

Materjali faasikoostise määramine kombinatsioonhajumise spektrist

Taavi Tammaru

2 detsember 2025

Töö eesmärk

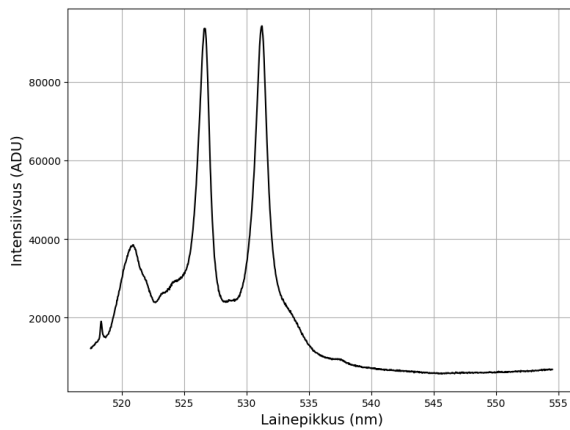
Töö eesmärk on kombinatsioonhajumise nähtusega tutvumine, kaasaegse Raman-spektromeetri kasutamine ja proovi faasikoostise kindlakstegemine Raman-spektri kaudu.

Katseseadmed

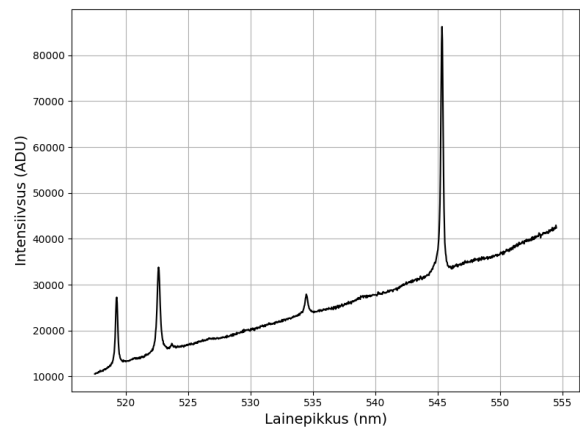
- Raman-spektromeeter Renishaw inVia
- Faasipuhtad ained (mineraalid):
 - $\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$ (dolomiit)
 - TiO_2 (rutiil)
 - SnO_2 (kassiteriit)
 - ZnO
- Eelmainitud ainete segudest pressitud tabletid

Faasipuhas materjal

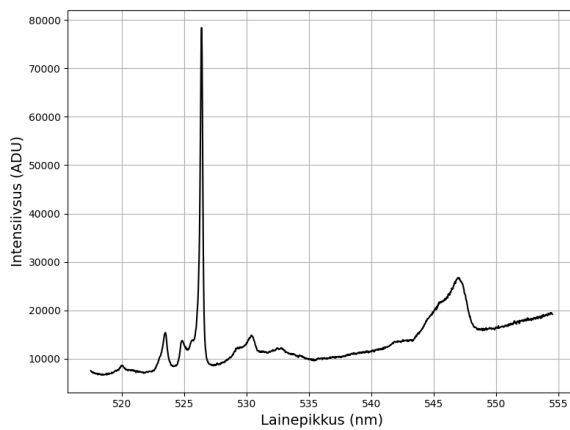
Saadud töötlemata proovide tulemused on järgnevad:



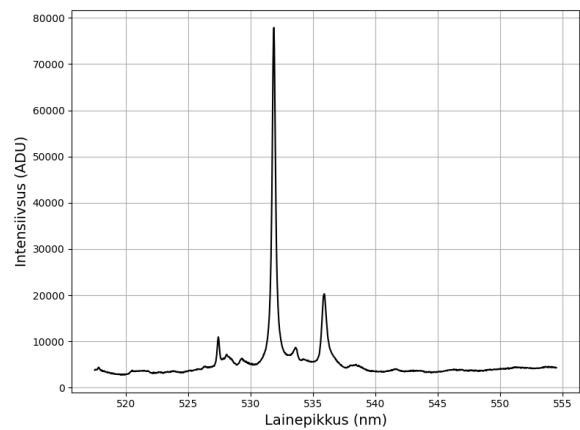
(a) proov A, laseri võimsus 5%



(b) proov B, laseri võimsus 50%



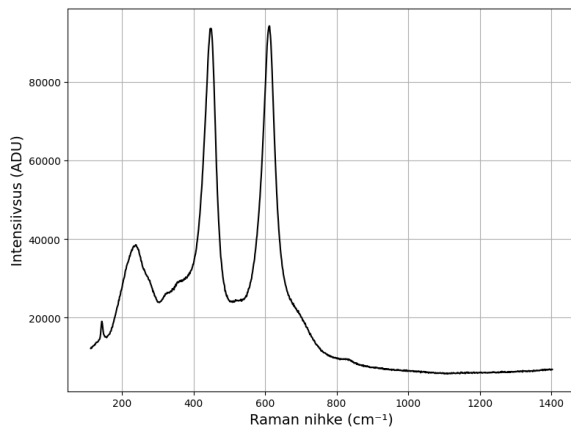
(c) proov C, laseri võimsus 100%



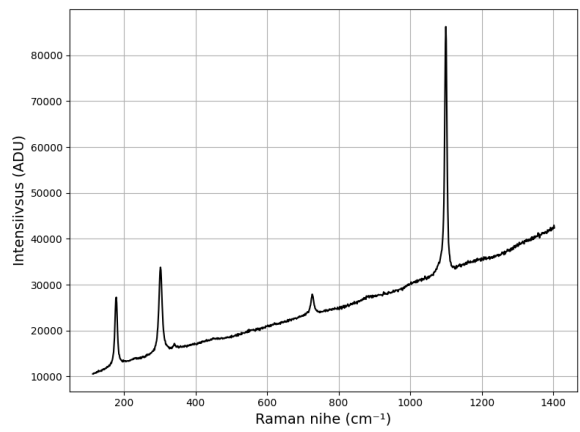
(d) proov D, laseri võimsus 100%

Joonis 1: Faasipuhaste proovide spektrid lainepikkuse skaalal

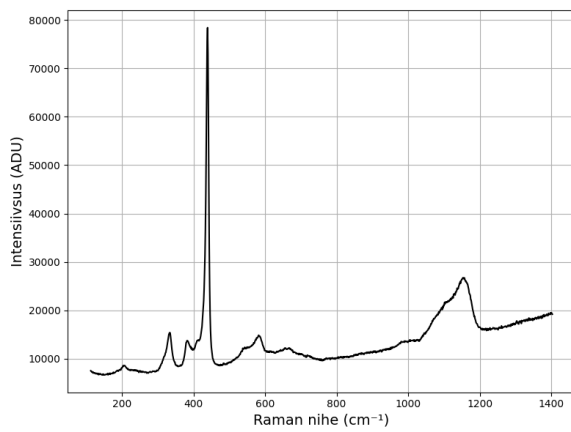
Nüüd viime graafikud ramani nihke skaalasse, et saaksime neid võrrelda kirjanduses leiduvate spektritega ja tuvastada proovi numbritele vastavad ained. Tuvastame raman spektrid kasutades andmebaasi ruff.net.



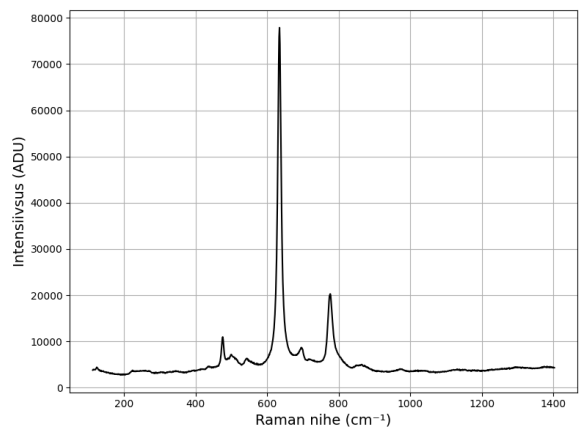
(a) Rutiil



(b) Dolomiit



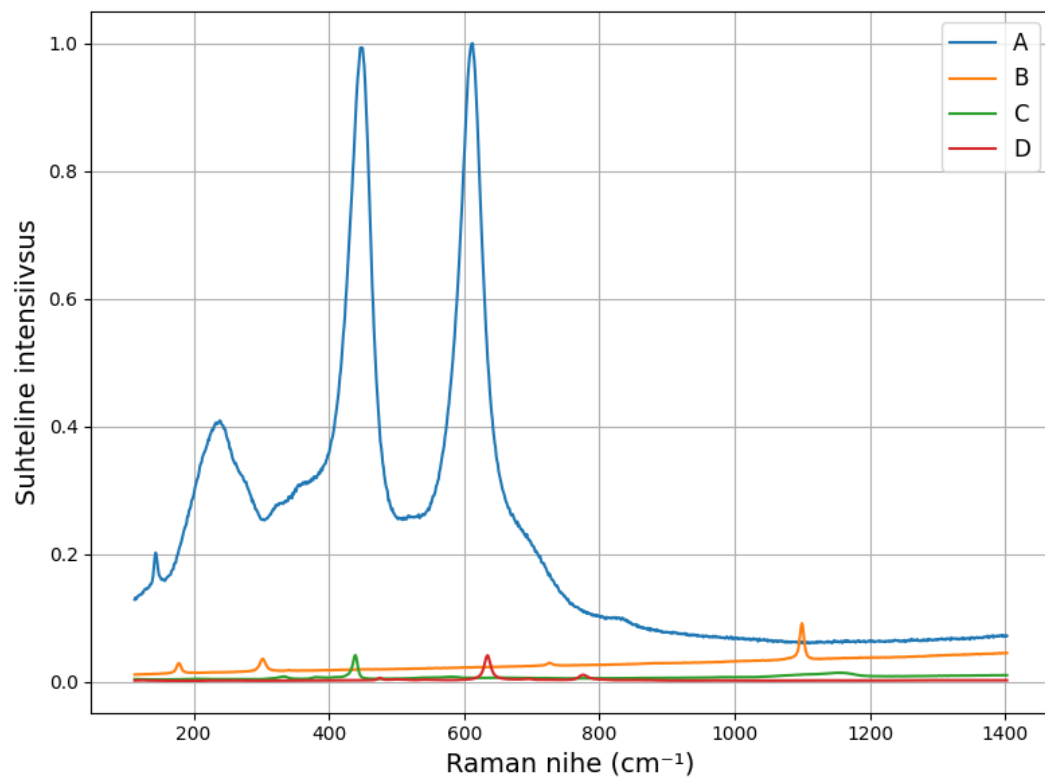
(c) ZnO



(d) Kassiteriit

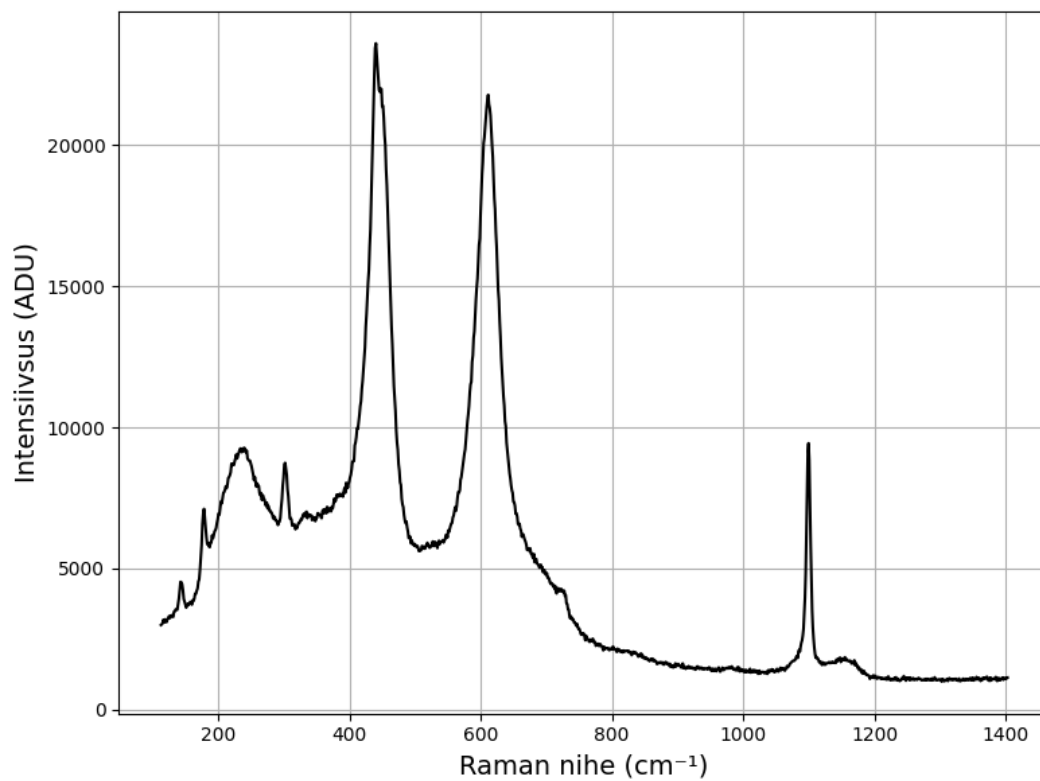
Joonis 2: Raman spektrid määratud koostisega

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



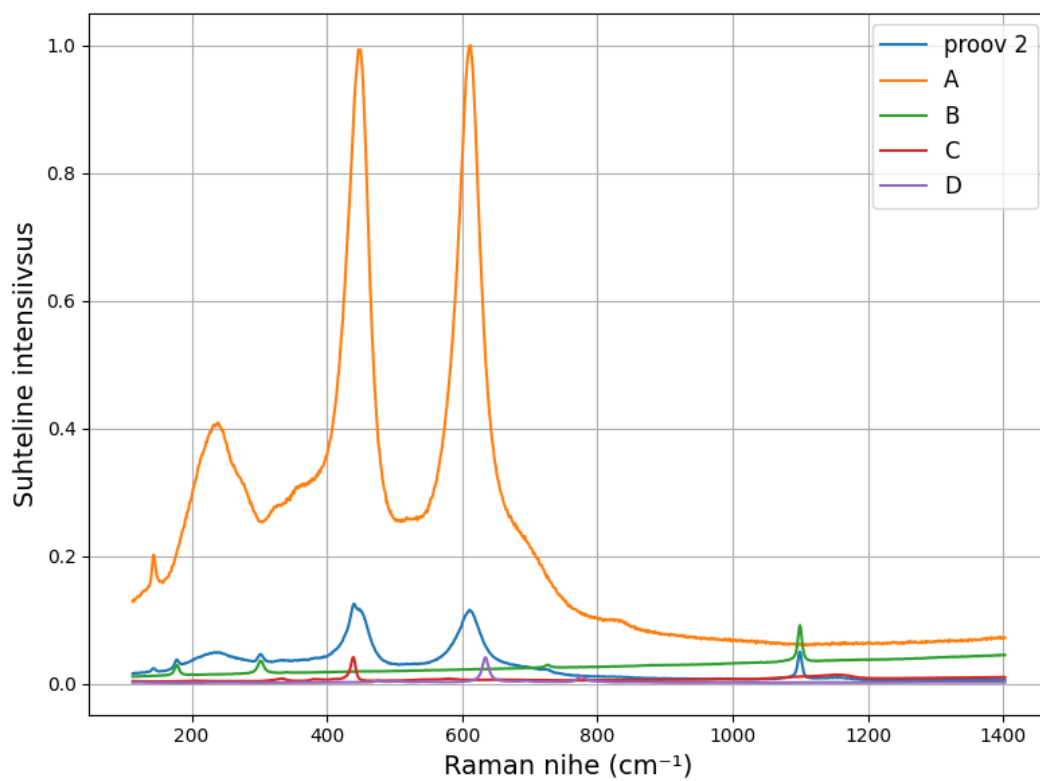
Tundmatu proov

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

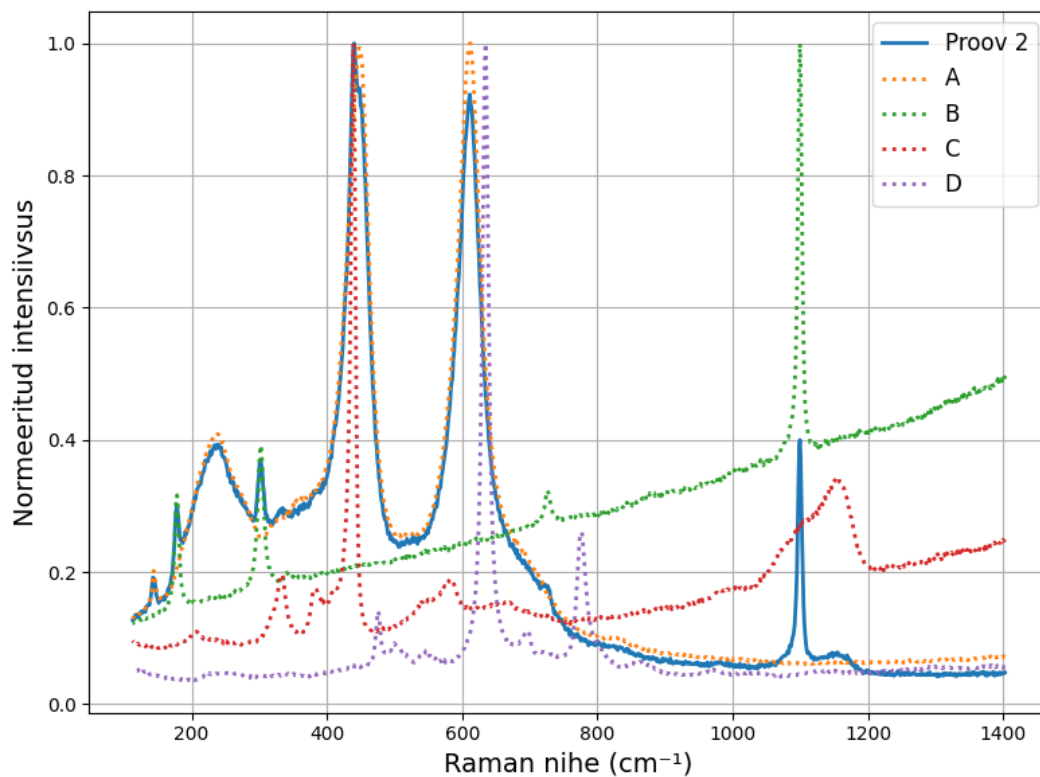


kvalitatiivne määramine

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:

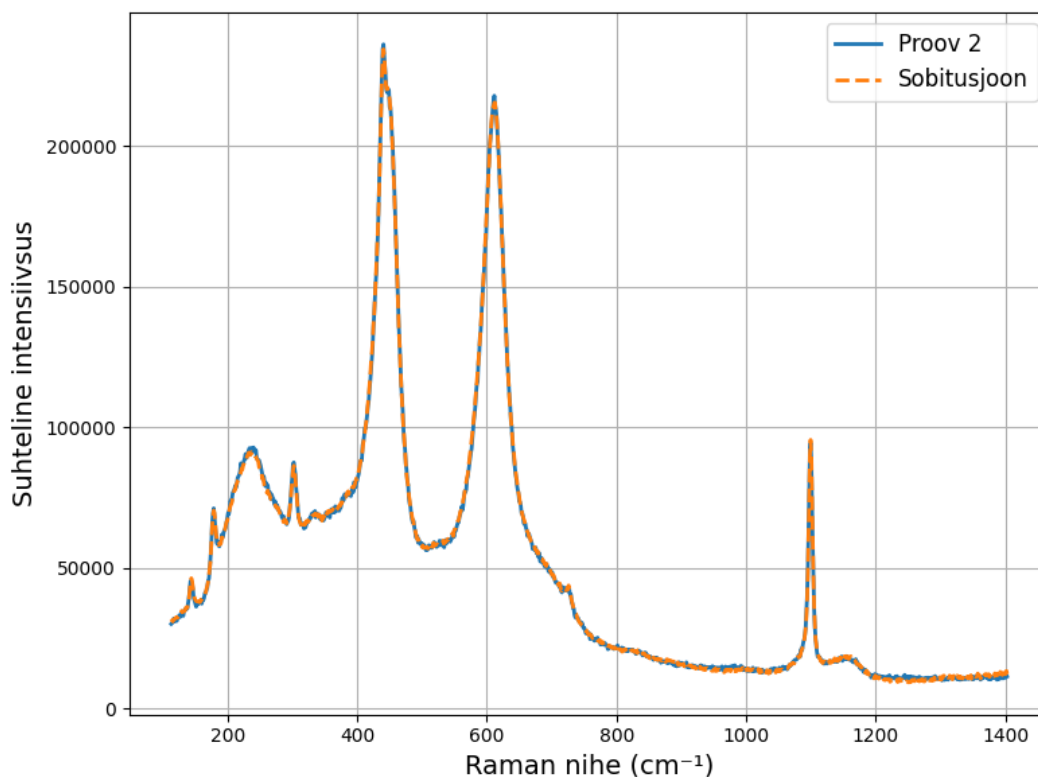


Siit on näha, et segu kindlasti koosneb ainetest A, B ja C. Aine D sisaldust on piisavalt

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%