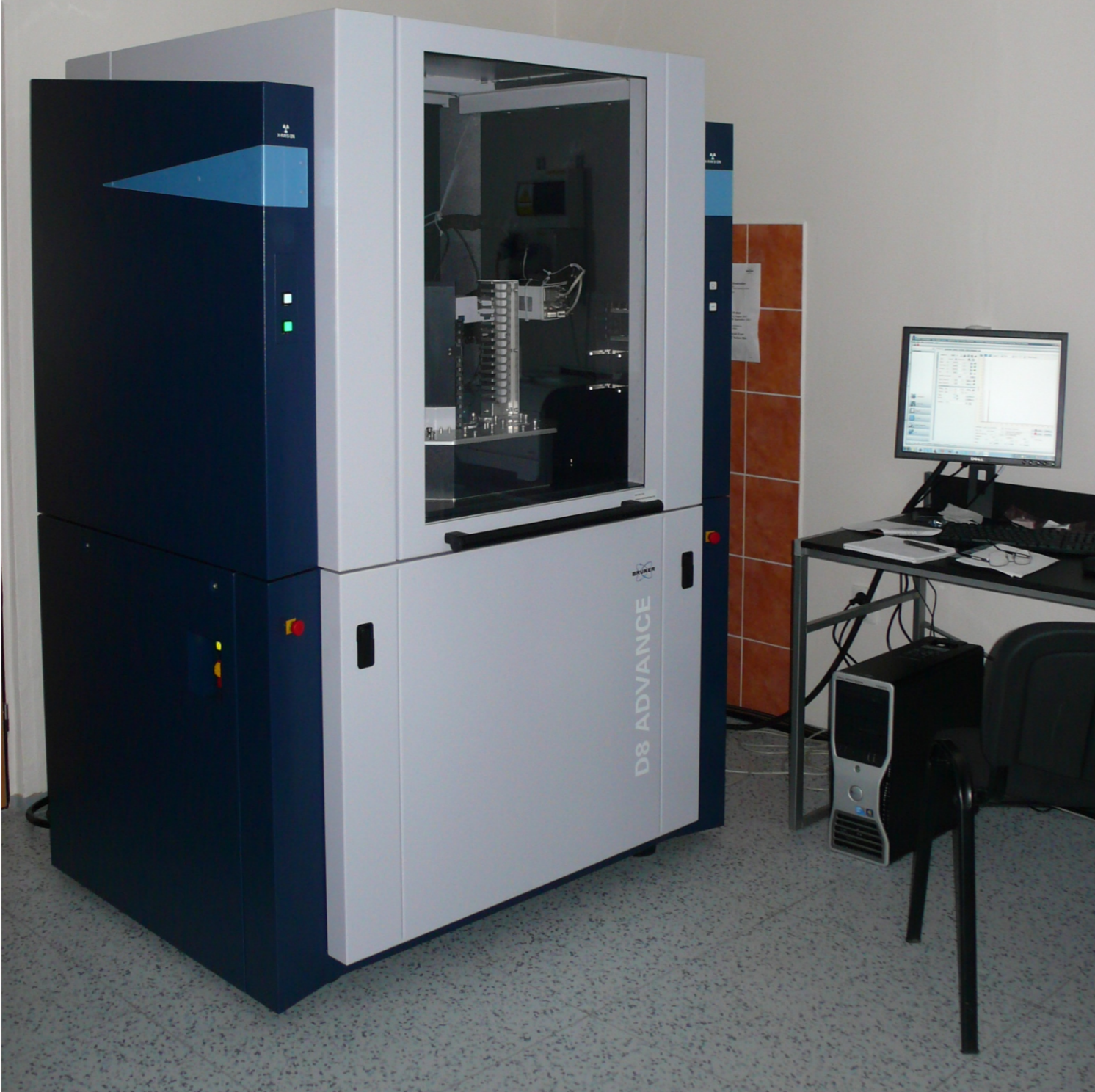
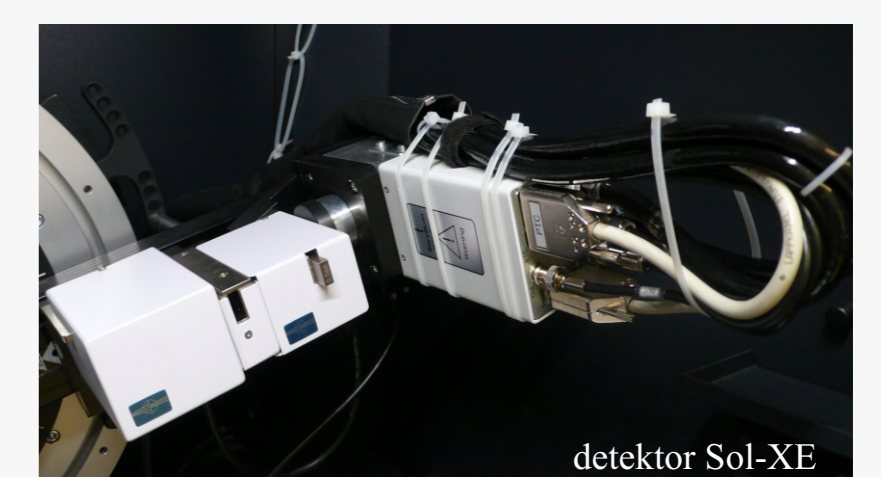
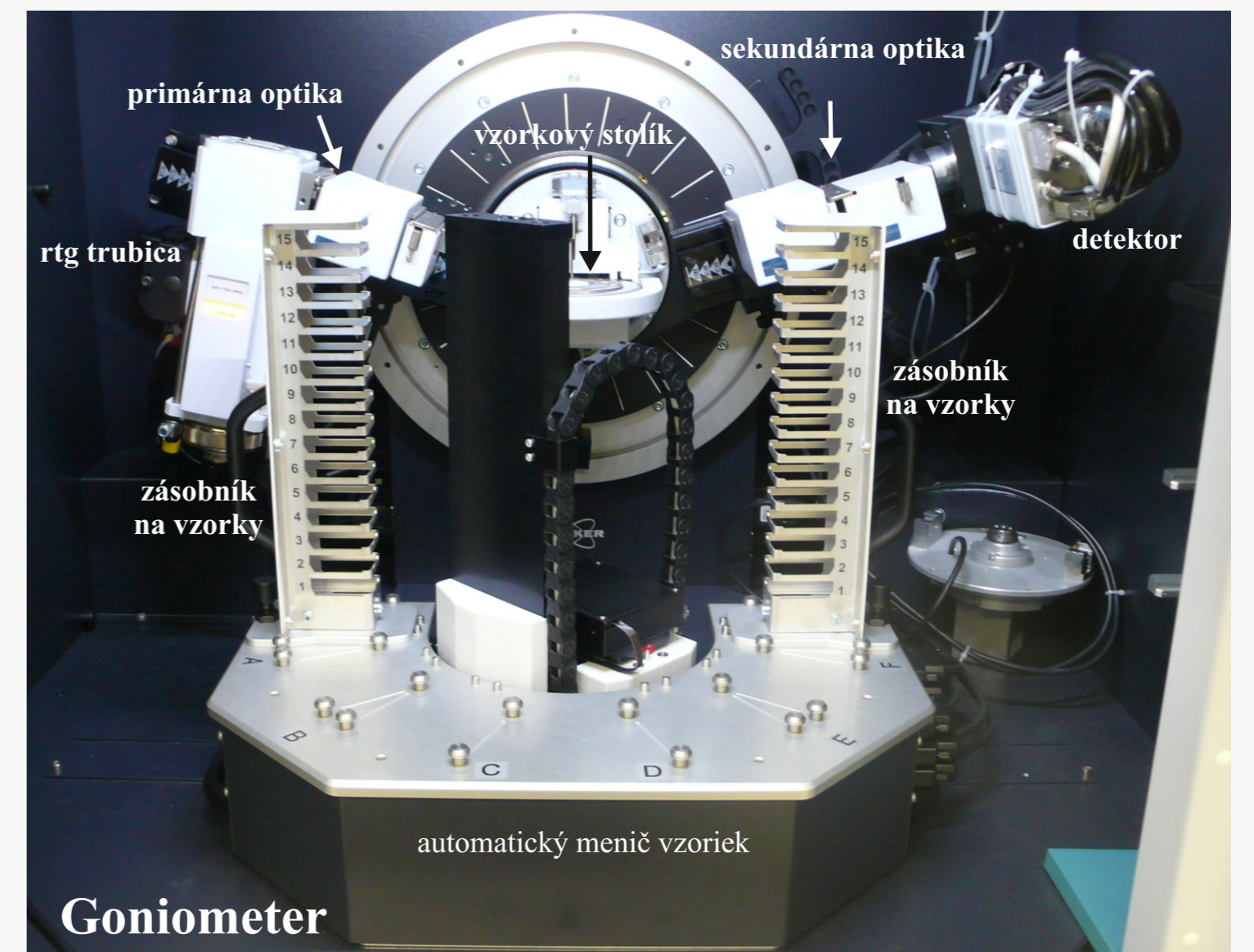


Röntgenový práškový difraktometer Bruker D8 ADVANCE DAVINCI.DESIGN



- GENERÁTOR:**
- max. výkon 3 kW
 - vysoké napätie 20-50 kV, prúd 5-60 mA
- GONIOMETER:**
- geometria Bragg-Brentano (vertikálny typ Θ/Θ)
 - priemer meracieho kruhu: 560 mm
 - uhlový rozsah: -110° až 168°
 - kontinuálny alebo krokový pracovný režim
 - najmenší nastaviteľný krok: $0,0002^\circ$
 - zdroj rtg žiarenia: keramická trubica s jemným čiarovým ohniskom a Cu anódou
 - motorizovaná primárna a sekundárna divergenčná štrbina
 - primárna a sekundárna Sollerova štrbina
 - automatický menič vzoriek s 2 zásobníkmi po 15 vzoriek
 - rotačný vzorkový stolík
 - kapilárový vzorkový stolík
 - fokusujúce Göbelovo zrkadlo
- DETEKTOR:**
- Sol-XE energiovodisepný SDD detektor s Si(Li) čipom
 - chladenie Peltierovým článkom
 - operačný rozsah: 3 keV - 30keV
 - energetické rozlíšenie: 250 eV pri 10^3 cps s použitím pulzného tvarovacieho času 6 μ s pre 5,9 keV
- OVLÁDANIE:**
- softvérový balík DIFFRAC.MEASUREMENT CENTER

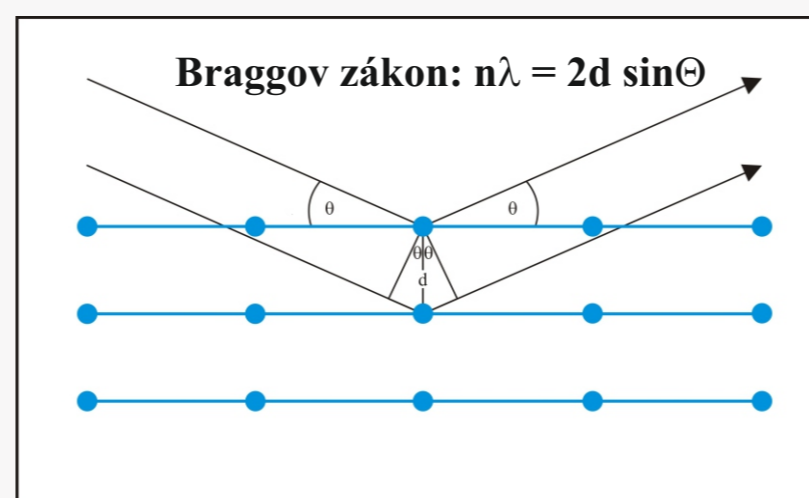


PRINCÍP METÓDY:

Rtg difrakcia je proces, pri ktorom sú rtg lúče, dopadajúce na kryštalickú látku, rozptyľované:

- charakterom elektrónovej štruktúry, ktorá obklopuje atómové jadro
- termálnou vibráciou atómu
- usporiadaním atómov v základnej bunke.

K rtg difrakcii na trojrozmernej kryštalovej štruktúre dochádza pri určitých geometrických podmienkach daných Braggovým zákonom. Vzniknutý rtg difrakčný vzor je charakteristický pre každú kryštalickú látku a môže slúžiť na jej identifikáciu a objasnenie jej kryštalovej štruktúry.



SPRACOVANIE ANALYTICKÝCH DÁT:

DIFFRAC.EVA - grafický program pre spracovanie, vyhodnotenie a prezentáciu 2- and 3-rozmerných dát.

Umožňuje:

- vyhľadávanie reflexov a tvorba súborov typu d/I
- odstránenie pozadia
- vyhladzovanie dát (metóda Savitzky-Golay alebo Fourierovo filtrovanie)
- odstránenie $K\alpha$, difrakcií (Rachingerova metóda)
- korekcia umiestnenia vzorky
- výpočet profilových parametrov: pozícia reflexov, integrovaná plocha, FWHM a iné
- určenie veľkosti difrakčných domén (Scherrerova metóda)

V kombinácii s databázou rtg difrakčných spektier ICDD Powder Diffraction File (PDF2):

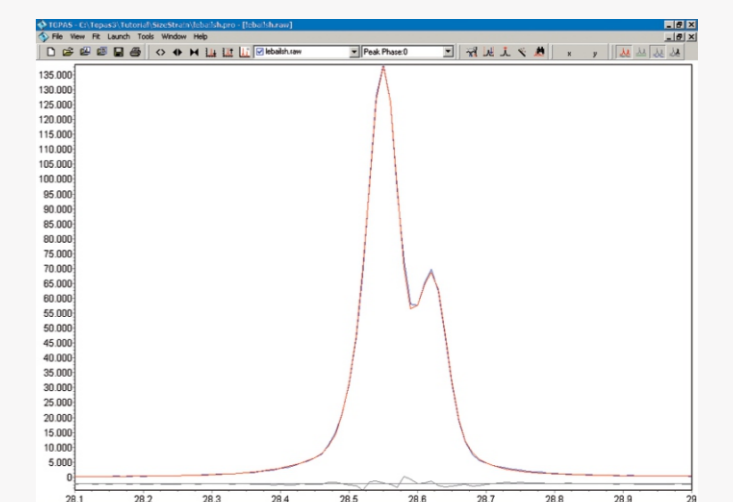
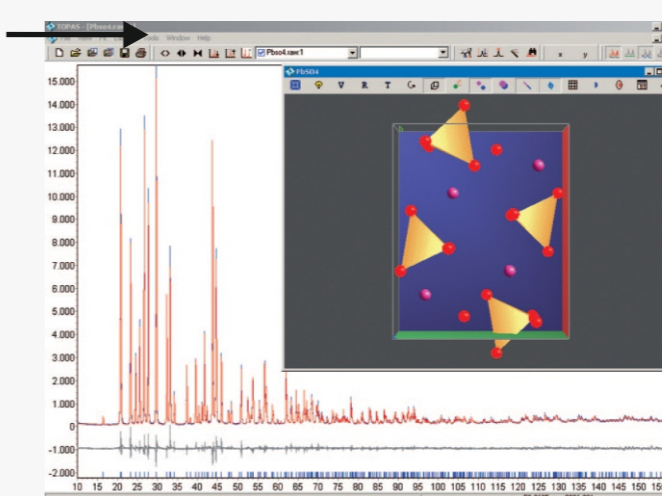
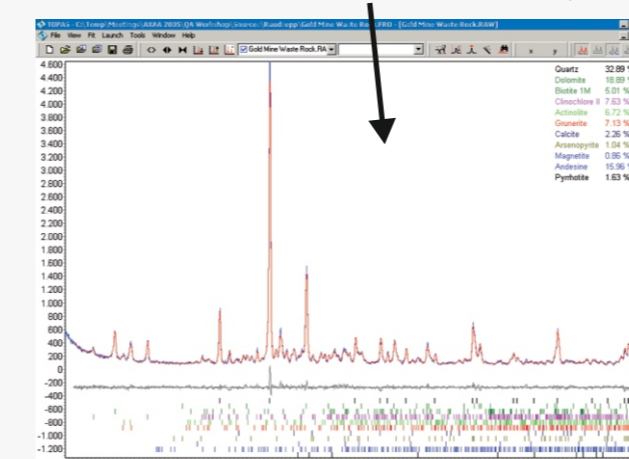
- vyhľadávanie a identifikácia minerálnych fáz
- zobrazenie všetkých databázových informácií
- grafická semi-kvantitatívna fázová analýza
- zobrazenie hkl indexov



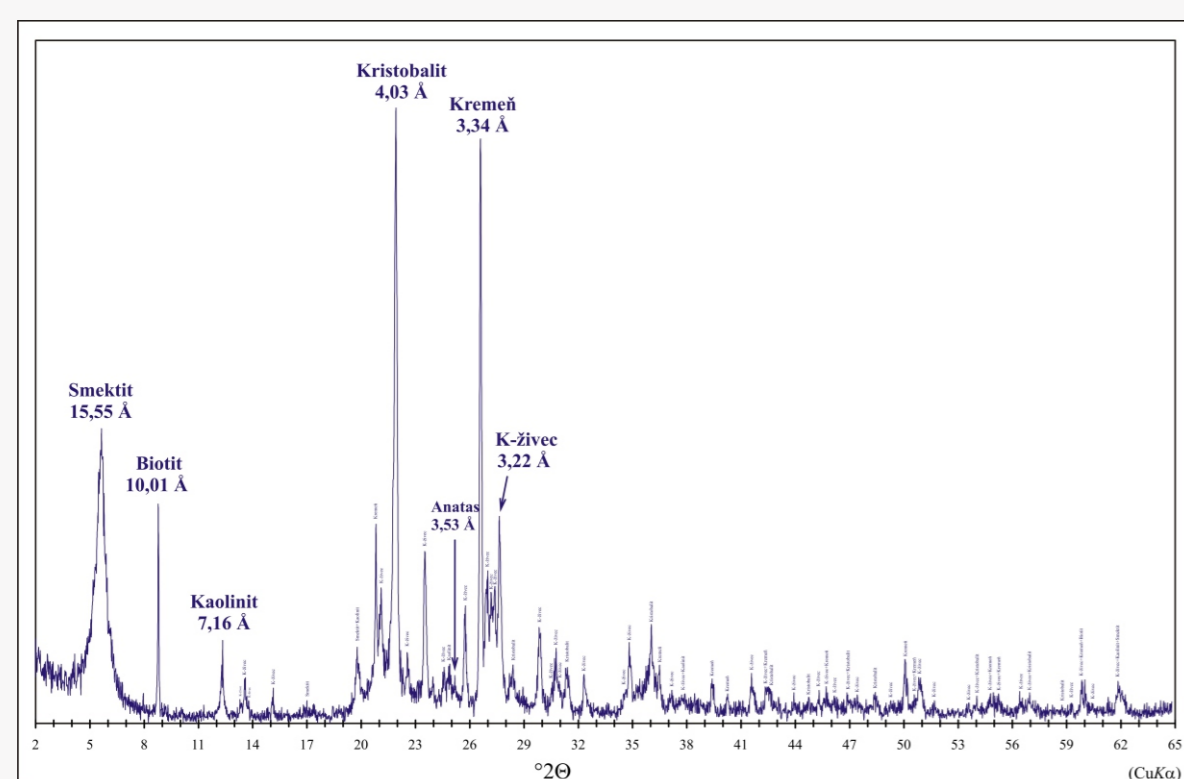
DIFFRAC.TOPAS - program pre profilovú a štruktúrnú analýzu s grafickým užívateľským rozhraním.

Zahrňuje:

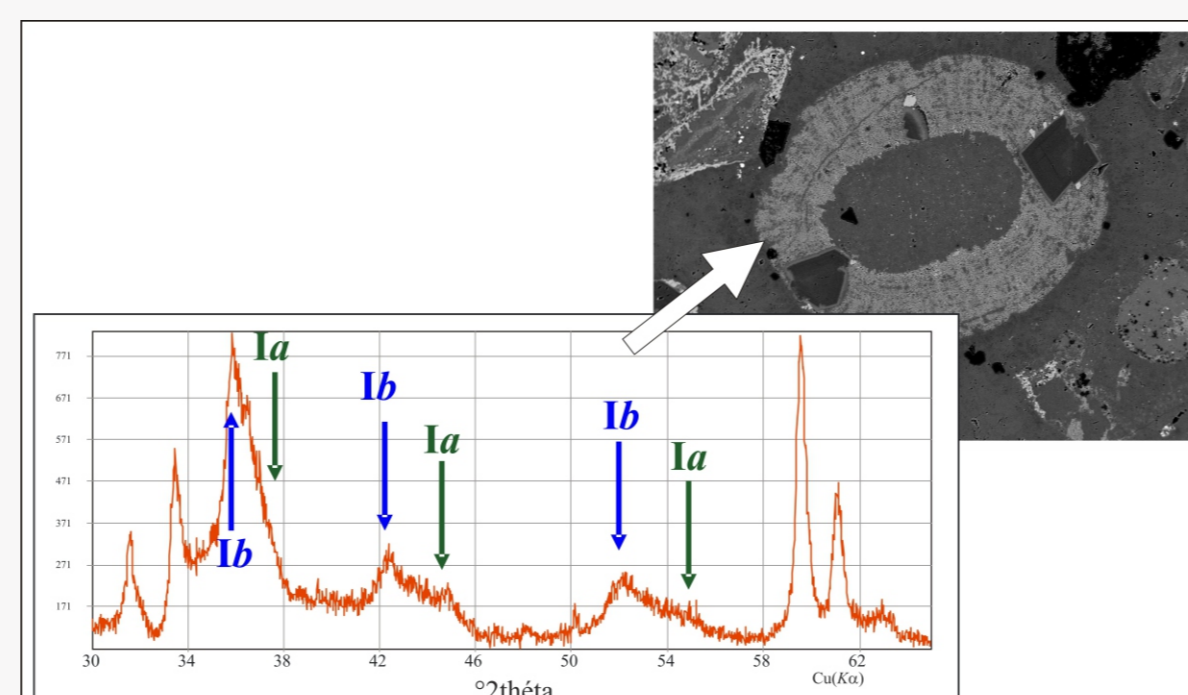
- "Single Line" fitovanie
- indexovanie (LSI a LP-Search metóda)
- "Whole Powder Pattern" dekompozícia (metóda Pawley a Le Bail)
- určenie štruktúry metódou *ab-initio*
- Rietveldovo spresňovanie štruktúry
- kvantitatívna Rietveldova analýza



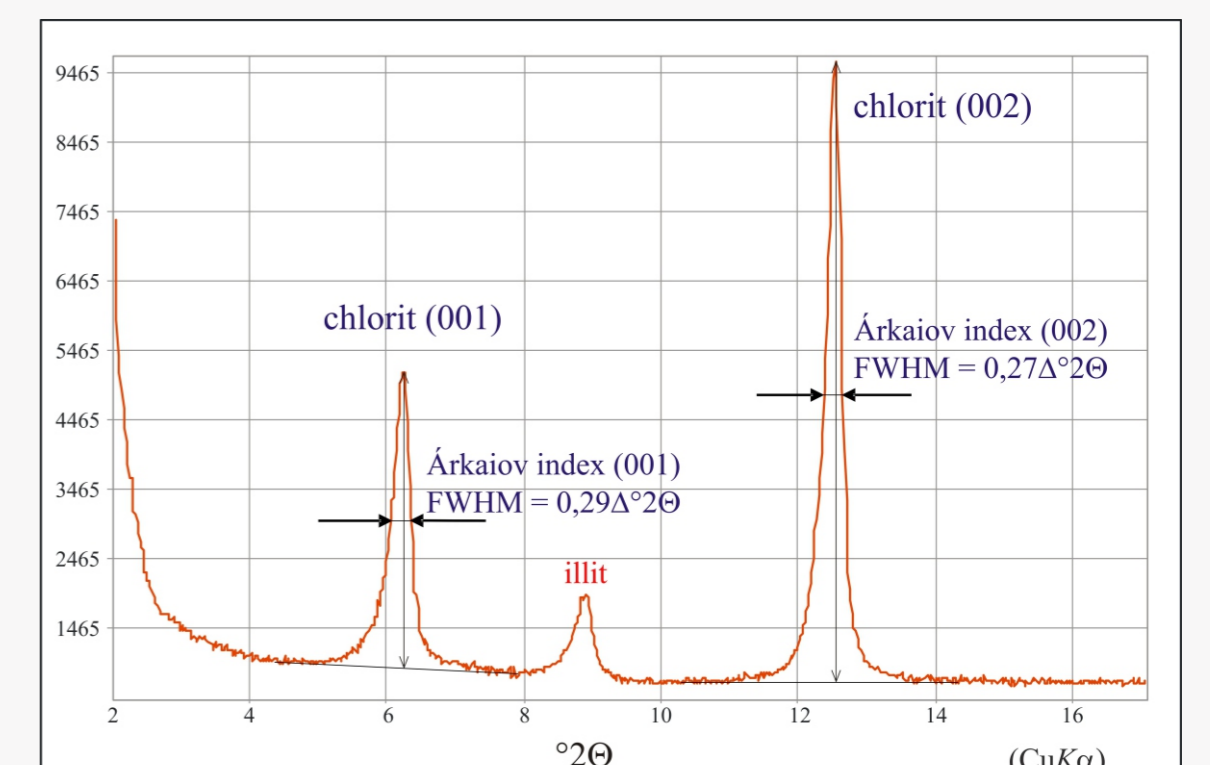
APLIKÁCIE:



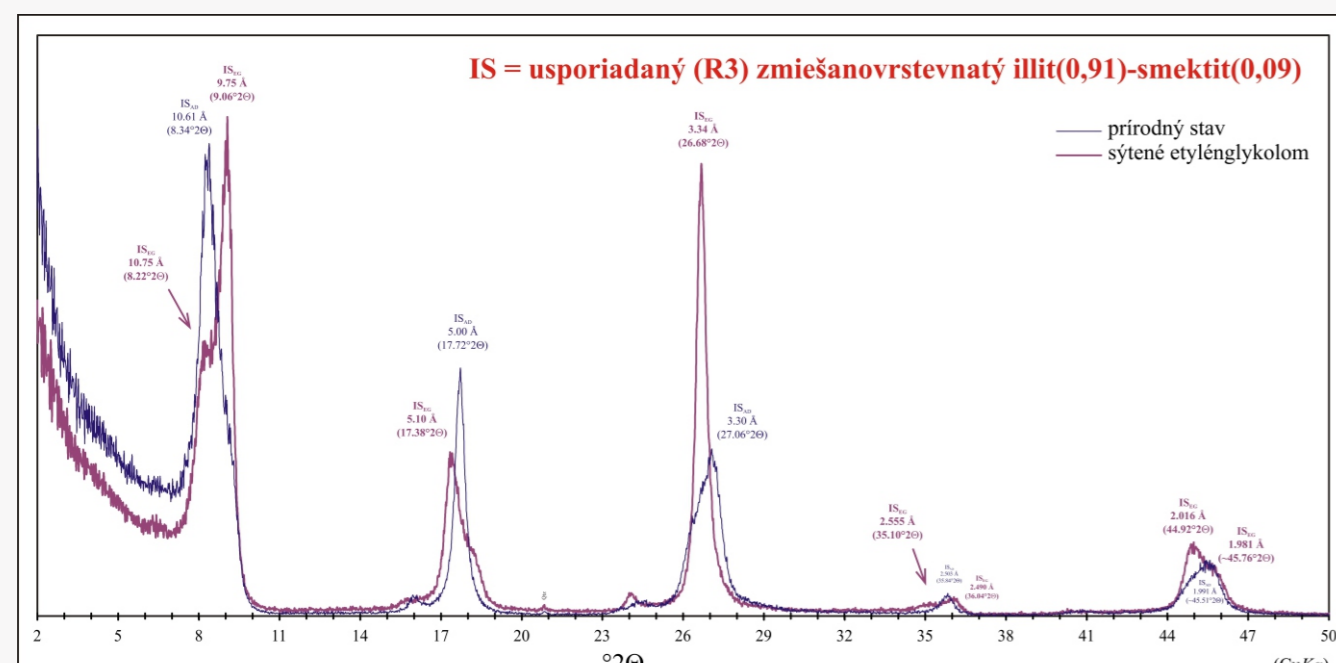
Kvalitatívna fázová analýza hornín.



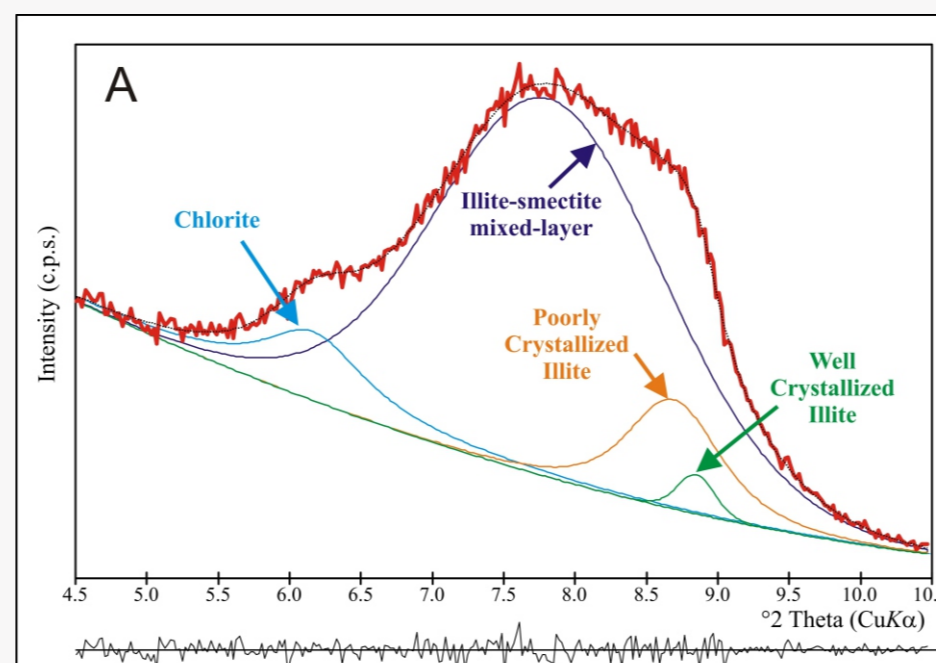
náhodne usporiadaný (R=0) zmiešanovrstevnatý bertierín(0,06)-chamosit(0,94)
náhodne usporiadaný (R=0) zmiešanovrstevnatý 1**b**(0,70)-1**a**(0,30)
Polytypizmus bertierínu-chamositu z oolitových Fe-rúdu križňanskej jednotky.



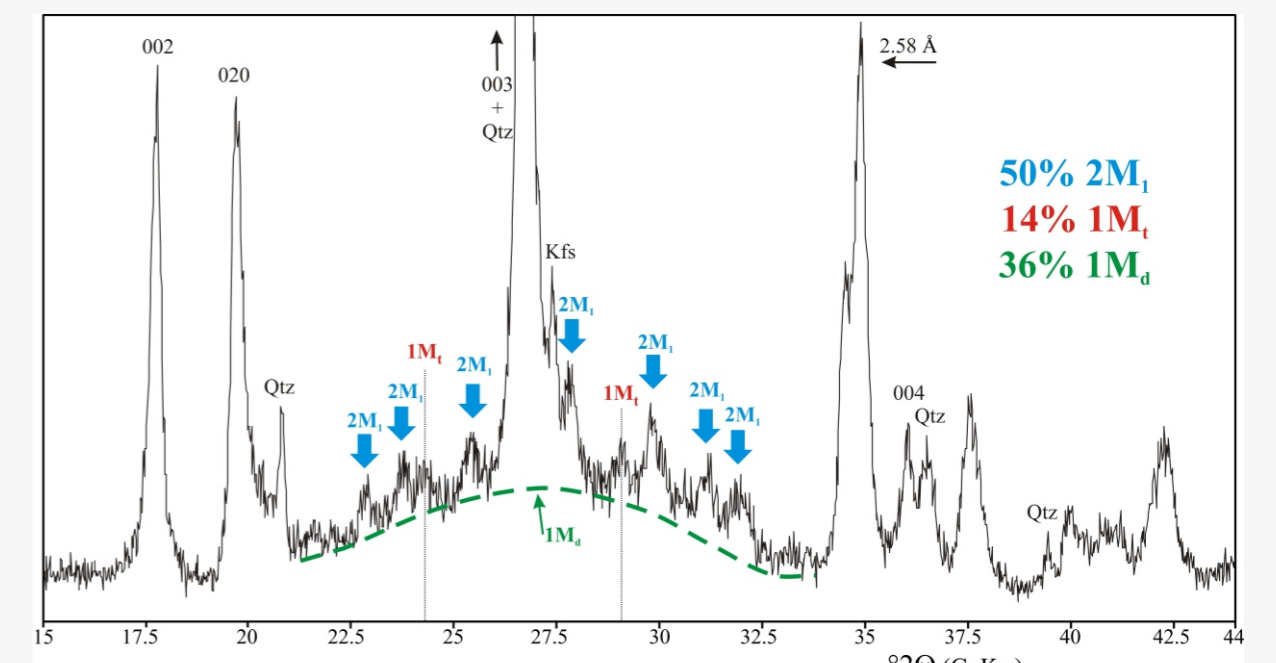
Stanovenie rôznych indexov "kryštalinity" ako indikátorov fyzikálnych podmienok premeny hornín.



Identifikácia zmiešanovrstevnatých silikátov.



Dekompozícia komplexných difrakčných pásov.



Kvantifikácia polytypového zloženia illitického materiálu z hydrotermálne alterovaných hornín.

Spracovali: Adrian Biroň a Jarmila Luptáková



Európska únia
Európsky fond regionálneho rozvoja

**Centrum excelentnosti pre integrovaný výskum
geosféry Zeme (ITMS: 26220120064)**

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku / Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov EÚ

Agentúra
Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu SR
pre štrukturálne fondy EÚ

