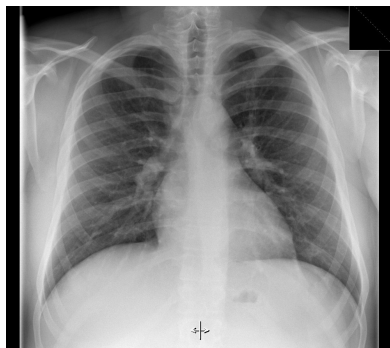


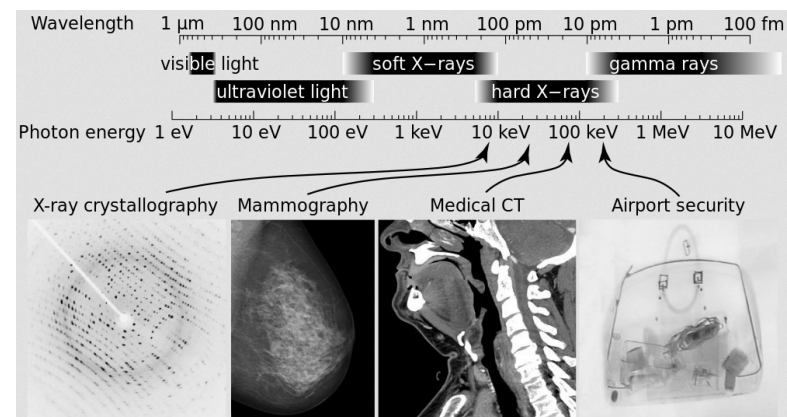
Metody využívající rentgenové záření



- Rentgenografie, RTG prášková difrakce

1

Rentgenovo záření



2

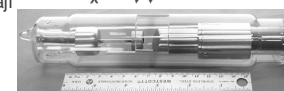
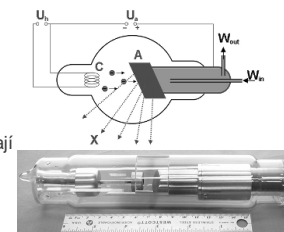
Rentgenovo záření

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

3

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.



4

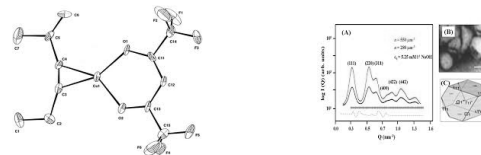
Rentgenografie

- 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.

5

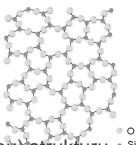
Rentgenová krystalografie

- 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.



6

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 amorfními látkami patří např. sklo, asfalt, vosk nebo pryskyřice.

7

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 měřítkům). Struktura krystalu je tak určená 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.

8

Krystalografické soustavy

Soustava	Průměrná brátka	Charakteristika
trojbojná (triklinická)		$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
jednobojná (monoklinická)		$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
isoedrová (rombická)		$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
čtvercová (tetragonální)		$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
šesterečná (hexagonální)		$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
krychlová (kubická)		$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
křencová (trigonalní)		$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 120^\circ$

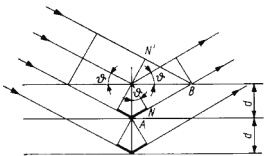
9

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 difrakujícího atomu.
- Dochází k ní pouze, pokud je splněna Braggova rovnice.

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

- n – řád difrakce
- λ – vlnová délka difraktovaného záření
- d – mezivrstevná vzdálenost
- θ – úhel ohybu záření



10

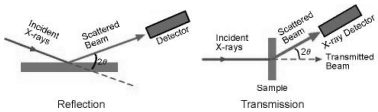
Prášková RTG difrakce

- 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.

11

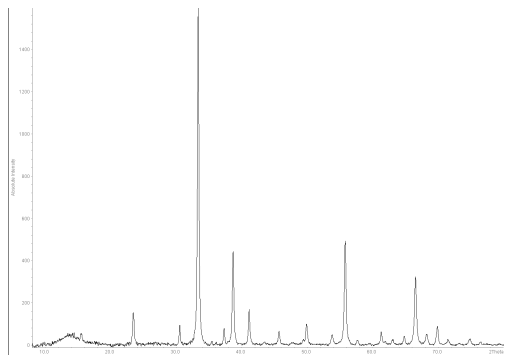
Prášková RTG difrakce

- 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.

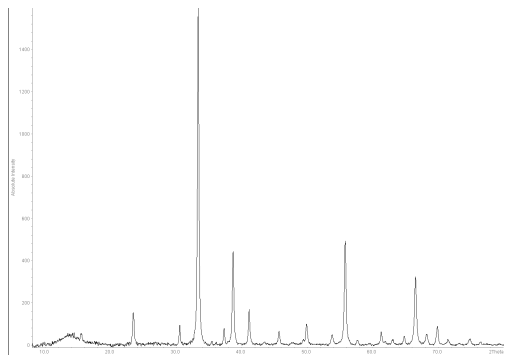


12

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

Source Distribution

00- Experimental	108,711
01- FIZ	59,927
02- CDC	0
03- MST	3,122
04- MPDS	156,900

Subfile Distribution

Inorganic	297,574
Organic	37,094

Fundamentals

No. of binaries	56,946
No. of ternaries	112,562
No. of quaternaries	87,158
No. ≥ 5 elements	68,514

Quantitative Analysis Parameters

RIR - No with I/c	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

Crystallographic & Bibliographic Data

Unit Cells - Author, Crystal and Reduced	297,411
Reference Citations	374,820
Journals	2,416

Databáze PDF-4

PDF-4+ 2012 Highlights

Total No. of Datasets 328,660

Source Distribution

00- Experimental	108,711
01- FIZ	59,927
02- CDC	0
03- MST	3,122
04- MPDS	156,900

Subfile Distribution

Inorganic	297,574
Organic	37,094

Fundamentals

No. of binaries	56,946
No. of ternaries	112,562
No. of quaternaries	87,158
No. ≥ 5 elements	68,514

Quantitative Analysis Parameters

RIR - No with I/c	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

Crystallographic & Bibliographic Data

Unit Cells - Author, Crystal and Reduced	297,411
Reference Citations	374,820
Journals	2,416

PDF-4+ 2012 Highlights

Total No. of Datasets 328,660

Source Distribution

00- Experimental	108,711
01- FIZ	59,927
02- CDC	0
03- MST	3,122
04- MPDS	156,900

Subfile Distribution

Inorganic	297,574
Organic	37,094

Fundamentals

No. of binaries	56,946
No. of ternaries	112,562
No. of quaternaries	87,158
No. ≥ 5 elements	68,514

Quantitative Analysis Parameters

RIR - No with I/c	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

Crystallographic & Bibliographic Data

Unit Cells - Author, Crystal and Reduced	297,411
Reference Citations	374,820
Journals	2,416

Odkazy

- <http://cs.wikipedia.org/>
- <http://en.wikipedia.org/>
- 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>