

Kvantitativna rtg analiza

1. Metoda zunanjega standarda

Enačba Alexandra in Kluga:

$$x_i = \mu / \mu_i \cdot I_i / (I_i)_0 - \text{masni delež komponente } i \text{ v zmesi}$$

$$\mu = \mu_i \Rightarrow x_i \text{ linearno z } I_i / (I_i)_0$$

n.pr.: kremen - kristobalit

$$\mu \neq \mu_i \Rightarrow \text{ni linearne odvisnosti}$$

n.pr.: kremen - Be oksid

kremen - KCl

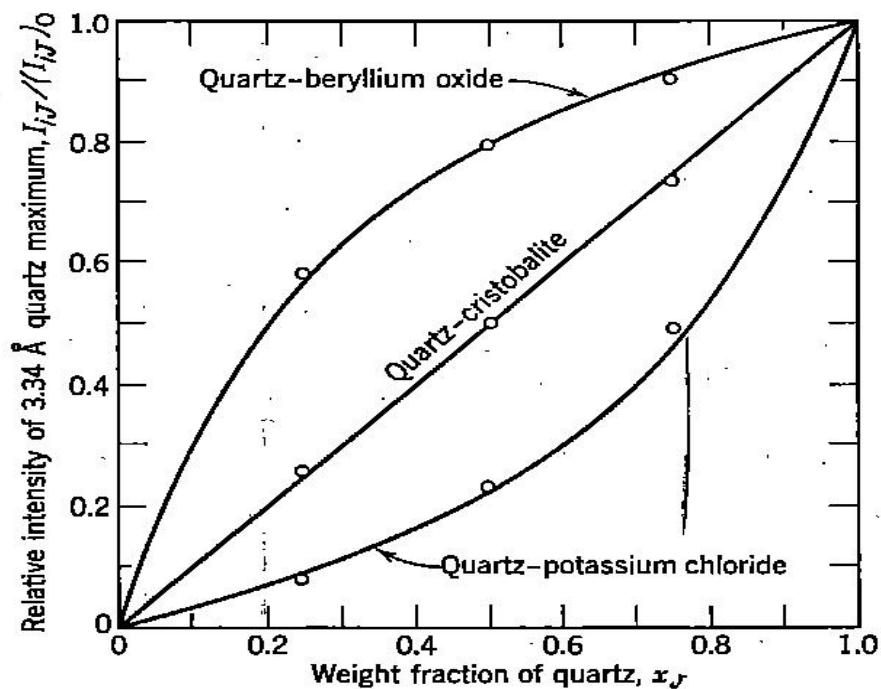
μ - lin.abs.koef.zmesi

μ_i - lin.abs.koef.komponente i

Odvisna sta od:

- kemične sestave vzorca,
- λ uporabljenih žarkov,
- debeline vzorca

Slika



Standardna snov:

- mora biti kubična (malo uklonov, ostri in jasni)
- ima nizek absorpcijski koeficient

Primer

- mešanice kremen - kristobalit (znane koncentracije z x_i za kremen 0 – 100 %)
- izmerimo višino določenega pika kremena pri vseh mešanicah
- diagram:
 $I_{kremena}/(I_{kremena})_o = f(x_{kremena}).$
- primerjamo višino istega pika kremena v posnetku, kjer hočemo določiti količino kremena
- iz diagrama odčitamo vrednost x za kremen.

2. Metoda internega (notranjega) standarda

I odbojev dane komponente v sistemu so premosorazmerne s količino te komponente v sistemu (Alexander in Klug):

$$I_i = K_i \cdot f_i / \mu$$

f_i - volumski delež komponente I v zmesi

μ - lin.abs.koef zmesi

K - konstanta proporcionalnosti

I dodane znane količine standardne komponente v zmesi je:

$$I_s = K_s \cdot f_s / \mu$$

⇓

$$I_i/I_s = K_i/K_s \cdot f_i/\mu \cdot \mu/f_s = K_i/K_s \cdot x_i/\rho_i \cdot \rho_s/x_s \cdot (1-x_s) = \alpha_i \cdot x_i$$

α_i - koef.proporcionalnosti = nakl.kot umeritvene premice

Standardna snov

- intenzitete se ne smejo prekrivati,
- inertna,
- I_s in I_i morata biti blizu skupaj (enako ozadje)

N.pr. določanje mineralne sestave surovine za cementni klinker:
notranji standard je CaF_2 z $d = 3,153 \text{ \AA}$ ($2\theta = 28,40^\circ$ za $\text{CuK}\alpha$)

za minerale:	kalcit	$d = 3,035 \text{ \AA}$
	kremen	$d = 3,35 \text{ \AA}$
	dolomit	$d = 2,89 \text{ \AA}$
	magnezit	$d = 2,74 \text{ \AA}$
	kaolinit	$d = 3,56 \text{ \AA}$

Primer:

- sestava mešanic po izrazu: $x_s + x_i + (1 - x_i)$

x_s - konstantna količina standarda (n.pr. 10 mas.%)

x_i - spremenljiva znana količina analizirane snovi (n.pr. 0 - 100 mas.%)

$1 - x_i$ - količina polnila (n.pr. 100 - 0 mas.%)

- posnetek analiziranega vzorca (z mineralom i) s konstantno količino standarda (n.pr. 10 mas.%) $\Rightarrow I_i/I_{\text{stand}}$
- merjenje I (število impulzov, površina pika ...)
- diagram: $I_{\text{kremena}}/I_{\text{stand}} = f(x_{\text{kremena}})$

