

## Kryštalová štruktúra kysličníka telúričitého

BLAHOŠLAV STEHLÍK a LADISLAV BALÁK

(Pokračovanie.)

### III. Priestorová grupa.

Dosadením číselných hodnôt do (10) za použitia (4ac) dostaneme pre odrazy žiarenia  $CuK\alpha_1$  vzťah

$$\sin^2 \vartheta = 0,02570 (h^2 + k^2) + 0,01024 l^2 \quad (12)$$

Slabšie odrazy žiarenia  $CuK\alpha_2$  s vlnovou dĺžkou  $\lambda = 1,541 \text{ \AA}$  splývajú pri menších uhloch  $\vartheta$  s čiarami  $\alpha_1$ . Pri veľkých uhloch sú na obr. 1 a 2 zrejme ako vonkajšie časti dubletov. Odrazy žiarenia  $CuK\beta$ , ktoré bolo zoslabené použitím miklového filtra, ležia na samostatných vrstevniciach, ktoré sú bližšie rovníku ako vrstevnice žiarenia  $CuK\alpha_1$ , pretože dĺžka ich vlnenia je menšia:  $\lambda = 1,3894 \text{ \AA}$ . Na rovníku sú však odrazy  $\alpha$  i  $\beta$  pomiešané. Odrazy  $\beta$  poznáme tu porovnávaním so silnejšími odrazmi  $\alpha$  podľa úmery  $\sin^2 \vartheta\beta : \sin^2 \vartheta\alpha = \lambda^2\beta : \lambda^2\alpha = 1,3894^2 : 1,5374^2 = 0,8166 : 1$ . (13)

V tab. IV. a VII je meranie odrazov na rovníkoch spracované takto: Vedľa bežného čísla odrazu je uvedená vzdialenosť  $s$ . Príslušná hodnota  $\sin^2 \vartheta$ , vypočítaná pomocou (6), je potom porovnaná s hodnotou vypočítanou podľa (12) a prípadne (13) dosadením indexov odrazu, ktoré sú uvedené v ďalšom stĺpci.

Meranie odrazov na vrstevniciach vyžaduje spracovanie složitejšie. Analogickým spôsobom, ako boly na rovníku počítané uhly  $\vartheta$ , vypočítajú sa na vrstevnici uhly  $\varphi$  podľa vzťahu Uhol  $\varphi$  treba potom prepočítať na uhol odrazu  $\vartheta$ . Odrazený lúč  $p$  (obr. 7) sviera s primárnym lúčom  $q$  uhol  $2\vartheta$  a s rovinou rovníka uhol  $\mu$ . Jeho

$$d/R = \text{arc } 4 \varphi$$

kolmý priemet na rovinu rovníka, označený  $p'$ , sviera s primárnym lúčom uhol  $\varphi$ . Keď z bodu  $A$ , t. j. z priesečiku primárneho lúča s filmom, spustíme kolmicu na  $p$  do bodu  $B$  a na  $p'$  do bodu  $C$ , je spojnica  $BC$  kolmá k  $p$ . Potom

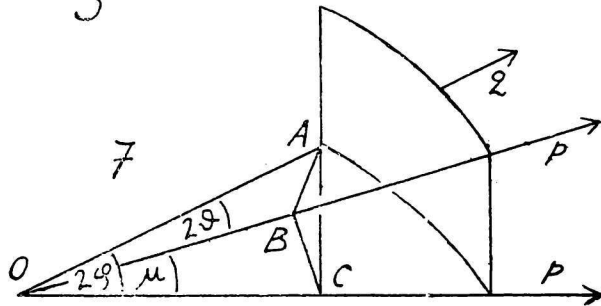
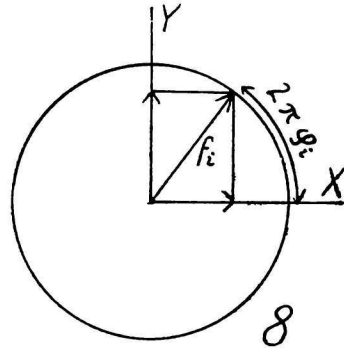
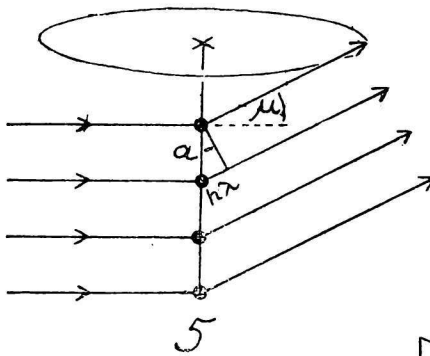
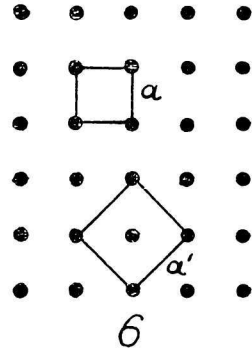
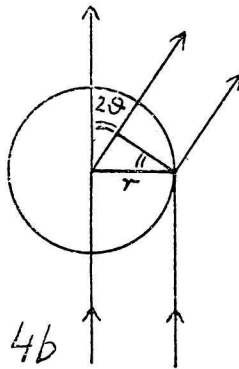
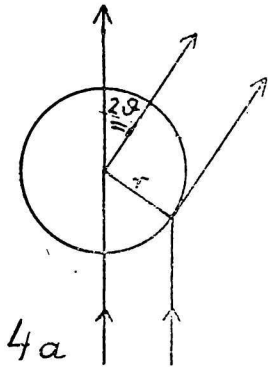
$$\cos 2\vartheta = \frac{\overline{OB}}{\overline{OA}} = \frac{\overline{OC} \cos \mu}{R} = \frac{R \cos 2\varphi \cos \mu}{R} = \cos 2\varphi \cos \mu.$$

Dosadením

$\cos 2\vartheta = 1 - 2 \sin^2 \vartheta$ ,  $\cos 2\varphi = 1 - 2 \sin^2 \varphi$   
dostaneme tvar vhodnejší pre výpočty:

$$\sin^2 \vartheta = \sin^2 \varphi + (1 - \cos \mu) \left( \frac{1}{2} - \sin^2 \varphi \right).$$

Hodnotu  $\sin^2 \vartheta$  vypočítame, keď hodnotu  $\sin^2 \varphi$  zväčšíme o korekciu  
 $\delta = m (0,500 - \sin^2 \varphi)$ , (15)  
 kde s ohľadom na (7)



$$m = 1 - \cos \mu = 1 - \frac{1}{\sqrt{1 - \operatorname{tg}^2 \mu}} = 1 - \frac{R}{\sqrt{R^2 - p^2}}. \quad (16)$$

V tab. V, VI, VIII — IX sú z nameraných vzdialeností s vypočítané vopred hodnoty  $\sin^2 \vartheta$ . V ďalšom stĺpci sú uvedené korek.

cie  $\delta$ . Pre celú vrstevnicu platiace hodnoty  $m$  sú uvedené v ostatnom stĺpci tab. II.

TABULKA IV.  
Os  $a$ , rovník.

Č.	$s$ $cm$	$10^3 \sin^2 \vartheta$		$hkl$	$I$		Č.	$s$ $cm$	$10^3 \sin^2 \vartheta$		$hkl$	$I$	
		poz.	poč.						poz.	poč.			
1	2,67	36	36	011	5	w	25	10,98	504	503	043	32	—m
2	3,30	55	55	012 $\beta$		vw	26	11,38	533	535	051 $\beta$		vw
3	3,66	68	67	012	166	s				537	008 $\beta$		
4	4,10	84	84	020 $\beta$		vw	27	11,52	543	547	045 $\beta$		vw
5	4,56	104	103	020	52	m	28	11,73	558	558	018 $\beta$		w
6	4,79	114	113	021	10	w				561	052 $\beta$		
7	5,23	135	134	004 $\beta$		w	29	11,96	574	575	044	116	s
8	5,81	164	164	004	132	+ m	30	12,32	600	600	036	158	s
9	6,40	197	195	023	161	w				605	027	161	
			197	031 $\beta$			31	12,58	618	622	028 $\beta$		w
10	6,77	219	218	024 $\beta$		w	32	13,09	653	653	051	60	+ m
11	6,85	223	224	032 $\beta$		—m				655	008	98	
12	7,16	242	241	031	28	—m	33	13,27	666	667	045	50	—m
13	7,57	268	267	024	134	s	34	13,51	682	681	(018)	0	s
14	7,65	273	272	032	188	vs				684	052	52	
15	7,80	283	282	015	10	vw	35	14,30	733	733	037	38	s
16	8,42	324	323	033	18	w				735	053	66	
17	8,59	337	337	040 $\beta$		vw	36	14,70	758	758	028	170	vs
18	8,72	344	345	041 $\beta$		vw	37	15,85	825	828	056 $\beta$		w
19	8,95	360	359	025	7	w	38	16,40	854	855	019	8	w
20	9,47	396	395	(034)	0	s	39	16,66	867	867	039 $\beta$		w
			395	016	184		40	17,06	886	886	(038)	0	w
21	9,68	411	411	020	59	+ m				890	064 $\beta$		
22	9,82	421	421	041	48	m	41	17,30	896	899	055	68	+ m
23	10,48	468	472	(026)	0	vw	42	17,65	911	913	047	62	m
			472	044 $\beta$			43	18,00	925	925	060	20	—m
24	10,76	488	487	035	34	—m	44	18,20	933	932	029	12	s
			490	036 $\beta$						935	061	92	

Napr. pre prvú vrstevnicu pri otáčaní kryštalu okolo osi  $a$  platí podľa (16) hodnota

$$m = 1 - \frac{3,48}{\sqrt{3,48^2 + 1,18^2}} = 0,0530.$$

Korekcia pre  $\sin^2 \varphi = 0,011$  u prvej čiary v tab. V. je podľa (15)  
 $\delta = 0,0530 (0,500 - 0,011) = 0,026.$

V ďalších dvoch stĺpcoch tabuliek sú hodnoty  
 $\sin^2 \vartheta = \sin^2 + \delta$

porovnané s hodnotami vypočítanými podľa (12) dosadením indexov odrazu  $hkl$  uvedených v nasledujúcom stĺpci.

V danom príklade

$$\sin^2 \vartheta = 0,011 + 0,026 = 0,037$$

súhlasí uspokojive s hodnotou

$$\sin^2 \vartheta = 0,0257 + 0,0102 = 0,036.$$

Vo štvorcovej sústave sa môžu vyskytovať tieto *Bravaisove* typy mriežok: u primitívnej sa príde do totožnej polohy iba posunutím o dĺžku ktorejkoľvek hrany, u spodovej centrovanej aj

TABULKA V.  
Os a, 1. vrstovnica.

Č.	s cm	1000X				hkl	I	
		sin <sup>2</sup> φ	δ	sin <sup>2</sup> θ				
				poz.	peč.			
1	1,48	11	26	37	36	101	3	vw
2	2,28	27	25	52	51	110	94	m
3	2,74	38	24	62	61	111	5	w
4	2,90	43	24	67	67	102	83	m
5	3,73	70	23	93	92	112	4	vw
6	4,66	108	21	129	129	120	2	vw
7	4,90	118	20	138	193	121	6	w
8	5,00	124	20	144	143	113	8	w
9	5,58	153	18	171	170	122	184	s
10	6,46	201	16	217	215	114	188	s
11	6,56	206	16	222	221	123	12	w
12	7,18	244	14	258	257	130	62	w
13	7,36	255	13	268	267	131	21	-m
14	7,62	271	12	283	282	105	5	vw
15	7,84	285	11	296	{ 293	124	1	vw
					{ 298	132	3	
16	8,02	297	11	308	307	115	3	vw
17	8,68	341	8	349	349	133	27	m
18	9,22	378	6	384	385	125	21	w
19	9,36	389	6	395	395	106	92	m
20	9,76	417	4	421	{ 420	116	1	s
					{ 421	134	228	
21	9,97	432	4	436	437	140	7	vw
22	10,14	443	3	446	447	141	53	m
23	10,60	477	1	478	478	142	95	+ m
24	10,88	497	0	497	498	126	172	s
25	11,13	514	-1	513	513	135	31	-m
26	11,34	530	-2	528	{ 528	(107)	0	m
					{ 529	143	54	
27	12,43	607	-6	601	601	144	2	vw
28	12,88	638	-7	631	{ 626	136	2	w
					{ 631	127	22	
29	13,44	677	-9	668	668	150	38	m
30	13,60	687	-9	678	678	151	72	+ m
31	13,82	702	-10	792	693	145	42	m
32	14,06	718	-11	707	{ 706	118	184	s
					{ 709	152	5	
33	14,94	773	-14	759	{ 759	137	20	+ m
					{ 760	153	68	
34	15,78	821	-17	804	806	146	104	+ m
35	16,30	849	-17	832	832	154	72	+ m
36	18,24	934	-23	911	912	138	134	s
37	18,58	946	-24	922	924	155	55	+ m
38	19,10	961	-24	937	939	147	42	+ m
39	20,16	985	-26	959	{ 958	129	22	s
					{ 961	161	94	

T a b u l k a VI  
Os a, 2. vrstevnica

Č.	s cm	1000X				hkl	I	
		sin <sup>2</sup> φ	δ	sin <sup>2</sup> θ				
				poz.	poč.			
1	1,72	15	113	128	129	210	2	vw
2	2,38	29	110	139	139	211	6	w
3	3,37	70	101	171	170	212	184	vs
4	4,58	104	93	197	195	203	8	w
5	4,85	116	90	206	206	220	92	s
6	5,14	130	86	216	216	221	10	w
7	5,28	137	85	222	221	213	12	w
8	5,93	170	77	247	247	222	2	vw
9	6,40	197	71	268	267	204	67	m
10	7,08	237	62	299	298	223	10	w
11	8,03	298	47	345	344	231	22	w
12	8,35	316	42	358	359	205	4	vw
13	8,52	330	40	370	370	224	176	s
14	8,64	339	38	377	375	232	90	s
15	8,80	349	35	384	385	215	21	w
16	9,58	404	23	427	426	233	40	m
17	10,22	450	12	462	462	225	29	w
18	10,86	495	1	496	{ 498 498 }	{ 234 216 }	{ 8 172 }	s
19	11,14	516	—4	512	514	240	49	m
20	11,34	530	—7	523	524	241	40	m
21	11,90	570	—16	554	555	242	10	vw
22	12,54	616	—27	589	590	235	37	—m
23	12,84	636	—31	605	{ 605 606 }	{ 207 243 }	{ 8 33 }	m
24	13,32	669	—40	629	631	217	22	w
25	14,30	733	—55	657	678	244	98	+m
26	14,84	767	—65	702	{ 703 708 }	{ 236 227 }	{ 122 37 }	s
27	15,80	823	—75	748	745	250	9	vw
28	16,00	833	—78	755	{ 755 758 }	{ 251 208 }	{ 45 85 }	s
29	16,32	850	—82	768	770	245	38	—m
30	16,78	873	—88	785	{ 784 786 }	{ 218 252 }	{ 0 54 }	+m
31	18,36	938	—102	836	{ 836 837 }	{ 237 253 }	{ 34 46 }	+m
32	19,46	970	—110	860	361	228	148	s

Tabuľka VII.  
Os c, rovník.

Č.	s cm	10 <sup>3</sup> sin <sup>2</sup> ϑ		hkl	I'	Č.	s cm	10 <sup>3</sup> sin <sup>3</sup> ϑ		hkl	I'			
		poz.	poč.					poz.	poč.					
1	2,90	43	43	110β	vw	16	11 12	514	514	420	98	s		
2	2,20	52	51	110	94	s	17	11,54	544	546	510β	vw		
3	4,10	84	84	200β	vw	18	12 44	608	609	520β	vw			
4	4,56	104	104	200	52	+m	19	12 93	642 {	643	430	26	w	
5	5,10	128	129	210	4	vw	20	13,30	668 {	643	(500)	0	}	s
6	5,88	168	169	220β	w	668				510	76			
7	7,55	206	206	220	92	s	21	13,97	712	714	530β	vw		
8	6,60	209	210	310β	w	22	14 47	745	745	520	18	w		
9	7,40	257	257	150	124	vs	23	14,62	756	756	600β	vw		
10	8,58	334	{ 334	320	0	vw	24	15 81	823	822	440	22	w	
11	9 21	378	379	330β	vw	25	16 15	841	840	620β	vw			
												336	400β	}
12	9,68	411	411	400	59	m	26	16,55	862	862	540β			
13	9,80	420	420	420β	w	27	16 80	874	874	530	35	m		
14	10,05	437	437	410	14	vw	28	18 00	925	925	600	20	w	
15	10,40	462	463	330	40	+m								

Tabuľka VIII.  
Os c, l. vrstevnica

Č.	s cm	1000×				hkl	I'		
		sin <sup>2</sup> ϑ	δ	sin <sup>2</sup> ϑ					
				poz.	poč.				
1	2,28	27	10	37	36	101	3	vw	
2	3,23	53	9	62	61	111	3		
3	4 61	106	8	114	113	201	5	vw	
4	5,16	131	8	139	139	211	6	vw	
5	6,62	210	6	216	216	221	6	vw	
6	7 05	236	5	241	241	301	14	w	
7	7,48	262	5	267	267	311	21	w	
8	8,68	341	3	344	344	321	22	w	
9	9 80	420	2	422	421	401	24	w	
10	10,17	446	1	447	447	411	53	w	
11	10,50	472	1	473	473	331	45	w	
12	11,24	523	0	523	524	521	40	w	
13	13,10	654	-3	651	{ 653	431	44	}	m
					{ 653	501	30		
14	13,48	680	-5	676	678	511	72	m	
15	14,70	759	-5	754	755	521	43	m	
16	16 08	838	-7	831	832	441	35	-m	
17	17,14	890	-8	882	884	531	52	m	
18	18,50	943	-9	934	935	601	46	-m	
19	19 38	968	-10	959	961	611	94	s	

Tabuľka IX.  
Os c, 2. vrstevnica.

Č.	s cm	1000X				hkl	I'	
		sin <sup>2</sup> φ	δ	sin <sup>2</sup> ψ				
				poz.	poč.			
1	2,29	27	40	67	67	102	83	s
2	5,30	138	31	169	170	212	184	s
3	6,84	223	24	247	247	222	1	vw
4	7,30	251	21	272	272	302	64	+m
5	7,74	279	20	299	298	312	3	vw
6	9,00	363	10	373	375	322	90	+m
7	10,58	475	2	477	478	412	95	+m
8	10,98	504	0	504	504	332	9	vw
9	11,73	553	-5	553	555	422	10	vw
10	13,76	702	-16	686	{ 684	{ 502	{ 26	{ s
					{ 684	{ 432	{ 90	{ }
11	14,20	727	-19	708	709	512	5	vw
12	15,60	811	-27	784	786	522	54	m
13	17,33	898	-34	864	863	442	21	w
14	18,82	954	-39	915	915	532	50	-m

posunutím o pol uhlopriečky spodovej plochy, u plošne centro-  
vanej posunutím o pol uhlopriečky ktorejkoľvek steny a u prie-  
storove centrovanej posunutím o pol uhlopriečky priestorovej  
vzorky. Pre rozhodnutie medzi týmito typmi postačí poukázať napr.  
na jednoznačne určený odraz 012. U spodove centrovanej mriežky  
sa vyskytujú odrazy iba s párnym súčtom prvých dvoch indexov.  
Súčet  $0 + 1 = 1$  je však nepárny. U priestorove centrovanej  
mriežky nastávajú odrazy iba s párnym súčtom všetkých indexov.  
Súčet  $0 + 1 + 2 = 3$  je však nepárny. Plošne centovaná mriežka  
dáva iba také odrazy, u ktorých všetky tri indexy sú alebo párne  
alebo nepárne. Vedľa nepárnej 1 máme však v danom príklade  
párne 0 a 2. Zostáva teda jediná možnosť: *Priestorová mriežka*  
*TeO<sub>2</sub> je primitívna.*

Okrem náhodne vyhaslých čiar, ktoré sú uvedené v l. stĺpci  
tab. XII, chýbajú dve význačné skupiny čiar:

1) V tab. VII. chýbajú 100 a 300. Pretože odraz č. 19 sa dá  
vyložiť ako 430, možno i 500 považovať za vyhaslé. To potvrdzuje  
tab. IV, kde chýbajú 010, 030 a 050. Z odrazov h00 alebo 0k0 sa vy-  
skytujú iba tie, u ktorých h alebo k je párne.

2) V tab. VII. pozorujeme síce odrazy 004 a 008, nie však  
001, 002, 003, 005, 006, 007, ani 009. Z odrazov 00l sa vyskytujú  
iba tie, u ktorých l je násobkom štyroch.

Keď dva atomy majú parametre (súradnice vyjadrené zlomkami  
hrán priestorovej vzorky)  $x_1, y_1, z_1$  a  $x_2, y_2, z_2$ , má vlnenie, ktoré z nich vy-  
chádza fázy

$$\varphi_1 = hx_1 + ky_1 + lz_1,$$

$$\varphi_2 = hx_2 + ky_2 + lz_2$$

Pri odraze h00 je fázový rozdiel

$$\varphi_1 - \varphi_2 = h(x_1 - x_2).$$

Vyhasnutie odrazu s nepárny  $h$  nastane interferenciou, keď

$$x_1 - x_2 = \frac{1}{2}.$$

Pretože vyhasnutie nastáva iba pri  $k = l = 0$ , majú obidva atomy parametre  $y$  i  $z$  rozdielne. Prvý atom prejde do polohy druhého, keď mriežku posunieme o  $a$  a otočíme o  $180^\circ$  okolo osi rovnobežnej s  $a$ . Podobná úvaha platí pre odrazy  $0k0$ .

*Mriežka  $\text{TeO}_2$  má dvojskrutné skrutkové osi vo smere osí vedľajších.*

Pri odraze  $00l$  má vlnenie, ktoré vychádza zo štyroch atomov, fázy

$$\varphi_i = lz_i.$$

kde  $i = 1, 2, 3, 4$ . Pretože sa interferenciou zosiluje iba vtedy, keď  $l$  je násobkom 4, sú rozdiely medzi parametrami  $z_i$  rovné  $\frac{1}{4}$ . Tretie parametre štyroch atomov sú

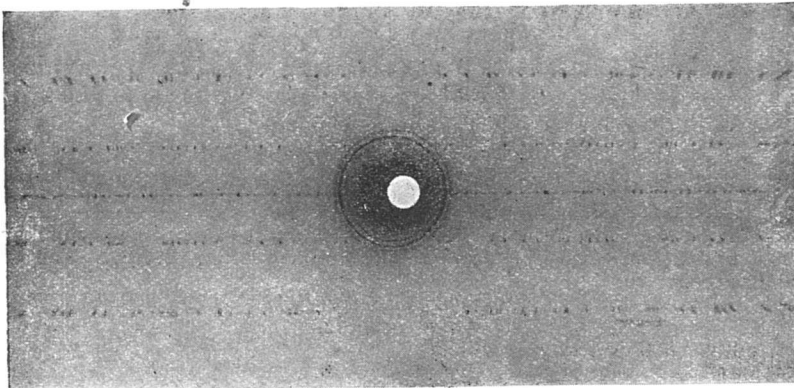
$$z, z + \frac{1}{4}, z + \frac{1}{2}, z + \frac{3}{4}.$$

Prvé dva parametre obidvoch atomov sú rozdielne, pretože úvaha o interftrencii platí len pre  $h = k = 0$ . Prvý atom prejde do poloh atomov ďalších, keď mriežku postupne posunujeme o  $\frac{1}{4}c$  a súčasne otáčame o  $90^\circ$  okolo osi rovnobežnej s osou hlavnou.

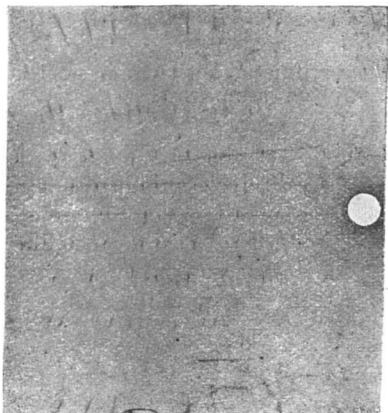
*Mriežka  $\text{TeO}_2$  má štvorskrutnú skrutkovú os vo smere osi hlavnej.*

Primitívna mriežka so štvorskrutnou skrutkovou osou vo smere osi hlavnej a dvojskrutnou skrutkovou osou vo smere osí vedľajších je slovným vyjadrením skráteného Hermann-Mauguinovho symbolu priestorovej grupy  $P4_12_1$ . Kysličník telúricitý patrí do priestorovej grupy označovanej úplným symbolom Hermann-Mauguinovým  $P4_12_12$ , kde posledné číslo značí dvojskrutnú os vo smere medziosí, alebo Schoenfliesovým symbolom  $D_4^1$ .

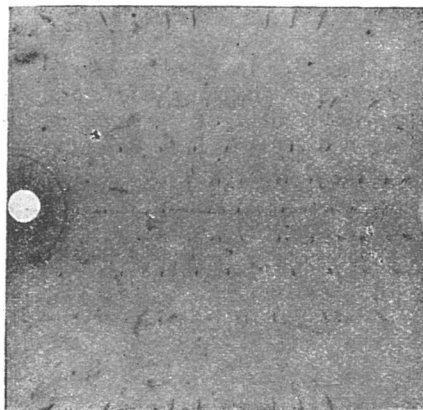
Jestvuje však ešte druhá možnosť, totiž tá, že štvorskrutná ková os má opačný smer otáčania sa. Je teda možná i priestorová grupa  $P4_32_12$  čiže  $D_4^8$ . Medzi obidvoma enantiomorfnými nedá sa experimentálne rozhodnúť. Pre ďalšie úvahy si zvolíme možnosť prvú.







Obr. 2a.



Obr. 2b.

### V. Poloha atomov telúru.

V priestorovej grupe  $D_4^4 - P4_12_12$  má atom všeobecne osmorakú polohu s týmito parametrami<sup>9)</sup> (čiarka nad písmenou značí mínus):

$xyz$

$$\begin{aligned} \bar{x}, \quad \bar{y}, \quad \frac{1}{2} + z \\ \frac{1}{2} - y, \quad \frac{1}{2} + x, \quad \frac{1}{4} + z \\ \frac{1}{2} + y, \quad \frac{1}{2} - x, \quad \frac{3}{4} + z \end{aligned}$$

$yxz$

$$\begin{aligned} \bar{y}, \quad \bar{x}, \quad \frac{1}{2} - z \\ \frac{1}{2} - x, \quad \frac{1}{2} + y, \quad \frac{1}{4} - z \\ \frac{1}{2} + x, \quad \frac{1}{2} - y, \quad \frac{3}{4} - z \end{aligned}$$

Tieto polohy bude zaujímať 8 atomov *kyslíka*. Štyri atomy *telúru* môžu zaujímať polohu iba štvorakú, ktorú odvodíme zo (17) dosadením  $x = y$  a  $z = 0$ :

$xx0$

$$\frac{1}{2}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} - x, \quad \frac{1}{2} + x, \quad \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} + x, \quad \frac{1}{2} - x, \quad \frac{3}{4} \end{aligned}$$

Všeobecne napísané polohy atomov vyhodnotíme podľa intenzity odrazov.

Atom ležiaci v polohe  $x_i, y_i, z_i$  má žiarivosť (rozkmit vlnenia, ktoré sa od neho šíri)  $f_i$ . Vlnenie má fázu

$$\varphi_i = hx_i + ky_i + lz_i. \quad (19)$$

V diagrame (obr. 8) sa rozkladá žiarivosť atomu  $f_i$  znázornená vektorom, ktorý sviera s pevným smerom  $OX$  uhol  $2\pi\varphi_i$ , na složky  $f_i \cdot \cos 2\pi\varphi_i$  a  $f_i \cdot \sin 2\pi\varphi_i$ . Vlnenie vychádzajúce z  $n$  atomov sa skladá vo výslednú vlnu, ktorej intenzita je úmerná štvorcu rozkmitu vlnenia čiže štvorcu štruktúrneho faktoru

$$S^2 = S_x^2 + S_y^2, \quad (20)$$

kde složky štruktúrneho faktoru  $S_x$  a  $S_y$  sú aritmetickým súčtom složiek rozkmitov vlnení vychádzajúcich z jednotlivých atomov:

$$S_x = \sum f_i \cos 2\pi \varrho_i, \quad (21a)$$

$$S_y = \sum f_i \sin 2\pi \varrho_i. \quad (21b)$$

Vlnenie vychádzajúce z 8 atomov *kyslíka* sa skladá vo výslednú vlnu o složkách rozkmitu

$$S'_x = f_0 A_0, \quad S'_y = f_0 B_0, \quad (22)$$

kde  $f_0$  je žiarivosť atomu kyslíka a kde složky rozkmitu vlnenia — ako vychádza dosadením (17) do (21ab) za použitia (19) — sú <sup>10)</sup>

$$A_0 = 4 \left\{ \cos \pi (h+k) (x+y) \cos \pi \left[ (h-k) (x-y) - \frac{l}{2} \right] \cos 2\pi \left( lz + \frac{l}{4} \right) + \right. \\ \left. - \cos \pi (h+k) \cos \pi \left[ (h-k) (x+y) - \frac{l}{2} \right] \cos \pi (h+k) (x-y) \cos 2\pi lz \right\}, \quad (23a)$$

$$B_0 = -4 \left\{ \sin \pi (h+k) (x+y) \sin \pi \left[ (h-k) (x-y) - \frac{l}{2} \right] \sin 2\pi \left( lz + \frac{l}{4} \right) - \right. \\ \left. - \cos \pi (h+k) \sin \pi \left[ (h-k) (x+y) - \frac{l}{2} \right] \sin \pi (h+k) (x-y) \sin 2\pi lz \right\}. \quad (23b)$$

Vlnenie vychádzajúce zo 4 atomov *telúru* sa skladá vo výslednú vlnu o složkách rozkmitu

$$S''_x = f_{Te} A_{Te}, \quad S''_y = f_{Te} B_{Te}, \quad (24)$$

kde  $f_{Te}$  je žiarivosť atomu telúru a kde složky rozkmitu vlnenia — ako ľahko nájdeme, keď do (23ab) dosadíme  $x = y$  a  $z = 0$  a keď číselný koeficient pred složenými zátvorkami zmenšíme na polovicu — sú

$$A_{Te} = 2 \left\{ \cos 2\pi (h+k)x \cos^2 2\pi \frac{l}{4} + \cos 2\pi \frac{h+k}{2} \cos 2\pi \left[ (h-k)x - \frac{l}{4} \right] \right\}, \quad (25a)$$

$$B_{Te} = 2 \left\{ \sin 2\pi (h+k)x \sin^2 2\pi \frac{l}{4} \right\}. \quad (25b)$$

Vlnenie vychádzajúce zo *všetkých* atomov obsažených v priestorovej vzorke  $TeO_2$  sa skladá vo výslednú vlnu, ktorej intenzita je vo smysle (20) a (21ab) úmerná

$$S^2 = (f_{Te} A_{Te} + f_O A_O)^2 + (f_{Te} B_{Te} + f_O B_O)^2. \quad (26)$$

Táto intenzita je tiež úmerná četnosti odrazových rovín  $\nu$ , ktorá je pre kryštál štvorcovej sústavy pri jeho otáčaní okolo osi  $a$  i okolo osi  $c$  uvedená v tab. XII.

Napr. odraz od primárnej roviny  $hkO$  do vrstovnice  $h$  pri otáčaní okolo  $a$  nastáva dva razy, totiž od rovín  $hkO$ , a zatiaľ čo do rovníka pri otáčaní okolo osi  $c$  nastáva štyrikrát, totiž od rovín  $hkO$ ,  $hkO$ ,  $hkO$  a  $h\bar{k}O$ .

Keď neberieme do úvahy ostatných faktorov, platí pre intenzitu  $I$  vzťah

Tabuľka X.  
Os c, 3. vrstevnica.

Č.	s cm	1000×				hkl	I'	
		sin <sup>2</sup> φ	δ	sin <sup>2</sup> θ				
				poz.	poč.			
1	4,85	117	80	179	195	203	8	vw
2	5,50	148	74	222	221	213	12	w
3	7,22	246	53	299	298	223	5	vw
4	7,73	278	47	325	323	303	9	w
5	8,21	310	40	350	349	313	27	w
6	9,62	407	21	428	426	323	40	—m
7	10,97	503	—1	502	503	403	16	w
8	11,42	535	—7	528	529	413	54	—m
9	11,94	574	—22	552	555	333	19	w
10	12,80	633	—28	605	606	423	33	—m
11	15,35	797	—63	734	735	433	62	m
					735	503	33	
12	15,86	826	—68	758	760	513	68	m
13	18,02	926	—89	837	837	523	46	m

Tabuľka XI.  
Os c, 4. vrstevnica.

Č.	s cm	1000×				hkl	I'	
		sin <sup>2</sup> φ		sin <sup>2</sup> θ				
				poz.	poč.			
1	1,70	15	199	214	215	114	94	m
2	4,57	104	163	267	267	204	67	m
3	7,70	278	92	370	370	224	88	m
4	9,04	366	54	420	421	314	228	s
5	10,87	496	2	498	498	324	8	vw
6	12,68	624	—2	573	575	404	58	m
7	14,02	715	—89	626	627	334	42	m
8	15,46	802	—125	677	678	424	98	m

Tabuľka XII.  
Početnosť odrazových rovin  
v štvorcovej sústave.

	a		c	
	r.	v.	r.	v.
00l	2	—	—	1
OkO	2	1	4	1
hhO	—	2	4	—
hkO	—	2	8	—
OkI	4	2	—	4
hhl	—	4	—	4
hkl	—	4	—	8

$$I \sim vS^2.$$

27

Než začneme uvažovať o polohe atomov telúru, zjednodušíme si rovnice (25ab) tým, že odrazy rozdelíme do *štyroch skupín*:

1) Keď  $2h+2k+l=4n+1$ , (takto sa symbolizuje, že  $2h+2k+l$  pri *neúplnom* delení štvormi dáva zvyšok 1) je buď  $h+k$  párne a potom  $l=4n+1$  alebo  $h+k$  je nepárne a potom  $l=4n+3$ . V prvom prípade je

$$\cos 2\pi \frac{h+k}{2} = 1,$$

$$\cos 2\pi \left[ (h-k)x - \frac{l}{4} \right] = -\sin 2\pi (h-k)x,$$

v druhom prípade

$$\cos 2\pi \frac{h+k}{2} = -1,$$

$$\cos 2\pi \left[ (h-k)x - \frac{l}{4} \right] = \sin 2\pi (h-k)x.$$

V oboch prípadoch je teda

$$\left. \begin{aligned} A &= -2 \sin 2\pi (h-k)x, \\ B &= 2 \sin 2\pi (h+k)x. \end{aligned} \right\} (28)$$

2) Keď  $2h+2k+l=4n+2$ , je buď  $h+k$  párne a potom  $l=4n+2$  alebo  $h+k$  je nepárne a potom  $l=4n$ . V prvom prípade je

$$\cos 2\pi \frac{h+k}{2} = -1,$$

$$\cos 2\pi \left[ (h-k)x - \frac{l}{4} \right] = -\cos 2\pi (h-k)x,$$

v druhom prípade

$$\cos 2\pi \frac{h+k}{2} = 1,$$

$$\cos 2\pi \left[ (h-k)x - \frac{l}{4} \right] = \cos 2\pi (h-k)x.$$

V oboch prípadoch

$$A = 2 [\cos 2\pi (h+k)x - \cos 2\pi (h-k)x] = -4 \sin 2\pi hx \sin 2\pi kx. \quad (29)$$

$$B = 0.$$

Analogicky odvodíme ďalšie prípady.

3) Keď  $2h+2k+l=4n+3$ , je

$$\left. \begin{aligned} A &= 2 \sin 2\pi (h-k)x, \\ B &= 2 \sin 2\pi (h+k)x. \end{aligned} \right\} (30)$$

4) Keď  $2h+2k+l=4n$ , je

$$\left. \begin{aligned} A &= 4 \cos 2\pi hx \cos 2\pi kx, \\ B &= 0. \end{aligned} \right\} (31)$$

Intenzita odrazov závisí v podstate na atómoch, ktoré majú žiarivosť asi desaťkrát väčšiu ako atomy kyslíka a teda vplyv na

intenzitu asi stokrát väčší. Polohu atomov telúru budeme posudzovať tak, že *žiarivosť kyselika zanedbáme*.

Pretože Röntgenovo žiarenie sa kryštalom absorbuje, uplatňujú sa pri odrazoch hlavne len tie lúče, ktoré sa odrážajú od povrchu. Keby kryštál bol guľový, rástla by intenzita odrazov s  $\vartheta$  rastúcim od  $0^\circ$  do  $90^\circ$  podobne, ako rastie intenzita mesačného svetla od nového mesiaca do splnu. Žiarivosť jednotlivých atomov sa s rastúcim  $\vartheta$  naopak znižuje, pretože interferencia vlnení vychádzajúcich z jednotlivých elektronov atomu sa zväčšuje. Obidve závislosti intenzity na uhle  $\vartheta$  budú sa aspoň čiastočne kompenzovať, keď zanedbávajú absorpčný faktor, budeme *žiarivosť atomov telúru* pokladať za *konštantnú*. Položíme ju rovnú 1.

Na snímke získanej otáčaním kryštalu okolo osi  $c$  (obr. 2) pozorujeme celkovo toto rozdelenie intenzít: Na 1. a 3. vrstevnici, kde ležia odrazy  $2h + 2k + l = 4n + 1$  alebo  $4n + 3$ , intenzita rastie s rastúcim  $\vartheta$ . To podľa (28) a (30) znamená, že hodnoty  $\sin 2\pi(h-k)x$  a  $\sin 2\pi(h+k)x$  neprechádzajú cez maximum. Keby tohto maxima pri odraze 061 dosiahly, bolo by podľa (28) a (30)  $|\sin 2\pi 6x| = 1$ , čiže

$$|x| = 0,25 : 6 = 0,04.$$

Na rovníku a na 2. a 4. vrstevnici pozorujeme pomerne silné odrazy  $2h + 2k + l = 4n$ . Pretože intenzita pri odraze 600 neklesla ešte k 0, je vo smysle (31)

$$|x| < 0,04.$$

Medzi uvedenými silnými odrazmi pozorujeme pomerne slabé odrazy  $2h + 2k + l = 4n + 2$ , pokiaľ nie sú vyhaslé. To podľa (29) nasvedčuje tiež tomu, že  $x$  je blízke 0.

Pri ďalších úvahách sa rozhodneme pre kladnú hodnotu  $x$ , pretože záporné  $x$  ako druhá možnosť znamená iba iné vymedzenie priestorovej vzorky, totiž jej posunutie v priestorovej mriežke o  $\frac{1}{2}c$ , čo je zrejmé z (18). Podobne i ďalšie dve možnosti, pri ktorých by  $x$  bolo blízke 0,5, znamenajú iba posunutie priestorovej vzorky o  $\frac{1}{2}(a + b)$ .

Presnejšiu hodnotu parametru  $x$  získame *porovnávaním intenzít* odrazov 1. alebo 3. skupiny s odrazmi 4. skupiny na snímke získanej otáčaním okolo osi  $a$  (obr. 1). Pre toto porovnávanie je výhodné nájsť vždy dva blízko seba ležiace odrazy približne rovnako intenzívne, ktoré sú jednoznačne určené. Niekoľko takých dvojíc je uvedených v tab. XIII., kde sú vypočítané hodnoty  $100 \nu S^2/32$  pre  $x = 0,024$ ,  $0,028$ ,  $0,030$ ,  $0,032$  a  $0,036$  podľa rovnice (26) zjednodušenej na tvar

$$S^2 = A_{Te}^2 + B_{Te}^2$$

za použitia (28) až (31). Pozorovaniu vyhovuje najlepšie hodnota  $x = 0,30$ .

*Parameter telúru je  $x = 0,030 \pm 0,001$ . (Dokončenie.)*