

# RTG fázová analýza

M. Žaludová  
V. Blechta  
L. Antal

Gymnázium Hořovice  
Gymnázium Jeseník  
Gymnázium Olomouc

[rachel.mz@seznam.cz](mailto:rachel.mz@seznam.cz)  
[luis.felipe@email.cz](mailto:luis.felipe@email.cz)  
[l.antal@tiscali.cz](mailto:l.antal@tiscali.cz)

## Abstrakt:

RTG fázová analýza je fyzikální metoda určující složení a strukturu krystalických materiálů pomocí koherentního rozptylu rentgenového záření. Na rozdíl od RTG fluorescenční analýzy, kterou se zjišťuje pouze chemické složení látky, dokáže fázová analýza rozlišit i různé fáze materiálu se stejným chemickým základem. Jde o metodu velmi přesnou a nedestruktivní. V tomto příspěvku je popsáno použití této metody pro určení fázového složení neznámého prášku.

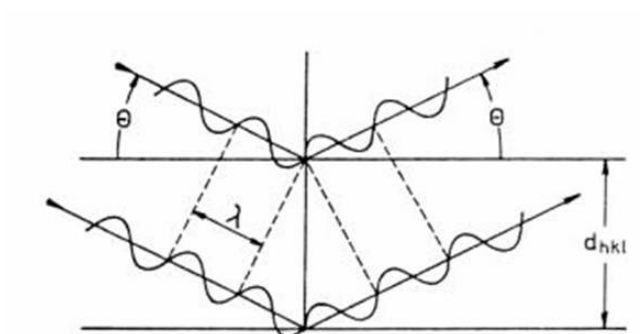
## 1 Úvod

Wilhelm Conrad Röntgen položil v roce 1895 základy RTG technologiím objevem paprsků X. V roce 1912 vlnovou povahu RTG záření popsal M. von Laue, který objevil difrakci RTG paprsků na krystalech a již tentýž rok popsal L. W. Bragg tento jev matematicky (Braggova rovnice).

Krystalickou mřížku si můžeme představit jako nekonečnou soustavu rovin. Jestliže na materiál dopadá RTG záření, dochází na jednotlivých krystalových rovinách k odrazu vlnění pod stejným úhlem, pod jakým záření dopadá, podobně jako v optice, při odrazu světla od rovinného zrcadla. Podmínka interferenčního maxima je, aby fázový rozdíl vln odražených od dvou následujících rovin byl právě  $2n\pi$ . To vyjadřuje právě Braggova rovnice:

$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin\theta \quad , \quad (1)$$

kde  $\lambda$  je vlnová délka dopadajícího RTG záření,  $d_{hkl}$  je meziroviná vzdálenost,  $\theta$  difrakční úhel (viz obr. 1) a  $n \in \mathbb{N}$ .



Obrázek 1 Popis interference vln odražených od dvou sousedních atomových rovinách v krystalu.

## 2 Experiment

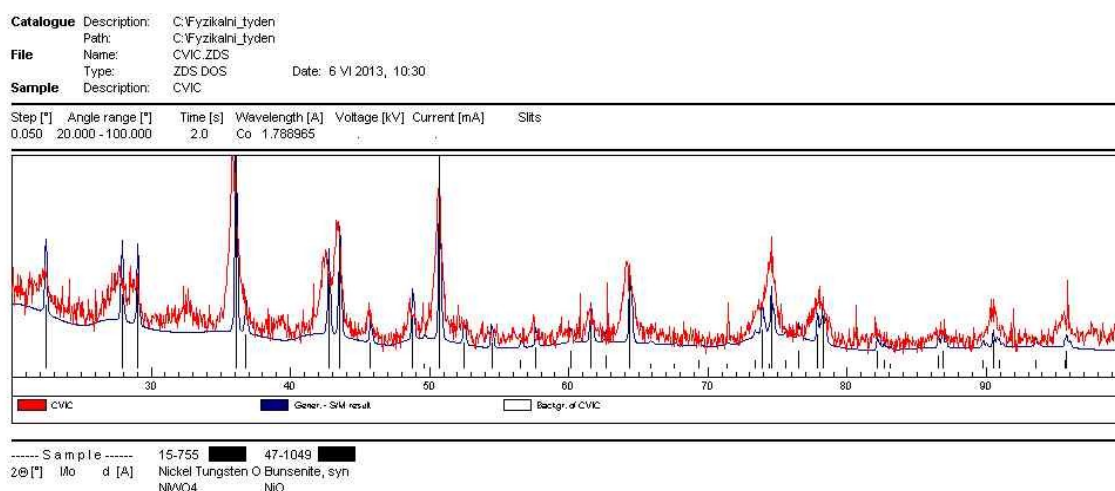
Materiál v podobě prášku byl přilepen na podkladní laboratorní skličko a vyhlazen do tenké rovné plochy. Po zaschnutí byl vložen do držáku vzorků difraktometru. Byl použit difraktometr zn. Siemens model Kristaloflex 4.

Parametry měření:

urychlovací napětí na rentgence .....30 kV  
 proud v rentgence.....20 mA  
 počáteční úhel  $2\theta$ ..... $20^\circ$   
 konečný úhel  $2\theta$ ..... $100^\circ$   
 úhlový krok  $\Delta\theta$ ..... $0,05^\circ$   
 expoziční doba v jednom kroku.....2 s  
 použité charakteristické záření.....Co

### 3 Výsledky a hodnocení

Pro zpracování získaných dat jsme použili program ZDS Search Match zpracovávající naměřený difrakční profil (odečtení pozadí, určení polohy difrakčních linií, výpočet integrální intenzity difrakčních linií) a hledající v databázi PDF2 (Powder Diffraction Files) materiály a jejich fáze, které nejlépe odpovídají naměřeným liniím. Výsledky zpracování jsou zachyceny na obrázku 2:



Obrázek 2 Výsledek fázové analýzy práškového vzorku (červeně – naměřená data, modře – numerická simulace)

Na základě zpracovaných dat jsme vyhodnotili tyto výsledky:

Vzorek obsahoval: kubický NiO ...(ICDD Card No. 47-1049)  
 monoklinický NiWO<sub>4</sub>...(ICDD Card No. 15-755)

## 4 Diskuse

Analýzou nebylo možné rozlišit zda NiO je v kubické nebo nízkosymetrické romboedrické fázi, protože difrakční linie obou fází jsou velmi blízké a při daném rozšíření difrakčních linií není možné je rozlišit.

## 5 Shrnutí

Zjistili jsme, že RTG fázová analýza je velmi zajímavý obor a umožňuje nám proniknout do tajemství duálního prostoru. RTG fázová analýza je využívána zejména tehdy, chceme-li se o materiálu dozvědět víc než jen jeho chemické složení, ale i jeho strukturu.

## Poděkování

Děkujeme FJFI za možnost realizování daných experimentů. Dále děkujeme ing. Markovi a ing. Sedlákovu za podporu a objasnění dané problematiky během experimentu.

## Reference:

[1] WWW.XRAY.CZ

[2] KRAUS, I.: *Struktura a vlastnosti krystalů* Academia, 1993,