

Hledání krystalové struktury materiálu

Martin Kalda

Garant: Mgr. Cinthia Antunes Correa PhD.

Cíl

Naším hlavním cílem bylo analyzovat strukturu neznámého vzorku krystalu z korku od vína za pomoci rentgenového difraktometru a výpočetního programu Jana2020 také určit jeho prvkové složení a zjistit jak vypadá jeho elementární buňka.

Difrakce

Difrakce je jevem, jenž nastává, když se vlnění ohýbá okolo nějakého objektu oproti kterému nemá vlnová délka zanedbatelnou velikost. v našem případě se jedná o rentgenové záření, které se ohýbá o atomy, které jsou v krystalické struktuře, kterou chceme pozorovat. Důvod ohybu rentgenového záření v tomto případě je jeho interakce s elektronovou hustotou atomů.



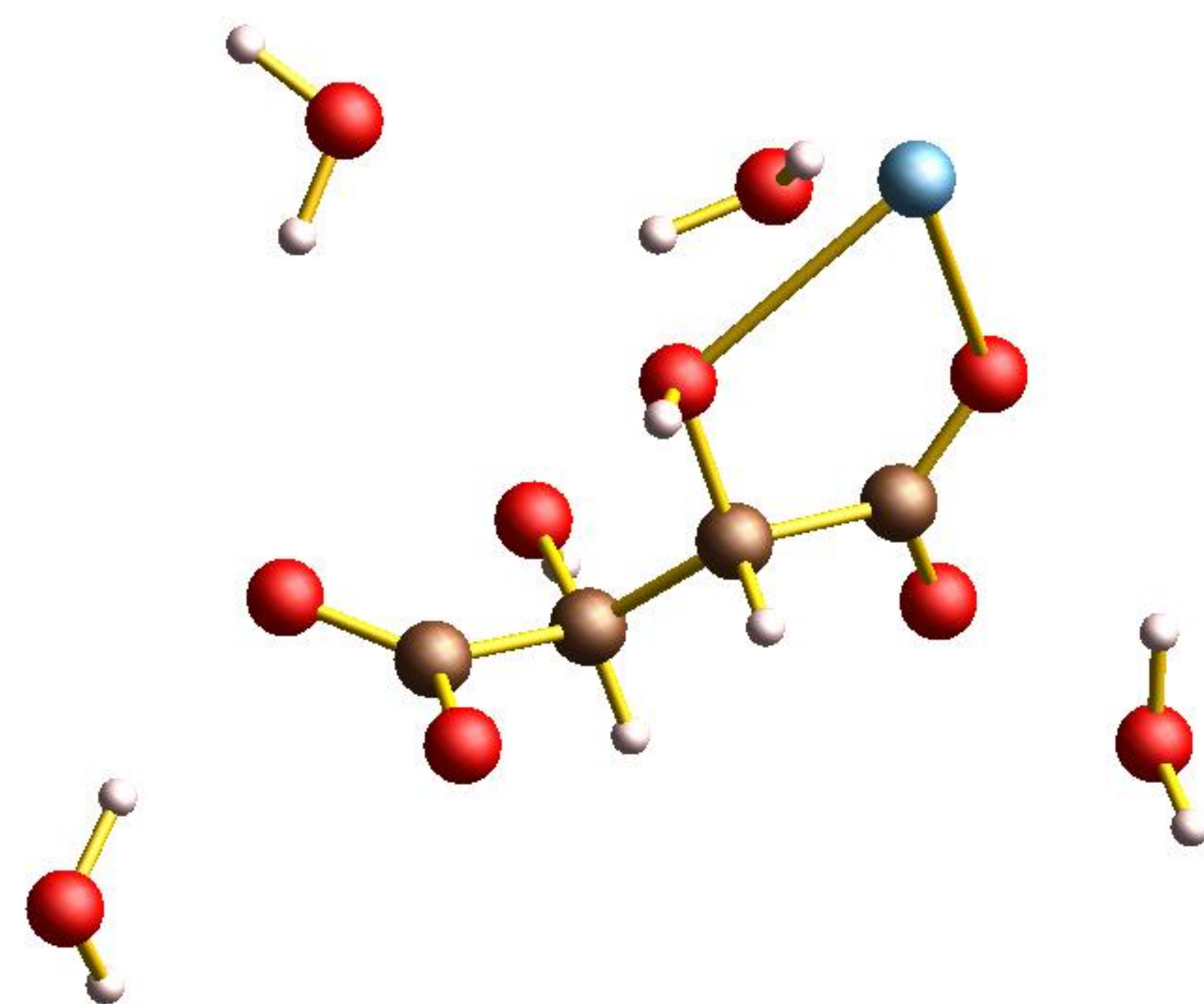
Metodika práce

Napřed jsme oddělili malý vzorek od naší krystalické látky a připevnili jej na skleněnou jehlu abychom jej mohli vložit do difraktometru a poté jsme měřili interakce mezi atomy a rentgenovým zářením pomocí poloh kam dopadaly difraktované rentgenové paprsky. Měření probíhalo na čtyřkruhovém difraktometru Gemini ultra při nastavených hodnotách: vlnová délka $\lambda=0.71073$ Å a teplotě $T=293$ K a celkový čas měření byl 1h 23m. Po dokončení měření jsme hodnoty nahráli do výpočetního programu Jana2020.

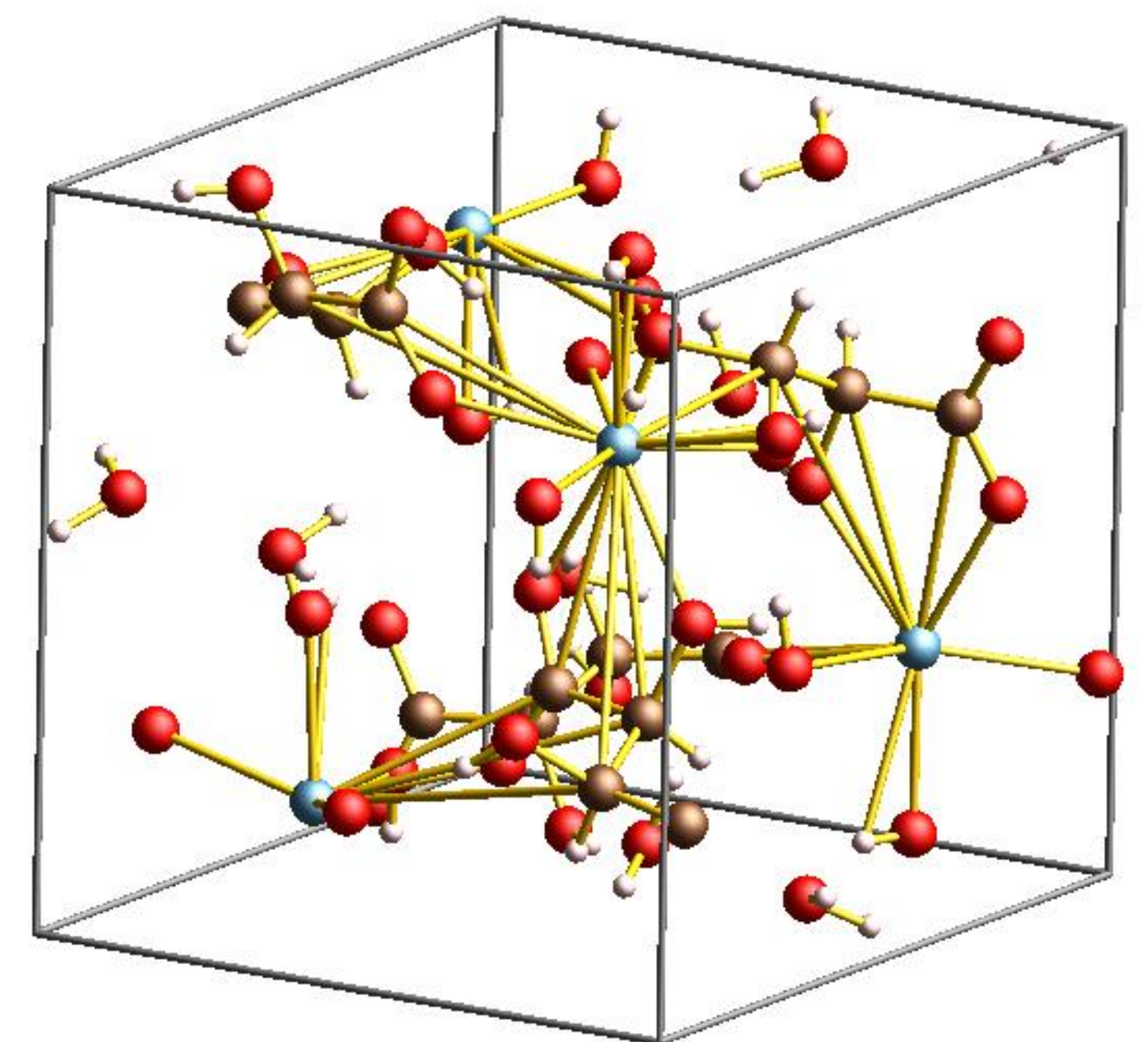
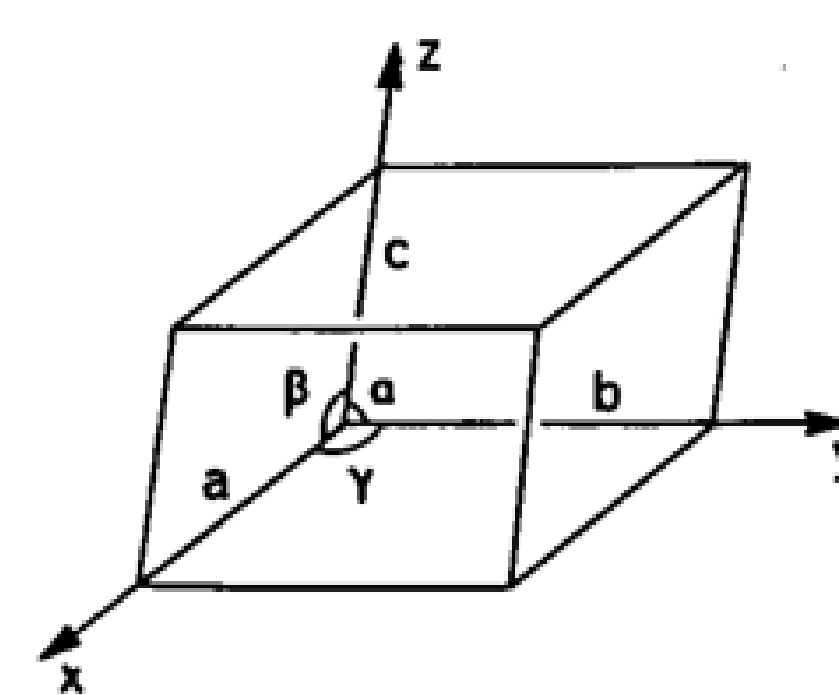


Zpracování naměřených hodnot

Ke zpracování výsledků jsme využili program Jana2020 který pomocí metody výpočtu superflip vypočítá kde se nachází atomy v dané krystalové mřížce. Poté vygeneruje obrázek jak takováto $C_4H_{10}Ca_1O_{10}$ molekula vypadá.



Elementární buňka krystalu je nejmenší opakující se jednotka celé krystalické struktury. Náš vzorek měl ortorombický tvar elementární buňky a to protože má odlišné délky a, b, c v krystalové mřížce a všechny jeho úhly jsou 90°



Závěr

Zjišťování struktury krystalu za pomoci difraktometru se ukázalo jako velmi efektivní a precizní metoda která se dá využít jak k zjišťování prvkového složení tak k vymodelování jejich struktury. Pro lepší prozkoumání daného materiálu by pomohlo vybrání dokonalejšího krystalu který má všechny elementární buňky orientovány jedním směrem tedy vybrání monokrystalu namísto dvojčat.

