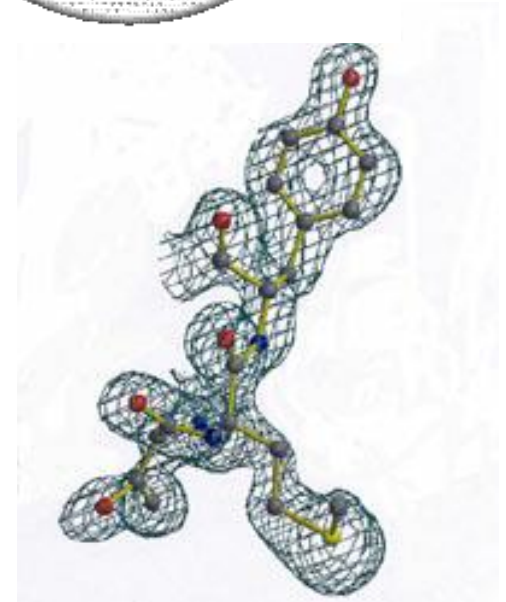
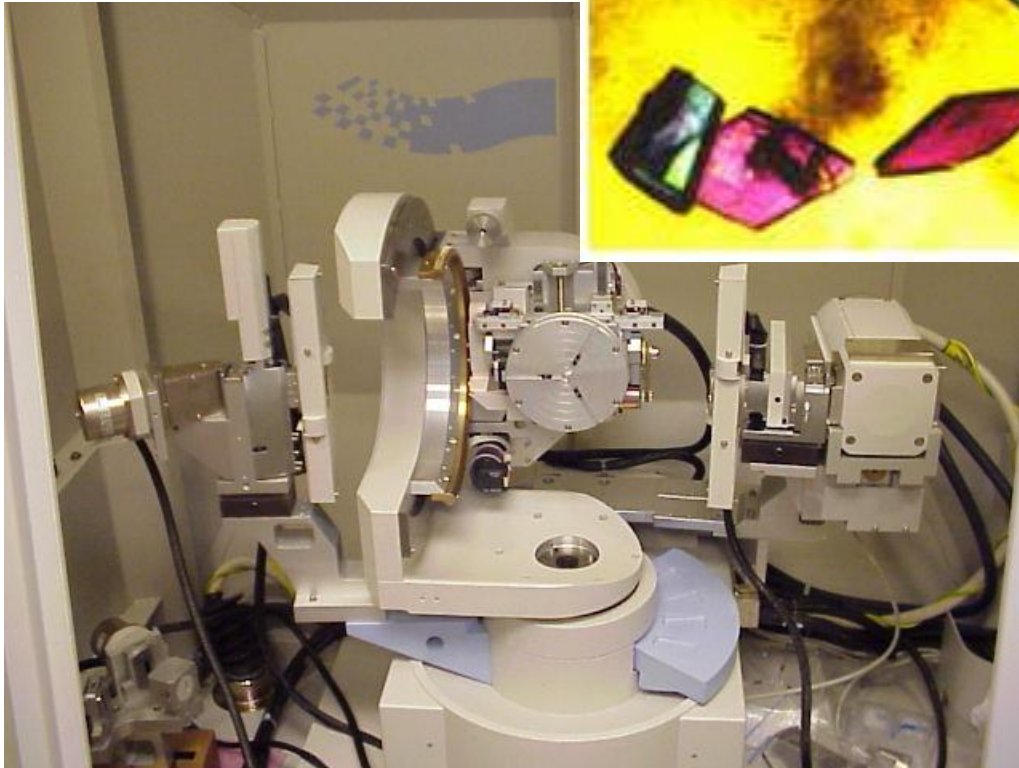
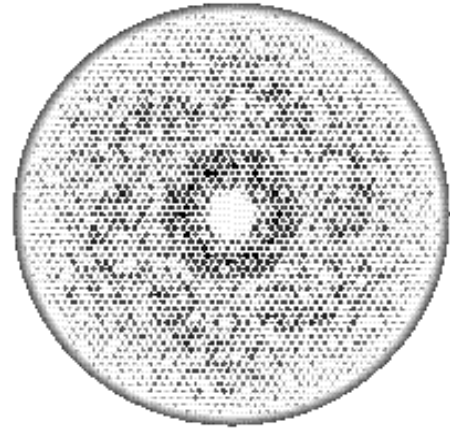


RTG záření



RTG záření

- elektromagnetické vlnění s vlnovými délkami v intervalu $< 10^{-8}; 10^{-12} >$ m.
- Dle vlnové délky můžeme rozlišit 2 druhy RTG záření - **měkké** (vyšší $\lambda = 10^{-8} - 10^{-10}$ m) a **tvrdé** ($\lambda = 10^{-10} - 10^{-12}$ m)
- Další dělení je podle způsobu vzniku. V tomto případě rozlišujeme **brzdné** a **charakteristické** záření.

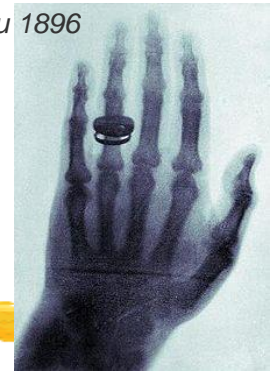
Vlastnosti RTG záření



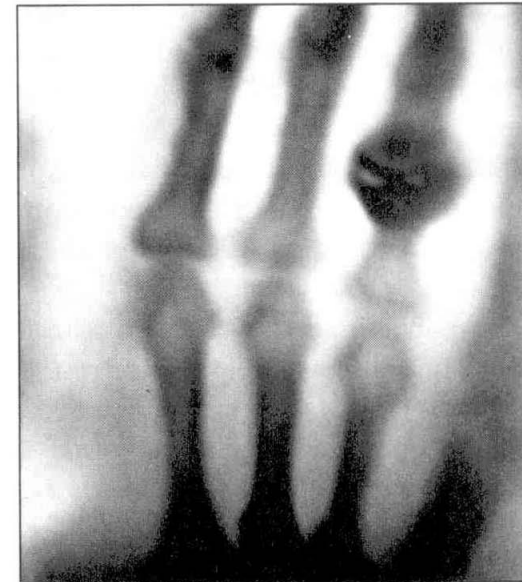
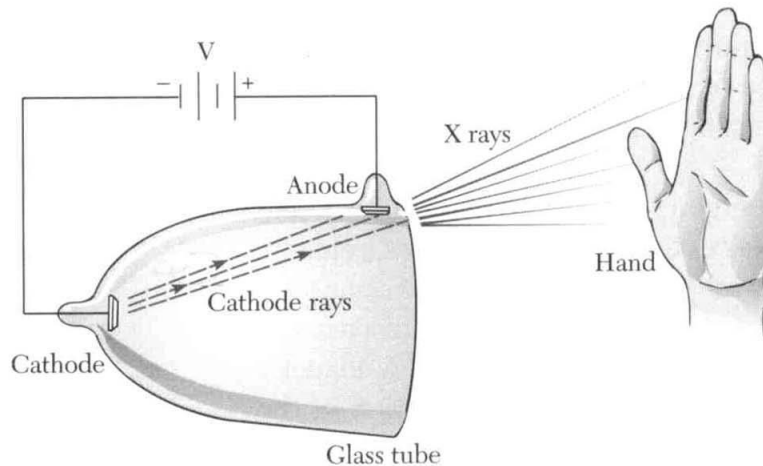
- **pronikavost** (roste s frekvencí)
- vysoká schopnost **ionizace** prostředí
- **luminiscenční** účinky na některé látky
- **fotochemické** účinky na fotografickou desku, film
- **biologické** účinky

W.C. Roentgen

Historie RTG



- 1895 – Roentgen: paprsky-x v katodovém záření.
- 1912 – Laue: difrakční záznam krystalu.
- 1912 – Bragg: difraktometr

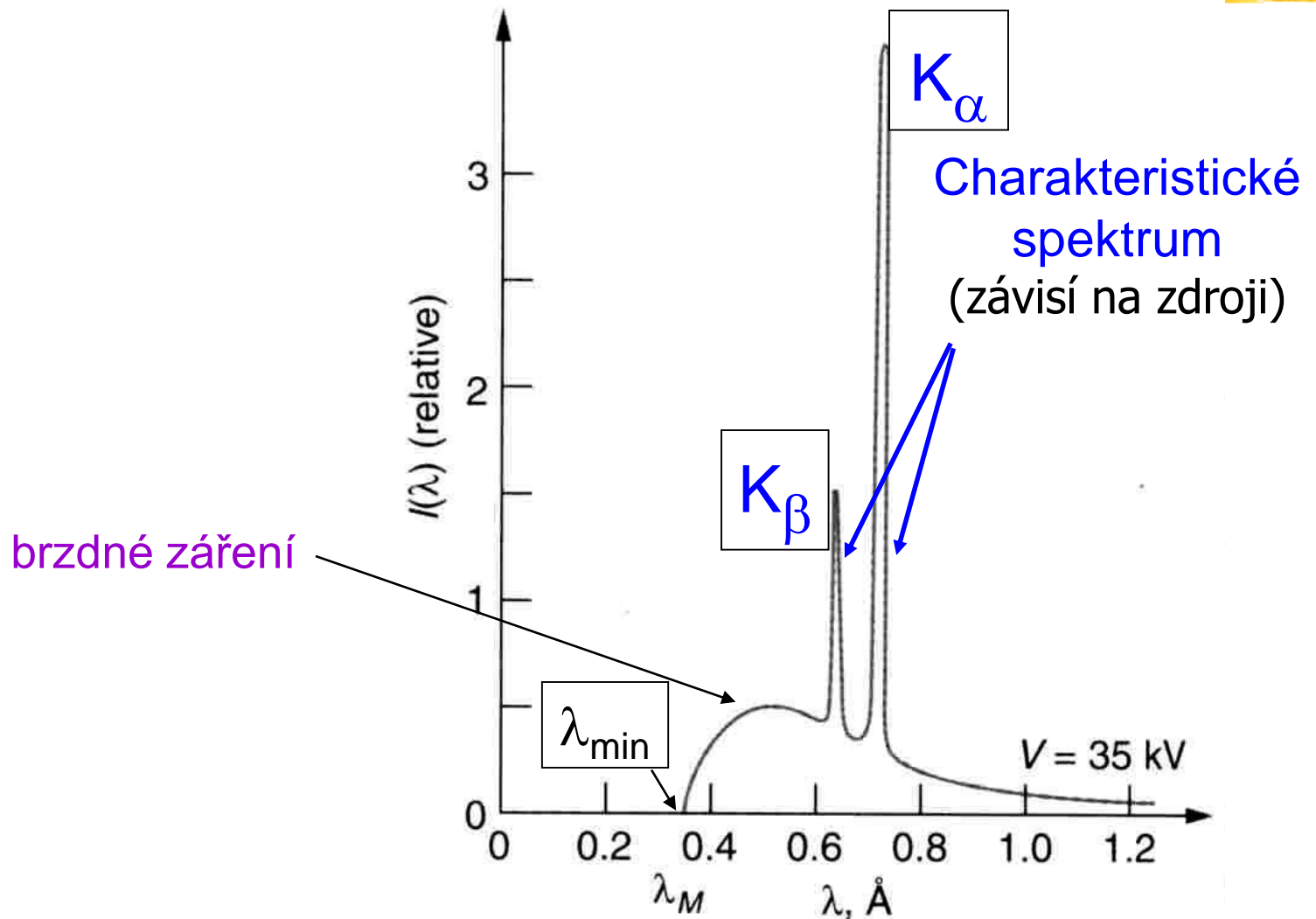


první RTG snímek - prsten paní Roentgenové

Brzdné a charakteristické záření

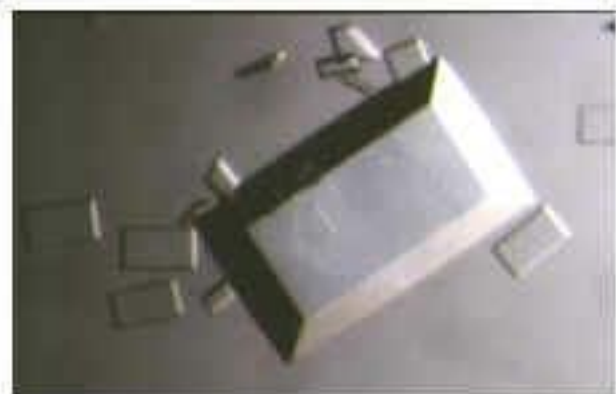
- ❑ **Brzdné záření** - při brzdění elektronu, např. dopadem na povrch látky. Mění se rychlost má za následek vyzařování elektromagnetických vln, se spojitě se měnící frekvencí, nesouvisí s materiálem antikatody.
 - spojité spektrum
- ❑ **Charakteristické záření** - rychlé elektrony, mající značnou energii, při brzdění v kovu mohou předat atomům kovu takové množství energie, že dojde k uvolnění některého z vnitřních elektronů antikatody. Na takto uvolněné místo přejde elektron z nejbližší slupky o vyšší energii. Jelikož tento elektron musí snížit svou energii, dojde k vyzáření fotonu.
 - čárové spektrum, kde poloha čar odpovídá uspořádání elektronového obalu atomu a je pro daný kov charakteristická

X-Ray spektrum

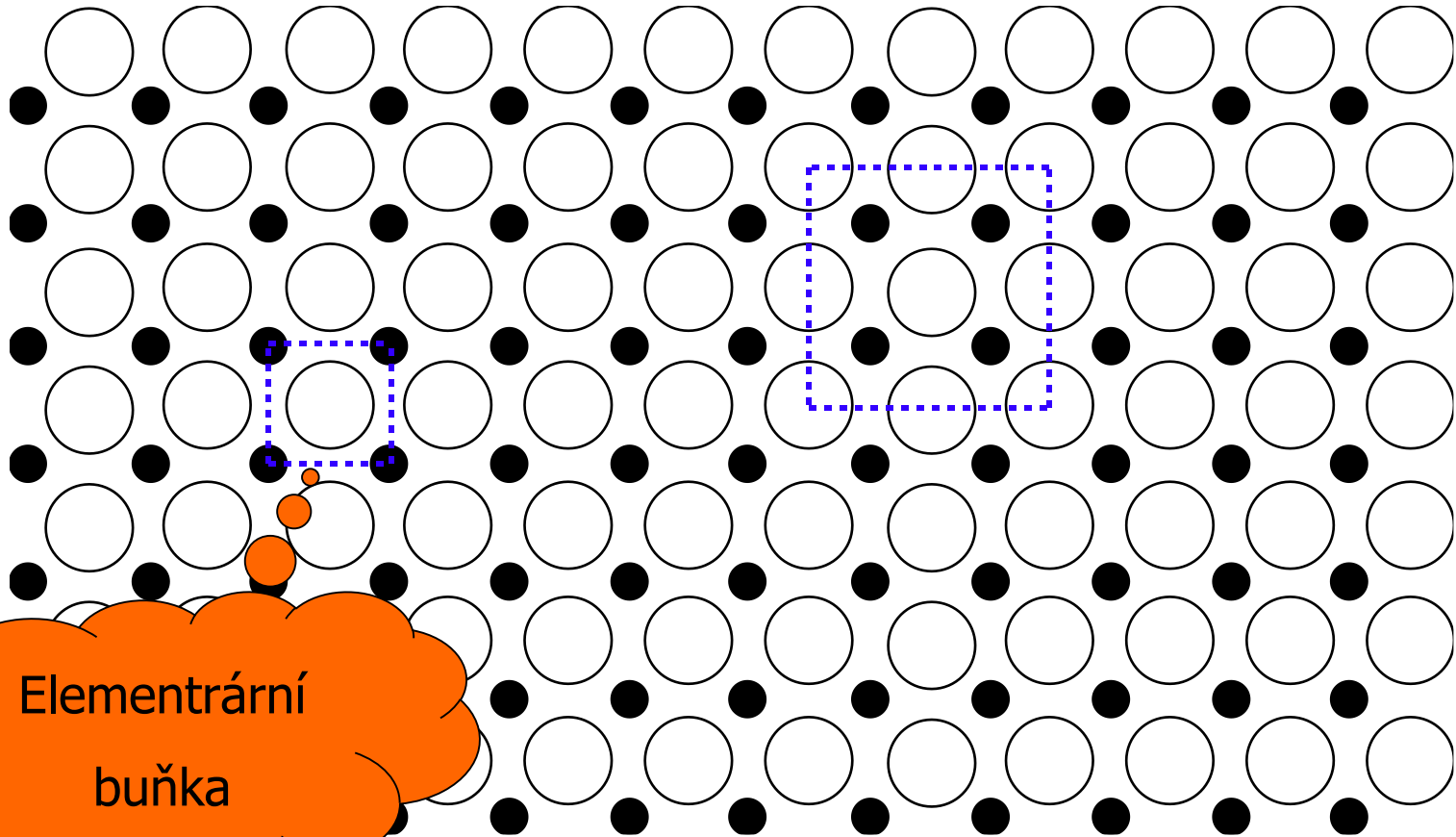


Krystal

- homogenní pevná látka vytvořená opakováním tří-rozměrného modelu atomů, iontů, nebo molekul a mající pevné vzdálenosti mezi základními částmi.



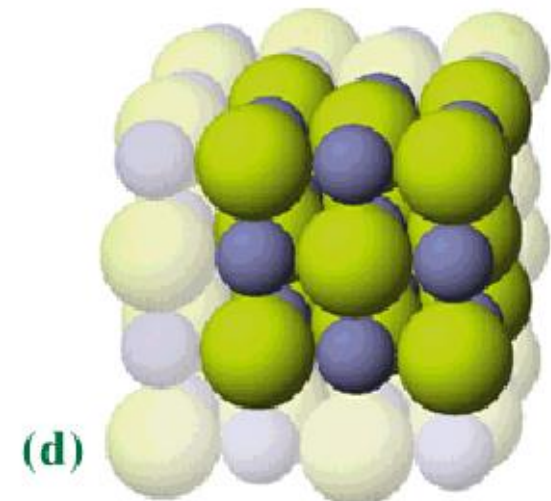
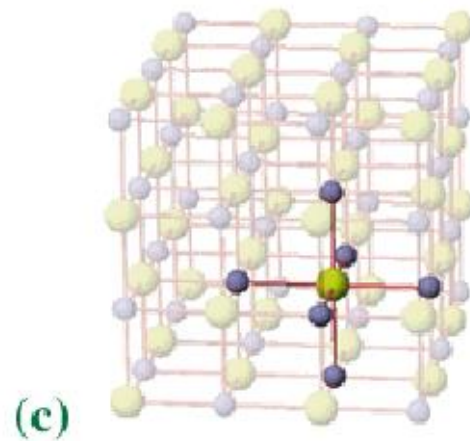
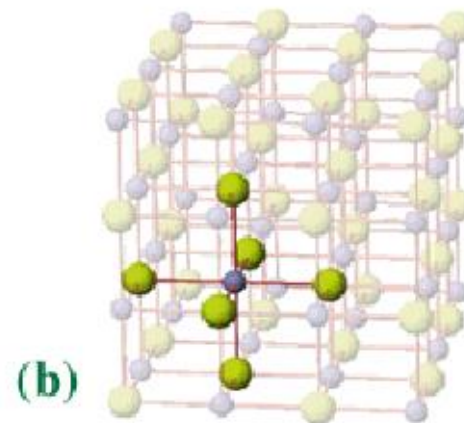
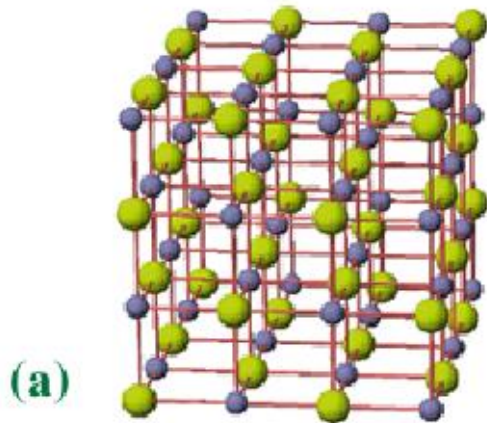
Krystalická mříž



Elementární
buňka

Krystalová mříž

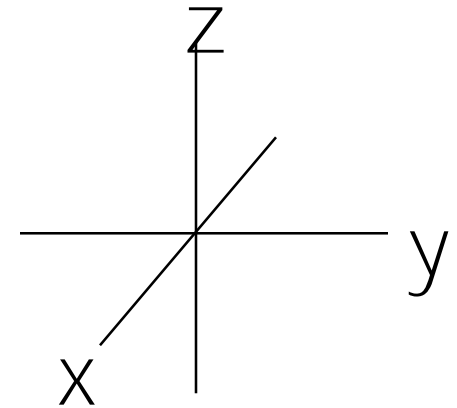
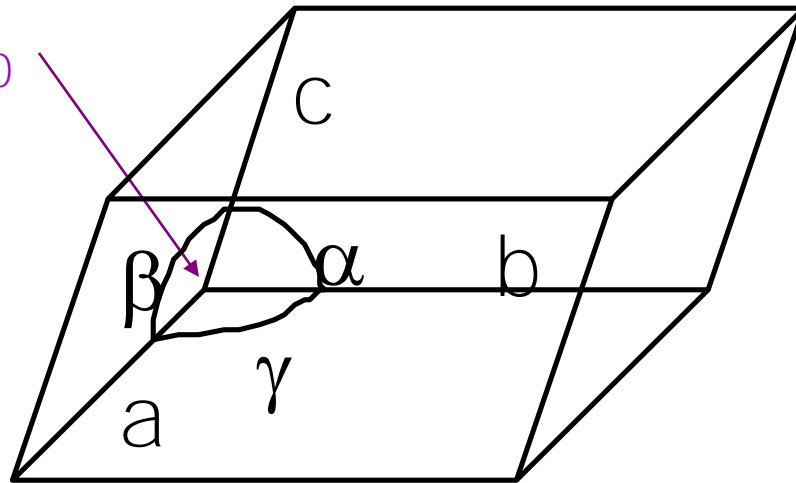
NaCl crystal lattice



Elementární buňka

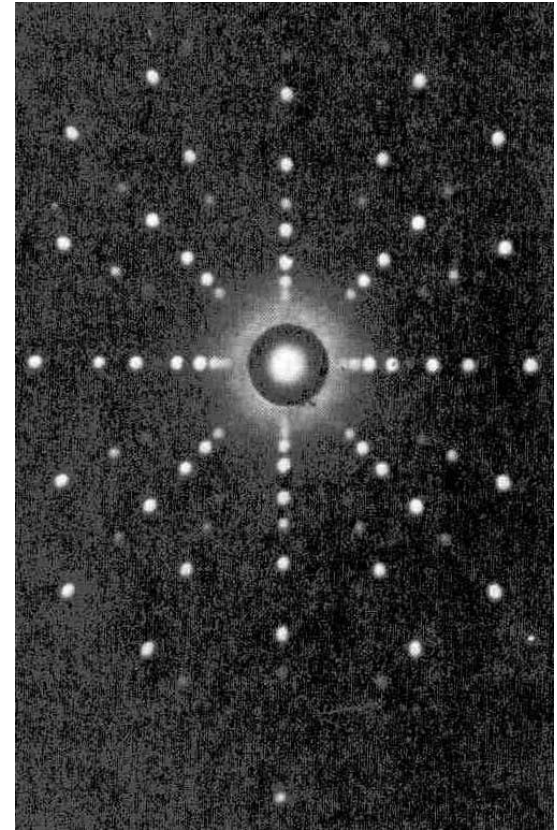
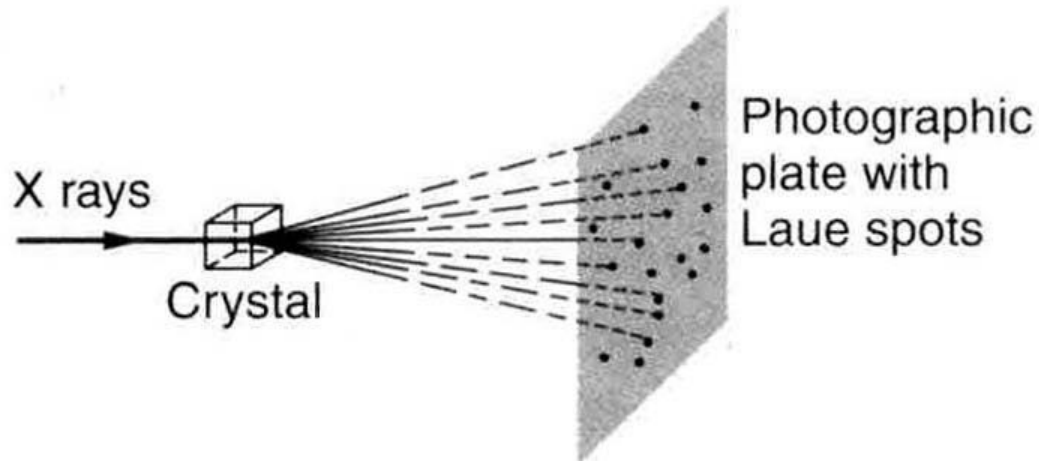
základní „stavební“ jednotka každé mřížky

Podle původní
konvence - 0,0,0



- a , b a c jsou délky hran (vzdál. vrcholů)
- α , β a γ jsou úhly (α je naproti hrany a , atd.)

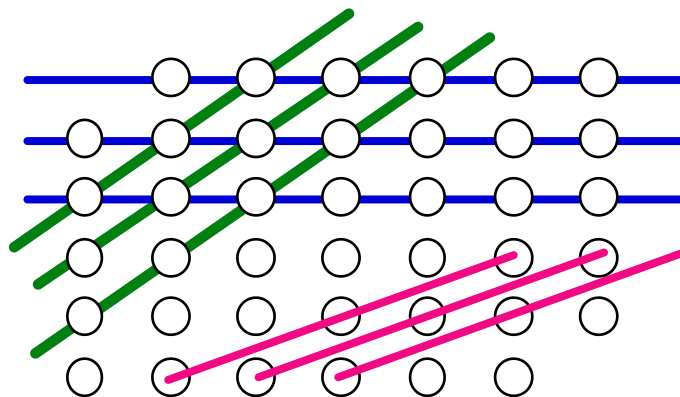
Laueho experiment



Laueho záznam

Difrakce na mřížce

Vlnová délka RTG záření je srovnatelná se vzdáleností jednotlivých mřížkových rovin, proto dochází k difrakci



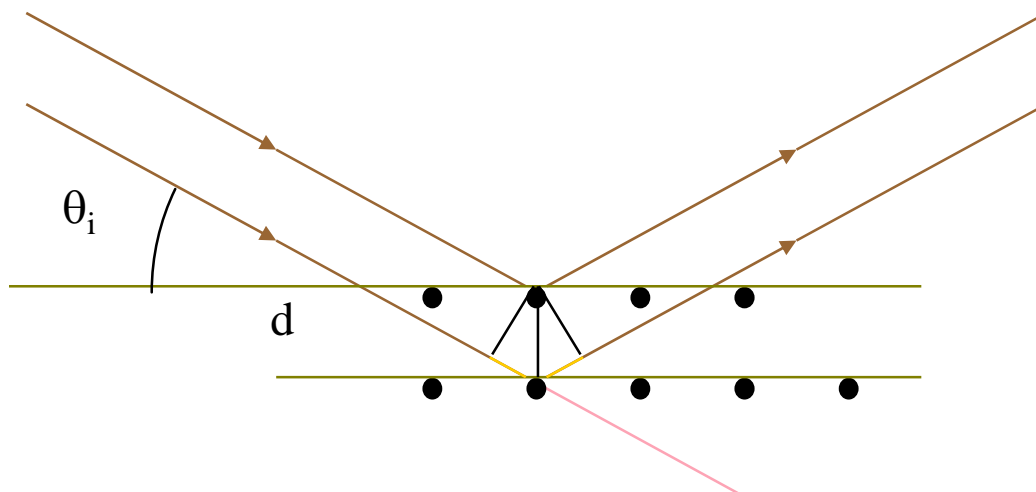
Difrakční metody

- ❑ využívají dvou vlnových vlastností záření a to rozptylu a interference takto rozptýleného záření
- ❑ nejrozšířenější je použití RTG záření, kde se sleduje jeho rozptyl na elektronech krystalické látky
- ❑ měření pouze s tuhými vzorky a to ve formě monokrystalu nebo ve formě souboru krystalů - tzv. polykrystalové nebo práškové metody

Difrakce

- Při rozptylu dopadne vlna primárního záření na atomy v krystalu. **Jádra** atomů zůstanou vzhledem ke své velké hmotnosti **v klidu**, ale **elektrony** jsou **rozkmitány** se stejnou frekvencí jako má primární záření a stávají se zdrojem **sekundárního záření**, jehož vlnová délka je shodná s vlnovou délkou primárního záření. Tento typ rozptylu nazýváme **koherentní (pružný) rozptyl**.
- Dále dochází k **interferenci (skládání)** vln vysílaných jednotlivými elektrony, které mohou být vůči sobě fázově posunuty. Výsledkem celého tohoto procesu (**difrakce**) je soubor tzv. **difraktovaných vln**, které se šíří od krystalu **pouze v určitých směrech**. Prostorové rozložení difraktovaných vln vytváří difrakční obraz krystalu.

Difrakce na mřížce

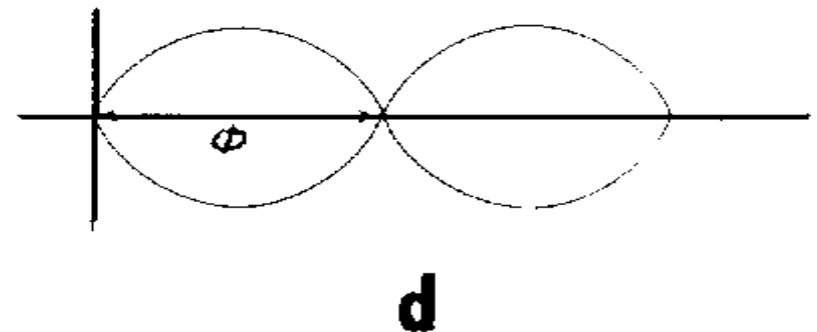
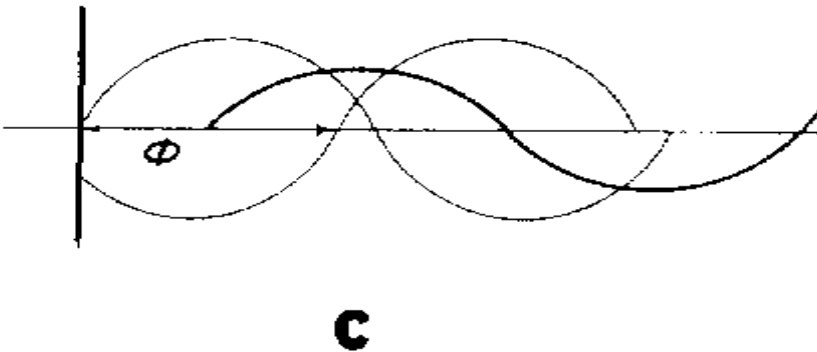
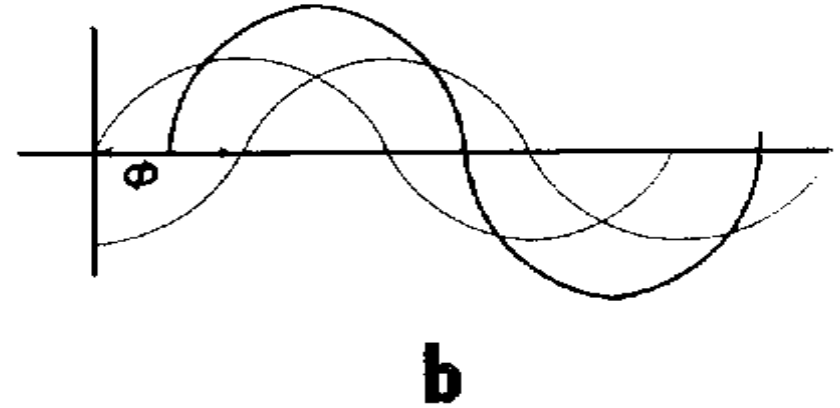
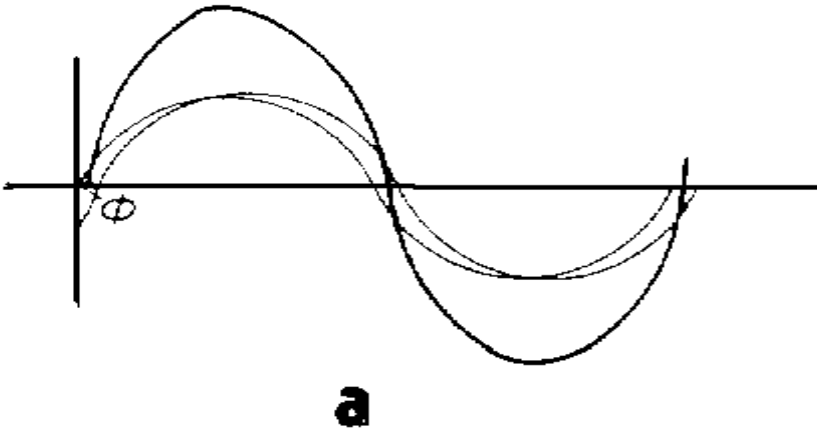


dráhový rozdíl = $2d \sin \theta_i$

konstruktivní interference $n \lambda = 2d \sin \theta_i$

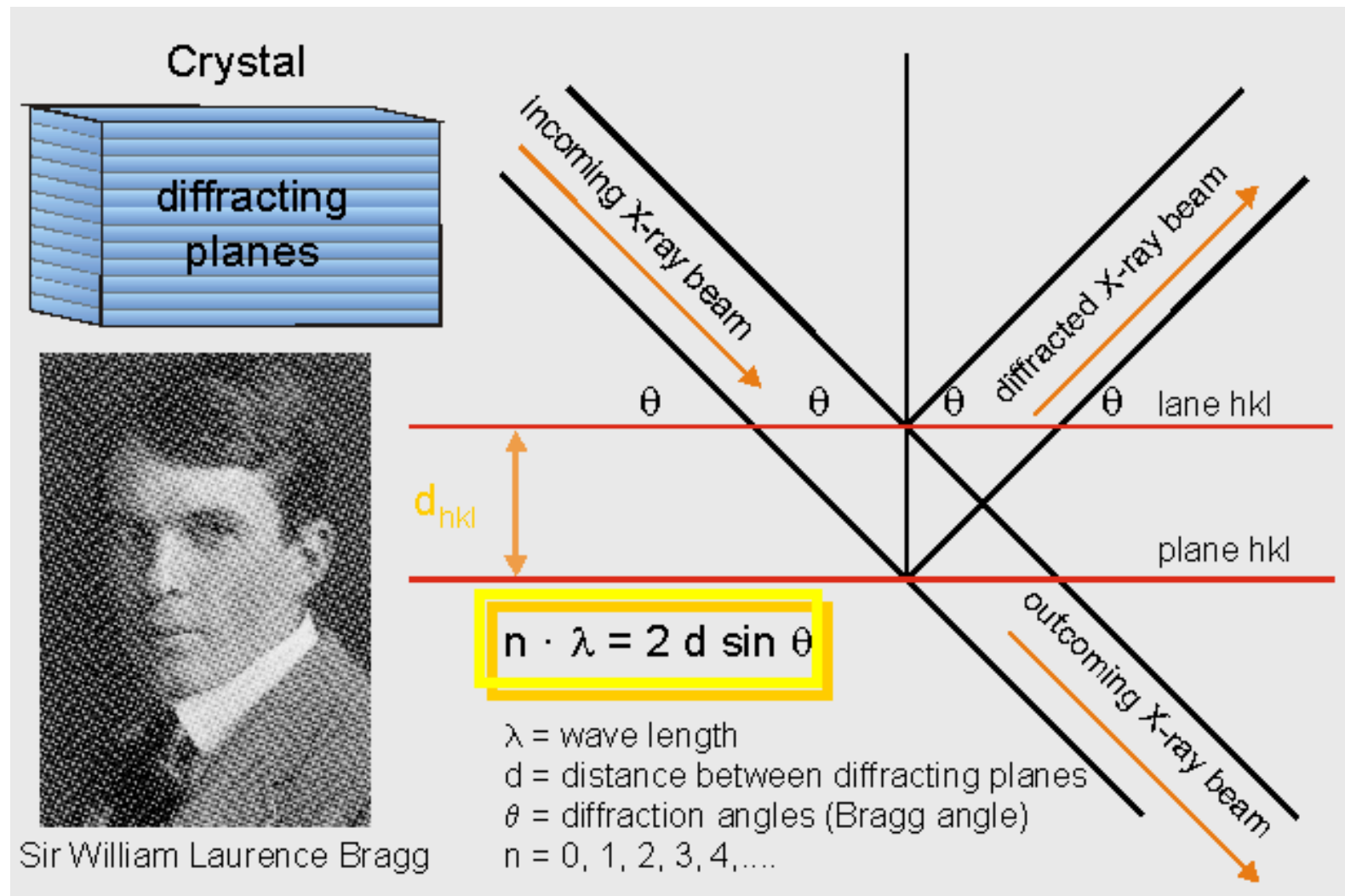
$n = 1, 2, 3 \dots$

Interference záření



Vliv velikosti fázového posunu (úhlu) ϕ na zesílení (a,b), zeslabení (c), nebo zánik (d) vlnění při interferenci dvou vln

Braggova difrakce



Sir William Lawrence Bragg

Příklad

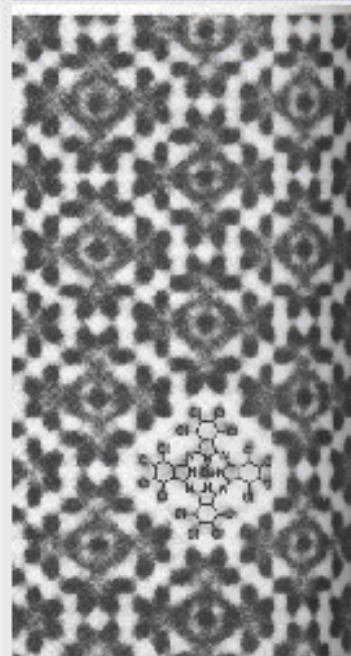
Jaká je vzdálenost mezi atomy mědi, jestliže RTG záření o vlnové délce 1.54Å difraktuje v druhém stupni při 58.42°?

$$n = 2 \quad \lambda = 1.54\text{Å} \quad \theta = 58.42^\circ \quad d = ?$$

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

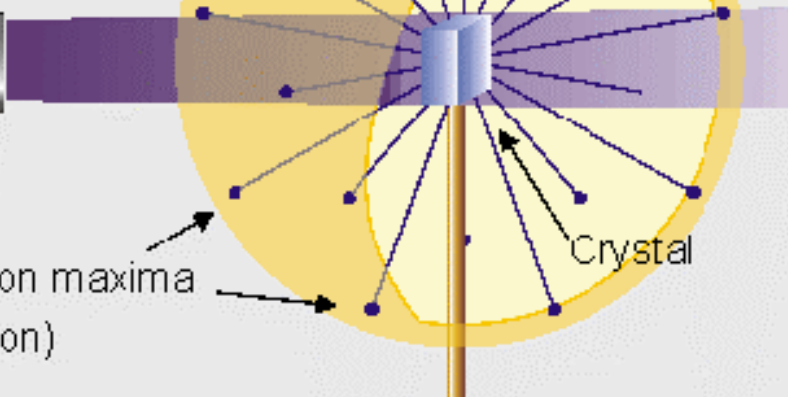
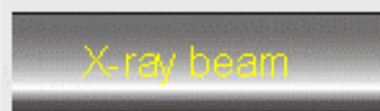
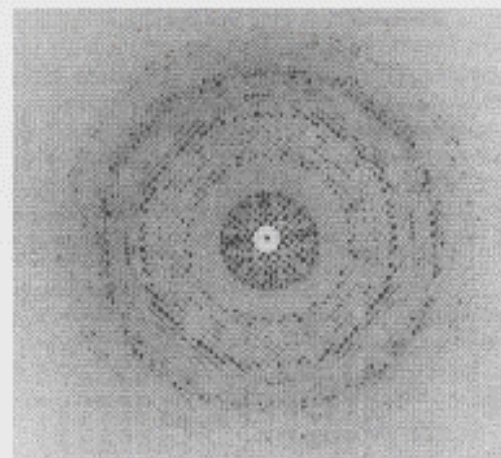
$$\begin{aligned} d &= (n\lambda)/2\sin\theta = (2*1.54\text{Å})/(2*\sin(58.42^\circ)) \\ &= 1.54\text{Å}/0.852 = 1.81\text{Å} \end{aligned}$$

3D struktura látek z RTG



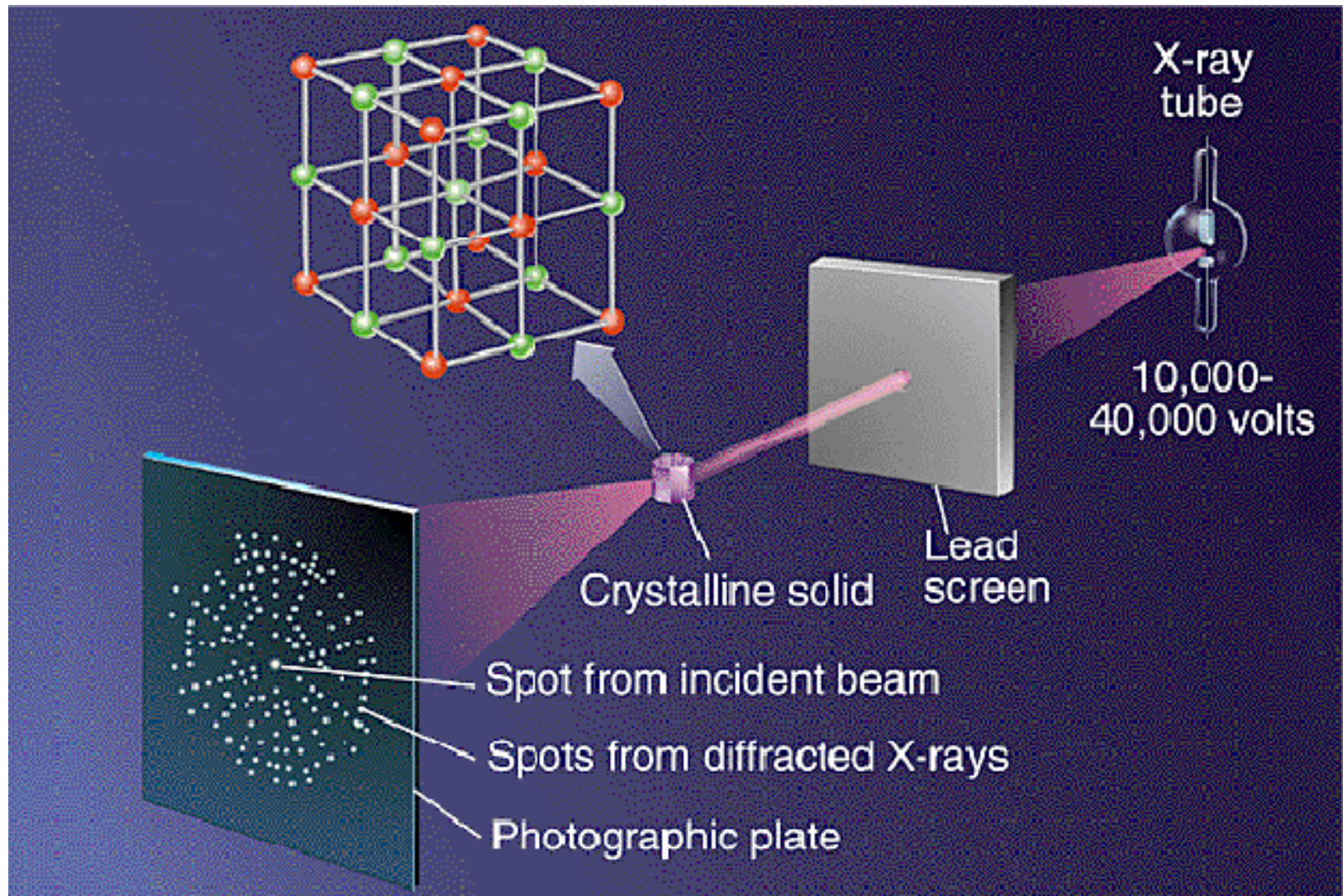
3-dimensional structure

diffraction pattern

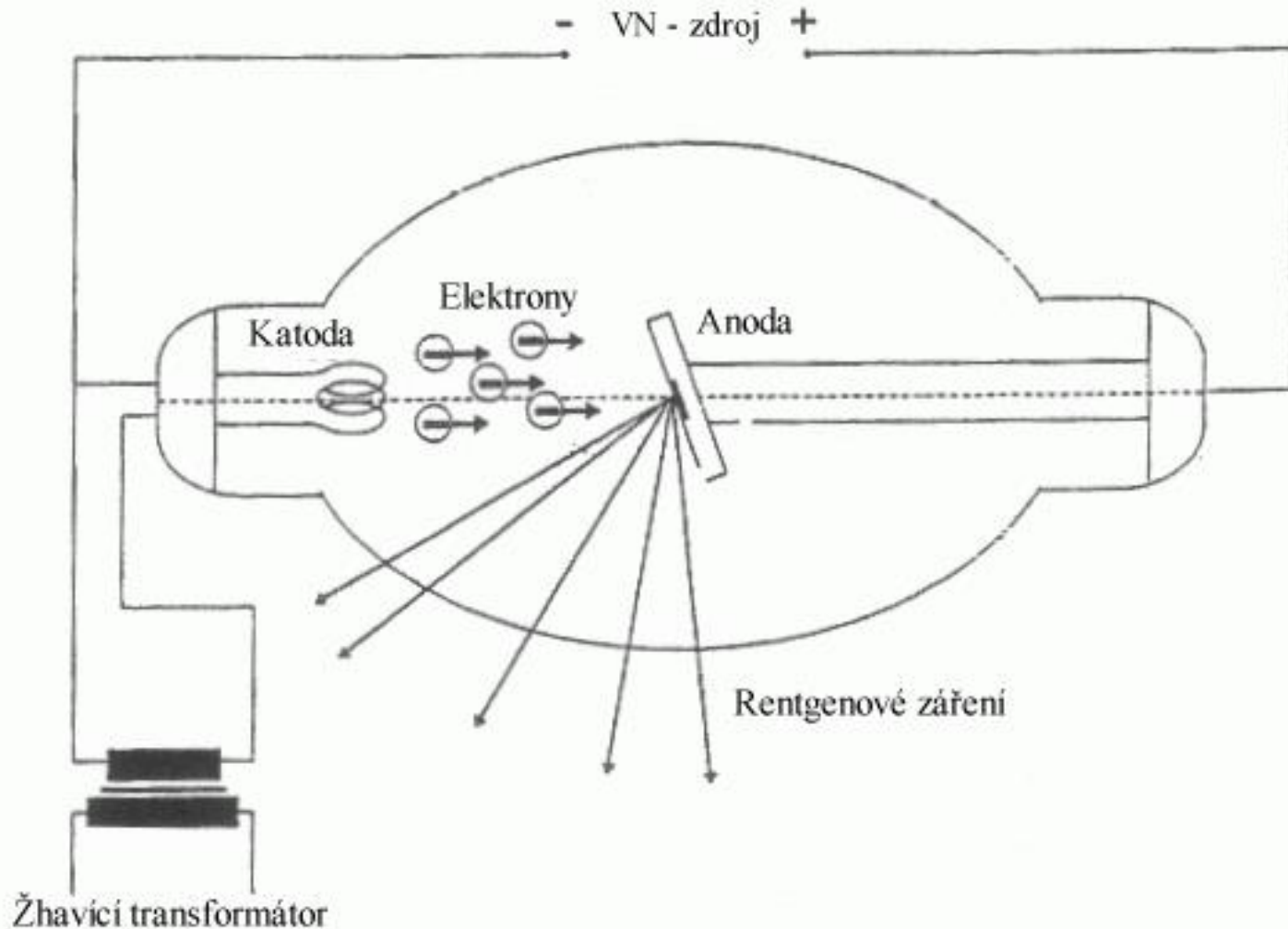


Max von Laue

RTG difraktometr



Zdroje RTG záření



Registrace RTG záření

- k identifikaci RTG záření se využívá některých jeho účinků:
 - schopnost **ionizace** plynů (G-M detektory, ionizační komory aj.)
 - **luminiscenčních účinků** (scintilační počítače)
 - **chemických účinků** (krystalové dozimetry)
 - **fotografických účinků** (fotografické filmy a desky)

Rozdělení difrakčních metod

☐ podle použitého záření

- polychromatické (např. Laueho metoda)
- monochromatické (např. Debye-Scherrerova metoda)

☐ podle způsobu detekce

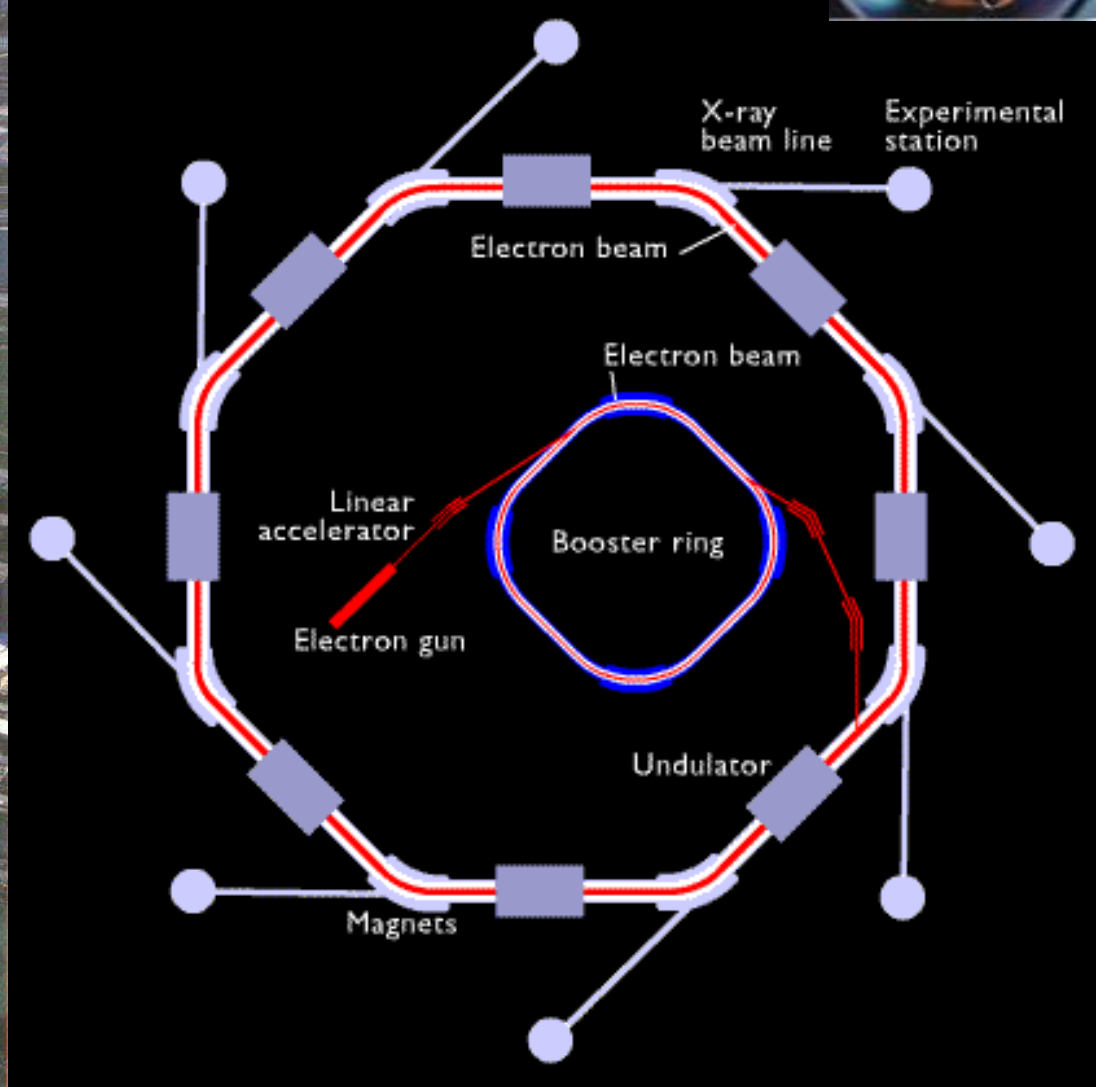
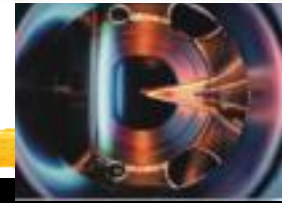
- filmové metody (film rovinný, válcový; pevný, pohyblivý)
- nefilmové metody s kvantovým detektorem (viz detekce RTG)

☐ podle vzorku

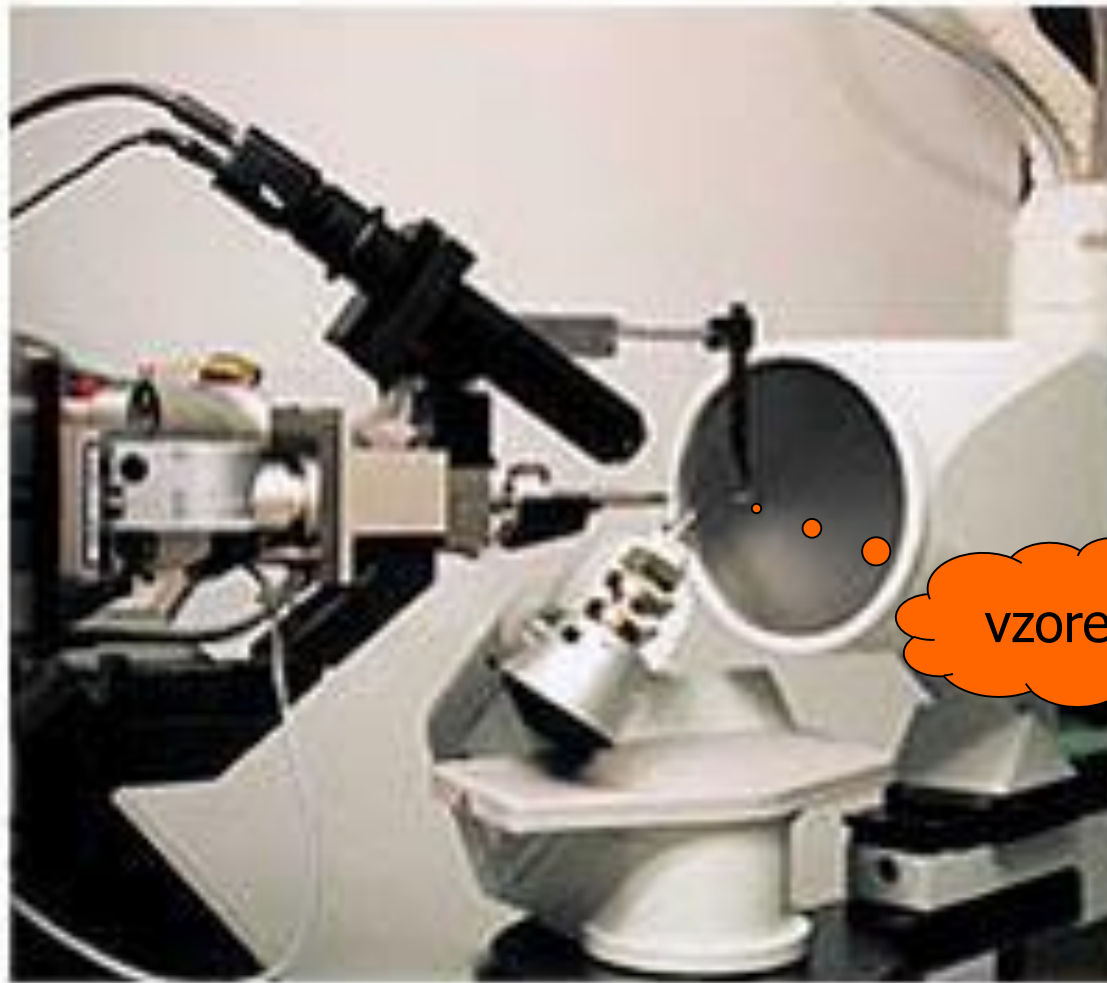
- polykrystalické (Debye-Scherrerova metoda)
- monokrystalové (precesní, Weissenbergova metoda)



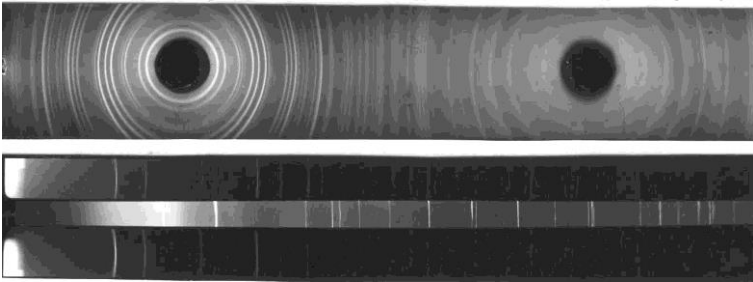
Synchrotron



Difraktometr



vzorek

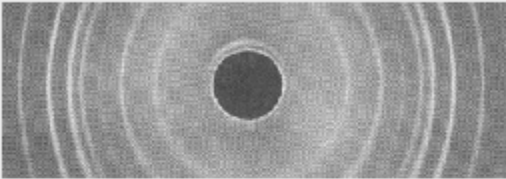
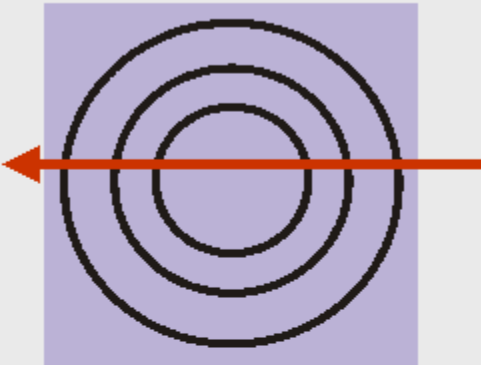


Prášková difrakce

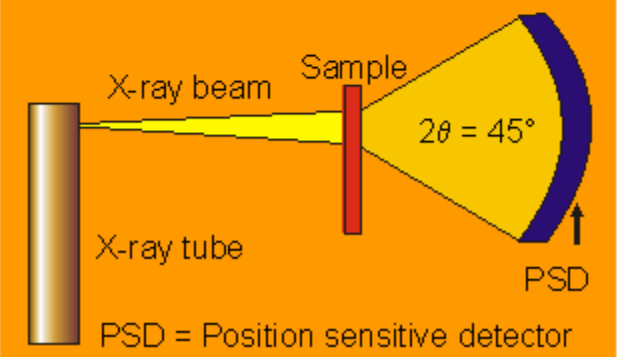
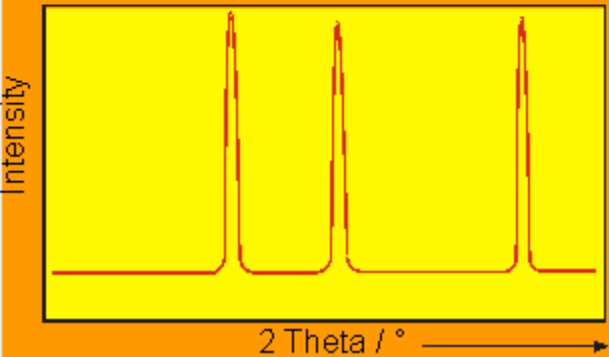
© Christian Hüfner
KIT, Germany

Registration of powder patterns

With films:



With detectors

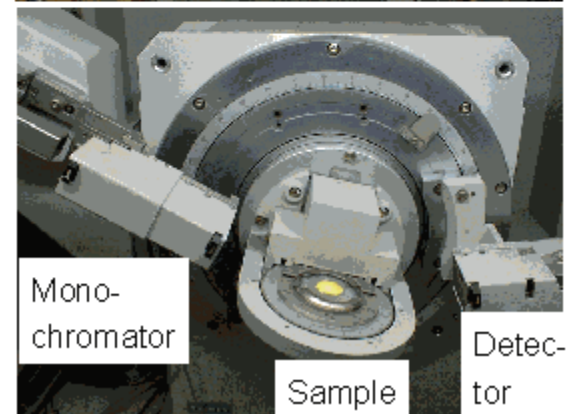
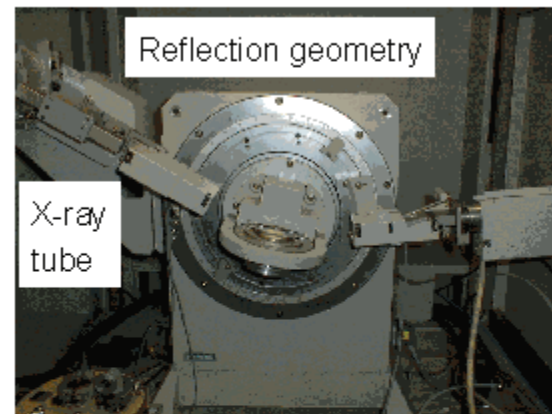
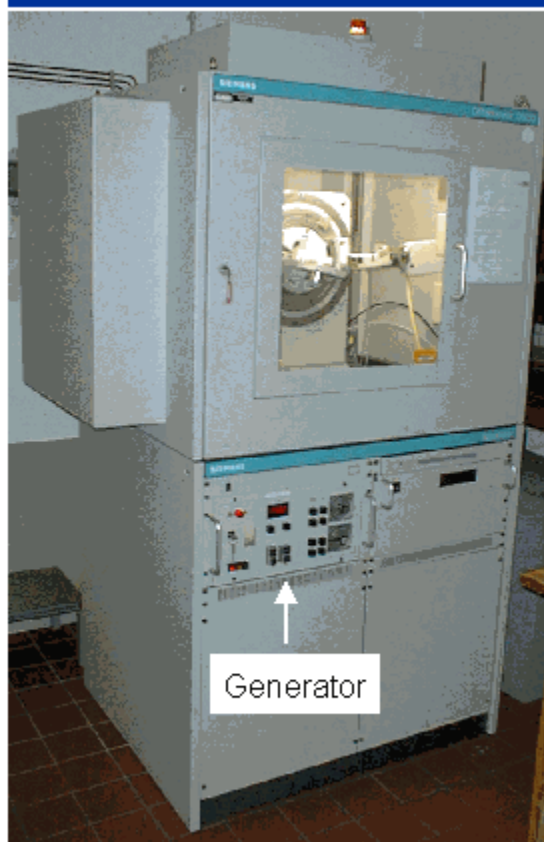


X-ray tube
Sample
X-ray beam
 $2\theta = 45^\circ$
PSD
PSD = Position sensitive detector

Difraktometry

©
Christoph Jähner
KIT, Germany

Diffractometers



Využití



- ❑ pro kvalitativní, kvantitativní i strukturální analýzu mají význam **difrakční úhel** paprsků vzniklých interferencí rozptýleného záření na vzorku a **intenzita** tohoto záření
- ❑ neexistují dvě různé látky, které mají naprosto stejné krystalové struktury
- ❑ každá látka poskytuje charakteristický difrakční obraz

Využití



- ❑ v kvalitativní a kvantitativní analýze se u neznámého vzorku zjistí závislost intenzity rozptýleného záření na difrakčním úhlu a ta se srovná s difr. záznamy známých látek ve sbírkách v atlasech nebo pomocí PC
- ❑ při kvantitativní analýze směsí se vyhodnotí intenzity rozptýleného záření o charakteristickém difrakčním úhlu jednotlivých komponent směsi

Využití práškové difrakce

- ❑ určování **rozměrů částic** z šířky difrakčních linií
- ❑ měření **pružného napětí** v povrchových vrstvách kovů (0,05 mm)
- ❑ zjišťování **přednostní orientace (textury)**
- ❑ studium **stupně uspořádanosti** nekrytalických látek (sklo, saze)
- ❑ zpřesňování hodnot **mřížkových parametrů**
- ❑ stanovení **struktur** u látek, kde nelze získat monokrystal

Využití RTG

- ❑ **medicína** (studium ledvinových a močových kamenů)
- ❑ **kvalitativní a kvant. analýza** na základě RTG spekter
- ❑ RTG difrakce - **struktura látek**, nedestruktivní měření
- ❑ **prášková difrakce ...**
- ❑ **využití RTG absorpce a emise sek. záření**