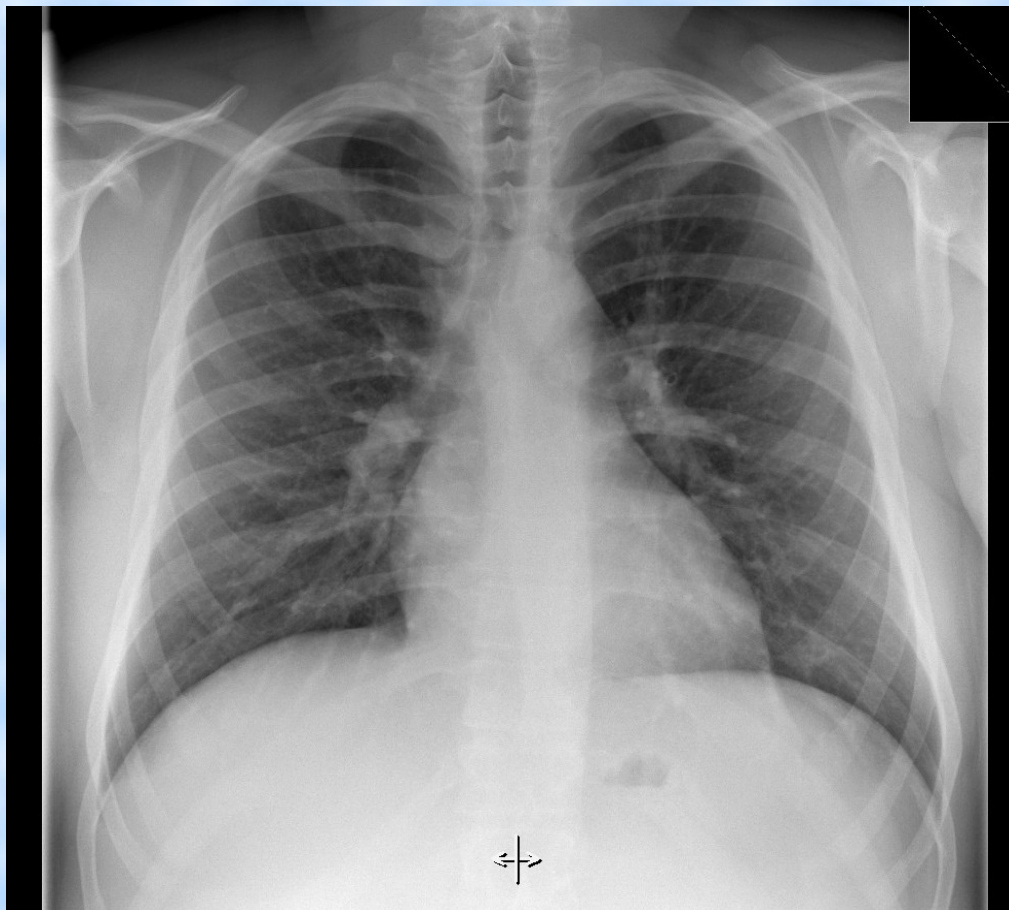
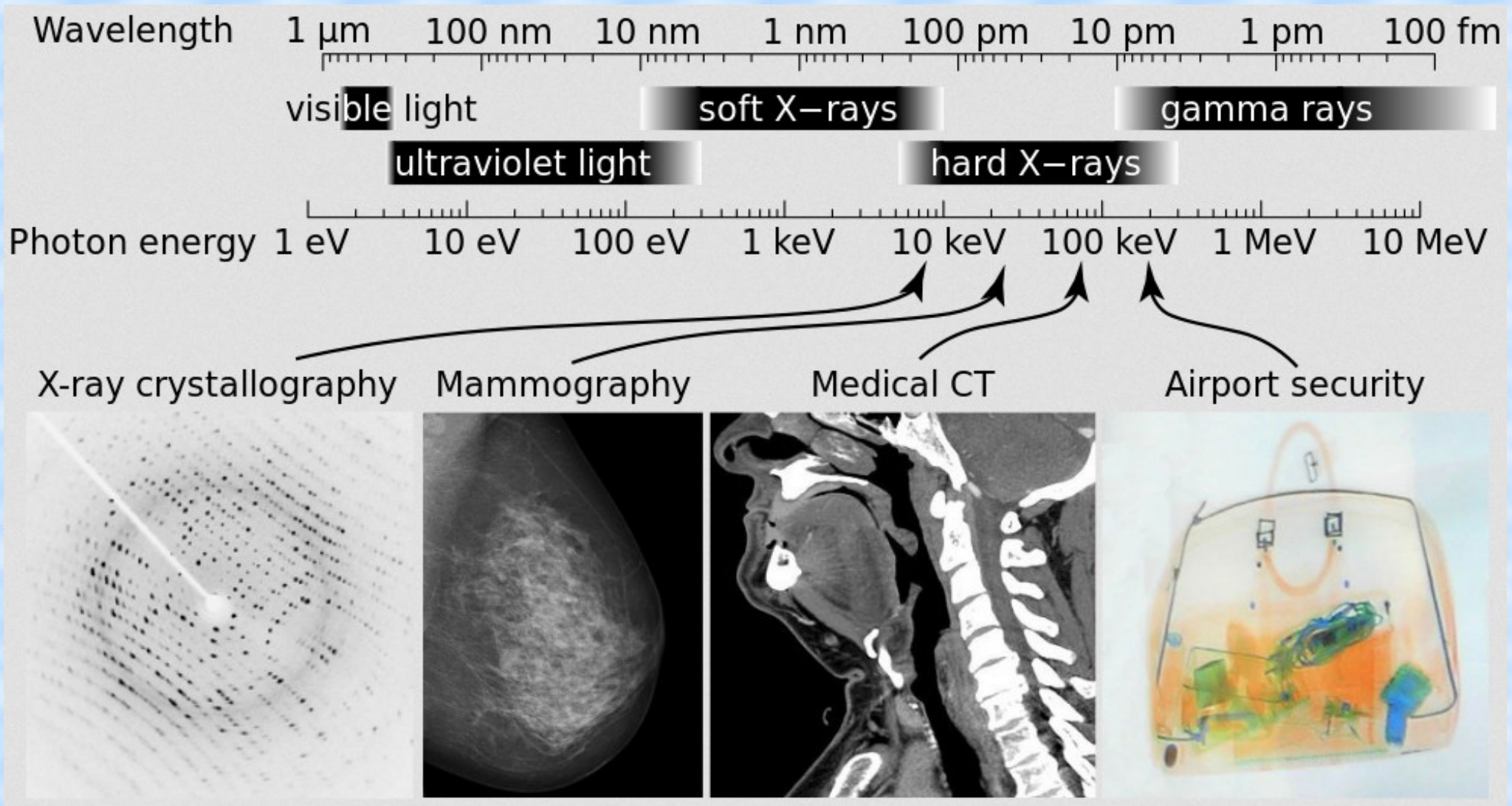


# Metody využívající rentgenové záření



- Rentgenografie, RTG prášková difrakce

# Rentgenovo záření



# Rentgenovo záření

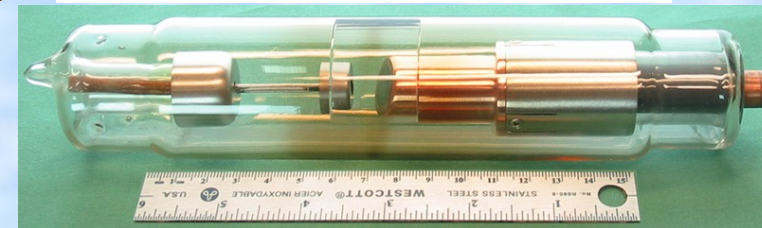
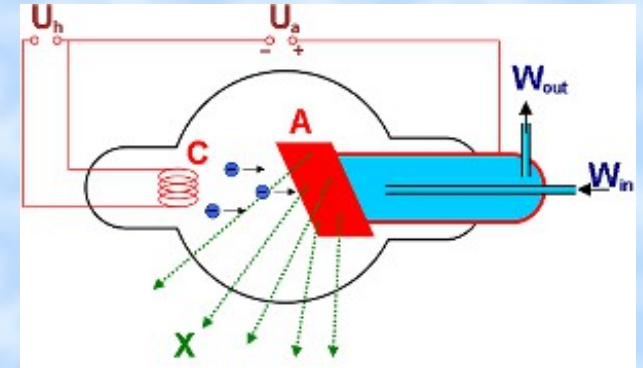
- X-Ray
- Elektromagnetické záření
- Ionizující záření
- 10 nm – 1 pm
- Využívá se v lékařství a krystalografii.



# Vznik rentgenova záření

- Rentgenky

- katodou je žhavený wolframový drát, který poskytuje elektrony.
- ty jsou vysokým napětím urychleny a dopadají na kovovou anodu.
- po dopadu se uvolňuje RTG záření.



- Synchrotron

- kruhový urychlovač částic (cyklotron).
- RTG záření vzniká při změně směru pohybu urychlených elektronů.

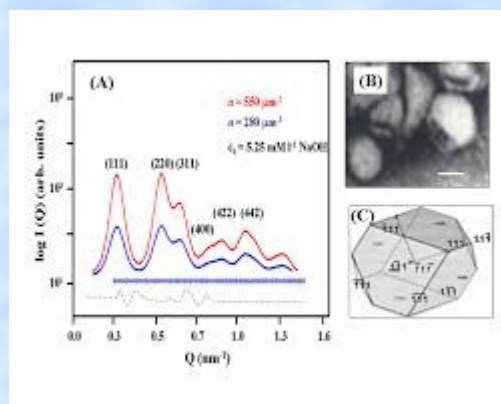
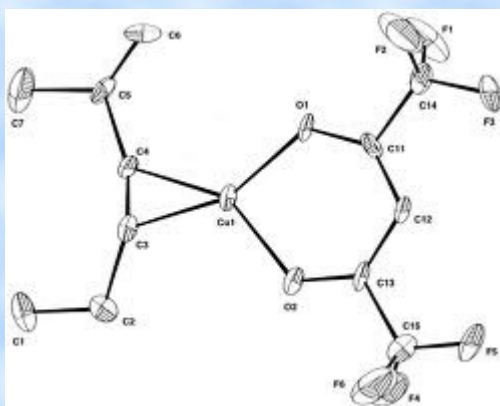


# Rentgenografie

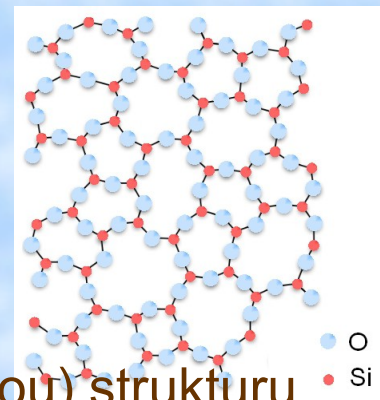
- Jedna z nejstarších nedestruktivních metod na testování materiálu.
- Využívá schopnosti RTG záření procházet materiálem.
- Při průchodu dochází k absorpci a rozptylu záření, v závislosti na vlastnostech materiálu.
- Jako detektor se využívají fotografické desky, scintilační detektory nebo CCD kamery.
- Metoda využívaná ve stavebnictví pro studium namáhání materiálů.

# Rentgenová krystalografie

- Studuje interakci rentgenova záření s krystalickým vzorkem.
- Monokrystalová – pro analýzu vyžaduje kvalitní monokrystal. Umožňuje zjistit chemickou strukturu vzorku.
- Prášková – pro analýzu stačí mikrokrytalický vzorek. Tato metoda poskytuje pouze parametry krystalové mřížky.



# Amorfní látky



- Amorfní látky jsou látky, které nemají pravidelnou (krystalickou) strukturu. Uspořádání částic je v těchto látkách náhodné, určité zákonitosti existují pouze v polohách navzájem sousedících atomů.
- Amorfní látky jsou považovány za izotropní, tj. mají ve všech směrech stejné fyzikální vlastnosti (např. mechanické, tepelné, optické apod.).
- Přestože jsou amorfní látky pevné, lze je pokládat za kapaliny s velmi vysokou viskozitou.
- Z energetického hlediska je krystalické uspořádání výhodnější než amorfní, proto je pro většinu pevných látek přirozené. Amorfní látky vznikají např. při rychlém ochlazení taveniny, kdy částice nemají dostatek času k vytvoření krystalu. Při zahřívání amorfní látky postupně měknou, až do teploty, kdy se rozpustí. Jejich teplotu tání tudíž nelze přesně určit, ale lze je charakterizovat pomocí oblasti měknutí, což je teplotní interval mezi pevnou a kapalnou fází.
- Mezi amorfní látky patří např. sklo, asfalt, vosk nebo pryskyřice.



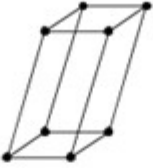
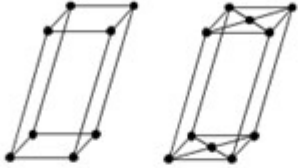
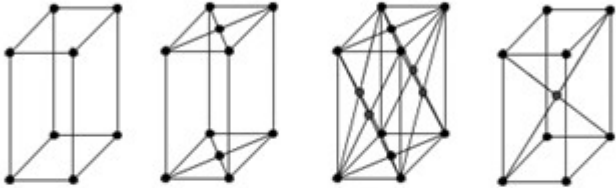
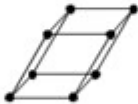
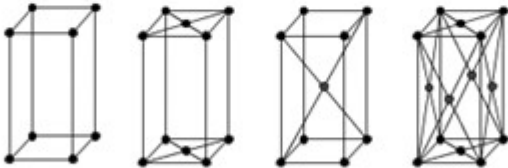
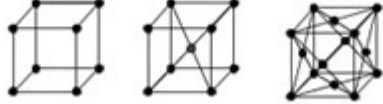
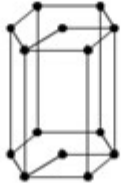
# Krystalické látky



- Krystal je pevná látka, v níž jsou stavební prvky (atomy, molekuly nebo ionty) pravidelně uspořádány v opakujícím se vzoru, který se zachovává na velké vzdálenosti (oproti atomárním měříkům). Struktura krystalu je tak určena základní jednotkou vzoru, nazývanou základní buňka, jejíž periodické opakování ve třech rozměrech tvoří krystalovou mřížku. Krystaly jsou obecně anizotropní.
- Pro krystal rovněž platí
  - krystal má pevné chemické složení a ostrý bod tání, který je pro danou látku charakteristický.
  - krystal má schopnost omezit svůj vnější tvar plochami, které se sbíhají v hranách a rozích.
- *Krystalové soustavy* – Podle počtu rovin souměrnosti, os souměrnosti a přítomnosti či nepřítomnosti středu souměrnosti můžeme krystalové tvary nerostů zařadit do skupin, které označujeme jako krystalové soustavy.



# Krystalografické soustavy

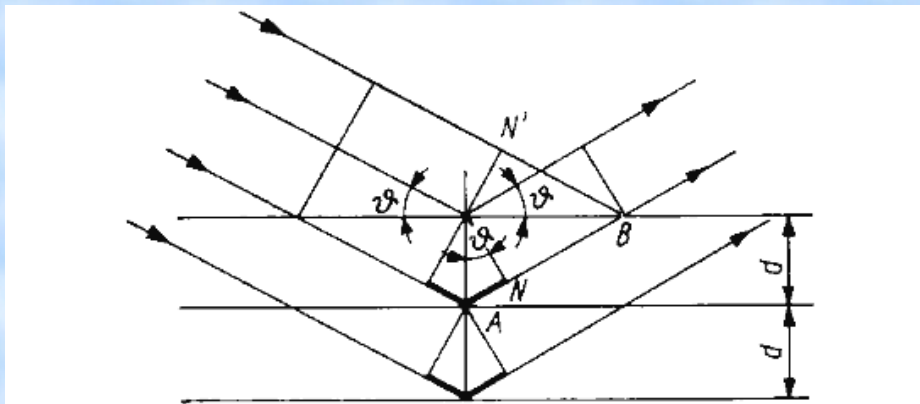
Soustava	Primitivní buňka	Charakteristika
trojklonná (triklinická)		$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
jednoklonná (monoklinická)		$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$
kosočtverečná (rombická)		$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
čtverečná (tetragonální)		$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
šesterečná (hexagonální)		$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
krychlová (kubická)		$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
klencová (trigonální)		$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$

# Braggův zákon

- Při studiu interakce krystalu s RTG zářením nás zajímá především difrakce.
- Dochází k ní na elektronech vzorku.
- Můžeme si ji představit jako konstruktivní interferenci RTG vln po ohybu primárního paprsku na elektronech difraktujícího atomu.
- Dochází k ní pouze, pokud je splněna Braggova rovnice.

$$n\lambda = 2d\sin\Theta$$

- $n$  – řád difrakce
- $\lambda$  – vlnová délka difraktovaného záření
- $d$  – mezirovinná vzdálenost
- $\Theta$  – úhel ohybu záření

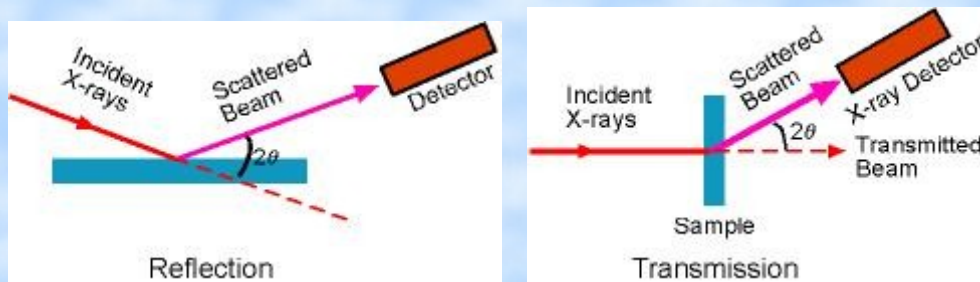


# Prášková RTG difrakce

- Pro difrakční experimenty je nutné mít k dispozici monochromatické RTG záření. K monochromatizaci se využívá buď filtrace nebo difrakce.
- Filtrace – využívá se materiálu, který propustí pouze úzkou oblast vlnových délek.
- Difrakce – kvalitnější, ale dražší metoda. Z Braggovy rovnice vyplývá, že když na krystal dopadá záření s rozdílnými vlnovými délkami, můžeme pozorovat difrakci pod úhlem, který je závislý na vlnové délce. Volba vhodného difrakčního úhlu je proto ekvivalentní volbě určité vlnové délky, která bude po difrakci ve zvoleném směru odcházet od krystalu.

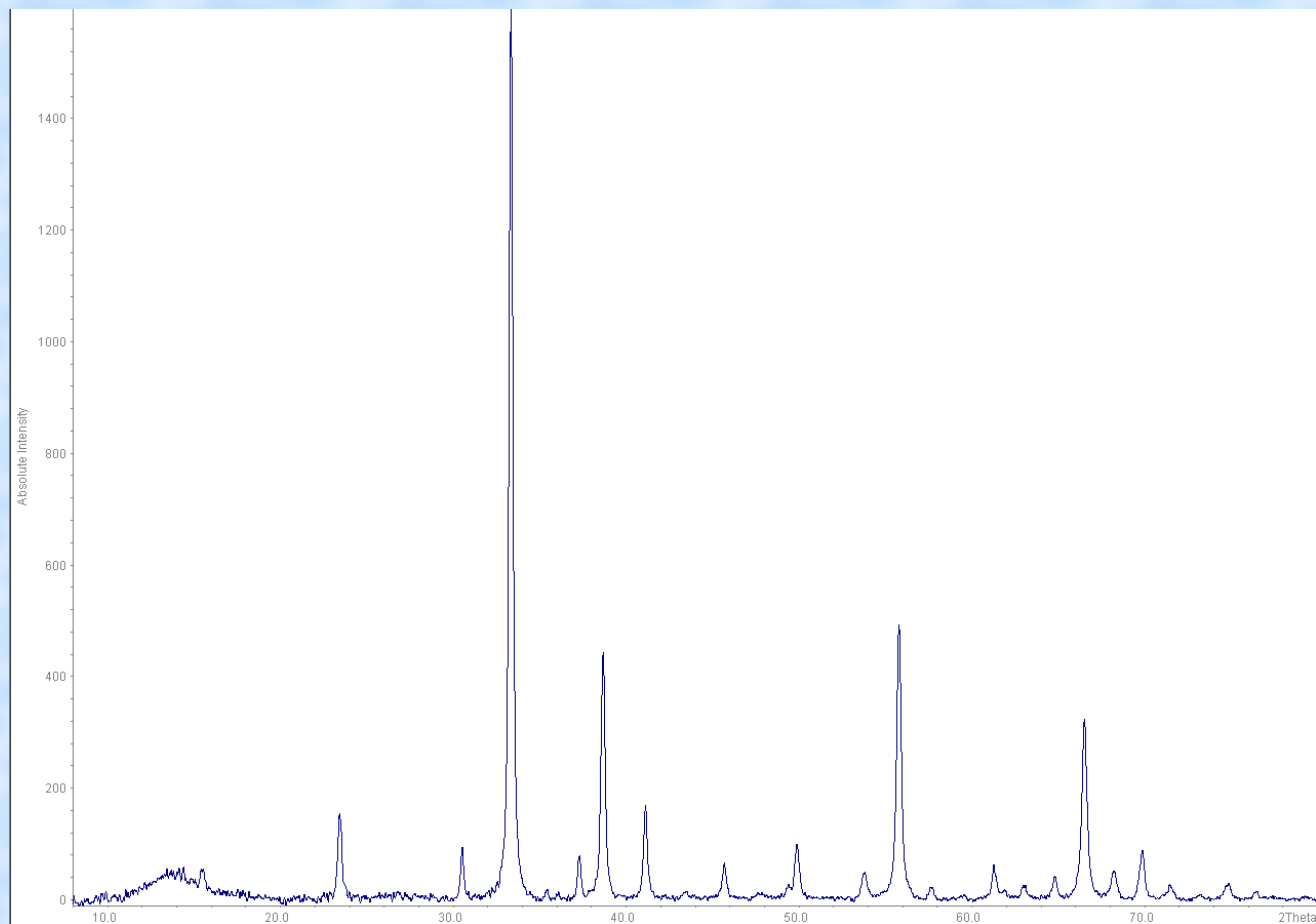
# Prášková RTG difrakce

- V praxi se využívají dvě experimentální uspořádání.
- Reflexní uspořádání
  - Není nutné mít k dispozici vzorek v práškovém stavu.
  - Umožňuje identifikaci minoritních fází.
- Transmisní uspořádání
  - Stačí relativně malé množství práškového vzorku.
  - Při průchodu vzorkem dochází k absorpci části záření.

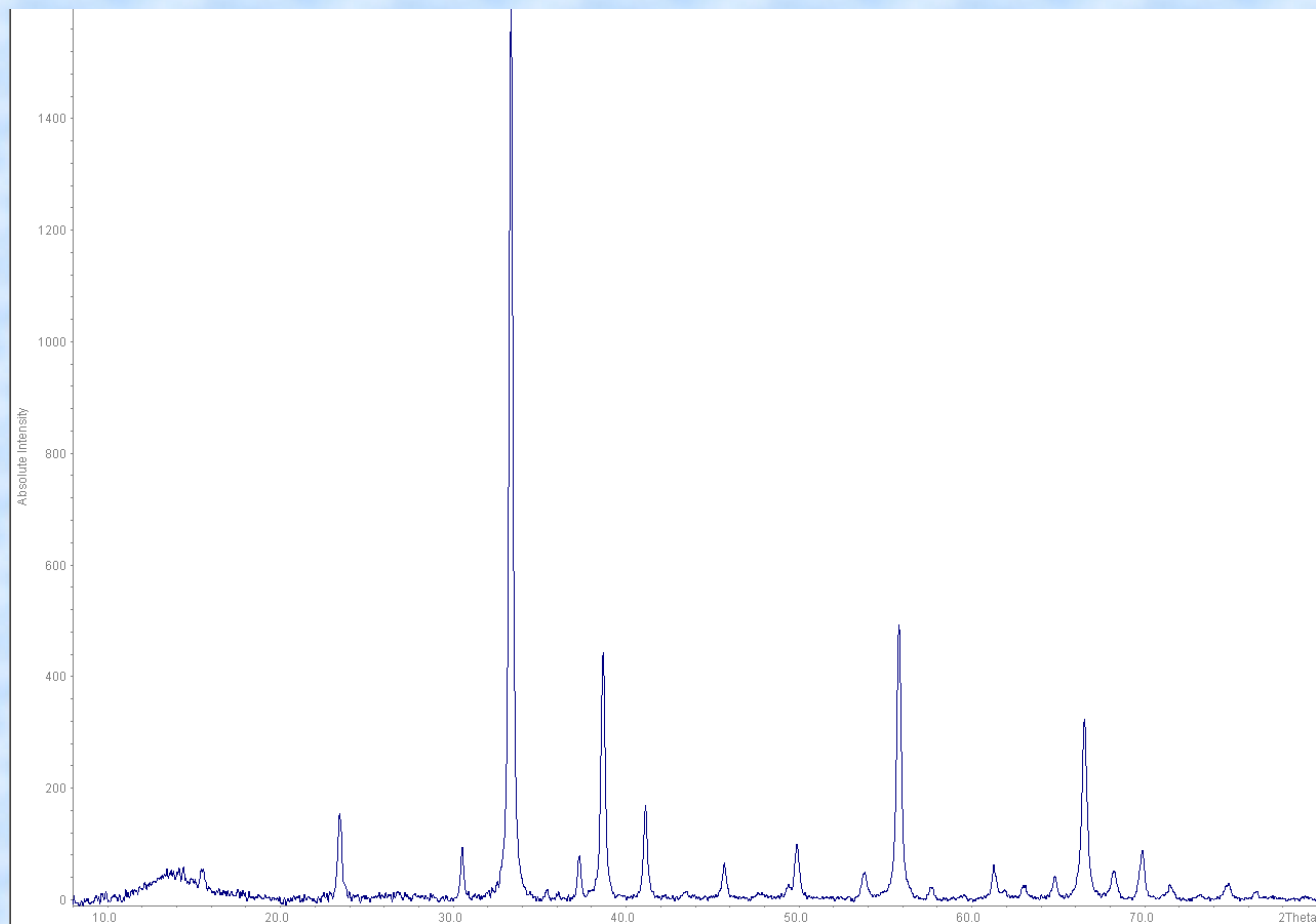




# Prášková RTG difrakce

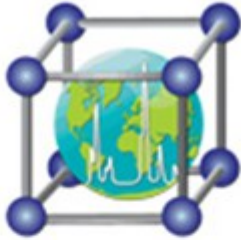


# Prášková RTG difrakce



# Databáze PDF-4

- The International Center for Diffraction Data
- <http://icdd.com>
- Umožňuje využití vyhledávacích programů pro identifikaci vzorku.
- Každý standard má přiděleno identifikační číslo.



**PDF-4+ 2012 Highlights**

Total No. of Datasets	328,660
<u>Source Distribution</u>	
00- Experimental	108,711
01- FIZ	59,927
02- CCDC	0
03-NIST	3,122
04-MPDS	156,900
<u>Subfile Distribution</u>	
Inorganic	297,574
Organic	37,094
<u>Fundamentals</u>	
No. of binaries	56,946
No. of ternaries	112,562
No. of quaternaries	87,158
No. $\geq$ 5 elements	68,514
<u>Quantitative Analysis Parameters</u>	
RIR - No with I/Ic	232,376
Rietveld - Total No. with Atomic Coordinates	171,856
Rietveld - No. with Cross-Referenced Atomic Coordinates	45,286
Pattern Fitting - Digital Patterns	328,660
<u>Crystallographic &amp; Bibliographic Data</u>	
Unit Cells - Author, Crystal and Reduced	297,411
Reference Citations	374,820
Journals	2,416

# Databáze PDF-4

Text: [21-1276]											
File  < << < > >> >  Short Options											
[21-1276]		PDF-2 Sets 1-46			Quality: *			Wavelength: 1.540598			
Titanium Oxide Rutile, syn titania Ti O2											
Rad.: CuKα1 (1.54056)		Filter: Mono.			d-sp:			Int.: Diffractometer			
I/Icor.:3.40		Cutoff:			Ref.: Natl. Bur. Stand. (U.S.) Monogr. 25, 7, (1969), 83						
Sys.: Tetragonal		S.G.: P42/mmm (136)			V(redu): 62.4						
a: 4.5933		b:		c: 2.9592		C: 0.6442					
A:		B:		C:		Z: 2		mp:			
Dx: 4.250		Dm: 4.230		SS/FOM: F30= 106.6 ( .0088, 32)							
ea: 2.9467		nwB: 2.6505		ey:		Sign: +		2V:			
Color: White											
Ref.: Dana's System of Mineralogy, 7th Ed., I, 575											
No impurity over 0.001%. // Sample obtained from National Lead Co., South Amboy, NJ, USA. // Pattern taken at 25 C. Two other polymorphs, anatase (tetragonal) and brookite // (orthorhombic), converted to rutile on heating above 700 C. Optical data on specimen from Dana's System of Mineralogy, 7th // Ed., I 555. Opaque mineral optical data on specimen from Sweden: R3R%=20.3, Disp.=Std., VHN100=1132-1187, Ref.: IMA Commission on Ore // Microscopy QDF. Pattern reviewed by Syvinski, W., McCarthy, G., North Dakota State Univ, Fargo, ND, USA, ICDD Grant-in-Aid (1990). Agrees well // with experimental and calculated patterns. // Additional weak reflections [indicated by brackets] were observed. // Validated by calculated pattern. // Naturally occurring material may be reddish brown.											
Hanawalt: 3.25/X 1.69/6 2.49/5 2.19/3 1.62/2 1.36/2 1.35/1 0.82/1 2.05/1 1.48/1											
Max-d: 3.25/X 2.49/5 2.30/1 2.19/3 2.05/1 1.69/6 1.62/2 1.48/1 1.45/1 1.42/1											
d[Å]	2Theta	Int.	h	k	l	d[Å]	2Theta	Int.	h	k	l
3.2470	27.447	100	1	1	0	1.0827	90.708	4	3	3	0
2.4870	36.086	50	1	0	1	1.0425	95.275	6	4	1	1
2.2970	39.188	8	2	0	0	1.0364	96.017	6	3	1	2
2.1880	41.226	25	1	1	1	1.0271	97.176	4	4	2	0
2.0540	44.052	10	2	1	0	1.0167	98.514	< 1	3	3	1
1.6874	54.323	60	2	1	1	0.9703	105.099	2	4	2	1
1.6237	56.642	20	2	2	0	0.9644	106.019	2	1	0	3
1.4797	62.742	10	0	0	2	0.9438	109.406	2	1	1	3
1.4528	64.040	10	3	1	0	0.9072	116.227	4	4	0	2
1.4243	65.480	2	2	2	1	0.9009	117.527	4	5	1	0



# Odkazy

- <http://cs.wikipedia.org/>
- <http://en.wikipedia.org/>
- [http://www.sci.muni.cz/~vavra/vyuka/RTG-difr/rtg\\_difr\\_index.htm](http://www.sci.muni.cz/~vavra/vyuka/RTG-difr/rtg_difr_index.htm)
- <http://www.webmineral.com/>
- <http://pd.chem.ucl.ac.uk/pd/welcome.htm>
- <http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/index-en.html>