

## Z á p i s

z 89. schůzky Rozhovorů o aktuálních otázkách ve strukturní rentgenografii.

Schůzka se konala dne 3. dubna 1968 v budově Ústřední rady ČSVTS, Praha 1 - Staré Město, Široká 5, I. patro.

- P r o g r a m :
- 1) Přednáška prom.fys.M.Lázníčky CSc. (Ústav fyziky pevných látek ČSAV, Praha)  
"Studium povrchu železných monokrystalů metodou difrakce pomalých elektronů"
  - 2) Přednáška Doc.Ing. S. Ďuroviče CSc. (Ústav anorganické chemie SAV, Bratislava)  
"Kryštalová štruktúra gama- $\text{Hg}_3\text{S}_2\text{Cl}_2$ "
  - 3) Různé.

ad 1)

Přednášející podrobně uvedl výsledky svého studia železných whiskerů. Metodou difrakce pomalých elektronů studoval plochy (100) a (110) železných whiskerů. Použil komerční zařízení firmy Varian s některými vlastními doplňky (ohřev vzorků, napouštění čistých plynů).

V obou případech, tj. na ploše Fe(100) i Fe(110) studoval strukturu povrchové vrstvy v různých stadiích preparace vzorků. Experimentální výsledky, které získal v případě nečištěných povrchů, tj. takových, které byly po umístění do difrakční komory pouze zahřívány v podmínkách ultravysokého vakua na teploty nejvýše do 850 °C, podrobně diskutoval v případě plochy Fe(100).

Působení kyslíku na nečištěné povrchy vedlo ke složitým difraktoqramům, jejichž interpretace nebyla vzhledem k současnému stavu teorie difrakce pomalých elektronů možná.

Metodou bombardování argonovými ionty připravil čisté povrchy Fe(100) a Fe(110) a ukázal, že struktura povrchové vrstvy odpovídá struktuře v objemu monokrystalů.

Na vyčištěných površích zkoumal vliv působení kyslíku, vodíku a dusíku. Zatím co působení vodíku a dusíku nevedlo ke změnám difraktoqramů, vznikaly v důsledku působení kyslíku nadstruktury různých typů, podle množství napouštěného kyslíku, délky působení a teploty, na niž byl vzorek zahříván. Jednotlivé struktury interpretoval na základě

kinematické teorie a navrhl modely uspořádání rozptylových center v povrchových vrstvách.

Diskuse k této přednášce byla jen malá; týkala se interpretace difraktogramu, příčin vzniku difúzních pásů a sledování parciálního tlaku kyslíku při pokusech.

ad 2)

Přednášající popísal postup práce a výsledky riešenia štruktúry gama- $\text{Hg}_3\text{S}_2\text{Cl}_2$ , ktorého rtg. difrakčný obraz obsahuje vedľa seba ostré stopy a difúzne pásy s maximami. Zatiaľ, čo rozdelenie intenzít ostrých stôp je konštantné, rozdelenie intenzít difúzných maxim sa mení od kryštálu ku kryštálu. Na základe tejto skutočnosti sa vyslovila domienka, že ide o OD-štruktúru /v zmysle definície Dornberger-Schiff-ovej/ so súmernosťou famílie OD-grupoidov

$$\begin{array}{l} A(2) \quad m \quad m \\ \{(b_{1/2})^2 \quad 2_{1/2} \quad 2\} \\ \{(b_{1/2})^2 \quad 2_{1/2} \quad 2\} \end{array}$$

ktorá sa potvrdila v priebehu ďalšej práce. Superpozičná štruktúra sa vyriešila použitím podobnosti rozdelenia intenzít ostrých stôp s  $\hat{h} + \hat{k} = 2n$  s difrakčným obrazom alfa- $\text{Hg}_3\text{S}_2\text{Cl}_2$ . Rozbor Fourierovej transformácie ukázal ďalej, že na vyriešenie štruktúrnej schémy možno výhodne využiť intenzity difúzných maxim v tvare  $|\hat{A}(hkl)|^2 = |F(hkl)|^2 + |F(hkl)|^2$ , takže zdvojnásobnosť kryštálov priaznivo ovplyvnila ďalší postup práce. Konečný R-faktor superpozičnej štruktúry je 11%, pre difúzne maximá 21%. Získaný model štruktúry súhlasí s pozorovaným difrakčným obrazom a niektorými chemickými a fyzikálnymi vlastnosťami.

V závere sa prednášajúci zmienil o niektorých problémoch použitia metódy najmenších štvorcov na spresňovanie OD-štruktúr a vyslovil vďaka kanadskému National Research Councilu, ktorý umožnil túto prácu udeľením dvojročného štipendia na univerzite McGill v Montreali.

Diskuse k tejto veľmi zaujímavej a živě podanej prednášce nebyla prakticky žiadna, patrne proto, že nikdo z prítomných se OD štruktúrami prakticky nezabýval.

Ad 3)

Účastníci Rozhovorů byli upozorněni, že zbyl poměrně velký počet dosud nerozprodáných Sborníků z Konference o rtg. mikroanalýze a rentgenspektrální analýze a dále, že kurs "Použití samočinných počítačů ve výzkumu struktury ionizačním zářením" se překládá na konec září nebo začátek října, ježto se nepodařilo zajistit na duben ani květen vhodné umístění.

Zapsali: M. Láznička  
S. Ďurovič  
A. Kochanovská

V Praze dne 10. dubna 1968