^2 \rho(r)$

Integrál tejto funkcie od vzdialenosti r_1 po r_2 poskytuje počet atómov, ktoré sa nachádzajú v tomto intervale vzdialeností okolo priemerného vzťažného bodu, t. j. údaj s významom koordinačného čísla. Ak ide o látku skladajúcu sa aspoň z dvoch druhov atómov, aktuálne sú **parciálne** RDF vyjadrujúce distribúciu napr. atómov druhu A okolo vzťažného atómu B.

hustota (syn. objemová hmotnosť)

veličina definovaná ako podiel hmotnosti a objemu (napr. kryštálu), ktorej jednotkou v sústave SI je kg/m^3

V štruktúrnej analýze sa vyjadruje ako podiel hmotnosti atómov pripadajúcich na základnú bunku a jej objemu. Má význam pri stanovovaní počtu vzorcových jednotiek pripadajúcich na základnú bunku kryštálu.

medziatómová vzdialenosť

vzdialenosť medzi stredmi susedných atómov v kryštálovej štruktúre vyjadrovaná v nanometroch alebo angströmoch

V bodovej štruktúre je to vzdialenosť medzi susediacimi bodovými atómami.

väzbový uhol

uhol medzi dvoma úsečkami spájajúcimi stred zvoleného atómu so stredmi dvoch ďalších atómov, s ktorými je uvažovaný atóm chemicky viazaný

frakčné súradnice (syn. zlomkové súradnice)

bezrozmerné súradnice používané na vyjadrenie polohy atómu v základnej bunke; definujú sa ako podiel súradnice ťažiska atómu (vyjadrenej jednotkou dĺžky) a mriežkového parametra v príslušnom smere (vyjadreného rovnakou jednotkou dĺžky)

Frakčné súradnice nadobúdajú hodnoty z intervalu $\langle 0, 1 \rangle$, pričom sú definované vzťahmi

$$x_{\text{fr}} = \frac{x}{a}, \quad y_{\text{fr}} = \frac{y}{b}, \quad z_{\text{fr}} = \frac{z}{c},$$

kde a, b, c sú $\rightarrow$ mriežkové parametre.

obsadzovací faktor

číslo z intervalu $(0, 1)$, ktoré vyjadruje štatistické obsadenie konkrétnej polohy v základnej bunke daným druhom atómov

Obsadzovacie faktory sa používajú pri kryštáloch, v ktorých sa na danom mieste v základnej bunke môžu nachádzať atómy aspoň dvoch druhov alebo aj vakancie.

vzorcová jednotka

chemická náplň asymetrickej časti základnej bunky totožná s daltoniánskym chemickým vzorcom

V základných bunkách (okrem priestorovej grupy $P1$) sa nachádza väčší počet vzorcových jednotiek, ktorý sa označuje písmenom Z .

C 1 Difrakčné metódy

difrakčná metóda

experimentálna metóda štúdia difrakčného obrazu kryštalických i nekryštalických látok využívajúca difrakciu röntgenového žiarenia, neutrónov a elektrónov na získanie informácií o štruktúrnych parametroch látok, najmä o mriežkových parametroch, usporiadaní atómov, symetrii usporiadania, veľkosti kryštalických zŕn a ich prednostnej orientácii, o vnútorných napätiach, štruktúrnych poruchách, kvalitatívnom a kvantitatívnom fázovom zložení a orientácii monokryštálov

Difrakčné metódy sa delia na monochromatické a polychromatické, monokryštálové a polykryštálové; podľa spôsobu registrácie difrakčného obrazu na filmové a elektronické. Využívajú žiarenie s vlnovými dĺžkami, ktoré sa veľkosťou rádovo zhodujú s medziatómovými vzdialenosťami v kondenzovaných látkach.

vzorka

objekt, ktorý je predmetom skúmania difrakčnými metódami

Vzorkou môže byť monokryštál, kompaktná alebo prášková polykryštalická látka, ale aj vhodným spôsobom pripravený a upravený preparát prispôsobený požiadavkám konkrétnej difrakčnej metódy. Osobitnú skupinu tvoria vzorky pripravené rôznymi planárnymi technológiami.

monokryštál

kryštalický jedinec, ktorý sa kvalitou blíži → ideálnemu alebo → ideálne mozaikovému kryštálu

kompaktná vzorka

kompaktné zoskupenie najčastejšie jemnozrnných, náhodne orientovaných drobných kryštálov

Skúmanými objektmi takéhoto typu sú jemnozrnné kovy, tenké vrstvy a nanokryštály.

preparát

vzorka pripravená alebo upravená vhodným spôsobom tak, aby spĺňala požiadavky zodpovedajúce jednotlivým difrakčným metódam

Preparáty sa zvyčajne pripravujú do podoby prášku (**práškový preparát**) drvením v achátovej alebo korundovej miske, upravujú sa glykolovaním. Na dosiahnutie náhodného usporiadania kryštalitov sa pridávajú do nich plnidlá. Preparáty môžu byť orientované a neorientované.

orientovaný preparát

preparát, v ktorom sa zámerne vytvára prednostné usporiadanie

Preparát tohto typu sa používa, ak ide o kryštalické fázy s vrstevnatou štruktúrou, v ktorých sa skúma usporiadanie vrstiev v smere na ne kolmom (→ textúra).

difrakcia röntgenového žiarenia

jav podmienený interferenciou elektromagnetických vln z rtg oblasti spektra koherentne rozptýlených na elektrónoch atómov alebo iónov látky a využívaný najmä na štruktúrnú a fázovú analýzu kryštalických látok

difrakcia elektrónov

jav podmienený vlnovými vlastnosťami elektrónov a ich interakciou s elektromagnetickým poľom v okolí atómov látky

Vzhľadom na malú prenikavosť elektrónov slúži na skúmanie štruktúry povrchov tuhých látok (→ LEED, RHEED) a získavanie štruktúrnych informácií (→ TEM, SAED, CBED, HRTEM) zo vzoriek pripravených v podobe veľmi tenkých fólií.

difrakcia neutrónov

jav podmienený vlnovými vlastnosťami neutrónov a vznikajúci ako dôsledok ich pružného rozptylu na jadrách atómov (→ jadrový rozptyl) alebo na ich magnetických momentoch (→ magnetický rozptyl) a následnej interferencie koherentných zväzkov

Vzhľadom na prenikavosť neutrónového žiarenia má využitie aj pri štúdiu veľkoobjemových vzoriek.

monochromatická difrakčná metóda

difrakčná metóda slúžiaca na štúdium monokryštálov i polykryštalických látok využívajúca žiarenie, ktoré možno charakterizovať jednou vlnovou dĺžkou

Pri charakteristickom röntgenovom žiarení ide o vlnové dĺžky z oblasti od 0,05 nm po 0,25 nm, pri neutrónovom žiarení okolo 0,1 nm (tepelné neutróny), pri difrakcii elektrónov približne od 0,0025 nm (urýchľujúce napätie ~ 200 kV) do 0,012 nm (urýchľujúce napätie ~ 10 kV).

polychromatická difrakčná metóda

difrakčná metóda využívajúca spojité spektrum rtg žiarenia

Metódy tohto typu sa používajú na určovanie bodovej symetrie (→ Laueho grupy) a orientácie monokryštálov (→ Laueho metóda).

monokryštálová difrakčná metóda

difrakčná metóda, pri ktorej študovanou vzorkou je monokryštál

Ide najmä o metódy využívajúce rôzne typy monokryštálových difraktometrov, o metódu otáčaného kryštálu, Weissenbergovu metódu, precesnú metódu, Laueho metódu. Slúžia na získavanie údajov využívaných pri kryštálovej štruk-

túrnej analýze, poskytujú informácie o mriežkových parametroch, o systematickom vyhasínaní difrakcií a bodovej symetrii (→ Laueho grupy).

metóda otáčaného kryštálu

monokryštalová difrakčná metóda, pri ktorej sa malý monokryštál otáča (alebo osciluje) okolo zvolenej mriežkovej priamky; na monokryštál dopadá úzky zväzok lúčov smerujúci kolmo na os otáčania a difrakčný obraz sa zaznamenáva na film uložený vo valcovej komôrke, ktorej os je totožná s osou otáčania

Difrakčný záznam má tvar vrstevníc, preto umožňuje vypočítať periódu identity pozdĺž zvolenej mriežkovej priamky, ale neumožňuje difrakčným stopám jednoznačne priradiť difrakčné indexy.

Weissenbergova metóda

monokryštalová difrakčná metóda odlišujúca sa od metódy otáčaného kryštálu synchronizáciou oscilácií monokryštálu so striedavým horizontálnym posunom filmu pozdĺž osi otáčania monokryštálu

Zaradením vhodných clôn sa dosiahne rozvinutie vybratej vrstevnice na celú plochu filmu. Získaný difrakčný záznam – **weissenbergogram** – umožňuje priradiť difrakčným stopám difrakčné indexy a určiť systematické vyhasínanie. Pri tejto metóde sa faktor násobnosti rovná jednej, preto sa pred zavedením monokryštalových difraktometrov údaje o intenzite difrakcií získané pomocou nej používali pri riešení kryštalových štruktúr.

precesná metóda

monokryštalová difrakčná metóda využívajúca precesný pohyb monokryštálu synchronizovaný s precesným pohybom rovinného detektora (filmu alebo PSD), pričom primárny zväzok žiarenia dopadá kolmo na os precesie a orientácia monokryštálu sa volí tak, aby niektorá jeho významná mriežková priamka bola zhodná s osou precesie

Zaradením vhodne umiestnených clôn sa dá získať difrakčný záznam predstavujúci zväčšený obraz časti mriežkovej roviny reciprokej mriežky. Získaný obrazec má symetriu niektorej z 10 rovinných bodových grúp (→ rovinné bodové grupy).

Laueho metóda

polychromatická difrakčná metóda slúžiaca na získanie informácií o bodovej symetrii skúmaného monokryštálu s obmedzením na 11 Laueho grúp alebo o jeho orientácii v laboratórnej vzťažnej sústave

Na nepohybujúci sa monokryštál dopadá úzky zväzok polychromatického žiarenia a difrakčný obraz sa zaznamenáva na film alebo plošným detektorom

lauegram

difrakčný obrazec vytvorený Laueho metódou a zachytený na film alebo plošným polohovo citlivým detektorom

Lauegram má symetriu niektorej z 10 rovinných bodových grúp ($\rightarrow$ rovinné bodové grupy).

monokryštalová difraktometrická metóda

monokryštalová difrakčná metóda využívajúca niektorý z typov monokryštalových difraktometrov, pri ktorej sa kryštal postupne nastavuje do difrakčných polôh natáčaním okolo niekoľkých osí a difrakcie sa registrujú nastavovaním polôh detektora

Osi natáčania kryštálu sa zvyčajne označujú gréckymi písmenami χ , φ a ω , poloha detektora uhlovou súradnicou 2θ . Výsledkom je postupne vznikajúci číslcový difrakčný záznam obsahujúci množinu difrakčných maxim charakterizovaných difrakčnými indexmi a intenzitami.

polykryštalová metóda (syn. prášková metóda)

difrakčná metóda používaná na štúdium práškových alebo kompaktných polykryštalických vzoriek, pri ktorej sa využíva najmä projekcia trojrozmerného difrakčného obrazu do jedného rozmeru

Využíva sa filtrované alebo monochromatizované žiarenie, pričom sa difrakčný obraz zachytáva na film v kazetách ($\rightarrow$ Debyeova-Scherrerova metóda) alebo pomocou bodových, či polohovo citlivých detektorov. Získané údaje sa používajú na kvalitatívnu a kvantitatívnu fázovú analýzu, štúdium textúry, výpočet mriežkových parametrov, stanovenie veľkosti kryštálov, vnútorného napätia a na spresňovanie kryštalových štruktúr.

Debyeova-Scherrerova metóda

polykryštalová difrakčná metóda, pri ktorej sa rovinná vzorka alebo preparát v tvare tenkej tyčinky umiestňuje do stredu valcovej komôrky, na ktorej stenu sa umiestňuje film v Debyeovom-Scherrerovom, Straumanisovom alebo van Arkelovom usporiadaní

Tyčinka sa zvyčajne otáča okolo svojej osi, zväzok žiarenia dopadá kolmo na túto os. Výsledkom je difrakčný záznam – **debyeogram**.

malouhlová difrakcia (syn. difrakcia pri malom uhle dopadu)

rtg difrakčná metóda využívaná pri analýze veľmi tenkých kryštalických vrstiev

Pri tejto metóde primárne žiarenie dopadá na vzorku pod konštantným malým uhlom, typicky v rozmedzí $1^\circ - 3^\circ$. Počas merania sa pohybuje len detektor, pred ktorým je umiestnená Sollerova clona s lamelami orientovanými kolmo na difrakčnú rovinu. Najčastejšie sa používa v kombinácii s paralelnou optikou zabezpečenou Göbelovým parabolickým zrkadlom v primárnom žiarení.

malouhlový rozptyl

metóda využívaná na štúdium častíc, ktorých rozmer je oveľa väčší než vlnová dĺžka žiarenia

Primárny zväzok musí byť dobre kolimovaný, rozptýlené žiarenie v uhlovom intervale $0,1^\circ - 10^\circ$ sa zaznamenáva plošným detektorom. Veľkosti študovaných častíc sa pohybujú od jednotiek do stoviek nanometrov. V závislosti od použitého žiarenia ide o **malouhlový rozptyl röntgenového žiarenia** (SAXS) alebo o **malouhlový rozptyl neutrónov** (SANS). Získané výsledky sa interpretujú na základe vhodne zvoleného modelu.

malouhlový rozptyl pri veľmi malom uhle dopadu

metóda využívaná na štúdium vrstevnatých štruktúr pozostávajúcich z častíc, ktorých rozmer je oveľa väčší než vlnová dĺžka žiarenia

Metóda kombinuje prednosti malouhlového rozptylu s povrchovou citlivosťou malouhlovej difrakcie. Využíva sa na štúdium usporiadania častíc na rovinnom povrchu, ktorých veľkosti sa pohybujú od jednotiek do stoviek nanometrov. Rozptýlené žiarenie sa zaznamenáva plošným detektorom. V závislosti od použitého žiarenia ide o **malouhlový rozptyl rtg žiarenia pri veľmi malom uhle dopadu** (GISAXS) alebo o **malouhlový rozptyl neutrónov pri veľmi malom uhle dopadu** (GISANS). Získané výsledky sa interpretujú na základe vhodne zvoleného modelu.

difrakčný kužeľ

kužeľ tvorený množinou difraktovaných lúčov zodpovedajúcich jednému difrakčnému uhlu, ktorý vzniká pri difrakcii na polykryštalických látkach; os kužeľa tvorí primárny zväzok lúčov, vrcholový uhol kužeľa sa rovná štvornásobku difrakčného uhla (4θ)

Pri difrakcii na polykryštalických látkach vzniká súčasne viacero súosových difrakčných kužeľov s rôznymi vrcholovými uhlami 4θ , ktoré tvoria difrakčný obraz polykryštalickej látky.

difrakčná čiara (syn. difrakčná línia)

priesečnica difrakčného kužeľa s plochou detektora skladajúca sa z veľkého počtu difrakčných stôp ležiacich tesne vedľa seba a pochádzajúcich od difrakcie na jednotlivých rôzne orientovaných kryštalitoch skúmanej vzorky

Tvar difrakčnej čiary závisí od tvaru plochy detektora, najčastejšie ide o kružnicu alebo ich časti. Charakteristikami difrakčnej čiary sú: difrakčný uhol, profil, šírka, vrcholová intenzita a integrálna intenzita. Difrakčné čiary registrované dvojrozmernými detektormi sa v závislosti od veľkosti kryštalitov skúmanej vzorky javia ako **súvislé** alebo ako **nesúvislé** – **škvrnité**. Termín difrakčná čiara sa v prenesenom význame používa aj na označenie difrakčných maxim na difrakčných záznamoch polykryštalických vzoriek registrovaných jednorozmernými alebo bodovými detektormi.

profil difrakčnej čiary

závislosť nameranej intenzity difraktovaného žiarenia od difrakčného uhla v oblasti príslušnej difrakčnej čiary

Nameraný profil difrakčnej čiary je konvolúciou funkcie zohľadňujúcej prístrojové rozšírenie a **vlastného (fyzikálneho) profilu** difrakčnej čiary, ktorý je ovplyvnený len vlastnosťami skúmanej vzorky.

aproximácia profilu difrakčnej čiary

nahradenie experimentálne získaného profilu difrakčnej čiary analyticky vyjadriteľnou funkciou; slúži na ďalšie spracovanie údajov

Používa sa najmä Gaussova funkcia, Lorentzova (Cauchyho) funkcia, Stoke-sova funkcia, Voigtova funkcia, pseudovoigtova funkcia a Pearsonova funkcia. Tieto funkcie sa v angličtine označujú ako *Profile Shape Functions (PSF)*.

integrálna intenzita difrakčnej čiary

veľčina úmerná ploche ohraničenej profilom difrakčnej čiary a líniou pozadia

Môže sa vzťahovať na intenzitu zväzku primárneho žiarenia (**absolútna integrálna intenzita**) alebo na integrálnu intenzitu inej difrakčnej čiary (**relatívna integrálna intenzita**).

vrcholová intenzita

intenzita difrakčnej čiary zodpovedajúca jej maximálnej hodnote na difrakčnom zázname

integrálna šírka difrakčnej čiary

podiel integrálnej intenzity difrakčnej čiary a jej vrcholovej intenzity

Okrem prístrojových parametrov závisí od veľkosti kryštálov, prítomnosti štruktúrnych porúch a od zvyškového napätia II. a III. druhu.

polšírka difrakčnej čiary

šírka profilu difrakčnej čiary v jej polovičnej výške

Okrem prístrojových parametrov závisí od veľkosti kryštálov, prítomnosti štruktúrnych porúch a od zvyškového napätia II. a III. druhu. Z angličtiny pochádza u nás bežne používaná skratka *FWHM* (*Full Width at Half Maximum*).

prístrojové rozšírenie

rozšírenie experimentálne stanoveného profilu difrakčnej čiary vplyvom parametrov prístrojového usporiadania

Prístrojové rozšírenie závisí od parametrov difraktometra, ako sú efektívna veľkosť ohniska zdroja žiarenia, polomer goniometra, rozmery štrbín, prípadne optické chyby príslušného usporiadania.

Rachingerova procedúra

grafická alebo analytická metóda používaná pri rozklade profilu difrakčnej čiary na zložky zodpovedajúce vlnovým dĺžkam spektrálnych čiar $K\alpha_1$ a $K\alpha_2$ vznikajúcich v laboratórnych zdrojoch rtg žiarenia

indexovanie difrakcií

analytická, porovnávacia alebo grafická procedúra slúžiaca na priradenie difrakčných indexov jednotlivým difrakčným maximám na difrakčnom zázname

Difrakcia elektrónov

elektrónová difrakčná analýza

štúdium štruktúrnych parametrov kryštálov, symetrie povrchov tuhých látok, ale aj usporiadania nablízko v amorfných látkach pomocou difrakcie zväzkov elektrónov

Malá prenikavosť elektrónového lúča vyžaduje špeciálnu prípravu tenkých preparátov rozdrobením, rezaním na ultramikrotóme, chemickým leptaním alebo iónovým bombardovaním. Malá vlnová dĺžka ($\sim 0,0025 \text{ nm} - 0,012 \text{ nm}$) poskytuje rozlišovaciu schopnosť niekoľkých mikrometrov až nanometrov. Vzhľadom na malú extinkčnú dĺžku elektrónov je pri interpretácii difrakčných záznamov nevyhnutné opierať sa o dynamickú teóriu difrakcie. Použitie elektrónovej mikroskopie poskytuje zobrazenie s extrémnym zväčšením (v tmavom a svetlom poli, HRTEM) a získanie difrakčných obrazcov (SAED, CBED).

SAED (Selected Area Electron Diffraction)

elektrónová difrakčná metóda využívajúca transmisný elektrónový mikroskop so zväzkom rovnobežných elektrónových lúčov, pri ktorej sa analyzovaná časť preparátu ohraničuje apertúrnou clonou

Excitovaný objem má veľkosť $\sim 1 \mu\text{m}^3$. Na difrakčnom obraze sa najčastejšie nachádzajú difrakcie s jedným nulovým indexom (ZOZL – Zero Order Laue Zone), prípadne s jedným indexom rovnajúcim sa jednej (FOLZ – First Order Laue Zone), zriedka s vyšším (HOLZ – Higher Order Laue Zone). Súmernosť difrakčného obrazca zodpovedá niektorej z 10 bodových rovinných grúp.

Kikučiho obrazec

symetrický obrazec tvorený líniami, ktorý vzniká na difúznom pozadí elektrónogramov monokryštálov ako dôsledok neelastického a následného elastického rozptylu elektrónov

Tvorí ho úseky hyperbol, ktoré vznikajú pri preparátoch s väčšou hrúbkou. Pomocou Kikučiho obrazca možno určiť orientáciu kryštálu ($\rightarrow$ parameter odchýlky) s oveľa väčšou presnosťou ako z bodového difrakčného obrazu. Symetria Kikučiho obrazcov zodpovedá niektorej z 10 bodových rovinných grúp.

CBED (Convergent Beam Electron Diffraction)

elektrónová difrakčná metóda využívajúca transmisný elektrónový mikroskop s kónicky sústredeným zväzkom elektrónových lúčov a umožňujúca uskutočniť experimenty pri rôznych uhloch dopadu zväzku na preparát

Excitovaný objem má veľkosť $\sim 1 \text{ nm}^3$. Rozmiestnenie difrakčných stôp v obraze a interferenčné obrazce v nich majú symetriu zodpovedajúcu niektorej z 10 bodových rovinných grúp.

HRTEM (High Resolution Transmission Electron Microscopy)

zobrazovacia metóda s rozlíšením pod $0,2 \text{ nm}$, pri ktorej sa využíva interferencia prechádzajúceho elektrónového lúča s jedným alebo niekoľkými difraktovanými lúčmi, resp. interferencia viacerých difraktovaných lúčov

Pri interpretácii detailov v obraze sa používajú teoretické, počítačom simulované obrazce, ktoré sa počítajú na základe dynamickej teórie difrakcie elektrónov. Pre tieto výpočty je nevyhnutné poznať štrukturálne parametre, rozmery základnej bunky, priestorovú grupu, absorpciu, hrúbku vzorky, orientáciu vzorky vzhľadom na smer primárneho lúča a prístrojové parametre.

LEED (Low-Energy Electron Diffraction)

elektrónová difrakčná metóda využívajúca zväzky elektrónov urýchlených relatívne nízkym elektrickým napätím ($20 \text{ V} - 200 \text{ V}$) a dopadajúcich kolmo na povrch preparátu

Využíva sa hlavne na určenie symetrie povrchovej vrstvy kryštálov.

RHEED (Reflection High-Energy Electron Diffraction)

elektrónová difrakčná metóda používaná na sledovanie povrchov kryštalických materiálov, ktorá sa vyznačuje veľmi malým uhlom dopadu elektrónového lúča na preparát (štandardne menším než 5°) a podstatne vyšším urýchľujúcim napätím ($10 \text{ kV} - 30 \text{ kV}$)

Využíva sa *in situ* počas prípravy epitaxných vrstiev a multivrstiev s presne definovanou hrúbkou.

EBSA (Electron Back Scattering Diffraction)

elektrónová difrakčná metóda využívajúca difrakciu spätne rozptýlených elektrónov

Používa sa na určovanie orientácie kryštalických materiálov, textúry, na štúdium porúch kryštálovej štruktúry, na identifikáciu fáz, hraníc zŕn, lokálnych nehomogenít i na mapovanie zvyškového napätia.

Difrakcia neutrónov

neutrónová difrakčná analýza

štúdium štruktúry tuhých látok, kvapalín a plynov pomocou difrakcie tepelných neutrónov (s energiou okolo 0,06 eV), ktorým zodpovedá vlnová dĺžka blízka medziatómovým vzdialenostiam v kondenzovaných látkach (rádovo 10^{-10}m)

Využíva sa na štruktúrnú analýzu monokryštálov aj polykryštalických látok, na určovanie magnetického usporiadania v kryštáloch, na presné stanovenie mriežkových parametrov a na meranie a mapovanie vnútorného napätia v kryštalických látkach. V porovnaní s röntgenovými difrakčnými metódami dokáže analyzovať oveľa hrubšie vzorky, je podstatne citlivejšia na ľahké atómy, dokáže rozlíšiť izotopy toho istého chemického prvku (určovanie polôh izotopov vodíka), pričom analyzované vzorky radiačne prakticky nezaťažuje; niektoré látky sa však po ožiarení môžu stať rádioaktívnymi.

jadrový rozptyl neutrónov

rozptyl podmienený silnou fyzikálnou interakciou medzi neutrónmi a atómovými jadrami

Využíva sa na určenie usporiadania atómov v kryštáloch metódou neutrónovej difrakcie, umožňuje určiť polohy atómových jadier a ich tepelný pohyb. Jadrá sú podstatne menšie než vlnová dĺžka zodpovedajúca tepelným neutrónom, preto veľkosť rozptylovej dĺžky pri jadrovom rozptyle nezávisí od difrakčného uhla a difrakčné maximá sú intenzívne aj pri vyšších difrakčných uhloch.

magnetický rozptyl neutrónov

rozptyl podmienený elektromagnetickou interakciou magnetického momentu neutrónov s magnetickými momentmi atómov

Využíva sa na určenie magnetického usporiadania v kryštáloch metódou neutrónovej difrakcie.

C 2 Určovanie a spresňovanie kryštálovej štruktúry

Základné pojmy

kryštálová štruktúrna analýza

súbor postupov, ktorých cieľom je stanovenie kryštálovej štruktúry danej kryštalickej látky; zaužívaný je aj termín **riešenie kryštálovej štruktúry**

Jej etapami sú: určenie symetrie (zaradenie do kryštalografickej sústavy, bodovej a priestorovej grupy), určenie rozmerov a typu základnej bunky a počtu vzorcových jednotiek v nej, výpočet absolútnych hodnôt štruktúrnych faktorov, riešenie fázového problému, výpočet trojrozmernej funkcie elektrónovej hustoty, stanovenie frakčných súradníc atómov a nakoniec overenie a spresnenie navrhnutého modelu štruktúry.

elektrónová hustota

počet elektrónov pripadajúci na jednotku objemu

V kryštalografii sa vyjadruje ako trojrozmerná spojitá funkcia priestorových súradníc, zvyčajne v rozmedzí základnej bunky kryštálu. Bežne sa vyjadruje ako počet elektrónov pripadajúci na kubický angström.

mapa elektrónovej hustoty

zobrazenie elektrónovej hustoty zvyčajne v rozmedzí jednej základnej bunky kryštálu ako rez niektorou kryštalograficky významnou rovinou, prípadne ako priemet do takejto roviny

Analogický význam má **mapa hustoty magnetických momentov**, ktorá sa získava pri neutrónových difrakčných experimentoch s využitím magnetického rozptylu.

meraná guľa

časť objemu reciprokeho priestoru, ktorá sa pri experimente využíva na získavanie difrakčných údajov slúžiacich na určenie kryštálovej štruktúry

Zvyčajne predstavuje iba časť objemu ohraničeného limitujúcou guľovou plochou.

Fourierova syntéza

v štruktúrnej analýze vyjadrenie elektrónovej hustoty pomocou Fourierovho radu, ktorého koeficientmi sú štruktúrne faktory

Rozlišuje sa niekoľko jej druhov – syntéza F_0 , diferenčná syntéza, Pattersonova syntéza a špeciálne syntézy.

syntéza F_o

Fourierova syntéza, pri ktorej sú koeficientmi vo Fourierovom rade experimentálne určené absolútne hodnoty štruktúrnych faktorov, ktorým sú priradené fázy vypočítané z predbežne navrhnutého modelu štruktúry kryštálu

diferenčná syntéza

Fourierova syntéza, pri ktorej sa ako koeficienty vo Fourierovom rade používajú rozdiely $F_o - F_c$, kde F_o sú štruktúrne faktory používané v syntéze F_o a F_c sú štruktúrne faktory vypočítané na základe navrhnutého modelu štruktúry

Používa sa pri určovaní polôh atómov s malými protónovými číslami (H, Be, B).

špeciálna syntéza

Fourierova syntéza, pri ktorej sa ako koeficienty vo Fourierovom rade používajú rôzne upravené a skombinované štruktúrne faktory

Fourierova mapa

mapa elektrónovej hustoty získaná Fourierovou transformáciou štruktúrnych faktorov

V úvodnom štádiu štruktúrnej analýzy ide o syntézu F_o .

falošné maximum

maximum na Fourierovej mape, ktoré nezodpovedá skutočnej polohe atómu a je dôsledkom kumulácie chýb pri Fourierovej syntéze

Ide o nepresné určenie absolútnych hodnôt štruktúrnych faktorov a ich fáz, ako aj o dôsledok ohraničeného počtu členov Fourierovho radu.

fázový problém

problém určenia fáz štruktúrnych faktorov, ktoré sa nedajú získať priamo z experimentálnych údajov

Rieši sa rôznymi metódami, v minulosti najmä metódou skúšania a chýb ($\rightarrow$ metódy riešenia kryštálovej štruktúry).

Výpočet štruktúrnych faktorov

absolútna stupnica (syn. absolútna škála)

stupnica na porovnávanie absolútnych hodnôt štruktúrnych faktorov, ktoré sa v nej vyjadrujú v elektrónových jednotkách

V tejto stupnici sú štruktúrne faktory násobkami amplitúd rtg žiarenia rozptýleného v uvažovanom smere voľným elektrónom ($\rightarrow$ Thomsonov rozptyl).

škálovací faktor

číslo (násobiteľ), pomocou ktorého sa štruktúrne faktory získané na základe experimentálnych údajov prepočítavajú na absolútnu stupnicu

absolútny člen Fourierovho rozvoja

nultý člen F_{000} Fourierovho rozvoja elektrónovej hustoty, ktorý vnáša mierku (počet elektrónov v základnej bunke) do škálovacieho faktora

Absolútny člen nie je možné určiť experimentálne, lebo difraktovaný zväzok s difrakčnými indexmi 000 sa šíri v smere pokračujúceho primárneho lúča.

Wilsonov graf

graf používaný na určenie veľkosti škálovacieho faktora a stanovenie centrosymetrickej alebo necentrosymetrickej štruktúry

Predstavuje závislosť logaritmu podielu nameranej intenzity difrakčných maxim $I(hkl)$ a súčtu druhých mocnín atómových faktorov $\sum f_i^2$ atómov základnej bunky kryštálu ako funkcie medzirovínnej vzdialenosti d_{hkl} :

$$\log \frac{I(hkl)}{\sum f_i^2} = f(d_{hkl}) .$$

modifikovaný štruktúrny faktor

štruktúrny faktor vyjadrený v absolútnej stupnici s prihliadnutím na absolútne hodnoty ostatných štruktúrnych faktorov ($\rightarrow$ jednotkový štruktúrny faktor, $\rightarrow$ normalizovaný štruktúrny faktor)

jednotkový štruktúrny faktor

podiel štruktúrneho faktora F_{hkl} konkrétneho difrakčného maxima a štruktúrneho faktora F_{000} , teda štruktúrneho faktora s difrakčnými indexmi 000 ($\rightarrow$ absolútny člen Fourierovho rozvoja)

normalizovaný štruktúrny faktor

modifikovaný štruktúrny faktor, ktorého upravená hodnota sa získa vydelením jeho pôvodnej hodnoty druhou odmocninou zo strednej hodnoty druhých mocnín absolútnych hodnôt všetkých štruktúrnych faktorov

zostrená Fourierova mapa

mapa elektrónovej hustoty získaná Fourierovou transformáciou modifikovaných štruktúrnych faktorov

Jej maximá sú v porovnaní s Fourierovou mapou ostrejšie a výraznejšie.

renormalizácia štruktúrnych faktorov

úprava normalizovaných štruktúrnych faktorov, ktorou sa dosiahne, že v každej paritnej skupine difrakčných maxim sa stredná hodnota druhých mocnín absolútnych hodnôt štruktúrnych faktorov bude rovnať číslu 1

Štruktúrna analýza

model štruktúry

predbežný model usporiadania atómov v základnej bunke kryštálu vytvorený na základe experimentálnych výsledkov s využitím apriórnych štruktúrnych informácií, ktorý sa v ďalšom procese štruktúrnej analýzy postupne spresňuje a využíva na predbežný výpočet fáz štruktúrnych faktorov

bodová štruktúra

idealizovaný model štruktúry kryštálu, v ktorom sú reálne trojrozmerné atómy nahradené bodovými atómami

bodový atóm

bodový útvar, ktorý sa používa ako náhrada reálneho trojrozmerného atómu pri navrhovaní modelu štruktúry kryštálu a ktorému sa priradia frakčné súradnice, zachová sa atómový rozptylový faktor a teplotný faktor

apriórna štruktúrna informácia

informácia o vzájomnom priestorovom usporiadaní istej skupiny atómov prítomnej v štruktúre kryštálu; vyplýva z chemických vlastností atómov alebo je známa z iných, už vyriešených kryštálových štruktúr

štruktúrny fragment

časť štruktúry kryštálu, niekoľko atómov základnej bunky, ktorých vzájomné usporiadanie bolo určené v prvej etape štruktúrnej analýzy, zvyčajne metódami *ab initio*; informácia o ňom uľahčuje ďalší postup pri určovaní štruktúry kryštálu

nezávislá časť základnej bunky (syn. asymetrická časť základnej bunky)

najmenšia časť kryštálovej štruktúry definovanej frakčnými súradnicami atómov zodpovedajúcich jednej vzorcovej jednotke, z ktorej uplatnením operácií symetrie možno získať náplň celej základnej bunky

metóda riešenia kryštálovej štruktúry

matematický postup používaný pri štruktúrnej analýze kryštálov a súvisiaci najmä s riešením fázového problému

Patria sem vektorové metódy, priame metódy, metódy značeného vektora, iteračné metódy a metóda *ab initio*.

metóda *ab initio*

metóda riešenia kryštálovej štruktúry, ktorá nevyžaduje apriórnu znalosť časti štruktúry

Pomocou nej sa obvykle určí poloha iba niektorých význačných atómov, zvyčajne s vyššími protónovými číslami, ktoré majú rozhodujúci vplyv na difrakčný obraz.

vektorové metódy (syn. Pattersonove metódy)

metódy štruktúrnej analýzy využívajúce Pattersonovu funkciu, pri ktorých sa správnosť riešenia posudzuje na základe zhody medzi množinou medziatómových vektorov navrhnutého modelu štruktúry a množinou získanou z Pattersonovej funkcie vypočítanej z difrakčných údajov

Pattersonova funkcia

trojrozmerná funkcia, ktorej maximá sú lokalizované v miestach zodpovedajúcich koncovým bodom medziatómových vektorov spájajúcich atómy patriace do základnej bunky kryštálu, pričom najväčšie maximum je v začiatku vzťažnej sústavy

Maximum v začiatku zodpovedá súčtu všetkých ostatných maxím.

Pattersonova syntéza

Fourierova syntéza, pri ktorej koeficientmi vo Fourierovom rade sú druhé mocniny absolútnych hodnôt štruktúrnych faktorov; je Fourierovou transformáciou len intenzít difraktovaného žiarenia

Pri N atómoch má N

diferenčná Pattersonova mapa

mapa Pattersonovej funkcie vypočítanej tak, že ako koeficienty sa využívajú rozdiely druhých mocnín štruktúrnych faktorov získaných meraním pôvodnej vzorky a meraním vzorky, v ktorej bol niektorý atóm štruktúrneho motívu nahradený ťažším atómom

Harkerov rez

časť Pattersonovej mapy obsahujúca viaceré **Harkerove maximá** zodpovedajúce vektorom spájajúcim atómy, ktorých polohy sú vzhľadom na niektoré operácie symetrie ekvivalentné

Môže ísť o rovinný rez alebo o priamku na Pattersonovej mape, ktoré obsahujú ľahko interpretovateľné informácie. Harkerove rezy sú užitočné na začiatku štruktúrnej analýzy, slúžia na potvrdenie prítomnosti niektorých prvkov symetrie, ktoré sa nedajú určiť zo systematického vyhasínania.

satelitné maximum

dodatočné maximum na Pattersonovej mape, ktoré môže byť využité na potvrdenie príslušnosti riešenej štruktúry k predpokladanej priestorovej grupe

superpozičná metóda (syn. koincidenčná metóda)

jedna z vektorových (Pattersonových) metód štruktúrnej analýzy, pri ktorej sa kombinujú dve Pattersonove funkcie, pričom jedna má posunutý začiatok do známej polohy niektorého atómu

metóda najstrmšieho poklesu (syn. metóda gradientu)

metóda štruktúrnej analýzy, pri ktorej sa hľadá minimum niektorého z R -faktorov

vzorkovanie Pattersonovej funkcie

vyjadrenie Pattersonovej funkcie pomocou hodnôt na konečnej množine bodov priestoru vytvorením siete s takou veľkosťou oka, aby sa nevynechalo niektoré maximum funkcie, ale aby počet bodov bol čo najmenší

metóda ťažkého atómu

metóda štruktúrnej analýzy využívajúca výrazne väčší atómový rozptylový faktor prítomného ťažšieho atómu

Takýto atóm podstatným spôsobom ovplyvňuje difrakčný obraz, čím uľahčuje postup pri stanovovaní štruktúry kryštálu. Prítomnosť ťažkého atómu podmieňuje vznik výrazných maxím na Pattersonovej alebo Fourierovej mape; využíva sa aj pri metóde izomorfného nahradenia.

priama metóda

metóda riešenia fázového problému, pri ktorej sa na určenie fáz využíva pravdepodobnosť existencie určitých vzťahov medzi fázami štruktúrnych faktorov najintenzívnejších difrakčných maxím

Zo skutočnosti, že rozptylovými centrami sú diskkrétne atómy a že elektrónová hustota nemôže byť záporná, vyplývajú ohraničenia intervalu možných hodnôt fáz štruktúrnych faktorov, ktoré umožňujú počiatočný odhad ich veľkosti.

fázová relácia

vzťah medzi fázami štruktúrnych faktorov získaný využitím apriórnej štruktúrnej informácie a umožňujúci výpočet fáz priamo z absolútnych hodnôt štruktúrnych faktorov, bez výpočtu Pattersonovej funkcie

univerzálny štruktúrny invariant

lineárna kombinácia fáz štruktúrnych faktorov, ktorá nezávisí od voľby začiatku vzťažnej sústavy v štruktúre kryštálu

štruktúrny seminvariant

lineárna kombinácia fáz štruktúrnych faktorov, ktorá sa nemení pri takých zmenách polohy začiatku vzťažnej sústavy, ktoré sú invariantné vzhľadom na operácie priestorovej grupy symetrie kryštálu

N -fázový invariant

funkcia N nezávislých fáz štruktúrnych faktorov, ktorá nezávisí od umiestnenia začiatku vzťažnej sústavy

rád štruktúrneho invariantu

počet fáz štruktúrnych faktorov, z ktorých je štruktúrny invariant (seminvariant) utvorený

Karleho-Hauptmanove matice

matice používané na riešenie fázového problému, ktoré obsahujú isté kombinácie štruktúrnych faktorov

Pri praktickom určovaní fáz štruktúrnych faktorov sa vyžaduje, aby determinant zostavenej matice (**Karleho-Hauptmanov determinant**) bol nezáporný a aby dosahoval maximálnu hodnotu. Podmienka nezápornosti determinantu je ekvivalentná s podmienkou nezápornosti elektrónovej hustoty v základnej bunke.

trieda symetricky ekvivalentných začiatkov

množina takých začiatkov súradnicovej sústavy v kryštálovej štruktúre, ktoré majú okolo seba rovnaké priestorové usporiadanie prvkov symetrie

metóda mnohých riešení

metóda na určovanie fáz štruktúrnych faktorov, pri ktorej sa vychádza z niekoľkých už známych fáz (zo štartovacieho súboru fáz), pričom fázy zvyšných štruktúrnych faktorov sa počítajú v niekoľkých cykloch, využívajúc relácie medzi fázami

Optimálne hodnoty fáz sa hľadajú pomocou testov spoľahlivosti.

holografická metóda

priama metóda na určenie štruktúry kryštálov využívajúca určitý druh atómov kryštálu ako vnútorný zdroj röntgenového žiarenia, ktoré postupuje k detektoru jednak priamo (referenčná vlna), jednak po rozptyle na susedných atóмоch (objektové vlny), čím dochádza k interferencii a vzniku hologramu

Numerickou rekonštrukciou hologramu sa získa trojrozmerný obraz časti štruktúry kryštálu nachádzajúcej sa v blízkosti vnútorných zdrojov žiarenia.

metóda značeného vektora

metóda kryštálovej štruktúrnej analýzy využívajúca rozdiel v difrakčných záznamoch získaných opakovaným meraním, a to po zámene niektorého z atómov v štruktúre atómom so značne odlišným rozptylovým faktorom (**metóda izomorfneho nahradenia**) alebo po zmene vlnovej dĺžky žiarenia (**metóda anomálneho rozptylu**)

metóda SIRAS

kombinácia metódy anomálneho rozptylu s metódou izomorfneho nahradenia

Označenie je odvodené z anglického názvu Single Isomorphous Replacement with Anomalous Scattering.

metóda molekulárneho nahradenia

metóda analogická metóde izomorfneho nahradenia; používa sa pri riešení štruktúr biopolymérov a využíva náhradu časti štruktúry molekulárnym fragmentom so známou štruktúrou

Používa sa pri vektorových metódach.

iteračná metóda

metóda kryštálovej štruktúrnej analýzy, pri ktorej sa vychádza zo známych polôh niekoľkých atómov v základnej bunke kryštálu; polohy ostatných atómov sa získavajú a spresňujú postupne vo viacerých iteračných cykloch, využíva sa pri tom spresňovanie fáz štruktúrnych faktorov metódou skúšania a chýb

metóda skúšania a chýb

metóda, pri ktorej sa postupne, po malých krokoch, mení model štruktúry kryštálu, na jeho základe sa počítajú štruktúrne faktory a potom sa pomocou R -faktora posudzuje ich zhoda so štruktúrnymi faktormi určenými experimentálne

Rietveldova metóda

metóda spresňovania štruktúry na základe záznamu získaného práškovou difrakčnou metódou, pri ktorej sa využíva celý profil difrakčného záznamu vrátane pozadia; využíva metódu najmenších štvorcov

R-faktor

štatistický parameter, ktorým sa hodnotí súlad medzi experimentálne určenými hodnotami $|F_o|$ štruktúrnych amplitúd a hodnotami $|F_c|$ vypočítanými na základe navrhnutého modelu kryštálovej štruktúry

R -faktor zohľadňujúci rozdiely štruktúrnych amplitúd má tvar

$$R = \frac{\sum_i ||F_o| - |F_c||_i}{\sum_i |F_o|_i},$$

kde sa sčíta cez všetky dostupné difrakcie. Používajú sa aj iné definície R -faktora obsahujúce druhé mocniny štruktúrnych amplitúd, resp. druhé mocniny ich rozdielov. R -faktor sa zvykne vyjadrovať aj v percentách. Analogický parameter sa používa aj pri Rietveldovej metóde, kde sa zohľadňujú rozdiely nameraných a vypočítaných intenzít difrakčného záznamu práškovej vzorky vrátane pozadia.

mapa R -faktorov

mapa zobrazujúca závislosť R -faktora od súradníc vybraného atómu s nepresne určenou polohou pri metóde najstrmšieho poklesu (gradientu)

spresňovanie kryštálovej štruktúry

postup na získavanie čo najpresnejších hodnôt frakčných súradníc atómov v základnej bunke, parametrov tepelného pohybu (teplotných faktorov), obsadzovacích faktorov, prípadne aj ďalších parametrov charakterizujúcich štruktúru kryštálu metódou najmenších štvorcov tak, aby R -faktor bol čo najmenší

V súčasnosti sa dosahujú hodnoty $R < 1\%$.

spresňovanie s viazaním

spresňovanie kryštálovej štruktúry s redukovaným počtom spresňovaných štruktúrnych parametrov definovaním algebrických väzieb medzi niektorými z nich

spresňovanie s ohnivením

spresňovanie kryštálovej štruktúry s vymedzením intervalov možných, resp. prípustných hodnôt niektorých spresňovaných štruktúrnych parametrov

kvalita spresňovania

štatistický parameter charakterizujúci kvalitu výsledku spresňovania štruktúry

Parameter je nepriamo úmerný počtu stupňov voľnosti daného spresňovania, t. j. rozdielu celkového počtu nameraných hodnôt intenzít a počtu spresňovaných parametrov znížených o počet väzieb medzi nimi. Spoľahlivosť spresňovania sa označuje skratkou GoF (z anglického názvu Goodness of Fit).

C 3 Fázová analýza polykryštalických látok

fáza látky

homogénna časť heterogénnej vzorky oddelená od ostatných častí rozhraním, na ktorom sa fyzikálne, prípadne i chemické vlastnosti menia skokom (nespojito)

Termín fáza sa používa aj v iných významoch, napr. pri interferencii vlnenia alebo na pomenovanie časti štruktúrneho faktora.

fázová analýza

identifikácia kryštalických fáz obsiahnutých v analyzovanej vzorke z kvalitatívneho hľadiska (kvalitatívna fázová analýza) alebo aj z kvantitatívneho hľadiska (kvantitatívna fázová analýza)

kvalitatívna fázová analýza

fázová analýza slúžiaca na určenie kryštalických fáz prítomných v študovanej vzorke

Najčastejšie sa uskutočňuje porovnávaním difrakčných údajov s údajmi v referenčných databázach.

kvantitatívna fázová analýza

fázová analýza, pri ktorej sa určuje hmotnostná koncentrácia fáz prítomných v analyzovanej vzorke (ich percentuálne zastúpenie); vychádza z porovnania intenzít difrakcií zodpovedajúcich jednotlivým fázam a zo skutočnosti, že intenzita difraktovaného žiarenia je priamoúmerná difraktujúcemu objemu príslušnej fázy

Kvalitatívna fázová analýza

referenčná databáza (syn. referenčná knižnica, kartotéka)

databáza difrakčných údajov kryštalických fáz (štandardov) získaných experimentálne alebo výpočtom

V súčasnosti sú najpoužívanejšie digitalizované databázy PDF-1 až PDF-4 (z anglického Powder Diffraction File).

index databázy (syn. kľúč databázy)

údaj, podľa ktorého je referenčná databáza usporiadaná; najčastejšie ide o chemické zloženie (v abecednom usporiadaní), veľkosť medzirovinných vzdialeností alebo o integrálnu intenzitu difrakčných maxím (difrakčných čiar)

Známe sú tieto indexy: Finkov, Daveyov, Frevelov, Hanawaltov, Key-Word-in-Context, Matthewsov súradnicový index. V súčasnosti sú na vyhľadávanie v indexoch k dispozícii účinné počítačové programy a digitalizované databázy.

priame usporiadanie databázy

abecedné usporiadanie referenčnej databázy podľa chemického zloženia kryštalických látok

inverzné usporiadanie databázy

usporiadanie referenčnej databázy podľa veľkosti medzirovinných vzdialeností

štandard

kryštalická látka, ktorej difrakčné údaje sú súčasťou referenčnej databázy, alebo látka, ktorej difrakčný záznam je k dispozícii

filtrácia

prvá etapa fázovej analýzy, v ktorej sa z referenčnej databázy vyberajú také difrakčné záznamy, ktoré sa čo najviac podobajú difrakčnému záznamu študovanej vzorky množinou medzirovinných vzdialeností, prípadne aj intenzitami difrakčných čiar

Na filtráciu sa používajú rôzne kritériá (filtre): zhodnosť, rozdielnosť či podobnosť difrakčných záznamov, informácie o druhu látky (minerály, anorganické látky, organické látky, cementy, zeolity, výbušniny, polyméry, supravodiče, drogy a lieky...), jej chemickom zložení (vzorec, koncentrácia jednotlivých prvkov v hmotnostných a atómových percentách), kryštálovej štruktúre (mriežkové parametre, priestorová grupa, počet vzorcových jednotiek v základnej bunke).

chybové okno

parameter kvalitatívnej fázovej analýzy predstavujúci najväčší prípustný rozdiel medzi hodnotami medzirovinných vzdialeností, ktoré zodpovedajú difrakčným maximám študovanej vzorky a hodnotami prislúchajúcimi štandardu

miera zhody

číselný parameter udávajúci spoľahlivosť identifikačnej procedúry pri porovnávaní nameraného difrakčného obrazu s referenčným

Miera zhody sa označuje skratkou FoM (z anglického názvu Figure of Merit). Vysoké hodnoty FoM (> 20) znamenajú dobrú zhodu.

Kvantitatívna fázová analýza

optimalizácia

druhá etapa fázovej analýzy, začiatok kvantitatívnej fázovej analýzy, v ktorej sa hľadá taká kombinácia difrakčných záznamov vybraných v prvej etape, aby zhoda medzi vytvorenou kombináciou a difrakčným záznamom vzorky bola čo najlepšia

metóda vnútorného štandardu

metóda kvantitatívnej fázovej analýzy, pri ktorej sa na jednom difrakčnom zázname porovnávajú integrálne intenzity difrakčných maxím analyzovanej vzorky a difrakčných maxím referenčnej látky (štandardu) pridanej do analyzovanej vzorky v známej hmotnostnej koncentrácii

vnútorný štandard

kryštalická látka, ktorá sa v práškovej forme pridáva do analyzovanej vzorky zvyčajne v pomere hmotností 1 : 1 a ktorá slúži na kvantitatívnu fázovú analýzu difrakčnými metódami

metóda vonkajšieho štandardu

metóda kvantitatívnej fázovej analýzy, pri ktorej sa porovnávajú integrálne intenzity významných difrakčných maxím dvoch difrakčných záznamov – záznamu analyzovanej vzorky a záznamu referenčnej látky (štandardu) získaných pri rovnakých experimentálnych podmienkach

vonkajší štandard

referenčná kryštalická látka používaná pri kvantitatívnej fázovej analýze, ktorej difrakčný záznam, najmä integrálna intenzita difrakčných maxím, slúži na porovnanie s integrálnymi intenzitami difrakčných čiar fáz prítomných v analyzovanej vzorke, a tým na stanovenie ich hmotnostných koncentrácií, resp. percentuálneho hmotnostného zastúpenia

kalibrácia

postup slúžiaci na určenie závislosti hmotnostnej koncentrácie sledovanej fázy od pomeru integrálnej intenzity niektorej z jej silných difrakčných čiar a integrálnej intenzity difrakčnej čiar štandardu

Realizuje sa meraním pomeru týchto intenzít pri známom pomere hmotnostných koncentrácií sledovanej fázy a štandardu. Výsledkom je veľkosť kalibračnej konštanty, a ak sa meria pri viacerých hodnotách hmotnostnej koncentrácie sledovanej fázy, aj grafická závislosť.

kalibračná konštanta

koeficient sprostredkujúci vzťah medzi hmotnostnou koncentráciou kryštalickej fázy prítomnej v študovanej vzorke a integrálnou intenzitou niektorej jej difrakčnej čiar; používa sa pri kvantitatívnej fázovej analýze

Určuje sa kalibráciou alebo výpočtom zo známych štruktúrnych parametrov sledovanej fázy. Hodnoty kalibračných konštánt závisia aj od konkrétneho experimentálneho usporiadania. Používajú sa pri metódach vonkajšieho i vnútorného štandardu.

absolútna kvantitatívna fázová analýza

analýza, pri ktorej sa na kalibráciu nepoužívajú vonkajšie ani vnútorné štandardy, ale kalibračné konštanty sa získavajú výpočtom opierajúcim sa o znalosť štruktúry príslušných fáz a zohľadňujúcim experimentálne usporiadanie

metóda bez štandardu

metóda kvantitatívnej fázovej analýzy využívajúca vopred stanovené kalibračné konštanty pre všetky kryštalické fázy (väčšinou pre najsilnejšiu difrakčnú čiaru fázy), o ktorých sa predpokladá, že sú súčasťou vzorky

Pomer hmotnostných koncentrácií dvoch fáz sa určuje zo súčinu pomeru intenzít ich difrakčných čiar a pomeru príslušných kalibračných konštánt. Špeciálnym iteratívnym postupom však tento pomer možno získať aj bez vopred stanovených kalibračných konštánt.

metóda referenčných zmesí

metóda kvantitatívnej fázovej analýzy, pri ktorej sa difraktogram študovanej vzorky porovnáva so sériou vopred získaných difraktogramov vzoriek s rôznym percentuálnym zastúpením tých istých fáz

metóda prídavku

metóda kvantitatívnej fázovej analýzy, pri ktorej sa hmotnostná koncentrácia konkrétnej fázy získava meraním integrálnej intenzity vybranej difrakčnej čiary na troch záznamoch získaných snímkaním pôvodnej vzorky a ďalších dvoch vzoriek, do ktorých sa postupne pridáva známe množstvo sledovanej fázy

Uplatňuje sa pri nižších koncentráciách sledovanej fázy.

zried'ovacia metóda

metóda kvantitatívnej fázovej analýzy, pri ktorej sa do študovanej vzorky pridáva iný materiál v známej hmotnostnej koncentrácii, ktorý neobsahuje žiadnu z fáz prítomných vo vzorke (môže byť aj amorfný); hmotnostná koncentrácia sledovanej fázy sa určuje zo zmeny integrálnej intenzity niektorej jej difrakčnej čiary, pričom treba počítať aj so zoslabením žiarenia prechodom cez pridávaný materiál

Používa sa pri vyšších koncentráciách sledovanej fázy.

faktorová analýza

metóda kvantitatívnej fázovej analýzy, pri ktorej sa zo študovanej vzorky vytvorí viacero frakcií s kvalitatívne zhodným, ale kvantitatívne odlišným fázovým zložením

Metódou vnútorného štandardu sa potom určia kalibračné konštanty pre jednotlivé fázy s využitím všetkých frakcií. Rozdiely vo výsledkoch sa pripisujú najmä rozdielnej reálnej štruktúre frakcií a dajú sa zohľadniť pri výslednom určovaní hmotnostných koncentrácií jednotlivých fáz obsiahnutých v študovanej vzorke.

rietveldovská kvantitatívna analýza

spôsob určenia podielov jednotlivých fáz vo vzorke, pri ktorom sa využívajú informácie z celého difrakčného záznamu vrátane pozadia, nie iba z difrakčných čiar (tzv. *full-pattern-analysis*)

Difrakčný záznam analyzovanej vzorky sa vyjadrí ako mnohorozmerný vektor $\mathbf{x}$ ($x_1, x_2, \dots, x_n$), kde súradnice x_i predstavujú intenzity difraktovaného žiarenia v jednotlivých bodoch difrakčného záznamu, a rovnako sa vyjadria difrakčné záznamy čistých fáz ako $\mathbf{y}_j$ ($y_{j1}, y_{j2}, \dots, y_{jn}$) obsiahnutých vo vzorke (získavajú sa experimentálne alebo výpočtom na základe znalosti ich kryštálovej štruktúry), pričom sa hľadajú také ich koncentrácie w_j , pri ktorých výraz

$$R(w_1, w_2, \dots, w_n) = \left| \mathbf{x} - \sum_{j=1}^n w_j \mathbf{y}_j \right|^2$$

dosahuje minimálnu hodnotu.

vypočítaný difrakčný záznam

difrakčný záznam získaný výpočtom difrakčných uhlov a intenzít difrakčných čiar zodpovedajúcich konkrétnej kryštalickej fáze alebo zmesi fáz, a to na základe údajov o ich kryštálovej štruktúre

Porovnávanie vypočítaných a experimentálne získaných difrakčných záznamov je základom rietveldovských postupov pri kvantitatívnej analýze a pri spresňovaní kryštálových štruktúr.

semikvantitatívna fázová analýza

približné určovanie fázového zloženia zmesi kryštalických látok vizuálnym porovnávaním difraktogramu analyzovanej vzorky so súborom vypočítaných difrakčných záznamov

mapovanie fázového zloženia

experimentálne určovanie laterálneho rozloženia fáz v študovanej vzorke

profilovanie fázového zloženia

experimentálne určovanie hĺbkového rozloženia fáz v študovanej vzorke

C 4 Textúra polykryštalických vzoriek

textúra (syn. prednostná orientácia)

výraznejšie zastúpenie niektorej orientácie kryštalických zŕn v polykryštalickej vzorke

Textúrou sa vyznačujú prakticky všetky technicky používané polykryštalické látky, ale aj niektoré horniny. Prejavuje sa vo vzorkách tvorených fázami s dobrou a výbornou štiepatelnosťou (napr. grafitom, galenitom, trigonálnymi karbonátmi, slúdami) alebo pri dostatočne jemnozrnných fázach so zachovanou morfológiou kryštálov (napr. horninotvorných zeolitoch, azbestoch, ílových mineráloch). Vzniká najmä pri kryštalizácii, plastickej deformácii, pri technologickej príprave a úprave materiálov – valcovaní a ťahaní za studena, elektrolytickom alebo inom nanášaní tenkých vrstiev. Podmieňuje anizotropiu fyzikálnych vlastností materiálov. Zobrazuje sa pólóvymi obrazcami konštruovanými pomocou stereografickej projekcie alebo pomocou orientačnej distribučnej funkcie. Textúra nevplýva na polohy difrakčných maxím, ovplyvňuje len ich intenzity.

os textúry

smer v skúmanej vzorke, vzhľadom na ktorý sa kryštalické zrná vo vzorke prednostne orientujú niektorým svojím významným kryštalografickým smerom

Konkrétny kryštalografický smer kryštalitov môže byť rovnobežný s osou textúry alebo s ňou môže zvierat určitý uhol. Vo vzorkách s vláknovou textúrou je os textúry zhodná s osou vlákna.

stupeň textúry

kvantitatívny parameter, ktorý udáva pomernú časť prednostne orientovaných kryštalických zŕn polykryštalickej vzorky; vzorka s dokonale náhodnou orientáciou zŕn je bez textúry

typ textúry

kvalitatívny parameter vyjadrujúci spôsob usporiadania kryštalických zŕn vo vzorke s textúrou alebo proces, pri ktorom textúra vzniká

Podľa usporiadania kryštalických zŕn sa rozlišujú jednoosová, dvojsová, prípadne viacsová textúra, podľa procesov vedúcich k vzniku textúry najmä deformačná textúra a kryštalizačná textúra.

pólóvý obrazec

stereografická projekcia časti projekčnej gule, na ktorej je vrstevnicami znázornená hustota pólov zvolenej mriežkovej roviny, resp. kryštalografického smeru

V pólovom obrazení býva vyznačený aj smer (alebo smery), ktorý charakterizuje orientáciu vzorky. Na základe toho možno z pólového obrazca vyčítať súvislosť medzi tvarom, resp. orientáciou vzorky, a vzniknutou textúrou.

pól mriežkovej roviny

priesečník normály na zvolenú mriežkovú rovinu konkrétneho kryštalitu vzorky s projekčnou guľou

Termín sa používa pri znázornení textúry pomocou stereografickej projekcie. Póly zodpovedajúce roviny s istým Millerovým symbolom a reprezentujúce rôzne kryštalinity vytvárajú na projekčnej guľi množinu bodov, ktorá v prípade vzorky bez textúry má na rozdiel od vzorky s textúrou všade rovnakú hustotu. Pre názornosť sa miesta s rovnakou hustotou pólov môžu pospájať vrstevnicami alebo zobraziť odlišnými farbami.

orientačná distribučná funkcia

funkcia slúžiaca na 3D prezentáciu textúry v polykryštalickej vzorke; vyjadruje objemový zlomok kryštalických zŕn s určitou orientáciou v závislosti od troch vhodne zvolených uhlových súradníc, zvyčajne Eulerových uhlov

Vzťahuje sa na orientáciu konkrétnej mriežkovej roviny alebo kryštalografického smeru a matematicky sa vyjadruje pomocou modifikovaných guľových funkcií vzhľadom na súradnicovú sústavu viazanú na vonkajší tvar vzorky. Nedá sa merať priamo, získava sa na základe viacerých pólových obrazcov. Keďže je funkciou troch premenných, prezentuje sa formou série rezov pre vybrané hodnoty jednej z troch uhlových premenných.

jednoosová textúra (syn. axiálna textúra)

textúra, ktorú je možné úplne charakterizovať jedinou osou textúry

Os textúry je určitým spôsobom spojená s tvarom, resp. s významným smerom vzorky, napr. s osou drôtu. V polykryštalických tenkých vrstvách býva významným smerom normála povrchu podložky.

vláknová textúra

jednoosová textúra, pri ktorej kryštalické zrná tvoriace kompaktné vlákno majú tendenciu orientovať sa niektorým svojím kryštalografickým smerom najčastejšie rovnobežne s osou vlákna – osou textúry; orientácia ostatných kryštalografických smerov je náhodná

Vyskytuje sa v drôtoch ťahaných za studena, charakterizuje sa symbolom príslušného kryštalografického smeru zvierajúceho s osou textúry istý uhol. Pri **jednoduchšej vláknovej textúre** je významný kryštalografický smer rovnobežný s osou textúry, pri **prstencovej vláknovej textúre** je na ňu kolmý a pri **špi rálovej vláknovej textúre** zvierá s ňou určitý uhol.

dvojosová textúra

textúra, pre ktorú sú charakteristické dve osi textúry

Obidve osi textúry sú určitým spôsobom spojené s tvarom, resp. orientáciou vzorky. V polykryštalických tenkých vrstvách nanesených na monokryštalické podložky býva jedna os textúry orientovaná v smere normály povrchu podložky, druhá os je obyčajne významným kryštalografickým smerom podložky rovnobežným s jej povrchom. Limitným prípadom dvojsovej textúry vrstiev na monokryštalických podložkách je epitaxná vrstva. K osiam textúry sa môže v rámci tej istej polykryštalickej vzorky orientačne viazať viacero (neekvivalentných) kryštalografických smerov tej istej fázy, prípadne aj niekoľkých odlišných fáz. Takýto typ textúry býva označený ako **viacnásobná textúra**.

valcovacia textúra

dvojsová textúra, ktorá sa pozoruje v plechoch pripravených valcovaním za studena

Označenie textúry odzrkadľuje výrobný proces v metalurgickom priemysle, pri ktorom bol zistený jeden z najstarších zdokumentovaných typov textúry. Dve osi textúry sú spojené s normálou roviny valcovania a so smerom valcovania. Textúra sa označuje kombináciou Millerovho symbolu mriežkovej roviny, ktorá má tendenciu sa ukladať rovnobežne s rovinou valcovania, a symbolu vyjadrujúceho kryštalografický smer, ktorý má tendenciu orientovať sa rovnobežne so smerom valcovania, napr. $(110)[\bar{1}12]$.

rastová textúra

textúra vznikajúca pri kryštalizácii v chladnúcich taveninách, pri nanášaní vrstiev na podložky pri depozičných technológiách

Významným smerom z hľadiska vzniku textúry pri chladnutí je smer tepelného toku.

deformačná textúra

textúra vytvorená mechanickým namáhaním vzoriek prekračujúcim medzu pružnosti, t. j. plastickou deformáciou

C 5 Difrakčná tenzometria a difrakčná topografia

Difrakčná tenzometria

difrakčná tenzometria

meranie zvyškového mechanického napätia v materiáloch pomocou difrakcie rtg žiarenia alebo difrakcie neutrónov

Zvyškové napätie sa určuje na základe relatívnych zmien medzirovinných vzdialeností slúžiacich na výpočet súradníc tenzora deformácií; pri znalosti modulov pružnosti možno vypočítať príslušné mechanické napätie. Vzhľadom na malú hĺbku prieniku rtg žiarenia sa pomocou rtg difrakcie získava informácia o napätí len z tenkej povrchovej vrstvy vzorky. Na meranie napätia vo väčších hĺbkach sa používa neutrónové žiarenie.

vonkajšie napätie

mechanické napätie v skúmanej vzorke vyvolané vonkajšími silami

V prípade, že nenastala plastická deformácia vplyvom pôsobiacich síl, po ich odstránení toto napätie vo vzorke zaniká.

zvyškové napätie

mechanické napätie, ktoré existuje v materiáloch bez pôsobenia vonkajších síl

Vzniká počas výroby súčiastok pri mechanickom, tepelnom alebo chemickom spracovaní a pri nanášaní tenkých vrstiev. Má vplyv na polohu a šírku difrakčných čiar.

zvyškové napätie I. druhu

zvyškové napätie, ktoré je približne homogénne v ožiarenom objeme vzorky porovnateľnom s celým objemom meraného telesa

Spôsobuje približne rovnakú zmenu medzirovinných vzdialeností v celom difraktujúcom objeme, a tým aj zmenu príslušných difrakčných uhlov

zvyškové napätie II. druhu

zvyškové napätie, ktoré je približne homogénne len v objeme jedného kryštálu

Spôsobuje odlišné zmeny medzirovinných vzdialeností v difraktujúcom objeme vzorky, a tým aj rozšírenie príslušných difrakčných čiar.

zvyškové napätie III. druhu

zvyškové napätie, ktoré je nehomogénne už na úrovni jednotlivých kryštálov

Spôsobuje rozšírenie difrakčných čiar, prípadne aj pokles ich intenzity.

metóda jednej expozície

difrakčná metóda merania zvyškového napätia využívajúca difrakčné stopy nachádzajúce sa na protiľahlých stranách stopy difrakčného kužela, ktoré pochádzajú od kryštalických zŕn rôzne naklonených vzhľadom na povrch vzorky

Metóda umožňuje vypočítať súradnice tenzora zvyškového napätia v rovine rovnobežnej s povrchom vzorky.

metóda dvoch expozícií

difrakčná metóda merania zvyškového napätia, pri ktorej sa využívajú dve expozície líšiace sa uhlom medzi primárnym zväzkom žiarenia a normálou na povrch rovinatej vzorky

Metóda umožňuje vypočítať súradnice tenzora zvyškového napätia v rovine rovnobežnej s povrchom vzorky.

metóda $\sin^2 \psi$

difrakčná metóda merania zvyškového napätia, pri ktorej sa premeriava profil difrakčnej čiary vhodne zvolenej difrakcie hkl pri rôznych uhloch ψ náklonu povrchu vzorky vzhľadom na difrakčnú rovinu

Metóda využíva lineárnu závislosť relatívnej zmeny medzi rovinnej vzdialenosti $\Delta d_{hkl}/d_{hkl}$ od parametra $\sin^2 \psi$. Meranie pri rôznych azimutálnych uhloch φ v rovine povrchu vzorky umožňuje stanoviť všetky súradnice tenzora malých deformácií. Metóda jednej expozície a metóda dvoch expozícií sú zjednodušenou modifikáciou metódy $\sin^2 \psi$.

Difrakčná topografia

difrakčná topografia

skupina experimentálnych zobrazovacích metód, ktoré využívajú difrakciu röntgenového alebo neutrónového žiarenia na zviditeľnenie porúch kryštálovej mriežky vo veľmi dokonalých monokryštáloch

Na rozdiel od elektrónovej difrakcie pri topografii nedochádza k zväčšeniu obrazu, preto je jej využitie ohraničené na kryštály s malou hustotou porúch. Difraktovaný zväzok sa registruje vhodným dvojrozmerným detektorom s dostatočným rozlíšením, zaznamenaný obraz sa nazýva **topogram**. Na interpretáciu obrazu sa využíva výlučne dynamická teória difrakcie.

difrakčný kontrast

lokálna zmena intenzity difraktovaného žiarenia spôsobená prítomnosťou štruktúrnej poruchy v danej oblasti kryštálu

Každá porucha spôsobuje vychýlenie stavebných častíc zo svojich pravidelných polôh v kryštálovej štruktúre, čo zapríčiňuje lokálne narušenie periodicity

s následnou zmenou intenzity difraktovaného žiarenia. Ak je hustota porúch malá, t. j. rozmer nenarušených oblastí medzi poruchami je väčší ako extinkčná dĺžka, kontrast spôsobený poruchami sa dá objasniť pomocou dynamickej teórie difrakcie. Difrakčný kontrast umožňuje zviditeľnenie porúch pomocou difrakčnej topografie.

orientačný kontrast

kontrast spôsobený zmenou difrakčnej polohy časti inak dokonalého kryštálu

Zmena difrakčnej polohy môže byť spôsobená pootočením časti kryštálu so zachovaním jeho mriežkových parametrov, zmenou mriežkových parametrov so zachovaním jej orientácie, alebo súčasným pôsobením obidvoch faktorov.

extinkčný kontrast

kontrast spôsobený lokálnym zakrivením mriežkových rovín v okolí poruchy

Každá porucha, ktorá spôsobuje deformáciu mriežky, môže byť charakterizovaná vektorovou funkciou – elastickým posunutím $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ –, ktorú možno získať metódami teórie elasticity. Extinkčný kontrast v okolí poruchy vzniká len v prípade, keď je splnená podmienka $\mathbf{u} \cdot \mathbf{h} \neq 0$, kde $\mathbf{h}$ je difrakčný vektor príslušnej difrakcie. Podmienka sa využíva pri určovaní Burgersových vektorov dislokácií a pri analýze vrstevných chýb pomocou rtg topografie a elektrónovej difrakcie.

polychromatická topografia

metóda využívajúca polychromatický zväzok žiarenia, ktorej výhodou je, že na splnenie difrakčných podmienok sa nevyžaduje presná orientácia vzorky vzhľadom na zväzok primárneho žiarenia

Prednosťou metódy je jednoduchosť a rýchlosť. Pri tejto metóde je vhodné používať synchrotrónové žiarenie.

Bergova-Barrettova metóda

najstaršia a experimentálne najmenej náročná metóda rtg difrakčnej topografie

Metóda využíva nemonochromatizované žiarenie (difraktujú obidve zložky dubletu $K\alpha_{1,2}$) a difrakciu v Braggovej geometrii, preto sa zobrazuje len vrstva kryštálu tesne pri jeho povrchu. Pri registrácii obrazu je vzorka nepohyblivá. Modifikácia využívajúca Laueho geometriu je označovaná ako **Barthova-Hosemannova metóda**.

Langova metóda

najrozšírenejšia metóda rtg difrakčnej topografie

Metóda využíva monochromatizované žiarenie a difrakciu v Laueho geometrii (na prechod). Na monochromatizáciu sa nepoužíva kryštálový monochromátor, zložka $K\alpha_2$ zo spektra laboratórneho zdroja sa odstráni vhodnou voľbou štrbín vymedzujúcich primárny zväzok. Počas registrácie obrazu vzorka spolu

so záznamovým médiom môže vykonávať translačný pohyb v smere približne kolmom na primárny zväzok, čo umožňuje nasnímanie obrazu širšieho, ako je šírka zväzku. Usporiadanie, pri ktorom vzorka vykonáva translačný pohyb, sa označuje ako **projekčná topografia**.

dvojkryštálová topografia

metóda rtg difrakčnej topografie založená na postupnej difrakcii žiarenia na dvoch kryštáloch v Braggovej geometrii

Dvojkryštálová topografia sa najčastejšie využíva v nedisperznom usporiadaní, zriedkavejšie v disperznom usporiadaní. Voľbou asymetrickej difrakcie na prvom kryštáli sa dá dosiahnuť rozšírenie zväzku, a teda zväčšenie snímanej oblasti druhého (analyzovaného) kryštálu. Pri registrácii obrazu je vzorka nepohyblivá. Metóda sa používa na zviditeľnenie malých zmien mriežkového parametra, pričom sa registrujú relatívne zmeny veľkosti $\sim 10^{-5}$. Zvýšenie citlivosti sa dosahuje nastavením kryštálu do polohy, ktorá zodpovedá miestu s najväčšou strmosťou difrakčnej krivky. V angličtine sa dvojkryštálová topografia zvykne označovať aj ako **plane-wave topography**.

sekvenčná topografia

metóda rtg difrakčnej topografie založená na postupnom nasnímaní série topogramov metódou dvojkryštálovej topografie, pričom jednotlivé topogramy sa získavajú pri orientáciách skúmaného kryštálu, ktoré zodpovedajú rôznym bodom na difrakčnej krivke

sekčná topografia

modifikácia Langovej metódy rtg difrakčnej topografie, pri ktorej sa poloha vzorky počas expozície nemení

Metóda využíva extrémne zúžený primárny zväzok a vyžaduje zdroje s vysokou intenzitou žiarenia a veľmi malým ohniskom. Zväzok je podstatne užší než hrúbka vzorky, ktorá sa počas registrácie obrazu nepohybuje. Na sekčnom topograme je zaznamenaná oblasť kryštálu, ktorá zodpovedá Borrmannovmu trojuholníku. Na sekčných topogramoch veľmi dokonalých planparalelných kryštálov sú viditeľné pružky zodpovedajúce javu nazývanému pendellösung.

limitovaná projekčná topografia

modifikácia Langovej metódy rtg difrakčnej topografie, ktorá je kombináciou konvenčnej Langovej metódy a sekčnej topografie

Metóda podobne ako sekčná topografia využíva veľmi úzky zväzok primárneho žiarenia. Presným nastavením a zúžením štrbiny medzi vzorkou a záznamovým médiom sa z difraktovaného zväzku vyčlení úzka časť, ktorá zodpovedá vrstve s definovanou hrúbkou a v požadovanej hĺbke vo vzorke. Počas registrá-

cie obrazu môže vzorka spolu so záznamovým médiom vykonávať translačný pohyb v približne kolmom smere na primárny zväzok, čo umožňuje nasnímanie obrazu tenkej vrstvy vzdialenej od obidvoch povrchov vzorky. Metóda sa používa v prípadoch, keď nie je možné odstrániť porušenú povrchovú vrstvu vzorky.

synchrotrónová topografia

polychromatická topografia využívajúca synchrotrónové žiarenie

Synchrotrónová topografia v porovnaní s inými technikami umožňuje podstatne skrátiť expozičnú dobu. Vzhľadom na väčšie rozmery primárneho zväzku počas expozície nie je potrebná translácia vzorky. Použitím nemonochromatizovaného žiarenia je možné súčasne zaznamenať viacero topogramov rozmiestnených podobne ako difrakčné stopy na lauegrame.

retikulografia

novšia verzia difrakčnej topografie, pri ktorej sa medzi plošne ožarovanú vzorku a plošný detektor vkladá jemná hustá kovová sieťka, ktorá na detektore vytvára tieň s tvarom rastra; difraktované žiarenie prichádzajúce z časti kryštálu deformovanej lokálnou poruchou má odlišný smer ako žiarenie z neporušenej časti, čím sa obraz rastra na detektore deformuje

Takagiho rovnice

sústava lineárnych diferenciálnych rovníc 1. rádu opisujúcich difrakciu v silne deformovaných kryštáloch

Rovnice sa využívajú pri výpočtoch teoretických reflexných kriviek a pri simulácii kontrastu v difrakčnej topografii.

D Experimentálne zariadenia difrakčných metód

D 1 Práškové komôrky

difrakčná komôrka

zariadenie slúžiace na umiestnenie záznamového média (fotografického filmu alebo zobrazovacej fólie), na ktoré sa zachytáva difrakčný obraz

prášková komôrka

difrakčná komôrka, v ktorej sa snímajú polykryštalické vzorky

Najčastejšie má tvar valca, pričom záznamové médium sa vkladá na jeho vnútornú stenu. Skladá sa z držiaka vzorky, kolimátora, vstupnej štrbiny, filmovej kazety, lapača primárneho zväzku a fluorescenčného tienidla.

držiak vzorky

zariadenie na upevnenie vzorky v komôrke alebo v difraktometri, ktoré umožňuje umiestniť vzorku na požadovanom mieste a v požadovanej polohe vzhľadom na smer primárneho zväzku

Sústavné otáčanie vzorky umožňuje **rotačný držiak**, ktorým sa zabezpečuje, aby sa do difrakčnej polohy dostal podstatne väčší počet kryštálov.

filmová kazeta

kazeta na uloženie záznamového média používaná vtedy, keď sa médium nevkladá priamo do difrakčnej komôrky

Môže byť rovinná (obdĺžniková alebo kruhová), valcová alebo kužeľová. Používa sa aj pri monokryštalových metódach.

kolimátor

zariadenie slúžiace na obmedzenie divergencie a na vymedzenie rozmeru (prierezu) a tvaru primárneho zväzku žiarenia

lapač primárneho zväzku

rúrka zvyčajne s kruhovým prierezom umiestnená oproti kolimátoru, do ktorej vstupuje tá časť primárneho zväzku, ktorá sa nerozptýlila na vzorke

vstupná štrbina

úzký otvor s obdĺžnikovým prierezom, ktorým do práškovej komôrky vstupuje primárny zväzok žiarenia

centrovanie vzorky

činnosť, ktorej cieľom je umiestniť vzorku tak, aby pri rotácii okolo osi komôrky neoscillovala

komôrka s fokusáciou

komôrka s takým usporiadaním svojich častí, pri ktorom sa zväzok difraktovaných lúčov zodpovedajúcich niektorému z difrakčných maxím zbieha do miesta detekcie

Zabezpečuje sa tým vyššia rozlišovacia schopnosť merania a presnosť stanovenia polôh difrakčných čiar. Opakom sú komôrky s **nefokusačným usporiadaním**.

fokusačná kružnica

kružnica, na ktorej sa zbiehajú (fokusujú) difraktované lúče z rôznych miest vzorky zodpovedajúce tomu istému difrakčnému maximu

Ak je povrch vzorky rovinný, tak je dotykovou rovinou fokusačnej kružnice; ak je ohnutý, tak kopíruje jej tvar. Na fokusačnej kružnici leží aj vstupná štrbina komôrky.

Debyeova-Scherrerova komôrka

valcovitá prášková komôrka, v ktorej sa vzorky tvaru tenkej tyčinky vkladajú do osi komôrky, primárny zväzok dopadá kolmo na jej os a valcový film sa umiestňuje na vnútornú stenu komôrky

Tyčinkové vzorky sa zvyčajne upevňujú do rotačného držiaka, film sa umiestňuje po obvode komôrky v Debyeovom, Straumanisovom alebo vo van Arkelovom usporiadaní. Do komôrky sa môže umiestniť aj plochá polykryštalická vzorka. Získaný difraktogram sa nazýva **debyegram**, metóda snímkovania je **Debyeova-Scherrerova metóda**, usporiadanie sa označuje ako **Debyeovo-Scherrerovo usporiadanie**, ktoré patrí medzi nefokusačné.

Debyeovo-Scherrerovo uloženie filmu

symetrické uloženie filmu v Debyeovej-Scherrerovej komôrke, pri ktorom primárny zväzok vstupuje do nej stredom filmu

van Arkelovo uloženie filmu

symetrické uloženie filmu v Debyeovej-Scherrerovej komôrke, pri ktorom primárny zväzok vstupuje do nej medzi okrajmi filmu protiľahlými k jeho stredu

Straumanisovo uloženie filmu

uloženie filmu v Debyeovej-Scherrerovej komôrke, pri ktorom film je okolo vstupnej štrbiny (kolimátora) uložený asymetricky

Toto uloženie umožňuje určiť efektívny polomer komôrky a tým presnejšie vypočítať difrakčné uhly bez použitia štandardu.

komôrka s rovinným filmom

difrakčné zariadenie s odnímateľnou rovinnou filmovou kazetou, ktorá sa umiestňuje kolmo na primárny zväzok žiarenia, a to pred skúmanú vzorku alebo za ňu

Pri hrubých vzorkách, cez ktoré nedokáže preniknúť žiarenie, sa film umiestňuje pred vzorku (lúč prechádza otvorom vo filme a až potom dopadá na vzorku), takže na filme sa nasnímajú difrakčné maximá s veľkými difrakčnými uhlami ($\theta > 45^\circ$); ide o **usporiadanie na odraz**. Pri tenkých vzorkách sa film umiestňuje za vzorku a snímajú sa difrakčné maximá s malými difrakčnými uhlami ($\theta < 45^\circ$); ide o **usporiadanie na priechod**. Obidve usporiadania patria medzi nefokusačné.

kužel'ová komôrka

komôrka, ktorou sa primárny zväzok šíri pozdĺž jej osi; film sa umiestňuje na vnútornú kužel'ovitú stenu komôrky

Využíva sa napr. na identifikáciu textúr. Usporiadanie patrí medzi nefokusačné.

Seemannova-Bohlinova komôrka

komôrka valcovitého tvaru, v ktorej sa vzorka aj vstupná štrbina umiestňujú na jej obvod, čím sa dosahuje, že vnútorný obvod valca, na ktorý sa umiestňuje aj film, je totožný s fokusačnou kružnicou

Difrakčné maximá po celom obvode komôrky sú ostré, usporiadanie patrí medzi fokusačné.

Prestonova komôrka

symetrický variant Seemanovej-Bohlinovej komôrky, pri ktorom sa vzorka umiestňuje na obvod komôrky oproti vstupnej štrbine, takže vzdialenosť vstupnej štrbiny od povrchu vzorky sa rovná priemeru valcovej komôrky

Guinierova komôrka

Seemannova-Bohlinova komôrka doplnená o kryštálový monochromátor primárneho zväzku; využíva sa na registrovanie difrakčných maxím pri nízkych uhloch θ

malouhlová komôrka (syn. Kratkého komôrka)

komôrka určená na zaznamenanie rozptýleného žiarenia v blízkosti primárneho zväzku, t. j. pri veľmi malých rozptylových uhloch

Jej základom je dokonalá kolimačná sústava vymedzujúca primárny zväzok žiarenia s extrémne nízkou divergenciou. Využíva sa pri malouhlovom rozptyle (SAXS).

Gandolfiho komôrka

komôrka slúžiaca na získanie simulovaného práškoveho difrakčného záznamu snímkaním malého monokryštálu rotujúceho okolo dvoch osí zvierajúcich uhol 45°

vysokotlaková komôrka

komôrka umožňujúca získať difrakčné záznamy vzoriek pri vysokom tlaku

D1 Práškové komôrky

nízkoteplotná komôrka

komôrka umožňujúca získať difrakčné záznamy vzoriek pri teplote nižšej než izbová teplota, najčastejšie pri teplote kvapalného dusíka, extrémne pri teplote kvapalného hélia

vysokoteplotná komôrka

komôrka umožňujúca získať difrakčné záznamy pri teplote vyššej než izbová teplota, v extrémnych prípadoch až po bod topenia vzorky

vákuová komôrka

komôrka umožňujúca získať difrakčné záznamy vzoriek pri zníženom tlaku

D 2 Difraktometre a goniometre

difraktometer

prístroj na elektronické snímanie difrakčného obrazu jeho postupným premeriavaním bodovým detektorom alebo súčasným meraním viacerých jeho častí polohovo citlivým detektorom – lineárnym alebo plošným

Podľa typu vzoriek sa rozlišujú polykryštalové (práškové) difraktometre a monokryštalové difraktometre; podľa použitého druhu žiarenia sa delia na röntgenové a neutrónové difraktometre.

monokryštalový difraktometer

difraktometer na elektronické snímanie difrakčného obrazu monokryštalov umožňujúce získať číslkové záznamy o polohách a intenzitách difrakčných maxim

Jednotlivé difrakčné maximá sa získavajú postupným natáčaním skúmaného kryštálu do difrakčných polôh a nastavením detektora do smeru príslušného difraktovaného lúča. Difraktometre sa rozlišujú podľa počtu osí, okolo ktorých sa môže otáčať kryštál a detektor. V **štvorkruhovom difraktometri** sa orientácia kryštálu nastavuje otočením okolo troch osí označovaných ako χ , φ , ω a detektor sa otáča okolo osi, ktorá je geometricky totožná s osou ω . Monokryštalový difraktometer sa skladá zo zdroja žiarenia, z kolimačnej sústavy, zo vstupnej a výstupnej štrbiny, z goniometra, detektora, ramena detektora, pohonov na nastavenie polohy kryštálu a detektora a z ovládacej elektroniky. Súčasťou difraktometra môžu byť aj rôzne typy monochromátorov.

polykryštalový difraktometer (syn. práškový difraktometer)

difraktometer na elektronické snímanie difrakčného obrazu polykryštalických vzoriek pohybom detektora po kružnici sledujúcej obvod goniometra

Umožňuje získať analógové aj digitálne difrakčné záznamy slúžiace na určenie uhlov a intenzít difrakčných čiar, ako aj pozadia. Skladá sa zo zdroja žiarenia, z kolimačnej sústavy, zo vstupnej a výstupnej štrbiny, z goniometra, detektora, ramena detektora, pohonov a z ovládacej elektroniky. Súčasťou difraktometra môžu byť aj rôzne typy monochromátorov zaradených do primárneho alebo aj do difraktovaného zväzku. S použitím lineárneho polohovo citlivého detektora s dostatočne veľkým uhlovým rozsahom je možné nasnímať celý difrakčný záznam bez pohybu detektora.

neutrónový difraktometer

difraktometer, v ktorom sa na difrakčnú analýzu využíva zväzok tepelných neutrónov

Pri meraní sa registruje intenzita zväzkov koherentne rozptýlených v rôznych smeroch jadrami alebo magnetickými momentmi atómov študovanej látky. Jeho hlavnými súčasťami sú goniometer a detektor neutrónov. Zdrojom neutrónov býva jadrový reaktor alebo spalačný zdroj, ktoré sa paralelne využívajú aj v ďalších experimentálnych zariadeniach.

kolimačná sústava

sústava štrbín vymedzujúca smer a šírku primárneho i difraktovaného zväzku žiarenia

Namiesto termínu štrbina sa pri difraktometroch zvykne používať aj menej výstižný termín **clona**. V angličtine sa používa výhradne termín slit.

divergencia zväzku

rozbiehavosť zväzku primárnych alebo difraktovaných lúčov

Rozbiehavosť zväzku v difrakčnej rovine charakterizuje **ekvatoriálna divergencia**, rozbiehavosť v rovine kolmej na difrakčnú rovinu charakterizuje **axiálna divergencia**. Hodnoty divergencie zväzkov patria medzi základné parametre daného usporiadania, môžu ovplyvniť presnosť merania difrakčných uhlov.

vstupná štrbina

štrbina, ktorou vstupuje primárny zväzok žiarenia do oblasti goniometra

V usporiadaní využívajúcom paralelný primárny zväzok vymedzuje šírku tohto zväzku, ale nemá vplyv na jeho divergenciu.

divergenčná štrbina

vstupná štrbina, ktorou sa v Braggovom-Brentanovom usporiadaní vymedzuje divergencia (rozbiehavosť) primárneho zväzku žiarenia

Zmenou divergencie zväzku možno ovplyvniť veľkosť ožiarenej plochy na vzorke.

automatická divergenčná štrbina

divergenčná štrbina s premenlivou šírkou, ktorá môže v priebehu merania plynule meniť divergenciu zväzku

Použitím automatickej divergenčnej štrbiny je možné dosiahnuť, aby bola počas merania ožiarená vždy rovnako veľká plocha vzorky.

Sollerova clona

sústava navzájom rovnobežných štrbín vytvorená z tenkých kovových lamiel, ktorá slúži na obmedzenie divergencie primárneho alebo difraktovaného zväzku

Zaradením Sollerovej clony sa čiastočne znižuje intenzita zväzku žiarenia, pričom jeho efektívny prierez zostáva nezmenený. Najčastejšie sa používa na zníženie axiálnej divergencie zväzku. Zaradením Sollerovej clony sa čiarové

ohnisko rtg lampy virtuálne rozdelí na súbor bodových ohnisk. Špeciálny typ Sollerovej clony s lamelami kolmými na difrakčnú rovinu sa používa pri malouhlovej difrakcii, umiestňuje sa pred detektor.

štrbina detektora

štrbina, ktorá vymedzuje šírku zväzku difraktovaného žiarenia vstupujúceho do detektora

Je umiestnená tesne pred detektorom, vymedzuje snímaný uhlový interval, jej zúžením sa zvyšuje rozlišovacia schopnosť, ale znižuje sa tok vstupujúceho žiarenia.

goniometer

mechanická súčasť difraktometra slúžiaca na presné nastavenie uhlovej polohy vzorky a ramena detektora, resp. ramena rtg lampy a ramena detektora

rovina goniometra

rovina, v ktorej leží stred vstupnej štrbiny, stred ožiarenej časti vzorky a stred detektorovej štrbiny

V rovine goniometra leží aj stred ohniska zdroja žiarenia. Rovina goniometra je rovnobežná s difrakčnou rovinou.

os goniometra

spoločná os otáčania vzorky a ramena detektora, resp. ramena rtg lampy a ramena detektora

Os goniometra je kolmá na rovinu goniometra.

polomer goniometra

vzdialenosť osi goniometra od ohniska zdroja žiarenia

V Braggovom-Brentanovom usporiadaní sa vzdialenosť medzi štrbinou detektora a osou goniometra musí rovnať polomeru goniometra.

horizontálny goniometer

goniometer, ktorého rovina je vodorovná

V usporiadaní s horizontálnym goniometrom je zdroj žiarenia nepohyblivý, otáčať sa môže vzorka a rameno detektora.

vertikálny goniometer

goniometer, ktorého rovina je zvislá

V usporiadaní s vertikálnym goniometrom je vzorka obyčajne nepohyblivá, otáčať sa môže rameno so zdrojom žiarenia a rameno detektora. Goniometer býva označený ako **theta-theta goniometer**. V tomto usporiadaní je možné získať difrakčné záznamy kvapalín i tavenín.

Braggov-Brentanov goniometer

goniometer so semifokusačným usporiadaním, v ktorom sa vzorka umiestňuje v jeho osi (stredový goniometer), pričom vzdialenosť osi goniometra od štrbiny detektora je rovnaká ako vzdialenosť od ohniska rtg lampy

V priebehu merania je povrchová rovina vzorky vždy rovnobežná s dotyčnicou fokusačnej kružnice, čo zabezpečuje fokusáciu práve meraného difraktovaného zväzku.

Seemannov-Bohlinov goniometer

goniometer s fokusačným usporiadaním, v ktorom sú nehybná vzorka a vstupná štrbina umiestnené na fokusačnej kružnici; pri meraní sa detektor so štrbinou pohybuje po obvode fokusačnej kružnice

V primárnom zväzku býva umiestnený monochromátor, ktorým sa odstráni zložka $K\alpha_2$ zo spektra rtg lampy.

textúrny goniometer

zariadenie na kvantitatívne určovanie textúry pomocou difrakcie rtg alebo neutronového žiarenia

Goniometer umožňuje meniť orientáciu vzorky rotovaním okolo jej povrchovej normály, ako aj postupnou zmenou uhla povrchovej normály vzhľadom na difrakčnú rovinu. Detektor nastavený do polohy 2θ zodpovedajúcej difrakcii hkl registruje intenzitu, ktorá je úmerná počtu kryštálov nachádzajúcich sa v difrakčnej polohe pri danej orientácii vzorky. Výsledky meraní sa prezentujú vo forme pólových obrazcov alebo orientačnej distribučnej funkcie.

uhol ramena detektora

uhol medzi ramenom detektora a smerom primárneho zväzku

Pri difraktometroch určených na presné meranie mriežkových parametrov Bondovou metódou môže nadobúdať aj záporné hodnoty.

uhol dopadu

uhol medzi smerom primárneho zväzku a povrchovou rovinou vzorky

Môže byť konštantný alebo premenný v závislosti od režimu merania.

skenovanie (syn. snímanie)

premeriavanie difrakčného obrazu pomocou difraktometra, pri ktorom sa postupne získavajú údaje o polohách a intenzitách jednotlivých difrakčných máxím, prípadne aj o pozadí; výsledok skenovania sa zvykne označovať slovom **sken**

Pri difraktometroch môže byť skenovanie spojité alebo krokové. Pri **spojitom skenovaní** sa difrakčný záznam získava najčastejšie súčasným plynulým pohybom ramena detektora, resp. otáčaním vzorky integráciou počtu impulzov zaregistrovaných v definovaných uhlových, resp. časových intervaloch. Pri **krokovom skenovaní** sa difrakčný záznam získava meraním intenzity pri dis-

krétnych hodnotách uhlov počas zvoleného časového intervalu. V obidvoch prípadoch sa môže postupne meniť poloha len detektora (tzv. **detektorové skenovanie**), len vzorky (tzv. **ω -skenovanie**), alebo súčasne detektora aj vzorky. Pri súčasnom pohybe ide najčastejšie o **skenovanie** nazývané „**theta-dve theta**“ ($\theta-2\theta$), pri ktorom pootočenie vzorky o uhol θ je spojené s pootočením ramena detektora o uhol 2θ . V usporiadaní s vertikálnym goniometrom sa používa **skenovanie** „**theta-theta**“ ($\theta-\theta$), ktoré je z fyzikálneho hľadiska rovnocenné s režimom ($\theta-2\theta$), na horizontálnom goniometri. Špeciálnym prípadom je **lineárne skenovanie** v reciprokom priestore, pri ktorom veľkosť kroku otáčania vzorky ani ramena detektora nie je stála, ale mení sa tak, aby zodpovedala rovnomernému pohybu koncového bodu rozptylového vektora po úsečke v reciprokom priestore. Nameraním a spojením viacerých uhlových alebo lineárnych skenov možno vytvoriť **mapu reciprokého priestoru**, ktorá reprezentuje rozdelenie intenzity žiarenia v niektorej rovine reciprokej mriežky. Pri monokryštálových difraktometroch sa vzorka postupne nastavuje do jednotlivých difrakčných polôh, čomu sa prispôsobuje aj poloha ramena detektora, a skenuje sa len úzka oblasť jednotlivých difrakčných maxím.

menič vzoriek

zariadenie používané v polykryštálových difraktometroch a slúžiace na rýchlu automatickú výmenu vzoriek vopred pripravených v zásobníku

goniometrická hlavica

zariadenie umožňujúce vycentrovať a nastaviť vhodnú orientáciu monokryštálu vzhľadom na primárny zväzok lúčov

Umožňuje posuny monokryštálu v dvoch na seba kolmých smeroch (centráciu) a náklony okolo dvoch osí (justáciu). Cieľom justácie je natočiť monokryštál tak, aby niektorý z jeho významných kryštalografických smerov bol rovnobežný s osou goniometra, okolo ktorej sa pri skenovaní otáča. Zariadenie sa zvykne označovať ako **Eulerova kolíska**. V štvorkruhových monokryštálových difraktometroch sa používajú hlavice umožňujúce len centráciu, justačné pohyby sa robia pomocou zmeny uhlov s označením χ , φ , a ω na trojici goniometrických kruhov.

textúrna hlavica

osobitný typ goniometrickej hlavice slúžiaci na prichytenie polykryštalických vzoriek používaný pri štúdiu ich textúry

Umožňuje otáčať a naklápať vzorku okolo dvoch na seba kolmých osí vo väčšom uhlovom rozsahu.

Laueho komôrka

zariadenie na získavanie difrakčných snímok Laueho metódou

Komôrka sa skladá zo vstupných clôn vymedzujúcich úzky primárny polychromatický zväzok žiarenia, z držiaka vzorky umožňujúceho ju otáčať a nakláňať a z rovinnej filmovej kazety (alebo plošného detektora), ktorú možno umiestniť pred alebo za vzorku

Weissenbergov goniometer

goniometer s komôrkou valcového tvaru na štúdium monokryštálov, v ktorom oscilácie monokryštálu okolo osi rovnobežnej s osou komôrky sú synchronizované s translačným oscilačným pohybom komôrky pozdĺž jej osi

Monokryštál sa umiestňuje do osi komôrky, primárny zväzok je na ňu kolmý (pri nulte vrstovnici) alebo dopadá na ňu šikmo (pri snímkaní vyšších vrstovníc). Synchronizáciou pohybov vzorky a komôrky sa zabezpečuje rozlíšenie jednotlivých difrakcií a ich indexácia (faktor násobnosti je 1). V minulosti weissenbergogramy slúžili na stanovenie intenzít difrakcií a na zistenie systematického vyhasínania vedúceho k určeniu priestorovej grupy.

precesná komôrka

zaužívaný názov pre zariadenie využívajúce synchronizovaný precesný pohyb monokryštálu a rovinnej filmovej kazety okolo osi, pozdĺž ktorej prechádza primárny zväzok

Difrakčný záznam je zväčšeným obrazom reciprokej mriežky, prípadne len jednej jej roviny, ak sa použijú vhodne zvolené a umiestnené clony.

D 3 Monochromátory

monochromatizácia

vymedzenie úzkeho intervalu vlnových dĺžok $\Delta\lambda$ v okolí zvolenej vlnovej dĺžky zo spektra použitého žiarenia

V prípade charakteristického rtg žiarenia ide o potlačenie, resp. odstránenie nežiaducich spektrálnych čiar (najmä čiary $K\beta$, prípadne aj $K\alpha_2$) z primárneho zväzku.

monochromátor

v kryštálovej štruktúrnej analýze zariadenie slúžiace na monochromatizáciu röntgenového alebo neutrónového žiarenia a využívajúce jeho difrakciu na rovinných, ohnutých alebo vybrúsených monokryštáloch, na vysokotextúrnych polykryštáloch, alebo na špeciálne pripravených multivrstvách

Výber vlnovej dĺžky monochromatizovaného žiarenia sa dosahuje nastavením difrakčného uhla monochromátora. Monochromátor môže byť zaradený do primárneho alebo do difraktovaného zväzku. Na zvýšenie účinnosti monochromátorov sa používajú kombinácie viacerých kryštálov vo vhodnom geometrickom usporiadaní.

rozlišovacia schopnosť monochromátora

parameter monochromátora definovaný vzťahom $R = \lambda/(\Delta\lambda)$, kde λ je vlnová dĺžka, na ktorú je monochromátor nastavený, a $\Delta\lambda$ je interval vlnových dĺžok, ktoré monochromátor prepúšťa

Zužovaním intervalu $\Delta\lambda$ sa zvyšuje rozlišovacia schopnosť monochromátora, ale klesá tok energie prenášanej monochromatizovaným zväzkom žiarenia.

disperzia monochromátora

veličina definovaná vzťahom $D = dx/d\lambda$, kde λ je vlnová dĺžka monochromatizovaného žiarenia a x je parameter, ktorým sa ovláda nastavenie vlnovej dĺžky (napríklad uhol natočenia kryštálu monochromátora alebo poloha štrbiny); vyjadruje zmenu tohto parametra potrebnú na dosiahnutie jednotkovej zmeny vlnovej dĺžky

skresľovacia funkcia

závislosť spektrálnej intenzity žiarenia vychádzajúceho z monochromátora od vlnovej dĺžky

Mimo intervalu $\Delta\lambda$ vlnových dĺžok, ktoré prechádzajú monochromátorom, má nulovú hodnotu. Uplatňuje sa pri dekonvolúcii nameraných spektrálnych údajov.

absorpčný filter

filter v podobe tenkého pliešku vložený za okienko rtg lampy, ktorý silno absorbuje žiarenie s vlnovými dĺžkami kratšími než vlnová dĺžka zodpovedajúca jeho absorpčnej hrane a pomerne dobre prepúšťa žiarenie s väčšími vlnovými dĺžkami

Používa sa najmä na zoslabenie spektrálnej čiary $K\beta$ ($\rightarrow$ filter β).

Braggov monochromátor

kryštálový monochromátor, pri ktorom monochromatizovaný lúč vystupuje z monokryštálu monochromátora cez tú istú povrchovú rovinu, na ktorú dopadá primárny zväzok

Ak sú difraktujúce mriežkové roviny rovnobežné s povrchovou rovinou kryštálu, ide o **symetrický Braggov monochromátor** a vtedy dopadajúci aj monochromatizovaný zväzok žiarenia zvierajú s povrchovou rovinou kryštálu rovnaké uhly. V opačnom prípade ide o **asymetrický Braggov monochromátor**.

Laueho monochromátor

kryštálový monochromátor v podobe tenkej planoparalelnej platničky, na ktorú primárny zväzok žiarenia dopadá z jednej strany a z jej druhej strany vychádzajú dva zväzky: oslabený primárny zväzok a monochromatizovaný zväzok odchýlený od primárneho zväzku o dvojnásobok difrakčného uhla θ

Ak sú difraktujúce mriežkové roviny kolmé na povrchovú rovinu kryštálu, ide o **symetrický Laueho monochromátor**, v opačnom prípade ide o **asymetrický Laueho monochromátor**.

meridionálna divergencia

rozbiehavosť zväzku primárnych alebo monochromatizovaných lúčov v difrakčnej rovine kryštálu monochromátora

sagitálna divergencia

rozbiehavosť zväzku primárnych alebo monochromatizovaných lúčov v rovine kolmej na difrakčnú rovinu kryštálu monochromátora

dvojkryštálový monochromátor

monochromátor, v ktorom sa na zlepšenie monochromatizácie používa kombinácia dvoch kryštálových monochromátorov zaradených za sebou

Kryštály bývajú väčšinou rovnaké, môžu byť rovinné alebo ohýbané, uložené v disperznom alebo nedisperznom geometrickom usporiadaní.

nedisperzné usporiadanie

usporiadanie v dvojkryštálovom monochromátore, pri ktorom sú difraktujúce roviny druhého kryštálu rovnobežné s difraktujúcimi rovinami prvého kryštálu; pritom ide o roviny s rovnakými Millerovými indexmi

Zväzok lúčov vychádzajúci z monochromátora je pri takomto usporiadaní rovnobežný s primárnym zväzkom. Rovnobežnosť difraktujúcich mriežkových rovín sa dá optimálnym spôsobom dosiahnuť, ak sú obidva kryštály súčasťou toho istého monokryštálu.

disperzné usporiadanie

usporiadanie v dvojkryštálovom monochromátore, pri ktorom difraktujúce roviny druhého kryštálu zvierajú s difraktujúcimi rovinami prvého kryštálu dvojnásobok difrakčného uhla; difrakčné roviny obidvoch difrakcií sú totožné

V disperznom usporiadaní sa využívajú rovnaké kryštály a identické difrakcie. Monochromátor s disperzným usporiadaním prepúšťa veľmi úzky interval vlnových dĺžok, pričom monochromatizovaný lúč zvierá s primárnym lúčom štvornásobok difrakčného uhla.

slabé disperzné usporiadanie

usporiadanie v dvojkryštálovom monochromátore, pri ktorom je geometria usporiadania kryštálov podobná ako pri nedisperznom usporiadaní, ale používajú sa dva rozdielne kryštály

So zreteľom na odlišnú medzirovinnú vzdialenosť musia byť difraktujúce mriežkové roviny druhého kryštálu mierne pootočené vzhľadom na roviny prvého kryštálu.

Bartelsov monochromátor (syn. **štverkryštálové disperzné usporiadanie**) usporiadanie štyroch kryštálových monochromátorov, zvyčajne rovinných, pri ktorom sú dve dvojice v nedisperznom usporiadaní umiestnené tak, aby spoločne vytvorili disperzné usporiadanie

Pri takomto usporiadaní si monochromatizovaný lúč zachováva trajektóriu primárneho lúča.

multivrstvový monochromátor

monochromátor vytvorený striedavou depozíciou vrstiev ľahkého a ťažkého chemického prvku (napr. uhlíka a volfrámu), s periódou opakovania zodpovedajúcou násobkom medziatómových vzdialeností

Vrstvy sa môžu nanášať aj na rôzne zakrivené povrchy a tak vytvárať monochromátory s fokusáciou. Riadenou depozíciou sa dá dosiahnuť laterálna i hĺbková zmena hrúbky vrstiev, a tým aj zmena medzirovinnej vzdialenosti. Ich rozlišovacia schopnosť rastie s počtom vrstiev.

Göbelovo zrkadlo

multivrstvový monochromátor s laterálne sa meniacou hrúbkou vrstiev, ktorého povrch má tvar parabolického valca

Slúži na konverziu divergentného zväzku na paralelný.

fokusačný monochromátor

monochromátor zabezpečujúci zbiehavosť zväzku monochromatizovaných lúčov

Fokusačné monochromátory sa zhotovujú z vhodne ohnutých monokryštálov (**Johannov monochromátor**), prípadne z vybrúsených ohnutých monokryštálov (**Johanssonov monochromátor**). Špeciálnu triedu predstavujú multivrstvové monochromátory, v ktorých je multivrstva s laterálnou zmenou periódy opakovania nanosená na vhodne zakrivenú plochu.

meridionálna fokusácia

fokusácia divergentného zväzku zabezpečujúca jeho zbiehavosť v difrakčnej rovine kryštálu monochromátora, t. j. v rovine určenej smerom primárneho lúča a normálou na difraktujúce mriežkové roviny

sagitálna fokusácia

fokusácia divergentného zväzku zabezpečujúca jeho zbiehavosť v rovine kolmej na difrakčnú rovinu kryštálu monochromátora

polychromatická fokusácia

fokusácia zabezpečujúca sústredenie lúčov s rôznymi vlnovými dĺžkami prichádzajúcich z rôznych smerov

monochromatická fokusácia

fokusácia zabezpečujúca sústredenie lúčov s rovnakými vlnovými dĺžkami prichádzajúcich z rôznych smerov

von Hamosov monochromátor

sagitálne fokusujúci monochromátor s tvarom valca, pri ktorom sa zdroj divergentného zväzku lúčov umiestňuje na jeho os, na ktorej sa lúče v jednom bode aj zbiehajú

D 4 Zdroje a charakteristiky žiarenia

žiarivý tok P (syn. žiarivý výkon)

energia, ktorú žiarenie preniesie za jednotku času cez uvažovanú plochu; jednotkou žiarivého toku v sústave SI je watt (W)

Súčín tejto veličiny s časovým intervalom sa rovná energii, ktorá v uvažovanom časovom intervale na plochu dopadla alebo cez ňu prešla.

fotónový tok Φ

počet fotónov, ktoré za jednotku času prešli uvažovanou plochou, boli z nej vyžiarené, alebo na ňu dopadli; jednotkou fotónového toku je 1/s

S monochromatickým žiarivým tokom P súvisí fotónový tok Φ podľa vzťahu $\Phi = P/hf$, kde súčin hf predstavuje energiu jedného fotónu (h je Planckova konštanta a f je frekvencia príslušnej elektromagnetickej vlny). Súčin fotónového toku s časovým intervalom sa rovná počtu fotónov, ktoré v uvažovanom časovom intervale na plochu dopadli alebo cez ňu prešli, takže priamo súvisí s údajom detektora častíc, resp. s hustotou sčernania fotografického filmu.

intenzita žiarenia (syn. hustota toku častíc, hustota fotónového toku)

počet častíc, resp. fotónov, ktoré za sekundu prejdú plochou s jednotkovým obsahom postavenou kolmo na smer šírenia častíc

Súčín tejto veličiny s časovým intervalom sa rovná počtu fotónov, ktoré v uvažovanom časovom intervale dopadli na plochu s jednotkovým obsahom. Plošný integrál intenzity žiarenia sa rovná toku častíc, resp. fotónovému toku. (→ Dodatky)

index lomu n

bezrozmerný parameter charakterizujúci prostredie, ktorý je definovaný ako podiel rýchlosti šírenia elektromagnetického vlnenia alebo iného žiarenia vo vákuu a fázovej rýchlosti jeho šírenia v danom prostredí: $n = c/v$

Vo viditeľnej oblasti má hodnotu vždy väčšiu ako jeden. Pri zanedbaní absorpcie sa pre rtg žiarenie, neutrónové žiarenie a pre elektróny vyjadruje v tvare $n = 1 - \delta$. Parameter δ je kladný pre rtg žiarenie a má hodnotu $\delta \approx 10^{-5}$. Pre neutróny je kladný pri väčšine atómových jadier (ktoré majú kladnú rozptylovú dĺžku) a má hodnotu $\delta \approx 10^{-6}$. Pre elektróny je záporný s hodnotou $\delta \approx -10^{-4}$. Pri rtg žiarení a neutrónoch môže nastať úplný odraz žiarenia.

elektrónové žiarenie

z hľadiska štruktúrnej analýzy zväzkov elektrónov urýchlených napätím až do niekoľkých stoviek kV tvarovaný elektromagnetickou optikou

Elektrónové žiarenie má nízku prenikavosť a jeho vlnová dĺžka sa dá nastaviť urýchľovacím napätím (pri 100 kV má hodnotu 0,0036 nm).

neutrónové žiarenie

z hľadiska štruktúrnej analýzy tok pomalých (tzv. tepelných) neutrónov s energiou okolo 0,06 eV, ktorým zodpovedá vlnová dĺžka blízka medziatómovým vzdialenostiam v kondenzovaných látkach (rádovo 10^{-10} m)

Zdrojom sú špecializované jadrové reaktory alebo spalačné zdroje, pričom pôvodné polychromatické žiarenie z nich vychádzajúce je potrebné monochromatizovať.

röntgenové žiarenie

spojité a charakteristické elektromagnetické žiarenie s vlnovými dĺžkami približne od 10 nm po 1 pm

V štruktúrnej analýze sa pri difrakčných experimentoch používa len časť z tohto spektrálneho intervalu približne od 0,05 nm (0,5 Å) po 0,2 nm (2 Å), pričom vlnová dĺžka jednotlivých spektrálnych čiar charakteristického žiarenia závisí len od druhu vyžarujúcich atómov.

fotón röntgenového žiarenia

elementárna častica reprezentujúca kvantum elektromagnetickej energie v oblasti rtg žiarenia

Z hľadiska difrakčných experimentov je dôležitým parametrom vlnová dĺžka λ priradená fotónu, ktorá súvisí s jeho energiou E podľa vzťahu $\lambda = hc/E$, kde h je Planckova konštanta a c je rýchlosť svetla.

brzdne röntgenové žiarenie

žiarenie so spojitým spektrom, ktoré vzniká pri prudkom brzdení urýchlených elektrónov, napr. pri ich dopade na kovový terčik

Vlnové dĺžky brzdného žiarenia sú zdola ohraničené krátkovlnnou hranicou. V štruktúrnej analýze sa využíva pri Laueho metóde.

krátkovlnná hranica

najmenšia vlnová dĺžka brzdného rtg žiarenia generovaná pri danej energii elektrónov, resp. pri danom urýchľujúcom elektrickom napätí; s rastúcou energiou elektrónov sa znižuje

charakteristické žiarenie

röntgenové žiarenie s presne určenými vlnovými dĺžkami, ktoré vzniká pri kvantových prechodoch v elektrónovom obale atómov z vyšších hladín energie najčastejšie na najnižšiu hladinu

Jeho vlnové dĺžky závisia od protónového čísla atómu, z ktorého je emitované. Pri štruktúrnej analýze sa využívajú len spektrálne čiary série K .

ionizačná energia

energia potrebná na uvoľnenie elektrónu z atómu

Na vznik rtg žiarenia využívaného pri štruktúrnej analýze je potrebná energia niekoľkých keV.

čiar charakteristického žiarenia

diskrétna hodnota vlnovej dĺžky, resp. frekvencie obsiahnutá v spektre charakteristického rtg žiarenia

Čiary rtg spektra sa zaraďujú do niekoľkých spektrálnych sérií, označovaných písmenami K , L , M ... Pri štruktúrnej analýze sa využívajú len spektrálne čiary série K .

Moseleyov zákon

zákon vyjadrujúci závislosť frekvencie čiar charakteristického rtg žiarenia od protónového čísla atómov, ktoré ich vyžarujú

Podľa tohto zákona je odmocnina z frekvencie príslušnej spektrálnej čiar priamoúmerná protónovému číslu atómu.

dublet $K\alpha$

dvojica najintenzívnejších čiar série K zo spektra charakteristického rtg žiarenia s veľmi blízkymi, presne určenými vlnovými dĺžkami, ktorá sa pri štruktúrnej analýze pomocou difrakcie rtg žiarenia využíva najčastejšie

čiara $K\beta$

druhá najintenzívnejšia čiara série K zo spektra charakteristického rtg žiarenia, ktorá je pri metódach štruktúrnej analýzy nežiaduca; odstraňuje sa monochrómatom alebo β -filtrom

polarizácia elektromagnetického vlnenia

proces, pri ktorom v danom mieste, ktorým prechádza elektromagnetické vlnenie, vektor intenzity elektrického poľa začína kmitať prednostne v istom smere

Pri rozptylovom uhle 90° je rozptýlené žiarenie dokonale lineálne polarizované, pri iných uhloch je polarizované len čiastočne.

lineárna polarizácia

polarizácia elektromagnetickej vlny, pri ktorej vektor intenzity elektrického poľa kmitá rovnobežne iba s jednou priamkou kolmou na smer šírenia vlny

s-polarizácia (syn. σ -polarizácia)

lineárna polarizácia rtg žiarenia, pri ktorej vektor elektrického poľa osciluje v rovine kolmej na rozptylovú (difrakčnú) rovinu

Pri rozptyle takto polarizovaného žiarenia nedochádza k zmenšeniu jeho amplitúdy.

p-polarizácia (syn. π -polarizácia)

lineárna polarizácia rtg žiarenia, pri ktorej vektor elektrického poľa osciluje v rozptylovej (difrakčnej) rovine

Pri rozptyle takto polarizovaného žiarenia nastáva pokles jeho amplitúdy.

zoslabovanie žiarenia (syn. extinkcia žiarenia)

proces postupného znižovania intenzity zväzku žiarenia prenikajúceho látkou vplyvom rozptylu, absorpcie, difrakcie alebo aj iných procesov

absorpcia röntgenového žiarenia

proces, pri ktorom sa elektromagnetická energia prenášaná rtg žiarením mení na iné formy energie, najmä na vnútornú energiu látky (excitáciu fonónov) a na excitáciu atómov

lineárny koeficient zoslabovania μ (syn. lineárny koeficient extinkcie)

koeficient, ktorého prevrátená hodnota vyjadruje vzdialenosť, na ktorej intenzita zväzku žiarenia prenikajúceho látkou poklesne e -krát, kde $e = 2,71828$ je Eulerovo číslo – základ prirodzených logaritmov

Vystupuje v exponenciálnom vzťahu vyjadrujúcom pokles intenzity žiarenia I po preniknutí do hĺbky x :

$$I = I_0 \exp(-\mu x).$$

pričom jeho časťou je aj **lineárny koeficient absorpcie**.

hmotnostný koeficient zoslabovania μ_ρ

podiel lineárneho koeficientu zoslabovania μ a objemovej hmotnosti (hustoty) ρ látky:

$$\mu_\rho = \mu / \rho$$

polhrúbka

hrúbka vrstvy látky, ktorá zoslabí intenzitu prenikajúceho žiarenia na polovicu

hĺbka prieniku žiarenia

hrúbka vrstvy materiálu, ktorá poskytuje dohodnutú časť (napr. 90 %) intenzity registrovaného difraktovaného žiarenia

Materiál nachádzajúci sa pod touto hranicou prispieva k difrakcii už iba malou časťou, lebo intenzita primárneho i difraktovaného žiarenia sa vo vzorke absorpciou zoslabuje.

absorpčná hrana

vlnová dĺžka, pri ktorej sa závislosť koeficientu absorpcie (lineárneho aj hmotnostného) od vlnovej dĺžky elektromagnetického žiarenia mení skokom, pričom pri žiarení s menšími vlnovými dĺžkami nadobúda výrazne vyššie hodnoty

Závisí od druhu atómov, s rastúcim protónovým číslom sa absorpčná hrana posúva k menším vlnovým dĺžkam.

filter β

absorpčný filter zhotovený z materiálu, ktorého absorpčná hrana leží medzi vlnovými dĺžkami spektrálnych čiar $K\alpha$ a $K\beta$; zaraďuje sa do cesty primárneho zväzku rtg žiarenia, čím sa výrazne mení pomer intenzít týchto čiar v prospech prvej z nich

Rossova filtrácia (syn. Rossov filter, balančný filter)

metóda čiastočnej monochromatizácie röntgenového žiarenia, pri ktorej sa výsledný difrakčný záznam získava odčítaním dvoch difrakčných záznamov zhotovených za použitia rozdielnych filtrov β s blízkymi absorpčnými hranami vymedzujúcimi interval, do ktorého spadá vlnová dĺžka použitého dubletu $K\alpha$

röntgenová lampa (syn. röntgenová trubica)

vákuová dióda, v ktorej vzniká rtg žiarenie pri nárazoch elektrónov urýchlených elektrickým napätím niekoľkých desiatok kV na anódu (**antikatódu, terčik**)

Katódou je žeravené volfrámové vlákno, anóda je zvyčajne medená a opatrená kovovým terčíkom (z čistého kovu – Cr, Co, Ni, Cu, Mo a pod.). Obal je čiastočne sklenený, čiastočne kovový, v ktorom sú **okienka** na výstup žiarenia a príводы na kvapalinu ochladzujúcu anódu.

zatavená röntgenová lampa

rtg lampa, z ktorej sa po poskladaní vyčerpá vzduch a zataví sa

čerpaná röntgenová lampa

rtg lampa, v ktorej sa vákuum udržiava stálym čerpaním počas prevádzky

Umožňuje výmenu katódy, okienok i anódy, a tým aj zmenu vlnovej dĺžky charakteristického žiarenia.

lampa s rotujúcou anódou

rtg lampa, v ktorej sa anóda rýchlo otáča, takže dopadajúcim zväzkom elektrónov sa ohrieva väčšia plocha anódy, nie iba jedno jej miesto

Umožňuje získať až desaťnásobne väčšiu intenzitu rtg žiarenia v porovnaní s inými lampami.

ohnisko röntgenovej lampy

plôška na anóde lampy, na ktorú je sústredený zväzok dopadajúcich elektrónov

Podľa veľkosti a tvaru sa rozlišujú ohniská: normálne ($\sim 1 \times 10 \text{ mm}^2$), jemné, široké, bodové, čiarové a mikroohnisko (mikrofokus). Osobitným prípadom je **zdroj s kvapalnou anódou**, v ktorom sa namiesto tuhej kovovej anódy používa úzky prúd kvapalného kovu, napr. zliatiny gália, a ktorý sa vyznačuje extrémne malým ohniskom. V angličtine sa tento typ zdroja označuje ako **metal jet X-ray tube**.

mikroohnisko (syn. mikrofokus)

ohnisko rtg lampy s veľkosťou rádovo niekoľkých štvorcových mikrometrov, t. j. s lineárnymi rozmermi niekoľkých tisícín milimetra

okienko röntgenovej lampy

otvor v kovovej časti lampy z materiálu, ktorý málo absorbuje rtg žiarenie (najčastejšie berýlium); vzhľadom na polohu anódy lampy je okienko umiestnené tak, aby fotónový tok, ktorý cezeň vychádza, bol čo najväčší

synchrotrónové žiarenie

polarizované elektromagnetické žiarenie so spojitým spektrom, ktoré vyžarujú elektricky nabité častice pri pohybe po krivočiarej trajektórii v synchrotróne

Synchrotróny môžu generovať žiarenie s vlnovými dĺžkami od 10^3 nm až po 10^{-2} nm, kam patria aj vlnové dĺžky rtg žiarenia používaného v štruktúrnej analýze.

synchrotrón

kruhový urýchl'ovač elementárnych častíc využívaný aj ako zdroj rtg žiarenia s mimoriadne veľkou intenzitou prevyšujúcou rtg lampy o viac než 3 rády; umožňuje aj výber (voľbu) vlnovej dĺžky

laser s voľnými elektrónmi

zdroj koherentného elektromagnetického žiarenia laserového typu, ktorým sa dá generovať aj rtg žiarenie s vlnovými dĺžkami používanými v štruktúrnej analýze

Označuje sa ako zdroj rtg žiarenia štvrtej generácie. Intenzitou žiarenia výrazne prevyšuje synchrotrónové zdroje. Žiarenie má charakter krátkych pulzov s dĺžkou desiatok až stoviek femtosekúnd. V angličtine sa tento typ zdroja označuje skratkou **FEL** (Free Electron Laser).

jadrový reaktor

zdroj, v ktorom neutróny vznikajú štiepnou reťazovou reakciou; úpravami sa získavajú tepelné neutróny s de Broglieho vlnovými dĺžkami vhodnými na kryštálovú štruktúrnú analýzu

Zo spojitého spektra neutrónov sa požadovaná vlnová dĺžka získava pomocou kryštálových monochromátorov.

spalačný zdroj neutrónov

zdroj, v ktorom vznikajú neutróny pri trieštivej jadrovej reakcii vyvolanej nalietaťavajúcou časticou

Spravidla ide o súčasť kruhového alebo lineárneho urýchl'ovača častíc. Vzniknuté zväzky neutrónov sa monochromatizujú metódou doby preletu (time-of-flight) alebo pomocou monochromátorov.

D 5 Detektory žiarenia

röntgenový film

špeciálny druh fotografického filmu používaný na detekciu rtg žiarenia a vyznačujúci sa citlivou vrstvou na jednej alebo na oboch stranách fólie

Umožňuje získať bohatšiu informáciu o rozložení difraktovaného, ako aj rozptýleného žiarenia než bodové detektory.

hustota sčernania filmu

veličina, ktorá charakterizuje exponovanú časť vyvolaného filmu, definovaná ako dekadický logaritmus $D = \log(I_0/I)$, kde I_0 je svetelný tok, ktorý pri meraní fotometrom prechádza cez neexponovanú časť filmu, a I je svetelný tok, ktorý pri meraní fotometrom prechádza cez exponované miesto na filme; je úmerná expozícii filmu

expozičia

veličina definovaná ako súčin intenzity röntgenového žiarenia a expozičnej doby; s rastúcou expozíciou rtg filmu sa zväčšuje jeho hustota sčernania

zosilňovacia fólia

tenká fólia z fluorescenčného materiálu umiestňovaná pred rtg film, ktorá pri dopade rtg žiarenia fluoreskuje, takže na fotografickú emulziu pôsobí nielen rtg, ale aj fluorescenčné žiarenie

Používa sa pri tvrdom rtg žiarení s vlnovými dĺžkami menšími než 0,07 nm, pri mäkšom žiarení je menej účinná.

zobrazovacia fólia (syn. pamäťová fólia)

tenká mnohonásobne použiteľná fólia obsahujúca fotocitlivý materiál, z ktorej sa záznam vytvorený rtg žiarením sníma laserovým skenerom

Fólia registruje a uchováva dávku rtg žiarenia v jednotlivých bodoch pomocou excitovaných elektrónových stavov. Pri snímaní záznamu je fotostimulovaná luminiscencia vyvolaná laserovým žiarením konvertovaná na elektrické signály. Zobrazovacie fólie sa využívajú najmä v počítačovej rádiografii, ale sú vhodné aj ako náhrada fotografického filmu v difrakčných komôrkach.

fotometer (syn. denzitomer)

optické zariadenie na meranie hustoty sčernania vyvolaného filmu, ktoré využíva detekciu svetelného toku prechádzajúceho cez film

Skladá sa zo svetelného zdroja, kondenzora, držiaka filmu umožňujúceho posuvy v dvoch navzájom kolmých smeroch, detektora svetla a citlivého meracieho prístroja, zvyčajne vybaveného logaritmickou stupnicou ukazujúcou priamo hodnotu hustoty sčernania.

detektor častíc

prístroj na registráciu častíc alebo elektromagnetického žiarenia s fotónmi vyššej energie (rtg a gama žiarenia)

detekčná účinnosť

pomer počtu detektorom zaregistrovaných častíc k počtu častíc, ktoré na detektor dopadli

linearita detektora

nezávislosť účinnosti detektora častíc od intenzity žiarenia alebo od energie registrovaných kvánt žiarenia

rozlišovacia schopnosť detektora

parameter, ktorým sa charakterizuje schopnosť detektora rozlíšiť energie alebo miesta dopadu detegovaných častíc

energiové rozlíšenie detektora

minimálny rozdiel v energiách dopadajúcich častíc, ktorý detektor dokáže rozlíšiť

Udáva sa v jednotkách eV alebo keV.

priestorové rozlíšenie detektora

najmenšia vzdialenosť medzi bodmi dopadu častíc, ktorú detektor dokáže rozlíšiť

Pri bodových detektoroch závisí od šírky štrbiny detektora, pri plošných detektoroch od veľkosti ich segmentov (pixelov).

vlastný šum

údaj zaznamenaný detektorom pri dokonalom odtienení pozorovaného signálu; je zapríčinený najmä tepelnými fluktuáciami v elektronike detektora

pomer signálu k šumu

číselný parameter vyjadrujúci, koľkokrát je užitočný signál zaregistrovaný detektorom väčší než vlastný šum detektora

pozadie signálu

časť údajov zaznamenaných detektorom a vyvolaných inými príčinami než sledovaným signálom

mŕtva doba

časový interval, počas ktorého detektor nedokáže zaregistrovať nasledujúcu časticu

Tento časový interval je potrebný na odstránenie zmien vyvolaných predtým detegovanou časticou, t. j. na obnovenie pôvodného fyzikálneho stavu prostredia (napr. plynovej náplne) v detektore

zhášací obvod

elektronický obvod zabezpečujúci zastavenie elektrického výboja v plynovom detektore, návrat náplne do pôvodného stavu, a tým možnosť detekcie nasledujúcej častice; skracuje mŕtvu dobu detektora

diskriminátor

elektronický obvod v detektore častíc, ktorý zabraňuje registrovať častice s energiou nižšou než istá, podľa potreby nastavená hodnota energie

amplitúdový analyzátor

elektronický obvod v detektore častíc umožňujúci zvoliť interval energií, v ktorom musí ležať energia detegovaných častíc

plynový detektor

detektor častíc, v ktorom sú dve elektródy pod napätím umiestnené v priestore naplnenom plynom

Detekcia žiarenia sa zakladá na meraní ionizačného prúdu, t. j. elektrického prúdu podmieneného ionizáciou molekúl plynovej náplne dopadajúcim žiarením.

charakteristika plynového detektora

krivka znázorňujúca závislosť počtu iónov vytvorených v plynovej náplni detektora jednou časticou (alebo fotónom) od napätia medzi elektródami; prejavuje sa veľkosťou impulzu v elektronickom obvode detektora

S rastúcim napätím medzi elektródami vzniká niekoľko oblastí – oblasť čiastočnej rekombinácie iónov, oblasť ionizačnej komory (nasýteného prúdu), proporcionálna oblasť, Geigerova oblasť a oblasť trvalého výboja.

ionizačná komora

plynový detektor pracujúci pri takom elektrickom napätí medzi elektródami, pri ktorom ešte nedochádza k sekundárnej ionizácii molekúl urýchlenými iónmi

Pracuje v oblasti nasýteného elektrického prúdu, nepoužíva sa na registráciu jednotlivých fotónov, slúži na porovnávanie intenzít zväzkov žiarenia.

proporcionálny detektor

plynový detektor pracujúci pri takom elektrickom napätí, pri ktorom v jeho náplni dochádza k sekundárnej ionizácii, pričom počet iónov vytvorených jedným fotónom je úmerný (proporcionálny) jeho energii

Geigerov-Müllerov detektor

plynový detektor pracujúci pri napätí, pri ktorom dochádza k lavínovej ionizácii plynovej náplne

V plynovej náplni je primiešaná látka (tzv. zhášadlo), ktorá výboj po krátkom časovom intervale utlmí a pripraví detektor na registráciu ďalšej častice. Pracuje v oblasti tzv. plató na charakteristike detektora.

scintilačný detektor

detektor častíc využívajúci scintiláciu látky pri dopade častice

Skladá sa zo scintilačného prostredia (najčastejšie kryštálu NaI) a fotonásobiča, ktorým sa svetelné impulzy transformujú na elektrické, zosilňujú sa a pomocou elektronického obvodu sa registrujú.

fotonásobič

elektronické zariadenie určené na detekciu svetelných kvánt

Využíva fotoelektrický jav na svojej katóde (fotokatóde) na uvoľnenie elektrónov, ktorých počet sa na ďalších stupňoch fotonásobiča (dynódach) kaskádovo zväčšuje, čo umožňuje zaregistrovať prúdový impulz ako následok dopadu jedného fotónu na katódu. Používa sa ako súčasť scintilačných detektorov.

fluorescenčné tienidlo

pomôcka na vizuálnu detekciu rtg žiarenia využívajúca fluorescenciu látky (najčastejšie ZnS) nanesej na jej povrch

Využíva sa najmä na detekciu polohy primárneho zväzku rtg žiarenia pri justovaní rtg prístrojov. Býva súčasťou difrakčných komôrok.

polovodičový detektor

detektor častíc vyrobený na báze polovodičov, v ktorom sa využíva zvýšenie počtu voľných nosičov elektrického náboja vyvolané dopadajúcim žiarením

V porovnaní s inými detektormi sa vyznačuje slabým elektrickým signálom na výstupe. Zvyčajne vyžaduje prevádzku i uchovávanie pri teplotách kvapalného dusíka. V súčasnosti sú už k dispozícii priamo konvertujúce polovodičové detektory registrujúce jednotlivé fotóny, ktoré pracujú pri izbovej teplote.

bodový detektor

detektor častíc, ktorý registruje častice iba vo veľmi obmedzenom uhlovom intervale, takže pri skúmaní väčšej časti difrakčného obrazu ho treba postupne premiestňovať

Môže byť plynový, scintilačný alebo polovodičový; pred bodový detektor sa umiestňuje štrbina detektora.

polohovo citlivý detektor (syn. PSD detektor)

detektor súčasne registrujúci intenzitu žiarenia vo väčšom uhlovom rozsahu alebo na väčšej ploche s rozlíšením miesta dopadu častíc

Podľa počtu súradníc detekčnej plochy sa polohovo citlivé detektory rozdeľujú na jednorozmerné (**lineárny PSD**) a dvojrozmerné (**plošný PSD**). Podľa konštrukcie a princípu činnosti sa rozlišuje viacero typov polohovo citlivých detektorov, napr. mozaikové, multielektródové, CCD detektory, zobrazovacie platne. Skratka PSD pochádza z anglického Position Sensitive Detector.

Tab. 1. Charakteristika kryštalografických sústav podľa metriky

Sústava	Metrika	
Triklinická	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
Monoklinická	$a \neq b \neq c,$	$\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta > 90^\circ$
Rombická	$a \neq b \neq c,$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonálna	$a = b \neq c,$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Trigonálna	$a = b = c,$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Hexagonálma	$a = b \neq c,$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
Kubická	$a = b = c,$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Poznámky: a) znamienko $\neq$ neznamená *a priori* nerovnosť, ale „vo všeobecnosti sa nemusí rovnať“, pretože spolu s metrikou rozhoduje o príslušnosti k danej sústave súmernosť,

b) v monoklinickej sústave platí konvencia, že ako nepravý uhol je β (vo všeobecnosti $\beta > 90^\circ$) a kryštály treba orientovať tak, aby bol tupý (táto orientácia sa označuje ako druhé postavenie).

Tab 2. Rovinné bodové grupy a im zodpovedajúce rovinné grupy (použité sú ich medzinárodné symboly)

Bodové grupy	Rovinné grupy
1	$p1$
2	$p211$
m	$p1m1, p1g1, c1m1$
$2mm$	$p2mm, p2mg, p2gg, c2mm$
4	$p4$
$4mm$	$p4mm, p4gm$
3	$p3$
$3m$	$p3m1, p31m$
6	6
$6mm$	$p6mm$

Tab 3. Bodové grupy a im zodpovedajúce izogonálne priestorové grupy (použité sú ich medzinárodné symboly)

Bodové grupy	Priestorové grupy
1	$P1$
$\bar{1}$	$P\bar{1}$
2	$P2, P2_1, C2$
m	Pm, Pc, Cm, Cc
$2/m$	$P2/m, P2_1/m, C2/m, P2/c, P2_1/c, C2/c$
222	$P222, P222_1, P2_12_12, P2_12_12_1, C222_1, C222, F222, I222, I2_12_12_1$
$mm2$	$Pmm2, Pmc2_1, Pcc2, Pma2, Pca2_1, Pnc2, Pmn2_1, Pba2, Pna2_1, Pnn2, Cmm2, Cmc2_1, Ccc2, Amm2, Aem2, Ama2, Aea2, Fmm2, Fdd2, Imm2, Iba2, Ima2$
mmm	$Pmmm, Pnnn, Pccm, Pban, Pmma, Pnna, Pmna, Pcca, Pbam, Pccn, Pbcm, Pnnm, Pmmn, Pbcn, Pbca, Pnma, Cmcm, Cmce, Cmmm, Cccm, Cmme, Ccce, Fmmm, Fddd, Immm, Ibam, Ibca, Imma$
4	$P4, P4_1, P4_2, P4_3, I4, I4_1$
$\bar{4}$	$P\bar{4}, I\bar{4}$
$4/m$	$P4/m, P4_2/m, P4/n, P4_2/n, I4/m, I4_1/a$
422	$P422, P42_12, P4_122, P4_12_12, P4_222, P4_22_12, P4_322, P4_32_12, I422, I4_122$
$4mm$	$P4mm, P4bm, P4_2cm, P4_2nm, P4cc, P4nc, P4_2mc, P4_2bc, I4mm, I4cm, I4_1md, I4_1cd$
$\bar{4}2m$	$P\bar{4}2m, P\bar{4}2c, P\bar{4}2_1m, P\bar{4}2_1c, P\bar{4}m2, P\bar{4}c2, P\bar{4}b2, P\bar{4}n2, I\bar{4}m2, I\bar{4}c2, I\bar{4}2m, I\bar{4}2d$
$4/mmm$	$P4/mmm, P4/mcc, P4/nbm, P4/nnc, P4/mbm, P4/mnc, P4/nmm, P4/ncc, P4_2/mmc, P4_2/mcm, P4_2/nbc, P4_2/nnm, P4_2/mbc, P4_2/mnm, P4_2/nmc, P4_2/ncm, I4/mmm, I4/mcm, I4_1/amd, I4_1/acd$
3	$P3, P3_1, P3_2, R3$
$\bar{3}$	$P\bar{3}, R\bar{3}$
32	$P312, P321, P3_112, P3_121, P3_212, P3_221, R32$
$3m$	$P3m1, P31m, P3c1, P31c, R3m, R3c$
$\bar{3}m$	$P\bar{3}1m, P\bar{3}1c, P\bar{3}m1, P\bar{3}c1, R\bar{3}m, R\bar{3}c$
6	$P6, P6_1, P6_5, P6_2, P6_4, P6_3$
$\bar{6}$	$P\bar{6}$
$6/m$	$P6/m, P6_3/m$
622	$P622, P6_122, P6_522, P6_222, P6_422, P6_322$
$6mm$	$P6mm, P6cc, P6_3cm, P6_3mc$
$\bar{6}m2$	$P\bar{6}m2, P\bar{6}c2, P\bar{6}2m, P\bar{6}2c$
$6/mmm$	$P6/mmm, P6/mcc, P6_3/mcm, P6_3/mmc$

Tabuľky

23	$P23, F23, I23, P2_13, I2_13$
$m\bar{3}$	$Pm\bar{3}, Pn\bar{3}, Fm\bar{3}, Fd\bar{3}, Im\bar{3}, Pa\bar{3}, Ia\bar{3}$
432	$P432, P4_232, F432, F4_132, I432, P4_332, P4_132, I4_132$
$\bar{4}3m$	$P\bar{4}3m, F\bar{4}3m, I\bar{4}3m, I\bar{4}3n, F\bar{4}3c, I\bar{4}3d$
$m\bar{3}m$	$Pm\bar{3}m, Pn\bar{3}n, Pm\bar{3}n, Pn\bar{3}m, Fm\bar{3}m, Fm\bar{3}c, Fd\bar{3}m, Fd\bar{3}c, Im\bar{3}m, Ia\bar{3}d$

Tab 4. Faktory násobnosti a koincidencie pri polykryštálovej (práškovej) metóde v jednotlivých Laueho grupách

Sústavy									
Kubická			Tetragonálna			Hexagonálna			
	$m\bar{3}m$	$m\bar{3}$		$4/mmm$	$4/m$			$6/mmm$	$6/m$
hkl	48	2×24	hkl	16	2×8	hkl	$(hk\bar{l})$	24	2×12
hhl	24	24	hhl	8	8	hhl	$(hh\bar{2}hl)$	12	12
$hk0$	24	2×12	$h0l$	8	8	$h0l$	$(h0\bar{h}l)$	12	12
$hh0$	12	12	$hk0$	8	2×4	$hk0$	$(hk\bar{i}0)$	12	2×6
hhh	8	8	$hh0$	4	4	$hh0$	$(hh\bar{2}h0)$	6	6
$h00$	6	6	$h00$	4	4	$h00$	$(h0\bar{h}0)$	6	6
			$00l$	2	2	$00l$	$(000l)$	2	2

Sústavy									
Trigonálna				Rombická		Monoklinická		Triklinická	
		$\bar{3}2/m$	$\bar{3}$	mmm		$2/m$		$\bar{1}$	
hkl	$(hk\bar{l})$	2×12	4×6	hkl	8	hkl	4	hkl	2
hhl	$(hh\bar{2}hl)$	12	2×6	$h0l$	4	$h0l$	2	$0kl$	2
$h0l$	$(h0\bar{h}l)$	2×6	2×6	$hk0$	4	$0kl$	4	$hk0$	2
$hk0$	$(hk\bar{i}0)$	12	2×6	$0kl$	4	$hk0$	4	$h0l$	2
$hh0$	$(hh\bar{2}h0)$	6	6	$h00$	2	$0k0$	2	$0k0$	2
$h00$	$(h0\bar{h}0)$	6	6	$0k0$	2	$00l$	2	$00l$	2
$00l$	$(000l)$	2	2	$00l$	2	$h00$	2	$h00$	2

Poznámka: zápis $n \times m$ znamená koincidenciu n súborov neekvivalentných difrakcií s rovnakým faktorom násobnosti m .

Dodatky

Komentár k heslu **intenzita žiarenia**

V textoch o difrakcii röntgenového alebo neutrónového žiarenia sa často používa termín **intenzita**, a to v spojeniach dvoch typov: **intenzita žiarenia** (*intenzita primárneho žiarenia, intenzita difraktovaného žiarenia, intenzita röntgenového žiarenia, intenzita neutrónového žiarenia, intenzita rozptýleného žiarenia, intenzita difraktovaných zväzkov*) a **intenzita difrakcie** (*intenzita difrakčnej čiary, vrcholová intenzita, integrálna intenzita, intenzita pozadia*). V medzinárodnej norme ISO 31 o fyzikálnych veličinách a ich jednotkách ani v jej preklade do slovenčiny sa termín *intenzita žiarenia* neuvádza, ale vzhľadom na jeho frekventovanosť v literatúre o štruktúrnej analýze nie je možné ho obísť.

V norme STN ISO 31-7 sa uvádza názvom blízka veličina **intenzita zvuku** s jednotkou W/m^2 , vyjadrujúca množstvo akustickej energie, ktorá za sekundu prejde cez plochu s obsahom 1 m^2 . Z pohľadu štruktúrnej analýzy pri meraní difrakčných obrazov však nie je rozhodujúce množstvo energie prenesené fotónmi či časticami, ale ich počet – koľko ich zaregistruje detektor, koľko ich vyprodukuje zdroj žiarenia alebo koľko ich prejde danou plochou (alebo jej jednotkovým obsahom) za sekundu či počas celého merania. V norme STN ISO 31-6 je takémuto chápaniu blízka veličina **fotónový tok** (Φ), ktorou sa vyjadruje počet fotónov, ktoré prešli uvažovanou plochou za jednotku času (jednotkou je $1/\text{s}$).

Je zrejmé, že v štruktúrnej analýze často používaný termín *intenzita žiarenia* treba spájať s počtom častíc či fotónov, ale treba rozhodnúť, či má vyjadrovať počet častíc prechádzajúci celou plochou, alebo len jej jednotkovým obsahom. Prikláňame sa k názoru, že je racionálne pod termínom **intenzita žiarenia** rozumieť druhú z týchto možností, lebo takto definovaná veličina umožňuje vyjadriť priestorovú distribúciu celkového toku častíc (fotónov) vyžiarených či už zdrojom, alebo difraktujúcim kryštálom. Potom sa *intenzita žiarenia* obsahom zhoduje s veličinou **hustota toku častíc**, ktorá bola súčasťou normy ČSN 01 1308 z roku 1968, ktorej jednotkou je $1/(\text{s}\cdot\text{m}^2)$. V prípade, že by išlo špeciálne o fotóny, bola by ekvivalentná s veličinou **hustota fotónového toku**, ktorá síce nie je uvedená v norme ISO 31, ale jej názov je vytvorený v súlade s odporúčaniami tejto normy.

S takto chápanou definíciou *intenzity žiarenia* súvisí priestorová distribúcia častíc či fotónov v difrakčnom obraze, ale aj distribúcia častíc zaregistrovaných v rámci jednotlivých difrakčných maxím. V tejto súvislosti sa používa termín *intenzita difrakcie* alebo *intenzita difrakčného maxima*. Aj tieto termíny sa však dajú chápať v dvojakom význame: ako veličina úmerná poč-

tu častíc, ktoré v prepočítaní na jednotku plochy dopadli do daného miesta filmu či plošného detektora, alebo ako počet častíc, ktoré dopadli na plochu predstavujúcu celé difrakčné maximum. Prvý význam sa týka termínu **vrcholová intenzita** (*difrakčného maxima*), druhý zaužívaného termínu **integrálna intenzita** (*difrakčného maxima*). Obsah termínu *intenzita* nie je v takýchto prípadoch jednoznačný.

Pri skenovaní difrakčnej stopy alebo difrakčnej čiary bodovým detektorom získavame údaje o počte zaregistrovaných častíc, ktoré v jednotlivých polohách detektora prešli jeho štrbinou. Tento údaj sa rovná súčinu časového intervalu (zodpovedajúceho jednému kroku pri skenovaní) a fotónového toku (toku častíc), ktorý prechádza štrbinou. Pritom fotónový tok sa rovná súčinu plošného obsahu štrbiny detektora a hustoty fotónového toku, t. j. intenzity žiarenia. To znamená, že počet detektorom zaregistrovaných fotónov pri jednotlivých krokoch skenovania je úmerný lokálnej intenzite žiarenia. Skenovaním sa tak získa informácia o priestorovej distribúcii intenzity žiarenia, a teda o difrakčnom obraze.

Jazykový komentár

Kolineárny a komplanárny – Pre vektory, ktoré sú rovnobežné s jednou priamkou alebo s jedným vektorom, sa v slovenčine rovnako ako v iných jazykoch používa pomenovanie *kolineárne vektory* (čes. *kolineární*, angl. *collinear*, nem. *kollinear*). Inak je to pri pomenovaní vektorov, ktoré sú rovnobežné s jednou rovinou. V slovenčine sa zaužívalo označenie *komplanárne vektory*, ale v angličtine sa používa termín *coplanar vectors*. Rozdiel je v prvej časti prídavného mena, teda v angličtine sa používa *co-* a v slovenčine *kom-*. V prevzatých slovách sa aj v slovenčine používajú obidve prvé časti zložených slov pochádzajúce z latinčiny *kom-* aj *ko-* a majú rovnaký význam „spolu“. V niektorých slovách sa ustálené používa prvá časť *ko-*, napr. *koexistencia*, *koedukácia*, *koincidencia*, *kolaborácia*, *koprodukcja*, v iných zasa predpona *kom-*, napr. *kombinácia*, *kompaktný*, *kompatibilný*, *komplex*, *kompletný*, *komplot*, *komponent*, *kompozícia*. Niektorí pracovníci univerzít i akadémií poukazujú na rozdiel medzi slovenským a anglickým termínom a odporúčajú, aby sa aj v slovenčine používala podoba *koplanárny*. V texte tejto publikácie sme sa rozhodli používať zaužívaný termín *komplanárny*, čím sme rešpektovali pomenovanie, ktoré používal Dionýz Ilkovič aj Jozef Garaj v učebniciach vektorového počtu. Podoba *komplanárny* sa používa nielen v slovenčine, ale aj v češtine (*komplanární*), nemčine (*komplanar*) i v ruštine (*komplanarnyj*). Preto pomenovanie s písmenom *m* považujeme za korektné a nenachádzame dôvod meniť ustálenú terminológiu pod vplyvom angličtiny.

Kryštálový, kryštalografický a kryštalický – V publikáciách týkajúcich sa kryštálov sa často vyskytujú adjektíva *kryštálový*, *kryštalický* a *kryštalografický*. Z jazykového hľadiska sú všetky tri správne, ale nie všetci autori im prisudzujú rovnaký obsah. Prídavné meno *kryštálový* má význam „vzťahujúci sa na kryštál“, preto podľa nášho názoru sa v kryštalografii ako súčasť termínov, napr. *kryštálová os*, *kryštálová plocha* alebo *kryštálová štruktúra*, spája s vlastnosťou konkrétneho kryštálového jedinca. V uvedených slovných spojeniach možno danú vlastnosť vyjadriť aj bez prídavného mena *kryštálový*, a to formou nezodného prívlastku (v spojení so slovom *kryštál*), teda *os kryštálu*, *plocha kryštálu* alebo *štruktúra kryštálu*, ktoré explicitne naznačujú, že ide o pojem súvisiaci s konkrétnym kryštálom. Adjektívum *kryštálový* však niektorí autori používajú aj pri preklade anglického termínu *crystal system*, keď namiesto termínu *kryštalografická sústava* používajú termín *kryštálová sústava*. Termín *kryštalografická sústava* bol vytvorený kryštalografmi na systematizáciu kryštálov podľa metriky a symetrie ich štruktúry a vonkajších tvarov, nie je to vlastnosť konkrétneho kryštálu. Je to termín, ktorý sa desaťročia používa v českej a slovenskej kryštalografii, preto ani v tomto prípade nevidíme dôvod na prispôbovanie sa angloamerickej terminológii.

Adjektívom *kryštalický* sa vyjadruje typ (druh) tuhej látky, ktorá sa skladá z kryštálov. Kryštalickou látkou môže byť monokryštál, ale aj agregát skladajúci sa z množstva drobných kryštálov, či už vo forme prášku, alebo ako kompaktný kus materiálu. Časť materiálu, napríklad polyméru, môže byť kryštalická, časť amorfná. Za nevhodné považujeme použitie prídavného mena *kryštalický* v termíne *kryštalická štruktúra* vo význame „štruktúra kryštálu“. Aj keď ho niektorí autori takto používajú, v danom význame je v slovenskej i českej kryštalografii ustálené pomenovanie *kryštálová štruktúra*, ktoré sa uvádza aj v texte tejto knihy.

Osobitným prípadom je adjektívum *polykryštalický*, ktoré sa zaužívalo v spojeniach *polykryštalická látka*, *polykryštalická vzorka*, *polykryštalický preparát*. Na pomenovanie zariadenia na meranie takýchto látok sa však zaužívalo pomenovanie *polykryštálový difraktometer*. V analógii s termínom *polykryštalický* považujú autori za vhodné používať termín *monokryštalický* v prípadoch, keď ide napr. o podložky pripravené z monokryštálov.

Recipročný a reciproký – V matematike, kryštalografii a v chémii sa po pri podobe prídavného mena *recipročný*, ktorá sa uvádza v Pravidlách slovenského pravopisu (2000) a v Krátkom slovníku slovenského jazyka (2003), v minulosti používala a aj v súčasných prácach sa vyskytuje podoba *reciproký*. Keďže významy prídavných mien *recipročný* a *reciproký* nemožno chápať vždy rovnako (významovému rozdielu a používaniu obidvoch prídavných mien sa podrobne venuje príspevok Ivana Červeňa a Pavla Žiga *Vzťah termínov reciproký – recipročný*, ktorý vyšiel vo 4. čísle časopisu Kultúra slova v r. 2013 a

v elektronickej podobe je prístupný na internetovej adrese <http://www.juls.savba.sk/ediela/ks/2013/4/ks2013-4.pdf>), aj v texte našej príručky sa v spojeniach *reciproká mriežka*, *reciproké vektory*, *reciproký priestor* používa podoba *reciproký*.

Bezrozmerný a bezrozmerový – V slovenských výkladových slovníkoch sa vo význame „bez rozmerov“ (Slovník slovenského jazyka, 1. zväzok, 1959), resp. „neurčený rozmermi; ktorý sa nedá zmerať“ (Slovník súčasného slovenského jazyka, 1. zväzok, 2006, ďalej SSSJ/1) uvádza iba prídavné meno *bezrozmerný*. V texte sme však na niekoľkých miestach použili termín *bezrozmerová veličina*, hoci donedávna sa používal termín *bezrozmerná veličina* definovaný ako „v ktorej sa exponenty všetkých základných veličín rovnajú nule“ (porov. SSSJ/1). Tento nový termín sa uvádza aj v norme STN EN ISO 80000-1 Veličiny a jednotky. Časť 1: Všeobecne, preto sme ho akceptovali. Zmenu považujeme za vhodnú, lebo sa tým odliší pomenovanie používajúce sa v súvislosti s označením počtu rozmerov priestoru (plocha je dvojrozmerná, priamka jednorozmerná, bod *bezrozmerný*) od pomenovania veličiny, pri ktorej sa za číselný údaj nepridáva rozmer jednotky, napríklad meter, joule a pod., takže je bez rozmeru. Prídavné meno *bezrozmerový* sa používa nielen vo fyzike, ale doklady naň sú aj z iných vedných odborov. O náležitosti prídavného mena *bezrozmerový* svedčí aj jeho zaradenie do zoznamu slov, ktoré pod názvom *Slová, ktoré nenájdete v Krátkom slovníku slovenského jazyka* vychádzajú v príspevkoch Mateja Považaja v časopise Kultúra slova (roč. 47, 2013). Podoba *bezrozměrový* sa popri podobe *bezrozměrný* používa aj v češtine, a to napríklad v spojeniach *bezrozměrová veličina*, *bezrozměrové číslo*.

Skratka rtg – Textové skratky sa v slovenčine obyčajne končia bodkou, napr. *p.* (pán), *hod.* (hodina), *tzv.* (takzvaný). Za skratkami vytvorenými z prvého a posledného písmena, napr. *fa* – *firma*, sa bodka nepíše. Bodka sa nedáva ani za značkami, napr. *kg* (kilogram), *h* (hodina), *N* (newton). Skratka slova *röntgen* vo význame „prístroj“, resp. prídavného mena *röntgenový* sa však v jazykovej praxi používa v oboch podobách: s bodkou (*rtg.*) aj bez bodky (*rtg*), o čom svedčí aj jej lexikografické spracovanie. S bodkou sa skratka *rtg.* uvádza v Pravidlách slovenského pravopisu (2000) a v Krátkom slovníku slovenského jazyka (2003), bez bodky je skratka *rtg* v slovníkoch skratiek a značiek aj vo Veľkom slovníku cudzích slov (2008). Vo fyzike a v kryštalografii sa častejšie používa skratka *rtg* bez bodky a v tejto podobe ju uvádzame aj v našej publikácii.

Komentáre autorov Československého kryštalografického názvoslovía

Ďurovič, Gruber

Nekonvenčná definícia kryštalických látok v úvode tejto kapitoly vychádza z presvedčenia, že považovať trojrozmernú periodicitu rozmiestnenia základných stavebných častíc v tuhej látke za charakteristickú vlastnosť kryštalických látok je z hľadiska novších poznatkov nesprávne, pretože sa tým zamieňa príčina s následkom a vedie k neúčelnému zúženiu obsahu pojmu. Trojrozmerná periodicitá je dôsledkom skutočnosti, že ak určitá lokálna konfigurácia atómov je energeticky výhodná, môže sa v priestore periodicky opakovať. Opakovanie energeticky stabilnej konfigurácie však môže mať za následok i usporiadanie, ktoré nie je trojrozmerné periodické – typickým príkladom sú neperiodické polytypy, ale aj najnovšie objavené kvázikryštály. Navyše dôsledné trvanie na trojrozmerné periodicitu by znamenalo vylúčenie tuhých roztokov z radov kryštálov. Preto sme sa rozhodli použiť prácu K. Dornbergerovej – Schiffovej a H. Grellovej (Kristallografia 27, 1982, 126 – 133) a rozlišovať kryštály v širšom slova zmysle a v užšom slova zmysle (trojrozmerná periodicitá) bez toho, že by sme tieto názvy kodifikovali ako termíny.

Proti často používanému termínu *elementárna bunka* namietame toto: keby analogický názov existoval aj v angličtine (existuje v ruštine i nemčine), akceptovali by sme ho. Avšak v angličtine je *unit cell* a preložiť ho ako *jednotková bunka* by viedlo ku komplikáciám s odvodeninami. Naproti tomu *základná bunka* umožňuje logické uplatnenie atribútu *základný* aj v termínoch *základné vektory*, *základné periódy identity*, *základná báza*; reálie pomenované týmito termínmi sa dobre odlišujú od ostatných buniek, mriežkových vektorov, periód identity a báz.

Popri *mriežkovom bode* ponechávame ako synonymum aj *uzol*, ktorý sa v našich jazykoch dost' rozšíril pod vplyvom ruskej odbornej literatúry.

Veľkosti základných vektorov nie sú pre danú látku konštanty, ale závisia od teploty, tlaku, zloženia a iných faktorov. Preto je nevhodné pre ne používať termín *mriežkové konštanty*, aj keď je v našej i zahraničnej literatúre značne rozšírený. Na túto skutočnosť upozornil u nás pred časom M. Černožorský. Preto odporúčame termín *mriežkové parametre*, ktorý je v súlade s Medzinárodnými tabuľkami 1983.

Fejdi, Žák

Kryštálový tvar – v staršej literatúre možno nájsť *jednoduchý tvar*, inde len *tvar*. Najvýstižnejšie je anglické *crystal form*, preto navrhujeme tento termín.

Millerove, Bravaisove symboly – radi by sme upozornili, že tieto symboly pozostávajú z indexov (koeficientov). Takže *Millerove symboly* a *Millerove indexy* (bežne zamieňané v anglosaskej literatúre) sú dve rozličné veci.

Jednotlivé kryštálové tvary – považujeme za nevyhnutné používať ich starogrécke názvy, národné názvy (*kocka, klenec*) ponechať ako synonymá. Z tradičných dôvodov sa v češtine ponechávajú ako synonymá národné analógy starogréckych názvov všetkých kryštálových tvarov. Pri písaní názvov kryštálových tvarov patriacich do kubickej sústavy sú nasledovné alternatívy: *tetragón-tri oktaéder, tetragóntri-oktaéder* a *tetragóntrioktaéder*. Navrhujeme prvú možnosť, pretože už z názvu vyplýva, že tento kryštálový tvar je tvorený trojicou štvoruholníkov nad jednou plochou oktaédra.

Z jazykového hľadiska boli problematické termíny týkajúce sa zrastania kryštálov. Namiesto doteraz používaných termínov, ako napr. *dvojčatný zákon, dvojčatná rovina*, či *os*, navrhujeme *zákon dvojčatenia* a pod.

Červeň, Valvoda

Počas prípravy textu sa vyskytli niekedy až protichodné názory posudzoateľov týkajúce sa fundamentálnych termínov súvisiacich s difrakciou.

Nejednotný názor sa prejavil na obsah a vzájomný vzťah termínov *rozptyl – difrakcia*. Podľa jedného názoru treba pod difrakciou rozumieť len vznik ostrých maxím, všetko ostatné je rozptyl. V texte sme sa priklonili k názoru, podľa ktorého *rozptyl* je pre difrakciu nadradeným pojmom, charakterizujúcim jav, pri ktorom dochádza k zmene smeru šírenia vln. V tomto duchu sa používa aj medzinárodne akceptovaný a používaný termín *atómový rozptylový faktor*. Termín *difrakcia*, tak ako je uvedený v texte, umožňuje hovoriť o difrakcii aj na amorfných látkach, kvapalinách alebo veľmi malých kryštáloch.

Rozdielne názory boli aj na používanie termínov *difrakcia – reflexia*. V texte sme sa priklonili k fyzikálne správne termínu *difrakcia*, pričom tento termín treba chápať len ako skrátenú verziu úplného termínu *difrakčné maximum*. Terminologicky totiž nie je správne, ak sa jeden termín – *difrakcia* – používa v dvoch významoch, raz pre fyzikálny jav, inokedy pre konkrétne difrakčné maximum. Termín *reflexia*, napriek fyzikálnej nevhodnosti, je natoľko zaužívaný, že nie je možné ho ignorovať. Formulácia týkajúca sa reflexie je prevzatá z Cowleyovej monografie *Diffraction Physics*. Citovať však treba aj názor J. Kuběnu, ktorý upozornil, že röntgenové žiarenie sa na rozhraní dvoch prostredí skutočne aj odráža a že termín *reflexia* by sa mal používať len v tejto súvislosti.

Termín *atómový faktor* treba chápať len ako skrátenú, i keď často používanú formu úplného termínu *atómový rozptylový faktor* vystihujúceho len jednu z množstva vlastností atómu. Skrátená forma je vhodná, keď nemôže dôjsť k omylu.

„Amplitúdu rozptylu chápeme ako komplexné číslo. Týka sa to aj štruktúrneho faktora, pre ktorý niektorí autori používajú termín štruktúrna amplitú-

da“ (Cowley). Iní autori pod štruktúrnou amplitúdou rozumejú len modul štruktúrneho faktora (Kraus). V texte sme sa priklonili k termínom podľa Medzinárodných tabuliek.

V súvislosti s Ewaldovou konštrukciou sme použili termín *gul'ová plocha*, teda nie *gul'a* či *sféra*, lebo v podstate len tá je relevantná z hľadiska určenia smerov difrakčných maxím.

Fiala, Smrčok

Pojem *difraktogram* byl upřednostněn před synonymem *difrakční záznam* proto, že je přiléhavější, snad trochu obecnější a jednoslovný. Pojmu *difrakční maximum* jsme dali přednost před synonymem *difrakční pík* proto, že tento posledně jmenovaný termín se přece jenom ještě trochu pocituje jako „enfant terrible“. Pojem *simulovaný difrakční záznam* je uváděn v závorkách, protože zní poněkud přepjatě v porovnání se synonymem *vypočtený difrakční záznam*. Ve dvojici *lokální a mikroanalytické metody* jsme upřednostnili termín prvně jmenovaný, protože se nám zdá býti deskriptivnější.

V komentovaném textu se mluví o *difrakčním spektru*, tento pojem však zde není uváděn jako termín – hlavně pro nebezpečí záměny s pojmovým aparátem spektroskopie. Záležitost se stává ještě nepřehlednější, když vezmeme v úvahu Laueho, nebo energeticky disperzní techniku rtg difrakce. Přímá fyzická konstrukce difrakčního spektra monokrystalů resp. hrubě krystalických materiálů se realizuje Gandolphiho kamerou. Pojem *difrakční spektrum* se používá v angličtině i v ruštině. Podrobně je používání tohoto termínu diskutováno na str. 8 monografie E. K. Vasiljev, M. S. Nachmanson: *Kačestvennyj rentgenofazovyj analiz*, Nauka, Novosibirsk 1986.

Pro pojem *identifikace směsí* hovoří nejen ekvivalentní termíny v angličtině a ruštině, ale i analogické termíny v češtině, např. *identifikace soustav* (J. Švec a kol.: *Příručka automatizační a výpočetní techniky*, SNTL Praha 1975).

Kuběna, Trnovcová

Historicky se začali poruchy krystalové struktury studovat na krystalech, u nichž je motiv tvořen jen jedním atomem a šlo tedy ve všech případech o narušení pravidelnosti krystalové mřížky a tudíž o poruchy krystalové mřížky. Proto se ve světové literatuře, zejména fyzikální, užívá tradičně také termín *mřížková porucha* místo *strukturní porucha*. Termín *strukturní porucha* je ale obecnější (a byl upřednostněn), protože je možné jej rozšířit i na krystaly v širším slova zmyslu (↗ kap. A) jako libovolnou odchylku od příslušné idealizované struktury. Text této kapitoly byl síce sestaven na základě terminologie platné pro trojrozměrně periodické krystaly, pro které je popis poruch podrobně vypracován a terminologicky ustálen, avšak většina hesel a jejich výklad, zůstává v platnosti i pro krystaly v širším slova zmyslu.

Při popisu strukturních poruch v této kapitole sledujeme jen geometrické hledisko, které je společné všem krystalickým látkám, na rozdíl od jiných fyzikálních charakteristik, jež jsou přítomností poruch ovlivňovány. Nezabýváme se zde tedy vlivem strukturních poruch na mechanické, elektrické, tepelné vlastnosti, absorpci světla ap. a z toho důvodu neřadíme mezi strukturní poruchy ani fonony či různé jiné typy kolektivních excitací, s nimiž se můžeme setkat v různých oblastech fyziky krystalů (Cooperovy páry, excitony, magnony, plazmony, polaritony, polarony, solitony ap.).

Při výkladu základních pojmů uvádíme paralelně všechny používané synonyma, ale české a slovenské termíny, z hlediska jednoznačnosti, stručnosti a jazykové čistoty méně vhodné, jsou uváděny pouze v závorce.

Při práci na kapitole jsme se setkali s problémem, jaké české a slovenské ekvivalenty přisoudit pojmu *self-interstitial*, který se běžně užívá při popisu bodových poruch v kovech nebo polovodičích. Zdá se nám, že překlad *vlastní intersticiál* nevystihuje jednoznačně situaci, protože přívlastek *vlastní* se v češtině a slovenštině užívá zejména jako ekvivalent anglického adjektiva *intrinsic* (např. *vlastní porucha*, *vlastní neuspořádanost*, *vlastní vodivost*, *vlastní absorpce* ap.). V této souvislosti přívlastek *vlastní* zdůrazňuje, že jde o vlastnosti základního materiálu, které nejsou ovlivněny přítomností nečistot nebo příměsí. Kromě přívlastku *vlastní* v české a slovenské odborné literatuře se ve stejném zmyslu užívá také adjektivum *intrinzický*. Z jazykového hlediska se nám jeví užívání pojmu *intrinzický* jako nevhodné, proto v komentovaném textu překládáme termíny *intrinsic defect* a *intrinsic disorder* jako *vlastní porucha*, resp. *vlastní neuspořádanost*. Otázka výstižného a přesného překladu termínu *self-interstitial* tedy zůstává otevřená. Analogicky k termínu *samodifuze* (anglicky *selfdiffusion*) by bylo možné mluvit o *samointersticiálu*.

Na problém překladu anglického termínu *intrinsic* navazuje také otázka vhodného překladu anglického termínu *extrinsic*, který se do češtiny a slovenštiny překládá nejednotně jako *nevlastní* (např. *nevlastní porucha*, *nevlastní neuspořádanost*, *nevlastní vodivost* ap.), *příměsový* (např. *příměsová absorpce*, *příměsová vodivost* ap.) nebo *extrinzický*. Opět se nám z jazykového hlediska jeví užívání pojmu *extrinzický* jako nevhodné a v souvislosti se strukturními poruchami upřednostňujeme atribut *nevlastní*.

Při překladu anglického termínu *boundary* jsme upřednostnili termín *hranice* (např. *hranice dvojčatění*), když jde o plošný kontakt dvou stejných fází, ale termín *rozhraní* (např. *fázové rozhraní*), když se jedná o hranici dvou rozdílných fází.

V laboratorním prostředí se často užívá pojmu *defekt* místo *porucha* a spojení *mikrodefekt*, *makrodefekt* místo *mikroskopická porucha* a *makroskopická porucha*. Myslíme si, že to nejsou vhodné termíny, i když se s nimi můžeme setkat zejména v některých konferenčních zbornících. V této souvislosti ovšem nevíme, čím by bylo vhodné nahradit termín *defektoskopie*.

Hašek, Pavelčík

Pojem *krystalová a molekulární struktura* nebo stručně jenom *struktura* se použije pouze jde-li o molekulární krystaly. Všude tam, kde pojem molekuly ztrácí smysl (u většiny anorganických materiálů), mluvíme pouze o *krystalové struktuře*.

Velikost vektoru = *absolutní hodnota vektoru*. Nesmí se v tomto smyslu užívat slova *modul*.

Modul je základní jednotka, ze které něco skládáme, nebo pomocí které něco proměřujeme; dělitel při výpočtu zbytku dělení; konstanta užitá při převodu logaritmů o různém základu. Je nevhodné používat *modul* ve smyslu *absolutní hodnoty*.

Izomorfní nahrazení se nám zdá z neznámých důvodů lepší než *izomorfní změna*.

Termín *strukturní amplituda* $|F_H|$ (nebo jednoduše *amplituda*, pokud nemůže dojít k záměně) znamená amplitudu vlny na Fourierově mapě odpovídající příspěvku od strukturního faktoru F_H . Užíváme jej tam, kde je třeba vyjádření pomocí jednoho slova, např. při tvorbě dalších termínů: *bazální amplituda*, *sdrúžená amplituda* atd. Významově ekvivalentní jsou jednoznačné opisy: *absolutní hodnota strukturního faktoru* (zdůrazňující fakt, že F_H je komplexní číslo) a *velikost strukturního faktoru* (zdůrazňující vektorové znázornění F_H).

Stanovení struktury – implikuje odvození dosud zcela neznámé struktury. *Určení struktury* – naznačuje výběr z několika předpokládaných možností.

Čerňanský, Smrčok

K vystižení různorodosti způsobů a zařízení používaných při sledování difrakce na polykrystalických látkách užíváme termín *práškové metody* v množném čísle. V souladu např. s [1] Debyeovou-Scherrerovou metodu pak považujeme jen za jednu z práškových metod.

Pokud se u některých termínů vyskytují synonyma, preferovali jsme to, které je podle našeho názoru v češtině i slovenštině užívanější (tedy spíše *komůrka* než *komora*).

Slova *spojitá* a *nespojitá* (u difrakční linie) doporučujeme používat spíše jako součást matematických termínů, např. *spojité zobrazení*, *nespojitá funkce*, a v souladu s angličtinou mluvit o *skvrnitých liniích* a jejich *skvrnitosti*. Pokud je nám známo, v angličtině se totiž užívá jen termín *diffraction spot* – *difrakční skvrna*, který zavádíme jako synonymum *difrakční stopy*. V případě nutnosti doporučujeme mluvit o *souvislých difrakčních liniích*.

Termín *nefokusační uspořádání* upřednostňujeme před *uspořádáním bez fokusace* jednak z gramatických důvodů (odborný termín má být podstatné jméno, před kterým je případně upřesňující přídavné jméno), dále z důvodů symetrie (*fokusační* – *nefokusační*), ale hlavně po obsahové stránce nám připadá slovo *nefokusační* výstižnější (ve zmíněném uspořádání se paprsky nefokusuji, nedo-

cháží k fokusaci a nejedná se tedy o to, že se fokusace ztratí a dojde ke stavu bez fokusace).

U termínu *uspořádání na odraz* jsme nuceni respektovat skutečnost, že se u nás už dlouho běžně užívá [2], [3]. Jeho někdejší synonymum *metoda zpětného paprsku* [4] se neujalo, a proto navrhuje věcně správnější termín *metoda zpětné difrakce*, avšak opět jen jako synonymum. Důvodem je obecné rozšíření a ustálení termínu *uspořádání na odraz* – *uspořádání na průchod* a jejich symetrie. U termínu *uspořádání na průchod* je nutné zdůraznit, že i jeho slovenský ekvivalent *usporiadanie na priechod* se již dlouhou dobu běžně užívá. Je to v dobré shodě se skutečností, že česká slova začínající slabikou *prů-* mají ve slovenštině ekvivalenty začínající na *prie-*, zatímco slova začínající v češtině slabikou *pře-* mají ekvivalenty začínající na *pre-* (např. *průliv* – *prieliv*, *přeliv* – *preliv*). Naproti tomu slovníky [5], [6] nyní požadují ve slovenštině rozlišení ve tvaru *prechod* (děj) a *priechod* (místo děje), což by mělo vést k termínu *usporiadanie na prechod*. Přesto doporučujeme ponechat termín *usporiadanie na priechod*, aby nedošlo k rozporu s výše uvedenými skutečnostmi.

Musíme doporučit převzetí termínu *theta-theta goniometr*, protože nemáme vhodnou náhradu a ani nepovažujeme za účelné ji hledat. Vycházíme přitom z faktu, že tento termín se ustálil i v jazycích, které spíše než čeština nebo slovenština si vytvářejí vlastní názvy, např. v němčině. Uvedený tvar je totožný s mezinárodně rozšířeným i pokud se týká pořadí slov (je možné zvážit např. *goniometr θ - θ*). Připomínáme, že v naší fyzikální literatuře se běžně užívají termíny jako např. *částice α* , *rozpad beta*, *π -mezon*. Podobné poznámky by se zřejmě týkaly i *ω -goniometru*, *ψ -goniometru*, o nichž předpokládáme, že budou popsány v kapitole o rentgenové tenzometrii. V podstatě stejně jako *theta-theta goniometr* musíme zdůvodnit i *plnění ze zadu* a *plnění z boku*. Existují difraktometrická měření, u kterých mezi primárním svazkem a povrchem vzorku není difrakční úhel či Braggův úhel. Proto užíváme termíny *úhel (natočení) vzorku* a *úhel (nastavení) detektoru*, které popisují primární, obecné pojmy.

Z předcházejícího textu plyne, že jako synonyma uvádíme termíny, které by měly spíše vymizet. V případě *snímání* (syn. *skanování*) však jde o výjimku. Podle našeho názoru by se i u nás, podobně jako v jiných jazycích, mělo zavést *skanování* jako běžný odborný termín. Zatím ho uvádíme jako synonymum jenom proto, aby toto zavedení bylo postupné a nenásilné. Respektujeme totiž tu skutečnost, že ve značné části naší veřejnosti převládá zatím příliš jednostranné chápání anglického slova *scanning* jako postupné, podrobné prohlížení něčeho (bod po bodu). Pokud je nám známo, současná angličtina užívá toto slovo volněji, v širším významu. Jedná se např. o *stepwise scanning* v difraktometru s krokem cca 1° , kde těžko jde o „podrobné prohlížení bod po bodu“, nebo se dělá *scanning* s pozičně citlivým detektorem, kde evidentně nejde o „postupné prohlížení“.

Na závěr se ještě vracíme k termínu *difrakční obraz*, aby se vymezil jeho vztah k dalším, námi užívaným termínům. V souladu s definicí v kapitole *Difrakcia rtg žiarenia na kryštalických látkach* nebo v [2] na str. 110 uvádíme, že difrakční obraz je směrová distribuce intenzity difraktovaného záření nebo její reprezentace v recipročném prostoru. Difrakční záznam je výsledek registrace difrakčního obrazu. Difrakční záznam může být analogový (= difraktogram) nebo digitální (= soubor čísel). Obě formy difrakčního záznamu, t. j. analogová i digitální, mohou být jednorozměrné (např. u práškového difraktometru) nebo dvourozměrné (na filmu, na displeji). Difrakční obrazec je geometrický obrazec (útvár), který vidíme na dvourozměrném analogovém difrakčním záznamu. Difrakční snímek je dvourozměrný analogový difrakční záznam na filmu. Pokud je nám známo, v angličtině se volně užívá pro všechny tři pojmy – t. j. pro *difrakční obraz*, *difrakční obrazec*, *difrakční snímek* – tentýž ekvivalent *diffraction pattern*. Rozdíl v chápání je dán souvislostmi nebo se použije rozlišení: *difrakční obraz* – *diffraction image*, *difrakční obrazec* – *diffraction pattern* a *difrakční snímek* – *diffraction picture*, *diffraction photograph*.

Kraus, Ječný, Maďar

V některých případech má jeden pojem ke svému označení tolik synonym, že jejich výčet by krystalografické nomenklatuře asi příliš neposloužil. Ilustrací může být *záření spojité, bílé, brzdné, polychromatické, heterochromatické* nebo *budící napětí, budící potenciál, práh buzení, prahové napětí*.

Termíny *primární* a *sekundární rentgenové záření* se používají ve dvojím smyslu:

- a) podle způsobu ionizace atomu (elektronem nebo fotonem),
- b) podle toho, zda se jedná o záření dopadající na prostředí nebo o záření, které s prostředím reagovalo.

Termín *mikrofokusní rentgenka* se někdy používá k označení rentgenek s jemným ohniskem. Výrobce Chirana označoval odtavené rentgenky s jemným a normálním ohniskem jako mikrostrukturní.

V literatuře se často vyskytuje méně vhodný název *počítač* (*G-M počítač*, *proporcionální počítač* atd.) místo doporučeného termínu *detektor* (*G-M detektor*, *proporcionální detektor* atd.).

Použité pramene

- [1] Československé krystalografické názvosloví I., Odborná skupina „Studium struktury materiálů ionizačním zářením“ ČsVTS v spolupráci s Výskumným uhelným ústavem v Ostravě-Radvanicích, 1986
- [2] Československé krystalografické názvosloví II., Odborná skupina „Studium struktury materiálů ionizačním zářením“ ČsVTS v spolupráci s Výskumným uhelným ústavem v Ostravě-Radvanicích, 1989
- [3] International Tables for Crystallography, Volume A: Space-Group Symmetry. International Union of Crystallography, Fifth Edition, Corrected reprint 2005, Springer
- [4] International Tables for Crystallography, Vol B: Reciprocal Space, International Union of Crystallography, Second Edition 2001 Kluwer Academic Publishers, Dordrecht/Boston/London.
- [5] Chemický náučný slovník 1 (Fyzikálna chémia), ALFA, Bratislava 1983
- [6] Difrakcia na polykrýštalických látkach, ed. Smrčok Ľ., R&D Print, Bratislava 1994
- [7] Bačík P., Fejdi P.: Prášková difraktometria. *Univerzita Komenského, Bratislava* 2013
- [8] Buerger, M. J., 1956: Elementary crystallography. *John Wiley & Sons, Inc., New York, Chapman & Hall, Limited, London*
- [9] Buerger, M. J., 1960: Crystal-structure analysis. *John Wiley & Sons, Inc., New York, London*
- [10] Buerger, M. J., 1970: Contemporary crystallography. *McGraw-Hill Book Company, New York, St. Louis, San Francisco, Düsseldorf, London, Mexico, Panama, Sydney, Toronto*
- [11] Červeň I.: Fyzika tuhých látok I., Štruktúra látok, SVŠT, Bratislava 1977

- [12] Ďurovič S.: Mineralogická kryštalografia, SPN, Bratislava 1962
- [13] Fejdi, P.: Všeobecná mineralógia: Štruktúrna kryštalografia a základy kryštalochémie. Univerzita Komenského, Bratislava 1997
- [14] Fejdi, P.: Všeobecná mineralógia: Morfologická kryštalografia. *Univerzita Komenského, Bratislava* 2000
- [15] Giacovazzo C.: Fundamentals of Crystallography, Part: Symmetry in crystallography. *International Union of Crystallography* 2002
- [16] Hrdý J.: Monochromátory: www.x-ray.cz/education
- [17] Kalavský S.: Štruktúra a vlastnosti tuhých látok, *Univerzita Komenského, Bratislava*, 1992
- [18] Kraus I.: Úvod do strukturní rentgenografie, Academia, Praha 1985
- [19] Nye J. E.: Physical properties of crystals, Oxford Univ. Press 1960
- [20] Pavelčík F., Kuchta L.: Difrakčné metódy. *Univerzita Komenského, Bratislava* 1995

Slovenský abecedný index s anglickými ekvivalentmi

A			
absorpcia rtg žiarenia	X-rays absorption	D4	131
absorpcia, anomálna	anomalous absorption	B3	73
agregát, polykryštalický	polycrystalline aggregate	A1	8
aktívnosť, optická	optical activity	A4	39
amplitúda rozptylu	scattering amplitude	B1	53
amplitúda, štruktúrna	structure amplitude	B3	70
analýza, difrakčná, elektrónová	electron diffraction analysis	C1	89
analýza, difrakčná, neutrónová	neutron diffraction analysis	C1	91
analýza, faktorová	factor analysis	C3	104
analýza, fázová	phase analysis	C3	101
analýza, fázová, kvalitatívna	qualitative phase analysis	C3	101
analýza, fázová, kvantitatívna	quantitative phase analysis	C3	101
analýza, fázová, kvantitatívna, absolútna	absolute quantitative phase analysis	C3	104
analýza, fázová, semikvantitatívna	semiquantitative phase analysis	C3	105
analýza, kvantitatívna, rietveldovská	Rietveld quantitative analysis	C3	105
analýza, štruktúrna	structure analysis	C1	81
analýza, štruktúrna, kryštálová	crystal structure analysis	C2	92
analyzátor	analyzer	A4	37
analyzátor, amplitúdový	puls-height analyser	D5	136
antikatóda rtg lampy	anticathode	D4	132
aproximácia profilu difrakčnej čiary	line profile approximation	C1	88
aproximácia, (n+1)-vlnová	(n+1)-wave approximation	B3	78
aproximácia, Bornova	Born approximation	B1	53
aproximácia, dvojvlnová	two-wave approximation	B3	78
aproximácia, jednovlnová	single-wave approximation	B3	77
atmosféra, Cottrellova	Cottrell atmosphere	A6	49
atmosféra, Snoekova	Snoek atmosphere	A6	49
atóm, bodový	point atom	C2	95
atóm, intersticiálny	interstitial atom	A6	43
atóm, substitučný	substitutional atom	A6	44
B			
báza mriežky	lattice basis	A1	11
blok	block	A1	6
blok, mozaikový	mosaic block	A1	7
bod, Laueho	Laue point	B3	77
bod, Lorentzov	Lorentz point	B3	77
bod, mriežkový	lattice point	A1	9

Slovensko-anglický index

bod, pozičný	figurative point	A2	23
bod, projekčný	projection point	A2	23
bod, uzlový	tie point	B3	78
bunka, bázičky centrovaná	A-, B-, C-face centred cell	A1	12
bunka, centrovaná	centred cell	A1	12
bunka, Niggliho	Niggli cell	A1	12
bunka, ortohehexagonálna	orthohexagonal cell	A1	12
bunka, plošne centrovaná	face centred cell	A1	12
bunka, priestorovo centrovaná	body centred cell	A1	12
bunka, redukovaná	reduced cell	A1	12
bunka, Wignerova-Seitzova	Wigner-Seitz cell	A1	12
bunka, základná	unit cell	A1	12
bunka, základná, primitívna	primitive unit cell	A1	12
bunka, základná, romboédrická	rhombohedral unit cell	A1	12
C, Č			
CBED	Convergent Beam Electron Diffraction	C1	90
centrovanie vzorky	sample centring	D1	114
centrum, farebné	colour centre	A6	44
centrum, rozptyľové	scattering centre	B1	52
clona	aperture	D2	119
clona, Sollero	Soller slit	D2	119
časť základnej bunky, asymetrická	asymmetric part of unit cell	C2	95
časť základnej bunky, nezávislá	independent part of unit cell	C2	95
častica, kryštalická	crystalline particle	A1	8
častica, stavebná	building particle	A1	6
čiara charakteristického žiarenia	characteristic radiation line	D4	130
čiara $K\beta$	$K\beta$ -line	D4	130
čiara, difrakčná	diffraction line	C1	87
čiara, difrakčná, súvislá	continuous diffraction line	C1	87
čiara, difrakčná, škvrnitá	spotty diffraction line	C1	87
čiara, dislokačná	dislocation line	A6	45
číslo, koordinačné	coordination number	A1	17
člen Fourierovho rozvoja, absolútny	absolute term of Fourier series	C2	94
D			
databáza, referenčná	reference database	C3	101
debyeogram (difrakčné metódy)	Debyeogram	C1	86
debyeogram (práškové komôrky)	Debyeogram	D1	115
deformácia, plastická	plastic deformation	A6	46
denzitomer	densitometer	D5	134

Slovensko-anglický index

detektor častíc	particle detector	D5	135
detektor, bodový	point detector	D5	137
detektor, Geigerov-Müllerov	Geiger-Müller counter	D5	136
detektor, plynový	gas-filled counter	D5	135
detektor, polohovo citlivý	position sensitive detector	D5	137
detektor, polohovo citlivý, lineárny	linear PSD	D5	137
detektor, polohovo citlivý, plošný	areal PSD	D5	137
detektor, polovodičový	semiconductor counter	D5	137
detektor, proporcionálny	proportional counter	D5	136
detektor, PSD	position sensitive detector	D5	137
detektor, scintilačný	scintillation detector	D5	137
determinant, Karleho-Hauptmanov	Karle-Hauptman determinant	C2	98
diadochia	diadochy	A1	16
didodekaéder	diploid	A2	21
difrakcia	diffraction	B2	60
difrakcia elektrónov	electron diffraction	C1	84
difrakcia neutrónov	neutron diffraction	C1	84
difrakcia pri malom uhle dopadu	grazing incidence diffraction	C1	86
difrakcia rtg žiarenia	X-ray diffraction	C1	84
difrakcia, asymetrická	asymmetric diffraction	B3	75
difrakcia, komplanárna	coplanar diffraction	B3	75
difrakcia, malouhlová	small angle diffraction	C1	86
difrakcia, nekomplanárna	non-coplanar diffraction	B3	76
difrakcia, symetrická	symmetrical diffraction	B3	75
difrakcia, takmer zakázaná	quasi-forbidden diffraction	B3	69
difrakcia, viacnásobná	multiple diffraction	B3	73
difraktogram	diffractogram	B2	62
difraktometer	diffractometer	D2	118
difraktometer, monokryštálový	single-crystal diffractometer	D2	118
difraktometer, neutrónový	neutron diffractometer	D2	118
difraktometer, polykryštálový	powder diffractometer	D2	118
difraktometer, práškový	powder diffractometer	D2	118
difraktometer, štvorkruhový	four-circle diffractometer	D2	118
dipyramída	dipyramid	A2	20
disfenoid	disphenoid	A2	20
disklinácia	disclination	A6	48
diskriminátor	discriminator	D5	136
dislokácia	dislocation	A6	45
dislokácia nezhody	misfit dislocation	A6	48
dislokácia, dekorovaná	decorated dislocation	A6	49
dislokácia, disociovaná	dissociated dislocation	A6	47

Slovensko-anglický index

dislokácia, Frankova	Frank dislocation	A6	47
dislokácia, hranová	edge dislocation	A6	45
dislokácia, kútová	stair-rod dislocation	A6	47
dislokácia, Lomerova-Cottrellova	Lomer-Cottrell dislocation	A6	47
dislokácia, misfitová	misfit dislocation	A6	48
dislokácia, nabitá	charged dislocation	A6	49
dislokácia, neúplná	partial dislocation	A6	47
dislokácia, parciálna	partial dislocation	A6	47
dislokácia, rozštiepená	splitted dislocation	A6	47
dislokácia, Shockleyho	Shockley dislocation	A6	47
dislokácia, skrutková	screw dislocation	A6	45
dislokácia, úplná	perfect dislocation	A6	47
dislokácia, Volterrova	Volterra dislocation	A6	47
dislokácia, závitnicová	helical dislocation	A6	47
dislokácia, zmiešaná	mixed dislocation	A6	46
disperzia monochromátora	monochromator dispersion	D3	124
disperzia, anomálna	anomalous dispersion	B1	56
divergencia zväzku	beam divergence	D2	119
divergencia, axiálna	axial divergence	D2	119
divergencia, ekvatoriálna	equatorial divergence	D2	119
divergencia, meridionálna	meridional divergence	D3	125
divergencia, sagitálna	sagittal divergence	D3	125
dĺžka, extinkčná	extinction length	B3	65
dĺžka, koherenčná	coherence length	B2	59
dĺžka, rozptylová	scattering length	B1	53
dĺžka, rozptylová, jadrového rozptylu	nuclear scattering length	B1	56
dĺžka, rozptylová, magnetického rozptylu	magnetic scattering length	B1	57
dĺžka, rozptylová, Thomsonova	Thomson scattering length	B1	55
doba, mŕtva	dead time	D5	135
dóma	dome	A2	19
doména, antifázová	antiphase domain	A6	50
držiak vzorky	sample holder	D1	114
držiak vzorky, rotačný	sample spinner	D1	114
dublet $K\alpha$	$K\alpha$ -doublet	D4	130
dvojča	twin	A5	40
dvojčatenie	twinning	A5	40
dvojlom svetla	birefringence	A4	35
dvojvakancia	divacancy	A6	44

Slovensko-anglický index

E, F			
EBSD	Electron Back Scattering Diffraction	C1	90
elipsoid indexu lomu	indicatrix	A4	36
energia, ionizačná	ionization energy	D4	129
expozícia	exposure, exposition	D5	134
extinkcia žiarenia	extinction of radiation	D4	139
extinkcia, primárna	primary extinction	B3	72
extinkcia, sekundárna	secondary extinction	B3	73
faktor asymetrie	asymmetry factor	B3	74
faktor násobnosti	multiplicity factor	B3	67
faktor, absorpčný	absorption factor	B3	67
faktor, atómový	atomic factor	B1	55
faktor, atómový rozptylový	atomic scattering factor	B1	55
faktor, Debyeov-Wallerov	Debye-Waller factor	B3	69
faktor, fyzikálny	physical factor	B3	66
faktor, geometrický	geometrical factor	B3	66
faktor, Lorentzov	Lorentz factor	B3	67
faktor, mriežkový	lattice factor	B3	70
faktor, obsadzovací	occupancy factor	C1	82
faktor, polarizačný	polarization factor	B3	67
faktor, škálovací	scale factor	C2	93
faktor, štruktúrny	structure factor	B3	70
faktor, štruktúrny, jednotkový	unitary structure factor	C2	94
faktor, štruktúrny, modifikovaný	modified structure factor	C2	94
faktor, štruktúrny, normalizovaný	normalized structure factor	C2	94
faktor, teplotný	temperature factor	B3	69
faktor, teplotný, anizotropný	anisotropic temperature factor	B3	69
faktor, teplotný, izotropný	isotropic temperature factor	B3	69
faktor-R	R-factor	C2	100
farba, interferenčná	interference color	A4	38
fáza látky	phase of material	C3	101
fáza štruktúrneho faktora	phase of structure factor	B3	70
film, röntgenový	X-ray film	D5	134
filter β , β -filter	K_β -filter	D4	132
filter, absorpčný	absorption filter	D3	125
filter, balančný	balance filter	D4	132
filter, Rossovo	Ross-filter	D4	132
filtrácia	filtration, search	C3	102
filtrácia, Rossova	Ross-filter	D4	132
fokusácia, meridionálna	meridional focusing	D3	127

Slovensko-anglický index

fokusácia, monochromatická	monochromatic focusing	D3	127
fokusácia, polychromatická	polychromatic focusing	D3	127
fokusácia, sagitálna	sagittal focusing	D3	127
fólia, pamäťová	imaging foil	D5	134
fólia, zobrazovacia	imaging foil	D5	134
fólia, zosilňovacia	intensifying screen	D5	134
fotometer	densitometer	D5	134
fotón röntgenového žiarenia	X-ray photon	D4	129
fotonásobič	photomultiplier	D5	137
fragment, štruktúrny	structure fragment	C2	95
funkcia, distribučná, orientačná	orientation distribution function	C4	107
funkcia, interferenčná	interference function	B3	70
funkcia, korelačná, párová	pair correlation function	C1	81
funkcia, Pattersonova	Patterson function	C2	96
funkcia, Pattersonova, zostrená	sharpened Patterson function	C2	96
funkcia, radiálna distribučná	radial distribution function	C1	81
funkcia, radiálna distribučná, parciálna	partial radial distribution function	C1	81
funkcia, skresľovacia	distortion function	D3	124
FWHM	Full Width at Half Maximum	C1	88
G			
geometria difrakčného obrazu	diffraction pattern geometry	B2	61
geometria, Braggova	Bragg geometry, Bragg case	B3	75
geometria, Braggova-Laueho	Bragg-Laue geometry	B3	75
geometria, Laueho	Laue geometry, Laue case	B3	74
geometria, Laueho-Braggova	Laue-Bragg geometry	B3	75
goniometer (difraktometra)	goniometer	D2	120
goniometer na meranie kryštálov	crystal goniometer	A2	22
goniometer, Braggov-Brentanov	Bragg-Brentano goniometer	D2	121
goniometer, horizontálny	horizontal goniometer	D2	120
goniometer, Seemannov-Bohlinov	Seemann-Bohlin goniometer	D2	121
goniometer, textúrny	texture goniometer	D2	121
goniometer, theta-theta	theta-theta goniometer	D2	120
goniometer, vertikálny	vertical goniometer	D2	120
goniometer, Weissenbergov	Weissenberg goniometer	D2	123
graf, Wilsonov	Wilson plot	C2	94
grupa symetrie	symmetry group	A3	28
grupa symetrie fyzikálnej vlastnosti	symmetry group of physical property	A4	33
grupa symetrie polohy	site symmetry group	A3	31
grupa symetrie, kryštalografická	crystallographic symmetry group	A3	28

Slovensko-anglický index

grupa, Belovova	Belov symmetry group	A3	32
grupa, bodová, centrosymetrická	centrosymmetric point group	A3	29
grupa, bodová, enantiomorfná	enantiomorphic point group	A3	29
grupa, bodová, kryštalografická	crystallographic point group	A3	28
grupa, bodová, necentrosymetrická	noncentrosymmetric point group	A3	29
grupa, bodová, nekryštalografická	noncrystallographic point group	A3	30
grupa, bodová, piezoelektrická	piezoelectric point group	A4	34
grupa, bodová, polárna	polar point group	A3	29
grupa, bodová, pyroelektrická	pyroelectric point group	A4	33
grupa, bodová, rovinná	plane point group	A3	30
grupa, čiernobiela	black-white symmetry group	A3	32
grupa, farebná	colour symmetry group	A3	32
grupa, Friedelova	Friedel group	B2	62
grupa, hemiédrická	hemihedral group	A3	29
grupa, holoédrická	holohedral group	A3	29
grupa, Laueho	Laue group	B2	62
grupa, magnetická	magnetic symmetry group	A3	32
grupa, meroédrická	merohedral group	A3	29
grupa, ogdoédrická	ogdohedral group	A3	29
grupa, priestorová	space group	A3	30
grupa, rovinná	plane group	A3	30
grupa, symorfná	symorphic group	A3	32
grupa, Šubnikovova	Shubnikov space group	A3	32
grupa, tetartoédrická	tetartohedral group	A3	29
grupa, translačná	translation group	A3	30
grupy, priestorové, izogonálne	isogonal space groups	A3	32
guľa, meraná	measured sphere	C2	92
guľa, projekčná	projection sphere	A2	23
H, Ch			
habitus kryštálu	crystal habit	A2	19
hexaéder	hexahedron	A2	21
hexaoktaéder	hexoctahedron	A2	21
hexatetraéder	hextetrahedron	A2	21
hlavica, goniometrická	goniometer head	D2	122
hlavica, textúrna	texture cradle	D2	122
hlbka prieniku žiarenia	penetration depth	D4	131
hmotnosť, objemová	volumic mass, density	C1	81
hrana, absorpčná	absorption edge	D4	131
hranica zrna	grain boundary	A6	49
hranica, antifázová	antiphase boundary	A6	50
hranica, fázová	phase boundary	A6	50

Slovensko-anglický index

hranica, koherentná	coherent boundary	A6	50
hranica, krátkovlnná	short-wavelength limit	D4	129
hranica, malouhlová	low angle boundary, lineages	A6	49
hranica, náklonová	tilt boundary	A6	49
hranica, nekoherentná	incoherent boundary	A6	50
hranica, skrutová	twist boundary	A6	50
HRTEM	High Resolution Transmission Electron Microscopy	C1	90
hustota	density, volumic mass	C1	81
hustota fotónového toku	photon flux density	D4	128
hustota sčernania filmu	optical density	D5	134
hustota toku častíc	particle flux density	D4	128
hustota, atómová, radiálna	radial atomic density	C1	81
hustota, elektrónová	electron density	C2	92
hustota, retikulárna	reticular density	A1	11
charakter kryštálu, optický	optical character of crystal, optical sign of crystal	A4	35
charakteristika detektora	detector characteristic curve	D5	136
chyba, vrstevná	stacking fault	A6	50
chyba, vrstevná, extrinzičná	extrinsic stacking fault	A6	51
chyba, vrstevná, intrinzičná	intrinsic stacking fault	A6	50
I, J			
identita	identity	A3	28
index databázy	index of database	C3	101
index lomu	refractive index	D4	128
indexovanie difrakcií	diffraction indexing	C1	89
indexy, Bravaisove	Bravais indices	A2	22
indexy, difrakčné	diffraction indices	B2	63
indexy, Laueho	Laue indices	B2	63
indexy, Millerove	Miller indices	A2	22
indikatrix	indicatrix	A4	36
informácia, štruktúrna, apriórna	a priori structure information	C2	95
inkoherencia, izotopová	isotopic incoherence	B1	57
inkoherencia, spinová	spin incoherence	B1	57
intenzita žiarenia	radiation intensity	D4	128
intenzita, integrálna, absolútna	absolute integral intensity	C1	88
intenzita, integrálna, difrakcie	integral intensity of diffraction, integral reflectivity	B3	80
intenzita, integrálna, difrakčného maxima	integral intensity	B3	66

Slovensko-anglický index

intenzita, integrálna, difrakčnej čiar	integral intensity of diffraction line	C1	88
intenzita, integrálna, relatívna	relative integral intensity	C1	88
intenzita, integrálna, transmisie	integral transmittivity	B3	80
intenzita, vrcholová	peak intensity	C1	88
intersticiál	interstitial	A6	43
intersticiál, dvojité	double interstitial	A6	44
intersticiál, prímiesový	impurity interstitial	A6	43
intersticiál, vlastný	self interstitial	A6	43
invariant, <i>N</i> -fázový	<i>N</i> -phase invariant	C2	98
invariant, štruktúrny, univerzálny	universal structure invariant	C2	98
inverzia	inversion	A3	27
izomorfizmus	isomorphism	A1	16
jadro dislokácie	dislocation core	A6	45
jav, Borrmannov	Borrmann effect	B3	73
jav, difrakčný, dynamický	dynamical diffraction effect	B3	72
jav, piezoelektrický	piezoelectric effect	A4	34
jav, pyroelektrický	pyroelectric effect	A4	33
jav, Renningerov	Renninger effect	B3	74
jednotka, stavebná	building unit	A1	6
jednotka, vzorcová	formula unit	C1	82
jednotky, absolútne	absolute units	B1	55
jednotky, elektrónové	electron units	B1	55
K			
kalibrácia	calibration	C3	103
kazeta, filmová	film cassette	D1	114
kľúč databázy	key of database	C3	101
kocka	cube	A2	21
koeficient absorpcie, lineárny	linear absorption coefficient	D4	131
koeficient extinkcie, lineárny	linear extinction coefficient	D4	131
koeficient zaplnenia	packing factor	A1	15
koeficient zoslabovania, hmotnostný	mass extinction coefficient	D4	131
koeficient zoslabovania, lineárny	linear extinction coefficient	D4	131
koeficienty, Cromerove-Mannove	Cromer-Mann coefficients	B1	56
koherencia vln	wave coherence	B2	59
kolimátor	collimator	D1	114
kolíska, Eulerova	Eulerian cradle	D2	122
komora, ionizačná	ionization chamber	D5	136
komôrka s fokusáciou	focusing camera	D1	115
komôrka s rovinným filmom	flat-cassette camera	D1	115

Slovensko-anglický index

komôrka, Debyeova-Scherrerova	Debye-Scherrer camera	D1	115
komôrka, difrakčná	diffraction camera	D1	114
komôrka, Gandolfiho	Gandolfi camera	D1	116
komôrka, Guinierova	Guinier camera	D1	116
komôrka, Kratkého	Kratky camera	D1	116
komôrka, kužeľová	conical camera	D1	116
komôrka, Laueho	Laue camera	D2	122
komôrka, malouhlová	small angle camera	D1	116
komôrka, nízkoteplotná	low-temperature camera	D1	117
komôrka, prášková	powder camera	D1	114
komôrka, precesná	precession camera	D2	123
komôrka, Prestonova	Preston camera	D1	116
komôrka, Seemannova-Bohlinova	Seemann-Bohlin camera	D1	116
komôrka, vákuová	vacuum camera	D1	117
komôrka, vysokoteplotná	high-temperature camera	D1	117
komôrka, vysokotlaková	high-pressure camera	D1	116
kompenzátor	compensating wave plate	A4	37
konštanta, kalibračná	calibration factor	C3	103
<i>konštanty, mriežkové</i>	lattice parameters	A1	11
konštrukcia, Ewaldova	Ewald construction	B2	64
kontrast, difrakčný	diffraction contrast	C5	110
kontrast, extinkčný	extinction contrast	C5	111
kontrast, orientačný	orientation contrast	C5	111
koordinácia	coordination	A1	17
krivka, Darwinova	Darwin curve	B3	79
krivka, Darwinova-Prinsova	Darwin-Prins curve	B3	80
krivka, difrakčná	rocking curve	B3	79
krivka, reflexná	reflection curve	B3	79
krivka, transmisná	transmission curve	B3	80
kružnica, fokusačná	focusing circle	D1	115
kryštál	crystal	A1	6
kryštál, alotriomorfný	allotriomorphic crystal	A1	6
kryštál, hypidiomorfný	hypidiomorphic crystal	A1	6
kryštál, ideálne mozaikový	ideally mosaic crystal	A1	7
kryštál, ideálny	ideal crystal	A1	7
kryštál, idiomorfný	idiomorphic crystal	A1	6
kryštál, kvapalný	liquid crystal	A1	8
kryštál, kvapalný, cholesterický	cholesteric liquid crystal	A1	8
kryštál, kvapalný, nematický	nematic liquid crystal	A1	8
kryštál, kvapalný, smectický	smectic liquid crystal	A1	8
kryštál, mozaikový	mosaic crystal	A1	7

Slovensko-anglický index

kryštál, neusporiadaný	disordered crystal	A1	7
kryštál, opticky dvojsový	biaxial crystal	A4	36
kryštál, opticky jednoosový	uniaxial crystal	A4	36
kryštál, reálny	real crystal	A1	7
kryštál, usporiadaný	ordered crystal	A1	7
kryštalit	crystallite	A1	8
kužel, difrakčný	diffraction cone	C1	87
kvalita spresňovania	goodness of fit	C2	100
kvázikryštál	quasicrystal	A1	7
L			
lampa s rotujúcou anódou	rotating anode X-ray tube	D4	132
lampa, röntgenová	X-ray tube	D4	132
lampa, rtg, čerpaná	pumped X-ray tube	D4	132
lampa, rtg, zatavená	sealed X-ray tube	D4	132
lapač primárneho zväzku	primary beam trap, primary beam stop	D1	114
laser s voľnými elektrónmi (FEL)	Free Electron Laser (FEL)	D4	133
látka, amorfná	amorphous substance	A1	6
látka, kryštalická	crystalline substance	A1	6
látka, polykryštalická	polycrystalline substance	A1	6
látky, izoštruktúrne	isostructural substances	A1	16
lauegram	lauegram	C1	86
LEED	Low-Energy Electron Diffraction	C1	90
les, dislokačný	dislocation forest	A6	49
linearita detektora	detector linearity	D5	135
lína, difrakčná	diffraction line	C1	87
lom svetla	refraction	A4	34
lúč, mimoriadny	extraordinary beam	A4	35
lúč, riadny	ordinary beam	A4	35
M			
makrodefekt	macrodefect	A6	51
mapa elektrónovej hustoty	electron density map	C2	92
mapa hustoty magnetických momentov	map of magnetic moments density	C2	92
mapa reciprokeho priestoru	reciprocal space map	D2	122
mapa <i>R</i> -faktorov	<i>R</i> value field	C2	100
mapa, Fourierova	Fourier map	C2	93
mapa, Fourierova, zostrená	sharpened Fourier map	C2	94
mapa, Pattersonova	Patterson map	C2	96
mapa, Pattersonova, diferenčná	difference Patterson map	C2	97
mapovanie fázevého zloženia	mapping of phase composition	C3	105

Slovensko-anglický index

matice, Karleho-Hauptmanove	Karle-Hauptman matrices	C2	98
maximum, difrakčné	diffraction maximum	B2	60
maximum, falošné	ghost	C2	93
maximum, Harkerovo	Harker maximum	C2	97
maximum, satelitné	satellite peak	C2	97
menič vzoriek	sample changer	D2	122
metóda $\sin^2 \psi$	$\sin^2 \psi$ method	C5	110
metóda <i>ab initio</i>	ab initio method	C2	95
metóda anomálneho rozptylu	anomalous scattering method	C2	99
metóda bez štandardu	standardless method	C3	104
metóda dvoch expozícií	method of two expositions	C5	110
metóda gradientu	gradient method	C2	97
metóda izomorfného nahradenia	isomorphous replacement method	C2	99
metóda jednej expozície	method of one exposition	C5	110
metóda mnohých riešení	multisolution method	C2	98
metóda molekulárneho nahradenia	molecular replacement method	C2	99
metóda najstrmšieho poklesu	method of steepest decrease	C2	97
metóda otáčaného kryštálu	rotating crystal method	C1	85
metóda prídavku	addition method	C3	104
metóda referenčných zmesí	reference mixtures method	C3	104
metóda SIRAS	SIRAS method	C2	99
metóda skúšania a chýb	trial and error method	C2	99
metóda ťažkého atómu	heavy atom method	C2	97
metóda vnútorného štandardu	internal standard method	C3	103
metóda vonkajšieho štandardu	external standard method	C3	103
metóda značeného vektora	labelled vector method	C2	99
metóda, Barthova-Hosemannova	Barth-Hosemann method	C5	111
metóda, Bergova-Barrettova	Berg-Barrett method	C5	111
metóda, Debyeova-Scherrerova	Debye-Scherrer method	C1	86
metóda, Debyeova-Scherrerova	Debye-Scherrer method	D1	115
metóda, difrakčná	diffraction method	C1	83
metóda, difrakčná, monochromatická	monochromatic diffraction method	C1	84
metóda, difrakčná, monokryštálová	single crystal method	C1	84
metóda, difrakčná, polychromatická	polychromatic diffraction method	C1	84
metóda, difraktometrická, monokryštálová	single crystal diffractometric method	C1	86
metóda, holografická	holographic method	C2	99
metóda, iteračná	iterative method	C2	99
metóda, koincidenčná	coincidence method	C2	97
metóda, Langova	Lang method	C5	111

Slovensko-anglický index

metóda, Laueho	Laue method	C1	85
metóda, polykryštálová	polycrystalline method	C1	86
metóda, prášková	powder method	C1	86
metóda, precesná	precession method	C1	85
metóda, priama	direct method	C2	97
metóda, Rietveldova	Rietveld method	C2	99
metóda, superpozičná	superposition method	C2	97
metóda, Weissenbergova	Weissenberg method	C1	85
metóda, zried'ovacia	dilution method	C3	104
metódy riešenia kryštálovej štruktúry	methods of crystal structure analysis	C2	95
metódy, Pattersonove	Patterson methods	C2	96
metódy, vektorové	vector methods	C2	96
miera zhody	figure of merit	C3	102
mikrodefekt	microdefect	A6	51
mikrofokus	microfocus	D4	133
mikroohnisko	microfocus	D4	133
mikroskop, polarizačný	polarizing microscope	A4	37
model štruktúry	structure model	C2	95
modifikácie, polymorfne	polymorphic modifications	A1	16
modul štruktúrneho faktora	modulus of structure factor	B3	70
mohutnosť, reflexná, integrálna	integral reflectivity	B3	80
monochromatizácia	monochromatization	D3	124
monochromátor	monochromator	D3	124
monochromátor, Bartelsov	Bartels monochromator	D3	126
monochromátor, Braggov	Bragg monochromator	D3	125
monochromátor, Braggov, symetrický	symmetric Bragg monochromator	D3	125
monochromátor, Braggov, asymetrický	asymmetric Bragg monochromator	D3	125
monochromátor, von Hamosov	von Hamos monochromator	D3	127
monochromátor, dvojkryštálový	double-crystal monochromator	D3	125
monochromátor, fokusačný	focusing monochromator	D3	127
monochromátor, Johannov	Johann monochromator	D3	127
monochromátor, Johanssonov	Johansson monochromator	D3	127
monochromátor, Laueho	Laue monochromator	D3	125
monochromátor, Laueho, asymetrický	asymmetric Laue monochromator	D3	125
monochromátor, Laueho, symetrický	symmetric Laue monochromator	D3	125
monochromátor, multivrstvový	multilayer monochromator	D3	126

Slovensko-anglický index

monokryštál	single crystal	C1	83
motív, štruktúrny	structural motif	A1	10
mriežka, Bravaisova	Bravais lattice	A1	12
mriežka, kryštálová	crystal lattice	A1	9
mriežka, priama	direct lattice	A1	10
mriežka, priamková	row lattice	A1	9
mriežka, priestorová	space lattice	A1	9
mriežka, reciproká	reciprocal lattice	A1	14
mriežka, reciproká, vážená	weighted reciprocal lattice	B3	68
mriežka, rovinná	plane lattice	A1	9
N			
nadgrupa symetrie	supergroup	A3	28
nadmriežka	superlattice	A1	10
nanokryštál	nanocrystal	A1	7
napätie, vonkajšie	external stress	C5	109
napätie, zvyškové	residual stress	C5	109
napätie, zvyškové, I. druhu	residual stress of type I.	C5	109
napätie, zvyškové, II. druhu	residual stress of type II.	C5	109
napätie, zvyškové, III. druhu	residual stress of type III.	C5	109
narastanie, rovnobežné	parallel overgrowth	A5	40
násobnosť polohy	site multiplicity	A3	31
násobnosť rotačnej osi	axis multiplicity	A3	28
neusporiadanosť, Frenkelova	Frenkel disorder	A6	44
neusporiadanosť, intrinzická	self disorder	A6	44
neusporiadanosť, pozičná	positional disorder	A1	9
neusporiadanosť, Schottkyho	Schottky disorder	A6	44
neusporiadanosť, substitučná	substitutional disorder	A1	9
neusporiadanosť, vlastná	self disorder	A6	44
normála, optická	optic normal	A4	36
O			
oblak, Cottrellov	Cottrell atmosphere	A6	49
oblak, Snoekov	Snoek atmosphere	A6	49
oblasť koherentného rozptylu	coherent domain	B2	59
oblasť, koherentná	coherent domain	B2	59
oblasť, kryštalografická	crystallographic orbit	A3	31
obraz, difrakčný	diffraction pattern	B2	61
obrazec, Kikučiho	Kikuchi pattern	C1	89
obrazec, difrakčný	diffraction pattern	B2	62
obrazec, interferenčný, konoskopický	conoscopic interference pattern	A4	38

Slovensko-anglický index

obrazec, leptový	etch figure	A4	39
obrazec, pólový	pole figure	C4	106
obvod, zhášací	quenching circuit	D5	136
ohnisko rtg lampy	X-ray tube focus, focal spot	D4	132
ohyb na dislokácii	dislocation kink	A6	46
okienko rtg lampy	X-ray tube window	D4	133
okno, chybové	error window	C3	102
oktaéder	octahedron	A2	21
operácia antisymetrie	antisymmetry operation	A3	25
operácia dvojčatenia	twin operation	A5	40
operácia súmernosti	symmetry operation	A3	25
operácia symetrie	symmetry operation	A3	25
operácia symetrie 1. druhu	first-sort symmetry operation	A3	26
operácia symetrie 2. druhu	second-sort symmetry operation	A3	26
operácia symetrie, bodová	point symmetry operation	A3	27
operácia symetrie, enantiomorfná	enantiomorphic symmetry operation	A3	26
operácia symetrie, jednoduchá	single symmetry operation	A3	26
operácia symetrie, kongruentná	congruent symmetry operation	A3	26
operácia symetrie, kryštalografická	crystallographic symmetry operation	A3	25
operácia symetrie, lokálna	local symmetry operation	A3	26
operácia symetrie, nekryštalografická	noncrystallographic symmetry operation	A3	25
operácia symetrie, nevlastná	improper symmetry operation	A3	26
operácia symetrie, otvorená	space-group symmetry operation	A3	27
operácia symetrie, parciálna	partial symmetry operation	A3	26
operácia symetrie, totálna	total symmetry operation	A3	25
operácia symetrie, uzavretá	point-group symmetry operation	A3	26
operácia symetrie, vlastná	proper rotation	A3	26
operácia symetrie, zložená	combined symmetry operation	A3	26
operácia, zrastová	twin operation	A5	40
optimalizácia	optimization	C3	102
orientácia, prednostná	preferred orientation	C4	106
os goniometra	goniometer axis	D2	120
os kryštálu, optická	optic axis	A4	36
os textúry	texture axis	C4	106
os zóny	zone axis	A2	22
os, polárna, jedinečná	unique polar axis	A3	29
os, rotačná	rotation axis	A3	28
os, rotoinverzná	rotoinversion axis	A3	28

Slovensko-anglický index

os, skrutková	screw axis	A3	28
osnova mriežkových priamok	set of lattice lines	A1	10
osnova mriežkových rovín	set of lattice planes	A1	11
otáčavosť, optická	optical rotation	A4	39
otočenie	rotation	A3	27
P			
pár, Bijvoetov	Bijvoet pair	B3	72
pár, Friedelov	Friedel pair	B3	72
parakryštal	paracrystal	A1	7
parameter odchýlky	deviation parameter	B3	79
parameter usporiadanosti na diaľku	long range order parameter	A1	16
parameter usporiadanosti nablízko	short range order parameter	A1	16
parameter, Debyeov	Debye parameter	B3	69
parameter, mriežkový	lattice parameter	A1	11
parameter, štruktúrny	structure parameter	C1	81
parameter, teplotný	temperature parameter	B3	69
parameter, teplotný, anizotropný	anisotropic temperature factor	B3	69
pás, sklzový	slip band	A6	48
pedión	pedion	A2	19
pendellösung	Pendellösung	B3	73
pentagóndodekaéder	pyritohedron	A2	21
pentagón-tri oktaéder	gyroid	A2	21
pentagón-tri tetraéder	tetartoid	A2	22
perióda identity	identity period	A1	10
perióda identity, základná	lattice parameter	A1	12
pinakoid	pinacoid	A2	19
plateau, Darwinovo	Darwin plateau	B3	80
pleochroizmus	pleochroism	A4	38
plocha, disperzná	dispersion surface	B3	77
plocha, disperzná dvojvlnová	two-wave dispersion surface	B3	77
plocha, guľová, Ewaldova	Ewald sphere	B2	64
plocha, guľová, limitujúca	limiting sphere	B2	64
podgrupa symetrie	symmetry subgroup	A3	28
podmienka, difrakčná	diffraction condition	B2	63
podmienka, disperzná	dispersion condition	B3	77
podmienky, difrakčné, Laueho	Laue diffraction conditions	B2	63
podmienky, okrajové	boundary conditions	B3	78
podmienky, reflexné	reflection conditions	B3	68
podmriežka	sublattice	A1	10
pól mriežkovej roviny	lattice plane pole	C4	107

Slovensko-anglický index

polarizácia elektromagnetického vlnenia	polarization of electromagnetic waves	D4	130
polarizácia <i>p</i> , <i>p</i> -polarizácia	p-polarization	D4	130
polarizácia <i>s</i> , <i>s</i> -polarizácia	s-polarization	D4	130
polarizácia svetla, eliptická	elliptic polarization	A4	34
polarizácia svetla, kruhová	circular polarization	A4	34
polarizácia svetla, lineárna	linear polarization	A4	34
polarizácia, lineárna (rtg žiarenia)	linear polarization	D4	130
polarizátor	polarizer	A4	37
polhrúbka	half-layer	D4	131
poloha, difrakčná	diffraction position	B2	63
poloha, intersticiálna	interstitial position	A6	43
poloha, limitná (na projekcii)	limiting position	A2	24
poloha, špeciálna (na projekcii)	special position	A2	24
poloha, špeciálna (v štruktúre)	special position	A3	31
poloha, všeobecná (na projekcii)	general position	A2	24
poloha, všeobecná (v štruktúre)	general position	A3	31
poloha, Wyckoffova	Wyckoff position	A3	31
polomer goniometra	radius of goniometer	D2	120
polomer, atómový	atomic radius	A1	17
polomer, iónový	ionic radius	A1	17
polomer, kovalentný	covalent radius	A1	17
polšírka difrakčnej čiary	FWHM, line half-width	C1	88
polygonizácia	polygonization	A6	50
polymorfizmus	polymorphism	A1	16
polytypizmus	polytypism	A1	17
pomer signálu k šumu	peak-to-background ratio	D5	135
porucha, antifrenkelovská	antifrenkel pair	A6	44
porucha, bodová	point defect	A6	43
porucha, čiarová	line defect	A6	44
porucha, Frenkelova	Frenkel pair	A6	43
porucha, makroskopická	macrodefect	A6	51
porucha, mikroskopická	microdefect	A6	51
porucha, objemová	volume defect	A6	51
porucha, plošná	plane defect	A6	49
porucha, radiačná	radiation defect	A6	44
porucha, Schottkyho	Schottky defect	A6	43
porucha, štruktúrna	structure defect	A6	43
postavenie, druhé	second position	A1	13
postavenie, prvé	first position	A1	13
postavenie, tretie	third position	A1	13

Slovensko-anglický index

pozadie signálu	background	D5	135
pravidlá, Bravaisove	Bravais rules	A1	11
precipitát	precipitate	A6	51
precipitát, čiastočne koherentný	partially coherent precipitate	A6	51
precipitát, koherentný	coherent precipitate	A6	51
precipitát, nekoherentný	incoherent precipitate	A6	51
preparát	specimen	C1	83
preparát, orientovaný	oriented specimen	C1	83
preparát, práškový	powder specimen	C1	83
prerastlica	interpenetrating twin	A5	41
priamka, mriežková	lattice line	A1	10
<i>priamka, uzlová</i>	lattice line	A1	10
prierez, celkový účinný	total cross-section	B1	54
prierez, diferenciálny účinný	differential cross-section	B1	54
priestor, priamy	direct space	A1	10
priestor, reciprokový	reciprocal space	A1	14
priestor, vektorový	vector space	C2	96
princíp, Neumannov	Neumann principle	A4	33
princíp, Voigtov	Voigt principle	A4	33
princíp, Curieho	Curie principle	A4	33
prizma	prism	A2	20
problém, fázový	phase problem	C2	93
procedúra, Rachingerova	Rachinger procedure	C1	89
profil difrakčnej čiary	diffraction line profile	C1	88
profil difrakčnej čiary, fyzikálny	physical profile	C1	88
profil difrakčnej čiary, vlastný	physical profile	C1	88
profilovanie fázového zloženia	profiling of phase composition	C3	105
projekcia, gnómonická	gnomonic projection	A2	23
projekcia, guľová	spherical projection	A2	23
projekcia, kryštalografická	crystallographic projection	A2	23
projekcia, stereografická	stereographic projection	A2	23
prostredie, opticky anizotropné	optically anisotropic medium	A4	35
prostredie, opticky izotropné	optically isotropic medium	A4	35
prvok symetrie	symmetry element	A3	28
PSD detektor	PSD	D5	137
pseudosymetria	pseudosymmetry	A3	25
pyramída	pyramid	A2	20
R			
rád difrakcie	order of diffraction	B2	63
rád štruktúrneho invariantu	order of structure invariant	C2	98
rad, Fourierov	Fourier series	B3	71

Slovensko-anglický index

reaktor, jadrový	nuclear reactor	D4	133
reflexia (difrakcia)	reflection	B2	60
reflexia (operácia symetrie)	reflection	A3	27
reflexia, integrálna	integral reflection	B3	66
relácia, fázová	phase relation	C2	98
renormalizácia štruktúrnych faktorov	renormalization of structure factors	C2	94
retikulografia	reticulography	C5	113
rez, Harkerov	Harker section	C2	97
<i>R</i> -faktor	<i>R</i> -factor	C2	100
RHEED	Reflection High-Energy Electron Diffraction	C1	90
riešenie kryštálovej štruktúry	crystal structure analysis	C2	92
riešenie, kyvadlové	Pendellösung	B3	73
rombododekaéder	dodecahedron	A2	21
romboéder	rhombohedron	A2	20
rotácia	rotation	A3	27
rotácia, nevlastná	improper rotation	A3	26
rotácia, vlastná	proper rotation	A3	26
rotoinverzia	rotoinversion	A3	27
rotoflexia	rotoreflection	A3	27
rovina dvojčatenia	twinning plane	A5	41
rovina goniometra	goniometer plane	D2	120
rovina, difrakčná	diffraction plane	B2	61
rovina, kompozičná	compositional plane	A5	41
rovina, mriežková	lattice plane	A1	10
rovina, rozptylová	scattering plane	B2	60
rovina, sklzná	glide plane	A3	28
rovina, sklzná, diagonálna	diagonal glide plane	A3	28
rovina, sklzná, diamantová	diamond glide plane	A3	28
rovina, sklzná, osová	axial glide plane	A3	28
rovina, sklzová	slip plane, glide plane	A6	46
<i>rovina, uzlová</i>	lattice plane	A1	11
rovina, zrkadlová	mirror plane	A3	28
rovnica, Braggova	Bragg equation	B2	64
rovnica, rozptylová, Debyeova	Debye scattering equation	B3	67
rovnice dynamickej teórie, základné	basic equations of dynamical theory	B3	76
rovnice, Laueho	Laue equations	B2	63
rovnice, Takagiho	Takagi equations	C5	113
rozlíšenie detektora, energiové	energy resolution	D5	135

Slovensko-anglický index

rozlíšenie detektora, priestorové	spatial resolution	D5	135
rozptyl neutrónov, jadrový	nuclear neutron scattering	C1	91
rozptyl neutrónov, magnetický	magnetic neutron scattering	C1	91
rozptyl neutrónov, malouhlový, pri veľmi malom uhle dopadu	GISANS	C1	87
rozptyl rtg žiarenia, malouhlový, pri veľmi malom uhle dopadu	GISAXS	C1	87
rozptyl žiarenia	radiation scattering	B1	52
rozptyl, Comptonov	Compton scattering	B1	54
rozptyl, difúzny	diffuse scattering	B1	55
rozptyl, difúzny, paramagnetický	paramagnetic diffuse scattering	B1	57
rozptyl, difúzny, tepelný	thermal diffuse scattering	B1	55
rozptyl, difúzny, z neusporiadanosti	disorder diffuse scattering	B1	55
rozptyl, elastický	elastic scattering	B1	52
rozptyl, magnetický, koherentný	coherent magnetic scattering	B1	58
rozptyl, malouhlový	small angle scattering	C1	87
rozptyl, malouhlový, neutrónov	small angle neutron scattering (SANS)	C1	87
rozptyl, malouhlový, pri veľmi malom uhle dopadu	grazing incidence small angle scattering (GISAS)	C1	87
rozptyl, malouhlový, rtg žiarenia	small angle X-ray scattering (SAXS)	C1	87
rozptyl, neelastický	inelastic scattering	B1	52
rozptyl, nepružný	inelastic scattering	B1	52
rozptyl, pružný	elastic scattering	B1	52
rozptyl, Rayleighov	Rayleigh scattering	B1	54
rozptyl, Thomsonov	Thomson scattering	B1	54
rozšírenie, prístrojové	instrumental broadening	C1	88
roztok, tuhý	solid solution	A1	8
roztok, tuhý, intersticiálny	interstitial solid solution	A1	8
roztok, tuhý, neusporiadaný	disordered solid solution	A1	8
roztok, tuhý, substitučný	substitutional solid solution	A1	8
roztok, tuhý, usporiadaný	ordered solid solution	A1	8
S			
SAED	Selected Area Electron Diffraction	C1	89
seminvariant, štruktúrny	structure seminvariant	C2	98
sfenoid	sphenoid	A2	19
schopnosť, rozlišovacia detektora	resolving power of detector	D5	135
schopnosť, rozlišovacia monochromátora	monochromator resolving power	D3	124

Slovensko-anglický index

sieť, Wulffova	Wulff net	A2	24
skalenoéder	scalenoedron	A2	20
sken	scan	D2	121
sken, Renningerov	Renninger scan	B3	74
skenovanie	scan, scanning	D2	121
skenovanie (θ - 2θ)	scan (θ - 2θ)	D2	122
skenovanie (θ - θ)	scan (θ - θ)	D2	122
skenovanie, detektorové	detector scan	D2	122
skenovanie, lineárne	linear scan	D2	122
skenovanie ω , ω -skenovanie	ω -scan	D2	122
skenovanie, krokové	step scan	D2	121
skenovanie, spojité	continuous scan	D2	121
sklz	slip	A6	46
slučka, dislokačná	dislocation loop	A6	47
smer, jedinečný	unique direction	A3	29
smer, kryštalografický	crystallographic direction	A1	11
smer, optický	optic direction	A4	36
smer, polárny	polar direction	A3	29
snímanie	scanning	D2	121
snímka, difrakčná	diffraction pattern	B2	62
spresňovanie kryštálovej štruktúry	crystal structure refinement	C2	100
spresňovanie s ohraňčením	restrained refinement	C2	100
spresňovanie s viazaním	constrained refinement	C2	100
stena, dislokačná	dislocation wall	A6	48
stĺpec	rod, column	A1	6
stopa, difrakčná	diffraction spot	B2	63
stred súmernosti	inversion centre	A3	28
stupeň kryštalinity	degree of crystallinity	A1	6
stupeň na dislokácii	dislocation jog	A6	46
stupeň textúry	degree of texture	C4	106
stupnica, absolútna	absolute scale	C2	93
súmernosť	symmetry	A3	25
supergrupa symetrie	supergroup	A3	28
superštruktúra	superstructure	A1	18
súradnice, frakčné	fractional coordinates	C1	82
súradnice, zlomkové	fractional coordinates	C1	82
sústava, hexagonálna	hexagonal system	A1	14
sústava, jednoklonná	monoclinic system	A1	13
sústava, kocková	cubic system, isometric system	A1	14
sústava, kolimačná	collimation system	D2	119
sústava, kosoštvorcová	orthorhombic system	A1	13

Slovensko-anglický index

sústava, kryštalografická	crystal system	A1	13
sústava, kubická	cubic system, isometric system	A1	14
sústava, monoklinická	monoclinic system	A1	13
<i>sústava, ortorombická</i>	orthorhombic system	A1	13
sústava, rombická	orthorhombic system	A1	13
<i>sústava, romboédrická</i>	trigonal system	A1	14
sústava, šesťuholníková	hexagonal system	A1	14
sústava, štvorcová	tetragonal system	A1	13
sústava, tetragonálna	tetragonal system	A1	13
sústava, trigonálna	trigonal system	A1	13
sústava, triklinická	triclinic system	A1	13
sústava, trojklonná	triclinic system	A1	13
sústava, trojuholníková	trigonal system	A1	13
svetlo, nepolarizované	unpolarized light	A4	34
svetlo, polarizované	polarized light	A4	34
svetlo, prirodzené	natural light	A4	34
symbol priestorovej grupy	space-group symbol	A3	30
symbol, Bravaisov	Bravais symbol	A2	22
symbol, difrakčný	diffraction symbol	B3	68
symbol, extinkčný	extinction symbol	B3	68
symbol, Millerov	Miller symbol	A2	22
symbol, Wyckoffov	Wyckoff letter	A3	31
symetria	symmetry	A3	25
symetria difrakčného obrazu	diffraction pattern symmetry	B2	62
symetria polohy	site symmetry	A3	31
synchrotrón	synchrotron	D4	133
syntéza F_o	F_o synthesis	C2	93
syntéza, diferenčná	difference synthesis	C2	93
syntéza, Fourierova	Fourier synthesis	C2	92
syntéza, Pattersonova	Patterson synthesis	C2	96
syntéza, špeciálna	special synthesis	C2	93
systém, sklzový	slip system	A6	48
Š			
šírka difrakčnej čiary, integrálna	integral width	C1	88
škála, absolútna	absolute scale	C2	93
škvrna, difrakčná	diffraction spot	B2	63
šošovka, Bertrandova	Bertrand lens	A4	37
šplhanie	climb	A6	46
štandard	standard	C3	102
štandard, vnútorný	internal standard	C3	103
štandard, vonkajší	external standard	C3	103

Slovensko-anglický index

štrbina detektora	detector slit, receiving slit	D2	120
štrbina, divergenčná	divergence slit	D2	119
štrbina, divergenčná, automatická	automatic divergence slit	D2	119
štrbina, vstupná (komôrky)	entrance slit, input slit	D1	114
štrbina, vstupná (difraktometra)	input slit, entrance slit	D2	119
štruktúra látky	structure of matter	A1	6
štruktúra, bodová	point structure	C2	95
štruktúra, homodesmická	homodesmic structure	A1	18
štruktúra, iónová	ionic structure	A1	18
štruktúra, kovalentná	covalent structure	A1	18
štruktúra, kovová	metallic structure	A1	18
štruktúra, kryštalová	crystal structure	A1	9
štruktúra, kryštalová, ideálna	ideal crystal structure	A1	9
štruktúra, mezomorfna	mesomorphic structure	A1	8
štruktúra, modulovaná	modulated structure	A1	18
štruktúra, mozaiková	mosaic structure	A1	7
štruktúra, nesúmerateľná	incommensurate structure	A1	18
štruktúra, neusporiadaná	disordered structure	A1	9
štruktúra, OD	OD-structure	A1	17
štruktúra, súmerateľná	commensurate structure	A1	18
štruktúra, usporiadaná	ordered structure	A1	9
štruktúry, enantiomorfné	enantiomorphic structures	A1	18
štruktúry, homometrické	homometric structures	A1	18
štruktúry, izovektorové	isovector structures	A1	18
šum detektora, vlastný	basic noise	D5	135
T			
tenzometria, difrakčná	diffraction tensometry	C5	109
tenzor, gyračný	gyration tensor	A4	39
teória difrakcie, dynamická	dynamical theory of diffraction	B3	65
teória difrakcie, kinematická	kinematical theory of diffraction	B3	65
terčik rtg lampy	tube target	D4	132
tetraéder	tetrahedron	A2	21
tetragón-tri oktaéder	trapezohedron	A2	21
tetragón-tri tetraéder	deltohedron	A2	22
tetrahexaéder	tetrahexahedron	A2	21
textúra	texture	C4	106
textúra, axiálna	axial texture	C4	107
textúra, deformačná	deformation texture, strain texture	C4	108
textúra, dvojosová	biaxial texture	C4	107
textúra, jednoosová	single axis texture	C4	107

Slovensko-anglický index

textúra, rastová	growth texture	C4	108
textúra, valcovacia	rolling texture	C4	108
textúra, viacnásobná	multiple texture	C4	108
textúra, vláknová	fiber texture	C4	107
textúra, vláknová, jednoduchá	simple fibre texture	C4	107
textúra, vláknová, prstencová	ring fibre texture	C4	107
textúra, vláknová, špirálová	spiral fibre texture	C4	107
tienidlo, fluorescenčné	fluorescence screen	D5	137
tok, fotónový	photon flux	D4	128
tok, žiarivý	radiant power	D4	128
topografia, difrakčná	diffraction topography	C5	110
topografia, dvojkryštálová	double crystal topography, plane-wave topography	C5	112
topografia, polychromatická	polychromatic topography	C5	111
topografia, projekčná	projection topography	C5	112
topografia, projekčná, limitovaná	limited projection topography	C5	112
topografia, sekčná	section topography	C5	112
topografia, sekvenčná	sequential topography, rocking curve imaging	C5	112
topografia, synchrotrónová	synchrotron topography	C5	113
topogram	topogram	C5	110
transformácia, Fourierova	Fourier transform	B3	71
transformácia, ortogonálna	orthogonal transformation, isometric transformation	A3	25
translácia, mriežková	lattice translation	A3	27
transmisia, anomálna	anomalous transmission	B3	73
trapezoéder	trapezohedron	A2	20
trieda symetricky ekvivalentných začiatkov	equivalence class	C2	98
trigón-tri oktaéder	trisoctahedron	A2	21
trigón-tri tetraéder	tristetrahedron	A2	22
trojuholník, Borrmannov	Borrmann triangle	B3	74
trubica, röntgenová	X-ray tube	D4	132
tvar kryštálu	crystal shape	A2	19
tvar, kryštálový	crystal form	A2	19
tvar, kryštálový, otvorený	open crystal form	A2	19
tvar, kryštálový, uzavretý	closed crystal form	A2	19
typ textúry	texture type	C4	106
U			
účinnosť, detekčná	detection efficiency	D5	135
uhol dopadu	incidence angle	D2	121

Slovensko-anglický index

uhol ramena detektora	angle of detector arm	D2	121
uhol, Braggov	Bragg angle	B2	61
uhol, difrakčný	diffraction angle	B2	61
uhol, rozptylový	scattering angle	B2	61
uhol, väzbový	chemical bond angle	C1	82
uloženie filmu, Debyeovo-Scherrerovo	Debye-Scherrer film loading	D1	115
uloženie filmu, Straumanisovo	Straumanis film loading	D1	115
uloženie filmu, van Arkelovo	van Arkel film loading	D1	115
usporiadanie databázy, inverzné	inverse arrangement of database	C3	102
usporiadanie databázy, priame	direct arrangement of database	C3	102
usporiadanie na odraz	back-reflection arrangement	D1	116
usporiadanie na priechod	forward-reflection arrangement	D1	116
usporiadanie, Debyeovo-Scherrerovo	Debye-Scherrer arrangement	D1	115
usporiadanie, disperzné	dispersive arrangement	D3	126
usporiadanie, disperzné, štvorkryštálové	four-crystal dispersive arrangement	D3	126
usporiadanie, disperzné, slabé	weak dispersive arrangement	D3	126
usporiadanie, najtesnejšie	closest packing	A1	15
usporiadanie, nedisperzné	non-dispersive arrangement	D3	125
usporiadanie, nefokusačné	non-focusing arrangement	D1	115
usporiadanie, reflexné	reflection geometry	B3	75
usporiadanie, tesné	close packing	A1	15
usporiadanie, transmisné	transmission geometry	B3	74
usporiadanosť na diaľku	long range order	A1	15
usporiadanosť nablízko	short range order	A1	15
usporiadanosť, chemická	chemical order	A1	15
usporiadanosť, topologická	topological order	A1	15
<i>uzol</i>	lattice point	A1	9
V			
vakancia	vacancy	A6	43
vejár, Borrmannov	Borrmann fan	B3	73
vektor bázy	basis vector	A1	11
vektor, báзовý	basis vector	A1	11
vektor, Burgersov	Burgers vector	A6	45
vektor, difrakčný	diffraction vector	B2	61
vektor, medziatómový	interatomic vector	C2	96
vektor, mriežkový	lattice vector	A1	11
vektor, rozptylový	scattering vector	B2	61
vektor, vlnový	wave vector	B2	60

Slovensko-anglický index

vektor, vlnový, uhlový	angular wave vector	B2	60
vektor, základný	basic vector	A1	11
vektory, reciproké	reciprocal vectors	A1	14
vlna rtg žiarenia, stojatá	X-ray standing wave	B3	80
vlna, Blochova	Bloch wave	B3	76
vlna, koherentná	coherent wave	B2	59
vlny, koherentné	coherent waves	B2	59
vrstva	layer	A1	6
výber, obverzný	obverse setting	A1	14
výber, reverzný	reverse setting	A1	14
vybočenie na dislokácii	dislocation kink	A6	46
vyhasínanie, systematické	systematic extinction	B3	68
výkon, žiarivý	radiant power	D4	128
vzdialenosť, medziatómová	interatomic distance	C1	82
vzdialenosť, medzirovinná	interplanar spacing, interplanar distance	A1	11
vzorka	sample, specimen	C1	83
vzorka, kompaktná	compact sample	C1	83
vzorkovanie Pattersonovej funkcie	Patterson function sampling	C2	97
vzťah, Thomsonov	Thomson formula	B3	66
weissenbergogram	weissenbergogram	C1	85
Z, Ž			
zákon, Friedelov	Friedel's law	B3	72
zákon, Moseleyov	Moseley law	D4	130
zákon, zrastový	twin law	A5	41
záznam, difrakčný	diffraction pattern	B2	62
záznam, difrakčný, vypočítaný	calculated diffraction pattern	C3	105
záznam, difraktometrický	diffractometer record	B2	62
záznam, fotometrický	photometric record	B2	62
zdroj neutrónov, spalačný	spallation neutron source	D4	133
zdroj rtg s kvapalnou anódou	metal jet X-ray tube	D4	132
zdroj, Frankov-Readov	Frank-Read source	A6	48
zhášanie	extinction	A4	38
zhášanie, agregátne	aggregate extinction	A4	38
zhášanie, undulózne	undulose extinction	A4	38
zhluk bodových porúch	point defect cluster	A6	44
zóna	zone	A2	22
zoslabovanie žiarenia	extinction of radiation	D4	131
zrast kryštálov	crystal twin	A5	40
zrastanie kryštálov	crystal twinning	A5	42
zrast, cyklický	cyclic twin	A5	41

Slovensko-anglický index

zrast, deformačný	deformation twin	A5	42
zrast, epitaxný	epitaxial twin	A5	42
zrast, kontaktný	contact twin	A5	41
zrast, kryštalizačný	growth twin	A5	42
zrast, kryštalograficky orientovaný	crystallographically oriented twin	A5	40
zrast, meroédrický	twin by merohedry	A5	41
zrast, mimetický	mimetic twin	A5	41
zrast, náhodný	nonoriented twin	A5	40
zrast, penetračný	penetration twin	A5	41
zrast, polysyntetický	polysynthetic twin	A5	41
zrast, pseudomeroédrický	twin by pseudomerohedry	A5	41
zrast, racemický	racemic twin	A5	42
zrast, transformačný	transformation twin	A5	42
zrkadlenie	reflection	A3	27
zrkadlo, Göbelovo	Göbel mirror	D3	126
zrno kryštálu	crystal grain	A1	8
zrno, kryštalické	crystal grain	A1	8
zvázok, difraktovaný	diffracted beam	B2	61
žiarenie, difraktované	diffracted radiation	B2	60
žiarenie, elektrónové	electron radiation	D4	128
žiarenie, charakteristické	characteristic radiation	D4	129
žiarenie, koherentné	coherent radiation	B2	59
žiarenie, nekoherentné	incoherent radiation	B2	59
žiarenie, neutrónové	neutron radiation	D4	129
žiarenie, primárne	primary radiation	B1	52
žiarenie, röntgenové	X-ray radiation	D4	129
žiarenie, röntgenové, brzdné	Bremsstrahlung	D4	129
žiarenie, rozptýlené	scattered radiation	B1	52
žiarenie, synchrotrónové	synchrotron radiation	D4	133

Anglický abecedný index so slovenskými ekvivalentmi

($n+1$)-wave approximation	($n+1$)-vlnová aproximácia	B3	78
$\sin^2 \psi$ method	metóda $\sin^2 \psi$	C5	110
A			
a priori structure information	apriórna štruktúrna informácia	C2	95
A-, B-, C-face centred cell	bázicky centrovaná bunka	A1	12
ab initio method	metóda <i>ab initio</i>	C2	95
absolute integral intensity	absolútna integrálna intenzita	C1	88
absolute quantitative phase analysis	absolútna kvantitatívna fázová analýza	C3	104
absolute scale	absolútna stupnica	C2	93
absolute scale	absolútna škála	C2	93
absolute term of Fourier series	absolútny člen Fourierovho rozvoja	C2	94
absolute units	absolútne jednotky	B1	55
absorption edge	absorpčná hrana	D4	131
absorption factor	absorpčný faktor	B3	67
absorption filter	absorpčný filter	D3	125
addition method	metóda prídavku	C3	104
aggregate extinction	agregátne zhášanie	A4	38
allotriomorphic crystal	alotriomorfný kryštál	A1	6
amorphous substance	amorfná látka	A1	6
analyzer	analyzátor	A4	37
angle of detector arm	uhol ramena detektora	D2	121
angular wave vector	uhlový vlnový vektor	B2	60
anisotropic temperature factor	anizotropný teplotný faktor	B3	69
anisotropic temperature factor	anizotropný teplotný parameter	B3	69
anomalous absorption	anomálna absorpcia	B3	73
anomalous dispersion	anomálna disperzia	B1	56
anomalous scattering method	metóda anomálneho rozptylu	C2	99
anomalous transmission	anomálna transmisia	B3	73
anticathode	antikatóda rtg lampy	D4	132
antifrenkel pair	antifrenkelovská porucha	A6	44
antiphase boundary	antifázová hranica	A6	50
antiphase domain	antifázová doména	A6	50
antisymmetry operation	operácia antisymetrie	A3	25
aperture	clona	D2	119
areal PSD	plošný polohovo citlivý detektor	D5	137
asymmetric Bragg monochromator	Braggov asymetrický monochromátor	D3	125

Anglicko-slovenský index

asymmetric diffraction	asymetrická difrakcia	B3	75
asymmetric Laue monochromator	Laueho asymetrický monochromátor	D3	125
asymmetric part of unit cell	asymetrická časť základnej bunky	C2	95
asymmetry factor	faktor asymetrie	B3	74
atomic factor	atómový faktor	B1	55
atomic radius	atómový polomer	A1	17
atomic scattering factor	atómový rozptylový faktor	B1	55
automatic divergence slit	automatická divergenčná štrbina	D2	119
axial divergence	axiálna divergencia	D2	119
axial glide plane	osová sklzná rovina	A3	28
axial texture	axiálna textúra	C4	107
axis multiplicity	násobnosť rotačnej osi	A3	28
B			
background	pozadie signálu	D5	135
back-reflection arrangement	usporiadanie na odraz	D1	116
balance filter	balančný filter	D4	132
Bartels monochromator	Bartelsov monochromátor	D3	126
Barth-Hosemann method	Barthova-Hosemannova metóda	C5	111
basic equations of dynamical theory	základné rovnice dynamickej teórie	B3	76
basic noise	vlastný šum detektora	D5	135
basic vector	základný vektor	A1	11
basis vector	vektor bázy	A1	11
basis vector	bázový vektor	A1	11
beam divergence	divergencia zväzku	D2	119
Belov symmetry group	Belovova grupa	A3	32
Berg-Barrett method	Bergova-Barrettova metóda	C5	111
Bertrand lens	Bertrandova šošovka	A4	37
biaxial crystal	opticky dvojosový kryštál	A4	36
biaxial texture	dvojosová textúra	C4	107
Bijvoet pair	Bijvoetov pár	B3	72
birefringence	dvojlom svetla	A4	35
black-white symmetry group	čiernobiela grupa	A3	32
Bloch wave	Blochova vlna	B3	76
block	blok	A1	6
body centred cell	priestorovo centrovaná bunka	A1	12
Born approximation	Bornova aproximácia	B1	53
Borrmann effect	jav, Borrmannov	B3	73
Borrmann fan	Borrmannov vejár	B3	73
Borrmann triangle	Borrmannov trojuholník	B3	74
boundary conditions	okrajové podmienky	B3	78
Bragg angle	Braggov uhol	B2	61

Anglicko-slovenský index

Bragg case	Braggova geometria	B3	75
Bragg equation	Braggova rovnica	B2	64
Bragg geometry	Braggova geometria	B3	75
Bragg monochromator	Braggov monochromátor	D3	125
Bragg-Brentano goniometer	Braggov-Brentanov goniometer	D2	121
Bragg-Laue geometry	Braggova-Laueho geometria	B3	75
Bravais indices	Bravaisove indexy	A2	22
Bravais lattice	Bravaisova mriežka	A1	12
Bravais rules	Bravaisove pravidlá	A1	11
Bravais symbol	Bravaisov symbol	A2	22
Bremsstrahlung	brzdné röntgenové žiarenie	D4	129
building particle	stavebná častica	A1	6
building unit	stavebná jednotka	A1	6
Burgers vector	Burgersov vektor	A6	45
C			
calculated diffraction pattern	vypočítaný difrakčný záznam	C3	105
calibration	kalibrácia	C3	103
calibration factor	kalibračná konštanta	C3	103
centred cell	centrovaná bunka	A1	12
centrosymmetric point group	centrosymetrická bodová grupa	A3	29
characteristic radiation	charakteristické žiarenie	D4	129
characteristic radiation line	čiara charakteristického žiarenia	D4	130
charged dislocation	nabitá dislokácia	A6	49
chemical bond angle	väzbový uhol	C1	82
chemical order	chemická usporiadanosť	A1	15
cholesteric liquid crystal	cholesterický kvapalný kryštál	A1	8
circular polarization	kruhová polarizácia svetla	A4	34
climb	šplhanie	A6	46
close packing	tesné usporiadanie	A1	15
closed crystal form	uzavretý kryštálový tvar	A2	19
closest packing	najtesnejšie usporiadanie	A1	15
coherence length	koherenčná dĺžka	B2	59
coherent boundary	koherentná hranica	A6	50
coherent domain	oblasť koherentného rozptylu, koherentná oblasť	B2	59
coherent magnetic scattering	koherentný magnetický rozptyl	B1	58
coherent precipitate	koherentný precipitát	A6	51
coherent radiation	koherentné žiarenie	B2	59
coherent wave	koherentná vlna	B2	59
coherent waves	koherentné vlny	B2	59
coincidence method	koincidenčná metóda	C2	97

Anglicko-slovenský index

collimation system	kolimačná sústava	D2	119
collimator	kolimátor	D1	114
colour centre	farebné centrum	A6	44
colour symmetry group	farebná grupa	A3	32
combined symmetry operation	zložená operácia symetrie	A3	26
commensurate structure	súmerateľná štruktúra	A1	18
compact sample	kompaktná vzorka	C1	83
compensating wave plate	kompenzátor	A4	37
compositional plane	kompozičná rovina	A5	41
Compton scattering	Comptonov rozptyl	B1	54
congruent symmetry operation	kongruentná operácia symetrie	A3	26
conical camera	kužeľová komôrka	D1	116
conoscopic interference pattern	interferenčný konoskopický obrazec	A4	38
constrained refinement	spresňovanie s viazaním	C2	100
contact twin	kontaktný zrast	A5	41
continuous diffraction line	súvislá difrakčná čiara	C1	87
continuous scan	spojité skenovanie	D2	121
Convergent Beam Electron Diffraction	CBED	C1	90
coordination	koordinácia	A1	17
coordination number	koordinačné číslo	A1	17
coplanar diffraction	komplanárna difrakcia	B3	75
Cottrell atmosphere	Cottrellova atmosféra	A6	49
Cottrell atmosphere	Cottrellov oblak	A6	49
covalent radius	kovalentný polomer	A1	17
covalent structure	kovalentná štruktúra	A1	18
Cromer-Mann coefficients	Cromerove-Mannove koeficienty	B1	56
crystal	kryštál	A1	6
crystal form	kryštálový tvar	A2	19
crystal goniometer	goniometer na meranie kryštálov	A2	22
crystal grain	zrno kryštálu	A1	8
crystal grain	kryštalické zrno	A1	8
crystal habit	habitus kryštálu	A2	19
crystal lattice	kryštálová mriežka	A1	9
crystal shape	tvar kryštálu	A2	19
crystal structure	kryštálová štruktúra	A1	9
crystal structure analysis	kryštálová štruktúrna analýza	C2	92
crystal structure analysis	riešenie kryštálovej štruktúry	C2	92
crystal structure refinement	spresňovanie kryštálovej štruktúry	C2	100
crystal system	kryštalografická sústava	A1	13
crystal twin	zrast kryštálov	A5	40

Anglicko-slovenský index

crystal twinning	zrastanie kryštálov	A5	42
crystalline particle	kryštalická častica	A1	8
crystalline substance	kryštalická látka	A1	6
crystallite	kryštalit	A1	8
crystallographic direction	kryštalografický smer	A1	11
crystallographic orbit	kryštalografická oblasť	A3	31
crystallographic point group	kryštalografická bodová grupa	A3	28
crystallographic projection	kryštalografická projekcia	A2	23
crystallographic symmetry group	kryštalografická grupa symetrie	A3	28
crystallographic symmetry operation	kryštalografická operácia symetrie	A3	25
crystallographically oriented twin	kryštalograficky orientovaný zrast	A5	40
cube	kocka	A2	21
cubic system	kubická sústava, kocková sústava	A1	14
Curie principle	Curieho princíp	A4	33
cyclic twin	cyklický zrast	A5	41
D			
Darwin curve	Darwinova krivka	B3	79
Darwin plateau	Darwinovo plateau	B3	80
Darwin-Prins curve	Darwinova-Prinsova krivka	B3	80
dead time	mŕtva doba	D5	135
Debye parameter	Debyeov parameter	B3	69
Debye scattering equation	Debyeova rozptylová rovnica	B3	67
Debyeogram	debyeogram (difrakčné metódy)	C1	86
Debyeogram	debyeogram (práškové komôrky)	D1	115
Debye-Scherrer arrangement	Debyeovo-Scherrerovo usporiadanie	D1	115
Debye-Scherrer camera	Debyeova-Scherrerova komôrka	D1	115
Debye-Scherrer film loading	Debyeovo-Scherrerovo uloženie filmu	D1	115
Debye-Scherrer method	Debyeova-Scherrerova metóda	C1	86
Debye-Waller factor	Debyeov-Wallerov faktor	B3	69
decorated dislocation	dekorovaná dislokácia	A6	49
deformation texture	deformačná textúra	C4	108
deformation twin	deformačný zrast	A5	42
degree of crystallinity	stupeň kryštalinity	A1	6
degree of texture	stupeň textúry	C4	106
deltahedron	tetragón-tri tetraéder	A2	22
densitometer	denzitomer	D5	134
densitometer	fotometer	D5	134
density, volumic mass	hustota	C1	81
detection efficiency	detekčná účinnosť	D5	135
detector characteristic curve	charakteristika detektora	D5	136

Anglicko-slovenský index

detector linearity	linearita detektora	D5	135
detector scan	detektorové skenovanie	D2	122
detector slit	štrbina detektora	D2	120
deviation parameter	parameter odchýlky	B3	79
diadochy	diadochia	A1	16
diagonal glide plane	diagonálna sklzná rovina,	A3	28
diamond glide plane	diamantová sklzná rovina	A3	28
difference Patterson map	Pattersonova diferenčná mapa	C2	97
difference synthesis	diferenčná syntéza	C2	93
diferencial cross-section	diferenciálny účinný prierez	B1	54
diffracted beam	difraktovaný zväzok	B2	61
diffracted radiation	difraktované žiarenie	B2	60
diffraction	difrakcia	B2	60
diffraction angle	difrakčný uhol	B2	61
diffraction camera	difrakčná komôrka	D1	114
diffraction condition	difrakčná podmienka	B2	63
diffraction cone	difrakčný kužeľ	C1	87
diffraction contrast	difrakčný kontrast	C5	110
diffraction indexing	indexovanie difrakcií	C1	89
diffraction indices	difrakčné indexy	B2	63
diffraction line	difrakčná čiara, difrakčná línia	C1	87
diffraction line profile	profil difrakčnej čiary	C1	88
diffraction maximum	difrakčné maximum	B2	60
diffraction method	difrakčná metóda	C1	83
diffraction pattern	difrakčný obraz	B2	61
diffraction pattern	difrakčný obrazec, difrakčná snímka, difrakčný záznam	B2	62
diffraction pattern geometry	geometria difrakčného obrazu	B2	61
diffraction pattern symmetry	symetria difrakčného obrazu	B2	62
diffraction plane	difrakčná rovina	B2	61
diffraction position	difrakčná poloha	B2	63
diffraction spot	difrakčná stopa, difrakčná škvrna	B2	63
diffraction symbol	difrakčný symbol	B3	68
diffraction tensometry	difrakčná tenzometria	C5	109
diffraction topography	difrakčná topografia	C5	110
diffraction vector	difrakčný vektor	B2	61
diffractogram	difraktogram	B2	62
diffractometer	difraktometer	D2	118
diffractometer record	difraktometrický záznam	B2	62
diffuse scattering	difúzny rozptyl	B1	55
dilution method	zried'ovacia metóda	C3	104

Anglicko-slovenský index

diploid	didodekaéder	A2	21
dipyramid	dipyramída	A2	20
direct arrangement of database	priame usporiadanie databázy	C3	102
direct lattice	priama mriežka	A1	10
direct method	priama metóda	C2	97
direct space	priamy priestor	A1	10
disclination	disklinácia	A6	48
discriminator	diskriminátor	D5	136
dislocation	dislokácia	A6	45
dislocation core	jadro dislokácie	A6	45
dislocation forest	dislokačný les	A6	49
dislocation jog	stupeň na dislokácii	A6	46
dislocation kink	ohyb na dislokácii	A6	46
dislocation kink	vybočenie na dislokácii	A6	46
dislocation line	dislokačná čiara	A6	45
dislocation loop	dislokačná slučka	A6	47
dislocation wall	dislokačná stena	A6	48
disorder diffuse scattering	difúzny rozptyl z neusporiadanosti	B1	55
disordered crystal	neusporiadaný kryštál	A1	7
disordered solid solution	neusporiadaný tuhý roztok	A1	8
disordered structure	neusporiadaná štruktúra	A1	9
dispersion condition	disperzná podmienka	B3	77
dispersion surface	disperzná plocha	B3	77
dispersive arrangement	disperzné usporiadanie	D3	126
disphenoid	disfenoid	A2	20
dissociated dislocation	disociovaná dislokácia	A6	47
distortion function	skresľovacia funkcia	D3	124
divacancy	dvojvakancia	A6	44
divergence slit	divergenčná štrbina	D2	119
dodecahedron	rombododekaéder	A2	21
dome	dóma	A2	19
double crystal topography	dvojkryštálová topografia	C5	112
double interstitial	dvojitý intersticiál	A6	44
double-crystal monochromator	dvojkryštálový monochromátor	D3	125
dynamical diffraction effect	dynamický difrakčný jav	B3	72
dynamical theory of diffraction	dynamická teória difrakcie	B3	65
E			
edge dislocation	hranová dislokácia	A6	45
elastic scattering	elastický rozptyl	B1	52
elastic scattering	pružný rozptyl	B1	52

Anglicko-slovenský index

Electron Back Scattering Diffraction	EBSD	C1	90
electron density	elektrónová hustota	C2	92
electron density map	mapa elektrónovej hustoty	C2	92
electron diffraction	difrakcia elektrónov	C1	84
electron diffraction analysis	elektrónová difrakčná analýza	C1	89
electron radiation	elektrónové žiarenie	D4	128
electron units	elektrónové jednotky	B1	55
elliptic polarization	eliptická polarizácia svetla	A4	34
enantiomorphic point group	enantiomorfná bodová grupa	A3	29
enantiomorphic structures	enantiomorfné štruktúry	A1	18
enantiomorphic symmetry operation	enantiomorfná operácia symetrie	A3	26
energy resolution	energiové rozlíšenie detektora	D5	135
entrance slit	vstupná štrbina (komôrky)	D1	114
entrance slit	vstupná štrbina (difraktometra)	D2	119
epitaxial twin	epitaxný zrast	A5	42
equatorial divergence	ekvatoriálna divergencia	D2	119
equivalence class	trieda symetricky ekvivalentných začiatkov	C2	98
error window	chybové okno	C3	102
etch figure	leptový obrazec	A4	39
Eulerian cradle	Eulerova kolíska	D2	122
Ewald construction	Ewaldova konštrukcia	B2	64
Ewald sphere	Ewaldova guľová plocha	B2	64
exposition	expozícia	D5	134
exposure	expozícia	D5	134
external standard	vonkajší štandard	C3	103
external standard method	metóda vonkajšieho štandardu	C3	103
external stress	vonkajšie napätie	C5	109
extinction	zhášanie	A4	38
extinction contrast	extinkčný kontrast	C5	111
extinction length	extinkčná dĺžka	B3	65
extinction of radiation	extinkcia žiarenia, zoslabovanie žiarenia	D4	139
extinction symbol	extinkčný symbol	B3	68
extraordinary beam	mimoriadny lúč	A4	35
extrinsic stacking fault	extrinzičná vrstevná chyba	A6	51
F			
face centred cell	plošne centrovaná bunka	A1	12
factor analysis	faktorová analýza	C3	104

Anglicko-slovenský index

fiber texture	vláknová textúra	C4	107
figurative point	pozičný bod	A2	23
figure of merit	miera zhody	C3	102
film cassette	filmová kazeta	D1	114
filtration, search	filtrácia	C3	102
first position	prvé postavenie	A1	13
first-sort symmetry operation	operácia symetrie 1. druhu	A3	26
flat-cassette camera	komôrka s rovinným filmom	D1	115
fluorescence screen	fluorescenčné tienidlo	D5	137
F_o synthesis	syntéza F_o	C2	93
focal spot	ohnisko rtg lampy	D4	132
focusing camera	komôrka s fokusáciou	D1	115
focusing circle	fokusačná kružnica	D1	115
focusing monochromator	fokusačný monochromátor	D3	127
formula unit	vzorcová jednotka	C1	82
forward-reflection arrangement	usporiadanie na priechod	D1	116
four-circle diffractometer	štvorkruhový difraktometer	D2	118
four-crystal dispersive arrangement	štvorkryštálové disperzné usporiadanie	D3	126
Fourier map	Fourierova mapa	C2	93
Fourier series	Fourierov rad	B3	71
Fourier synthesis	Fourierova syntéza	C2	92
Fourier transform	Fourierova transformácia	B3	71
fractional coordinates	frakčné súradnice, zlomkové súradnice	C1	82
Frank dislocation	Frankova dislokácia	A6	47
Frank-Read source	Frankov-Readov zdroj	A6	48
Free Electron Laser (FEL)	laser s voľnými elektrónmi (FEL)	D4	133
Frenkel disorder	Frenkelova neusporiadanosť	A6	44
Frenkel pair	Frenkelova porucha	A6	43
Friedel group	Friedelova grupa	B2	62
Friedel pair	Friedelov pár	B3	72
Friedel's law	Friedelov zákon	B3	72
Full Width at Half Maximum	FWHM	C1	88
FWHM, line half-width	polšírka difrakčnej čiary	C1	88
G			
Gandolfi camera	Gandolfiho komôrka	D1	116
gas-filled counter	plynový detektor	D5	135
Geiger-Müller counter	Geigerov-Müllerov detektor	D5	136
general position	všeobecná poloha (na projekcii)	A2	24

Anglicko-slovenský index

general position	všeobecná poloha (v štruktúre)	A3	31
geometrical factor	geometrický faktor	B3	66
ghost	falošné maximum	C2	93
GISANS	malouhlový rozptyl neutrónov pri veľmi malom uhle dopadu	C1	87
GISAXS	malouhlový rozptyl rtg žiarenia pri veľmi malom uhle dopadu	C1	87
glide plane	sklzná rovina	A3	28
glide plane	sklzová rovina	A6	46
gnomonic projection	gnómonická projekcia	A2	23
Göbel mirror	Göbelovo zrkadlo	D3	126
goniometer	goniometer (difraktometra)	D2	120
goniometer axis	os goniometra	D2	120
goniometer head	goniometrická hlavica	D2	122
goniometer plane	rovina goniometra	D2	120
goodness of fit	kvalita spresňovania	C2	100
gradient method	metóda gradientu	C2	97
grain boundary	hranica zrna	A6	49
grazing incidence diffraction	difrakcia pri malom uhle dopadu	C1	86
grazing incidence small angle scattering (GISAS)	malouhlový rozptyl pri veľmi malom uhle dopadu	C1	87
growth texture	rastová textúra	C4	108
growth twin	kryštalizačný zrast	A5	42
Guinier camera	Guinierova komôrka	D1	116
gyration tensor	gyračný tenzor	A4	39
gyroid	pentagón-tri oktaéder	A2	21
H			
halflayer	polhrúbka	D4	131
Harker maximum	Harkerovo maximum	C2	97
Harker section	Harkerov rez	C2	97
heavy atom method	metóda ťažkého atómu	C2	97
helical dislocation	závitnicová dislokácia	A6	47
hemihedral group	hemiédrická grupa	A3	29
hexagonal system	hexagonálna sústava, šesťuholníková sústava	A1	14
hexahedron	hexaéder	A2	21
hexoctahedron	hexaoktaéder	A2	21
hextetrahedron	hexatetraéder	A2	21
High Resolution Transmission Electron Microscopy	HRTEM	C1	90
high-pressure camera	vysokotlaková komôrka	D1	116

Anglicko-slovenský index

high-temperature camera	vysokoteplotná komôrka	D1	117
holographic method	holografická metóda	C2	99
holohedral group	holoédrická grupa	A3	29
homodesmic structure	homodesmická štruktúra	A1	18
homometric structures	homometrické štruktúry	A1	18
horizontal goniometer	horizontálny goniometer	D2	120
hypidiomorphic crystal	hypidiomorfný kryštál	A1	6
I, J			
ideal crystal	ideálny kryštál	A1	7
ideal crystal structure	ideálna kryštálová štruktúra	A1	9
ideally mosaic crystal	ideálne mozaikový kryštál	A1	7
identity	identita	A3	28
identity period	perióda identity	A1	10
idiomorphic crystal	idiomorfný kryštál	A1	6
imaging foil	zobrazovacia fólia, pamäťová fólia	D5	134
improper rotation	nevlastná rotácia	A3	26
improper symmetry operation	nevlastná operácia symetrie	A3	26
impurity interstitial	prímesový intersticiál	A6	43
incidence angle	uhol dopadu	D2	121
incoherent boundary	nekoherentná hranica	A6	50
incoherent precipitate	nekoherentný precipitát	A6	51
incoherent radiation	nekoherentné žiarenie	B2	59
incommensurate structure	nesúmerateľná štruktúra	A1	18
independent part of unit cell	nezávislá časť základnej bunky	C2	95
index of database	index databázy	C3	101
indicatrix	elipsoid indexu lomu, indikatrix	A4	36
inelastic scattering	nepružný rozptyl, neelastický rozptyl	B1	52
input slit	vstupná štrbina (komôrky)	D1	114
input slit	vstupná štrbina (difraktometra)	D2	119
instrumental broadening	prístrojové rozšírenie	C1	88
integral intensity	integrálna intenzita difrakčného maxima	B3	66
integral intensity of diffraction line	integrálna intenzita difrakčnej čiary	C1	88
integral intensity of diffraction	integrálna intenzita difrakcie	B3	80
integral reflection	integrálna reflexia	B3	66
integral reflectivity	integrálna intenzita difrakcie, integrálna reflexná mohutnosť	B3	80
integral transmittivity	integrálna intenzita transmisie	B3	80
integral width	integrálna šírka difrakčnej čiary	C1	88

Anglicko-slovenský index

intensifying screen	zosilňovacia fólia	D5	134
interatomic distance	medziatómová vzdialenosť	C1	82
interatomic vector	medziatómový vektor	C2	96
interference color	interferenčná farba	A4	38
interference function	interferenčná funkcia	B3	70
internal standard	vnútorný štandard	C3	103
internal standard method	metóda vnútorného štandardu	C3	103
interpenetrating twin	prerastlica	A5	41
interplanar distance	medzirovinná vzdialenosť	A1	11
interplanar spacing	medzirovinná vzdialenosť	A1	11
interstitial	intersticiál	A6	43
interstitial atom	intersticiálny atóm	A6	43
interstitial position	intersticiálna poloha	A6	43
interstitial solid solution	intersticiálny tuhý roztok	A1	8
intrinsic stacking fault	intrinzičná vrstevná chyba	A6	50
inverse arrangement of database	inverzné usporiadanie databázy	C3	102
inversion	inverzia	A3	27
inversion centre	stred súmernosti	A3	28
ionic radius	iónový polomer	A1	17
ionic structure	iónová štruktúra	A1	18
ionization chamber	ionizačná komora	D5	136
ionization energy	ionizačná energia	D4	129
isogonal space groups	izogonálne priestorové grupy	A3	32
isometric system	kubická sústava, kocková sústava	A1	14
isometric transformation	ortogonálna transformácia	A3	25
isomorphism	izomorfizmus	A1	16
isomorphous replacement method	metóda izomorfného nahradenia	C2	99
isostructural substances	izoštruktúrne látky	A1	16
isotopic incoherence	izotopová inkoherencia	B1	57
isotropic temperature factor	izotropný teplotný faktor	B3	69
isovector structures	izovektorové štruktúry	A1	18
iterative method	iteračná metóda	C2	99
Johann monochromator	Johannov monochromátor	D3	127
Johansson monochromator	Johanssonov monochromátor	D3	127
K			
$K\alpha$ -doublet	dublet $K\alpha$	D4	130
$K\beta$ -line	čiara $K\beta$	D4	130
Karle-Hauptman determinant	Karleho-Hauptmanov determinant	C2	98
Karle-Hauptman matrices	Karleho-Hauptmanove matice	C2	98
key of database	klúč databázy	C3	101
Kikuchi pattern	Kikučiho obrazec	C1	89

Anglicko-slovenský index

kinematical theory of diffraction	kinematická teória difrakcie	B3	65
Kratky camera	Kratkého komôrka	D1	116
K_{β} -filter	filter β , β -filter	D4	132
L			
labelled vector method	metóda značeného vektora	C2	99
Lang method	Langova metóda	C5	111
lattice basis	báza mriežky	A1	11
lattice factor	mriežkový faktor	B3	70
lattice line	mriežková priamka, <i>uzlová priamka</i>	A1	10
lattice parameter	mriežkový parameter, <i>mriežková konštanta</i>	A1	11
lattice parameter	základná perióda identity	A1	12
lattice plane	mriežková rovina, <i>uzlová rovina</i>	A1	10
lattice plane pole	pól mriežkovej roviny	C4	107
lattice point	mriežkový bod, <i>uzol</i>	A1	9
lattice translation	mriežková translácia	A3	27
lattice vector	mriežkový vektor	A1	11
Laue camera	Laueho komôrka	D2	122
Laue case	Laueho geometria	B3	74
Laue diffraction conditions	Laueho difrakčné podmienky	B2	63
Laue equations	Laueho rovnice	B2	63
Laue geometry	Laueho geometria	B3	74
Laue group	Laueho grupa	B2	62
Laue indices	Laueho indexy	B2	63
Laue method	Laueho metóda	C1	85
Laue monochromator	Laueho monochromátor	D3	125
Laue point	Laueho bod	B3	77
Laue-Bragg geometry	Laueho-Braggova geometria	B3	75
lauegram	lauegram	C1	86
layer	vrstva	A1	6
limited projection topography	limitovaná projekčná topografia	C5	112
limiting position	limitná poloha (na projekcii)	A2	24
limiting sphere	limitujúca guľová plocha	B2	64
line defect	čiarová porucha	A6	44
line profile approximation	aproximácia profilu difrakčnej čiary	C1	88
linear absorption coefficient	lineárny koeficient absorpcie	D4	131
linear extinction coefficient	lineárny koeficient extinkcie, lineárny koeficient zoslabovania	D4	131
linear polarization (of light)	lineárna polarizácia svetla	A4	34
linear polarization (of X-rays)	lineárna polarizácia (rtg žiarenia)	D4	130
linear PSD	lineárny polohovo citlivý detektor	D5	137

Anglicko-slovenský index

linear scan	lineárne skenovanie	D2	122
liquid crystal	kvapalný kryštál	A1	8
local symmetry operation	lokálna operácia symetrie	A3	26
Lomer-Cottrell dislocation	Lomerova-Cottrellova dislokácia	A6	47
long range order	usporiadanosť na diaľku	A1	15
long range order parameter	parameter usporiadanosť na diaľku	A1	16
Lorentz factor	Lorentzov faktor	B3	67
Lorentz point	Lorentzov bod	B3	77
low angle boundary, lineages	malouhlová hranica	A6	49
Low-Energy Electron Diffraction	LEED	C1	90
low-temperature camera	nízokoteplotná komôrka	D1	117
M			
macrodefect	makrodefekt	A6	51
macrodefect	porucha, makroskopická	A6	51
magnetic neutron scattering	magnetický rozptyl neutrónov	C1	91
magnetic scattering length	rozptylová dĺžka magnetického rozptylu	B1	57
magnetic symmetry group	magnetická grupa	A3	32
map of magnetic moments density	mapa hustoty magnetických momentov	C2	92
mapping of phase composition	mapovanie fázového zloženia	C3	105
mass extinction coefficient	hmotnostný koeficient zoslabovania	D4	131
measured sphere	meraná guľa	C2	92
meridional divergence	meridionálna divergencia	D3	125
meridional focusing	meridionálna fokusácia	D3	127
merohedral group	meroédrická grupa	A3	29
mesomorphic structure	mezomorfná štruktúra	A1	8
metal jet X-ray tube	zdroj rtg s kvapalnou anódou	D4	132
metallic structure	kovová štruktúra	A1	18
method of one exposition	metóda jednej expozície	C5	110
method of steepest decrease	metóda najstrmšieho poklesu	C2	97
method of two expositions	metóda dvoch expozícií	C5	110
methods of crystal structure analysis	metódy riešenia kryštálovej štruktúry	C2	95
microdefect	mikrodefekt	A6	51
microdefect	mikroskopická porucha	A6	51
microfocus	mikrofokus	D4	133
microfocus	mikroohnisko	D4	133
Miller indices	Millerove indexy	A2	22
Miller symbol	Millerov symbol	A2	22
mimetic twin	mimetický zrast	A5	41

Anglicko-slovenský index

mirror plane	zrkadlová rovina	A3	28
misfit dislocation	dislokácia nezhody, misfitová dislokácia	A6	48
mixed dislocation	zmiešaná dislokácia	A6	46
modified structure factor	modifikovaný štruktúrny faktor	C2	94
modulated structure	modulovaná štruktúra	A1	18
modulus of structure factor	modul štruktúrneho faktora	B3	70
molecular replacement method	metóda molekulárneho nahradenia	C2	99
monochromatic diffraction method	monochromatická difrakčná metóda	C1	84
monochromatic focusing	monochromatická fokusácia	D3	127
monochromatization	monochromatizácia	D3	124
monochromator	monochromátor	D3	124
monochromator dispersion	disperzia monochromátora	D3	124
monochromator resolving power	rozlišovacia schopnosť monochromátora	D3	124
monoclinic system	monoklinická sústava, jednoklonná sústava	A1	13
mosaic block	mozaikový blok	A1	7
mosaic crystal	mozaikový kryštál	A1	7
mosaic structure	mozaiková štruktúra	A1	7
Moseley law	Moseleyov zákon	D4	130
multilayer monochromator	multivrstvový monochromátor	D3	126
multiple diffraction	viacnásobná difrakcia	B3	73
multiple texture	viacnásobná textúra	C4	108
multiplicity factor	faktor násobnosti	B3	67
multisolution method	metóda mnohých riešení	C2	98
N			
nanocrystal	nanokryštál	A1	7
natural light	prirodzené svetlo	A4	34
nematic liquid crystal	nematický kvapalný kryštál	A1	8
Neumann principle	Neumannov princíp	A4	33
neutron diffraction	difrakcia neutrónov	C1	84
neutron diffraction analysis	neutrónová difrakčná analýza	C1	91
neutron diffractometer	neutrónový difraktometer	D2	118
neutron radiation	neutrónové žiarenie	D4	129
Niggli cell	Niggliho bunka	A1	12
noncentrosymmetric point group	necentrosymetrická bodová grupa	A3	29
non-coplanar diffraction	nekomplanárna difrakcia	B3	76
noncrystallographic point group	nekryštalografická bodová grupa	A3	30
noncrystallographic symmetry operation	nekryštalografická operácia symetrie	A3	25

Anglicko-slovenský index

non-dispersive arrangement	nedisperzné usporiadanie	D3	125
non-focusing arrangement	nefokusačné usporiadanie	D1	115
nonoriented twin	náhodný zrast	A5	40
normalized structure factor	normalizovaný štruktúrny faktor	C2	94
<i>N</i> -phase invariant	<i>N</i> -fázový invariant	C2	98
nuclear neutron scattering	jadrový rozptyl neutrónov	C1	91
nuclear reactor	jadrový reaktor	D4	133
nuclear scattering length	rozptylová dĺžka jadrového rozptylu	B1	56
O			
obverse setting	obverzný výber	A1	14
occupancy factor	obsadzovací faktor	C1	82
octahedron	oktaéder	A2	21
OD-structure	OD-štruktúra	A1	17
ogdohedral group	ogdoédrická grupa	A3	29
open crystal form	otvorený kryštálový tvar	A2	19
optic axis	optická os kryštálu	A4	36
optic direction	optický smer	A4	36
optic normal	optická normála	A4	36
optical activity	optická aktívnosť	A4	39
optical character of crystal	optický charakter kryštálu	A4	35
optical density	hustota sčernania filmu	D5	134
optical rotation	optická otáčavosť	A4	39
optical sign of crystal	optický charakter kryštálu	A4	35
optically anisotropic medium	opticky anizotropné prostredie	A4	35
optically isotropic medium	opticky izotropné prostredie	A4	35
optimization	optimalizácia	C3	102
order of diffraction	rád difrakcie	B2	63
order of structure invariant	rád štruktúrneho invariantu	C2	98
ordered crystal	usporiadaný kryštál	A1	7
ordered solid solution	usporiadaný tuhý roztok	A1	8
ordered structure	usporiadaná štruktúra	A1	9
ordinary beam	riadny lúč	A4	35
orientation contrast	orientačný kontrast,	C5	111
orientation distribution function	orientačná distribučná funkcia	C4	107
oriented specimen	orientovaný preparát	C1	83
orthogonal transformation	ortogonálna transformácia	A3	25
orthohexagonal cell	ortohexagonálna bunka	A1	12
orthorhombic system	rombická sústava, kosoštvorcová sústava, <i>ortorombická sústava</i>	A1	13

Anglicko-slovenský index

P, Q			
packing factor	koeficient zaplnenia	A1	15
pair correlation function	párová korelačná funkcia	C1	81
paracrystal	parakryštál	A1	7
parallel overgrowth	rovnobežné narastanie	A5	40
paramagnetic diffuse scattering	paramagnetický difúzny rozptyl	B1	57
partial dislocation	neúplná dislokácia, parciálna dislokácia	A6	47
partial radial distribution function	parciálna radiálna distribučná funkcia	C1	81
partial symmetry operation	parciálna operácia symetrie	A3	26
partially coherent precipitate	čiastočne koherentný precipitát	A6	51
particle detector	detektor častíc	D5	135
particle flux density	hustota toku častíc	D4	128
Patterson function	Pattersonova funkcia	C2	96
Patterson function sampling	vzorkovanie Pattersonovej funkcie	C2	97
Patterson map	Pattersonova mapa	C2	96
Patterson methods	Pattersonove metódy	C2	96
Patterson synthesis	Pattersonova syntéza	C2	96
peak intensity	vrcholová intenzita	C1	88
peak-to-background ratio	pomer signálu k šumu	D5	135
pedion	pedión	A2	19
Pendellösung	pendellösung, kyvadlové riešenie	B3	73
penetration depth	hlĺbka prieniku žiarenia	D4	131
penetration twin	penetračný zrast	A5	41
perfect dislocation	úplná dislokácia	A6	47
phase analysis	fázová analýza	C3	101
phase boundary	fázová hranica	A6	50
phase of material	fáza látky	C3	101
phase of structure factor	fáza štruktúrneho faktora	B3	70
phase problem	fázový problém	C2	93
phase relation	fázová relácia	C2	98
photometric record	fotometrický záznam	B2	62
photomultiplier	fotonásobič	D5	137
photon flux	fotónový tok	D4	128
photon flux density	hustota fotónového toku	D4	128
physical factor	fyzikálny faktor	B3	66
physical profile	fyzikálny profil difrakčnej čiary, vlastný profil difrakčnej čiary	C1	88
piezoelectric effect	piezoelektrický jav	A4	34
piezoelectric point group	piezoelektrická bodová grupa	A4	34

Anglicko-slovenský index

pinacoid	pinakoid	A2	19
plane defect	plošná porucha	A6	49
plane group	rovinná grupa	A3	30
plane lattice	rovinná mriežka	A1	9
plane point group	rovinná bodová grupa	A3	30
plane-wave topography	dvojkryštalová topografia	C5	112
plastic deformation	plastická deformácia	A6	46
pleochroism	pleochroizmus	A4	38
point atom	bodový atóm	C2	95
point defect	bodová porucha	A6	43
point defect cluster	zhhluk bodových porúch	A6	44
point detector	bodový detektor	D5	137
point structure	bodová štruktúra	C2	95
point symmetry operation	bodová operácia symetrie	A3	27
point-group symmetry operation	uzavretá operácia symetrie	A3	26
polar direction	polárny smer	A3	29
polar point group	polárna bodová grupa	A3	29
polarization factor	polarizačný faktor	B3	67
polarization of electromagnetic waves	polarizácia elektromagnetického vlnenia	D4	130
polarized light	polarizované svetlo	A4	34
polarizer	polarizátor	A4	37
polarizing microscope	polarizačný mikroskop	A4	37
pole figure	pólový obrazec	C4	106
polychromatic diffraction method	polychromatická difrakčná metóda	C1	84
polychromatic focusing	polychromatická fokusácia	D3	127
polychromatic topography	polychromatická topografia	C5	111
polycrystalline aggregate	polykryštalický agregát	A1	8
polycrystalline method	polykryštalová metóda	C1	86
polycrystalline substance	polykryštalická látka	A1	6
polygonization	polygonizácia	A6	50
polymorphic modifications	polymorfné modifikácie	A1	16
polymorphism	polymorfizmus	A1	16
polysynthetic twin	polysyntetický zrast	A5	41
polytypism	polytypizmus	A1	17
position sensitive detector	polohovo citlivý detektor, PSD detektor	D5	137
positional disorder	pozičná neusporiadanosť	A1	9
powder camera	prášková komôrka	D1	114
powder diffractometer	práškový difraktometer, polykryštalový difraktometer	D2	118

Anglicko-slovenský index

powder method	prášková metóda	C1	86
powder specimen	práškový preparát	C1	83
p-polarization	<i>p</i> -polarizácia	D4	130
precession camera	precesná komôrka	D2	123
precession method	precesná metóda	C1	85
precipitate	precipitát	A6	51
preferred orientation	prednostná orientácia	C4	106
Preston camera	Prestonova komôrka	D1	116
primary beam stop	lapač primárneho zväzku	D1	114
primary beam trap	lapač primárneho zväzku	D1	114
primary extinction	primárna extinkcia	B3	72
primary radiation	primárne žiarenie	B1	52
primitive unit cell	primitívna základná bunka	A1	12
prism	prizma	A2	20
profiling of phase composition	profilovanie fázového zloženia	C3	105
projection point	projekčný bod	A2	23
projection sphere	projekčná guľa	A2	23
projection topography	projekčná topografia	C5	112
proper rotation	vlastná rotácia, vlastná operácia symetrie	A3	26
proportional counter	proporcionálny detektor	D5	136
PSD	PSD detektor	D5	137
pseudosymmetry	pseudosymetria	A3	25
puls-height analyser	amplitúdový analyzátor	D5	136
pumped X-ray tube	čerpaná rtg lampa	D4	132
pyramid	pyramída	A2	20
pyritohedron	pentagóndodekaéder	A2	21
pyroelectric effect	pyroelektrický jav	A4	33
pyroelectric point group	pyroelektrická bodová grupa	A4	33
qualitative phase analysis	kvalitatívna fázová analýza	C3	101
quantitative phase analysis	kvantitatívna fázová analýza	C3	101
quasicrystal	kvázikryštál	A1	7
quasi-forbidden diffraction	takmer zakázaná difrakcia	B3	69
quenching circuit	zhášací obvod	D5	136
R			
<i>R</i> value field	mapa <i>R</i> -faktorov	C2	100
racemic twin	racemický zrast	A5	42
Rachinger procedure	Rachingerova procedúra	C1	89
radial atomic density	radiálna atómová hustota	C1	81
radial distribution function	radiálna distribučná funkcia	C1	81
radiant power	žiarivý tok, žiarivý výkon	D4	128

Anglicko-slovenský index

radiation defect	radiačná porucha	A6	44
radiation intensity	intenzita žiarenia	D4	128
radiation scattering	rozptyl žiarenia	B1	52
radius of goniometer	polomer goniometra	D2	120
Rayleigh scattering	Rayleighov rozptyl	B1	54
real crystal	reálny kryštál	A1	7
receiving slit	štrbina detektora	D2	120
reciprocal lattice	reciproká mriežka	A1	14
reciprocal space	reciproký priestor	A1	14
reciprocal space map	mapa reciprokého priestoru	D2	122
reciprocal vectors	reciproké vektory	A1	14
reduced cell	redukovaná bunka	A1	12
reference database	referenčná databáza	C3	101
reference mixtures method	metóda referenčných zmesí	C3	104
reflection	reflexia (difrakcia)	B2	60
reflection	reflexia, zrkadlenie (operácia symetrie)	A3	27
reflection conditions	reflexné podmienky	B3	68
reflection curve	reflexná krivka	B3	79
reflection geometry	reflexné usporiadanie	B3	75
Reflection High-Energy Electron Diffraction	RHEED	C1	90
refraction	lom svetla	A4	34
refractive index	index lomu	D4	128
relative integral intensity	relatívna integrálna intenzita	C1	88
Renninger effect	Renningerov jav	B3	74
Renninger scan	Renningerov sken	B3	74
renormalization of structure factors	renormalizácia štruktúrnych faktorov	C2	94
residual stress	zvyškové napätie	C5	109
residual stress of type I.	zvyškové napätie I. druhu	C5	109
residual stress of type II.	zvyškové napätie II. druhu	C5	109
residual stress of type III.	zvyškové napätie III. druhu	C5	109
resolving power of detector	rozlišovacia schopnosť detektora	D5	135
restrained refinement	spresňovanie s ohraničením	C2	100
reticular density	retikulárna hustota	A1	11
reticulography	retikulografia	C5	113
reverse setting	reverzný výber	A1	14
<i>R</i> -factor	<i>R</i> -faktor	C2	100
rhombohedral unit cell	romboédrická základná bunka,	A1	12
rhombohedron	romboéder	A2	20

Anglicko-slovenský index

Rietveld method	Rietveldova metóda	C2	99
Rietveld quantitative analysis	rietveldovská kvantitatívna analýza	C3	105
ring fibre texture	prstencová vláknová textúra	C4	107
rocking curve	difrakčná krivka	B3	79
rocking curve imaging	sekvenčná topografia	C5	112
rod, column	stĺpec	A1	6
rolling texture	valcovacia textúra	C4	108
Ross-filter	Rossova filtrácia, Rossovo filter,	D4	132
rotating anode X-ray tube	lampa s rotujúcou anódou	D4	132
rotating crystal method	metóda otáčaného kryštálu	C1	85
rotation	otočenie	A3	27
rotation	rotácia	A3	27
rotation axis	rotačná os	A3	28
rotoinversion	rotoinverzia	A3	27
rotoinversion axis	rotoinverzná os	A3	28
rotoreflexion	rotoreflexia	A3	27
row lattice	priamková mriežka	A1	9
S			
sagittal divergence	sagitálna divergencia	D3	125
sagittal focusing	sagitálna fokusácia	D3	127
sample	vzorka	C1	83
sample centring	centrovanie vzorky	D1	114
sample changer	menič vzoriek	D2	122
sample holder	držiak vzorky	D1	114
sample spinner	rotačný držiak vzorky	D1	114
satelite peak	satelitné maximum	C2	97
scale factor	škálovací faktor	C2	93
scalenoedron	skalenoéder	A2	20
scan	sken	D2	121
scan (θ - 2θ)	skenovanie (θ - 2θ)	D2	122
scan (θ - θ)	skenovanie (θ - θ)	D2	122
scanning	skenovanie, snímanie	D2	121
scattered radiation	rozptýlené žiarenie	B1	52
scattering amplitude	amplitúda rozptylu	B1	53
scattering angle	rozptylový uhol	B2	61
scattering centre	rozptylové centrum	B1	52
scattering length	rozptylová dĺžka	B1	53
scattering plane	rozptylová rovina	B2	60
scattering vector	rozptylový vektor	B2	61
Schottky defect	Schottkyho porucha	A6	43
Schottky disorder	Schottkyho neusporiadanosť	A6	44

Anglicko-slovenský index

scintillation detector	scintilačný detektor	D5	137
screw axis	skrutková os	A3	28
screw dislocation	skrutková dislokácia	A6	45
sealed X-ray tube	zatavená rtg lampa	D4	132
second position	druhé postavenie	A1	13
secondary extinction	sekundárna extinkcia	B3	73
second-sort symmetry operation	operácia symetrie 2. druhu	A3	26
section topography	sekčná topografia	C5	112
Seemann-Bohlin camera	Seemannova-Bohlinova komôrka	D1	116
Seemann-Bohlin goniometer	Seemannov-Bohlinov goniometer	D2	121
Selected Area Electron Diffraction	SAED	C1	89
self disorder	vlastná neusporiadanosť, intrinzičná neusporiadanosť	A6	44
self interstitial	vlastný intersticiál	A6	43
semiconductor counter	polovodičový detektor	D5	137
semiquantitative phase analysis	semikvantitatívna fázová analýza	C3	105
sequential topography	sekvenčná topografia	C5	112
set of lattice lines	osnova mriežkových priamok	A1	10
set of lattice planes	osnova mriežkových rovín	A1	11
sharpened Fourier map	zostrená Fourierova mapa	C2	94
sharpened Patterson function	zostrená Pattersonova funkcia	C2	96
Shockley dislocation	Shockleyho dislokácia	A6	47
short range order	usporiadanosť nablízko	A1	15
short range order parameter	parameter usporiadanosť nablízko	A1	16
short-wavelength limit	krátkovlnná hranica	D4	129
Shubnikov space group	Šubnikovova grupa	A3	32
simple fibre texture	jednoduchá vláknová textúra	C4	107
single axis texture	jednoosová textúra	C4	107
single crystal	monokryštál	C1	83
single crystal diffractometric method	monokryštálová difraktometrická metóda	C1	86
single crystal method	monokryštálová difrakčná metóda	C1	84
single symmetry operation	jednoduchá operácia symetrie	A3	26
single-crystal diffractometer	monokryštálový difraktometer	D2	118
single-wave approximation	jednovlnová aproximácia	B3	77
SIRAS method	metóda SIRAS	C2	99
site multiplicity	násobnosť polohy	A3	31
site symmetry	symetria polohy	A3	31
site symmetry group	grupa symetrie polohy	A3	31
slip	sklz	A6	46
slip band	sklzový pás	A6	48

Anglicko-slovenský index

slip plane	sklzárovina	A6	46
slip system	sklzárový systém	A6	48
small angle camera	malouhlová komôrka	D1	116
small angle diffraction	malouhlová difrakcia	C1	86
small angle scattering	malouhlový rozptyl	C1	87
small angle X-ray scattering (SAXS)	malouhlový rozptyl rtg žiarenia	C1	87
small angle neutron scattering (SANS)	malouhlový rozptyl neutrónov	C1	87
smectic liquid crystal	smektický kvapalný kryštál	A1	8
Snoek atmosphere	Snoekova atmosféra	A6	49
Snoek atmosphere	Snoekov oblak	A6	49
solid solution	tuhý roztok	A1	8
Soller slit	Sollerova clona	D2	119
space group	priestorová grupa	A3	30
space lattice	priestorová mriežka	A1	9
space-group symbol	symbol priestorovej grupy	A3	30
space-group symmetry operation	otvorená operácia symetrie	A3	27
spallation neutron source	spalačný zdroj neutrónov	D4	133
spatial resolution	priestorové rozlíšenie detektora	D5	135
special position	špeciálna poloha (na projekcii)	A2	24
special position	špeciálna poloha (v štruktúre)	A3	31
special synthesis	špeciálna syntéza	C2	93
specimen	vzorka, preparát	C1	83
sphenoid	sfenoid	A2	19
spherical projection	guľová projekcia	A2	23
spin incoherence	spinová inkoherencia	B1	57
spiral fibre texture	špirálová vlákňová textúra	C4	107
splitted dislocation	rozštiepená dislokácia	A6	47
s-polarization	s-polarizácia	D4	130
spotty diffraction line	škvrnitá difrakčná čiara	C1	87
stacking fault	vrstevná chyba	A6	50
stair-rod dislocation	kútová dislokácia	A6	47
standard	štandard	C3	102
standardless method	metóda bez štandardu	C3	104
step scan	krokové skenovanie	D2	121
stereographic projection	stereografická projekcia	A2	23
strain texture	deformačná textúra	C4	108
Straumanis film loading	Straumanisovo uloženie filmu	D1	115
structural motif	štruktúrny motív	A1	10
structure amplitude	štruktúrna amplitúda	B3	70

Anglicko-slovenský index

structure analysis	štruktúrna analýza	C1	81
structure defect	štruktúrna porucha	A6	43
structure factor	štruktúrny faktor	B3	70
structure fragment	štruktúrny fragment	C2	95
structure model	model štruktúry	C2	95
structure of matter	štruktúra látky	A1	6
structure parameter	štruktúrny parameter	C1	81
structure seminvariant	štruktúrny seminvariant	C2	98
sublattice	podmriežka	A1	10
substitutional atom	substitučný atóm	A6	44
substitutional disorder	substitučná neusporiadanosť	A1	9
substitutional solid solution	substitučný tuhý roztok	A1	8
supergroup	supergrupa symetrie, nadgrupa symetrie	A3	28
superlattice	nadmriežka	A1	10
superposition method	superpozičná metóda	C2	97
superstructure	superštruktúra	A1	18
symmetric Bragg monochromator	symetrický Braggov monochromátor	D3	125
symmetric Laue monochromator	symetrický Laueho monochromátor	D3	125
symmetrical diffraction	symetrická difrakcia	B3	75
symmetry	symetria, súmernosť	A3	25
symmetry element	prvok symetrie	A3	28
symmetry group	grupa symetrie	A3	28
symmetry group of physical property	grupa symetrie fyzikálnej vlastnosti	A4	33
symmetry operation	operácia symetrie, operácia súmernosti	A3	25
symmetry subgroup	podgrupa symetrie	A3	28
symorphic group	symorfná grupa	A3	32
synchrotron	synchrotrón	D4	133
synchrotron radiation	synchrotrónové žiarenie	D4	133
synchrotron topography	synchrotrónová topografia	C5	113
systematic extinction	systematické vyhasínanie	B3	68
T			
Takagi equations	Takagiho rovnice	C5	113
temperature factor	teplotný faktor	B3	69
temperature parameter	teplotný parameter	B3	69
tetartohedral grou	tetartoédrická grupa	A3	29
tetartoid	pentagón-tri tetraéder	A2	22
tetragonal system	tetragonálna sústava, štvorcová sústava	A1	13

Anglicko-slovenský index

tetrahedron	tetraéder	A2	21
tetrahexahedron	tetrahexaéder	A2	21
texture	textúra	C4	106
texture axis	os textúry	C4	106
texture cradle	textúrna hlavica	D2	122
texture goniometer	textúrny goniometer	D2	121
texture type	typ textúry	C4	106
thermal diffuse scattering	tepelný difúzny rozptyl	B1	55
theta-theta goniometer	theta-theta goniometer	D2	120
third position	tretie postavenie	A1	13
Thomson formula	Thomsonov vzťah	B3	66
Thomson scattering	Thomsonov rozptyl	B1	54
Thomson scattering length	Thomsonova rozptylová dĺžka	B1	55
tie point	uzlový bod	B3	78
tilt boundary	náklonová hranica	A6	49
topogram	topogram	C5	110
topological order	topologická usporiadanosť	A1	15
total cross-section	celkový účinný prierez	B1	54
total symmetry operation	totálna operácia symetrie	A3	25
transformation twin	transformačný zrast	A5	42
translation group	translačná grupa	A3	30
transmission curve	transmisná krivka	B3	80
transmission geometry	transmisné usporiadanie	B3	74
trapezohedron	tetragón-tri oktaéder	A2	21
trapezohedron	trapezoéder	A2	20
trial and error method	metóda skúšania a chýb	C2	99
triclinic system	triklinická sústava, trojklonná sústava	A1	13
trigonal system	trigonálna sústava, trojuholníková sústava, <i>romboédrická sústava</i>	A1	13
trisoctahedron	trigón-tri oktaéder	A2	21
tristetrahedron	trigón-tri tetraéder	A2	22
tube target	terčík rtg lampy	D4	132
twin	dvojča	A5	40
twin by merohedry	meroédrický zrast	A5	41
twin by pseudomerohedry	pseudomeroédrický zrast	A5	41
twin law	zrastový zákon	A5	41
twin operation	zrastová operácia, operácia dvojčatenia	A5	40
twinning	dvojčatenie	A5	40
twinning plane	rovina dvojčatenia	A5	41

Anglicko-slovenský index

twist boundary	skrutová hranica	A6	50
two-wave approximation	dvojlínová aproximácia	B3	78
two-wave dispersion surface	dvojlínová disperzná plocha	B3	77
U			
undulose extinction	undulózne zhašanie	A4	38
uniaxial crystal	opticky jednoosový kryštál	A4	36
unique direction	jedinečný smer	A3	29
unique polar axis	jedinečná polárna os	A3	29
unit cell	základná bunka	A1	12
unitary structure factor	jednotkový štruktúrny faktor	C2	94
universal structure invariant	univerzálny štruktúrny invariant	C2	98
unpolarized light	nepolarizované svetlo	A4	34
V – Z			
vacancy	vakancia	A6	43
vacuum camera	vákuová komôrka	D1	117
van Arkel film loading	van Arkelovo uloženie filmu	D1	115
vector methods	vektorové metódy	C2	96
vector space	vektorový priestor	C2	96
vertical goniometer	vertikálny goniometer	D2	120
Voigt principle	Voigtov princíp	A4	33
Volterra dislocation	Volterrova dislokácia	A6	47
volume defect	objemová porucha	A6	51
volumic mass, density	objemová hmotnosť	C1	81
von Hamos monochromator	von Hamosov monochromátor	D3	127
wave coherence	koherencia vln	B2	59
wave vector	vlnový vektor	B2	60
weak dispersive arrangement	slabé disperzné usporiadanie	D3	126
weighted reciprocal lattice	vážená reciproká mriežka	B3	68
Weissenberg goniometer	Weissenbergov goniometer	D2	123
Weissenberg method	Weissenbergova metóda	C1	85
weissenbergogram	weissenbergogram	C1	85
Wigner-Seitz cell	Wignerova-Seitzova bunka	A1	12
Wilson plot	Wilsonov graf	C2	94
Wulff net	Wulffova sieť	A2	24
Wyckoff position	Wyckoffova poloha	A3	31
Wyckoff letter	Wyckoffov symbol	A3	31
X-ray diffraction	difrakcia röntgenového žiarenia	C1	84
X-ray film	röntgenový film	D5	134
X-ray photon	fotón röntgenového žiarenia	D4	129
X-ray radiation	röntgenové žiarenie	D4	129

Anglicko-slovenský index

X-ray standing wave	stojatá vlna rtg žiarenia	B3	80
X-ray tube	röntgenová trubica, röntgenová lampa	D4	132
X-ray tube focus	ohnisko rtg lampy	D4	132
X-ray tube window	okienko rtg lampy	D4	133
X-rays absorption	absorpcia rtg žiarenia	D4	131
zone	zóna	A2	22
zone axis	os zóny	A2	22
ω -scan	ω -skenovanie	D2	122

Slovenská kryštalografická terminológia

Definície termínov s vysvetleniami, komentármi
a anglickými ekvivalentmi

doc. RNDr Ivan Červeň, CSc.
doc. RNDr. Edmund Dobročka, CSc.
doc. RNDr. Pavel Fejdi, CSc.
Mgr. Iveta Vančová

Návrh obálky: Mariana Maholányi
Zodpovedný redaktor: Emil Borčín
Grafické spracovanie: Ivan Červeň, Edmund Dobročka

Prvé vydanie. Vydala VEDA, vydavateľstvo SAV, v Bratislave roku 2014,
ako svoju 4045. publikáciu. Strán 224

www.veda.sav.sk

ISBN 978-80-224-1361-9