

## **Rentgenová strukturní analýza**

### **1. Experimentální technika:**

vznik rtg záření

zdroje (klasická lampa, rotační anoda, mikrofokusní, jet stream, synchrotron)

goniometry

optické prvky (monochromátory, kolimátory, zrcadla, fokusační optika)

detektory

Základní experimenty: polykrystalové a monokrystalové metody (BB, PB-PSA, pólové obrazce, Laue, HRXRD, topografie), mapování reciprokého prostoru

### **2. Kinematická teorie rozptylu**

úvod do teorie rozptylu, účinný průřez, rozptyl na elektronu, izolovaném atomu, krystal, strukturní a geometrický faktor, omezená velikost krystalu

**3(a,b). Difrakce na polykrystalu:** strukturní faktor, velikost krystalitu (Scherrerova formule), vliv deformace na polohy a šířky difrakčních maxim

Zbytková napětí

Full profile fitting

kvantifikace fázového složení (vnější normál a vnitřní normál)

Textury, ODF

Debyeův vztah, PDF

### **4. SAXS a GISAXS:** teoretický popis

řídke roztoky – Guinierův a Porodův vztah, Pair distance distribution function, max velikost částice, Porodův invariant

uspořádané částice – long range a short-range order

**5. Dokonalé a téměř dokonalé krystaly:** Kinematická teorie na monokrystalu a epitaxní vrstvě – polohy difrakcí, truncation rod, deformace v epitaxní vrstvě, relaxace. Mozaikový krystal, difuzní rozptyl od defektu.

### **6. Rtg reflexe**

Jednovlnná aproximace – hloubka vniku, reflexe na hladkém rozhraní, multivrstvy (formalismus přenosové matice), TRXRF

### **7. Dynamická teorie rtg difrakce**

Dvojvlnná aproximace: případ Bragg a Laue, Borrmannův jev, stojatá vlna, GID

### **7(a,b) Semikinematická teorie**

DWBA

Rozptyl na drsných rozhraních – popis drsného rozhraní, příklady: fraktálové rozhraní, dvouúrovňové, vicinální, spekulární odraz a nespekulární rozptyl, drsné multivrstvy

GISAXS na částicích na povrchu a uvnitř

Difuzní rozptyl na defektech v krystalu v okolí difrakce

### **8. Experimentální rozlišení**

Experimentální rozlišení v recipročném prostoru: analyzer streak, detector streak, monochromator streak, DuMondovy grafy, disperzní a nedisperzní uspořádání, koherenční šířka a délka

### **9. Další rentgenové metody**

Fluorescenční spektroskopie, absorpční spektroskopie – XAFS, XMCD

## Rentgenová topografie, rtg interferometr

Cvičení:

1. Exkurze – rentgenky, optické elementy,
2. Spektra rtg, příklady, absorpční hrany
3. Rozložení elektronové hustoty v přímém prostoru a jeho transformace, počítat různé tvarové funkce – koule, krychle, elipsoid, válec, reciproké mříže, Šířky píků koule, krychle, atd.