

Materjali faasikoostise määramine kombinatsioonhajumise spektrist

Taavi Tammaru

2 detsember 2025

Töö eesmärk

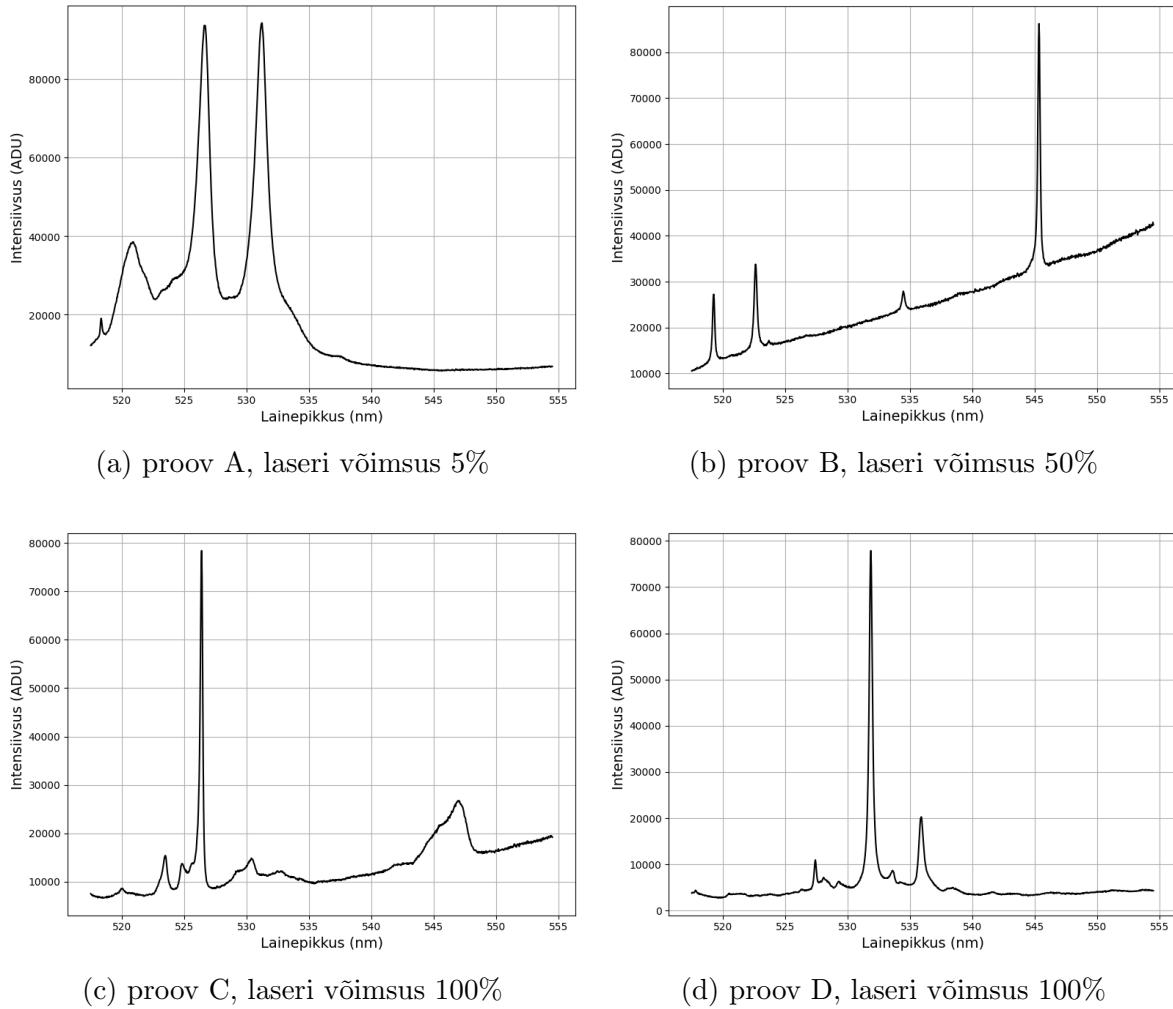
Töö eesmärk on kombinatsioonhajumise nähtusega tutvumine, kaasaaegse Raman-spektromeetri kasutamine ja proovi faasikoostise kindlakstegemine Raman-spektri kaudu.

Katseseadmed

- Raman-spektromeeter Renishaw inVia
- Faasipuhtad ained (mineraalid):
 - $\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$ (dolomiit)
 - TiO_2 (rutiil)
 - SnO_2 (kassiteriit)
 - ZnO
- Eelmainitud ainete segudest pressitud tabletid

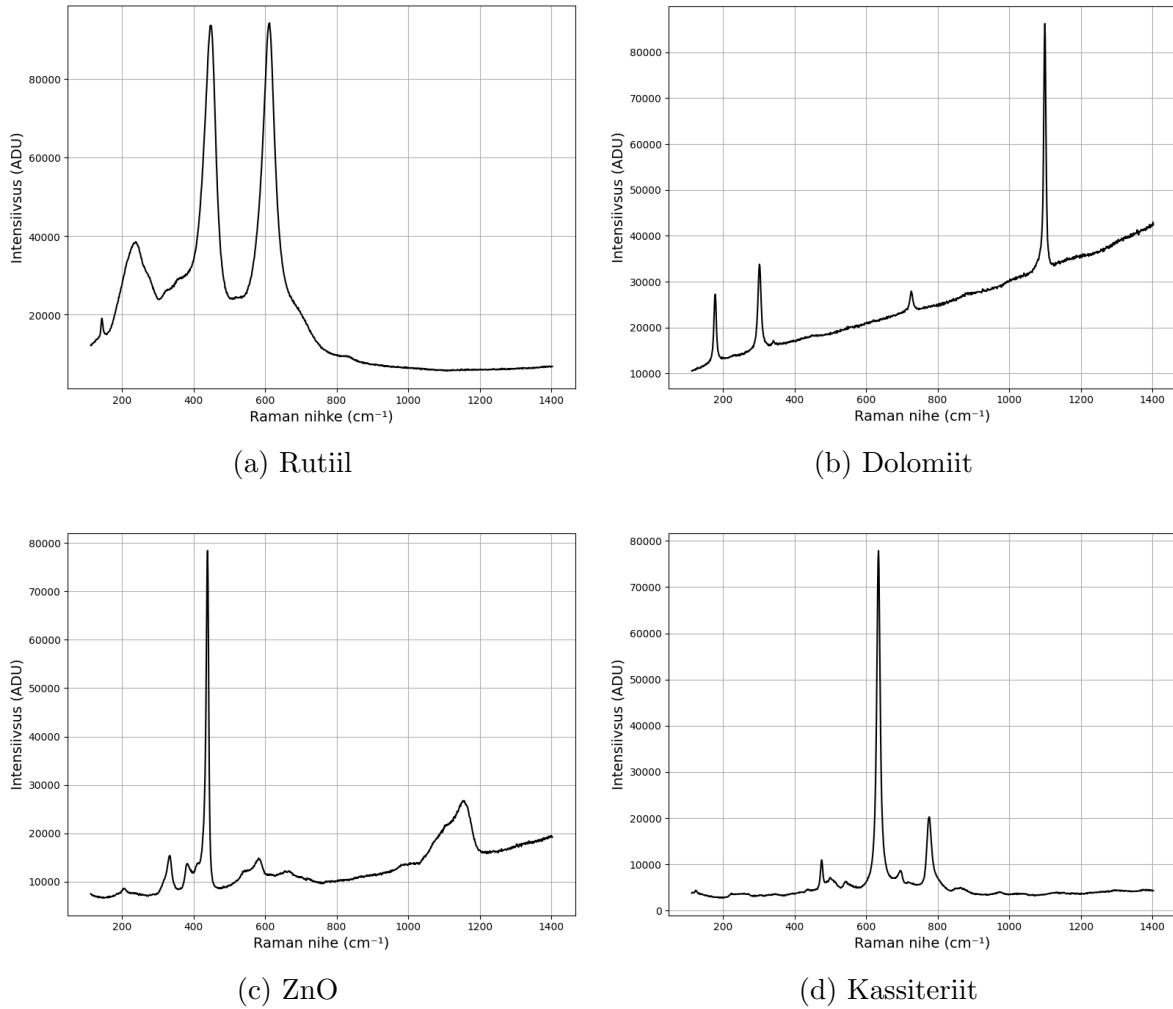
Faasipuhas materjal

Saadud töötlemata proovide tulemused on järgnevad:



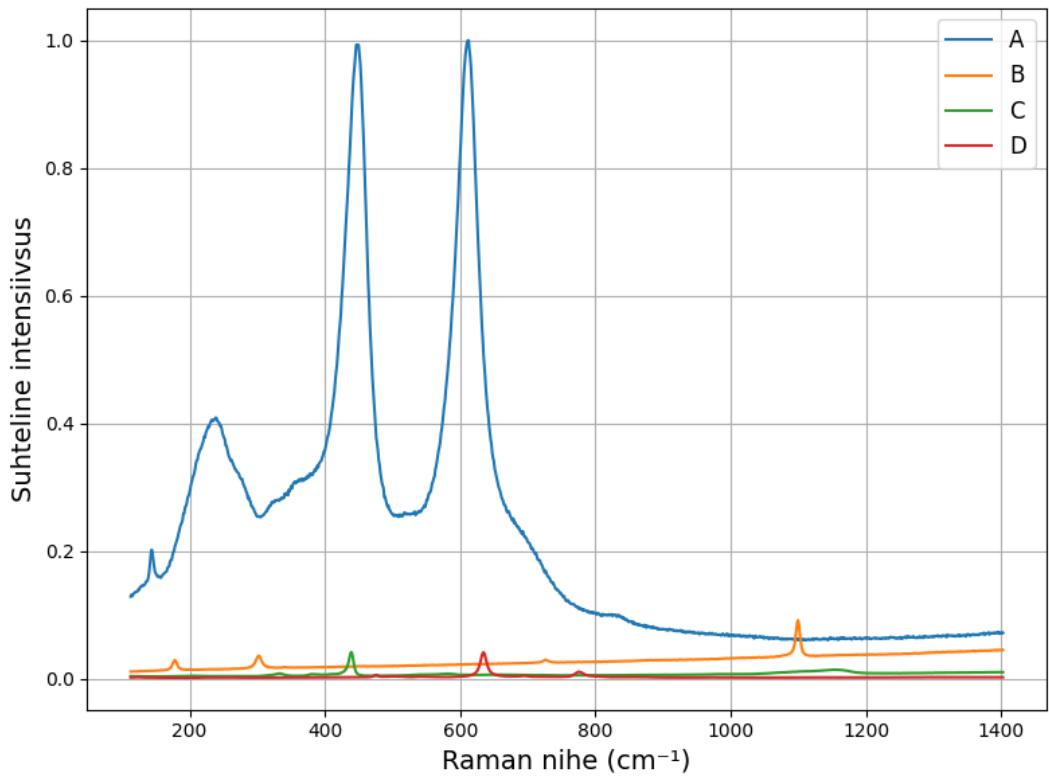
Joonis 1: Faasipuhaste proovide spektrid lainepekkuse skaalal

Nüüd viime graafikud ramani nihke skaalasse, et saaksime neid võrrelda kirjanduses leiduvate spektritega ja tuvastada proovi numbritele vastavad ained. Tuvastame raman spektrid kasutades andmebaasi [ruff.net](#).



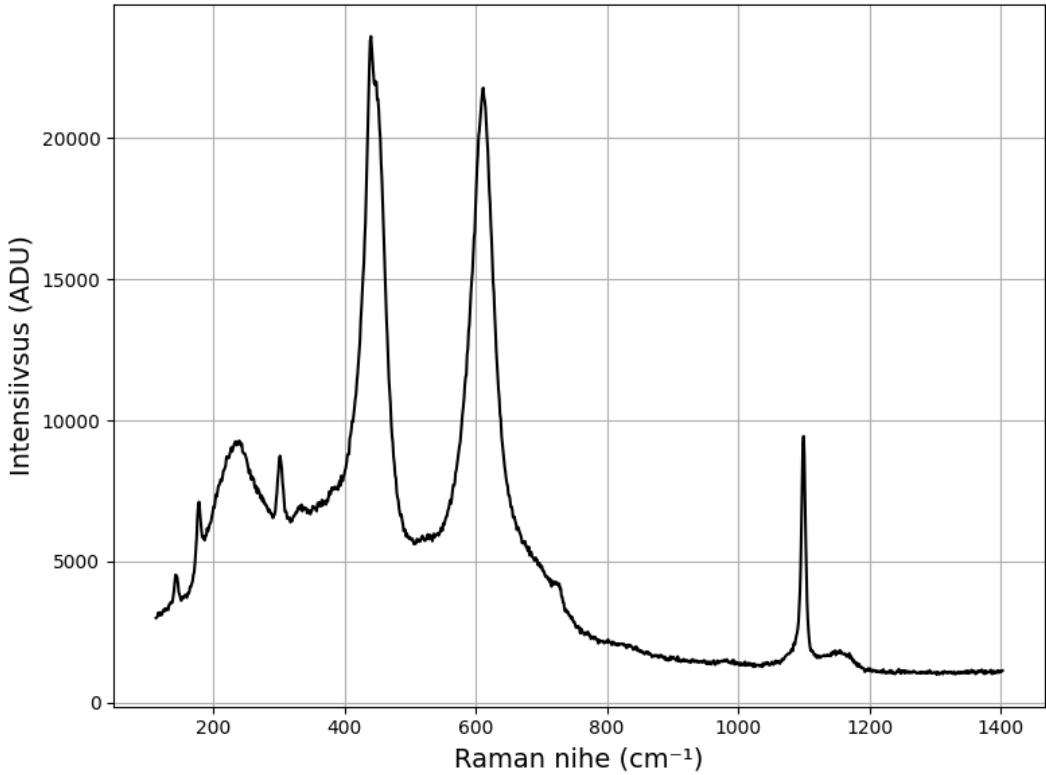
Joonis 2: Raman spektrid määratud koostisega

Järgmiseks normeerime raman spektrite graafikud võttes arvesse laseri intensiivsust ning visualiseerime saadud tulemused ühel graafikul:



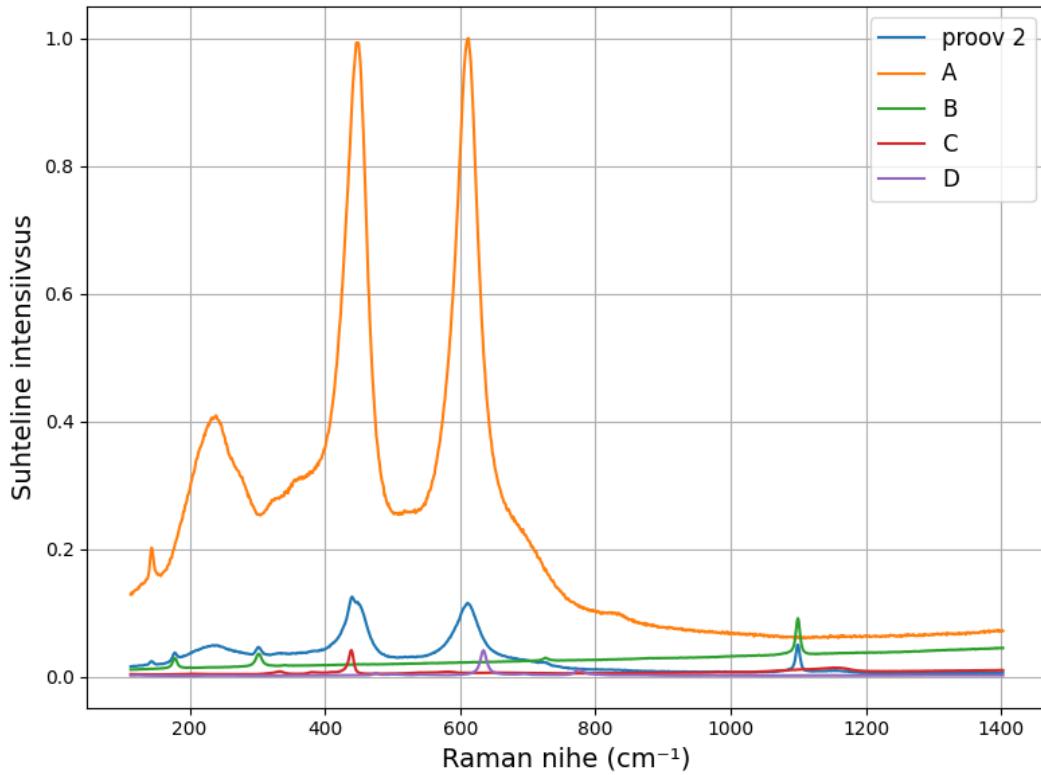
Tundmatu proov

Järgmiseks proovin tuvastada tundmatu segu ruumala protsendilise koostise. Eesmärk on tuvastada tundmatu proov number 2:

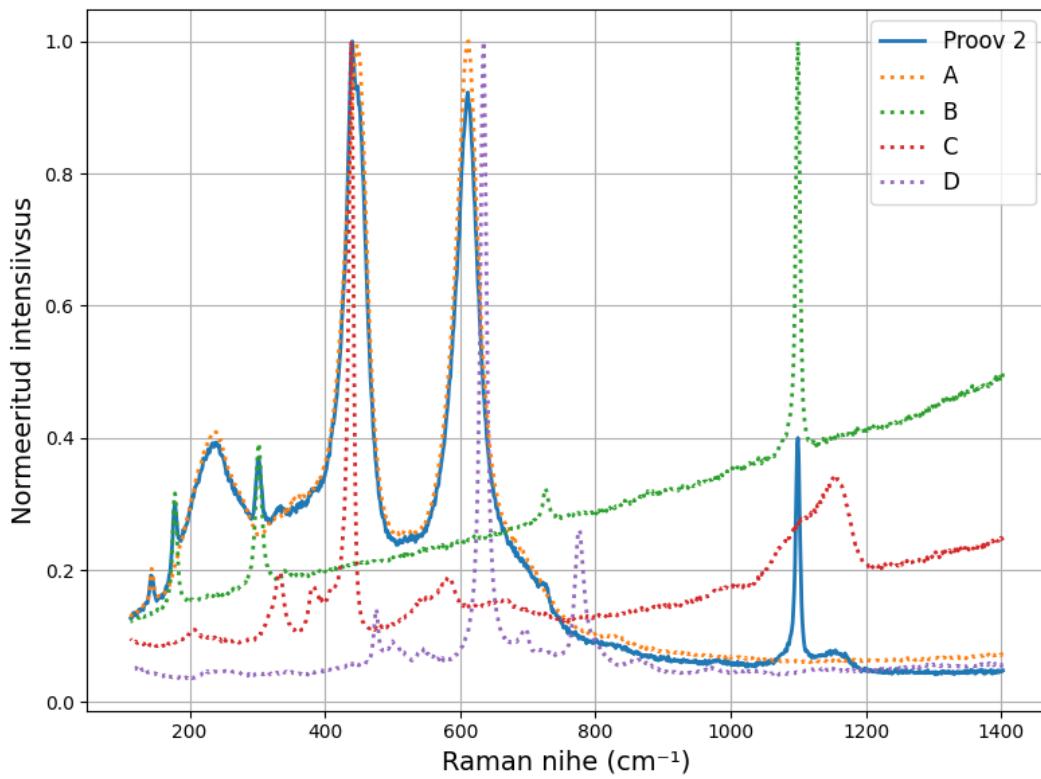


kvalitatiivne määramine

Määrame kvalitatiivselt, mis ühendeid tundmatu proov sisaldab. Proovi ning puhaste materjalide spektrid ühel graafikul:



Selle graafiku põhjal on raske kvalitatiivset hinnangut anda, seega normeerime kõik graafikud nullist üheni:

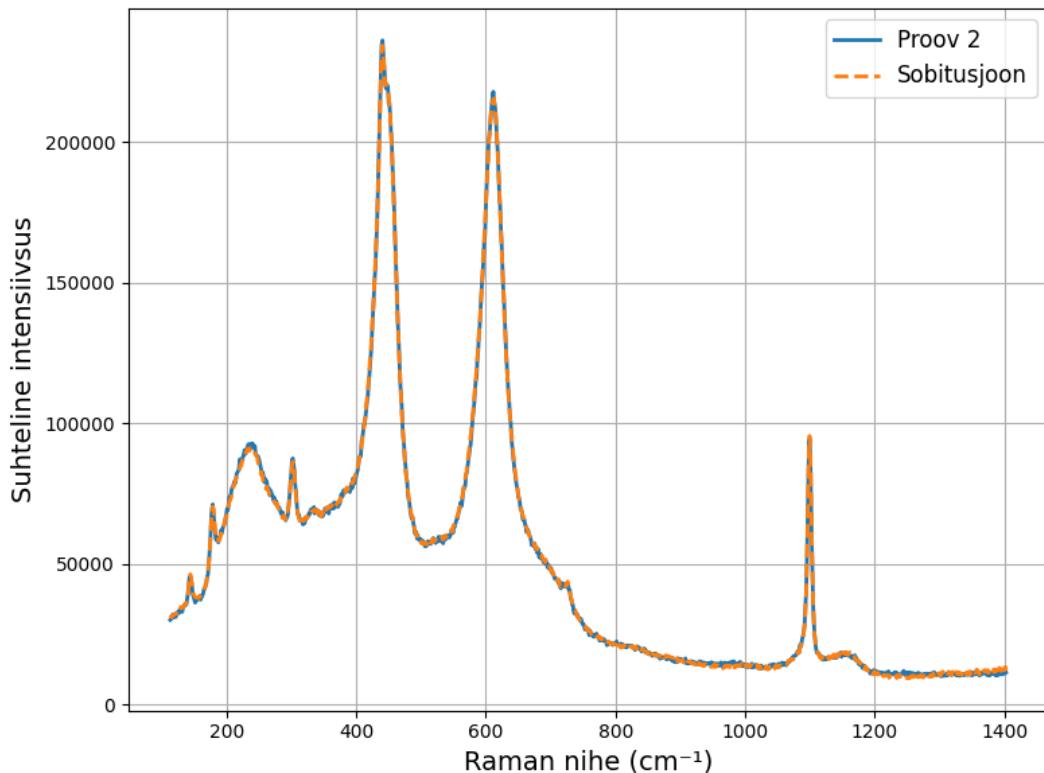


Sit on näha, et segu kindlasti koosneb ainetest A, B ja C. Aine D sisaldust on piisavalt

väike, et seda ei saa kvalitatiivselt hinnata.

Kvantitatiivne määramine

Etteantud koodi abil leiame milline kombinatsioon teadaolevatest spektritest A, B, C ja D annab meile parima lähenduse tundmatu proovi 2 spektrile.



Saame vastavad ruumala protsendid:

- aine A - 7.73%
- aine B - 51.4%
- aine C - 40.79%
- aine D - 0%

Vastavad massiprotsendid on:

- dolomiit - 4.20%
- rutiil - 41.4%
- kassiteriit - 54.4%
- ZnO - 0%