

How to find the crystal structure of a material?

L. Pavelková, J. Kraft, L. Kubof

Obsah

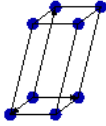
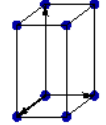
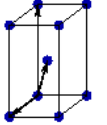
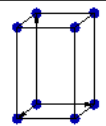
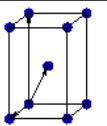
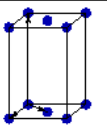
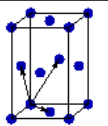
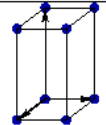
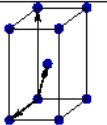
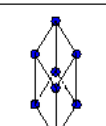
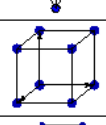
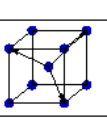
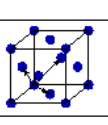
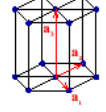
- Využití
- Princip
- Data
- Symetrie
- Zjišťování struktury
- Náš experiment
- Shrnutí

K čemu je užitečné znát strukturu materiálu?

- malá změna struktury \Rightarrow zásadní změna vlastností
- slitiny používané v jaderných reaktorech - metalurgie
 - velmi specifické vlastnosti
- ortopedické náhrady kostí
- farmacie
 - receptory našeho těla reagují pouze na látky, které mají určitou strukturu
 - např. Ibalgin, antipsychotika
- cukr x umělá sladidla
 - chuťové buňky reagují na umělá sladidla podobně jako na cukry, ale narozdíl od nich jsou nestravitelné

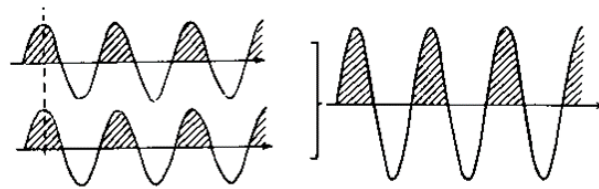
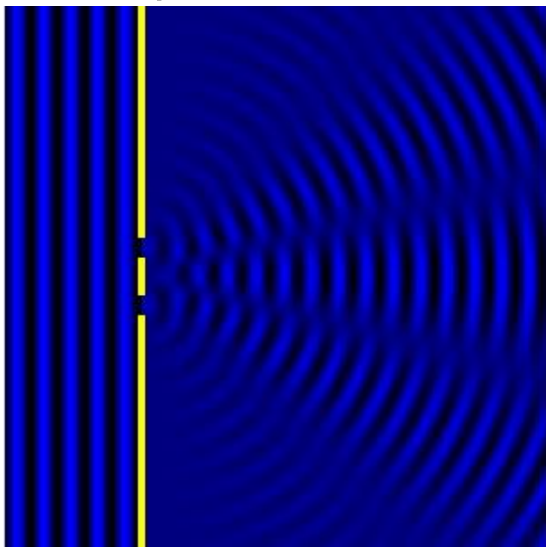
Symetrie

- krystalická mřížka je složena z periodicky se opakujících základních jednotek
 - jinak se jedná o amorfní látku
- podle této základní jednotky krystaly dělíme (viz tabulka)
- symetrie zjednodušuje výpočty \Rightarrow stačí zjistit část strukturu a druh symetrie

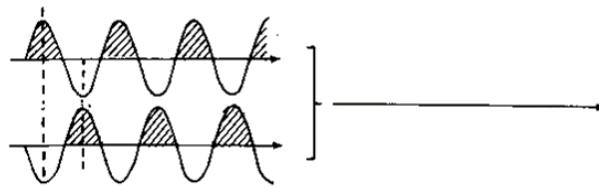
Bravais lattice	Parameters	Simple (P)	Volume centered (I)	Base centered (C)	Face centered (F)
Triclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} \neq \alpha_{23} \neq \alpha_{31}$				
Monoclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$ $\alpha_{12} \neq 90^\circ$				
Orthorhombic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Tetragonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Trigonal	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} < 120^\circ$				
Cubic	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Hexagonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = 120^\circ$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				

Na jakém principu funguje krystalografie?

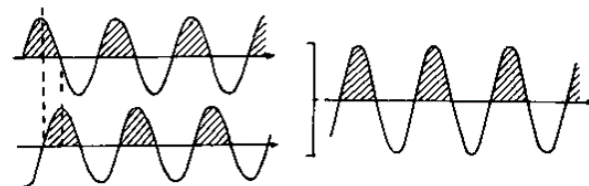
- vlnění se stejnou vlnovou délkou spolu interferují
 - výsledné vlnění závisí na fázovém posunu



in phase
(constructive
interference)



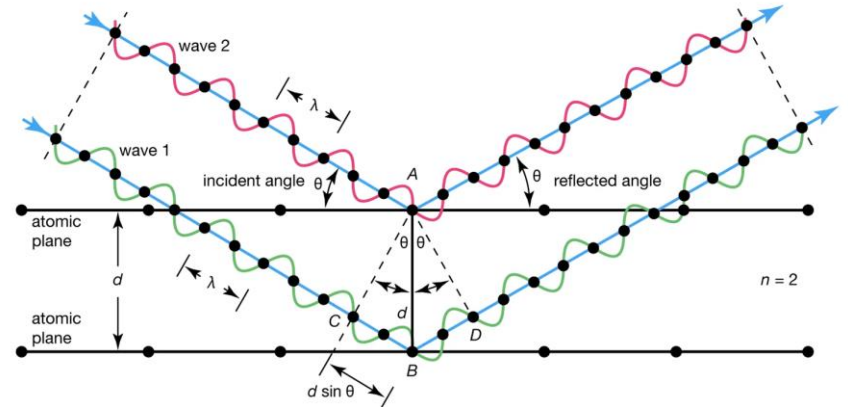
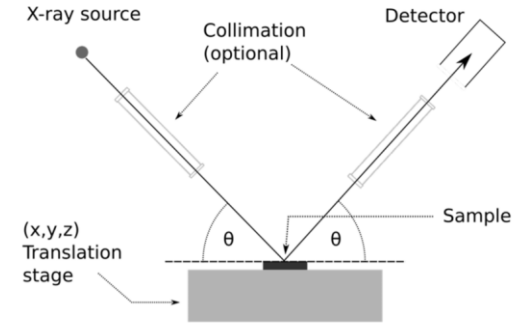
out of phase
(destructive
interference)



partially out of phase

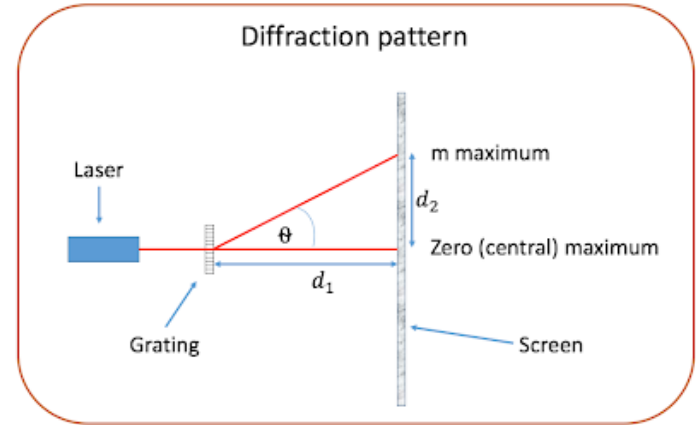
Na jakém principu funguje krystalografie?

- rentgenové záření vychází ze zdroje
- atomy rozptylují toto záření v určitém úhlu (Braggův zákon) v závislosti na elektronové hustotě
- rozptýlená záření urazila jinou vzdálenost \Rightarrow jsou fázově posunuta
- difrakční obrazec na detektoru
 - interferenční maxima
- změníme pozici krystalu a měření opakujeme



Data

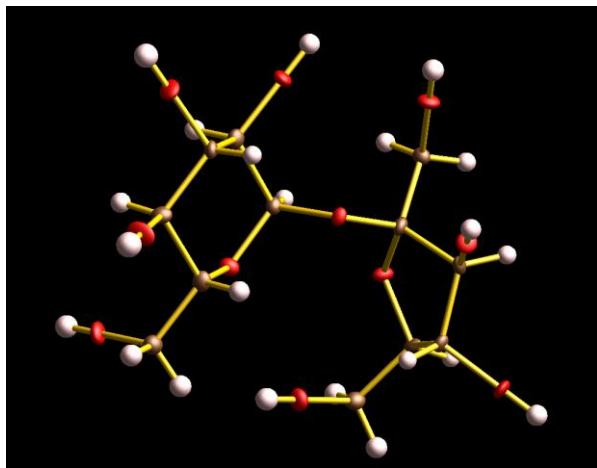
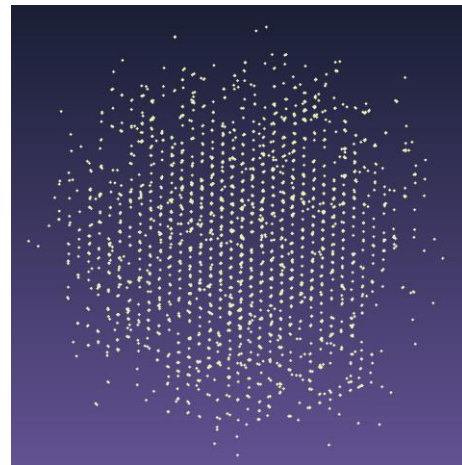
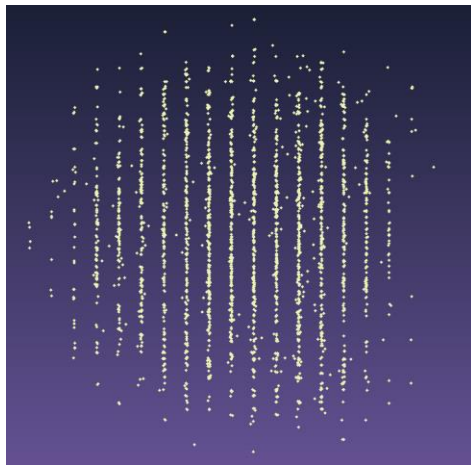
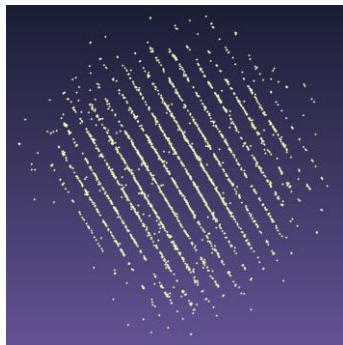
- z difrakčního obrazce vyčteme intenzitu a úhel (známe pozici a vzdálenost vzorku od obrazce)
- z těchto dat se software Jana2020 složitými výpočty pokouší určit prostorovou strukturu zkoumané látky
- Na zpracování dat jsou použity vzorce obecně nazvány strukturními parametry



Zjišťování struktury neznámého materiálu

- výběr vhodného krystalu pod mikroskopem
 - monokrystal, středně velký
- uchytit krystal na skleněnou jehlu pomocí silikonového maziva
- preexperiment
 - určení nejvhodnějšího krystalu pomocí rychlého (3 min) měření
- samotné měření
 - cca 1 a půl hodiny
- zpracování dat

Náš experiment



Shrnutí

- malá změna struktury \Rightarrow zásadní změna vlastností
- využití: medicína, mineralogie, jaderná energetika, umělá sladidla
- pouze u neamorfních (tj. krystalických) látek
- krystal musí obsahovat symetricky a periodicky se opakující jednotku
- krystalografie je založena na interferenci rentgenového záření rozptýleného atomy

Děkujeme za pozornost

Zdroje

How to find the crystal structure o

<https://commons.wikimedia.org/wiki/Diffraction>

<https://www.researchgate.net/publication/323722534/figure/fig9/AS:631579550416957@1527591707687/Schematic-of-an-X-ray-diffractometer.png>

<https://www.britannica.com/science/X-ray-diffraction>

https://sites.google.com/a/perthgrammar.co.uk/physics/_/rsrc/1465809845301/courses/higher/particles-and-waves/35-interference-and-diffraction/353-diffraction-of-waves/Screen%20Shot%202015-12-01%20at%2021.16.33.png?height=249&width=400