

Předmluva	5
Úvod	7
 I. K r y s t a l o v á s y m e t r i e	
1.1 Mříže	9
1.2 Buněky	13
1.3 Krystal	15
1.4 Operace a prvky symetrie v krystalových strukturách	17
1.5 Symboly prvků a operací souměrnosti	23
1.6 Maticové reprezentace operací souměrnosti	24
1.7 Prostorové grupy	27
1.8 Krystalové bodové grupy a Laueho grupy	34
1.9 Reciproká mříž	36
1.10 Transformační vztahy	38
1.11 Wignerovy-Seitzovy buněky a Brillouinovy zóny	41
 II. R e n t g e n o v á d i f r a k c e	
2. Rentgenové záření	43
2.1 Vznik a povaha rentgenového záření	43
2.2 Absorpce rentgenového záření látkou	47
2.3 Ochrana před rentgenovým zářením	50
3. Principy difrakce rentgenového záření na krystalech	51
3.1 Interakce rentgenového záření s látkou	51
3.2 Teorie rentgenové difrakce	52
3.3 Podmínky difrakce	58
3.4 Principy difrakčních metod	61
3.5 Strukturní faktor $F(hkl)$ a elektronová hustota $\rho(xyz)$	63
3.6 Strukturní faktor a symetrie krystalu	65
3.7 Faktory ovlivňující intenzitu difraktovaného záření	67
3.7.1 Atomový faktor f	67
3.7.2 Polarizační faktor p	69
3.7.3 Lorentzův faktor L	69
3.7.4 Geometrický faktor G	69
3.7.5 Absorpční faktor A	70
3.7.6 Teplotní faktor	71
3.7.7 Faktor četnosti m	72
3.7.8 Primární a sekundární extinkce	72
4. Polykrystalické metody a jejich využití	73
4.1 Získávání experimentálního materiálu	73
4.2 Polykrystalické metody	75
4.3 Vnější vzhled polykrystalických rentgenogramů	79

4.4	Indexování	81
4.5	Stanovení mřížových parametrů buňky	82
4.6	Stanovení počtu vzorcových jednotek	83
4.7	Pokyny pro provádění a publikování polykrystalických difrakčních záznamů	84
4.8	Příklad vyhodnocení polykrystalického záznamu	87
4.9	Příklad výpočtu strukturních faktorů a intenzit	88
4.10	Kvalitativní a semikvantitativní analýza	90
4.11	Kvantitativní analýza	91
4.11.1	Metoda vnějšího standardu	92
4.11.2	Metoda vnitřního standardu	93
4.11.3	Vegardův zákon	94
5.	Rentgenová strukturní analýza	94
5.1	Získávání a vyhodnocování experimentálního materiálu	96
5.2	Řešení fázového problému	105
5.2.1	Metody založené na vyhodnocení Pattersonovy funkce	106
5.2.1.1	Metoda těžkého atomu	107
5.2.2	Experimentální stanovení fází	108
5.2.2.1	Metoda anomálního rozptylu	108
5.2.2.2	Metoda izomorfní záměny	110
5.2.3	Přímé metody	111
5.3	Výpočet map elektronových hustot	119
5.4	Výpočet teplotních faktorů	119
5.5	Upřesnění struktury metodou nejmenších čtverců	121
5.6	Diferenční mapa elektronových hustot	122
5.7	Faktory spolehlivosti	122
5.8	Stanovení absolutní struktury	123
5.9	Publikování rentgenostrukturních údajů	124
5.10	Výpočet meziatomových vzdáleností a úhlů	125
5.11	Počítače v rentgenové strukturní analýze	126
5.12	Stanovení deformačních elektronových hustot	127
5.13	Rietveldova metoda stanovení struktury z polykrystalových dat	129
5.14	Strukturní banky dat	133

III. D o d a t k y

6.1	Vektory	135
6.2	Matice	136
6.3	Základní pojmy z teorie grup	137
6.4	Stereografická projekce	138
6.5	Komplexní čísla	140
6.6	Fourierova transformace	141
6.7	Zpracování experimentálních dat	141
7.	Doplňující literatura	142