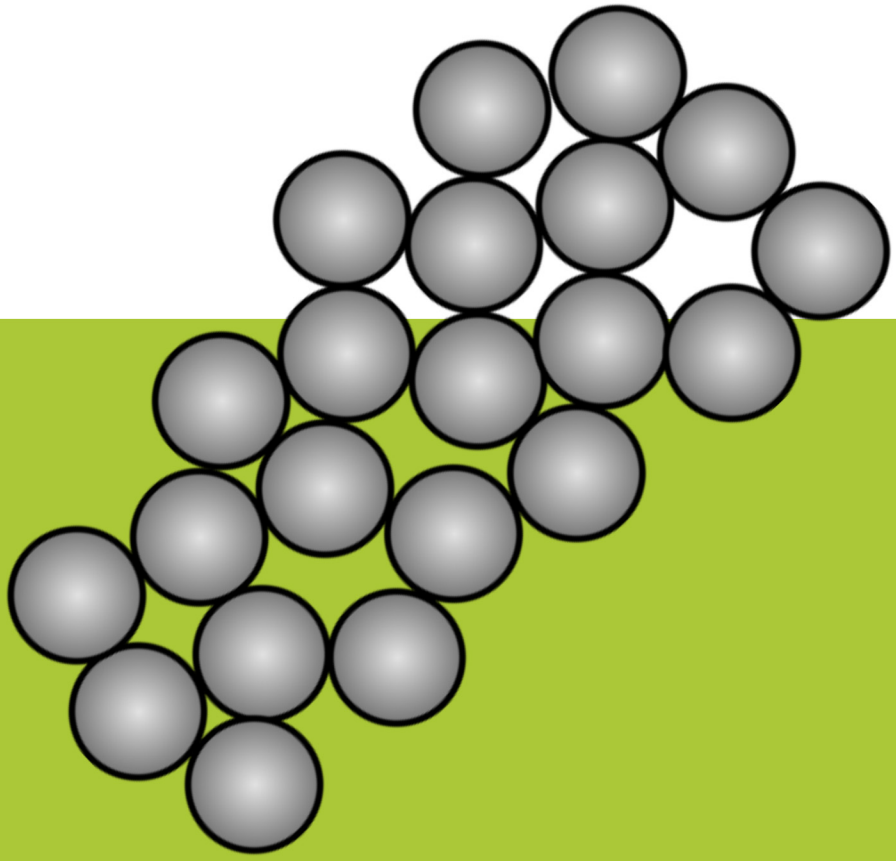
Kristalna struktura in rentgenska difrakcija difrakcija

Sašo
Gyergyek

Učno gradivo pri predmetu
Anorganska kemija



Univerzitetna založba
Univerze v Mariboru

Univerza v Mariboru

Fakulteta za kemijo
in kemijsko tehnologijo

Kristalna struktura in rentgenska difrakcija

Učno gradivo pri predmetu Anorganska kemija

Avtor
Sašo Gyergyek

November 2026

Naslov **Kristalna struktura in rentgenska difrakcija**
Title *Crystal strucure and X-ray diffraction*

Podnaslov **Učno gradivo pri predmetu Anorganska kemija**
Subtitle *Study materials for Inorganic Chemistry*

Avtor Sašo Gyergyek
Author (Univerza v Maribor, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo)

Recenzija Darko Makovec
Review (Institut Jožef Stefan)

Jezikovni pregled Tamara Matevc
Language editing

Tehnični urednik Jan Perša
Technical editor (Univerza v Mariboru, Univerzitetna založba)

Oblikovanje ovitka Jan Perša
Cover designer (Univerza v Mariboru, Univerzitetna založba)

Grafika na ovitku Cristal ou amorphe,
Cover graphics avtor: Sbyrnes321, Wikimedia Commons, 2026

Grafične priloge Vsi viri so lastni, razen če ni navedeno drugače.
Graphics material Gyergyek (avtor), 2026

Založnik **Univerza v Mariboru**
Published by **Univerzitetna založba**
Slomškov trg 15, 2000 Maribor, Slovenija
https://press.um.si, zalozba@um.si

Izdajatelj **Univerza v Mariboru**
Issued by **Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo**
Smetanova ulica 17, 2000 Maribor, Slovenija
https://fkktum.si, fkkt@um.si

Izdaja Prva elektronska izdaja
Edition

Izdano Maribor, Slovenija, november 2026
Published at

Vrsta publikacije E-knjiga
Publication type

Dostopno na https://press.um.si/index.php/ump/catalog/book/1183
Available at



© Univerza v Mariboru, Univerzitetna založba
/ University of Maribor, University of Maribor Press

Besedilo © Gyergyek (avtor), 2026

To delo je objavljeno pod licenco Creative Commons Priznanje avtorstva-Nekomercialno-Brez predelav 4.0 Mednarodna. / *This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivs 4.0 International License.*

Uporabnikom je dovoljeno reproduciranje brez predelave avtorskega dela, distribuiranje, dajanje v najem in priobčitev javnosti samega izvirnega avtorskega dela, in sicer pod pogojem, da navedejo avtorja in da ne gre za komercialno uporabo.

Vsa gradiva tretjih oseb v tej knjigi so objavljena pod licenco Creative Commons, razen če to ni navedeno drugače. Če želite ponovno uporabiti gradivo tretjih oseb, ki ni zajeto v licenci Creative Commons, boste morali pridobiti dovoljenje neposredno od imetnika avtorskih pravic.

https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/

Kataložni zapis o publikaciji (CIP) pripravili v Narodni in univerzitetni knjižnici v Ljubljani
COBISS.SI-ID 306133763
ISBN 978-961-299-224-8 (PDF)

ISBN 978-961-299-224-8 (pdf)

DOI https://doi.org/10.18690/um.fkkt.10.2026

Cena
Price Brezplačni izvod

Odgovorna oseba založnika
For publisher Prof. dr. Dean Korošak,
rektor Univerze v Mariboru

Citiranje
Attribution Gyergyek, S. (2026). *Kristalna struktura in rentgenska difrakcija: učno gradivo pri predmetu Anorganska kemija*. Univerza v Mariboru, Univerzitetna založba. doi.: 10.18690/um.fkkt.10.2026

Univerzitetna založba
Univerze v Mariboru

Kazalo

Uvod **1**

1 Razvoj rentgenske uklonske analize kot orodja za raziskave strukture **3**

2 Kristalne mreže, osnovne celice in Millerjevi indeksi **9**

3 Geometrijski opis difrakcije in Braggov zakon **15**

4 Sipanje na atomih in kristalih – izvor intenzitete uklonov **19**
4.1 Atomski sipalni faktor 19

5 Rentgenska praškovna difrakcija – naključna orientacija, položaj uklonov in intenzitete **23**
Rentgenska difrakcija: konceptualni zaključek 26

Literatura **27**

Univerzitetna založba
Univerze v Mariboru

Uvod

Učno gradivo je namenjeno študentom Anorganske kemije na magistrskem študijskem programu Kemija na Fakulteti za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Mariboru. Namen dela je predstaviti temeljna načela rentgenske difrakcije z vidika strukturne karakterizacije in ne kristalografske teorije. Poudarek je na razvijanju fizikalnega razumevanja, razumevanju informacij, ki jih daje XRD, ter prepoznavanju zmožnosti in omejitev te metode s pomočjo praktičnih primerov, pomembnih za kemijo in znanost o materialih.

Pri pripravi poglavja je bil kot pripomoček za pisanje in urejanje besedila uporabljen veliki jezikovni model (OpenAI ChatGPT). Uporabljen je bil za izboljšanje jasnosti razlag, oblikovanje pedagoške strukture in jezikovno izpopolnjevanje besedila. Znanstveno vsebino, izbor tem, slik, enačb in primerov ter končni strokovni pregled je opravil avtor. Celotna vsebina je bila pred vključitvijo v gradivo kritično pregledana, preverjena glede na uveljavljeno kristalografsko literaturo in po potrebi popravljena.

Univerzitetna založba
Univerze v Mariboru

1 Razvoj rentgenske uklonske analize kot orodja za raziskave strukture

Odkritje rentgenskih žarkov (Wilhelm Conrad Röntgen leta 1895) je odprlo novo obdobje v proučevanju snovi. Sprva so rentgenske žarke uporabljali predvsem v medicinski radiografiji, vendar je kmalu postalo jasno, da imajo valovne dolžine reda velikosti medatomskih razdalj. To je nakazovalo, da jih je mogoče uporabiti kot orodje za določanje atomske strukture kristaliničnih trdnih snovi.

Leta 1912 je Max von Laue eksperimentalno dokazal, da kristal deluje kot tridimenzionalna uklonska (difrakcijska) mreža za rentgenske žarke. Nastali uklonski (difrakcijski) vzorec je potrdil dve temeljni dejstvi: rentgenski žarki imajo valovno naravo, kristali pa izkazujejo periodično urejenost (na dolgih razdaljah). Ta spoznanja so vzpostavila konceptualno osnovo rentgenske kristalografije.

William Henry Bragg in William Lawrence Bragg sta kmalu zatem podala preprosto geometrijsko interpretacijo uklonskega pojava. Uvedla sta pogoj za konstruktivno interferenco med ravninami atomov v kristalu, ki je danes znan kot Braggov zakon. Ta zakon povezuje valovno dolžino rentgenskega sevanja, razdaljo med kristalnimi ravninami in uklonski kot ter predstavlja temeljno zvezo med eksperimentom in kristalno strukturo.[1] Do 20. let 20. stoletja so z uporabo rentgenske uklonske analize raziskali strukture enostavnih ionskih kristalov, kovin ter mineralov. Metoda je tako postala nepogrešljiva v kemiji in znanostih o materialih.

Rentgenski žarki so elektromagnetno valovanje z valovnimi dolžinami med približno 0,01 in 10 Å. V uklonskih eksperimentih se najpogosteje uporabljajo valovne dolžine med 0,5 in 2,5 Å, saj so primerljive z značilnimi razdaljami med atomi v trdnih snoveh.

Energija fotona elektromagnetnega valovanja je podana z zvezo:

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda},$$

kjer je *h* Planck-va konstanta, *ν* frekvenca*, c* hitrost svetlobe in *λ* valovna dolžina. Zaradi kratke valovne dolžine in relativno visoke energije rentgenski žarki interagirajo s snovjo predvsem preko elektronskih procesov in ne preko vibracijskih ter rotacijskih stanj molekul.

Ko rentgenski žarek vstopi v snov, lahko pride do absorpcije ali sipanja. Za uklon je ključno elastično (koherentno) sipanje, pri katerem sipani foton ohrani svojo energijo (in s tem valovno dolžino), spremeni pa smer širjenja. Ravno zaradi tega lahko pride do interference (Cullity in Stock, 2001).

Neelastično sipanje prispeva k ozadju v difraktogramu, vendar ne tvori ostrih difrakcijskih maksimumov. Verjetnost absorpcije in sipanja zavisi od atomskega števila atomov, ki sestavljajo snov ter od valovne dolžine rentgenskega valovanja.

Intenziteta rentgenskega sipanja je odvisna od porazdelitve elektronov v atomu, saj rentgenski žarki interagirajo predvsem z elektronskim oblakom. Amplitudo elastično sipanega vala na posameznem atomu opisuje atomski sipalni faktor, označen s *f*. Faktor je definiran kot razmerje med amplitudo vala, sipanega na atomu, in amplitudo vala, sipanega na enem prostem elektronu pri enakih pogojih. Zato je *f* merilo učinkovitosti atoma pri sipanju rentgenskega sevanja (Cullity in Stock, 2001; Giacovazzo et al., 2011; Dinnebier in Billinge, 2008).

Pri zelo majhnih sipalnih kotih sipajo vsi elektroni približno v fazi, zato je atomski sipalni faktor približno enak številu elektronov v atomu. Z naraščanjem sipalnega kota pa pride do delne destruktivne interference med prispevki različnih delov elektronskega oblaka, zato se vrednost *f* zmanjšuje.

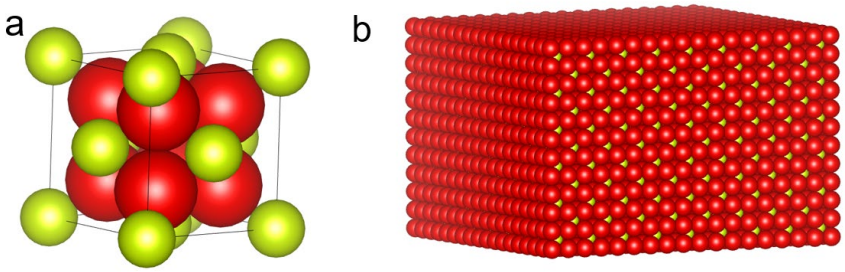
Matematično je atomski sipalni faktor podan kot Fourierjeva transformacija elektronske gostote:

$$f(\mathbf{q}) = \int \rho(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\, d\mathbf{r}$$

kjer $\varrho(\mathbf{r})$ predstavlja elektronsko gostoto v prostoru, $\mathbf{q}$ pa sipalni vektor (Cullity in Stock, 2001; Giacovazzo et al., 2011; Dinnebier in Billinge, 2008).

To pomeni, da je rentgenska difrakcija neposredno povezana s prostorsko porazdelitvijo elektronov v kristalu. Različni atomi prispevajo k uklonskim maksimumom z različno amplitudo, odvisno od njihovega atomskega števila in položaja v strukturi. Ker je atomski sipalni faktor odvisen od sipalnega kota, se relativne intenzitete uklonskih maksimumov spreminjajo z naraščanjem kota. Posamezen atom, ki je izpostavljen rentgenskemu sevanju, deluje kot izvor sipanega sferičnega vala. Vendar en sam atom ne tvori uklonskega vzorca v smislu ostrih maksimumov. Difrakcija kot pojav nastane šele zaradi interferenčnega seštevanja sipanih valov iz velikega števila atomov, razporejenih v periodični strukturi.

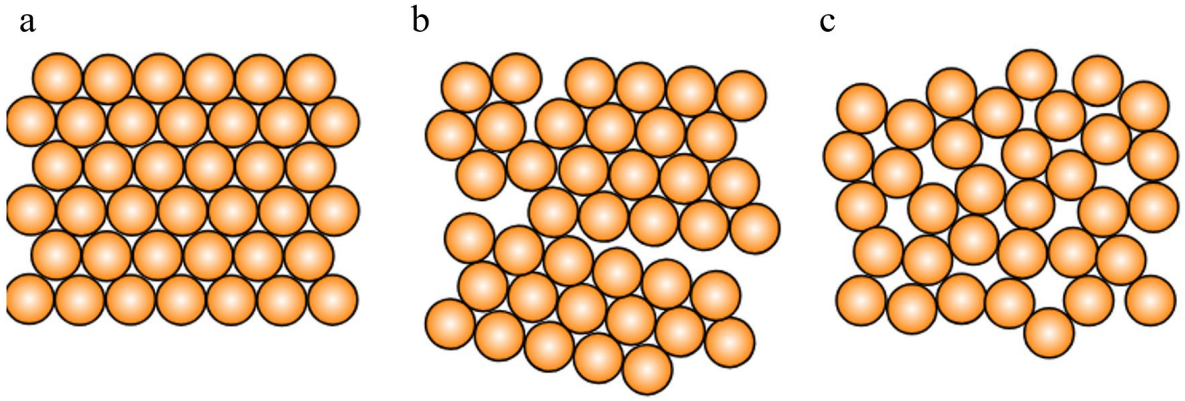
V kristalu so atomi razporejeni periodično. Zaradi te periodičnosti so fazna razmerja med sipanimi valovi sistematična. Konstruktivna interferenca nastane le v določenih smereh, ki ustrezajo geometrijskemu pogoju med valovno dolžino sevanja in razdaljami med kristalnimi ravninami. Rezultat te interferenčne ojačitve so diskretni uklonski maksimumi. Če je urejenost popolna, so uklonski vrhovi ostri in dobro definirani. Če je periodičnost omejena ali motena, se uklonski maksimumi razširijo ali oslabijo (Cullity in Stock, 2001; Giacovazzo et al., 2011; Dinnebier in Billinge, 2008).



Slika 1: Osnovna celica (a) in razširjena super celica (4 x 4 x 4) (b) CeO_2. Ce^{4+} in O^{2-} so prikazani v pravem razmerju ionskih radijev (O^{2-}-rdeč je znatno večji od Ce^{4+}-rumen).
Vir: lasten.

Amorfne snovi, pri katerih ni periodične urejenosti na dolge razdalje, ne dajejo ostrih uklonskih vrhov, temveč širok zabrisan maksimum, ki je podoben grbi. Nasprotno pa nanokristalinične snovi izkazujejo razširjene uklonske vrhove zaradi končne velikosti domen z urejeno kristalno strukturo.

Rentgenska difrakcija (XRD) je torej občutljiva predvsem na periodično urejenost na daljše razdalje in daje informacije o povprečni kristalni strukturi, ne pa o lokalnih, neperiodičnih odstopanjih.



Slika 2: Shematski prikaz monokristala (red dolgega dosega) (a), polikristalinične (domene urejenosti) (b) in amorfne (red kratkega dosega) (c) snovi.
Vir: Sbyrnes321, Cristal ou amorphe.svg, Wikimedia Commons, CC BY-SA 3.0.

Na tej stopnji moramo izpostaviti ključne konceptualne značilnosti rentgenske difrakcije. Te določajo teoretični okvir za interpretacijo rezultatov in preprečujejo, da bi difrakcijske podatke razumeli preveč poenostavljeno:

- **Periodično povprečje z informacijo o neredu:** XRD primarno daje informacijo o povprečni periodični strukturi skozi celoten makroskopski kristal. To pomeni, da je metoda statistična: če je v kristalu npr. le 1 % molekul v drugačni konformaciji, bo ta lokalni nered ostal neviden, saj XRD zazna le prevladujoče povprečje. Da lokalne napake sploh postanejo del merljive strukture, morajo biti prisotne v zadostni meri. Ko ta prag presežemo, se odstopanja od idealne urejenosti (defekti, dislokacije, mikronapetosti) eksperimentalno jasno odrazijo v širjenju in obliki difrakcijskih vrhov. Analiza same oblike vrha nam tako omogoča vpogled v realno (ne-idealno) strukturo trdne snovi.
- **Rekonstrukcija molekul preko recipročnega prostora:** XRD ne deluje kot klasični svetlobni mikroskop, kjer leče uklonjene žarke zberejo nazaj v sliko. Detektor posname difrakcijski vzorec v t. i. **recipročnem prostoru**. Da iz teh podatkov rekonstruiramo dejanske položaje atomov v realnem prostoru, je potreben rigorozen matematični pristop (Fourierjeva transformacija – FT). Iz ugotovljenih položajev težjih atomov lahko nato zanesljivo določimo celotno 3D-strukturo in konformacijo molekule v trdnem stanju – ob tem pa se moramo kot kemiki zavedati, da se ta struktura zaradi pakiranja v kristalu lahko razlikuje od tiste v raztopini ali plinski fazi.

– **Relativna občutljivost na atomska števila (*Z*):** Rentgenski žarki se sipljejo na elektronskih oblakih. Elementi z višjim *Z* sipljejo močneje, kar otežuje natančno lociranje lahkih atomov (npr. vodika, *Z*=1) v bližini težkih kovin ali ločevanje sosedov s podobnim *Z* (npr. Fe in Mn). Ta omejitev ne pomeni, da strukture ne moremo določiti, temveč postavlja meje natančnosti našega strukturnega modela.

Te lastnosti nam jasno kažejo, da difrakcijski rezultati niso statična slika, ampak dinamičen model, ki zahteva kritično kemijsko interpretacijo. Da bi ta fizikalni model sploh znali zgraditi in povezati eksperimentalne vrhove z realno molekulo, moramo najprej natančno definirati jezik kristalografije.

Univerzitetna založba
Univerze v Mariboru

2 Kristalne mreže, osnovne celice in Millerjevi indeksi

Rentgenska difrakcija ne zaznava posameznih atomov izolirano, temveč periodičnost njihove razporeditve. Za opis te periodičnosti kristalografija uvaja formalni jezik, ki temelji na pojmih mreže in osnovne celice. Kristal je trdna snov, v kateri se atomske lege periodično ponavljajo v treh dimenzijah. Matematični opis te periodičnosti predstavlja kristalna mreža.

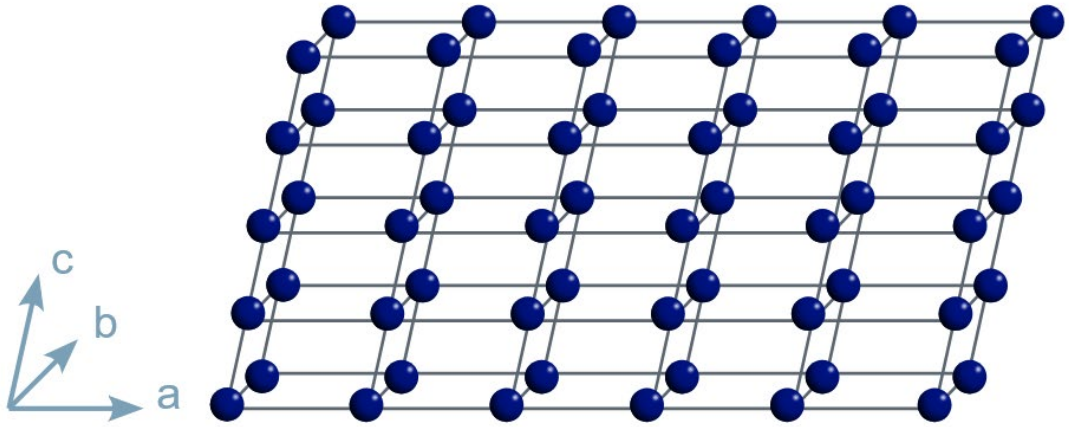
Kristalna mreža je neskončna množica točk, ki jih lahko dosežemo z linearnimi kombinacijami treh osnovnih translacijskih vektorjev:

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c}$$

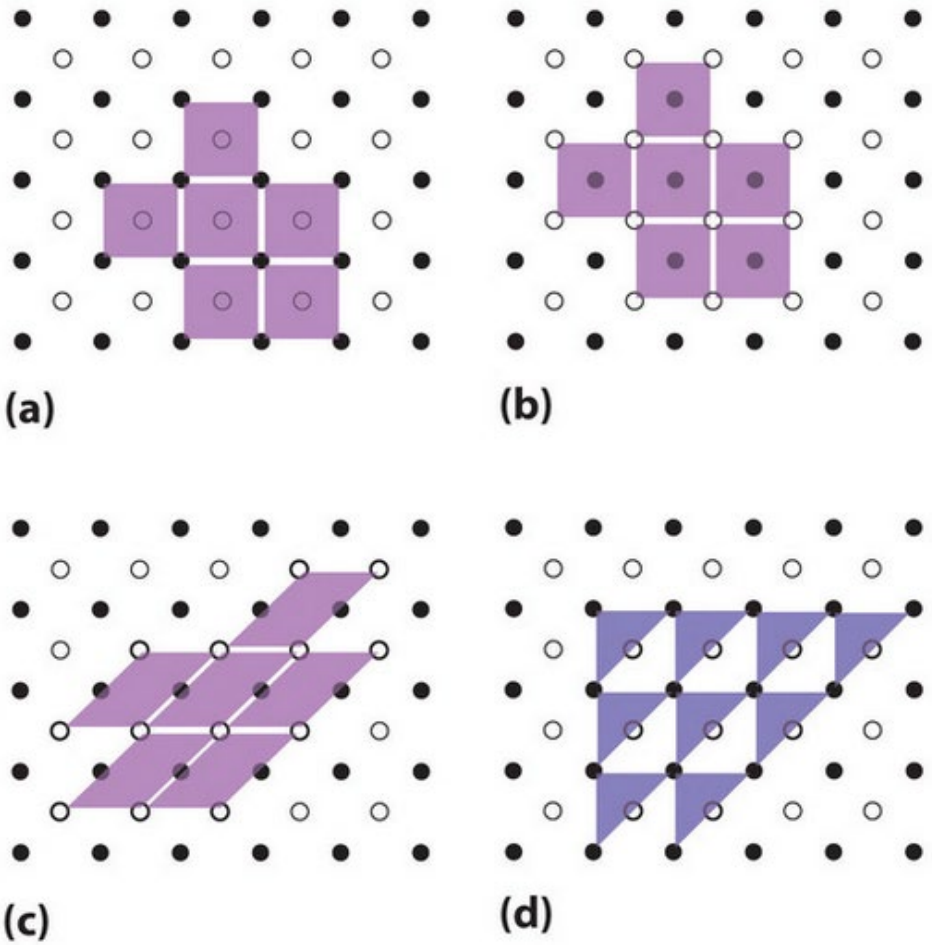
kjer so n_1, n_2 in n_3 cela števila, vektorji **a**, **b** in **c** pa osnovni mrežni vektorji.[1,2]
Pomembno je poudariti, da mreža sama po sebi ne vsebuje kemijske informacije. Predstavlja zgolj geometrijsko ogrodje. Za popoln opis kristalne strukture je treba vsaki mrežni točki pripisati **osnovo (motiv)**, ki jo sestavlja eden ali več atomov z določenimi relativnimi koordinatami. Kristalna struktura je torej rezultat kombinacije mreže in osnove.

Osnovna celica je najmanjši prostorninski element, ki s translacijami zapolni prostor brez vrzeli ali prekrivanja. Izbira osnovne celice ni enolična; različne izbire lahko vodijo do enakovrednih opisov iste strukture.

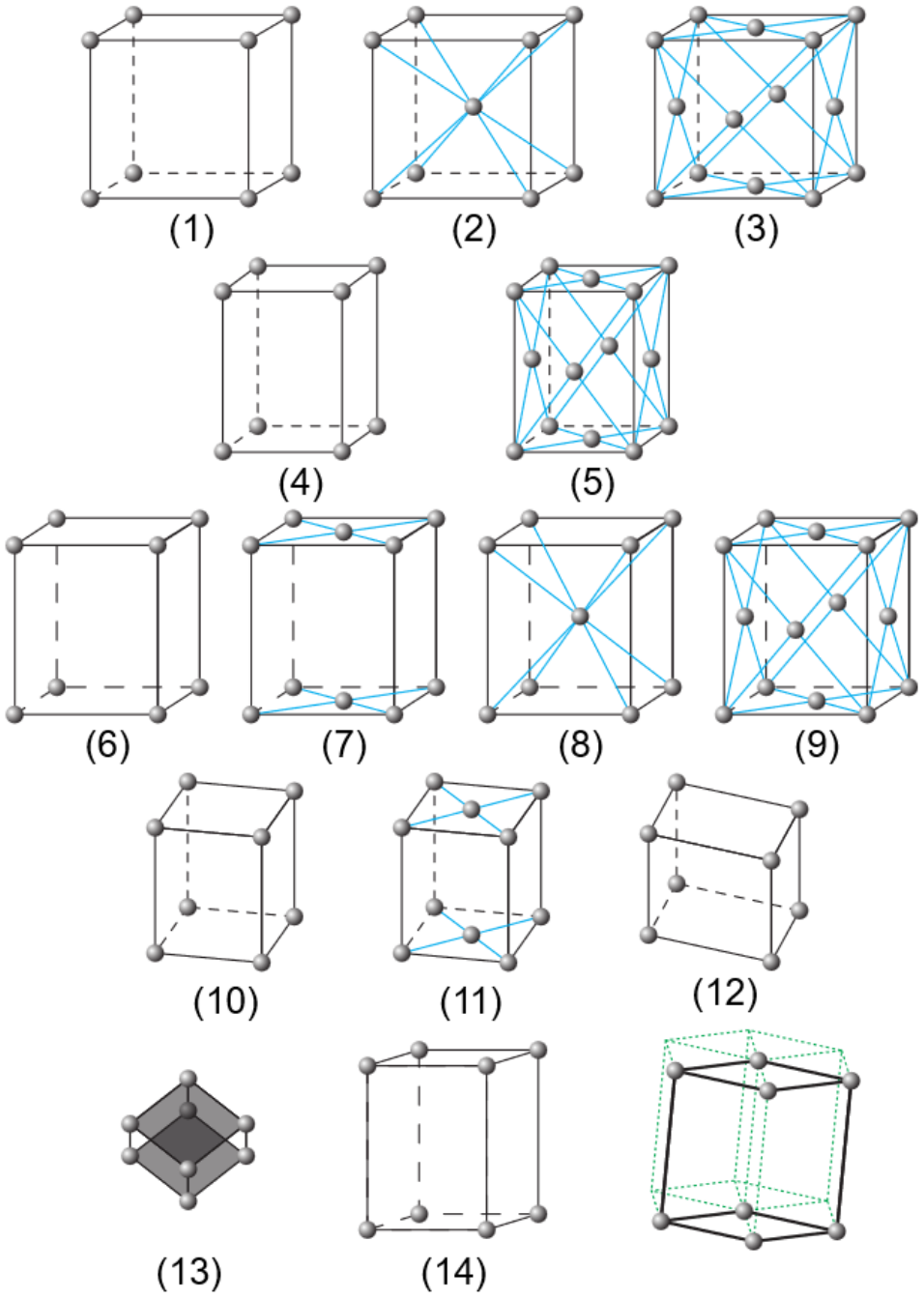
V tridimenzionalnem prostoru obstaja 14 Bravaisovih mrež, ki predstavljajo vse možne translacijske simetrije kristalnih mrež (Cullity in Stock, 2001; Giacovazzo in sod., 2011).



Slika 3: Tridimenzionalna mreža, ki jo definirajo vektorji a, b in c.
Vir: Philippe Lours, École des mines d'Albi-Carmaux, CC BY-NC-SA 4.0.



Slika 4: Osnovne celice v dveh dimenzijah. (a–c) Ilustracija možnih izborov osnovne celice na dvodimenzionalni mreži. Osnovne celice se razlikujejo v svojem položaju ali orientaciji znotraj mreže, vendar so vse pravilne, saj z njihovo ponovitvijo v katerokoli smer zapolnimo vzorec točk na mreži. (d) Trikotnik ni pravilna izbira za osnovno celico, saj ponavljanje trikotnikov zapolni le polovico prostora v mreži.
Vir: Anonimni avtor pod CC BY-NC-SA licenco.



Slika 5: 14 Bravaisovih mrež (1 primitivna kubična, 2 telesno centrirana kubična, 3 ploskovno centrirana kubična, 4 primitivna tetragonalna, 5 telesno centrirana tetragonalna, 6 primitivna ortorombska, 7 bazno centrirana ortorombska, 8 telesno centrirana ortorombska, 9 ploskovno centrirana ortorombska, 10 primitivna monoklinska, 11 bazno centrirana monoklinska, 12 primitivna triklinska, 13 romboedrska, 14 primitivna heksagonalna).

Vir: Napy1kenobi, Bravais lattices, Wikimedia Commons, CC BY-SA 3.0.

Pomembno je razlikovati med mrežo in strukturo. Na primer, ploskovno centrirana kubična (FCC) in telesno centrirana kubična (BCC) sta mreži, ne strukturi. Struktura nastane šele, ko mreži dodamo ustrezno osnovo (sinonim je motiv). Motiv je fizični »odtis«

atomov, ki jih postavimo na vsako točko v mreži. Celoten kristal zgradimo samo s translacijami (premiki levo, desno, gor, dol, naprej in nazaj) motiva, zato mora ta odtis vsebovati celotno razmerje atomov kot v formulski enoti.

Na primer:

- NaCl: FCC mreža + dvoatomska osnova: Na^+ na delnih koordinatah (0, 0, 0) in Cl^- na (0,5, 0,5, 0,5). Delne koordinate so deleži dolžin robov osnovne celice (a, b, c).
- CeO_2: FCC mreža + večatomska osnova: Ce^{4+} na delnih koordinatah (0, 0, 0) in dva O^{2-} na (0,25, 0,25, 0,25) in (0,75, 0,75, 0,75).
- BCC Fe: BCC mreža + enoatomska osnova: Fe na delnih koordinatah (0, 0, 0).

Poznamo tudi asimetrično enoto, ki je še manjša od motiva. To je absolutno najmanjša enota prostora, ki lahko zgradi kristal z uporabo vseh dovoljenih simetrijskih operacij (ne zgolj premiki, ampak tudi rotacije, zrcaljenja in inverzije ter kombinacije, ki dajejo vijačno os in drsno ravnino). Vsak kristal pripada eni od 230 možnih prostorskih grup in je zgrajen s kombinacijo teh petih simetrijskih operacij. Na primer,. v CeO_2 je asimetrična enota Ce^{4+} na mestu (0, 0, 0) in O^{2-} na mestu (0,25, 0,25, 0,25). V strukturi Ce^{4+} zaseda mesto z višjo simetrijo kot $O^{2-,}$ zato operacije prostorske grupe naravno pomnožijo dvakrat več O^{2-} položajev kot Ce^{4+} in razmerje Ce:O ohrani vrednost 1:2 (Cullity in Stock, 2001; Giacovazzo in sod., 2011).

Kot omenjeno je rentgenska difrakcija posledica kristalnih ravnin. Millerjevi indeksi nam omogočajo enostavno označevanje ravnin. Posamezna kristalna ravnina je označena s tremi celimi števili (hkl), ki so recipročne vrednosti presečišč ravnin z osnovnimi mrežnimi vektorji (**a**, **b** in **c**), pretvorjene v cela števila z uporabo najmanjšega skupnega večkratnika.

Poglejmo si praktičen primer ravnine, ki seka osi osnovne celice pri naslednjih vrednostih:

- **Presečišča z mrežnimi vektorji:** 2**a**, 1**b**, 3**c** (v kristalografiji zapišemo le koeficiente: 2, 1, 3).
- **Recipročne vrednosti:** Izračunamo obratne vrednosti teh koeficientov: $\frac{1}{2}, \frac{1}{1}, \frac{1}{3}$.
- **Odprava ulomkov:** Da dobimo cela števila, celotno trojico pomnožimo z najmanjšim skupnim večkratnikom imenovalcev (v tem primeru je to 6):

$$h = \frac{1}{2} \times 6 = 3$$

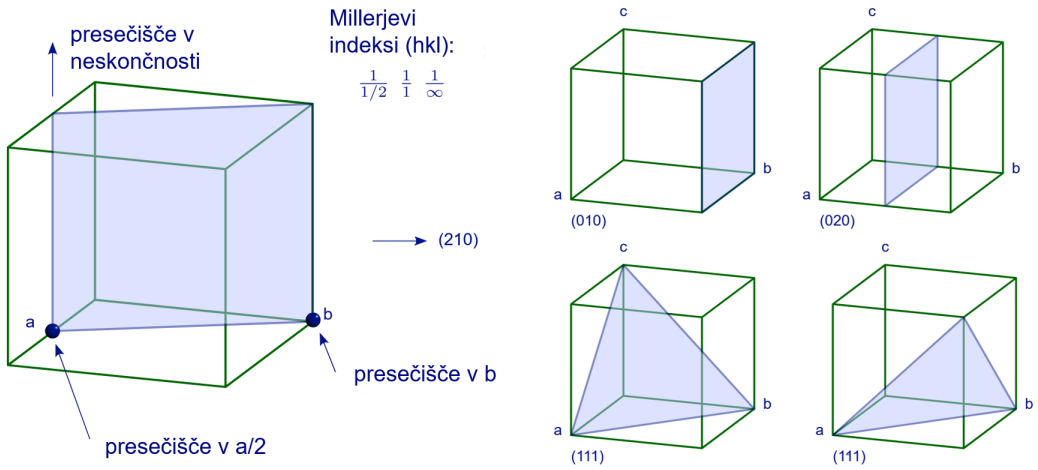
$$l = \frac{1}{1} \times 6 = 6$$

$$k = \frac{1}{3} \times 6 = 2$$

Ta ravnina ima torej Millerjeve indekse (362). Če ravnina teče vzporedno z določeno osjo, je njeno presečišče v neskončnosti (∞), njena recipročna vrednost pa je 0.

Osnovne značilnosti (Cullity in Stock, 2001; Giacovazzo in sod., 2011):

- Millerjevi indeksi so brezdimenzijski
- Vzporedne ravnine imajo sorazmerne Millerjeve indekse, ki so večkratniki istega osnovnega trojčka (hkl). Ker je kristalna mreža periodična, Millerjevi indeksi ne označujejo le ene same izolirane ravnine, temveč celo družino vzporednih ravnin z enako orientacijo. Pri tem imajo vmesne vzporedne ravnine znotraj iste družine večje, nekrajšane indekse (npr. ravnine (222) ali (444) so vzporedne osnovni ravnini (111), kar v rentgenski difrakciji fizikalno označuje manjše medravninske razdalje ali uklone višjega reda).
- Negativni odsek označimo s črtico nad številom, npr. $\bar{1}$



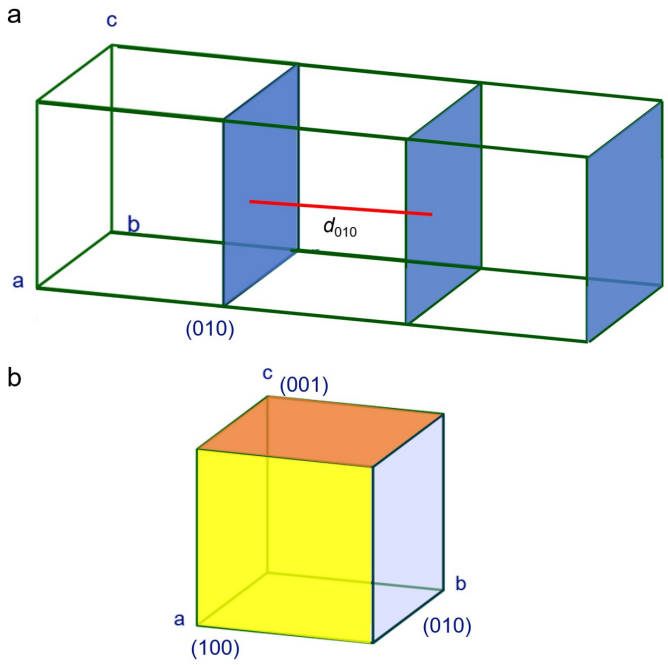
Slika 6: Millerjevi indeksi in primeri mrežnih ravnin, indeksiranih z Millerjevimi indeksi (hkl).
Vir: prirejeno po MIT OpenCourseWare, 3.091SC Introduction to Solid State Chemistry, CC BY-NC-SA 4.0.

Za vsak set (hkl) ravnin je značilna karakteristična razdalja d_{hkl}, ki zavisi od:

- velikosti osnovne celice
- simetrije
- indeksov hkl.

Ta razdalja d_{hkl} je geometrijska količina, ki je neposredno povezana z uklonskim pogojem, zapisanim iz Braggovega zakona.

Oklepaj (hkl) označuje specifično ravnino, medtem ko zaviti oklepaj {hkl} označuje družino simetrično ekvivalentnih ravnin.



Slika 7: Shematski prikaz (010) ravnin (a) in družina {100} simetrijsko ekvivalentih ravnin v kubični mreži (b).

Vir: prirejeno po Felix Kling (DeepKling), *Miller Indices*, Wikimedia Commons, CC BY 3.0.

Preden nadaljuješ premisli:

- Ali lahko materiala z isto osnovno celico izkazujeta različni uklonski sliki (difraktograma)?
- Je osnovna celica fizični objekt?
- Ali lahko amorfni trdnini pripišemo Millerjeve indekse?



razmislek

Povzetek poglavja

V poglavju smo vzpostavili geometrijski okvir, potreben za razumevanje difrakcije:

- kristaliničnost kot translacijsko periodičnost,
- mreže kot matematične konstrukte,
- osnovne celice kot neenolične opise strukture,
- Bravaisovemreže kot razrede simetrije,
- Millerjeve indekse kot označevalce kristalografskih ravnin.

Univerzitetna založba
Univerze v Mariboru

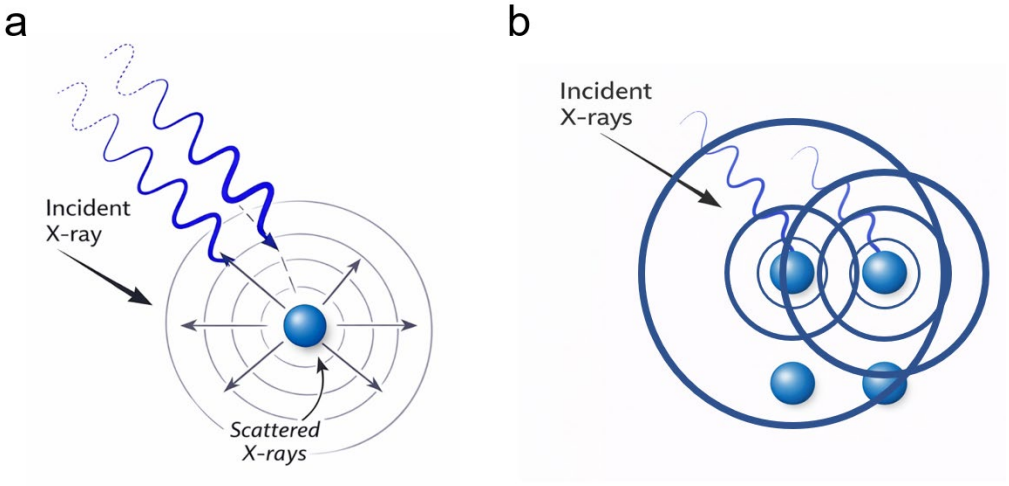
3 Geometrijski opis difrakcije in Braggov zakon

V prejšnjem poglavju smo kristalno strukturo opisali izključno z geometrijskimi pojmi: mreže, osnovne celice in mrežne ravnine. Na tej stopnji namenoma nismo vključili v opis sevanja, sipanja ali eksperimentalnih postopkov.

Rentgenska difrakcija se začne, ko to abstraktno geometrijo z eksperimentom preizkusimo. Osrednje vprašanje postane:

Pod katerimi geometrijskimi pogoji lahko na periodičnem kristalu opazimo difrakcijo?

Odgovor ni odvisen od kemijske identitete, temveč od valovne interference, ki je omejena s periodičnostjo kristalne mreže.



Slika 8: Sipanje rentgenskih žarkov na enem atomu (a) in na mreži štirih atomov (b).
Vir: lasten.

Ko rentgenski žarki interagirajo s snovjo, posamezni atomi sipajo sevanje v vse smeri. Ta proces sam po sebi še ne povzroči difrakcije. Difrakcija nastane šele, ko sipani valovi velikega števila atomov konstruktivno interferirajo v določenih smereh.

Zato morata biti izpolnjena dva pogoja:

1. elastično sipanje (brez spremembe valovne dolžine)
2. periodična urejenost na dolge razdalje (fazna koherenca preko številnih osnovnih celic)

Kristali oba pogoja naravno izpolnjujejo (Cullity in Stock, 2001; Giacovazzo in sod., 2011).

Zamislimo si niz vzporednih kristalnih ravnin, označenih z Millerjevimi indeksi (hkl) in razdaljo d_{hkl}. Ko vpadni rentgenski žarek zadene te ravnine, valovi, sipani z zaporednih ravnin, prepotujejo različne poti, preden se ponovno združijo.

Difrakcija nastane le takrat, ko je razlika teh poti enaka celoštevilskemu večkratniku valovne dolžine rentgenskega sevanja. Ta pogoj zagotavlja konstruktivno interferenco.

Ta geometrijski pogoj je izražen z Braggovim zakonom (Cullity in Stock, 2001; Giacovazzo in sod., 2011):

$$n\lambda = 2\, d_{hkl} \sin\theta$$

kjer je:

- λ valovna dolžina rentgenskega sevanja,
- d_{hkl} razdalja med kristalnima ravninama,
- θ kot med vpadnim žarkom in kristalografsko ravnino,
- n celo število (red difrakcije).

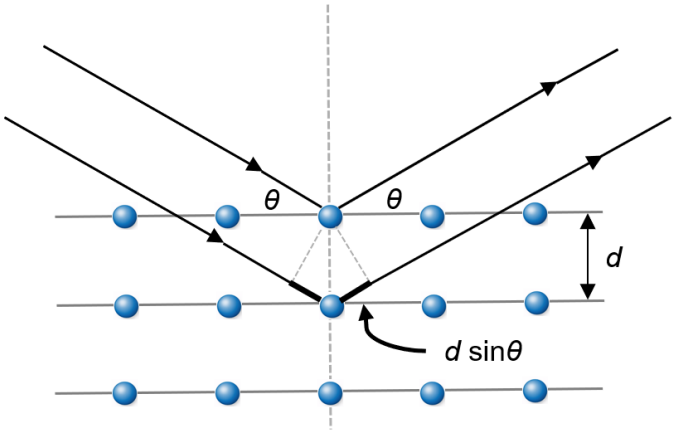
Braggov zakon ni temeljni fizikalni zakon, temveč geometrijski pogoj, izpeljan iz valovne interference. Pove nam, kdaj lahko pride do difrakcije, ne pa, kako intenzivna bo.

Ključno je razumeti, kaj nam Braggov zakon pove in česa nam ne pove.

Braggov zakon:

- povezuje difrakcijske kote z razdaljami med kristalnimi ravninami,

- omogoča določitev mrežnih parametrov,
- velja enako za monokristale in praškaste vzorce.



Slika 9: Shematski prikaz Braggovega zakona.
Vir: lasten.

Braggov zakon **ne**:

- določa intenzitet uklonskih vrhov: pove nam le, pri katerem kotu (θ) se bo pojavil difrakcijski maksimum, ne more pa napovedati, kako močan bo ta signal.
- vsebuje kemijske informacije: enačba upošteva le geometrijsko medravninsko razdaljo d_{hkl} in valovno dolžino (λ), popolnoma pa ignorira vrsto in razporeditev atomov v kristalu. Te omejitve bodo kasneje postale bistvene.

V difrakcijskih eksperimentih se intenzitete običajno beležijo kot funkcija kota 2θ, ki predstavlja kot med vpadnim in uklonjenim žarkom, zgolj zaradi geometrije instrumenta in ne iz fizikalne nujnosti.

Vsak uklonski vrh ustreza določeni družini mrežnih ravnin, ki izpolnjujejo Braggov pogoj. Vrhovi pri večjih kotih ustrezajo manjšim razdaljam

Na tej stopnji je pomembno poudariti:

- položaji vrhov so določeni z geometrijo kristala,
- intenzitete vrhov so odvisne od strukture (obravnavamo kasneje),
- širine vrhov vsebujejo informacijo o neurejenosti in velikosti (obravnavamo kasneje).

Pri monokristalu pride do difrakcije le takrat, ko je kristal orientiran tako, da je za določen niz ravnin izpolnjen Braggov pogoj. Rezultat so diskretne točke oz. pike.

Pri praškastem vzorcu so kristali hkrati prisotni v vseh možnih orientacijah. Zato je Braggov pogoj za vsak niz ravnin izpolnjen pri značilnem kotu, kar vodi do difrakcijskih obročev ali vrhov (Cullity in Stock, 2001).

Ta razlika je geometrijska, ne kemijska.

Podrobnejša primerjava sledi v naslednjem podpoglavju.

Preden nadaljujete, skrbno premislite o naslednjem:

- Če imata dva materiala enake mrežne parametre, vendar različni osnovi (motiva), ali bodo ukloni pri enakih kotih?
- Ali lahko Braggov zakon napove ali bo uklonski vrh močan ali šibek?
- Ali povečanje valovne dolžine rentgenskega sevanja poveča ali zmanjša uklonski kot za dani niz ravnin?

Ne računajte. Razmišljajte.



razmislek

Braggov zakon je pogosto predstavljen kot enačba rentgenske difrakcije. To je zavajajoče. Braggov zakon pove, kje se pojavijo uklonski vrhovi, ne pa, zakaj so nekateri vrhovi odsotni ali zakaj se intenzitete med posameznimi ukloni močno razlikujejo.

Za odgovor na ta vprašanja moramo uvesti:

- strukturni faktor,
- atomsko sipanje,
- simetrijsko pogojena selekcijska pravila.

To bo naloga naslednjega podpoglavja.

Povzetek poglavja

V tem poglavju smo ugotovili, da:

- je difrakcija posledica konstruktivne interference rentgenskih žarkov na periodični strukturi kristala,
- kristalna mreža določa geometrijski okvir in orientacijo kristalnih ravnin,
- Braggov zakon opredeljuje pogoje za nastanek difrakcije,
  - uklonski koti neposredno odražajo medravninske razdalje (d_{hkl}), ne vsebujejo pa kemijskih podrobnosti o vsebini osnovne celice.

Braggov zakon je torej nujen, vendar nepopoln opis difrakcije.

Univerzitetna založba
Univerze v Mariboru

4 Sipanje na atomih in kristalih – izvor intenzitete uklonov

V prejšnjem poglavju je bil Braggov zakon uveden kot geometrijski pogoj za konstruktivno interferenco rentgenskih žarkov, sipanih na vzporednih kristalnih ravninah. Braggov zakon določa, kje se pojavijo uklonski vrhovi, ne določa pa, ali bo posamezen uklon močan ali šibek, ali bo sploh opazen in kako se intenzitete razlikujejo med različnimi ukloni (hkl). Za obravnavo teh vprašanj je treba upoštevati, kako se rentgenski žarki sipajo na atomih in kako sipani valovi interferirajo. To poglavje uvaja fizikalni izvor intenzitet uklonov, začenši s sipanjem na enem atomu in nadaljujoč s sipanjem na kristalu.

Rentgenski žarki interagirajo predvsem z elektronskim oblakom atoma. Nihajoče električno polje vpadnega sevanja povzroči nihanje elektronov, ki nato ponovno sevajo elektromagnetno valovanje. Ta elastični proces je znan kot Thomsonovo sipanje. Sipano sevanje ima enako valovno dolžino kot vpadno sevanje, fazna razmerja pa so ohranjena. Vsak atom tako deluje kot sekundarni izvor sferičnih valov (Cullity in Stock, 2001).

4.1 Atomski sipalni faktor

Atom ne sipa rentgenskih žarkov kot točkovni objekt. Njegova elektronska gostota je prostorsko porazdeljena, zato je amplituda sipanja odvisna od sipalnega kota. Ta pojav opisuje atomski sipalni faktor, *f*:

$$f(\theta) = \int \rho(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

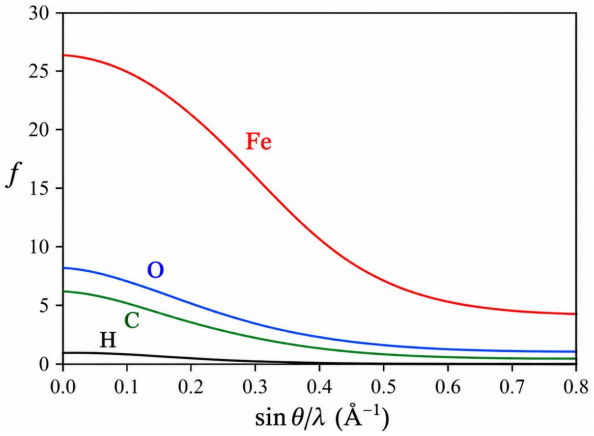
kjer:

- $\varrho(\mathbf{r})$ predstavlja elektronsko gostoto,
- $\mathbf{q}$ je sipalni vektor.

Atomski sipalni faktor se z naraščanjem sipalnega kota zmanjšuje in z naraščanjem atomskega števila povečuje. V prvem približku je *f* sorazmeren številu elektronov v atomu (Cullity in Stock, 2001).

To pojasnjuje, zakaj je rentgenska difrakcija bistveno bolj občutljiva na težke elemente kot na lahke (na primer železo v primerjavi s kisikom).

Kadar je prisotnih več atomov, lahko sipani valovi interferirajo konstruktivno ali destruktivno, odvisno od njihovih relativnih faz. Tudi pri majhnem številu atomov je končna intenziteta močno odvisna od njihovih medsebojnih položajev. V kristalu je število atomov, ki prispevajo k sipanju, zelo veliko, zato interferenčni učinki odločilno oblikujejo opazovani difrakcijski vzorec.



Slika 10: Odvisnsot struktrunega faktorja *f* od *sinθ/λ* za Fe, O, C in H. Vir: avtor, izračunano s Cromer–Mannovo parametrizacijo

Vir: podatki iz International Tables for Crystallography International Union of Crystallography, b. l.).

Skupno sipanje vseh atomov v osnovni celici opisuje strukturni faktor F_{hkl}. Strukturni faktor določa amplitudo uklonskega vrha, ki ustreza mrežnim ravninam z indeksi (hkl).[1] Strukturni faktor lahko zapišemo kot:

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{N} f_j \cos\left(2\pi\left(hx_j + ky_j + lz_j\right)\right) + i\sum_{j=1}^{N} f_j \sin\left(2\pi\left(hx_j + ky_j + lz_j\right)\right)$$

kjer:

– f_j predstavlja atomski sipalni faktor atoma j,
– (x_j,y_j,z_j) so delne koordinate atoma j v osnovni celici,
– vsota poteka po vseh atomih v osnovni celici.

Strukturni faktor lahko zapišemo bodisi v eksponentni obliki bodisi ekvivalentno kot vsoto sinusnih in kosinusnih členov; slednja predstavitev prikaže interferenčne učinke bolj eksplicitne.

Eksperimentalno izmerjena intenziteta uklona je sorazmerna kvadratu absolutne vrednosti strukturnega faktorja:

$$I_{hkl} \propto |F_{hkl}|^2$$

Izmerjena intenziteta je odvisna od kvadrata absolutne vrednosti strukturnega faktorja, ne od njegove faze (Cullity in Stock, 2001).

Strukturni faktor vsebuje informacijo o:

– kemijski sestavi (prek f_j)
– položajih atomov (prek faznih faktorjev),
– interferenci, pogojeni s simetrijo.

Pomembne posledice:

– nekateri odboji imajo lahko ničelno intenziteto (sistematična ugašanja).
– dva kristala z enakimi mrežnimi parametri, vendar različnima osnovama, lahko dajeta zelo različna uklonska vzorca.
– intenzitete, ne le položaji vrhov, vsebujejo strukturno informacijo.

Izguba fazne informacije je temeljna in leži v središču kristalografskega inverznega problema: uklonski eksperiment daje intenzitete, ne pa faz, ki so potrebne za rekonstrukcijo atomske strukture.

Pri določenih uklonih postane strukturni faktor natančno enak nič zaradi destruktivne interference, ki jo določa kristalna simetrija. Na primer, pri BCC velja: če je $h + k + l$ liho $\rightarrow F_{hkl}=0$. Pri FCC se ukloni pojavijo le, kadar so h, k in l vsi sodi ali vsi lihi (Cullity in Stock, 2001; Giacovazzo et al., 2011).

Sistematična ugašanja dajejo neposredno informacijo o centriranju mreže in simetrijskih elementih ter imajo ključno vlogo pri določanju strukture. Ne gre za eksperimentalne artefakte, temveč za temeljne posledice kristalne simetrije.

Povzetek poglavja

V tem poglavju smo prikazali, da:

- Braggov zakon določa položaje uklonskih vrhov, ne pa njihovih intenzitet,
- atomsko sipanje je odvisno od elektronske gostote in atomskega števila,
- intenzitete uklonov izvirajo iz interference valov, sipanih na atomih,
- strukturni faktor kodira kemijsko sestavo in razporeditev atomov,
- eksperimentalno je dostopna le absolutna vrednost strukturnega faktorja.

Ti pojmi predstavljajo temelj za razumevanje realnih uklonskih vzorcev in utemeljujejo potrebo po komplementarnih strukturnih metodah.

Univerzitetna založba
Univerze v Mariboru

5 Rentgenska praškovna difrakcija – naključna orientacija, položaj uklonov in intenzitete

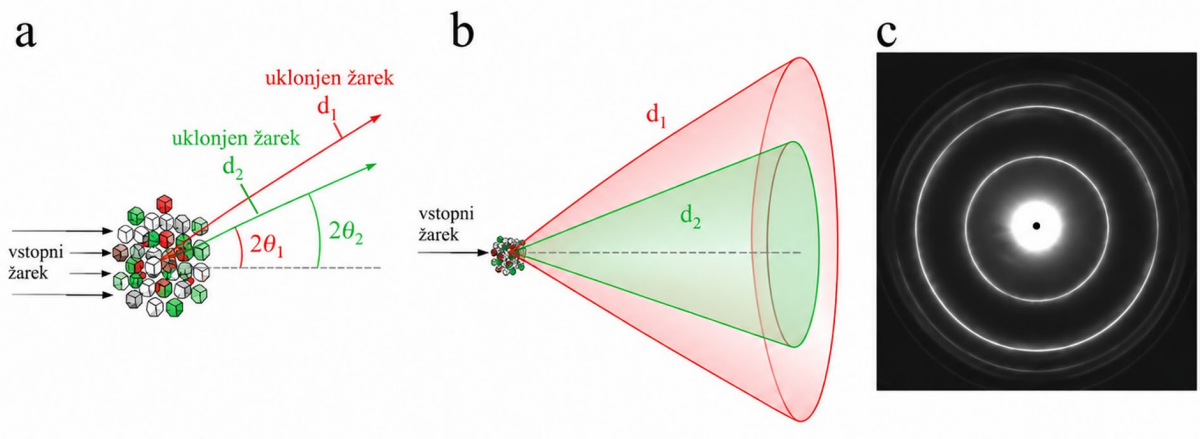
Monokristalna rentgenska difrakcija daje najbolj popolno strukturno informacijo, vendar iz eksperimentalnih razlogov zahteva **dovolj velike monokristale** (ki so v praksi pogosto težko dosegljivi brez realnih defektov pri rasti, kot sta dvojčičenje ali makroskopska mozaičnost). Na številnih področjih kemije in znanosti o materialih – zlasti pri keramiki, oksidih, katalizatorjih in nanomaterialih – takšnih monokristalov običajno ni mogoče vzgojiti. V teh primerih uporabljamo praškovno difrakcijo (PXRD). Fizikalni princip metode ostaja popolnoma enak – uklon na kristalni strukturi –, vendar PXRD izkorišča povprečenje po orientacijah. Ker je praškasti vzorec sestavljen iz ogromnega števila mikroskopskih kristalitov, ki so orientirani povsem naključno v vseh smereh prostora, bodo za vsak določen niz mrežnih ravnin (hkl) vedno obstajali kristaliti, ki natanko izpolnjujejo Braggov pogoj. Posledično se vsi geometrijsko dovoljeni ukloni pojavijo hkrati, uklonski vrhovi pa nastanejo pri fiksnih kotih, ki jih določajo razdalje med ravninami (Cullity in Stock, 2001; Dinnebier in Billinge, 2008).

Ta razlika v orientaciji ključno vpliva na obliko eksperimentalnega signala:

– pri monokristalni difrakciji je Braggov pogoj izpolnjen le pri določenih orientacijah kristala, kar na detektorju povzroči nastanek diskretnih pik (refleksov).

– pri praškovni difrakciji pa vsak niz ravnin (hkl) prispeva sipanje iz velikega števila različno zasukanih kristalitov. Ti uklonjeni žarki v prostoru izrišejo stožec uklonjene intenzitete (Debye–Scherrerjev stožec), ki dvodimenzionalni detektor seka v obliki uklonskega obroča. Pri standardnem enodimenzionalnem zajemu podatkov te obroče integriramo v klasičen 1D difraktogram, kjer vsak vrh ustreza določeni medravninski razdalji.

Zaradi te eksperimentalne dostopnosti in enostavnosti priprave vzorcev je praškovna difrakcija postala najpogosteje uporabljena difrakcijska tehnika v kemiji (Cullity in Stock, 2001).



Slika 11: V praškastem vzorcu več kristalitov izpolnjuje Braggov pogoj (a) in tvori stožec uklonjene intenzitete (b), ki se pri zajemu z dvodimenzionalnim detektorjem pokaže kot obroči (c).
Vir: lasten.

Lega uklonov v difraktogramu je določena izključno z valovno dolžino rentgenskega sevanja in razdaljo med ravninama d_{hkl}. Pri znani valovni dolžini lega uklonov omogoča določitev parametrov osnovne celice in njene geometrije, prav tako pa s pomočjo primerjave referenčnih difraktogramov omogoča identifikacijo kristaliničnih faz v vzorcu.[1,4] Sistematična ugašanja pa dajejo dodatno informacijo o centriranosti in simetriji celice. Kemijska sestava in razpored atomov oz. sprememba v kemijski sestavi in razporedu atomov lahko vplivata na položaj uklonov posredno, če takšna sprememba spremeni parametre in simetrijo celice. Intenzitete uklonov primarno zavisijo od vrednosti strukturnega faktorja in števila simetrijsko ekvivalentnih ravnin, ki prispevajo k uklonu. To število imenujemo multipliciteta (večkratnost), večja vrednost običajno pomeni močnejšo intenziteto za uklon, povezan s to ravnino(Cullity in Stock, 2001).

Rietveldova izpopolnitev (metoda, refinement) je metoda prilagajanja celotnega difraktograma, ki primerja eksperimentalni difraktogram z izračunanim iz strukturnega modela (Dinnebier in Billinge, 2008). Namesto analiziranja posameznih uklonov metoda izpopolnjuje parametre, kot so parametri celice, delež kristaliničnih faz, položaje atomov, obliko uklona, preferenčno orientacijo kristalitov in ozadje simultano. Metoda je tako še posebej uporabna za kvantitativno (ni pa edina, deleže kristaliničnih faz je možno določiti tudi z umeritveno krivuljo ali metod standardnega dodatka) analizo ter testiranje, ali je predpostavljeni strukturi model konsistenten z izmerjenim uklonskim vzorcem (difraktogramom). Seveda pa kakovost rezultatov močno zavisi od pravilnosti predpostavljenega modela, kakovosti podatkov, prekrivanja uklonov in števila parametrov, ki jih izpopolnjujemo. Dobro prileganje (numeričen fit) samo po sebi ne dokazuje, da je strukturni model edinstven ali kemijsko smiseln (Dinnebier in Billinge, 2008).

Okvir 1.1: Preferenčna orientacija v prahovih nanodelcev

V idealnem prahu so kristaliti naključno orientirani. V nekaterih vzorcih delcev pa ta pogoj pogosto ni izpolnjen. Ploščati ali paličasti delci se lahko med pripravo vzorca poravnajo. Posledično se nekateri uklonski vrhovi pojavijo nenormalno močni ali šibki, čeprav mrežni parametri in kristalna struktura ostanejo nespremenjeni.

Preferenčna orientacija vpliva na opazovane intenzitete, ne pa na položaje vrhov.

Okvir 1.2: Bimodalna porazdelitev velikosti kristalitov

Nanoprah lahko vsebuje zelo majhne in bistveno večje kristalite. Uklonski vrhovi lahko zato vsebujejo tako široke kot ozke komponente.
Ena sama povprečna velikost kristalitov, izračunana iz takšnega vzorca, je lahko zavajajoča.

Okvir 1.3: Anizotropna kristaliničnost in širjenje vrhov

Delci z anizotropno obliko (ploščice, palčke) lahko kažejo širjenje vrhov, ki je odvisno od kristalografske smeri.

Povzetek poglavja

Praškovna difrakcija temelji na povprečenju po naključnih orientacijah kristalitov, kar omogoča ugotavljanje geometrije in simetrije mreže. Položaji vrhov kodirajo razdalje med ravninami, intenzitete pa odražajo strukturni faktor in multipliciteto. Praškovna difrakcija je zato močno, vendar nepopolno strukturno orodje.

Rentgenska difrakcija: konceptualni zaključek

Rentgenska difrakcija oz. uklonska analiza (XRD) preiskuje periodično urejenost v kristaliničnih materialih.

Zagotavlja informacijo o geometriji mreže, simetriji in povprečni strukturi. Položaji uklonskih vrhov so določeni z razdaljami med ravninami (»fingerprint« kristalinične trdnine), medtem ko so intenzitete uklonov odvisne od razporeditve atomov.

XRD ne more neposredno določiti lokalne neurejenosti, morfologije delcev ali položajev atomov brez dodatnih predpostavk.

Uklonski eksperimenti merijo zgolj intenzitete, ki so sorazmerne $|F_{hkl}|^2$ uklona, ne pa faz uklonjenih žarkov. Za rekonstrukcijo elektronske gostote potrebujemo amplitude in faze, zato imenujemo ta manjkajoči podatek o fazah kristalografski fazni problem. V praksi manjkajočo informacijo o fazi posredno pridobimo iz simetrije, poznavanja kemijske sestave, matematičnih metodam ali iz začetnega strukturnega modela, ki ga potem izpopolnimo glede na eksperimentalne podatke, kar omogoča rekonstrukcijo elektronske gostote in atomske strukture (Dinnebier & Billinge, 2008).

XRD je zato najmočnejša v kombinaciji s komplementarnimi metodami, kot je elektronska mikroskopija, ki lahko daje strukturno informacijo v realnem prostoru ter lokalno informacijo o strukturi.

Praškovna difrakcija blesti, kadar jo uporabljamo za:

- identifikacijo in kvantifikacijo faz,
- določanje mrežnih parametrov,
- določanje velikosti koherentne domene (kristalit) in mikronapetosti,
- oceno kristaliničnosti,
- ugotavljanje simetrije in sistematičnih ugašanj.

Težavneje pa je, kadar jo želimo uporabiti za:

- reševanje kompleksnih neznanih struktur,
- razlikovanje med majhnimi razlikami v razporeditvi atomov,
- ugotavljanje lokalne neurejenosti.

Njene prednosti in omejitve moramo razumeti, da lahko metodo ustrezno uporabljamo.

Univerzitetna založba
Univerze v Mariboru

Literatura

Cullity, B. D., Stock, S. R. (2001). *Elements of X-ray diffraction* (3. izd.). Prentice Hall.
Dinnebier, R. E., Billinge, S. J. L. (Ur.). (2008). *Powder diffraction: Theory and practice*. Royal Society of Chemistry.
Giacovazzo, C., in sod. (2011). *Fundamentals of crystallography* (3. izd.). Oxford University Press.
International Union of Crystallography. (b. l.). *International tables for crystallography, Volume A: Space-group symmetry*. Wiley.

Priporočena literatura za nadaljnje branje

1. Cullity, B. D.; Stock, S. R. Elements of X-Ray Diffraction, 3rd ed. Prentice Hall, 2001.
(Klasika med učbeniki za uvod v XRD. Odlično pojasni Braggov zakon, strukturne faktorje, praškovno difrakcijo in širjenje uklonov.)

2. Giacovazzo, C. et al. Fundamentals of Crystallography, 3rd ed. Oxford University Press, 2011.
(Vključuje poglobljeno obravnavo simetrije, recipročnega prostora in določanja strukture.)

3. International Tables for Crystallography, Volume A: Space-Group Symmetry, Wiley.
(Absolutna referenca za simetrijo in sistematična ugašanja.)

4. Dinnebier, R. E.; Billinge, S. J. L. (Eds.) Powder Diffraction: Theory and Practice. Royal Society of Chemistry, 2008.
(Odlična sodobna referenca za praškovno difrakcijo in Rietveldovo izpopolnitev.)

5. Young, R. A. (Ed.) The Rietveld Method, Oxford University Press, 1993.
(Še zmeraj standarden tekst za Rietveldovo izpopolnitev.)

KRISTALNA STRUKTURA IN RENTGENSKA DIFRAKCIJA: UČNO GRADIVO PRI PREDMETU ANORGANSKA KEMIJA

SAŠO GYERGYEK
Univerza v Mariboru, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Maribor, Slovenija
saso.gyergyek@um.si

Delo predstavlja rentgensko difrakcijo (XRD) kot temeljno metodo za raziskovanje strukture kristaliničnih materialov, s poudarkom na konceptih, pomembnih za kemijo in znanost o materialih. Kristalne strukture so najprej opisane z mrežami, osnovnimi celicami, simetrijo in kristalografskimi ravninami, kar predstavlja geometrijski okvir za razumevanje difrakcije. Braggov zakon je nato predstavljen kot pogoj za konstruktivno interferenco ter povezan z medravninskimi razdaljami in položaji difrakcijskih vrhov. Atomsko sipanje in strukturni faktor sta uporabljena za razlago intenzitet, sistemskih izostankov in občutljivosti rentgenskih žarkov na različne elemente. Obravnava se nato razširi na praškasto difrakcijo, vključno z identifikacijo faz, velikostjo kristalitov, razširitvijo vrhov, prednostno orientacijo in Rietveldovo izpopolnitvijo. Posebna pozornost je namenjena nanomaterialom, pri katerih na difrakcijske vzorce vplivajo končna velikost kristalitov, deformacije, neurejenost in anizotropna kristaliničnost. Poglavje poudarja tako strukturne informacije, ki jih omogoča XRD, kot omejitve metode ter s tem utemeljuje uporabo komplementarne karakterizacije z elektronsko mikroskopijo.

DOI
https://doi.org/10.18690/um.fkkt.10.2026

ISBN
978-961-299-2224-8

Ključne besede:
kristalna struktura,
difrakcija,
simetrija,
nanodelci,
širitev uklonov

Univerzitetna založba Univerze v Mariboru

DOI
https://doi.org/
10.18690/um.fkkt.10.2026

ISBN
978-961-299-224-8

Crystal Strucure and X-ray Diffraction: Study Materials for Inorganic Chemistry

Sašo Gyergyek
University of Maribor, Faculty of Chemistry and Chemical Engineering, Maribor, Slovenia
saso.gyergyek@um.si

Keywords:
crystal structure,
diffraction,
symmetry,
nanoparticles,
peak broadening

This work introduces X-ray diffraction (XRD) as a fundamental method for investigating the structure of crystalline materials, with emphasis on concepts relevant to chemistry and materials science. Crystal structures are first described in terms of lattices, unit cells, symmetry, and crystallographic planes, providing the geometric framework required to understand diffraction. Bragg's law is then introduced as the condition for constructive interference and related to interplanar spacings and diffraction-peak positions. Atomic scattering and the structure factor are used to explain diffraction intensities, systematic absences, and the sensitivity of X-rays to different elements. The discussion then extends to powder diffraction, including phase identification, crystallite size, peak broadening, preferred orientation, and Rietveld refinement. Particular attention is given to nanoscale materials, where finite crystallite size, strain, disorder, and anisotropic crystallinity influence diffraction patterns. The chapter emphasizes both the structural information obtainable from XRD and its limitations, motivating complementary characterization by electron microscopy."

University of Maribor Press



Univerza v Mariboru

Fakulteta za kemijo
in kemijsko tehnologijo

