

Univerzita Karlova v Praze

Přírodovědecká fakulta

Chemie

Anorganická chemie



Bc. Ondřej Vik

Studium tuhé frakce atmosférického aerosolu z Plzně pomocí rentgenové
práškové difrakce

Study of solid fraction of the atmospheric aerosol from Pilsen by X-ray powder
diffraction

Diplomová práce

Školitel: doc. RNDr. David Havlíček, CSc.

Praha, 2014

Prohlášení:

Prohlašuji, že jsem závěrečnou práci zpracoval samostatně a že jsem uvedl všechny použité informační zdroje a literaturu. Tato práce ani její podstatná část nebyla předložena k získání jiného nebo stejného akademického titulu.

V Praze, dne 3. srpna 2014

.....

Ondřej Vik

Poděkování

Předně bych rád poděkoval svému školiteli doc. RNDr. Davidovi Havlíčkovi, CSc. za všestrannou pomoc s přípravou této práce. Dále bych chtěl poděkovat doc. RNDr. Radomíru Kuželovi, CSc. za předané zkušenosti s metodou paralelního svazku, Ing. Petru Svorovi za studium našeho vzorku elektronovou mikroskopií, Mgr. Miroslavovi Klánovi za poskytnutí výstupů jeho disertační práce a Vlastimile Pitterové za pomoc při přípravě vzorků. V neposlední řadě děkuji mojí rodině, přítelkyni a přátelům za podporu.

Název: Studium tuhé frakce atmosférického aerosolu z Plzně pomocí rentgenové práškové difrakce

Řešitel: Bc. Ondřej Vik

Ústav: Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta

Školitel: doc. RNDr. David Havlíček, CSc.

E-mail školitele: havlicek@natur.cuni.cz

Abstrakt

V této diplomové práci bylo studováno pomocí práškové rentgenové difrakce metodou paralelního svazku mineralogické složení vzorků denních měření prachů z několika míst v Plzni. Difrakční data byla porovnána s databází nejběžněji se vyskytujícími složkami atmosférického prachu. Tato databáze vznikla z publikovaných výsledků z podkrušnohorské oblasti a na jejím základě byla provedena fázová analýza vzorků. Ve vzorcích byla elektronovým mikroskopem vizuálně potvrzena vlákna amfibolového azbestu, který byl pomocí EDS analýzy určen jako aktinolit. Dále byl porovnáním meteorologické situace v době odběru a analýzy možných zdrojů znečištění v Plzni popsán transport několika složek atmosférického aerosolu antropogenního původu.

Klíčová slova: atmosférický aerosol, prášková rentgenová difrakce, metoda paralelního svazku.

Title: Study of solid fraction of the atmospheric aerosol from Pilsen by X-ray powder diffraction

Author: Bc. Ondřej Vík

Department: Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science

Supervisor: Assoc. Prof. RNDr. David Havlíček, CSc.

Supervisor's e-mail address:: havlicek@natur.cuni.cz

Abstract

In this diploma thesis there was studied a composition of a solid fraction of the atmospheric aerosol of the daily measurements from Pilsen by X-ray powder diffraction by the method of the parallel beam. The phase analysis was accomplished by comparing of the diffraction dates with a database of compounds usually occurring in the solid fraction of the atmospheric aerosol in this area. This database was created from works published earlier. In these samples there were also identified asbestos fibers of actinolite by the scanning electron microscope with EDS module. In this thesis there was also described a transport of several anthropogenic compounds of the atmospheric aerosol in dependence on a meteorological situation.

Key words: atmospheric aerosol, X-ray powder diffraction, parallel beam method.

Obsah

SEZNAM ZKRATEK	8
1 PŘEDMLUVA	9
2 CÍLE PRÁCE.....	10
3 ÚVOD	11
3.1 ATMOSFÉRICKÝ AEROSOL.....	11
3.1.1 Vliv atmosférického aerosolu na chemické a fyzikální děje v atmosféře	12
3.1.2 Ekvivalentní průměr částice aerosolu.....	13
3.1.3 Vliv atmosférického aerosolu na člověka	14
3.1.4 Chemické složení atmosférického aerosolu	15
3.1.5 Odstraňování atmosférického aerosolu z ovzduší.....	17
3.2 AZBESTOVÉ MINERÁLY	17
3.2.1 Možnosti expozice člověka azbestu.....	19
3.2.2 Limity koncentrace azbestových vláken v ovzduší	20
3.2.3 Vliv azbestových vláken na zdraví člověka	20
3.3 RENTGENOVÁ PRÁŠKOVÁ DIFRAKČNÍ ANALÝZA	23
3.3.1 Uspořádání nejběžnějších difraktometrů pro práškové vzorky.....	23
3.4 RASTROVACÍ ELEKTRONOVÝ MIKROSKOP (SEM)	27
4 EXPERIMENTÁLNÍ ČÁST.....	29
4.1 PŘÍSTROJOVÉ A SOFTWARE VYBAVENÍ	29
4.2 ODBĚR VZORKŮ	30
4.3 MĚŘENÍ VZORKŮ PRÁŠKOVOU RENTGENOVOU DIFRAKČÍ.....	31
4.4 ANALÝZA DIFRAKTOGRAMŮ	33
4.4.1 Profilová analýza difraktogramů programem ZDS a fázová analýza porovnáním se seznamem vybraných minerálů, vyskytujících se v atmosférickém prachu.....	36
4.4.2 Profilová a fázová analýza difraktogramu provedená za pomoci programu HighScore Plus	36
4.5 STUDIUM VYBRANÉHO VZORKU ELEKTRONOVOU MIKROSKOPIÍ	37
5 VÝSLEDKY A DISKUSE.....	39
5.1 VYHODNOCENÍ STUDIA VYBRANÉHO VZORKU ELEKTRONOVOU MIKROSKOPIÍ.....	39
5.2 FÁZOVÁ ANALÝZA JEDNOTLIVÝCH VZORKŮ	39
5.3 ANALÝZA MOŽNÝCH ZDROJŮ AEROSOLŮ A POPIS JEJICH TRANSPORTU	49
5.3.1 Možné zdroje aerosolů.....	49
5.3.2 Popis transportu polutantů.....	51
6 ZÁVĚR.....	53

7	CITOVANÁ LITERATURA	55
8	PŘÍLOHY	60
8.1	VÝSTUPY PROFILOVÉ ANALÝZY PROGRAMEM ZDS	60

Seznam zkratek

PM_x – particulate matter, kde x je maximální velikost částice v μm

d_a – aerodynamický průměr částice

d_g – geometrický průměr částice

ρ_p – hustota částice

ρ_0 – referenční hustota

k – dynamický tvarový faktor

λ – vlnová délka záření

θ – Braggův úhel

PAH – polycyklické aromatické uhlovodíky

BB uspořádání – Bragg-Brentanovo parafokusační uspořádání

ICDD – The International Centre for Diffraction Data

SEM – scanning electron microscope

EDS – energy-dispersive X-ray spectroscopy

XRD – X-ray Diffraction

PDF – Powder Diffraction File

ČHMÚ – Český hydrometeorologický ústav

TZL – tuhé znečišťující látky

1 Předmluva

Výzkum katedry anorganické chemie Přírodovědné fakulty University Karlovy v Praze je mimo jiné zaměřen i na oblast studia přírodních vzorků pomocí rentgenové práškové difrakce [1-10]. Tato metoda je zde často používána k fázové analýze atmosférického aerosolu. Znalost složení atmosférického aerosolu je klíčem k pochopení chemických a fyzikálních procesů v atmosféře a jejich význam bude diskutován v samostatné kapitole 3.1. Zadání této práce mělo také několik ryze praktických důvodů. Prvním z nich byl fakt, že byl na práškový rentgenový difraktometr, který má katedra anorganické chemie k dispozici, nainstalován modul pro metodu paralelního svazku, který je pro studium tenkých vrstev na filtrech obzvláště vhodný. Dalším důvodem byla možnost analyzovat vzorky atmosférického aerosolu z několika lokalit ve městě Plzni z období zimy a jara 2010/2011, které měl doc. Havlíček právě k dispozici.

Většina prací, které se zabývají tuhou frakcí atmosférického aerosolu, studuje jeho elementární složení, či sleduje pouze jednu mineralogickou složku. Jak se ukazuje, důležitým faktorem dopadu na životní prostředí je celkové mineralogické složení prachu. Velmi vhodnou metodou pro analýzu prachu je prášková rentgenová difrakční analýza. Vzhledem k nízké koncentraci prachu v ovzduší jsou vzorky odebírány na filtry v tenké vrstvě, kde je nejlepších výsledků měření dosaženo metodou paralelního svazku. Kvalitativní mineralogická analýza takových směsí však představuje náročný úkol, jehož řešení není rozhodně triviální. Difraktogram je obvykle porovnáván se záznamy v komplexních komerčních databázích, které kvůli svojí obsáhlosti přiřazují difrakční linie také látkám, které se v atmosférickém prachu vyskytovat nemohou, což je činí velmi obtížně použitelnými. Tento problém vede k „ruční“ analýze difraktogramu s nutností hledat jen látky, které se v praších mohou vyskytovat, což je zatíženo subjektivní chybou, nehledě na značnou časovou náročnost. Tato úskalí nás tedy vedla ke stanovení cílů této diplomové práce.

2 Cíle práce

- Pomocí rentgenové práškové difrakce kvalitativně analyzovat vzorky denních měření prachů získaných ve třech lokalitách města Plzně ze zimního období 2010/2011.
- Při kvalitativní analýze použít seznam nejběžněji se vyskytujících složek atmosférického prachu, vzniklý z publikovaných výsledků z podkrušnohorské oblasti, případně ho doplnit.
- Pokusit se navrhnout metodiku, která by snížila časovou náročnost identifikace jednotlivých složek ve vzorku.
- Na základě analýzy možných zdrojů znečištění v Plzni a meteorologické situace v době odběru popsat transport polutantů.

3 Úvod

3.1 Atmosférický aerosol

Atmosférické aerosoly jsou komplexní směsi pevných a/nebo kapalných částic látek suspendovaných v atmosféře. Velikost těchto částic se pohybuje v poměrně širokém rozpětí 1 nm – 100 μ m a samozřejmě ovlivňuje jejich chování v atmosféře a jejich dopad na životní prostředí. Jednotlivé aerosolové částice jsou prostým okem těžko rozpoznatelné, ale jejich shluky díky rozptylu světla již viditelné jsou – tvoří mraky, mlhu, opar, dým, kouř, či prach.

Aerosoly vstupují do atmosféry několika způsoby, přičemž se jejich původ dá rozdělit na přírodní a antropogenní, kde koncentrace částic antropogenního původu doplňují přírodní koncentrace a často je ve znečištěnějších oblastech mnohonásobně převyšují.

Přírodní atmosférický aerosol lze najít v mlze a mracích, kde se nacházejí kapalně aerosoly – vodní mikrokapky i aerosoly pevné – ledové krystalky. Další pevné aerosoly přírodního původu jsou obsaženy v prachu např. z půdy nebo pouští a v kouři z vulkanické činnosti, či z požárů. Významnými aerosoly přírodního původu jsou také částice mořské soli uvolňující se nad oceánem, které jsou buď ve formě kapalného roztoku, nebo po odpaření vody, tuhé.

Částice atmosférického aerosolu antropogenního původu se dostávají do atmosféry v podstatě všemi činnostmi člověka, které zahrnují zejména pohyb a spalování. Obecně jsou ale největšími přispěvateli průmysl a doprava.

Dále můžeme atmosférický aerosol rozdělit podle způsobu jeho vzniku na primární a sekundární atmosférický aerosol. Primární atmosférický aerosol je emitován zdrojem přímo do atmosféry. Částice sekundárního atmosférického aerosolu vznikají až v atmosféře, kde plyn chemickou reakcí nebo ochlazením kondenzuje v pevnou, či kapalnou částici.

V minulosti byly koncentrace atmosférického aerosolu sledovány pouze jako hmotnostní koncentrace suspendovaných částic v určitém objemu vzduchu. Nicméně se ukazuje, že vliv na dopad tohoto aerosolu na životní prostředí nemá pouze jeho hmotnostní koncentrace, ale především má vliv rozložení velikostí jednotlivých částic aerosolu. Obecně jsou nejškodlivější částice o průměru v jednotkách nanometrů (ač k hmotnostní koncentraci atmosférického aerosolu přispívají jen nepatrně), protože nejsnadněji prochází dýchacím traktem a poté do krevního oběhu. Proto se u pevných částic ukazuje jako vhodnější zavedení standardu PM_x (particulate matter) s uvedením jaká velikost částic je stanovována, tedy například standard PM_{10} , určuje složku atmosférického aerosolu menší aerodynamickým průměrem, než $10 \mu m$. Aerodynamický průměr bude definován níže v kapitole 3.1.2.

Pojem „particulate matter“ se překládá do češtiny dvěma způsoby podle oblasti využití tohoto pojmu. Při hodnocení znaků kvality volného ovzduší (tj. venkovního, vnitřního a pracovního) se tento pojem překládá jako aerosolové částice (všechny částice v daném objemu vzduchu, ČSN EN 12341). Při posuzování odpadních plynů se pojem „particulate matter“ překládá do češtiny jako tuhé znečišťující látky (Zákon o ochraně ovzduší 86/2002).

3.1.1 Vliv atmosférického aerosolu na chemické a fyzikální děje v atmosféře

Atmosférický aerosol byl poměrně dlouho opomíjen v modelech popisujících děje v atmosféře, nicméně se ukázalo, že aerosol hraje v atmosféře roli velmi důležitou.

Z fyzikálních dějů ovlivňuje atmosférický aerosol kromě kondenzačních procesů v mracích především radiační rovnováhu. Do ní zasahuje nejméně třemi způsoby [11]. Prvním z nich je fakt, že částice aerosolu přímo i nepřímo odrážejí sluneční záření zpět do vesmíru. Druhým způsobem je to, že tyto jemné částice působí jako kondenzační jádra, což ovlivňuje procesy kondenzace a krystalizace vody v atmosféře a následně tedy podporuje vznik mraků, které opět odrážejí alespoň částečně sluneční záření. Třetí způsob souvisí s druhým, protože čím více je

kondenzačních jader, tím více se vytvoří mikrokapek vody. Ty ale nejsou dostatečně velké na to, aby spadly na zemský povrch ve formě deště, a zůstávají proto v atmosféře delší dobu. Aerosoly mají tedy opačný vliv na oteplování než skleníkové plyny [12] a odhaduje se, že až z 50 % kompenzují vliv skleníkových plynů na globální oteplování [11].

Atmosférické modely z devadesátých let ve svých výpočtech ještě nezahrnovaly vliv heterogenních složek v atmosféře, a nebyly proto schopny předpovědět vznik ozonových děr v okolí zemských pólů. Nyní je již známo, že za těmito ději stojí aktivace chloru na ledových krystalcích, které tvoří takzvané polární stratosférické mraky. Závažnost tohoto procesu pro společnost samozřejmě vedla k jeho hlubšímu zkoumání a přehodnocení vlivu atmosférických aerosolů na děje v atmosféře. Ač je příklad vzniku ozonových děr ve stratosféře velmi komplexní děj, složitostí nemůže konkurovat dějům v nižších vrstvách atmosféry, kde se různorodost atmosférického aerosolu mnohonásobně zvyšuje. Zdaleka ne všechny tyto děje jsou prostudovány a k jejich pochopení tedy samozřejmě napomáhá studium složení atmosférického aerosolu, které se s jednotlivými regiony mění.

3.1.2 Ekvivalentní průměr částice aerosolu

Protože prachové částice mají obecně velmi nepravidelný tvar, bylo vyvinuto několik metod jak spolu jednotlivé částice porovnávat pomocí ekvivalentního průměru, nejčastěji se používá tzv. aerodynamický průměr, který standardizuje částice různých tvarů na kulové částice vody se stejnými aerodynamickými vlastnostmi, které mají původní částice. Aerodynamický průměr je tedy průměr koule se stejnou ustálenou rychlostí způsobenou gravitační silou v klidném ovzduší, jaký by měla koule kapaliny o hustotě 1 g/cm^3 a stejné hmotnosti jako částice za obvyklých podmínek týkajících se teploty, tlaku a relativní vlhkosti. Aerodynamický průměr je proto definován rovnicí 1 [13].

$$d_a = d_g \cdot \sqrt{\frac{\rho_p}{k \cdot \rho_0}} \quad (1)$$

Kde d_a je aerodynamický průměr, d_g je geometrický průměr částice, ρ_p je hustota částice, ρ_0 je referenční hustota (1 g/cm^3) a k je dynamický tvarový faktor (např. koule má tento faktor roven jedné).

3.1.3 Vliv atmosférického aerosolu na člověka

Na účinky atmosférického aerosolu na člověka má samozřejmě vliv i doba expozice jedince aerosolům. Při krátkodobé expozici může docházet k vyššímu počtu zánětlivých onemocnění plic, kašli, či zhoršenému dýchání. Zdravotními důsledky ovšem bývají vážnější při dlouhodobější expozici. Dlouhodobá expozice vysokým koncentracím atmosférického aerosolu se projevuje zvýšením počtu nádorových onemocnění plic a kardiovaskulárních onemocnění a v důsledku toho zvýšením úmrtnosti.

Škodlivost atmosférických aerosolů na lidské zdraví je dána nejen velikostí (jak bude zmíněno v následující podkapitole 3.1.3.1) a tvarem jejich částic, ale také jejich chemickým složením. Znalost chemického složení atmosférických aerosolů je tedy nezbytná, jak pro určení potenciálního zdravotního rizika aerosolů, tak při identifikaci emisních zdrojů aerosolů [14]. Dalším rizikem pro zdraví člověka je fakt, že i částice aerosolu, které by byly samy o sobě téměř neškodné, často obsahují adsorbované karcinogenní sloučeniny např. polycyklické aromatické uhlovodíky a zvyšují tak riziko vzniku rakoviny.

3.1.3.1 Vliv velikosti částic

Již výše zmíněný výraz PM_{10} je cílové označení pro vzorkování thorakálních částic ve volném ovzduší (ČSN EN 13241), přičemž thorakální částice (thoracic

particles) jsou vdechované částice pronikající za hrtan (ČSN ISO 7708). V podstatě se jedná o konvenci, která dělí aerosolové částice do dvou skupin z hlediska, kam mohou částice pronikat dýchacím ústrojím:

- na částice o aerodynamickém průměru větším než 10 μm , neprocházejí za hrtan
- na částice o aerodynamickém průměru menším než 10 μm , které procházejí za hrtan.

Z tohoto faktu následně vyplývá důvod proč částice větší než PM_{10} nejsou obecně tak nebezpečné jako částice menší, protože se v dýchacích cestách nedostanou tak daleko a jsou snadněji vyloučitelné. Částice PM_{10} se pak mohou usazovat v dolních cestách dýchacích. Částice $\text{PM}_{2,5}$ se mohou usazovat na průduškách a částice PM_1 mohou pronikat do plicních sklípků nebo až do krve (nanočástice), kde mohou způsobovat zdravotní problémy [15].

V roce 2012 byla provedena poměrně zajímavá studie [16], která srovnávala rozdílné usazování v dýchacích cestách aerosolů z otevřených ohnišť a aerosolů vznikajících spalováním nafty v dieselových motorech. Studie ukázala, že v dýchacích cestách se usadí dvacet procent vdechnutých aerosolů vzniklých spalováním v otevřeném ohništi. Oproti tomu aerosolů vzniklých v dieselových motorech se usadí v dýchacích cestách padesát procent, protože takto vzniklé částice jsou v průměru mnohem menší než ty, které vznikají spalováním v otevřeném ohništi. Tento poznatek názorně ukazuje jak důležitým faktorem je velikostní distribuce částic atmosférického aerosolu [17].

3.1.4 Chemické složení atmosférického aerosolu

Poznání tvorby, složení a chování atmosférického aerosolu je velmi důležité pro studium toho, jaký má atmosférický aerosol vliv na klimatické změny a na lidské

zdraví. Tyto oblasti ještě nejsou dopodrobna prostudovány, ač se jejich studiu věnuje velké úsilí.

Atmosférický aerosol je obvykle tvořen směsí různých látek obsahujících především síranové, dusičnanové, hlinitokřemičitanové, uhličitanové, křemičitanové a chloridové anionty s převážně sodnými a amonnými kationty. Dále většinou obsahuje vodu, těžké kovy, či různé uhlikaté frakce.

Sírany se dostávají do atmosféry především oxidací antropogenních a přírodních látek obsahujících síru, tedy především oxidu siřičitého, či dimethylsulfidu v hojně míře produkovaného mořskými řasami [18].

Dusičnany jsou v atmosféře tvořeny oxidací oxidu dusičitého. Dusičnany a sírany jsou produkovány nejprve jako kyselina dusičná a sírová, které jsou postupně neutralizovány atmosférickým amoniakem za vzniku amonných solí příslušných kyselin.

Chloridy vstupují do atmosféry zejména kapičkami slané mořské vody, které jsou následně unášeny i stovky kilometrů nad pevninu.

Zdrojem uhličitanů v atmosféře je především mechanické namáhání hornin a stavebního materiálu s obsahem vápence, který může následně v atmosféře reagovat s kyselinou sírovou na sírany a kyselinu uhličitou, která může dále reagovat s dalšími sloučeninami za vzniku dalších uhličitanů s jinými kationty, než je vápenatý kation [19]. Kyselina uhličitá také samozřejmě vzniká i rozpouštěním oxidu uhličitého ve vodě.

Kovy, jako např.: vanad, měď, nikl, chrom, kadmium, olovo a arsen, jsou nedílnou součástí atmosférických částic. Zdrojem těchto kovů je zejména antropogenní spalování fosilních paliv.

Atmosférický aerosol původem ze zemské kůry obvykle obsahuje pestrou paletu křemičitanů a hlinitokřemičitany, které se do atmosféry dostávají ze zemského prachu, či z větrem obroušených minerálů a hornin.

Uhlíkaté frakce atmosférického aerosolu se obvykle skládají jak ze sazí a grafitu, tak z organického uhlíku. Saze do atmosféry přímo unikají především při spalovacích procesech, jak v energetickém průmyslu, tak v dopravě. Organické polutanty se často adsorbují na povrch částic atmosférického aerosolu, patří mezi ně především perzistentní organické polutanty, které jsou velice stálé, bioakumulativní a toxické. Mezi nejvýznamnější složky této kategorie patří organochlorované pesticidy, PAH a polychlorované bifenoly. Hlavní podíl na znečištění prostředí těmito látkami má antropogenní činnost.

3.1.5 Odstraňování atmosférického aerosolu z ovzduší

Atmosférický aerosol dostává zpět na zemský povrch dvěma způsoby – suchou a mokrou depozicí.

Suchá depozice probíhá neustále, nejvíce jsou zasaženy oblasti kolem zdroje částic, tímto způsobem jsou deponovány především částice větší než 1 μm . Částice o aerodynamickém průměru 0,1 – 1 μm mohou v atmosféře zůstat v období bez srážek až deset dnů, což umožňuje jejich rozptýlení na mnohem větší plochu, než jak je tomu u částic větších [20].

Mokrá depozice je spojena s výskytem srážek a to jak vertikálních (např. déšť a sněh), tak horizontálních (např. jinovatka). Atmosférický aerosol se tímto způsobem v podstatě vymyje a vyprší z ovzduší.

3.2 Azbestové minerály

Protože byla během fázové analýzy difraktogramů našich vzorků zjištěna přítomnost amfibolového azbestu (pravděpodobně aktinolitu) a jedná se o poměrně zajímavý poznatek, který potvrdil dlouhodobější výskyt azbestových minerálů

v ovzduší Plzeňska, bude kapitola teoretické části věnována i azbestům, které se mohou v atmosférickém aerosolu také vyskytovat.

Azbesty představují poměrně pestrou skupinu křemičitanových vláknitých minerálů, jako jsou amosit, clinochryzotil a ortochryzotil, crocidolit, tremolit, grunerit, aktinolit a antofylit. Jejich typickou vlastností je vláknitá struktura, kdy délka vlákna několikanásobně převyšuje jeho průřez. Jejich vláknité krystaly mohou být až 30 cm dlouhé. Jejich tvrdost se pohybuje mezi 2 až 2,5 a hustota v rozmezí 2,9 až 3 g/cm³. Vláknité agregáty různých barev jsou průsvitné a mají hedvábný lesk. Nejčastější je bíle zbarvený chryzotil, crocidolit může být modrý, antofylit šedý a amosit hnědý. Azbestová vlákna jsou lehká, elastická, dobře opracovatelná, nehořlavá, odolná vůči kyselinám i zásadám, mají elektroizolační vlastnosti, což je předurčovalo býti ideálním materiálem k výrobě produktů, jako jsou stavební materiály, třecí výrobky a látky odolné vůči teplu. Jednotlivé azbestové minerály včetně jejich chemického složení jsou shrnuty v tabulce 1.

Tabulka 1 - chemické složení jednotlivých azbestových minerálů

<i>Amfibolová skupina</i>	<i>Chryzotilová skupina</i>
<i>(anion $Si_8O_{22}(OH)_4^{14-}$)</i>	<i>($Mg_3Si_2O_5(OH)_4$, polymorfni modifikace)</i>
Aktinolit (Ca^{2+} , Mg^{2+} , Fe^{2+})	Clinochryzotil
Crocidolit (Na^+ , Fe^{2+} , Fe^{3+} , Mg^{2+})	Orthochryzotil
Anthophylit (Mg^{2+} , Fe^{2+})	
Tremolit (Ca^{2+} , Mg^{2+})	
Amosit (Fe^{2+} , Mg^{2+})	
Grunerit (Fe^{2+})	

Azbestová vlákna se nevypařují do vzduchu, ani se nerozpouštějí ve vodě, nicméně se podélně štěpí a lámou na malá ostrá vlákénka, která mohou putovat ovzduším na poměrně velké vzdálenosti od zdroje.

Azbest je lidstvu znám více než 2000 let a paradoxně byl často užíván jako prostředek k ochraně lidského zdraví například ve filtrech vzduchu v nemocničních zařízeních, plynových maskách, cigaretových filtrech, ohnivzdorných oblecích a zábranách, či dokonce i v zubních pastách [21]. Ovšem mnohem běžněji se s azbesty setkáváme i přes zákaz jejich používání na lehkých eternitových střeších, či ve starých bytových jádrech jako s pozůstatky z dob, kdy se ještě azbestové materiály hojně užívaly ve stavebnictví.

3.2.1 Možnosti expozice člověka azbestu

Nejčastější expozicí člověka azbestu je vdechnutí jemných vláken azbestu rozptýlených ve vzduchu. Vlákna azbestu lze nalézt v podstatě v každém vzorku, nicméně se jejich koncentrace velmi liší. Například ve venkovských oblastech se obvykle nachází kolem 0,01-10 vláken na m^3 venkovního vzduchu. Jeden metr krychlový pro představu zhruba odpovídá objemu vzduchu, jaký člověku projde plicemi za jednu hodinu. Vyšší hodnoty koncentrací azbestových vláken bývají naměřeny ve městech, kde může být 2-300 vláken na m^3 . Největší riziko hrozí lidem, kteří s azbestem pracují, tito lidé jsou pak vystaveni koncentracím v řádech tisíců vláken na m^3 , pokud nejsou vhodně chráněni [22, 23].

Další možností expozice člověka azbestu je konzumace vláken spolu s vodou. Azbest není ve vodě rozpustný, ale může se do ní dostat například erozí přírodních zdrojů, tato expozice ale není příliš nebezpečná, protože naprostá většina vláken odchází z trávicího traktu spolu se stolicí [24].

3.2.2 Limity koncentrace azbestových vláken v ovzduší

Již v roce 1898 byla britskému parlamentu předložena zpráva o „zlých následcích azbestového prachu“ [25]. V roce 1984 v ČSSR byl azbest zařazen mezi prokázané karcinogeny pro člověka, následovalo postupné omezování jeho používání a v roce 2005 bylo jeho používání zakázáno v celé Evropské unii (Zákon č. 309/2006 Sb).

Limitní hodinovou koncentrací ve vnitřním prostředí pro azbestová a minerální vlákna je 1000 F/m^3 (fibres/ m^3) - jedná se o respirabilní vlákna o průměru menším než $3 \mu\text{m}$ a délce vlákna více jak $5 \mu\text{m}$, kdy poměr délky ku průměru vlákna je větší než 3:1. (Vyhláška MZ č. 6/2002 Sb). Tyto koncentrace jsou dle dosavadních jednorázových měření na Plzeňsku často překračovány i ve venkovním prostředí, pro které však doposud hygienická norma chybí [7].

3.2.3 Vliv azbestových vláken na zdraví člověka

Azbest nemá na lidské zdraví negativní vliv ve smyslu chemického poškození, ale ve smyslu mechanického. Jemná vlákna azbestu, která jsou lámavá jak podélně, tak příčně, se zabodávají do dýchacích cest, kde se mohou dostat až do plicních sklípků a mohou postupovat dále do krve. Po zabodnutí vlákna do výstelky dýchacích cest se snaží tělo toto vlákno vstřebat a rozložit. Dochází k aktivaci makrofágů, lysozomálních enzymů, cytokinů apod. a dochází tak vlastně k zánětlivé reakci, která by v běžném případě většinu jiných cizorodých látek rozložila a vyloučila je z těla. Nicméně vzhledem k velké chemické odolnosti azbestových vláken k jejich rozložení v těle nedochází a kolem takto zabodnutého vlákna se vytvoří zánět, který může přetrvávat až několik let.

Při velké a dlouhodobé expozici azbestovým vláknům toto vede k zjizvení plicní tkáně a tedy ke vzniku nejčastějšího, ale nikoli jediného onemocnění spojeného s azbestem – k azbestóze.

3.2.3.1 Onemocnění spojená s expozicí azbestovým vláknům

Obecně lze dělit tato onemocnění na benigní (nenádorová, nezhoubná onemocnění) a na maligní (nádorová, zhoubná) [24]. Jejich výčet je uveden v tabulce 2.

Tabulka 2 - Shrnutí onemocnění spojených s expozicí azbestovým vláknům

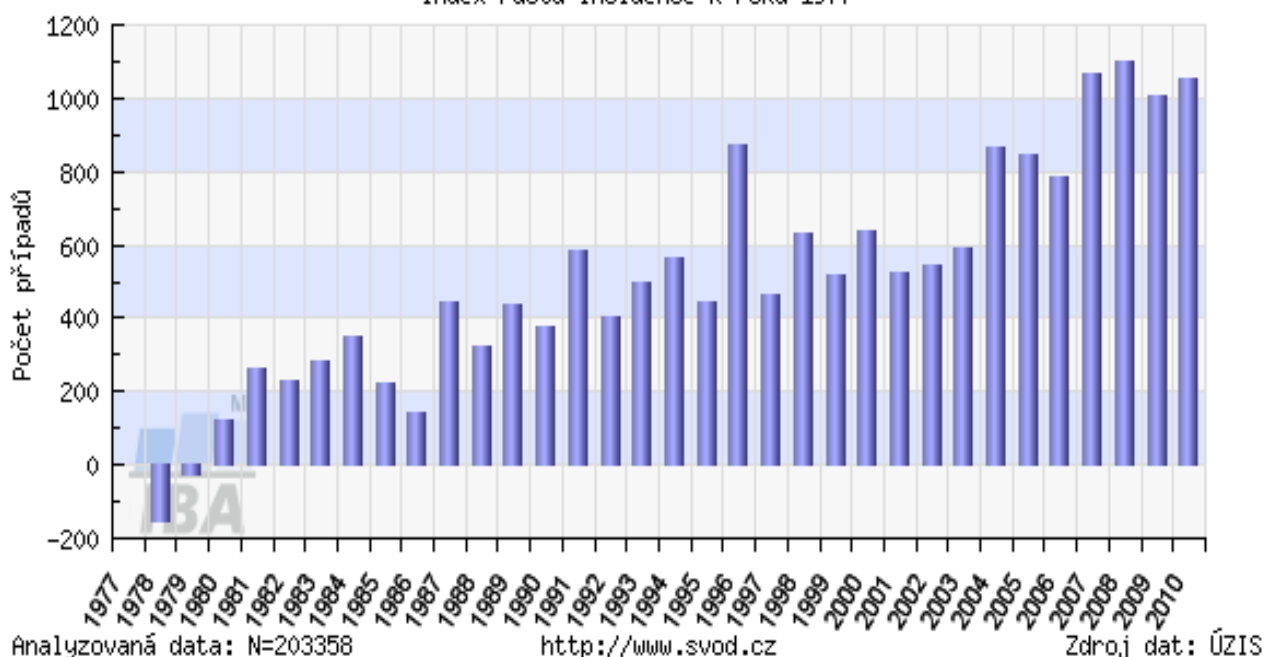
<i>Benigní onemocnění</i>	<i>Maligní onemocnění</i>
Azbestóza	Bronchogenní karcinom
Pleurální hyalinóza	Maligní mezoteliom pleury a peritonea
Exogenní alergická alveolitida	

Shrnutí zdravotních důsledků

U všech důsledků azbestových vláken pro lidský organismus lze vyzorovat několik trendů: vznikají po mnohaleté latenci od začátku expozice riziko onemocnění i progresse trvá i po ukončení expozice a často se onemocnění diagnostikuje až u osob v důchodu. Vzhledem k této latenci se i v současné době zvyšuje výskyt rakoviny dýchacího aparátu v ČR, jak ukazuje obrázek 1 z projektu SVOD Institutu biostatistiky a analýz LF a PřF MU v Brně. Velmi zajímavou je i mapa rozložení výskytu rakoviny dýchacího ústrojí v ČR na obrázku 2, která ukazuje, že Plzeňský kraj má třetí nejvyšší incidenci těchto onemocnění v ČR a až za ním jsou kraje, které jsou mnohem známější znečištěním svého ovzduší, jako je například Moravskoslezský kraj.

C33,C34 - ZN průdušnice, průdušky a plíce

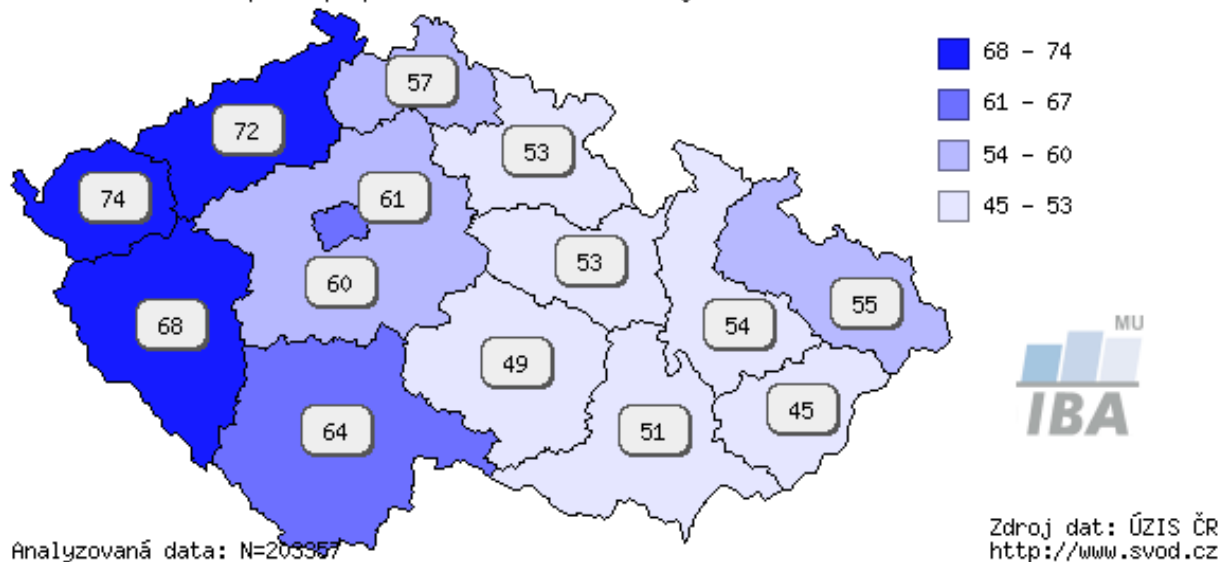
index růstu incidence k roku 1977



Obrázek 1 - Růst incidence rakoviny dýchacího ústrojí od r. 1977 (převzato z [43])

C33,C34 - ZN průdušnice, průdušky a plíce - Incidence

počet případů na 100000 osob v krajích za období 1977-2010



Obrázek 2 - Incidence rakoviny dýchacího ústrojí dle krajů v období 1977 – 2010 (převzato z [44])

3.3 Rentgenová prášková difrakční analýza

Stěžejní metodou analýzy zde zkoumaných vzorků byla zvolena rentgenová prášková difrakční analýza v uspořádání pro měření paralelním svazkem. Výhody právě tohoto uspořádání pro studium tenkých vrstev budou diskutovány níže. Teorie difrakce byla vynechána kvůli její rozsáhlosti a faktu, že toto téma a všechny základní pojmy řeší povinná přednáška krystalové strukturní analýzy.

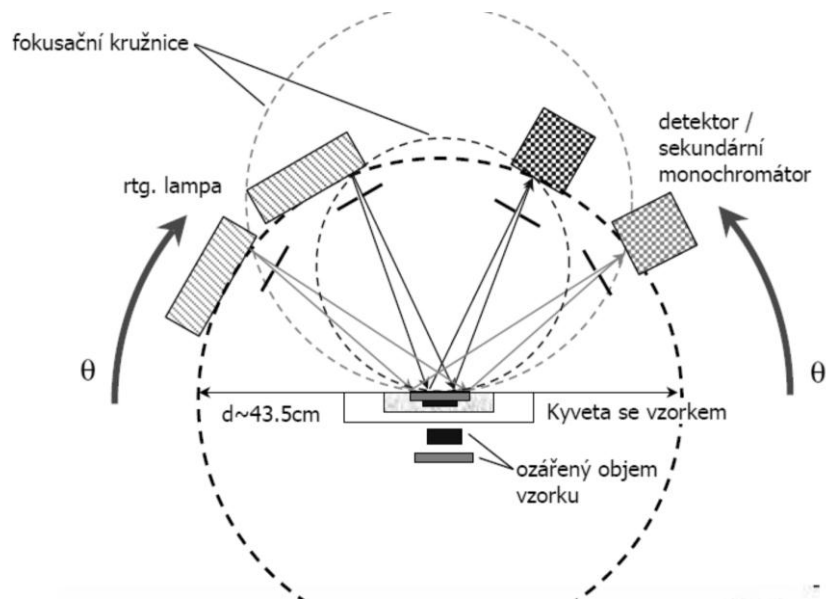
3.3.1 Uspořádání nejběžnějších difraktometrů pro práškové vzorky

3.3.1.1 *Bragg-Brentanovo parafofokusační uspořádání*

V současné době se jedná o nejběžnější uspořádání difraktometru pro práškové a polykrystalické vzorky. Jedná se o symetrické reflexní měření na dvoukruhovém difraktometru, kdy je vzorek umístěn na hlavní ose, jehož povrch je tečný k fokusační kružnici. Fokusační kružnice prochází ohniskem rentgenové lampy, povrchem vzorku a detektorem.

Detektor se pohybuje stejnou rychlostí jako rentgenová lampa, což zajišťuje splnění fokusačních podmínek. Difrakční podmínky jsou splněny pouze u těch rovin ve vzorku, které jsou orientovány rovnoběžně s povrchem vzorku [26]. Tento fakt může také ovlivnit kvalitu měření přednostní orientací jednotlivých krystalitů. Schéma tohoto uspořádání je uvedeno na obrázku 3.

Jak je již schematicky uvedeno na obrázku 3, objem a hloubka ozáření vzorku se s měnícím se úhlem dopadajícího záření mění také, což je nevýhodné právě pro měření tenkých vrstev vzorků, protože s měnícím se úhlem dochází ke změně intenzit jednotlivých difrakčních linií.

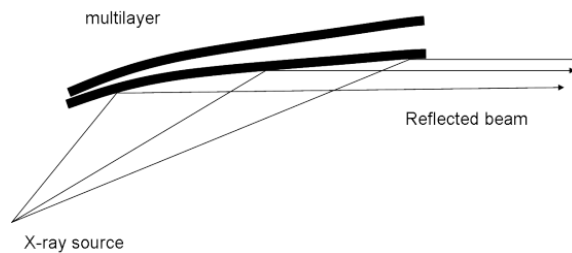


Obrázek 3 - Schéma Bragg-Brentanova parafokusačního uspořádání (převzato z [27])

3.3.1.2 *Metoda paralelního svazku*

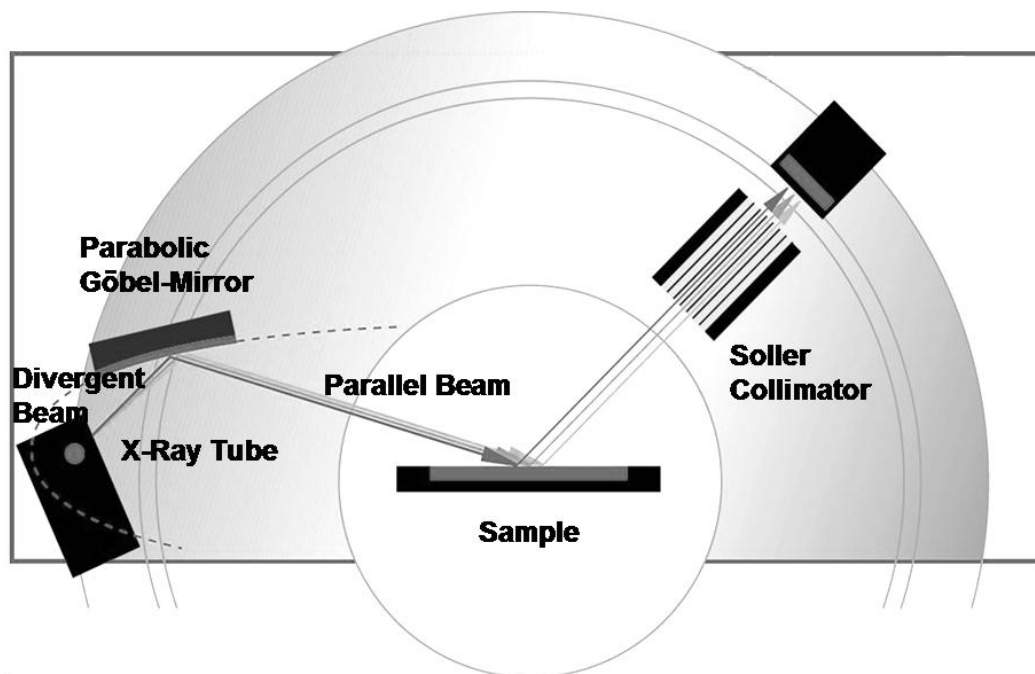
Tato metoda je vhodná především pro vzorky tenkých vrstev, opět využívá dvoukruhový goniometr, využívá ale navíc oproti klasickému BB uspořádání zakřivené multivrstevné Göbelovo zrcadlo a kolimátor. Úhel dopadajícího záření je konstantní a obvykle velmi malý (většinou $0,5^\circ - 4^\circ$).

Göbelovo zrcadlo bylo vyvinuto v devadesátých letech skupinou Herberta Göbela, který za jeho objev převzal v roce 1998 od ICDD Hanawalt Award. Jedná se o multivrstevné parabolické zrcadlo, ve kterém se střídají vrstvy lehkého prvku, který se označuje jako spacer a těžkého prvku, který se nazývá reflektor. Na vrstvách těžkého prvku dochází k odrazu rentgenového záření. Ohnisko rentgenové lampy je umístěno v ohnisku tohoto zrcadla, což má za následek převod původně divergentního svazku rentgenového záření na paralelní svazek jak je znázorněno na obrázku 4. Výhodou použití takového zrcadla je získání vysoké intenzity odraženého záření, reflektivita se pohybuje kolem 80-90 %. Nejčastěji jsou Göbelova zrcadla vyráběna odpařováním svazkem elektronů, naprašováním, či pulsní laserovou depozicí.



Obrázek 4 - převod divergentního rentgenového svazku na paralelní (převzato z [28])

Paralelní svazek rentgenového záření poté dopadá na vzorek umístěný na hlavní ose difraktometru. Jeho přesné umístění do dopadajícího svazku je při nízkých úhlech dopadajícího záření velmi důležité. Rentgenovo záření následně difraktuje na práškovém, či polykrystalickém vzorku a kolimátorem do detektoru procházejí pouze difrakce zaznamenané do několika málo kanálů, které v danou chvíli splňují fokusační podmínky. To vede k největší nevýhodě tohoto uspořádání, kterou je časová náročnost měření, protože nemůže být využita výhoda plošného detektoru a měření v podstatě přechází z kontinuálního (při BB uspořádání) na měření bodové. Schéma uspořádání metody paralelního svazku je uvedeno na obrázku 5.



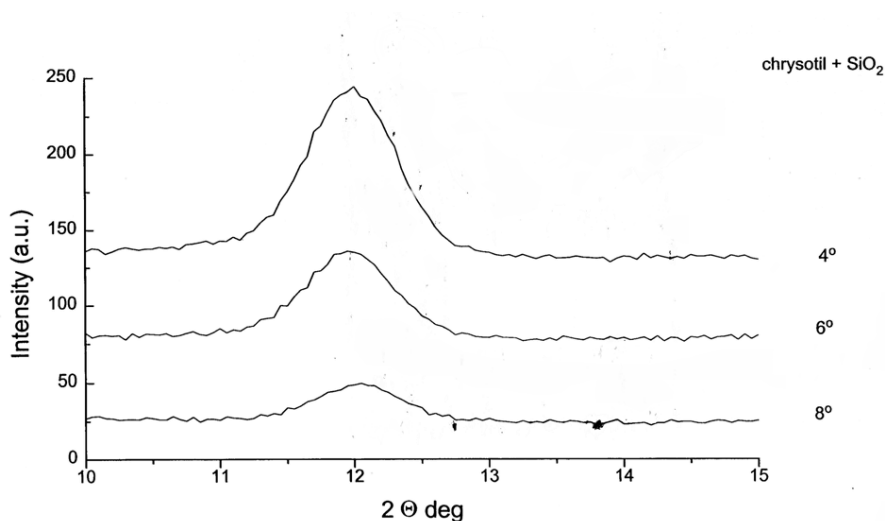
Obrázek 5 - Schéma uspořádání metody paralelního svazku (převzato z [29])

3.3.1.3 Srovnání Bragg-Brentanova parafokusačního uspořádání a metody paralelního svazku

Bragg-Brentanovo parafokusační uspořádání (BB) je v kombinaci s plošným detektorem neocenitelné pro svoji rychlost pořizování difrakčních záznamů, nicméně pro záznamy tenkých vrstev je mnohem výhodnější uspořádání metody paralelního svazku.

Vliv snižujícího se úhlu dopadu na zvyšování intenzity difrakce dokumentuje obrázek 6 převzatý z [9]. Výše diskutované výhody a nevýhody obou uspořádání jsou shrnuty v tabulce 3.

Jednou z dalších možností jak měřit difraktogramy tenkých vrstev je vyžít Guinierovu fokusační geometrii např. ve formě Seemanova-Bohlinova goniometru, kde se detektor pohybuje přímo po fokusační kružnici. Tato metoda je ale extrémně citlivá na justáž vzorku a celého uspořádání a na stabilitu ohniska rentgenové lampy.



Obrázek 6 - Vliv úhlu primárního svazku na intenzitu difrakce (převzato z [9])

Tabulka 3 - Srovnání BB uspořádání a metody paralelního svazku

<i>Metoda</i>	<i>Použití</i>	<i>Hlavní výhody</i>	<i>Hlavní nevýhody</i>
BB uspořádání	Konvenční měření	Rychlé a přehledné měření	Informace pouze od rovin rovnoběžných s povrchem
Metoda paralelního svazku	Tenké vrstvy	Necitlivost k orientaci vzorku (v porovnání s Guinierovou fokusační geometrií) a struktura jeho povrchu, možnost nastavení nízkého úhlu primárního svazku	Malá intenzita → časová náročnost

3.4 Rastrovací elektronový mikroskop (SEM)

Rastrovací elektronový mikroskop (scanning electron microscope) je přístroj určený ke sledování nejrůznějších objektů, který oproti klasickému mikroskopu používá místo světelného svazku elektrony urychlené elektrickým polem, a místo skleněných čoček jsou použity čočky elektromagnetické. Urychlené elektrony mají mnohem menší vlnovou délku danou de Broglieho vztahem, a proto se díky nim může dosáhnout i mnohem většího zvětšení než jakého je dosahováno klasickým optickým mikroskopem. Maximálního teoretického rozlišení dané de Broglieho vztahem však zatím není možno dosáhnout kvůli různým aberacím v přístroji (např. sférická, chromatická, či astigmatická aberace).

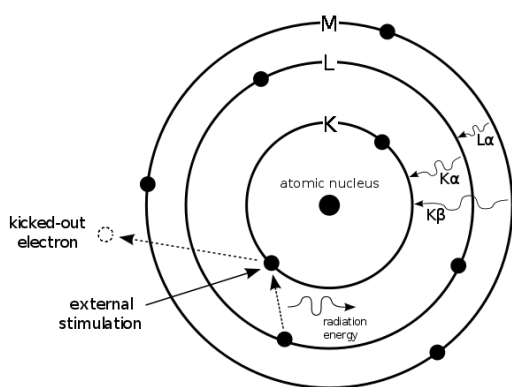
Urychlovací napětí je pro obvyklé měření voleno mezi 2 až 40 keV, ale existují samozřejmě i přístroje umožňující práci při vyšším urychlovacím napětí.

Na vzorek dopadá tenký svazek elektronů a výsledný obraz je tvořen pomocí sekundárního signálu - odražených nebo sekundárních elektronů, ty jsou zachyceny detektorem, výpočetně analyzovány a zobrazovány. Dále může dopadající primární svazek způsobovat luminiscenci vzorku, emisi Augerových elektronů a emisi charakteristického rentgenového záření. Posledně zmíněná emise rentgenového záření je jedním z důvodů proč byl SEM s modulem EDS (Energy-dispersive X-ray spectroscopy) zařazen mezi instrumentální metody analýzy našich vzorků.

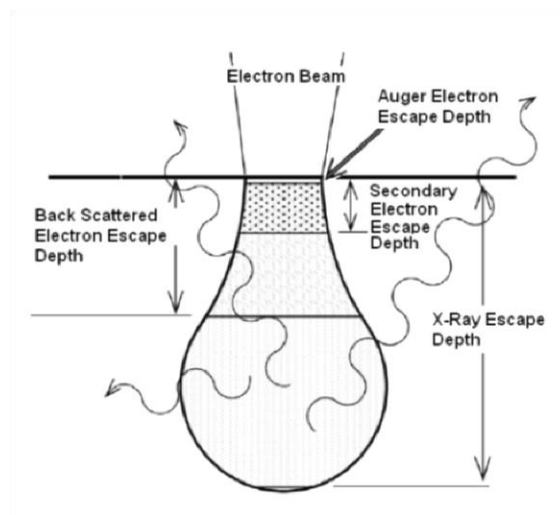
EDS modul umožňuje zachytit analyzovat charakteristické rentgenové záření emitované elektrony, které přeskakují na místo uvolněné vyraženým elektronem z vnitřní slupky elektronového obalu atomu ve vzorku a umožňuje tak provádět jeho prvkovou analýzu, schematické znázornění vzniku charakteristického rentgenového záření je uvedeno na obrázku 7 (převzato z [30]).

Přesnost EDS může být ovlivněna několika faktory, prvním z nich je, že se překrývají píky charakteristického záření některých prvků (např. Ti K_{β} a V K_{α} , Mn K_{β} a Fe K_{α}), Další nepřesnost může do výsledku zanést fakt, že výpočetní algoritmus pro analýzu spekter předpokládá rovinný povrch vzorku.

Rozlišení této metody je dáno interakčním objemem dopadajícího záření se vzorkem, který je přímo úměrně závislý na velikosti urychlovacího napětí a je nepřímo úměrný hustotě vzorku. Tento objem má obvykle tvar jakési kapky, jak je znázorněno na obrázku 8 (převzato z [31]). Průměr této kapky je při použití urychlovacího napětí 20 keV přibližně 1 μm [32], což mělo postačovat pro bodové měření složení vláken aktinolitu v našich vzorcích, ale byly nalezeny pouze shluky mnohem tenčích vláken.



Obrázek 8 - Vznik charakteristického rentgenového záření (převzato z [30]).



Obrázek 7 - Interakční objem svazku elektronů ve vzorku (převzato z [31])

4 Experimentální část

4.1 Přístrojové a softwarové vybavení

Zařízení pro odběr vzorků

Beta prachoměr Eberline, který zachytává aerosolové částice na filtrační pásku ze skelných vláken. Při odběru byly použity skleněné filtry firmy Whatman, které jsou pro odběr vzorků pro práškovou rentgenovou difrakci obzvláště vhodné kvůli tomu, že potlačují přednostní orientaci krystalitů a proto, že amorfni skleněná vlákna nedifraktují rentgenové záření. Odběr probíhá tak, že vzduch nasávaný vývěvou a prochází filtrem. Páska filtru se automaticky každý den posunuje mezi β zářičem a Geiger-Müllerovým počítačem. Rozdíl mezi radiací prošlou filtrem před a po zachycení částic představuje množství aerosolových částic zachycených na filtru.

Prášková rentgenová difrakce

Pro studium vzorků byla použita jako stěžejní metoda práškové rentgenové difrakce (XRD). Difrakční záznamy byly pořízeny na přístroji X'Pert Pro MPD, PANalytical za následujících podmínek: Cu K_{α} záření ($K_{\alpha} = 1.5406 \text{ \AA}$), Göbelovo zrcadlo Prefix Parabolic Mirror, PANalytical.

Elektronová mikroskopie

Skenovací elektronový mikroskop JSM-6510, JEOL s modulem EDS SSD INCA, Oxford Instruments, který detekuje prvky od bóru po uran.

Softwarové vybavení

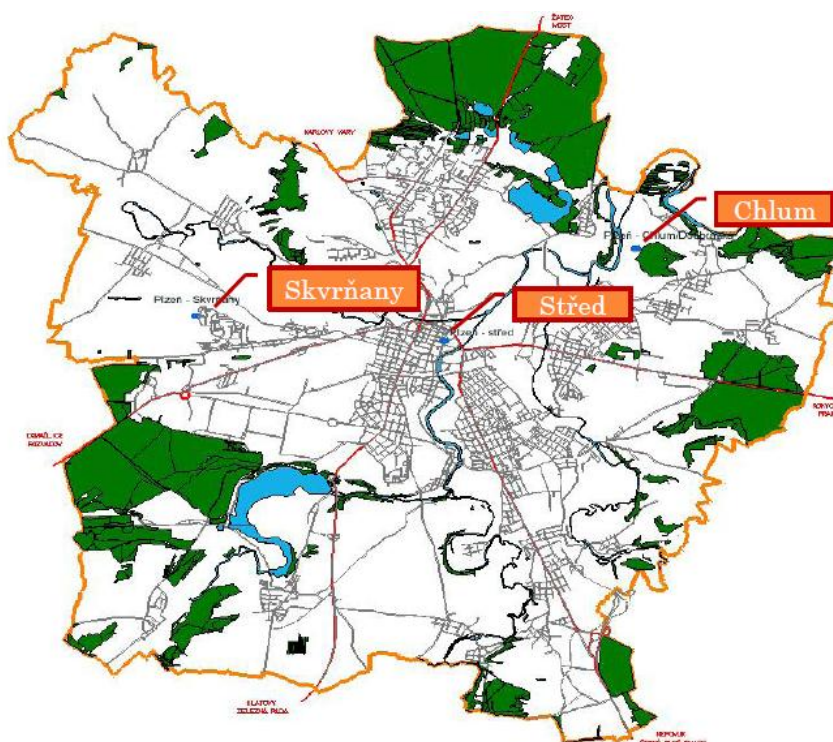
Pro analýzu vzorků byly použity tyto softwarové nástroje: programy pro analýzu difraktogramů ZDS [33], HighScore Plus [34], tabulkové procesory OriginPro [35], MS Excel [36] a databáze PDF-2 [37].

4.2 Odběr vzorků

Poskytnuté vzorky byly odebírány na skleněné nedifraktující filtry Whatman, které potlačují přednostní orientaci krystalitů. Jednalo se o frakci PM₁₀ denních (24 hodinových) měření ze zimy a jara 2010/2011. Konkrétní lokality a období odběrů vzorků jsou shrnuty v tabulce 4, lokality odběrů jsou také zobrazeny na mapě Plzně na obrázku 9, který byl převzat a upraven z [38].

Tabulka 4 - Lokality a období odběrů měřených vzorků

Lokalita	Období odběrů
Plzeň – Střed	25. 11. 2010 – 4. 5. 2011
Plzeň – Skvrňany	20. 12. 2010 – 4. 5. 2011
Plzeň – Chlum	29. 3. – 4. 5. 2011



Obrázek 9 - místa odběrů vzorků (převzato a upraveno z [38])

Data o meteorologické situaci v době odběru jednotlivých vzorků byla získána od ČHMÚ, pobočka Plzeň, ze stanice Mikulka a jsou uvedena v tabulce 33. Srážky byly odečítány vždy v sedm hodin dopoledne následujícího dne.

Tabulka 5 - Meteorologická situace v době odběru jednotlivých vzorků

<i>Datum</i>	<i>Srážky (mm)</i>	<i>Směr větru (°)</i>		
	7:00 hod	7:00 hod	14:00 hod	21:00 hod
22. 12. 2010	0.9	282	274	309
30. 12. 2010	0.1	265	224	230
07. 01. 2011	2.4	224	217	181
31. 01. 2011	0.2	103	40	26
10. 02. 2011	0.3	16	153	229
28. 02. 2011	0.0	58	54	14
09. 03. 2011	0.0	209	217	255
25. 03. 2011	0.0	185	256	332
04. 04. 2011	3.3	234	303	201
21. 04. 2011	0.0	207	8	9
01. 05. 2011	0.0	14	25	6

4.3 Měření vzorků práškovou rentgenovou difrakcí

Vzhledem k časové náročnosti měření (cca 8 hodin/vzorek) a k omezenému měřicímu času na přístroji, nebyly proměřeny všechny vzorky, ale byly vybrány vždy dva dny v měsíci v odstupeu přibližně dvou týdnů s co největším množstvím pevné frakce atmosférického aerosolu. Toto množství se v jednotlivých dnech měnilo, ale měnilo se se shodnými trendy na všech odběrných místech. Cílem tohoto výběru bylo zkombinovat požadavek na co největší množství zachycené pevné frakce atmosférického aerosolu na filtru a zároveň zachovat pokrytí měřením průběhu celého období odebíraných vzorků. Vybrané dny a místa jsou shrnuty v tabulce 6.

Tabulka 6 – Data a místa odběrů měřených vzorků

<i>Datum odběru</i>	<i>Místa odběru</i>
22. 12. 2010	Plzeň Střed, Skvrňany
30. 12. 2010	Plzeň Střed, Skvrňany
7. 1. 2011	Plzeň Střed, Skvrňany
31. 1. 2011	Plzeň Střed, Skvrňany
10. 2. 2011	Plzeň Střed, Skvrňany
28. 2. 2011	Plzeň Střed, Skvrňany
9. 3. 2011	Plzeň Střed, Skvrňany
25. 3. 2011	Plzeň Střed, Skvrňany
4. 4. 2011	Plzeň Střed, Skvrňany, Chlum
21. 4. 2011	Plzeň Střed, Skvrňany, Chlum
1. 5. 2011	Plzeň Střed, Skvrňany, Chlum

Filtry byly přilepeny voskem na podložku, aby nedošlo k jejich uvolnění a posunu během měření a takto byly vloženy do držáku difraktometru. Všechny vzorky byly měřeny programem o následujícím nastavení: napětí na rentgenové lampě – 40 kV, proud 30 mA, úhel primárního svazku byl nastaven na 2°, otáčení vzorku – 10 ot./min, krokový posun detektoru 0,026° a byly zkoumány difrakce v rozmezí 5-60° 2 θ .

4.4 Analýza difraktogramů

V získaných difraktogramech bylo nutno provést profilovou analýzu a na jejím základě následně provést fázovou analýzu.

Dosavadní postup byl takový, že byla provedena profilová analýza difraktogramů programem ZDS [33]. Výstupem této profilové analýzy byla textová tabulka, která byla následně ručně porovnáována se seznamem nejběžněji se vyskytujících složek atmosférického prachu, který vznikl z publikovaných výsledků z podkrušnohorské oblasti. Toto řešení je poměrně časově náročné a zanáší do řešení problému zatížení subjektivní chybou.

Proto bylo hledáno jiné řešení, které by se s dosavadním postupem srovnalo a zdá se, že tyto požadavky splňuje analýza programem HighScore Plus [34]. Tento software umožňuje mimo jiné provést profilovou i fázovou analýzu. Fázová analýza je prováděna na základě možnosti vytvořit uživatelskou databázi a možnosti difrakční data zároveň porovnat s difrakcemi přijatých kandidátů a porovnáním metodou nejmenších čtverců zjistit nejpravděpodobnější kombinaci fází ve vzorku.

Do uživatelské databáze byl vložen již dříve zmiňovaný a pro tuto práci zásadní seznam nejběžněji se vyskytujících složek atmosférického prachu z podkrušnohorské oblasti, který je uveden v tabulce 7, která byla převzata a upravena z [39]. Názvy jednotlivých minerálů jsou v tabulce 7 uvedeny tak, jak je uvádí databáze PDF-2.

Tabulka 7 - seznam nejběžněji se vyskytujících vyskytujících složek atmosférického prachu z podkrušnohorské oblasti

<i>Název minerálu</i>	<i>Chemický vzorec</i>	<i>Číslo PDF</i>	<i>3 nejintenzivnější difrakce s intenzitou vyšší než 50 % (2θ)</i>		
Afwillite	$\text{Ca}_3\text{Si}_3\text{O}_4$	29-330	28,1	31,54	32,8
Bertierine	$\text{Fe}_3\text{H}_4\text{O}_9\text{Si}_2$	31-618	12,42	25,06	35,45
Biotite	$\text{K}(\text{Mg}, \text{Fe})_3\text{F}_2(\text{Al}, \text{Fe})\text{Si}_3\text{O}_{10}(\text{OH}, \text{F})_2$	42-1437	8,8		
Graphite	C	25-284	26,6		
Calcite	CaCO_3	5-586	29,4		
Aragonite	CaCO_3	41-1475	26,2	33,12	27,2
Calcium Magnesium Sulfate	$\text{CaMg}_3(\text{SO}_4)_4$	19-241	24,6	32,55	
Gypsum	$\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	33-311	11,60	20,72	29,11
Chlorite	$\text{Na}_{0,5}\text{Al}_6(\text{Si}, \text{Al})_8\text{O}_{20}(\text{OH})_{10} \cdot \text{H}_2\text{O}$	39-381	25,43	11,48	19,98
Wollastonite	CaSiO_3	34-1460	29,98	26,84	25,29
Hematite	Fe_2O_3	33-664	33,15	35,61	
Magnetite	Fe_3O_4	19-629	35,42		
Illite	$(\text{K}, \text{H}_3\text{O}^+)\text{Al}_2\text{Si}_3\text{AlO}_{10}(\text{OH})_2$	26-911	26,67	8,84	17,65
Koktaite	$(\text{NH}_4)_2\text{Ca}(\text{SO}_4)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	11-0475	8,99	26,99	
Kaolinite	$\text{Al}_2(\text{Si}_2\text{O}_5)(\text{OH})_4$	14-164	12,38	24,9	20,33
Lizardite	$(\text{Mg}, \text{Al})_3(\text{Si}, \text{Al})_2\text{O}_5(\text{OH})_4$	11-386	35,85	12,2	24,57
Microcline	KAlSi_3O_8	19-932	27,51	21,04	
Muscovite Mg	$\text{KMgAlSi}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	21-993	19,71	8,92	29,16
Muscovite Al	$\text{KAl}_2\text{Si}_3\text{AlO}_{10}(\text{OH}, \text{F})_2$	7-25	26,83	8,88	34,94
Muscovite Ca	$(\text{K}, \text{Ca}, \text{Na})(\text{Al}, \text{Mg}, \text{Fe})_2(\text{Si}, \text{Al})_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	25-649	27,86	26,75	8,916

Mullite	$\text{Al}_6\text{Si}_2\text{O}_{13}$	15-776	26,27	25,97	16,43
Aluminum Silicate Hydrate	$\text{Al}_4\text{Si}_2\text{O}_{10} \cdot \text{H}_2\text{O}$	10-478	9,9	26,11	36,95
Ammonium Zinc Sulfate Hydrate	$(\text{NH}_4)_2\text{Zn}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	35-767	21,23	23,55	21,4
Ammonium Aluminum Sulfate Hydrate	$(\text{NH}_4)\text{Al}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$	7-22	20,51	21,77	27,22
Orthoclase	KAlSi_3O_8	9-0462	28,04	22,09	23,39
Anorthoclase	$(\text{Na}_{0.85}\text{K}_{0.15})(\text{AlSi}_3\text{O}_8)$	75-1635	27,52	21,61	27,76
Lizardite-1T	$3\text{MgO} \cdot 2\text{SiO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	2-360	24,78	12,42	35,74
Muscovite-2M ₁	$\text{KAl}_2(\text{Si}_3\text{Al})\text{O}_{10}(\text{OH}, \text{F})_2$	6-263	26,83	8,88	34,94
Quartz	SiO_2	33-1161	26,65		
Tridymite	SiO_2	14-260	20,8	21,79	23,39
Brookite	TiO_2	29-1360	25,34	30,81	25,69
Anhydrite	CaSO_4	37-1496	25,44		
Sillimanite	Al_2SiO_5	38-0471	26,07		
Cristobalite	SiO_2	82-1410	22,04		
Actinolite	$\text{Ca}_2(\text{Mg}, \text{Fe})_5\text{Si}_8\text{O}_{22}(\text{OH})_2$	41-1366	28,61	10,49	33,04
Tremolite	$\text{Ca}_2\text{Mg}_5\text{Si}_8\text{O}_{22}(\text{OH})_2$	44-1402	10,55	33,15	28,60
Montmorillonite	$\text{Si}_{3.74}\text{Al}_{2.03}\text{Fe}_{0.03}\text{Mg}_{0.02}\text{O}_{11}$	2-0009	5,77	19,8	29,26

4.4.1 Profilová analýza difraktogramů programem ZDS a fázová analýza porovnáním se seznamem vybraných minerálů, vyskytujících se v atmosférickém prachu

K možnosti porovnání jednotlivých přístupů analýzy difraktogramů vzorků atmosférických aerosolů bylo nutno tyto difraktogramy vyhodnotit oběma přístupy zvlášť. Získaná difrakční data našich vzorků byla nejprve podrobena profilové analýze programem ZDS a následně fázové analýze ručním porovnáním se seznamem nejběžněji se vyskytujících složek atmosférického prachu v podkrušnohorské oblasti. Výstupy z profilové analýzy jednotlivých vzorků jsou uvedeny v příloze v podkapitole 7.1.

4.4.2 Profilová a fázová analýza difraktogramu provedená za pomoci programu HighScore Plus

Jako nový a rychlejší způsob analýzy difraktogramů vzorků atmosférického aerosolu byl zvolen program HighScore Plus [34], ve kterém byla vytvořena uživatelská databáze obsahující právě zmíněný seznam nejběžněji se vyskytujících složek atmosférického prachu v podkrušnohorské oblasti v tabulce 7. Zdrojovými daty pro tuto databázi byly záznamy v databázi PDF-2 zmíněné v tabulce 7.

V tomto programu byla tedy provedena profilová analýza vzorků z tabulky 6, následně byla provedena fázová analýza se zapnutou možností porovnávat difraktogram s difrakčními daty navrhovaných kandidátů i pomocí metody nejmenších čtverců.

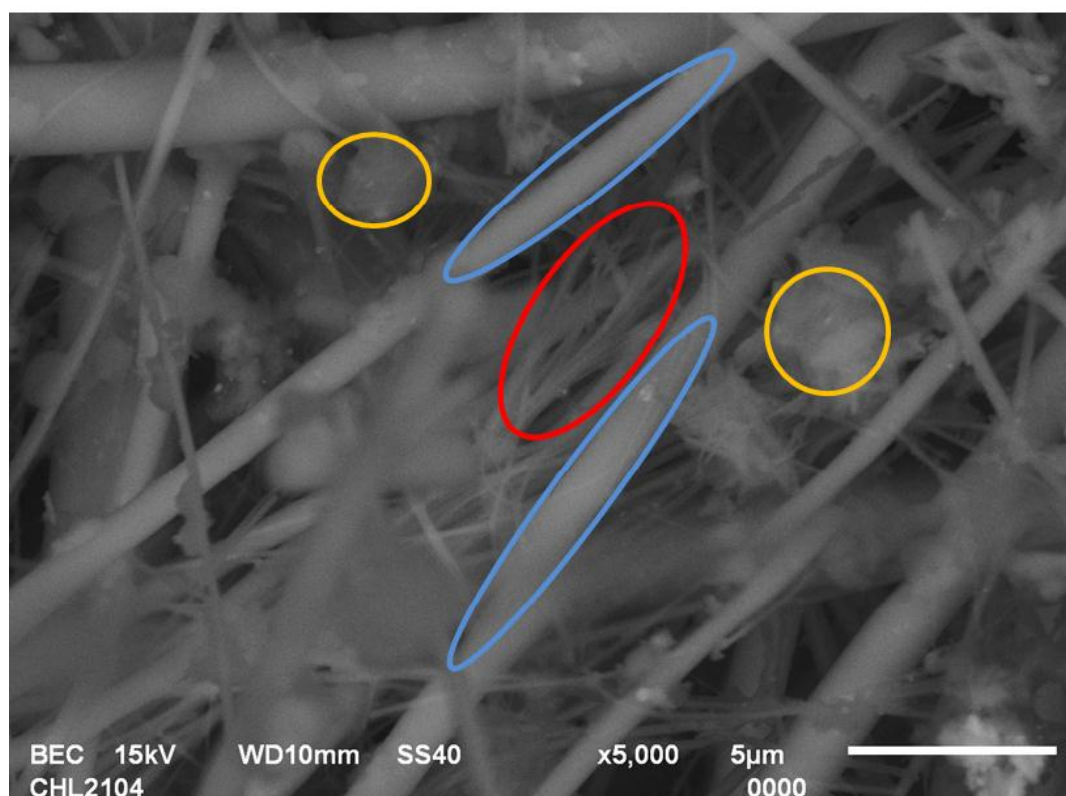
Výsledky obou metod profilové analýzy se nelišily. V následující kapitole 5.2 bude tedy popsáno, proč a jakým způsobem byly přiřazeny píky v difraktogramech jednotlivých vzorků.

4.5 Studium vybraného vzorku elektronovou mikroskopií

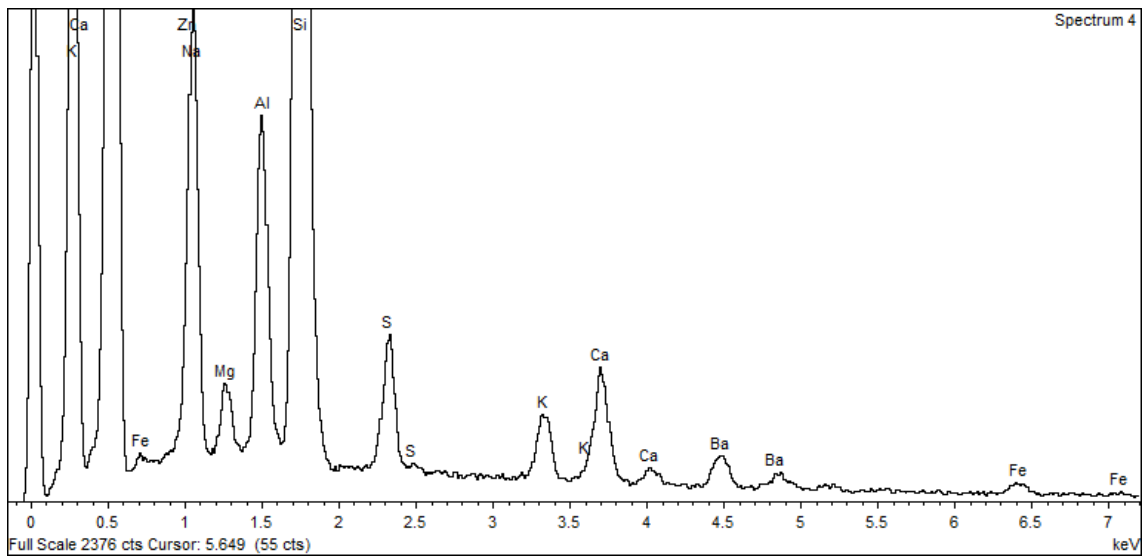
Protože byl ve vzorcích identifikován amfibolový azbestový minerál a na základě difrakčních dat nebylo možno rozhodnout, zdali se jedná o aktinolit, či tremolit, byl vzorek z 21. 4. 2011 ze stanoviště Plzeň Chlum studován na rastrovacím elektronovém mikroskopu s EDS analyzátozem. Jak bylo již zmíněno, tremolit ($\text{Ca}_2(\text{Mg}_{5,0-4,5}\text{Fe}^{2+}_{0,0-0,5})\text{Si}_8\text{O}_{22}(\text{OH})_2$) se chemicky liší od aktinolitu ($\text{Ca}_2(\text{Mg}_{4,5-2,5}\text{Fe}^{2+}_{0,5-2,5})\text{Si}_8\text{O}_{22}(\text{OH})_2$) pouze poměrem železnatých kationtů ku vápenatým (tedy pro tremolit je tento poměr 2:0-0,5 a pro aktinolit 2:0,5-2,5). Všechny prvky kationtů těchto amfibolových azbestů jsou snadno rozpoznatelné v EDS spektru.

Dalším důvodem použití elektronového mikroskopu bylo vizuálně potvrdit azbestová vlákna ve vzorku.

Na obrázku 10 je snímek části filtru se zachycenými azbestovými vlákny a na obrázku 11 je spektrum EDS analýzy bodového měření azbestových vláken.



Obrázek 10 - Snímek z elektronového mikroskopu vzorku z místa Plzeň - Chlum 21. 4. 2011 (vlákna azbestového minerálu červeně, skleněná vlákna filtru modře, další složky atmosférického aerosolu žlutě).



Obrázek 11 - EDS spektrum vzorku Plzeň Chlum 21. 4. 2011

5 Výsledky a diskuse

5.1 Vyhodnocení studia vybraného vzorku elektronovou mikroskopií

Jak je vidět na obrázku 10, tenká dlouhá vlákna azbestového minerálu (na obrázku značena červeným oválem), jsou snadno odlišitelná od silných skleněných vláken filtru (na obrázku značena modrými ovály) a dalších složek pevné frakce atmosférického aerosolu (na obrázku značeny žlutými ovály). Naprostá většina azbestových vláken spadá do kategorie respirabilních vláken (vlákna o průměru menším než 3 μm a délce vlákna více jak 5 μm , kdy poměr délky ku průměru vlákna je větší než 3:1).

Co se týče analýzy prvkového složení pomocí EDS a rozhodnutí na jejím základě, zda se jedná ve vzorku o aktinolit nebo tremolit, pravděpodobně jsou ve vzorku přítomna vlákna aktinolitu. K tomuto závěru nás vedl fakt, že je molární poměr atomů vápníku ku atomům železa (jak v bodovém měření, tak v měření oblasti shluku azbestových vláken) je ve vzorku 2:0,7, což odpovídá poměru aktinolitu. Poměr atomů vápníku ku atomům hořčíku je mírně větší než by se dalo ze vzorce aktinolitu očekávat. Tento vyšší obsah vápníku pravděpodobně pochází z naprášeného kalcitu na vláknech a pod vlákny aktinolitu, který byly ve vzorku také identifikován. Signál hliníku pravděpodobně pochází z naprášeného kaolinitu, či biotitu.

5.2 Fázová analýza jednotlivých vzorků

Zjištěné fáze byly kvůli povaze jejich difraktogramů a kvalitě našich záznamů identifikovány s různou jistotou. V následujících tabulkách 9 – 33, které obsahují fázové analýzy jednotlivých vzorků, jsou jako „s jistotou identifikované“ (označeny

jako „A“) označeny fáze, jejichž tři nejintenzivnější difrakční linie byly nalezeny v námi změřeném difraktogramu. Jako „pravděpodobně se vyskytující“ (označeny jako „B“) byly označeny fáze, jejichž jedna až dvě nejintenzivnější difrakční linie byly nalezeny v námi změřeném difraktogramu s tím, že jejich difrakční záznam více intenzivních linií neobsahuje. Během fázové analýzy našich vzorků byla identifikována jedna nová složka, kterou neobsahoval původní seznam v tabulce 7, informace o ní jsou uvedeny v tabulce 8. Dále byla fázová analýza doplněna o informace o původu jednotlivých složek [39]. Složky antropogenního původu jsou označeny jako „C“ a složky původem ze zemského povrchu jsou označeny jako „D“.

Tabulka 8 - Minerály doplněné do seznamu nejběžněji se vyskytujících složek atmosférického aerosolu

<i>Název minerálu</i>	<i>Chemický vzorec</i>	<i>Číslo PDF</i>	<i>3 nejintenzivnější difrakce s intenzitou vyšší než 50 % ($^{\circ} 2\theta$)</i>		
Mascagnite	$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$	40-0660	20,47	20,20	29,24

Tabulka 9 – Vzorek z 22. 12. 2010 ze stanice Plzeň Střed

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ}2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
Sillimanite	26,07	B	C
Actinolite/Tremolite	10,32; 28,38	B	D.
Mascagnite	20,46; 19,92; 29,34	A	C
Ammonium Zinc Sulfate Hydrate	20,46; 23,61	B	C
Montmorillonite	5,78; 19,92; 29,26	A	D

Tabulka 10 - Vzorek z 22. 12. 2010 ze stanice Plzeň Skvrňany

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
Ammonium Zinc Sulfate Hydrate	21,51; 23,83	B	C.
Actinolite/Tremolite	10,31; 28,70	B	D
Biotite	8,67	B	D

Tabulka 11 - Vzorek z 30. 12. 2010 ze stanice Plzeň Střed

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
Ammonium Aluminum Sulfate Hydrate	20,49; 22,07; 27,36	A	C, D
Calcite	29,31	B	C, D
Magnetite	35,57	B	C, D
Mascagnite	20,49; 20,24; 29,31	A	C
Aragonite	26,25; 33,26; 27,36	A	C, D
Montmorillonite	5,7; 19,95; 29,31	A	D

..

Tabulka 12 - Vzorek z 30. 12. 2010 ze stanice Plzeň Skvrňany

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
Calcite	29,33	B	C, D
Biotite	8,70	B	D
Mascagnite	20,48; 20,23; 29,34	A	C

Tabulka 13 - Vzorek z 7. 1. 2011 ze stanice Plzeň Střed

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
Mascagnite	20,50; 20,22; 29,38	A	C.
Paranatroilite	6,55	B	C, D

Tabulka 14 - Vzorek z 7. 1. 2011 ze stanice Plzeň Skvrňany

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
Biotite	8,67	B	D
Kaolinite	12,38; 24,99; 20,43	A	D
Microcline	27,51; 20,43	B	D
Calcite	29,47	B	D, C
Montmorillonite	5,64; 19,9; 29,47	A	D

Tabulka 15 - Vzorek z 31. 1. 2011 ze stanice Plzeň Střed

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
C/Quartz	26,75	B	D, C
Mascagnite	20,47; 20,22; 29,27	A	C
Biotite	8,82	B	D
Actinolite/Tremolite	10,26; 33,36; 28,46	A	D
Calcite	29,27	B	D, C

Tabulka 16 - Vzorek z 31. 1. 2011 ze stanice Plzeň Skvrňany

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
C/Quartz	26,56	B	D, C
Mascagnite	20,47; 20,21; 29,28	A	C
Paranatrofite	6,58	B	D, C
Ammonium Zinc Sulfate Hydrate	21,41; 23,63; 21,41	A	C

Tabulka 17 - Vzorek z 10. 2. 2011 ze stanice Plzeň Střed

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
C/Quartz	26,71	B	D, C
Mascagnite	20,65; 20,35; 29,39	A	C
Kaolinite	12,46; 25,15; 20,35	A	D

Tabulka 18 - Vzorek z 10. 2. 2011 ze stanice Plzeň Skvrňany

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
C/Quartz	26,71	B	D, C
Illite	26,62; 8,89	B	D
Calcite	29,44	B	D, C
Bertihierine	12,40; 25,06; 35,15	A	D

Tabulka 19 - Vzorek z 28. 2. 2011 ze stanice Plzeň Střed

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
C/Quartz	26,60	B	D, C
Mascagnite	20,50; 20,25; 29,37	A	C
Actinolite/Tremolite	10,51; 28,51	B	D
Kaolinite	12,51; 24,88; 20,49	A	D
Biotite	8,86	B	D

Tabulka 20 - Vzorek z 28. 2. 2011 ze stanice Plzeň Skvrňany

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
C/Quartz	26,65	B	D, C
Calcite	29,35	B	D, C
Actinolite/Tremolite	10,72; 32,98; 28,61	A	D
Illite	26,65; 8,88; 17,95	A	D
Mascagnite	20,50; 20,28; 29,35	A	C

Tabulka 21 - Vzorek z 9. 3. 2011 ze stanice Plzeň Střed

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
C/Quartz	26,56	B	D, C
Actinolite/Tremolite	10,33; 33,75;	B	D

Tabulka 22 - Vzorek z 9. 3. 2011 ze stanice Plzeň Skvrňany

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
C/Quartz	26,54	B	D, C
Calcite	29,51	B	D, C
Chlorite	25,72; 11,65; 20,20	A	D

Tabulka 23 - Vzorek z 25. 3. 2011 ze stanice Plzeň Střed

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
C/Quartz	26,60	B	D, C
Calcite	29,39	B	D, C
Actinolite/Tremolite	10,46; 33,26	B	D
Illite	26,60; 8,62; 17,42	A	D
Mascagnite	20,88; 20,51; 29,38	A	C

Tabulka 24 - Vzorek z 25. 3. 2011 ze stanice Plzeň Skvrňany

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
C/Quartz	26,63	B	D, C
Actinolite/Tremolite	10,43; 33,30	B	D
Illite	26,63; 8,58; 17,72	A	D

Tabulka 25 - Vzorek z 4. 4. 2011 ze stanice Plzeň Střed

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
C/Quartz	26,56	B	D, C
Calcite	29,31	B	D, C
Mascagnite	20,36; 20,74; 29,31	A	C

Tabulka 26 - Vzorek z 4. 4. 2011 ze stanice Plzeň Skvrňany

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
Microcline	27,28; 20,18; 21,18	B	D
Biotite	8,69	B	D

Tabulka 27 - Vzorek z 4. 4. 2011 ze stanice Plzeň Chlum

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
C/Quartz	26,58	B	D, C
Calcite	29,61	B	D, C
Biotite	8,57	B	D

Tabulka 28 - Vzorek z 21. 4. 2011 ze stanice Plzeň Střed

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
C/Quartz	26,60	B	D, C
Actinolite/Tremolite	10,31; 31,32	B	D
Magnetite	35,43	B	D, C
Kaolinite	12,46; 24,62; 20,45	A	D
Illite	26,60; 8,86; 17,66	A	D
Mascagnite	20,73; 20,20; 29,41	A	C

Tabulka 29 - Vzorek z 21. 4. 2011 ze stanice Plzeň Skvrňany

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
C/Quartz	26,57	B	D, C
Kaolinite	12,41; 25,06; 20,50	A	D
Illite	26,57; 8,83; 17,76	A	D
Mascagnite	20,79; 20,50; 29,31	A	C

Tabulka 30 - Vzorek z 21. 4. 2011 ze stanice Plzeň Chlum

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
C/Quartz	26,62	B	D, C
Calcite	29,29	B	D, C
Actinolite/Tremolite	10,46; 28,41; 33,16	A	D
Biotite	8,86	B	D

Magnetite	35,55	B	D, C
Kaolinite	12,52; 25,27; 20,43,	A	D

Tabulka 31 - Vzorek z 1. 5. 2011 ze stanice Plzeň Střed

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
C/Quartz	26,60	B	D, C
Calcite	29,39	B	D, C
Mascagnite	20,48; 20,21; 29,39	A	C

Tabulka 32 - Vzorek z 1. 5. 2011 ze stanice Plzeň Skvrňany

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
Kaolinite	12,30; 25,07; 20,42	A	D
Calcite	29,47	B	D, C

Tabulka 33 - Vzorek z 1. 5. 2011 ze stanice Plzeň Chlum

<i>Minerál</i>	<i>Nalezené difrakce ($^{\circ} 2\theta$)</i>	<i>Jistota přiřazení</i>	<i>Původ</i>
C/Quartz	26,60	B	D, C
Calcite	29,36	B	D, C
Ammonium Aluminum Sulfate Hydrate	20,57; 21,44; 27,45	S jistotou přiřazené	D, C
Calcium Magnesium Sulfate	24,64; 32,37	B	C

5.3 Analýza možných zdrojů aerosolů a popis jejich transportu

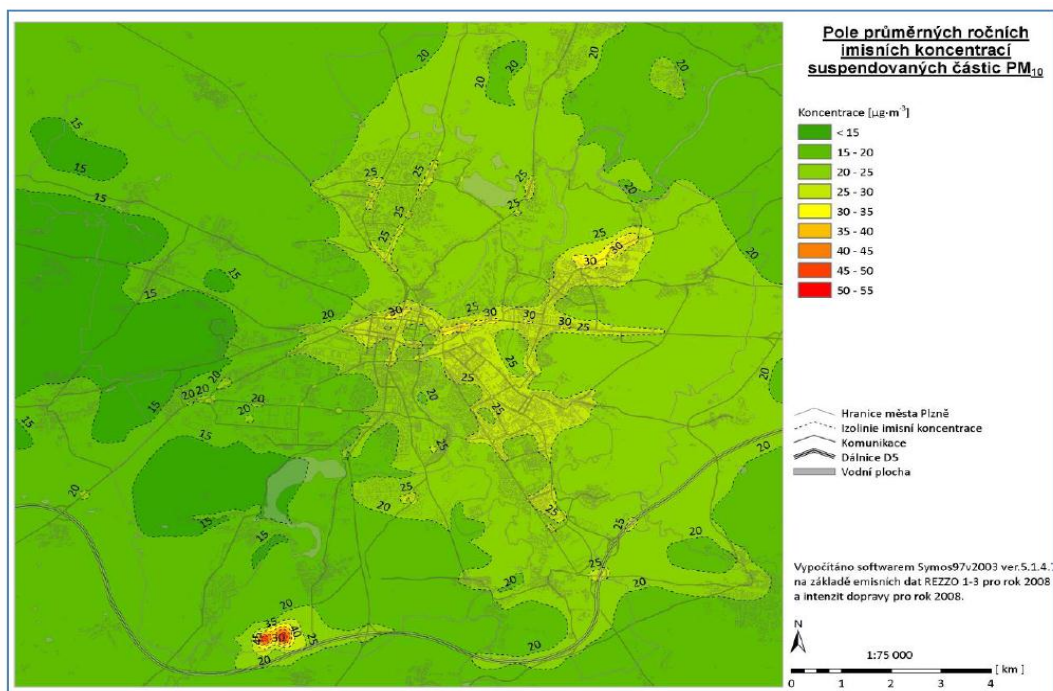
Dalším cílem této diplomové práce byl úkol popsat transport polutantů na základě analýzy možných zdrojů znečištění v Plzni a meteorologické situace v době odběru. Analýzou možných zdrojů znečištění ovzduší v Plzni se zabývá zatím nepublikovaná disertační práce Mgr. Miroslava Klána [40]. S jeho svolením zde budou uvedeny některé výstupy z jeho práce týkající se hlavních zdrojů znečištění v Plzni a složení jimi produkovaného atmosférického aerosolu. Tyto informace byly dány do souvislosti s meteorologickou situací v době odběru jednotlivých vzorků a námi zjištěnými složkami nalezenými ve vzorcích.

5.3.1 Možné zdroje aerosolů

Mezi největší zdroje tuhých znečišťujících látek (TZL) v Plzni patří zdroje uvedené v tabulce 34 [40, 41]. Jedná se především o velké teplárny, průmyslový komplex a lom na jižním okraji Plzně u obce Litice. Mapa Plzně na obrázku 12 (převzato z [40]) ukazuje průměrné roční imisní koncentrace suspendovaných částic PM₁₀ a na přehlednější mapě na obrázku 13 (převzato z [42]) lze ukázat, že místa se zvýšenou imisní koncentrací suspendovaných částic korelují s místy hlavních zdrojů TZL a hlavními dopravními tahy.

Tabulka 34 - Největší zdroje TZL

<i>Provozovna</i>	<i>Emise (t/rok)</i>	<i>Ulice</i>	<i>Typ TZL</i>
Plzeňská energetika a.s.	63,9	Tylova	Teplárenské popílký
Plzeňská teplárenská a.s.	35,3	Doubravecká	Teplárenské popílký
PILSEN STEEL s.r.o.	20,8	Tylova	Oxidy železa
Tarmac CZ a.s.	18,2	Litice	Prach spojený s drcení kamene
Typos, tiskařské závody s.r.o.	8,2	Podnikatelská	Popílký ze spalovacích procesů



Obrázek 12 - průměrné roční imisní koncentrace suspendovaných částic PM₁₀ (převzato z [40])



Obrázek 13 - Mapa umístění největších zdrojů TZL a odberných staníc (modrá kolečka – odberné stanice, červená kolečka – zdroje znečištění, převzato a upraveno z [42]),

Na obrázku 13 je uvedena mapa Plzně se zvýrazněnými místy námi použitých odběrných zařízení (modrá kolečka) a největších zdrojů TZL (červená kolečka). 1 – Plzeňská energetika a. s., 2 – Plzeňská teplárenská a. s., 3 – PILSEN STEEL s. r. o., 4 – Tarmac CZ a. s., 5 – Typos, tiskařské závody s. r. o., 6 – odběrná stanice Plzeň Střed, 7 – odběrná stanice Plzeň Skvrňany, 8 – odběrná stanice Plzeň Chlum.

5.3.2 Popis transportu polutantů

V našich vzorcích se často vyskytovaly půdní minerály jako je například biotit, illit, montmorillonit, kaolinit, chlorit, či berthierin. Tento fakt je v souladu s očekáváním, protože odběrné zařízení bylo umístěno ve výšce cca dvou metrů nad zemí a převažující přítomnost půdních minerálů je tedy pochopitelná.

Další kategorií jsou minerály, u nichž není možné jednoznačně rozlišit, zda jsou antropogenního nebo zemského původu. Takovými minerály je například křemen, sádrovec, kalcit a magnetit. Vzhledem k tomu, že se křemen a magnetit vyskytují v hojném množství v elektrárenských popílcích z plzeňských tepláren [40], lze předpokládat, že velká část námi zjištěného křemene pochází právě z tepláren. Křemen byl nalezen ve většině vzorků a jeho výskyt nebyl závislý na směru větru ani na srážkách. Nelze proto jednoznačně určit, ze kterého zdroje pochází. Magnetit byl nalezen ve třech našich vzorcích a všechny případy s ohledem na meteorologické podmínky naznačují, že by jeho zdrojem měla být teplárna v ulici Doubravecká společnosti Plzeňská teplárenská a.s.. Kalcit a sádrovec jsou poměrně běžné zemské minerály, které se mohou uvolňovat do ovzduší i během stavební činnosti.

Poměrně dobře se podařilo popsat transport aktinolitu na území Plzně, který se vyskytoval ve 40 % vzorků. Ve všech případech (kromě 1. 5. 2011, kdy byl státní svátek a v lomu se tedy nepracovalo), kdy váł vítr severním, či severovýchodním směrem, což je ve směru od lomu v Liticích na Plzeň, byl nalezen aktinolit i v našich vzorcích. Dále byl aktinolit nalezen i ve dvou dalších dnech (9. 3. a 25. 3. 2011), kdy váł vítr opačným (západním/jihozápadním) směrem. Jeho přítomnost se dá vysvětlit

zvícením usazeného prachu na cestách, který se kumuloval v důsledku absence srážek v tomto období.

Zajímavou skutečností byla přítomnost mascagnitu (síranu amonného) v 60 % vzorků, jehož výskyt vykazoval nezávislost na směru větru i srážkách. Jedná se zřejmě o sekundární aerosol, protože se tento minerál vyskytuje v přírodě velmi vzácně, obvykle v okolí požárů uhelných slojí a nejspíš vzniká v atmosféře reakcí kyseliny sírové se čpavkem. Jeho výskyt pravděpodobně souvisí s topnou sezónou a spalováním uhlí s obsahem síry.

6 Závěr

Pomocí rentgenové práškové difrakce metodou paralelního svazku byly studovány vzorky denních měření prachů získaných ve třech lokalitách města Plzně ze zimního období 2010/2011. Jednalo se o první použití této metody na práškovém difraktometru, který má k dispozici katedra anorganické chemie.

Difrakční data byla podrobena profilové analýze programy ZDS a HighScore Plus. Výsledky obou metod se nelišily. V programu HighScore Plus byla vytvořena databáze nejběžněji se vyskytujících složek atmosférického prachu, která vznikla z publikovaných výsledků z podkrušnohorské oblasti a byla doplněna o minerály mascagnit a paranatrolit, které byly nalezeny v našich vzorcích. Fázová analýza byla provedena programem HighScore Plus s použitím výše zmíněné databáze a tato metoda se ukázala být mnohem rychlejší, snadnější a přehlednější než dosavadní přístup ručním porovnáváním výstupů profilové analýzy programu ZDS s tabulkovým seznamem.

Protože nebylo možno pomocí rentgenové práškové difrakce rozlišit, zda se ve vzorcích jedná o aktinolit, či tremolit, byl vzorek obsahující amfibolový azbest podroben studiu rastrovacím elektronovým mikroskopem. Takto byla vizuálně potvrzena azbestová vlákna, která podle výsledků z EDS analýzy dle poměru železnatých kationtů přísluší aktinolitu.

Dále byl na základě analýzy možných zdrojů znečištění v Plzni [40] a meteorologické situace v době odběru, který byl získán od ČHMÚ, popsán transport některých složek atmosférického aerosolu antropogenního původu. Navzdory očekávání nebylo prokázáno spojení výskyt křemene v atmosférickém aerosolu s velkými teplárnami na území Plzně. Pravděpodobně dochází k mísení křemene původem z tepláren s křemenem zemského původu, a proto nelze jednoznačně popsat jeho transport od zdroje k zařízením, která odebírala vzorky. Zdrojem magnetitu zjištěného v našich vzorcích byla pravděpodobně teplárna v ulici Doubravecká.

Dalším zajímavým zjištěním bylo zjištění výskytu amfibolového azbestu aktinolitu ve 40 % zkoumaných vzorků, což potvrzuje podezření dosavadních

jednorázových měření, že jsou vlákna aktinolitu poměrně běžnou součástí plzeňského ovzduší. Jeho zdrojem byl na základě meteorologických dat identifikován lom v nedalekých Liticích.

7 Citovaná literatura

1. HAVLÍČEK, D.; PŘIBIL, R.; KRATOCHVÍL, B. Content of quartz and mullite in some selected powerplant fly ash in Czechoslovakia. *Atmospheric Environment*. **23**, 1989, p. 701-706.
2. HAVLÍČEK, D.; PŘIBIL, R.; ŠKOLOUD, O. The chemical and mineralogical composition of the water-soluble fraction of power-plant ash and its effect on the process of crystallization of water. *Atmospheric Environment*. **27**, 1993, p. 655-660.
3. HAVLÍČEK, D.; SEDLÁK, P. Chemical and mineralogical composition of ambient aerosol and radiative fluxes at different levels in NW Bohemia. *Anales Geophysicae*. Supplement II to Vol. 12, Part II, 1994.
4. HAVLÍČEK, D.; PŘIBIL, R.; DOBIÁŠOVÁ, L.; DUBOVSKÝ, O. Mineralogical composition of ambient aerosol in different levels. *Abstracts of the VI. European Powder Diffraction Conference*. 1995, p. 31.
5. HAVLÍČEK, D.; PŘIBIL, R.; DUBOVSKÝ, O.; DOBIÁŠOVÁ, L.; SEDLÁK, P. Chemical and mineralogical composition of solid fraction of ambient aerosol at different levels (Kopisty near Most, NW Bohemia). *Atmospheric Environment*. **34**, 2000, p. 3237-3244.
6. HAVLÍČEK, D.; PLOCEK, J.; KLÁN, M. Mineralogical composition of atmospheric dust in Pilsen studied by X-ray powder diffraction. *Abstracts 27th ECN*. 2012, p. 203.
7. KLÁN, M.; HAVLÍČEK, D.; PLOCEK, J. Azbest - vláknité minerální částice aktinolitu ve venkovním ovzduší na Plzeňsku. *Ochrana ovzduší*. **4**, 2013, p. 24-27.
8. HAVLÍČEK, D. Identifikace a stanovení azbestových minerálů v různých materiálech rentgenovou difrakcí. *Materials Structure*. **6**, 1999, p. 45-46.

9. HAVLÍČEK, D.; DOBIÁŠOVÁ, L.; PLOCEK, J. Mineralogické složení přirozeného aerosolu v různé výšce nad zemí v severních Čechách. *Chemické Listy*. **9**, 2000, p. 827-828.
10. HARTVICH, F.; HAVLÍČEK, D.; SLABINA, M. Multidisciplinary analysis of slope failure at the Obří Hrad site in the Šumava Mts. *Geomorphologia Slovaca et Bohemica*. **2**, 2007, p. 47-57.
11. JUNGWIRTH, P. Aerosols and the chemistry of the atmosphere. *Vesmír*. 2003, p. 193.
12. RAMANATHAN, V; CRUTZEN, P. J.; KIEHL, J. T.; ROSENFELD, D.. Aerosols, climate, and the hydrological cycle. *Science*. 294.5549, 2001, p. 2119-2124.
13. HINDS, W. C. *Aerosol Technology: Properties, Behavior, and Measurement of Airborne Particles, 2nd Edition*. Hoboken: John Wiley & Sons, 1999, p. 53.
14. BRUNEKREEF, B.; HOLGATE, S. T. Air pollution and health. *The lancet*. 2002, p. 1233-1242.
15. PETERS, A.; RÜCKERL, R.; CYRYS, J. Lessons Learned from Air Pollution Epidemiology. *Journal of Occupational and Environmental Medicine*. **53**, 2011, p. 8-13.
16. RISSLE, J; SWIETLICK, E.; BENGTSSON, A.; BOMAN, CH.; PAGELS, J.; SANDSTROM, T.; BLOMBERG, A.; LONDAHL, J. Experimental determination of deposition of diesel exhaust particles in the human respiratory tract. *Journal of Aerosol Science*. **48**, 2012, p. 18-33.
17. SPURNY, K.R. On the physics, chemistry and toxicology of ultrafine anthropogenic,. *Toxicology Letters*. **96**, 1998, p. 253-261.
18. STEFELS, J. et al. Environmental constraints on the production and removal of the climatically active gas dimethylsulphide (DMS) and implications for ecosystem modelling. *Biogeochemistry*. **83**, 2007, p. 245-275.

19. MAČALA, J.; SMRŽ, V. Ochrana ovzduší. *Enviromentální vzdělávání*. [Online] [Citace: 7. 23 2014.]. Dostupné z:
<http://www.hgf.vsb.cz/export/sites/hgf2/instituty-a-pracoviste/cs/546/studijni-materialy/EV-modul5.pdf>.
20. RAES, F.; VAN DINGENEN, R.; VIGNATI, E.; WILSON, J.; PUTAUD, J. P.; SEINFELD, J. H.,. Formation and cycling of aerosols in the global troposphere. *Atmospheric Enviroment*. 2000, **34**, p. 4215-4240.
21. ALLEMAN, J. E.; MOSSMAN, B. T. Asbestos revisited. *Scientific American*. 1997, p. 70-75.
22. CORN, M. Airborne concentrations of asbestos in non-occupational environments. *The Annals of Occupational Hygiene*. **38**, 1994, p. 495-502.
23. HARPER, M. Anniversary Review: Naturally occurring asbestos. *Journal of Environmental Monitoring*. **10**, 2008, p. 1394-1408.
24. AGENCY FOR TOXIC SUBSTANCES AND DISEASE REGISTRY, U.S. DEPARTMENT OF HEALTH AND HUMAN SERVICES. *Toxicological Profile for Asbestos*. Atlanta. 2001.
25. Annual Report of the Chief Inspector of Factories and Workshops. *H.M. Stationery Office*. 1898, p. 171-172.
26. KUŽEL, R.; RAFAJA, D. Powder diffractometry. *Materials Structure in Chemistry, Biology, Physics and Technology*. **9**, 2002, p. 6-8.
27. SEDMIDUBSKÝ, D. Úvod do principů strukturní chemie. [Online] 2008. [Citace: 18. 7 2014.]. Dostupné z:
<http://www.vscht.cz/ach/crystchem/Diffraction.pdf>.
28. HERTLEIN, F.; OEHR, A.; HOFFMANN, CH.; MICHAELSEN, C.; WIESMANN, J. State-of-art multilayer optics for laboratory x-ray sources. *Particle & Particle Systems Characterization*. **22**, 2006, p. 378-383.

29. Key Laboratory of Materials Modification by Laser, Ion and Electron Beams. [Online] [Citace: 18. 7 2014.]. Dostupné z: <http://mmlab.dlut.edu.cn/training/gid.pdf>.
30. *Wikipedia*. [Online]. [Citace: 19. 7 2014.]. Dostupné z: http://en.wikipedia.org/wiki/Energy-dispersive_X-ray_spectroscopy.
31. HAFNER, B. *EDS on the SEM: Primer discussing principles, capabilities and limitations of EDS with the SEM*. [Online]. [Citace: 19. 7 2014.]. Dostupné z: http://www.charfac.umn.edu/instruments/eds_on_sem_primer.pdf.
32. VERNON-PARRY, K.D. Scanning electron microscopy: an introduction. *III-Vs Review*. 13, 2000, **4**, p. 40-44.
33. ONDRUŠ, P. *ZDS Software pro analýzu RTG práškových difrakčních záznamů*. Praha, 1994.
34. PANalytical. *HighScore Plus 3.0*. Almelo, 2012.
35. OriginLab Corporation. *OriginPro 8.5*. Northampton, 2010.
36. Microsoft Corporation. *MS Office Professional Plus*. Santa Rosa, 2010.
37. International Centre for Diffraction Data. *PANalytical database version number: 2.0*. Newtown Square, 2004.
38. KLÁN, M. Air Quality and Energy. *Environment of the City of Pilsen*. 2012, p. 33-39.
39. PODHORNÁ, P. *Zpracování výsledků identifikace mineralogického složení atmosférického prachu v různých výškách nad zemí na stanicích Kopisty u Mostu, Dlouhá Louka a Milešovka*. Praha 2009. Bakalářská práce. Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie.
40. KLÁN, M. *Analýza atmosférického aerosolu PM₁₀ metodou rentgenové práškové difrakce*. Zatím nepublikovaná disertační práce.

41. ROUBAL, Z.; HLADÍK, M. Aktualizace Programu ke zlepšení kvality ovzduší města . Plzeň : ČHMÚ pobočka Plzeň, 2010.
42. *mapy.cz*. [Online]. [Citace: 19. 7 2014.]. Dostupné z: <http://www.mapy.cz>
43. INSTITUT BIOSTATISTIKY A ANALÝZ. *Epidemiologie zhobných nádorů v ČR*. [Online]. [Citace: 13. 7 2014.]. Dostupné z: <http://www.svod.cz/analyse.php?modul=trendy&diag=C33,C34&zobrazeni=graph&vypocet=r>.
44. INSTITUT BIOSTATISTIKY A ANALÝZ. *Epidemiologie zhoubných nádorů v ČR*. [Online]. [Citace: 13. 7 2014.]. Dostupné z: http://www.svod.cz/analyse.php?modul=regionprehled&diag=C33,C34&zobrazeni=map&incmor=inc&vypocet=c&pohl=&vek_od=1&vek_do=18&obdobi_od=1977&obdobi_do=2010&stadium=&t=&n=&m=&pt=&pn=&pm=&t=&n=&zije=&umrti=&lecba=.

8 Přílohy

8.1 Výstupy profilové analýzy programem ZDS

Vzorek z 22. 12. 2010 ze stanice Plzeň Střed

ZDS - System ver.5.17

12-26-2012 /11:22

=====
==

UNTITLED

UNTITLED

=====
P r o f i l e F i t t i n g

Sample: Stre2212

=====
=

Source: C:\ZDS\H\Stre2212.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
Start Angle: 5.013 ° 2θ
End Angle: 59.951 ° 2θ
Number of Points: 2114
Time per Step: 40.0 sec.
Wavelength: 1.54178 A Cu

=====
=

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
5.7655	15.32832	0.1306	0.1529	28.814	11.111	99.9627
6.3412	13.93779	0.2679	0.9783	45.763	100.000	99.9627
7.1246	12.40694	0.2639	0.8824	30.508	59.259	99.9627
8.4318	10.48618	0.1297	0.4782	20.339	22.222	99.9627
10.3282	8.56467	0.3446	0.4894	37.288	40.741	99.9807
19.9174	6.25688	0.2006	0.2241	33.898	14.815	99.9992
20.4598	4.34064	0.1112	0.1596	37.288	12.407	99.9665
21.5592	4.12170	0.1177	0.3116	69.492	48.148	99.9665
22.5228	3.94751	0.1193	0.1213	52.542	13.704	99.9665
23.6090	3.76828	0.1100	0.1366	30.137	14.286	99.9913
24.6253	3.61502	0.1213	0.1612	49.153	11.111	99.9719
25.3968	3.50694	0.2639	0.4577	38.983	40.741	99.9719
26.0683	3.41810	0.1047	0.1264	50.847	14.815	99.9719
28.3678	3.04115	0.2648	0.2468	27.397	35.714	99.9900
29.3419	3.04377	0.1711	0.1083	86.441	18.519	99.9747
31.6744	2.82476	0.1884	0.2309	100.000	51.852	99.9226

=====
=

Maximum Height: 0.59 cps Maximum Integral: 0.27 2θ.cps

=====
=

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
ConvergMode: Automatic ConvergParam= 2.00

=====
=

Vzorek z 22. 12. 2010 ze stanice Plzeň Skvrňany

ZDS - System ver.5.17

12-23-2012 /03:22

UNTITLED

UNTITLED

Profile Fitting

Sample: Skvr2212

Source: C:\ZDS\H\Skvr1212.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026
Start Angle: 5.013 ° 2θ
End Angle: 59.951 ° 2θ
Number of Points: 2114
Time per Step: 40.0 sec.
Wavelength: 1.54178 Å Cu

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
8.6726	10.19558	0.1115	0.1364	32.308	8.667	99.9128
10.3087	8.58076	0.2405	0.2930	38.462	23.333	99.9730
16.9702	5.22452	0.2311	0.3672	46.154	36.667	99.9777
20.5004	4.33214	0.3331	0.4684	100.000	100.00	99.9048
21.5134	4.13038	0.1294	0.1471	20.000	8.133	99.9238
22.0111	4.03810	0.1180	0.1224	30.769	9.873	99.9238
23.8334	3.89450	0.1069	0.2842	49.231	30.000	99.9238
25.8138	3.45122	0.3141	0.3333	18.462	13.333	99.9070
27.9028	3.19740	0.0947	0.1768	32.308	13.333	99.9532
28.6919	3.11124	0.1398	0.3561	33.846	26.667	99.9232
29.3656	3.04138	0.1159	0.2516	35.385	20.000	99.9132
29.9072	2.98752	0.4080	1.0655	43.077	100.000	99.9332

Maximum Height: 0.65 cps Maximum Integral: 0.30 2θ.cps

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
ConvergMode: Automatic ConvergParam= 2.00

Vzorek z 30. 12. 2010 ze stanice Plzeň Střed

ZDS - System ver.5.17

12-26-2012 /14:03

UNTITLED

UNTITLED

Profile Fitting

Sample: Stre3012

Source: C:\ZDS\H\Stre3012.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
 Start Angle: 5.013 ° 2θ
 End Angle: 59.951 ° 2θ
 Number of Points: 2114
 Time per Step: 40.0 sec.
 Wavelength: 1.54178 Å Cu

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
5.6972	15.51175	0.1710	0.2144	11.224	12.195	99.9991
13.1074	6.75421	0.1152	0.1337	12.245	7.317	99.9778
16.6665	5.31903	0.1668	0.3905	21.429	39.024	99.9292
16.9821	5.22089	0.1487	0.3023	17.857	26.829	99.9292
19.9540	4.43795	0.1113	0.1451	11.735	2.439	99.9911
20.2422	4.38680	0.2299	0.2640	70.408	87.805	99.9971
20.4909	4.33412	0.1888	0.2099	100.000	100.000	99.9971
21.0800	4.21431	0.1168	0.0857	11.735	4.878	99.9834
21.2756	4.17600	0.1255	0.1497	18.367	2.439	99.9834
22.0753	4.02651	0.1019	0.1511	12.755	4.878	99.9490
22.8208	3.89663	0.2263	0.3160	27.041	41.463	99.9490
26.2455	3.39543	0.4339	0.6455	14.796	43.902	99.9679
27.3554	3.26013	0.1134	0.1270	7.143	2.439	99.9628
28.4974	3.13203	0.3614	0.4955	31.122	73.171	99.9725
29.3103	3.04699	0.1665	0.2274	35.204	39.024	99.9725
29.8275	2.99532	0.2323	0.5589	18.367	48.780	99.9725
33.2560	2.65518	0.2701	0.3150	15.306	21.951	99.9384
35.5666	2.52405	0.3545	0.4010	8.163	14.634	99.9772
38.8914	2.31559	0.3843	0.3585	14.796	24.390	99.9935

Maximum Height: 1.96 cps Maximum Integral: 0.41 2θ.cps

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
 Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
 ConvergMode: Automatic ConvergParam= 2.00

Vzorek z 30. 12. 2010 ze stanice Plzeň Skvrňany

ZDS - System ver.5.17

12-24-2012 /20:27

UNTITLED

UNTITLED

Profile Fitting

Sample: Skvr3012

Source: C:\ZDS\H\Skvr3012.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
Start Angle: 5.013 ° 2θ
End Angle: 59.951 ° 2θ
Number of Points: 2114
Time per Step: 40.0 sec.
Wavelength: 1.54178 Å Cu

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
8.7001	10.95535	0.7029	0.6503	10.938	27.692	99.9795
9.4468	9.36162	0.2210	0.3770	10.156	15.385	99.9676
15.9677	5.55021	0.1268	0.1180	5.469	3.077	99.9129
16.9395	5.23392	0.1688	0.2398	16.797	15.385	99.9716
20.2297	4.38949	0.2157	0.2346	41.016	38.462	99.9975
20.4837	4.33563	0.2067	0.2528	100.000	100.000	99.9975
21.2244	4.18597	0.6566	0.5876	11.328	26.154	99.9301
22.8113	3.89822	0.1820	0.2035	24.219	20.000	99.9257
28.6164	3.11927	0.1452	0.2507	17.188	16.923	99.9012
29.3388	3.04409	0.1439	0.2058	41.406	33.846	99.9047
29.8342	2.99467	0.1192	0.1350	27.734	10.769	99.6890
33.7958	2.65214	0.5485	0.5533	6.641	13.846	99.9252

Maximum Height: 2.56 cps Maximum Integral: 0.65 2θ.cps

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
ConvergeMode: Automatic ConvergeParam= 2.00

Vzorek z 7. 1. 2011 ze stanice Plzeň Střed

ZDS - System ver.5.17

12-24-2012 /22:00

UNTITLED

UNTITLED

Profile Fitting

Sample: Stre0701

Source: C:\ZDS\H\Stre0701.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
Start Angle: 5.013 ° 2θ
End Angle: 59.951 ° 2θ
Number of Points: 2114
Time per Step: 40.0 sec.
Wavelength: 1.54178 Å Cu

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
6.5570	13.47956	0.1432	0.1700	32.877	16.000	99.9944
11.5183	7.68221	0.3902	0.3958	17.808	20.000	99.9268
16.6201	5.33377	0.1844	0.2323	28.767	20.000	99.9864
17.7443	4.99830	0.1164	0.1181	100.000	34.000	99.9473
18.1913	4.87648	0.1345	0.1580	42.466	18.000	99.9473
20.2219	4.39116	0.1943	0.3772	64.384	72.000	99.9309
20.5033	4.33153	0.1927	0.2572	90.411	68.000	99.9309
22.8543	3.89098	0.5223	0.4856	11.667	15.000	99.9544
23.6443	3.76274	0.1032	0.1108	7.447	3.191	99.9733
26.8611	3.31898	0.4451	0.5431	28.767	48.000	99.9596
28.5866	3.12246	0.2333	0.5614	23.288	40.000	99.9168
29.3801	3.03991	0.2617	0.3069	42.466	40.000	99.9168
30.9311	2.89093	0.4456	0.4814	70.000	33.000	99.9509
33.7236	2.65002	0.4140	0.3820	24.658	28.000	99.9780

Maximum Height: 0.73 cps Maximum Integral: 0.25 2θ.cps

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
ConvergMode: Automatic ConvergParam= 2.00

Vzorek z 7. 1. 2011 ze stanice Plzeň Skvrňany

ZDS - System ver.5.17

12-23-2012 /21:06

UNTITLED

UNTITLED

Profile Fitting

Sample: Skvr0701

Source: C:\ZDS\H\Skvr0701.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
Start Angle: 5.013 ° 2θ
End Angle: 59.951 ° 2θ
Number of Points: 2114
Time per Step: 40.0 sec.
Wavelength: 1.54178 Å Cu

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
5.6422	15.66302	0.2135	0.2342	0.700	9.524	99.9813
6.2819	14.06935	0.2584	0.5405	2.800	71.429	99.9813
8.1019	10.91238	0.4349	0.4612	4.600	100.000	99.9939
8.6675	10.20149	0.3841	0.4427	2.200	47.619	99.9939
12.3755	7.15199	0.3191	0.3337	1.900	28.571	99.9964
17.9221	4.94912	0.6365	0.4688	3.800	85.714	99.9898
18.9373	4.68604	0.1469	0.1846	2.500	23.810	99.9945
19.9020	4.46102	0.1719	0.1824	2.000	9.524	99.9583
20.4325	4.34637	0.2092	0.4088	2.800	57.143	99.9583
21.1719	4.19622	0.1603	0.3038	2.400	33.333	99.9750
21.6379	4.10691	0.1483	0.2843	2.200	28.571	99.9750
22.2420	3.99671	0.2093	0.4389	4.600	95.238	99.9907
22.9152	3.88078	0.1096	0.1438	1.400	9.524	99.9807
24.9915	3.76161	0.1671	0.1716	1.200	4.762	99.9846
24.2227	3.67419	0.2095	0.2763	2.000	23.810	99.9727
27.5115	3.24198	0.1440	0.1653	2.900	23.810	99.9837
29.4709	3.44112	0.3245	0.1377	1.700	9.524	99.9883

Maximum Height: 10.00 cps Maximum Integral: 0.21 2θ.cps

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
ConvergMode: Automatic ConvergParam= 2.00

Vzorek z 31. 1. 2011 ze stanice Plzeň Střed

ZDS - System ver.5.17

12-26-2012 /15:44

UNTITLED
UNTITLED

Profile Fitting

Sample: Stre3101

Source: C:\ZDS\H\Stre3101.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
Start Angle: 5.013 ° 2θ
End Angle: 59.951 ° 2θ
Number of Points: 2114
Time per Step: 40.0 sec.
Wavelength: 1.54178 Å Cu

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
5.6728	15.57858	0.2971	0.7578	15.510	58.000	99.9808
6.1714	14.32088	0.2485	0.3137	19.184	30.000	99.9808
6.9935	12.63924	0.1312	0.5270	8.980	22.000	99.9808
8.7665	10.08651	0.5633	1.0925	4.898	28.000	99.9170
10.2587	8.62247	0.2433	0.3670	10.612	20.000	99.9436
12.4135	7.13020	0.2978	0.4271	18.776	40.000	99.9293
15.3027	5.78986	1.0376	0.5213	10.037	29.787	99.9339
16.9748	5.22313	0.2115	0.2702	28.625	44.681	99.9745
17.7038	5.00964	0.2622	0.4123	7.807	19.149	99.9189
20.2240	4.39072	0.2331	0.2525	55.918	70.000	99.9741
20.4690	4.33870	0.1843	0.2056	100.000	100.000	99.9741
20.9581	4.23854	0.5152	0.6789	7.347	24.000	99.9741
22.7943	3.90109	0.2366	0.3966	27.347	54.000	99.9218
23.6246	3.76584	0.7443	1.1861	11.020	64.000	99.9218
24.4215	3.64473	0.1160	0.2065	7.755	8.000	99.9218
26.7532	3.34408	0.3356	0.6002	2.857	17.000	99.9170
28.4660	3.13541	0.2707	0.3841	25.714	48.000	99.9115
29.2700	3.05109	0.1717	0.3763	37.551	70.000	99.9115
29.8524	2.99288	0.2156	0.3817	17.143	32.000	99.9115
33.3592	2.65493	0.9933	0.6626	13.061	42.000	99.9134

Maximum Height: 2.45 cps Maximum Integral: 0.50 2θ.cps

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
ConvergMode: Automatic ConvergParam= 2.00

Vzorek z 31. 1. 2011 ze stanice Plzeň Skvrňany

ZDS - System ver.5.17

12-24-2012 /20:49

UNTITLED

UNTITLED

Profile Fitting

Sample: Skvr3101

Source: C:\ZDS\H\Skvr3101.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
 Start Angle: 5.013 ° 2θ
 End Angle: 59.951 ° 2θ
 Number of Points: 2114
 Time per Step: 40.0 sec.
 Wavelength: 1.54178 Å Cu

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
6.2312	14.18354	0.1405	0.3160	14.163	7.692	99.9729
6.5757	13.44123	0.1652	0.1835	4.139	1.339	99.9924
8.8180	10.02773	0.1327	0.4211	11.159	8.462	99.9404
9.6458	9.16898	0.1305	0.1745	6.867	2.308	99.9404
12.1924	7.25901	0.2356	0.3974	6.009	4.615	99.9601
16.9466	5.23175	0.8790	0.5722	42.060	43.077	99.9570
20.2127	4.39314	0.2376	0.2861	33.551	19.643	99.9898
20.4651	4.33953	0.1699	0.2023	54.248	100.000	99.9898
21.4058	4.15090	0.1058	0.0292	24.034	1.538	99.9547
22.0899	4.02387	0.1519	0.1649	15.021	1.538	99.9547
22.8188	3.89696	0.1333	0.2660	36.910	17.692	99.9547
23.6487	3.76205	0.1498	0.1575	10.300	0.769	99.9547
25.0688	3.55207	0.1219	0.1605	7.407	2.232	99.9552
25.6385	3.47442	0.6468	0.4406	10.893	9.821	99.9931
26.5635	3.35549	0.1663	0.1948	15.880	7.077	99.9569
27.3098	3.26547	0.1421	0.2028	9.442	3.077	99.9569
28.4809	3.13380	0.3452	0.3724	15.468	12.054	99.9302
29.2824	3.04982	0.1948	0.2151	25.708	11.161	99.9388
29.8343	2.99466	0.1859	0.3005	15.904	9.821	99.9388
33.8071	2.65128	0.1855	0.4871	10.300	9.231	99.9047
34.3628	2.60967	0.1062	0.1834	9.442	3.077	99.9047

Maximum Height: 2.33 cps Maximum Integral: 1.30 2θ.cps

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
 Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
 ConvergMode: Automatic ConvergParam= 2.00

Vzorek z 10. 2. 2011 ze stanice Plzeň Střed

ZDS - System ver.5.17

12-26-2012 /02:47

UNTITLED

UNTITLED

Profile Fitting

Sample: Stre1002

Source: C:\ZDS\H\Stre1002.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
Start Angle: 5.013 ° 2θ
End Angle: 59.951 ° 2θ
Number of Points: 2114
Time per Step: 40.0 sec.
Wavelength: 1.54178 Å Cu

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
6.1596	14.34834	0.2797	0.3849	18.713	34.286	99.9915
9.6421	9.17245	0.841	0.7047	28.655	100.000	99.9621
12.4635	7.10171	0.2790	0.3802	23.392	42.857	99.9919
20.3596	4.36177	0.1241	0.1415	10.638	5.000	99.9497
20.6468	4.30174	0.7894	0.6624	65.957	33.000	99.9497
22.0795	4.02575	0.1547	0.1672	42.105	19.286	99.9103
22.8286	3.89530	0.2086	0.2485	59.574	12.000	99.9877
23.4871	3.78758	0.9686	0.9431	10.526	48.571	99.9701
23.9705	3.71228	0.9179	0.8212	11.111	42.857	99.9701
25.1512	3.54062	0.1084	0.0658	28.070	8.571	99.9310
25.8969	3.44033	0.1297	0.0620	21.637	5.714	99.9310
26.7115	3.33724	0.0934	0.0492	25.146	5.714	99.9310
29.3881	3.03910	0.4455	0.5413	29.825	80.000	99.9799
34.3968	2.60716	1.0828	0.6872	25.731	85.714	99.9355

Maximum Height: 1.71 cps Maximum Integral: 0.35 2θ.cps

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
ConvergMode: Automatic ConvergParam= 2.00

Vzorek z 10. 2. 2011 ze stanice Plzeň Skvrňany

ZDS - System ver.5.17

12-23-2012 /23:04

UNTITLED

UNTITLED

Profile Fitting

Sample: Skvr0102

Source: C:\ZDS\H\Skvr0102.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
 Start Angle: 5.013 ° 2θ
 End Angle: 59.951 ° 2θ
 Number of Points: 2114
 Time per Step: 40.0 sec.
 Wavelength: 1.54178 Å Cu

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
6.2506	14.13955	0.4085	0.4436	14.403	84.211	99.9849
6.9578	12.70400	0.4792	0.5947	11.523	89.474	99.9849
8.8887	9.94818	0.2313	0.2706	10.288	36.842	99.9964
9.8696	8.96156	0.2036	0.2875	8.230	31.579	99.9509
10.4561	8.46015	0.1178	0.1412	8.642	15.789	99.9509
12.3964	7.13997	0.4904	0.4643	16.049	94.737	99.9976
13.8755	6.38203	0.4637	0.4694	8.230	47.368	99.9718
15.3078	5.78796	0.2422	0.2570	6.584	21.053	99.9925
18.1493	4.88767	0.1028	0.1374	6.173	10.526	99.9854
18.6896	4.74759	0.0848	0.0908	41.667	9.091	99.9864
18.7589	4.73020	0.1296	0.1396	22.917	9.091	99.9864
19.6568	4.51611	0.1033	0.1234	64.583	18.182	99.9877
19.9667	4.44670	0.1040	0.1276	77.083	18.182	99.9877
21.3725	4.15730	0.1131	0.1941	17.284	42.105	99.9397
23.8810	3.72598	0.1595	0.1802	9.053	21.053	99.9837
24.2799	3.66566	0.5314	0.5289	3.704	26.316	99.9837
25.0604	3.55324	0.3470	0.3871	20.165	100.000	99.9977
26.6243	3.34796	0.1660	0.1808	34.979	78.947	99.9878
29.4397	3.03389	0.1474	0.2512	12.757	42.105	99.9822
30.8142	2.90163	0.8899	0.4097	9.053	47.368	99.9791
35.1589	2.55943	0.1955	0.2071	5.761	15.789	99.9871

Maximum Height: 2.43 cps Maximum Integral: 0.19 2θ.cps

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
 Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
 ConvergMode: Automatic ConvergParam= 2.00

Vzorek z 28. 2. 2011 ze stanice Plzeň Střed

ZDS - System ver.5.17

12-26-2012 /12:02

==

UNTITLED

UNTITLED

=====
P r o f i l e F i t t i n g

Sample: Stre2802

=

Source: C:\ZDS\H\Stre2802.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
Start Angle: 5.013 ° 2θ
End Angle: 59.951 ° 2θ
Number of Points: 2114
Time per Step: 40.0 sec.
Wavelength: 1.54178 Å Cu

=

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
6.2187	14.21214	0.4065	0.5165	100.000	100.000	99.9922
8.8638	9.97605	0.1862	0.3009	80.000	46.939	99.9631
10.5089	8.41774	0.3017	0.4630	32.632	28.571	99.9687
12.5152	7.07247	0.1064	0.1469	40.000	12.245	99.9862
18.9124	4.69215	0.1129	0.1539	15.789	4.082	99.9816
20.2524	4.38462	0.2000	0.2946	60.000	34.694	99.9919
20.4955	4.33315	0.2111	0.2725	89.474	46.939	99.9919
22.1983	4.00448	0.0271	0.0307	53.684	4.082	99.9753
22.7995	3.90022	0.1469	0.1578	53.684	6.122	99.9753
24.8849	3.57790	0.0554	0.0753	33.684	4.082	99.9041
26.6015	3.35079	0.1214	0.1523	23.158	6.122	99.9636
28.5155	3.13008	0.0956	0.1274	24.211	6.122	99.9380
29.3715	3.04078	0.1643	0.5106	40.000	40.816	99.9380

=

Maximum Height: 0.95 cps Maximum Integral: 0.49 2θ.cps

=

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
ConvergMode: Automatic ConvergParam= 2.00

=

Vzorek z 28. 2. 2011 ze stanice Plzeň Skvrňany

ZDS - System ver.5.17

12-24-2012 /19:49

UNTITLED
UNTITLED

Profile Fitting

Sample: Skvr2802

Source: C:\ZDS\H\Skvr2802.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
Start Angle: 5.013 ° 2θ
End Angle: 59.951 ° 2θ
Number of Points: 2114
Time per Step: 40.0 sec.
Wavelength: 1.54178 A Cu

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
6.1844	14.29094	0.3911	0.4990	33.871	5.714	99.9868
8.8831	9.95441	0.1429	0.1926	17.857	5.714	99.9707
10.7289	8.24561	0.1327	0.1525	19.643	4.286	99.9850
12.3531	7.16489	0.1871	0.2018	15.179	4.286	99.9681
16.9693	5.22479	0.4751	0.6770	92.857	89.351	99.9349
17.9521	4.94091	0.1873	0.2009	10.714	4.286	99.9464
18.5400	4.78555	0.1052	0.4087	21.429	14.286	99.9464
20.2829	4.37809	0.4039	0.6204	91.071	79.214	99.9494
20.4950	4.33325	0.1948	0.2423	100.000	100.000	99.9494
20.8929	4.25162	0.1848	0.2841	19.643	8.571	99.9494
21.8886	4.06043	0.1082	0.1196	37.500	7.143	99.9339
22.8911	3.88482	0.1565	0.2339	33.929	12.857	99.9303
23.5024	3.78514	0.8855	0.4860	39.286	1.429	99.9303
26.6507	3.34472	0.3686	0.4235	24.107	17.143	99.9771
28.6073	3.12025	0.2140	0.3826	62.500	7.143	99.9207
29.3497	3.04299	0.2158	0.2682	54.464	11.429	99.9109
32.9788	2.77742	0.0958	0.2040	14.286	4.286	99.9230

Maximum Height: 1.12 cps Maximum Integral: 0.70 2θ.cps

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
ConvergMode: Automatic ConvergParam= 2.00

Vzorek z 9. 3. 2011 ze stanice Plzeň Střed

ZDS - System ver.5.17

12-24-2012 /22:25

UNTITLED
UNTITLED

Profile Fitting

Sample: Stre0903

Source: C:\ZDS\H\Stre0903.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
Start Angle: 5.013 ° 2θ
End Angle: 59.951 ° 2θ
Number of Points: 2114
Time per Step: 40.0 sec.
Wavelength: 1.54178 A Cu

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
6.1920	14.27335	0.2216	0.2571	15.455	25.000	99.9931
7.6056	11.62331	0.2487	0.2950	25.455	50.000	99.9825
9.1587	9.65552	0.1869	0.1388	10.000	6.250	99.9219
9.5645	9.24667	1.0777	0.6088	15.455	62.500	99.9219
10.3267	8.56586	0.3626	0.3148	16.364	37.500	99.9832
12.4992	7.08146	0.1293	0.2224	50.909	81.250	99.9279
18.0571	4.91243	0.3726	0.4103	9.091	25.000	99.9605
19.3522	4.58650	0.3485	0.4673	15.455	50.000	99.9807
20.4144	4.35019	0.1088	0.1672	30.909	37.500	99.9485
20.7858	4.25305	0.1481	0.1597	30.000	12.500	99.9485
22.8218	3.89646	0.1213	0.2701	16.364	31.250	99.9848
23.0412	3.85986	0.2646	0.2911	19.091	37.500	99.9848
23.9294	3.71856	0.2953	0.3183	20.000	43.750	99.9939
26.1428	3.40853	0.9885	0.5784	23.636	93.750	99.9845
26.5688	3.35483	0.1308	0.1446	100.000	100.000	99.9845
32.7535	2.74226	0.1678	0.2775	23.636	43.750	99.9766
42.5484	2.12465	0.1760	0.3411	19.091	43.750	99.9321

Maximum Height: 1.10 cps Maximum Integral: 0.16 2θ.cps

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
ConvergMode: Automatic ConvergParam= 2.00

Vzorek z 9. 3. 2011 ze stanice Plzeň Skvrňany

ZDS - System ver.5.17

12-23-2012 /21:42

UNTITLED
UNTITLED

Profile Fitting

Sample: Skvr0903

Source: C:\ZDS\H\Skvr0903.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
Start Angle: 5.013 ° 2θ
End Angle: 59.951 ° 2θ
Number of Points: 2114
Time per Step: 40.0 sec.
Wavelength: 1.54178 Å Cu

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
5.3611	16.48337	0.6476	0.4226	39.744	16.531	99.9823
9.0076	9.81705	0.1329	0.1581	25.641	6.122	99.9992
11.6546	7.59269	0.1231	0.1498	42.308	10.204	99.9742
12.6287	7.00916	0.9134	0.7784	37.179	44.898	99.9795
17.3558	5.10932	0.1063	0.1304	45.946	5.667	99.9835
17.6783	5.01683	0.2357	0.3236	67.568	12.667	99.9835
18.5986	4.77060	0.1399	0.0225	45.934	14.082	99.9375
20.2078	4.39419	0.1076	0.1243	24.359	4.082	99.9804
21.3669	4.15836	0.4280	0.4927	29.487	22.449	99.9582
21.9924	4.04149	0.1844	0.1931	14.103	4.082	99.9973
25.7220	3.46332	0.0216	0.0257	21.795	0.000	99.9145
26.5440	3.35792	0.2928	0.6852	48.718	53.061	99.9145
29.5061	3.02721	0.5505	0.6878	92.308	100.000	99.9741
30.8923	2.89446	0.2000	0.2177	28.205	10.204	99.9945
42.6928	2.11780	0.1317	0.2225	20.513	8.163	99.9054

Maximum Height: 0.78 cps Maximum Integral: 0.49 2θ.cps

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
ConvergMode: Automatic ConvergParam= 2.00

Vzorek z 25. 3. 2011 ze stanice Plzeň Střed

ZDS - System ver.5.17

12-26-2012 /11:47

UNTITLED
UNTITLED

Profile Fitting

Sample: Stre2503

Source: C:\ZDS\H\Stre2503.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
Start Angle: 5.013 ° 2θ
End Angle: 59.951 ° 2θ
Number of Points: 2114
Time per Step: 40.0 sec.
Wavelength: 1.54178 Å Cu

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
6.1988	14.25763	0.1969	0.2379	44.444	17.778	99.9952
8.6212	10.25617	0.1071	0.1179	18.868	16.696	99.9950
10.4629	8.45466	0.6156	0.3488	27.358	43.478	99.8999
12.1391	7.29074	0.3216	0.5463	50.000	44.444	99.9788
12.4953	7.08366	0.1909	0.2239	59.722	22.222	99.8788
17.4195	4.74584	0.2075	0.7263	59.722	38.889	99.9717
20.5088	4.33038	0.1413	0.3459	13.889	12.391	99.9373
20.8795	4.25433	0.3826	0.6083	43.056	42.222	99.9373
22.2180	4.00097	0.0983	0.1292	47.222	8.889	99.9245
22.8478	3.89208	0.1613	0.2758	28.333	6.667	99.9245
26.6096	3.34978	0.1553	0.2537	56.944	22.222	99.9630
29.3848	3.03944	0.0964	0.1055	29.245	13.043	99.9540
33.2562	2.65511	0.2701	0.3150	15.306	21.951	99.9384
37.2145	2.41598	0.2914	0.4443	36.111	24.444	99.9312

Maximum Height: 0.72 cps Maximum Integral: 0.45 2θ.cps

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
ConvergMode: Automatic ConvergParam= 2.00

Vzorek z 25. 3. 2011 ze stanice Plzeň Skvrňany

ZDS - System ver.5.17

12-24-2012 /18:22

UNTITLED

UNTITLED

Profile Fitting

Sample: Skvr2503

Source: C:\ZDS\H\Skvr2503.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
 Start Angle: 5.013 ° 2θ
 End Angle: 59.951 ° 2θ
 Number of Points: 2114
 Time per Step: 40.0 sec.
 Wavelength: 1.54178 Å Cu

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
6.1545	14.36029	0.1959	0.2349	62.963	20.513	99.9689
8.5827	10.30210	0.2586	0.6379	96.296	84.615	99.9897
10.4252	8.48515	0.1488	0.1636	50.000	10.256	99.9931
11.6512	7.59493	0.1519	0.2208	48.148	15.385	99.9214
12.3399	7.17252	0.1647	0.3019	37.037	15.385	99.9214
13.5336	6.54249	0.1077	0.2179	38.889	12.821	99.9481
17.7246	5.00381	0.9887	0.7830	40.741	43.590	99.9800
19.4242	4.56967	0.8320	0.7843	38.889	41.026	99.9164
19.9876	4.44211	0.1297	0.1834	20.370	5.128	99.9164
20.7703	4.27644	0.1780	0.5910	11.667	9.652	99.9538
21.5924	4.11545	0.1658	0.3367	23.077	21.484	99.9796
23.1377	3.84396	0.1340	0.2423	35.185	12.821	99.9757
25.2098	3.53252	0.1226	0.1922	46.296	12.821	99.9232
25.7518	3.45938	0.0597	0.1155	29.630	5.128	99.9232
26.6317	3.34705	0.2588	0.7106	100.000	100.000	99.9232
29.4302	3.03485	0.1705	0.2618	51.852	17.949	99.9044
29.7901	2.99900	0.1442	0.2643	34.615	27.778	99.9649
32.1239	2.78625	0.1451	0.1636	25.926	5.128	99.9895
33.2997	2.68851	0.1801	0.2142	12.809	11.693	99.9287

Maximum Height: 0.54 cps Maximum Integral: 0.39 2θ.cps

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
 Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
 ConvergMode: Automatic ConvergParam= 2.00

Vzorek z 4. 4. 2011 ze stanice Plzeň Střed

ZDS - System ver.5.17
2012/21:53

12-24-

=====
UNTITLED
UNTITLED
=====

Profile Fitting

Sample: str0404

=====
Source: C:\ZDS\H\Stre0404.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
Start Angle: 5.013 ° 2θ
End Angle: 59.951 ° 2θ
Number of Points: 2114
Time per Step: 40.0 sec.
Wavelength: 1.54178 A Cu

=====
Profile Fitting Data Table

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
5.4621	16.17897	0.3852	0.3457	50.685	59.091	99.9917
6.2535	14.13304	0.1126	0.1450	24.658	9.091	99.9855
7.9792	11.07989	0.1314	0.1881	9.524	8.696	99.9665
17.5335	5.05793	0.3974	0.3989	26.027	36.364	99.9867
18.7979	4.72047	0.6334	1.1891	16.190	86.957	99.9401
20.3647	4.36069	0.3173	0.3469	23.288	27.273	99.9747
20.7439	4.25863	0.2300	0.2468	35.616	27.273	99.9880
21.3271	4.16603	0.1119	0.1239	58.904	22.727	99.9918
24.9332	3.57108	0.5662	0.4539	42.466	63.636	99.9314
25.1469	3.54121	0.1876	0.2994	47.945	50.000	99.9314
26.5533	3.35676	0.1638	0.3037	100.000	100.000	99.9682
29.3098	3.04704	0.1264	0.3143	28.571	43.478	99.9204

=====
Maximum Height: 0.73 cps Maximum Integral: 0.22 2θ.cps
=====

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
ConvergMode: Automatic ConvergParam= 2.00

=====

Vzorek z 4. 4. 2011 ze stanice Plzeň Skvrňany

ZDS - System ver.5.17

12-23-2012 /20:38

UNTITLED
UNTITLED

Profile Fitting

Sample: Skvr0404

Source: C:\ZDS\H\Skvr0404.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
Start Angle: 5.013 ° 2θ
End Angle: 59.951 ° 2θ
Number of Points: 2114
Time per Step: 40.0 sec.
Wavelength: 1.54178 Å Cu

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
6.3792	13.85480	0.1493	0.2051	33.333	14.706	99.9722
8.6948	10.16961	0.4640	0.5658	53.030	58.824	99.9872
14.2762	6.20379	0.3124	0.3403	25.758	17.647	99.9953
17.8203	4.97716	0.2449	0.3465	40.909	26.471	99.9509
18.3192	4.84273	0.1567	0.2867	48.485	26.471	99.9509
19.2795	4.60362	0.1382	0.1888	50.000	17.647	99.9911
21.1802	4.19459	0.3228	0.5175	100.000	100.000	99.9729
22.7720	3.90487	0.1161	0.2657	39.394	20.588	99.9904
23.1832	3.83652	0.2163	0.2769	33.333	17.647	99.9904
23.8172	3.73582	0.6823	0.5425	48.485	50.000	99.9945
24.7248	3.60071	0.2556	0.3865	45.455	35.294	99.9818
27.2809	3.26886	0.9740	0.7429	69.697	100.000	99.9643
28.6967	3.11073	0.1518	0.1782	30.265	17.542	99.9803

Maximum Height: 0.66 cps Maximum Integral: 0.34 2θ.cps

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
ConvergMode: Automatic ConvergParam= 2.00

Vzorek z 4. 4. 2011 ze stanice Plzeň Chlum

ZDS - System ver.5.17

12-22-2012 /07:43

UNTITLED

UNTITLED

Profile Fitting

Sample: chlum44

Source: C:\ZDS\H\chlum44.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
Start Angle: 5.013 ° 2θ
End Angle: 59.951 ° 2θ
Number of Points: 2114
Time per Step: 40.0 sec.
Wavelength: 1.54178 Å Cu

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
6.7169	13.15899	0.1968	0.2913	6.855	55.556	99.9802
8.3587	10.57767	0.1396	0.1876	5.645	27.778	99.9860
8.5781	10.30760	0.1727	0.1940	5.847	33.333	99.9860
14.2237	6.22655	0.1155	0.0534	4.234	5.556	99.9111
14.7514	6.00497	0.1336	0.2360	3.024	16.667	99.9111
16.4705	5.38189	0.0963	0.1233	4.032	16.667	99.9488
24.0469	3.70066	0.1030	0.1158	4.637	11.111	99.9792
26.5763	3.35391	0.1011	0.1246	7.056	22.222	99.9809
29.6149	3.01634	0.1565	1.0853	2.621	83.333	99.9521
29.8646	2.99169	0.1449	0.5097	3.024	38.889	99.9521
35.5090	2.52801	0.1210	0.2347	3.226	22.222	99.9742
36.0872	2.48883	0.4129	0.5591	4.234	66.667	99.9742
37.0401	2.42695	0.1466	0.2672	3.226	22.222	99.9701

Maximum Height: 4.96 cps Maximum Integral: 0.18 2θ.cps

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
ConvergMode: Automatic ConvergParam= 2.00

Vzorek z 21. 4. 2011 ze stanice Plzeň Střed

ZDS - System ver.5.17

12-26-2012 /03:07

UNTITLED
UNTITLED

Profile Fitting

Sample: Stre2104

Source: C:\ZDS\H\Stre2104.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
Start Angle: 5.013 ° 2θ
End Angle: 59.951 ° 2θ
Number of Points: 2114
Time per Step: 40.0 sec.
Wavelength: 1.54178 A Cu

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
5.5358	15.96380	0.4939	0.5581	21.320	45.098	99.9950
6.0790	14.53843	0.4409	0.4900	17.259	31.373	99.9950
8.8639	9.97593	0.1126	0.0822	94.872	15.789	99.9685
10.3084	8.58103	0.5813	0.2829	56.410	31.579	99.9337
12.4610	7.10309	0.1573	0.2706	14.721	15.686	99.9571
17.6621	4.25951	0.1873	0.2009	10.714	4.286	99.9464
20.1915	4.41279	0.1769	0.3604	41.026	21.579	99.9207
20.4530	4.34207	0.2297	0.4180	19.797	31.373	99.9046
20.7345	4.26342	0.1198	0.1244	71.574	5.882	99.9132
24.6204	3.65965	0.1340	0.1619	12.690	7.843	99.9725
25.7882	3.45458	0.0875	0.1413	8.122	3.922	99.9144
26.5960	3.35147	0.1955	0.2646	19.289	19.608	99.9144
29.4144	3.03644	0.4004	0.3342	47.727	100.000	99.9682
31.3233	2.85355	0.1965	0.2981	15.469	18.471	99.9997
35.4311	2.53354	0.3545	0.4010	8.163	14.634	99.9772

Maximum Height: 1.97 cps Maximum Integral: 0.51 2θ.cps

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
ConvergMode: Automatic ConvergParam= 2.00

Vzorek z 21. 4. 2011 ze stanice Plzeň Skvrňany

ZDS - System ver.5.17

12-23-2012 /23:28

UNTITLED

UNTITLED

Profile Fitting

Sample: Skvr2104

Source: C:\ZDS\H\Skvr2104.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
Start Angle: 5.013 ° 2θ
End Angle: 59.951 ° 2θ
Number of Points: 2114
Time per Step: 40.0 sec.
Wavelength: 1.54178 Å Cu

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
8.8338	10.00986	0.9313	0.7185	25.333	29.167	99.9809
12.4071	7.13385	0.3691	0.5005	100.000	79.167	99.9661
16.5691	5.35010	0.1287	0.1391	32.000	12.083	99.9723
17.7554	4.99162	0.1648	0.4663	15.333	13.333	99.9723
18.5193	4.79086	0.1212	0.1294	35.294	8.333	99.9868
20.5005	4.33210	0.1877	0.3313	85.333	43.750	99.9538
20.7971	4.27100	0.0981	0.1090	82.353	20.833	99.9965
21.6479	4.10503	0.1004	0.1084	56.863	12.500	99.9726
22.0175	4.03695	0.3800	0.4742	53.853	42.275	99.9726
22.5933	3.93535	0.3767	0.3989	32.000	20.833	99.9715
23.0995	3.85024	0.6641	0.5868	37.333	35.417	99.9715
23.9333	3.71795	0.1139	0.1283	30.667	6.250	99.9934
25.0659	3.55247	0.6560	0.6015	52.000	50.000	99.9324
26.5664	3.35513	0.3179	0.7522	85.333	100.000	99.9164
27.1025	3.28998	0.1000	0.1099	54.902	12.500	99.9806
27.5424	3.23842	0.1498	0.2613	22.667	15.083	99.8964
28.4789	3.13402	0.1187	0.1278	53.333	10.627	99.8965
29.3134	3.04667	0.1061	0.1172	53.333	10.417	99.8965
41.7665	2.16260	0.3325	0.3903	29.333	16.667	99.9073

Maximum Height: 0.75 cps Maximum Integral: 0.48 2θ.cps

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
ConvergMode: Automatic ConvergParam= 2.00

Vzorek z 21. 4. 2011 ze stanice Plzeň Chlum

ZDS - System ver.5.17

12-23-2012 /02:49

UNTITLED
UNTITLED

Profile Fitting

Sample: Chlu2104

Source: C:\ZDS\H\Chlu2104.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
Start Angle: 5.013 ° 2θ
End Angle: 59.951 ° 2θ
Number of Points: 2114
Time per Step: 40.0 sec.
Wavelength: 1.54178 A Cu

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
6.3095	14.00782	0.1451	0.5101	1.302	33.333	99.9433
6.8358	12.93050	0.1185	0.1291	0.947	6.061	99.9433
8.8578	9.98284	0.1567	0.2523	3.491	45.455	99.9281
10.4583	8.45835	0.4079	0.5160	3.669	96.970	99.9893
12.2684	7.21417	0.1734	0.1882	2.071	9.091	99.9639
12.5164	7.07176	0.1055	0.1362	2.663	18.182	99.9639
16.6812	5.31439	0.1410	0.2398	1.420	18.182	99.9537
18.2816	4.85261	0.1070	0.1533	1.302	9.091	99.9857
20.4312	4.34665	0.3632	0.4630	4.260	100.000	99.9574
20.8620	4.25826	0.1197	0.2106	3.533	39.394	99.9574
21.8728	4.06332	0.1294	0.1412	1.598	3.030	99.9459
22.7836	3.90291	0.1764	0.5522	2.012	57.576	99.9459
25.2653	3.51601	0.1471	0.1569	1.834	15.152	99.9915
26.6161	3.34898	0.1309	0.1408	2.959	21.212	99.9638
28.4147	3.14095	0.1961	0.5290	2.604	69.697	99.9601
29.2877	3.04929	0.3047	0.4013	2.604	51.515	99.9601
33.1569	2.70102	0.1375	0.1536	0.888	6.061	99.9251
35.5481	2.52532	0.8310	0.4680	1.657	39.394	99.9438

Maximum Height: 16.90 cps Maximum Integral: 0.33 2θ.cps

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
ConvergMode: Automatic ConvergParam= 2.00

Vzorek z 1. 5. 2011 ze stanice Plzeň Střed

ZDS - System ver.5.17

12-24-2012 /21:21

==

UNTITLED

UNTITLED

Profile Fitting

Sample: Stre0105

=

Source: C:\ZDS\H\Stre0105.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
Start Angle: 5.013 ° 2θ
End Angle: 59.951 ° 2θ
Number of Points: 2114
Time per Step: 40.0 sec.
Wavelength: 1.54178 Å Cu

=

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
7.5561	11.69941	0.3945	0.4175	28.846	35.294	99.9895
17.0499	5.20029	0.1211	0.1623	51.923	23.529	99.9429
18.1368	4.89103	0.1025	0.1350	36.538	17.647	99.9897
20.2107	4.39357	0.2307	0.3660	36.538	41.176	99.9313
20.4831	4.33575	0.1369	0.3030	100.000	100.000	99.9313
22.2430	3.99653	0.1055	0.1373	46.154	17.647	99.9163
22.8158	3.89746	0.1287	0.1515	53.846	11.765	99.9163
24.2758	3.66628	0.2649	0.3661	59.615	64.706	99.9571
25.4655	3.49762	0.2478	0.4913	32.692	52.941	99.9381
26.3131	3.38685	0.1114	0.1218	29.412	7.407	99.9551
26.5968	3.35137	0.1223	0.2055	41.176	14.815	99.9551
29.3859	3.03932	0.1194	0.1482	70.588	18.519	99.9609
29.6100	3.01395	0.1135	0.1509	32.849	11.765	99.9336

=

Maximum Height: 0.52 cps Maximum Integral: 0.17 2θ.cps

=

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
ConvergnMode: Automatic ConvergnParam= 2.00

=

Vzorek z 1. 5. 2011 ze stanice Plzeň Skvrňany

ZDS - System ver.5.17

12-23-2012 /20:04

UNTITLED

UNTITLED

Profile Fitting

Sample: Skvr0105

Source: C:\ZDS\H\Skvr0105.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
Start Angle: 5.013 ° 2θ
End Angle: 59.951 ° 2θ
Number of Points: 2114
Time per Step: 40.0 sec.
Wavelength: 1.54178 Å Cu

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
12.2988	7.19641	0.4096	0.4668	38.298	36.364	99.9694
17.8340	4.97336	0.3112	0.4595	42.553	40.909	99.9798
20.4170	4.34964	0.1020	0.1700	61.702	22.727	99.9642
22.7528	3.90811	0.1807	0.2328	40.426	22.727	99.9837
25.0658	3.54992	0.4079	0.5187	17.021	45.455	99.9535
25.8480	3.44673	0.4259	0.6507	21.277	45.455	99.9535
27.0272	3.29896	0.1777	0.0923	65.957	13.636	99.9726
27.3742	3.25793	0.1075	0.1333	59.574	18.182	99.9726
29.4739	3.03045	0.3161	0.4673	100.000	100.000	99.9215
35.8120	2.50731	0.1101	0.1415	78.723	13.636	99.9146

Maximum Height: 0.47 cps Maximum Integral: 0.22 2θ.cps

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
ConvergeMode: Automatic ConvergeParam= 2.00

Vzorek z 1. 5. 2011 ze stanice Plzeň Chlum

ZDS - System ver.5.17

12-23-2012 /02:08

==

UNTITLED
UNTITLED

=====
P r o f i l e F i t t i n g
=====

Sample: Chlu0105

=

Source: C:\ZDS\H\Chlu0105.ZDS

Source Parameters:

Step Size: 0.026 ° 2θ
Start Angle: 5.013 ° 2θ
End Angle: 59.951 ° 2θ
Number of Points: 2114
Time per Step: 40.0 sec.
Wavelength: 1.54178 A Cu

=

Posit_2θ	Posit_d	FWHM	Width	Height	Integral	R
6.4786	13.64244	0.1180	0.1334	19.412	10.000	99.9751
6.9404	12.73578	0.1045	0.1228	15.882	6.667	99.9751
8.4022	10.52298	0.1596	0.2074	12.941	16.667	99.9590
15.9107	5.56995	0.3871	0.3758	20.588	43.333	99.9874
17.8560	4.96729	0.1021	0.1150	8.824	9.667	99.9799
20.5741	4.31678	0.1305	0.1505	100.000	45.543	99.9509
21.4356	4.14520	0.3522	0.6884	15.294	60.000	99.9509
23.8527	3.73033	0.1010	0.1288	11.176	12.333	99.9644
24.6388	3.61308	0.1818	0.4489	15.882	40.000	99.9649
25.1855	3.53587	0.1171	0.1294	8.824	9.667	99.9649
25.4702	3.49699	0.3893	0.6195	12.353	43.333	99.9649
26.5970	3.35134	0.1471	0.3204	22.941	43.333	99.9634
27.4516	3.24661	0.7788	0.5679	11.765	36.667	99.9332
29.3632	3.04162	0.4283	0.5159	20.000	60.000	99.9326
30.9987	2.88477	0.1248	0.1341	21.765	16.667	99.9148
31.7008	2.82247	0.1194	0.1379	16.471	9.667	99.9248
32.3699	2.76396	0.1451	0.1636	25.926	5.128	99.9895

=

Maximum Height: 1.70 cps Maximum Integral: 0.30 2θ.cps

=

Profile-Shape-Parameters:

PSF: Pearson VII Background: Linear
Doublet: Yes Split: No Lp-correction: No
ConvergMode: Automatic ConvergParam= 2.00

=