

UN NOU TIP DE CATALOG PENTRU IDENTIFICAREA SUBSTANTELOR ȘI FAZELOR LOR CRISTALINE PRIN METODĂ DIFRAȚIEI RAZELOR X

de dr. DAN CIOMĂRTAN

Cu ajutorul difracției razelor X se pot determina calitativ după formula și structura lor, substanțe cristaline individuale sau aflate în amestecuri de proveniență naturală (minerale) sau sintetice (aliaje, minerale prelucrate etc.).

Pentru aceasta se compară un spectru de difracție obținut experimental cu cele aparținând la circa 30.000 de substanțe pure.

Aceste spectre sînt date sub formă de fișe de difracție și sînt editate de către : Joint Comitee on Powder Diffraction Standards - National Bureau of Standards - S.U.A. Fișierul respectiv este însoțit de cataloage tip "Hanawalt" sau de tip "Fink", cu ajutorul cărora se pot identifica fazele cristaline după un număr de 8 maxime de difracție (cele mai intense), dîndu-se pozițiile și intensitățile lor relative, spectrale.

Deoarece, pe de o parte, intensitățile relative ale liniilor de difracție sînt afectate de factori fizici și experimentali, necunoscuți în momentul prelevării spectrului probei analitice, iar pe de altă parte numărul substanțelor catalogate crește continuu, ducînd la suprapuneri ale maximelor ce aparțin mai multor componenți, acestea au condus, așa cum arată literatura de specialitate, la un mare grad de nedeterminare în identificarea compușilor pe baza cataloagelor clasice și la micșorarea versatilității metodei DRX.

În cadrul laboratorului de raze X al Institutului de Cercetări și Proiectări pentru Tehnologia Sticlă și Ceramică Fină din București s-a considerat un alt parametru care înlocuiește intensitățile relative ale liniilor de difracție, pentru catalogarea compușilor și fazelor după spectrele lor caracteristice. Acest parametru este frecvența de suprapunere, pe aceeași poziție spectrală, a aceluiași linii de difracție aparținînd unui număr variabil de faze.

S-a obținut în acest fel un alt tip de catalog, actualmente pentru 3.000 de compuși, reprezentînd minerale naturale.

Acest catalog se poate aplica la identificarea rapidă și perfect determinată a unui număr oricît de mare de compuși aflați în amea-

tec. Modul de acțiune poate fi manual sau cu calculator electronic.

Pentru scopurile muzeale, se menționează posibilitatea analizelor calitative prin DRX ale : solurilor, materialelor ceramice, pietrelor prețioase, materialelor de sculptură și de construcții, mineralelor brute sau prelucrate.

Procedura este generală și se poate aplica la optimizarea cataloagelor : spectrometrie vizibil-UV, spectrometrie IR etc.

**UN NOUVEAU TYPE DE CATALOGUE POUR
L'IDENTIFICATION DES SUBSTANCES ET DE LEURS
PHASES CRISTALLINES, PAR LA MÉTHODE DE DIF-
FRACTION DES RAYONS X.**

Résumé

L'ouvrage signale l'apparition d'un nouveau type de catalogue qui facilite l'identification des phases cristallines.