

Odborné názvosloví

EXPERIMENTÁLNÍ ZAŘÍZENÍ PRO POLYKRystalOVÉ
RENTGENOVÉ DIFRAKČNÍ METODY**

MARIAN ČERŇANSKÝ, LUBOMÍR SMRČOK*

Fyzikální ústav ČSAV, Na Slovance 2, 180 40 Praha

*Ústav anorganické chémie SAV, 842 36 Bratislava

1. ÚVOD

Tato kapitola pojednává o *práškových metodách* (prášková metoda, powder method), u nichž se jako experimentální zařízení užívají především *práškové komůrky* (prášková komůrka, powder camera) (synonymum *práškové komory* (prášková komora, powder camera)) a *práškové difraktometry* (práškový difraktometer, powder diffractometer). Na těchto zařízeních se zkoumají *polykrystalické vzorky* (polykrystalická vzorka, polycrystalline specimen, polycrystalline sample), tj. kompaktní polykrystaly (Kryštal, kryštalová štruktúra, mriežka) nebo skutečné *práškové vzorky* (prášková vzorka, powder specimen, powder sample).

Základním rysem práškových metod je to, že primární svazek monochromatického záření dopadá na velký počet malých krystalů a vytváří tak charakteristický *difrakční obraz* (difrakčný obraz, diffraction image, diffraction pattern), který se na fotografickém filmu registruje jako soustava difrakčních linií, resp. *difrakčních kroužků* (difrakčný krúžok, diffraction ring), případně jejich částí. Vzájemná orientace zmíněných malých krystalů může být *náhodná* (náhodná, random), nebo mohou vykazovat jistou přednostní orientaci — *texturu* (textúra, texture). Pokud je *difraktujících* (difraktující, diffracting) krystalů v *ozářeném objemu* (ozářený objem, irradiated volume) málo, *difrakční obrazec* (difrakčný obrazec, diffraction pattern) na filmu, t. j. na *difrakčním snímku* (difrakčná snímka, diffraction picture, diffraction photograph) se skládá ze *škvřnitých*, (škvřnitých, spotty) difrakčních linií, na kterých je možné rozeznat diskrétní *difrakční stopy* (synonymum *difrakční škvřny* (difrakčná škvřna, diffraction spot)) od jednotlivých krystalů.

Je-li nutné *škvřnitost* (škvřnitosť, spottiness) difrakčních linií odstranit, použije se *přídavné zařízení* umožňující otáčení nebo oscilaci vzorku, případně filmu.

2. PRÁŠKOVÉ KOMŮRKY

Malé vzorky, resp. vzorky s *malou ozářenou plochou* (ozářená plocha, irradiated area) se zkoumají v *nefokusacích uspořádáních* (nefokusacné usporiadanie, non-focusing arrangement) (synonymum *uspořádání bez fokusace* (usporiadanie bez fokusácie, arrangement without focusing)). Sem patří především *válcová Debyeova-Scherrerova komůrka* (Debyeova—Scherrerova komůrka, Debye—Scherrer camera), v níž se snímkuje vzorky ve tvaru tenké tyčinky, která je — s možností rotace — umístěná v *ose komůrky* (os komůrky, camera axis), jež je kolmá na směr primárního

**Česko-slovenské kryštalografické názvoslovie

svazku. Prášková metoda, která užívá Debyeovu—Scherrerovu komůrku se nazývá *Debyeovou—Scherrerovou metodou* (Debyeova—Scherrerova metoda, Debye—Scherrer method) a difraktogram získaný touto metodou má název *debyegram* (debyegram, Debyegram).

Komůrka s rovinnou kazetou (komůrka s rovinnou kazetou, flat-cassette camera) (synonymum *komůrka s rovinným filmem* (komůrka s rovinným filmem, flat-film camera)) se často používá v *uspořádání na odraz* (usporiadanie na odraz, back-reflection arrangement) (synonymum při *metodě zpětné difrakce* (metóda spätnej difrakcie, back-reflection method)) s velkými difrakčními úhly. Pokud je vzorkem dostatečně tenký kompaktní polykrystal, např. fólie a stačí registrace s menšími difrakčními úhly, užívá se tato komůrka i v *uspořádání na průchod* (usporiadanie na priechod, forward-reflection arrangement) (synonymum při *průchodové metodě* (priechodová metóda, transmission method)). Případně se zmíněná komůrka s rovinnou kazetou užívá pro práci technikou *šikmých textur* (technika šikmých textúr, oblique-texture method), kdy osa textury vzorku není rovnoběžná se směrem primárního svazku. Místo rovinné kazety se někdy užívá *kuželová kazeta* (kuželová kazeta, conic(al) cassette) nebo *válcová kazeta* (valcová kazeta, cylindrical cassette) jejíž osa je rovnoběžná se směrem primárního svazku. Podobně jako u Debyeovy-Scherrerovy komůrky se v těchto uspořádáních užívá tenký primární svazek monochromatického záření z bodového ohniska k dosažení malé ozářené plochy vzorku, protože obecně se jedná o nefokusační uspořádání. Jen speciální volba geometrie umožňuje v uspořádání na odraz dosáhnout přibližnou fokusaci zvolené difrakční linie.

Fokusační uspořádání (fokusačné usporiadanie, focusing arrangement) umožňují využít větší ozářené plochy vzorků bez ztráty ostrosti difrakčních linií. V uspořádání na odraz se přitom užívá divergentní primární svazek z ohniska rtg. lampy, případně z ohniska monochromátoru. Konvergentní primární svazek, většinou difraktovaný krystalem monochromátoru, se užívá v uspořádání na průchod. *Seemannova—Bohlinova (metoda) fokusace* (Seemannova—Bohlinova (metóda) fokusácie, Seemann—Bohlin focusing (method)) je principem *Seemannovy—Bohlinovy fokusační komůrky* (Seemannovej—Bohlinovej fokusacenej komůrky, Seemann—Bohlin focusing camera), u níž *vstupní štěrbina* (vstupná štrbina, entry slit, (input) slit) a povrch vzorku leží na *fokusační kružnici* (fokusačná kružnica, focusing circle). *Braggova—Brentanova (metoda) fokusace* (Braggova—Brentanova (metóda) fokusácie, Bragg—Brentano focusing (method)) se uplatňuje u většiny práškových difraktometrů a u *semifokusační komůrky* (semifokusačná komůrka, glancing-angle camera, flat-specimen camera, flat-layer powder camera), u které osa komůrky leží v rovině povrchu vzorku. U Seemannovy—Bohlinovy fokusační komůrky a semifokusační komůrky je fotografický film ve válcové kazetě a *osa kazety* (os kazety, cassette axis) je totožná s osou komůrky, která je — podobně jako u Debyeovy—Scherrerovy komůrky — kolmá na směr primárního svazku. Speciální symetrickou variantou Seemannovy—Bohlinovy fokusační komůrky je *Prestonova komůrka* (Prestonova komůrka, Preston camera), u které je vzdálenost vstupní štěrbině od povrchu vzorku rovna *průměru komůrky* (priemer komůrky, camera diameter).

Kompaktní kombinace Seemannovy—Bohlinovy fokusační komůrky s fokusujícím krystalovým monochromátorem tvoří *Guinierovu komůrku* (Guinierova komůrka, Guinier camera). Od ní je odvozena řada dalších komůrek, např. Guinierova-de Wolfova, Guinierova—Häggova, Guinierova—Jagodzinského atd. Ve všech zatím zmíněných fokusačních uspořádáních se fokusace dosahuje využitím jistých geo-

metrických zákonitostí. Byly podniknuty pokusy (např. L. K. Frevel, V. Vand) dosáhnout soustředění paprsků použitím *Sollerovy clony* (Sollerova clona, Soller slit), což je soustava kovových, obvykle rovnoběžných lamel, která se často užívá na omezení rozbíhavosti, t. j. *divergence* (divergencia, divergence) svazku záření, aniž by se omezoval jeho průřez. Ve *Vandově komůrce* (Vandova komôrka, Vand camera) se k fokusaci užívá Sollerova clona, jejíž lamely jsou vůči sobě mírně skloněny. V tomto případě se Sollerova clona užívá k omezení *horizontální divergence* (horizontálna divergencia, horizontal divergence, equatorial divergence), což je rozbíhavost svazku v rovině rovníku difrakčního snímku, resp. v rovině fokusační kružnice. Častěji se však Sollerova clona užívá k omezení *vertikální divergence* (vertikálna divergencia, vertical divergence, axial divergence), t. j. rozbíhavosti svazku ve směru osy komůrky.

Mezi práškové komůrky se obvykle zařazuje i *Gandolfiho komůrka* (Gandolfiho komôrka, Gandolfi camera), v níž z malého monokrystalu (↖ Kryštal, kryštalová štruktúra, mriežka) rotujícího současně kolem dvou os svírajících navzájem úhel 45°, dostaneme stejný difrakční snímek jako od obvyklého práškového, resp. polykrystalického vzorku. Pokud potřebujeme zvláště malou ozářenou plochu vzorku, případně malou divergenci primárního svazku, použijeme *mikrosvazek* (mikro-zvázok, microbeam), z *mikroohniska* (mikroohnisko, microfocus) a v *mikrokomůrce* (mikrokomôrka, microcamera) získáme *mikrodifrakční snímek* (mikrodifrakčná snímka, microdiffraction picture).

Mezi komůrky pro difrakci za zvláštních podmínek patří především *vysokoteplotní komůrky* (vysokoteplotná komôrka, high-temperature camera) — např. Guinierova—Lenneova komůrka — dále *nízkoteplotní komůrky* (nízkoteplotná komôrka, low-temperature camera), *vysokotlaké komůrky* (vysokotlaková komôrka, high-pressure camera) a *komůrky s kontrolovanou atmosférou* (komôrka s kontrolovanou atmosférou, camera with controlled atmosphere) (synonymum *komůrky s definovanou atmosférou* (komôrka s definovanou atmosférou, camera with defined atmosphere)) včetně *vakuových komůrek* (vákuová komôrka, vacuum camera).

Kromě už zmíněných *filmových kazet* (filmová kazeta, film cassette), je podstatnou součástí každé komůrky *držák vzorku* (držiak vzorky, specimen holder, sample holder) a *kolimátor* (kolimátor, collimator) nebo štěrbinu pro vymezení primárního svazku. Z hlediska bezpečnosti práce se zářením i kvality difrakčních snímků — zejména kvůli nízkému *pozadí* (pozadie, background) — je důležitý *lapač primárního svazku* (lapač primárneho zvázku, primary beam stop, primary beam trap), který např. u Debyeovy—Scherrerovy komůrky má podobu *výstupní trubice* (výstupná trubica, exit-tube) obsahující černý papír, *fluorescenční stínítko* (fluorescenčné tienidlo, fluorescent screen) a olověné sklo s vyznačeným *nitkovým křížem* (nitkový kříž, cross-lines, cross-hairs). Tím současně umožňuje přesné *justování* (justovanie, adjustment) celé komůrky a zvláště vzorku do směru primárního svazku. Komůrka jako celek je pohyblivě uložena na *závěsu* (záves, support), resp. na *nosiči* (nosič, carrier) nebo na *stojanu* (stojan, stand, frame), případně na *podstavci* (podstavec, base), jejichž konstrukce umožňuje přesné *nastavení* (nastavenie, alignment) komůrky ke zdroji záření. Některé práškové komůrky jsou ještě vybaveny speciálními *břítými* (brit, cutting) edge), jejichž stíny na difrakčním snímku slouží ke *kalibraci* (kalibrácia, calibration) pro odečtení *difrakčních úhlů* (↖ Difrakcia rtg. žiarenia na kryštalických látkach). Speciální, např. *asymetrické uložení filmu* (uloženie filmu, film loading) podle Straumanise, nebo použití *standardu* (štandard, standard), či *expozice stopy primárního svazku* (stopa primárneho zvázku, primary beam spot, primary beam mark) má tentýž účel.

3. PRÁŠKOVÉ DIFRAKTOMETRY

V práškovém difraktometru probíhá *snímání* (snímanie, scanning) (synonymum *skanování* (skanovanie, scanning)) a registrace směrového rozložení záření difraktovaného práškovým či polykrystalickým vzorkem elektronicky. K tomu je vybaven detektorem záření (Fyzika rtg. lúčov, generátory a detektory rtg. žiarenia) a pohonným mechanismem na otáčení držáku vzorku a *ramena detektoru* (rameno detektoru, detektor arm). Kromě elektrického pohonu pro běžný *automatický provoz* (automatická převádka, automatic operation), mají difraktometry i *ruční pohon* (ručný pohon, hand drive), který se využívá při justování, nastavení výchozích poloh držáku vzorku a ramena detektoru apod. U starších typů difraktometrů se *úhel (nastavení) detektoru* (uhol (nastavenia) detektoru, diffractometer (setting) angle) obvykle odečítá na stupnici, která se opticky promítá na matnici přístroje a *úhel (natočení) vzorku* (uhol (natočenia) vzorku, glancing angle) je zpravidla na dělených kruzích s noniem. U novějších přístrojů se velikosti zmíněných úhlů zobrazují pomocí elektronických prvků. V dalším textu, pokud nebude uvedeno jinak, se bude jednat o difraktometr s Braggovou—Brentanovou fokusací. Její nedostatek u semifokusační komůrky — totiž fokusace jen jedné difrakční linie — u difraktometru odpadá díky postupnému snímání difrakčních linií, což umožňuje splnit fokusační podmínky vždy jen pro sledovaný difrakční úhel.

Měření na difraktometru obvykle začíná z počátečního stavu, ve kterém je mezi úhlem (natočení) vzorku (Θ) a úhlem detektoru (2Θ) nastaven poměr 1 : 2, t. j. z *nastavení* $\Theta : 2\Theta$ (nastavenie $\Theta—2\Theta$, $\Theta—2\Theta$ setting) (synonymum *nastavení* 2 : 1 (nastavenie 2 : 1, 2 : 1 setting)). S pevnou *vazbou* $\Theta—2\Theta$ (vázba $\Theta : 2\Theta$, $\Theta : 2\Theta$ coupling) pak následuje otáčení vzorku i detektoru, t. j. probíhá *pohyb* $\Theta : 2\Theta$ (pohyb $\Theta : 2\Theta$, $\Theta : 2\Theta$ motion), kterým se realizuje *snímání* $\Theta : 2\Theta$ (snímanie $\Theta : 2\Theta$, $\Theta : 2\Theta$ scan) (synonymum *měření (v režimu)* $\Theta : 2\Theta$ (meranie (v režime) $\Theta : 2\Theta$, $\Theta : 2\Theta$ following)). Kromě tohoto tzv. *normálního provozu difraktometru* (normálna převádka difraktometra, normal diffractometer operation) se *současným pohybem vzorku a detektoru* (2 : 1) (súčasný pohyb vzorky a detektoru (2 : 1), simultaneous detector and specimen motion (2 : 1)), vyžaduje řešení některých problémů *difraktometrická měření se stacionárním detektorem* (meranie so stacionárnym detektorom, stationary detector measurement) (a pohyblivým vzorkem) t. j. *pohyb vzorku s nehybným detektorem* (pohyb vzorky s nehybným detektorem, specimen motion with the stationary detector) nebo naopak *měření se stacionárním vzorkem* (meranie so stacionárnou vzorkou, stationary specimen measurement) (a pohyblivým detektorem) t. j. *pohyb detektoru s nehybným vzorkem* (pohyb detektoru s nehybnou vzorkou, detector motion with a stationary specimen).

U všech tří zmíněných způsobů měření můžeme zvolit *spojité snímání* (spojité snímanie, continuous scan) (synonymum *spojitý způsob měření* (spojitý spôsob merania, continuous scanning (mode of measurement))) (nebo *krokové snímání* (krokové snímanie, step scan) (synonymom *krokový způsob měření* (krokový spôsob merania, stepwise scanning)). V obou případech se nastaví *počáteční bod* (začiatočný bod, starting point) úhlového intervalu a úhlová rychlost otáčení vzorku, resp. ramena detektoru. *Koncový bod* (koncevový bod, terminal point, end point) měření je už zpravidla dán předvolbou *velikosti kroku* (veľkosť kroku, step size) a *počtu kroků* (počet kroků, step number). Volba parametrů měření vychází z kompromisu mezi požadovanou intenzitou difraktovaného záření, *rozlišovací schopností* (rozlišovacia schopnosť, resolving power) a *geometrickými a fyzikálními aberacemi* (geometrické a fyzikálne aberácie, geometrical and physical aberrations).

Podstatnou součástí práškového difraktometru je *goniometr* (goniometer, goniometer), který slouží k natáčení vzorku a ramena detektoru do určité úhlové polohy vůči směru primárního svazku a tím současně k měření příslušných úhlů. K vymezení směrů primárního a difraktovaného svazku je opatřen *kolimačním systémem* (kolimačný systém, collimating system) (synonymum *systémem clon* (systém clón, system of slits)). K prvnímu vymezení primárního svazku slouží *vstupní clona* (vstupná clona, input slit, entry slit), kterou často nahrazuje přímo ohnisko rentgenové lampy nebo ohnisko monochromátoru. *Divergenční clona* (divergenčná clona, divergence slit) omezuje horizontální divergenci primárního svazku, čímž vymezuje jeho šířku v místě vzorku a tím i ozářenou plochu vzorku. Některé modernější difraktometry mají *automatickou divergenční clonu* (automatická divergenčná clona, automatic divergence slit) (synonymum *theta-kompenzační clonu* (theta-kompenzačná clona, theta-compensating slit)), jejíž šířka se při měření mění tak, že ozářená plocha vzorku zůstává konstantní. Výšku primárního i difraktovaného svazku často vymezují jednoduché, vyměnitelné *zasouvací clony* (zasúvacia clona, sliding shutter), které v místě mezi divergenční clonou a vzorkem a zejména mezi vzorkem a detektorem současně plní funkci (*proti-*) *rozptylové clony* ((*proti-*)rozptylová clona, (anti-)scatter slit). Na omezení vertikální divergence se do difraktovaného a často i primárního svazku vkládá Sollerova clona. Před detektorem je *clona detektoru* (clona detektoru, receiving slit, detector slit).

Společná osa rotace vzorku a detektoru je *osou goniometru* (os goniometra, goniometer axis). Kružnice, po které se pohybuje clona detektoru, se nazývá *kružnicí goniometru* (kružnica goniometra, goniometer circle) a leží v *rovině goniometru* (rovina goniometra, goniometer plane). Průsečík osy a roviny goniometru je *střed goniometru* (stred goniometra, goniometer centre). Přímka procházející středem goniometru a středem clony detektoru v jeho nulové poloze se nazývá *nulovou čarou* (nulová čiara, zero line) (synonymum *středovou čarou* (stredová čiara, median line)). Vzdálenost osy goniometru od zdroje záření je *poloměr goniometru* (polomer goniometra, goniometer radius, radius of the goniometer circle). Zdrojem záření zde rozumíme vstupní clonu difraktometru nebo ohnisko rtg. lampy či ohnisko monochromátoru, pokud tuto clonu přímo nahrazují. Je-li rovina goniometru horizontální, mluvíme o *horizontálním goniometru* (horizontálny goniometer, horizontal goniometer). Pokud je rovina goniometru vertikální, jedná se o *vertikální goniometr* (vertikálny goniometer, vertical goniometer). Analogicky jako u práškových komůrek rozumíme horizontální divergenci rozbíhavost svazku v rovině goniometru a vertikální divergenci rozbíhavost svazku ve směru osy goniometru.

U *Braggova—Brentanova goniometru* (Bragg—Brentanov goniometer, Bragg—Brentano goniometer) je vzdálenost clony detektoru od osy goniometru stejná jako osy goniometru od zdroje záření. Navíc jsou během měření obě tyto vzdálenosti konstantní, zatím co poloměr fokusační kružnice se s difrakčním úhlem mění a její střed se posouvá tak, aby se povrch vzorků stále dotýkal fokusační kružnice. U *Seemannova—Bohlinova goniometru* (Seemann—Bohlinov goniometer, Seemann—Bohlin goniometer) jsou zdroj záření a vzorek stacionárně umístěny na fokusační kružnici, jejíž poloměr se nemění a střed zůstává na místě. Pohybuje se tedy jen detektor a to tak, aby clona detektoru byla stále na fokusační kružnici, takže vzdálenost detektoru od vzorku se mění. Braggův—Brentanův goniometr se někdy označuje jako *středový goniometr* (stredový goniometer, central goniometer), zatímco méně rozšířený Seemannův—Bohlinův goniometr jako *tečný goniometr* (tangenciálny goniometer, tangent(ial) goniometer), ale

toto označení se příliš neujalo. Braggova—Brentanova fokusace se uplatňuje také u *theta-theta goniometru* (theta-theta goniometer, theta-theta goniometer), ve kterém se detektor i zdroj záření pohybují současně proti sobě nad horizontálním povrchem stacionárního vzorku. Tento goniometr je zvláště vhodný na sledování difrakce kapalin.

U všech zatím zmíněných goniometrů se jednalo o uspořádání na odraz. U tenkých vzorků je možné použít uspořádání na průchod a to v několika modifikacích. Především se jedná o *symetrické uspořádání na průchod* (symetrické usporiadanie na priechod, symmetrical transmission arrangement), které je protějškem *symetrického uspořádání na odraz* (symetrické usporiadanie na odraz, symmetrical reflection arrangement), obvyklého v goniometrech s Braggovou—Brentanovou fokusací. Někdy se používá *uspořádání na průchod s kolmým dopadem* (usporiadanie na priechod s kolmým dopadom, normal (-beam) transmission arrangement) primárního svazku na vzorek. Při zmíněných uspořádáních na průchod nedochází v goniometru k fokusaci difraktovaného svazku, takže se užívají široké clony detektoru. Aby tím příliš neklesala rozlišovací schopnost, vkládá se před detektor další Sollerova clona, tentokrát k omezení horizontální divergence difraktovaného svazku. V případě úzkého čarového zdroje záření má tato clona jednotlivé lamely vůči sobě lehce skloněny v míře odpovídající horizontální divergenci primárního svazku, která teď může být relativně velká, takže lze dosáhnout dostatečně velké měřené intenzity. Pokud se ke zvýšení intenzit použije široký zdroj záření, vkládají se do difraktovaného i primárního svazku k omezení jejich horizontální divergence obvyklé Sollerovy clony s rovnoběžnými lamelami. Mluvíme pak o *uspořádání na průchod s rovnoběžným svazkem* (usporiadanie na priechod s rovnobežným svazkom, parallel-beam transmission arrangement). V rtg. tenzometrii se používá *uspořádání na odraz s rovnoběžným svazkem* (usporiadanie na odraz s rovnobežným svazkom, parallel beam reflection arrangement).

Z *přídavných zařízení* (přídavné zariadenie, (additional) attachment) se k práškovým difraktometrům často dodává *goniometrická hlavice* (goniometrická hlavica, goniometric head), někdy *texturní nástavec* (texturný nástavec, texture attachment) nebo *vysokoteplotní nástavec* (vysokoteplotný nástavec, high-temperature attachment) případně *nizkoteplotní nástavec* (nizkoteplotný nástavec, low-temperature attachment) či *vakuový nástavec* (vákuový nástavec, vacuum attachment). Obvykle se dodávají různé pomůcky pro justování difraktometru a *upevnění vzorku* (upevnenie vzorky, sample mounting). Někdy je vhodný automatický *měníč vzorků* (měníč vzoriek, sample changer). U hrubozrnných materiálů je často nutný *rotačný držák vzorku* (rotačný držiak vzorky, sample spinner), který umožňuje otáčení vzorku v rovině jeho povrchu. Důležitý je *monochromátor primárního svazku* (monochromátor primárneho svazku, primary beam monochromator) (synonymum *primární monochromátor* (primárny monochromátor, primary monochromator)) a případně i *monochromátor difraktovaného svazku* (monochromátor difraktovaného svazku, diffracted beam monochromator) (synonymum *sekundární monochromátor* (sekundárny monochromátor, secondary monochromator)).

4. ZÁVĚREČNÉ POZNÁMKY

Příprava vzorku (příprava vzorky, sample preparation, specimen preparation) vyžaduje věnovat pozornost následujícím faktorům: *velikosti částic* (velikost částic, particle size), *tloušťce vzorku* (hrúbka vzorky, sample thickness), *přednostní orientaci*

(prednostná orientácia, preferred orientation), *deformaci a tvárění za studena* (deformácia a tvárnenie za studena, strain and cold-working) a *rovinnosti povrchu* (rovinnosť povrchu, surface flatness, surface planarity). U kompaktních polykrystalů lze někdy přípravu vzorku omezit na běžné způsoby opracování k dosažení vhodné velikosti a tvaru vzorku. Postup přípravy je obvykle složitější u práškových vzorků, kde je někdy nutné drcením, mletím nebo pilováním z kompaktního materiálu dosáhnout vhodné velikosti částic a pak případně *žiháním* (žihanie, annealing) odstranit *vnitřní napětí* (vnútorné napätie, internal stress). Pro expozici v Debyeově—Scherrerově komůrce se obvykle částice prášku lepí na vlákno nebo pěchují do *kapiláry* (kapilára, capillary). Práškové vzorky s rozměrným povrchem se připravují lisováním prášku do dutiny v (lisovací) matici. Zvláště u prášků s velkými částicemi je někdy nutné použít vhodné pojivo. Lisováním směsi zkoumaného prášku s pojivem do vhodné (lisovací) formy lze připravit vzorky požadovaného tvaru. Často je výhodné umísťovat zkoumaný materiál přímo do držáku vzorku *plněním ze zadu* (plnenie zozadu, back-loading), nebo *plněním z boku* (plnenie z boku, side-loading).

Pokud nás zajímají pouze *polohy difrakčních linií* (poloha difrakčnej línie, diffraction line position), vyhodnocujeme difrakční snímek na *prosvětlovacím stolku* (presvetlovací pult, portable illuminator) nebo na *komparátoru* (komparátor, (X-ray film) comparator). Měřením *hustoty zčernání* (hustota zčernania, density of blackening) na *(mikro-)fotometru* ((mikro-)fotometer, (micro-)photometer) podél difrakčního snímku získáme *fotometrický záznam* (fotometrický záznam, photometer record(ing)). Podobně ze zapisovače nebo tiskárny u difraktometru dostaneme *difraktometrický záznam* (difraktometrický záznam, diffractometer record(ing)). Zmíněné fotometrické nebo difraktometrické záznamy, tj. *difrakční záznamy* (difrakčný záznam, diffraction record, record of diffraction pattern) mohou být analogové nebo digitální.

KOMENTÁŘ

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] *Debyeovu—Scherrerovu* 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*). Slovo „spojitá“ a „nespojité“ (u difrakční linie) doporučujeme užívat spíše jako součást matematických termínů, např. *spojité zobrazení*, *nespojité funkce* a v souladu s angličtinou mluvit o *skvrnitých* difrakčních 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. Slovo *náhodný* chápeme jako součást různých termínů, např. *náhodná orientace*, *náhodné číslo*, *náhodný proces* apod. Jeho zahrnutím mezi termíny se snažíme vyloučit méně vhodné „nahodilý“ nebo nevhodné „randomní“. Termín *nefokusační uspořádání* upřednostňujeme před *uspořádáním bez fokuse* jednak z gramatických důvodů (odborný termín má být podstatné jméno, před kterým je případně přepřesňující přídavné jméno), dále z důvodů symetrie (fokusační — nefokusační), ale hlavně po obsahové stránce nám připadá slovo *nefokusační* výstižnější (ve zmíněném uspořádání se paprsky nefokusují, nedochází k fokusaci

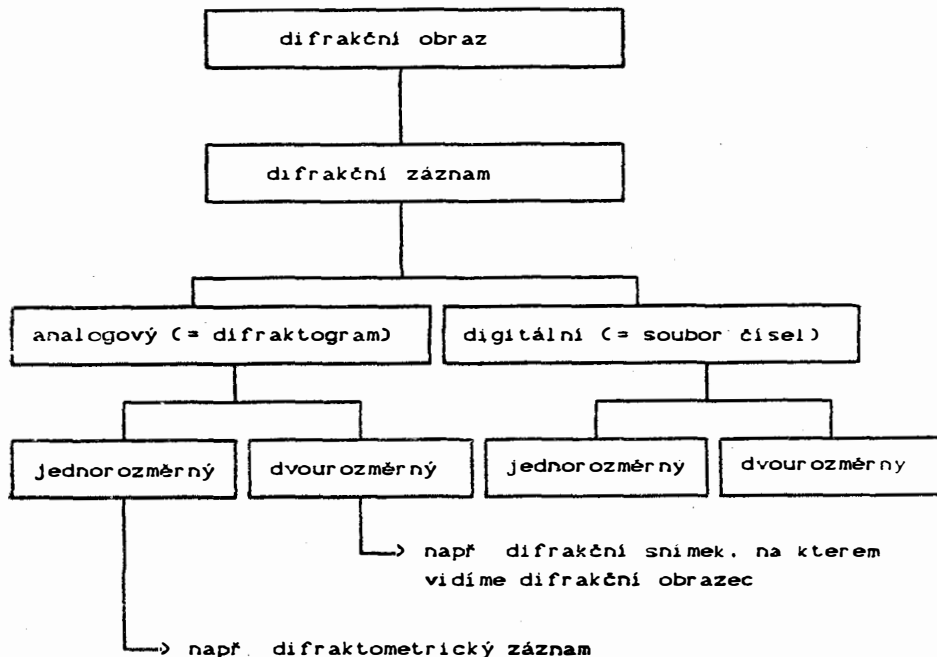
a nejedná se tedy o to, že se fokusace ztratí a dojde k stavu bez fokusace). U termínu *uspořádání na odraz* jsme nuceni respektovat skutečnost, že se u nás už dlouho běžně užívá [2, 3]. Jeho někdejší synonymum — *metoda zpětného paprsku* — [4] se neujalo a proto navrhuje věcně správnější termín *metoda zpětné difrakce*, avšak opět jen jako synonymum. Důvodem je obecné rozšíření a ustálení termínů *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 od 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 zvážít 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* a *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 používáme termíny *úhel (natočení) vzorku* a *úhel (nastavení) detektoru*, které popisují primární, obecné pojmy.

Z předchozího textu plyne, že jako synonyma uvádíme termíny, které by měly spíše vymizet. V případě *snímání* (synonymum *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 asi 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 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 reciprokém prostoru. *Difrakční záznam* je výsledek registrace difrakčního obrazu (obr. 1). Obě formy difrakčního záznamu, tj. analogová (= *difraktogram*) 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.



Obr. 1. Vztah mezi pojmy difrakční obraz a difrakční záznam.

Literatúra

- [1] Klug, H. P., Alexander, L. E.: *X-Ray Diffraction Procedures for Polycrystalline and Amorphous Materials*, J. Wiley, New York 1974.
- [2] Kraus, I.: *Úvod do strukturální rentgenografie*, Academia, Praha, 1985.
- [3] Barret, C. S.: *Struktura kovů — Krystalografické metody, principy a údaje*. Nakladatelství ČSAV, Praha 1959.
- [4] Kochanovská, A.: *Zkoušení jemné struktury materiálů röntgenovými paprsky*, ESČ, Praha 1946.
- [5] Česko-slovenský slovník (ed. Horák, G.), Veda, Bratislava, 1981.
- [6] Krátky slovník slovenského jazyka (ed. Kačala, J., Písarčíková M.), Veda, Bratislava, 1987.

Doteraz publikované části názvosloví:

Đurovič, S., Gruber, B., Fejdl, P., Žák, L.: *Mineralia slovaca* 21, 369 (1989) (Kryštál, kryštálová štruktúra, mrležkf).

Fiala, J., Smrčok, L.: *Silikáty* 32, 189 (1988) (Fázová analýza kvalitatívni a kvantitatívni).