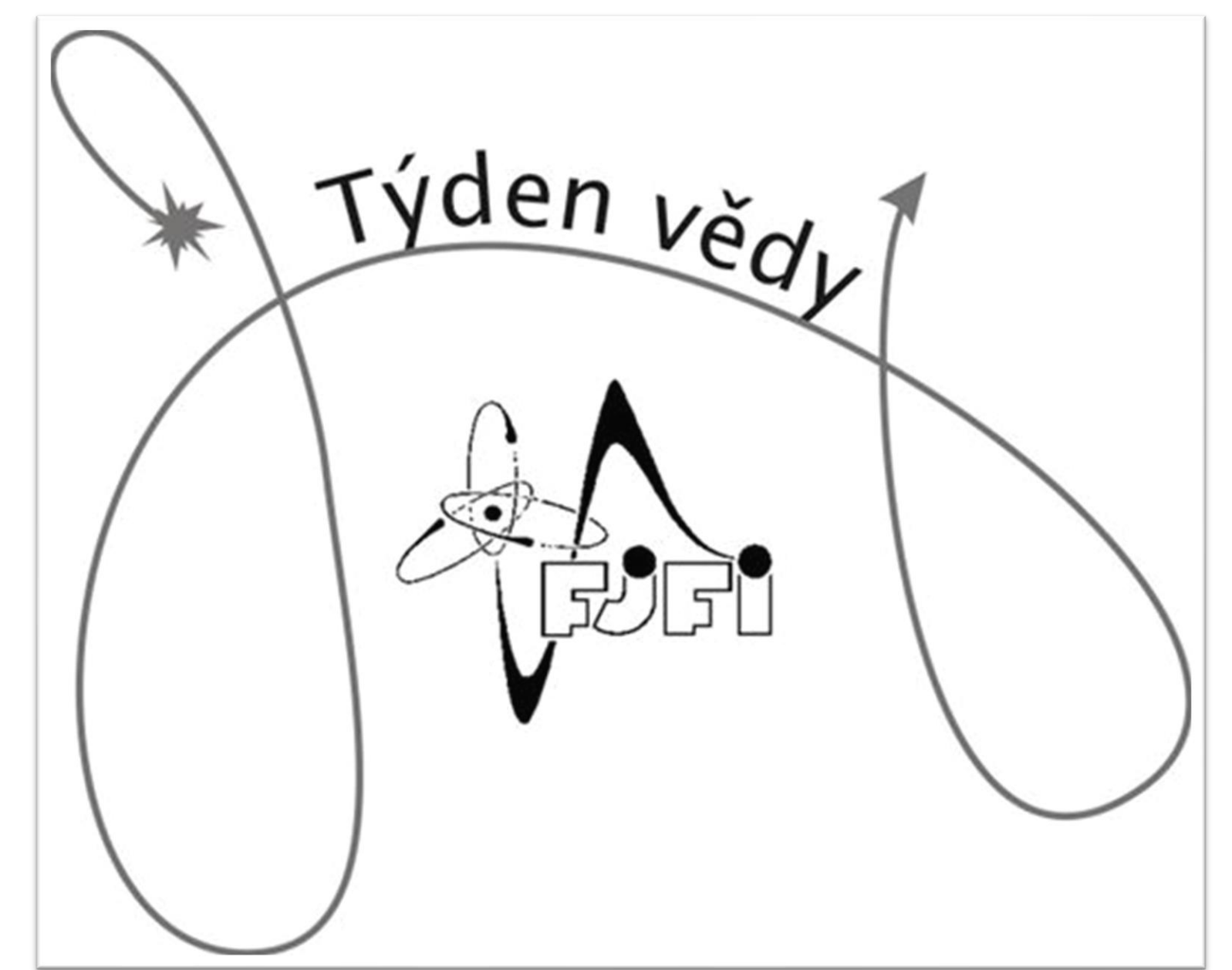


Lze pomocí rentgenu charakterizovat neznámou látku aneb co je to za bílý prášek?

Gymnázium Antona Bernoláka Senec

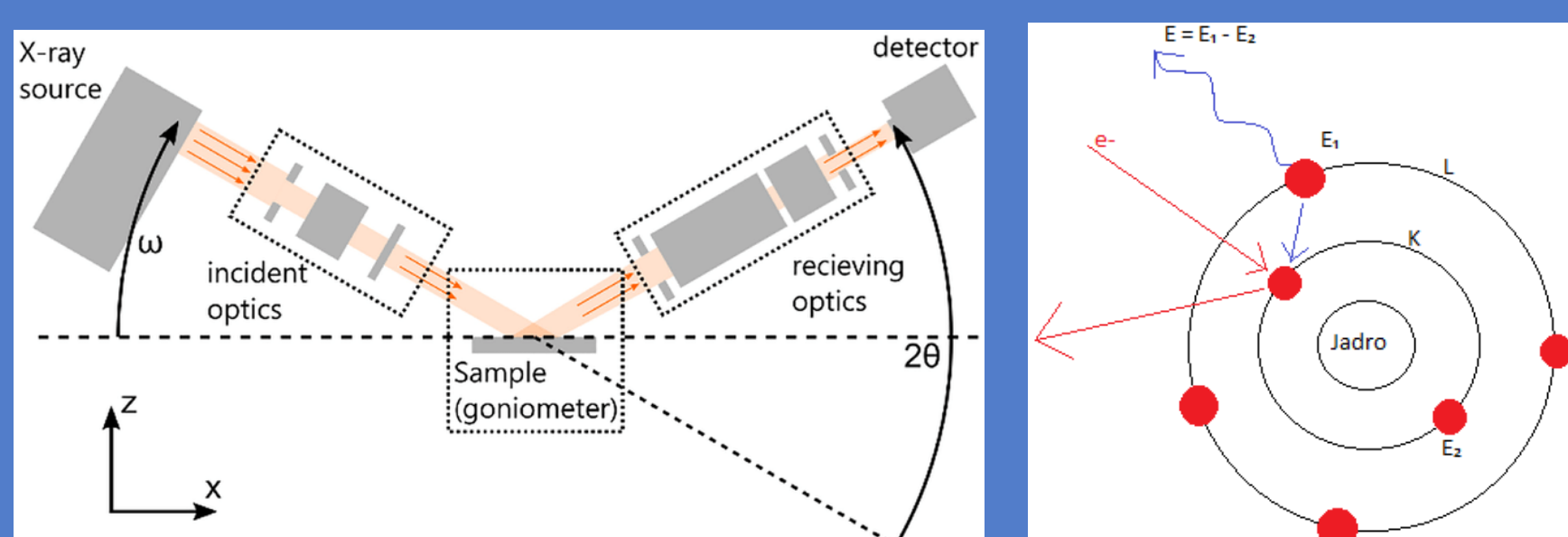
Júlia A. Moncol'ová,
Garant: Jiří Čapek



Difraktometer

Difraktometer pozostáva z

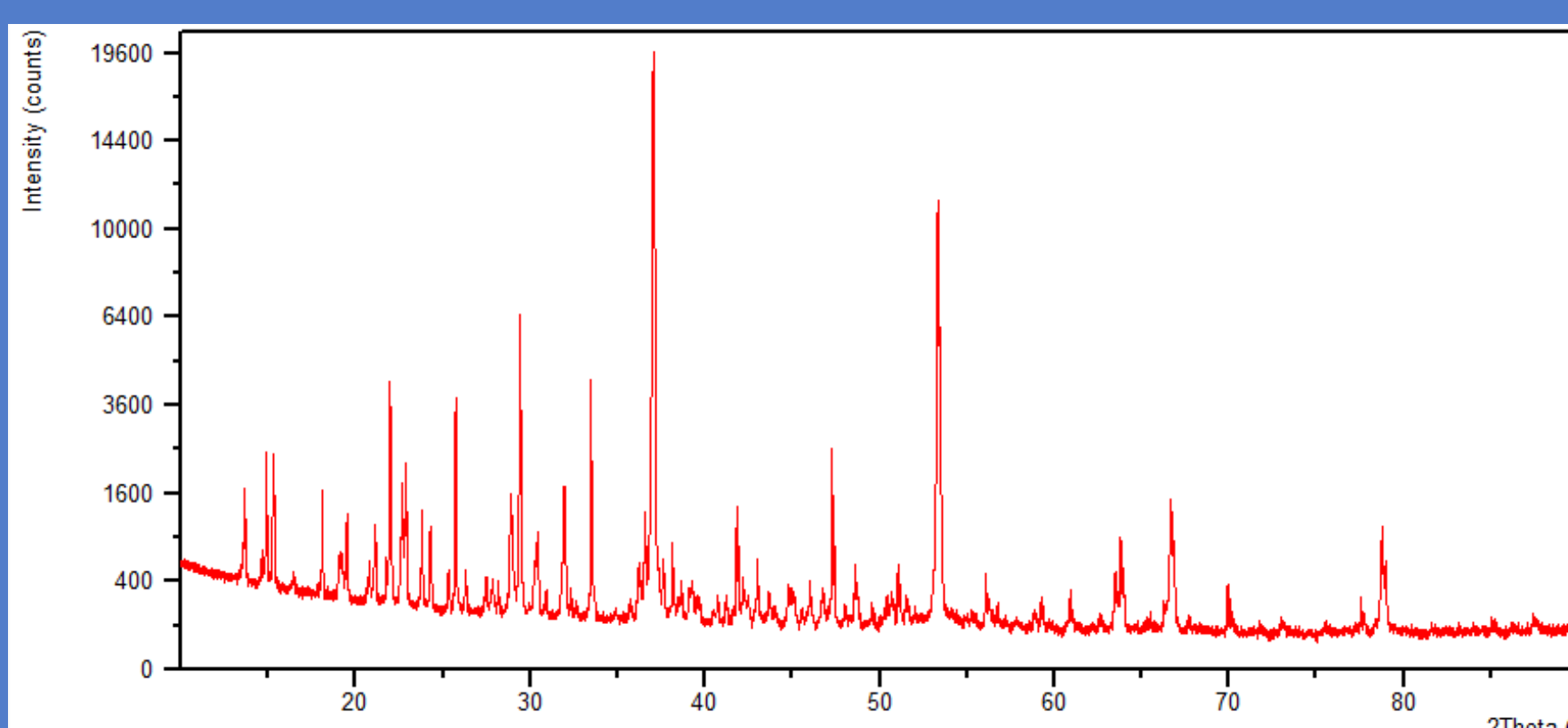
- Detektora
- Goniometra
- Zdroju rentgenového žiarenia
- Optika



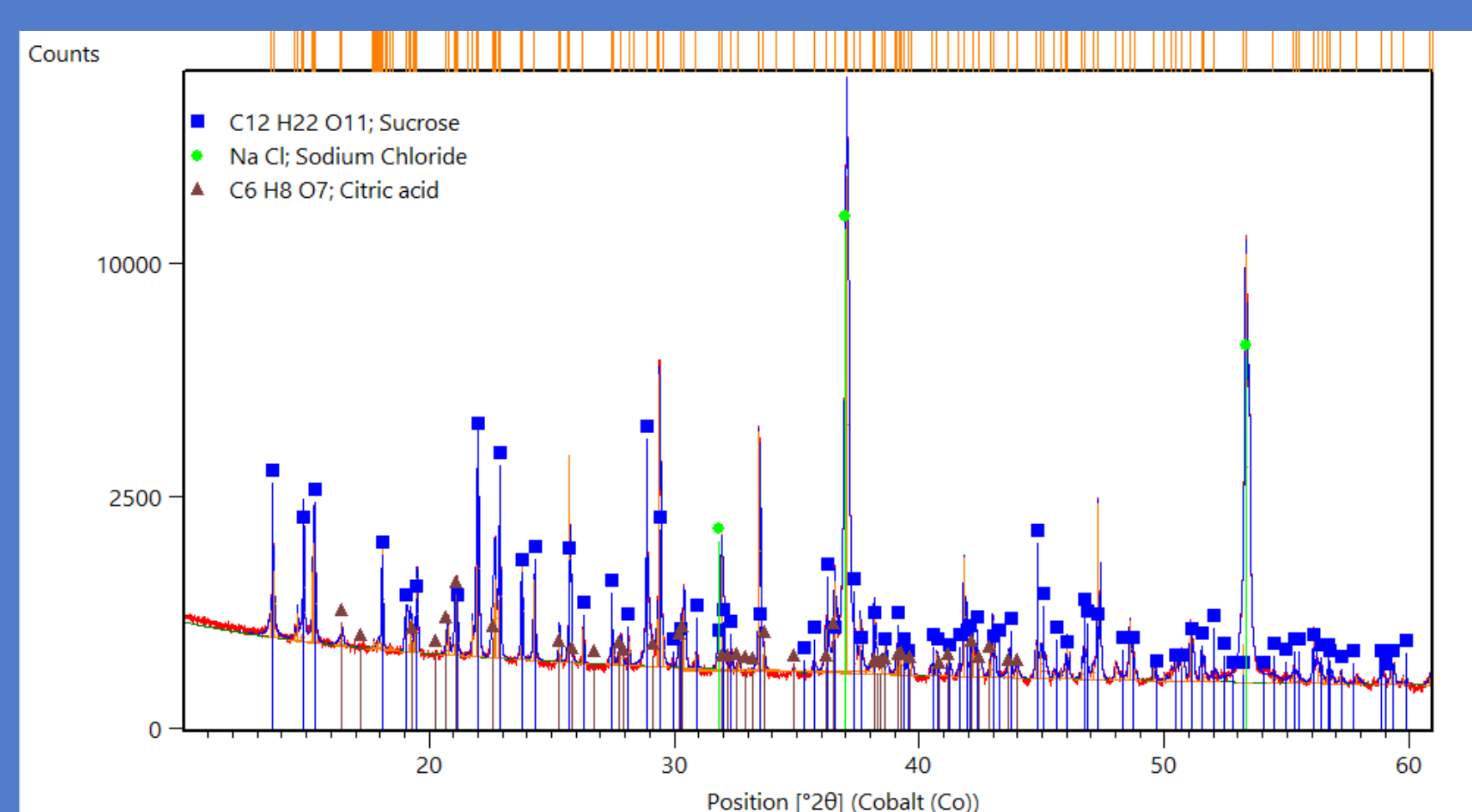
Components of a diffractometer
- prevzaté z (1).

Znázornenie vzniku
rentgenového žiarenia v
difraktometri

Vznik rentgenového žiarenia v difraktometri: Wolframové vlákno (katóda) vysiela elektróny na anódu. Pod anódou sa nachádza chladič – meď, tá sa chladí vodou. Elektróny dopadajúce na anódu, v kvázi vyhodí elektrón z elektrónovej vrstvy, tým je daný atóm nestabilný, preto elektrón z vyššej vrstvy sa posunie o vrstvu nižšie a nahradí vyhodенý elektrón. Elektróny na vzdialenejších vrstvách majú väčšiu energiu ako elektróny na bližších vrstvách, takže pri prechode elektróna z vrstvy na vrstvu mu zostane nadbytočná energia, ktorej sa potrebuje zbaviť – vyžaruje ju ako rentgenové vlnenie, ktorého energia je ovplyvnená materiálom anódy.



Obrázok 1: Difrakčný záznam zmesi práškov



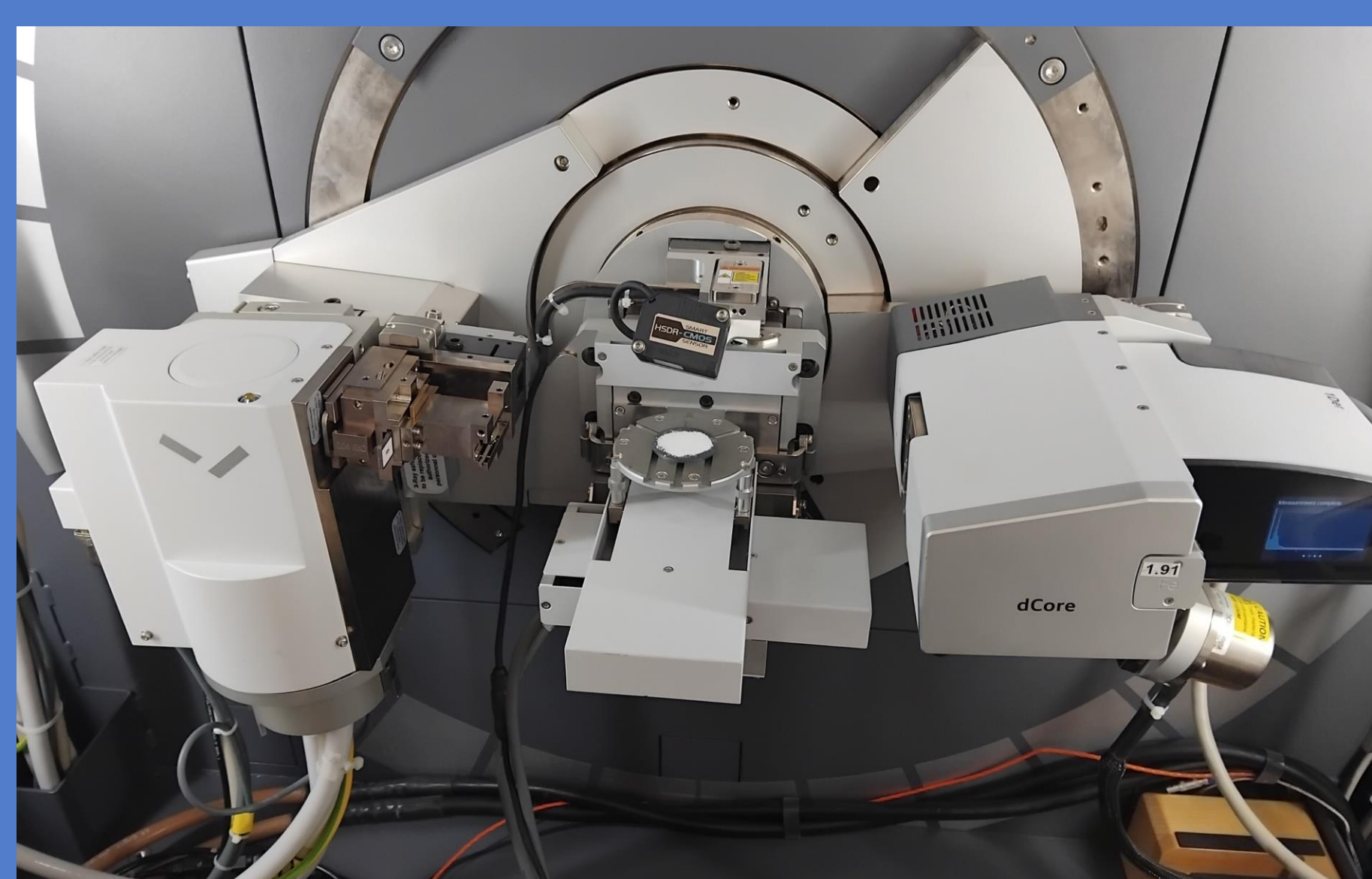
Obrázok 2: Fázová analýza zmesi práškov

Úvod

Pomocou rentgenovej difrakcie skúmame povrchy kryštalických látok a ich fázové zloženie pomocou interferencie rentgenového žiarenia, dopadajúce na pravidelné štruktúry skúmaného objektu. Využívané v kriminológii, farmaceutikryštalúke, strojárstve,...

Ciele práce

- Cieľom je zistiť, či pomocou rentgenovej difrakcie ide jednotlivé prášky v zmesi identifikovať
- Pričom vieme:
 - Prášky sú polykryštály.
 - V zmesi sa nachádzajú tri rôzne prášky bieleho sfarbenia.

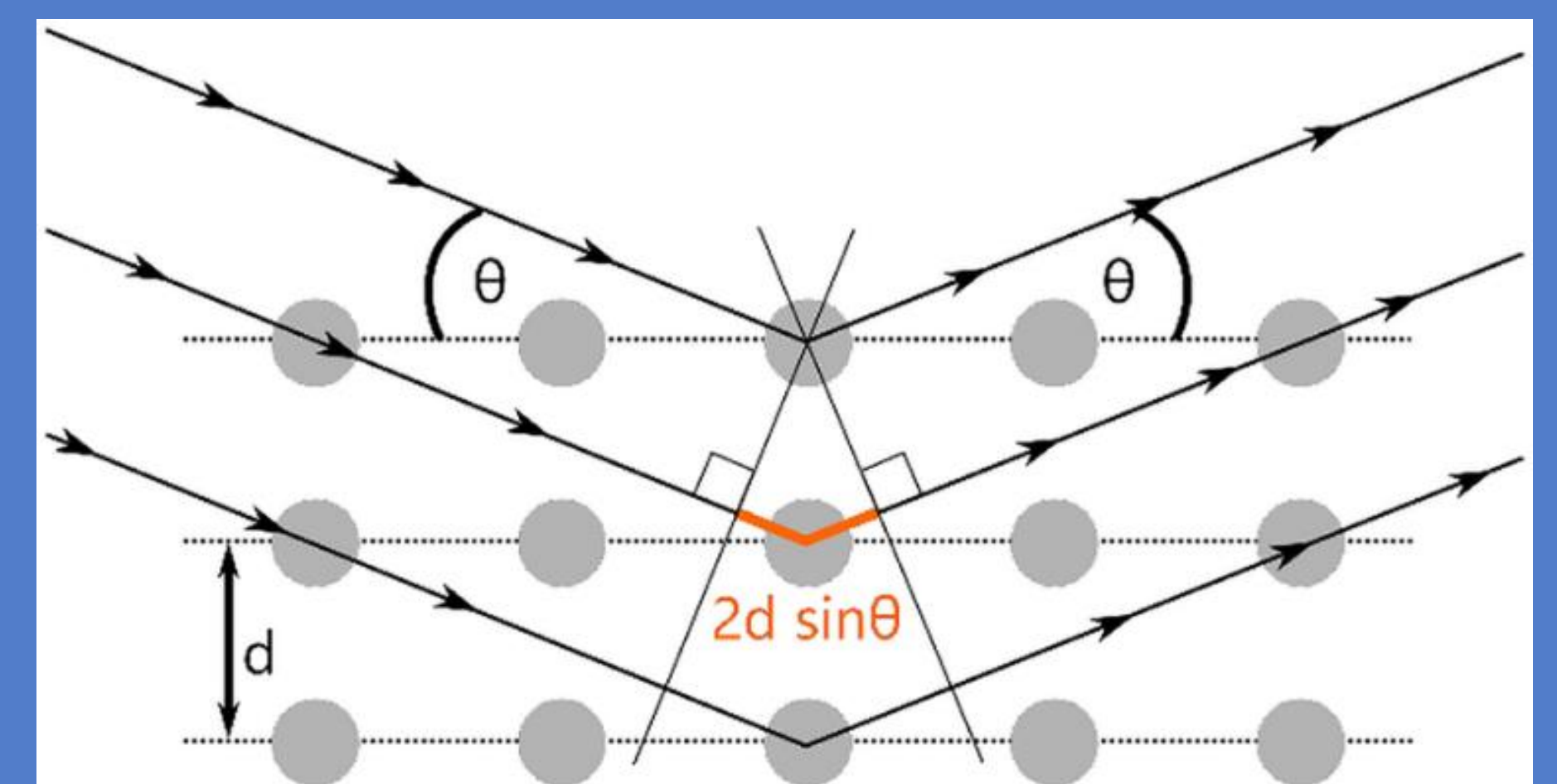


Difraktometer nastavený na meranie zmesi práškov

Delenie látok

- Amorfné
- Kryštalické
 - Monokryštály - vnútorné usporiadanie častíc je pravidelne opakované
 - Polykryštály - skladajú z množstva drobných kryštálov (zŕn), v ktorých sú častice pravidelne usporiadané, ale poloha týchto zŕn je náhodná.

Braggova rovnica



Visualisation of Bragg's equation - prevzaté z (1)

Difrakcia rentgenového žiarenia sa dá interpretovať ako odraz od kryštalických rovín. Na základe interferencie takto odrazených vln sú zaznamenané maximá. Použitím Braggovej rovnice $\lambda = 2d \sin \theta$ kde λ (lambda – vlnová dĺžka použitého žiarenia) máme zadanú ako konštantu; θ je uhol sklonu vlnenia, ktoré si určíme - zisťujeme vlastne d. D je vzdialenosť medzi kryštalickými rovinami.

Výsledky a diskusia

Pri meraní bola použitá

- kobaltová anóda
- rozsah merania boli 10° až 90° 2θ
- jeden krok bol 0,008°
- jeden krok trval 45 sekúnd.

Týmto meraním sme získali tento difrakčný záznam (obr. 1), ktorý bolo nutné ďalej spracovať aby sme vedeli podľa databázy čo najpresnejšie určiť, o aké prášky ide.

Každý prvok, zlúčenina má jedinečný interferenčný záznam, vďaka čomu vieme určiť skúmanú látku a jej fázu. Systém porovnáva výsledky merania (hodnoty d) s databázovými údajmi. Na základe systémových porovnaní s databázou (so zhodami nižšími ako 50%) a našimi vlastnými porovnaniami sa došlo k záveru, že v práškovej zmesi sa nachádza sacharóza (cukor), chlorid sodný (sol') a kyselina citrónová (obr. 2).

Záver

Rentgenová difrakcia je účinná metóda na zistenie fáz kryštalických látok. Výsledkom merania bola fázová analýza neznámej zmesi práškov a určenie presných komponentov danej zmesi na základe tohto difrakčného záznamu pomocou Braggovej rovnice a za využitia jedinečnosti každého difrakčného záznamu. Zistilo sa, že v neznámej zmesi práškov sa nachádzal cukor, sol' a kyselina citrónová.

Referencie

- (1) George F. Harrington a José Santiso. Back-to-Basics tutorial: X-ray diffraction of thin films (online). https://www.researchgate.net/publication/355201732_Back-to-Basics_tutorial_X-ray_diffraction_of_thin_films 2021, referencované 24.6.2025
- (2) Kráľová R., Novotná Z., Budinský R. Rentgenová difrakce - okno do materiálu (online). http://vega.fjfi.cvut.cz/docs/sfbc/rtg_difrakce/zuzstr1.html, referencované 24.6.2025