

VERTIKÁLNÍ PROFILY MINERALOGICKÉHO SLOŽENÍ ATMOSFÉRIKÉHO PRACHU V SEVEROZÁPADNÍCH ČECHÁCH (KOPISTY, DLOUHÁ LOUKA, MILEŠOVKA)

Článek je věnován 100. výročí založení Přírodovědecké fakulty Univerzity Karlovy.

DAVID HAVLÍČEK^{a,c} a JIŘÍ PLOCEK^b

^a Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030, 128 40 Praha 2,

^b Ústav anorganické chemie, AV ČR, v.v.i., Husinec-Řež 1001, 250 68 Řež, ^c Katedra chemie a didaktiky chemie, Pedagogická fakulta, Univerzita Karlova, Magdalény Rettigové 4, 116 39 Praha 1
plocek@iic.cas.cz

Došlo 2.10.19, přijato 10.2.20.

Klíčová slova: znečištění ovzduší, mineralogické složení, výškový profil, prášková rentgenová difrakce

Úvod

Pevné částice hrají významnou roli v různých procesech v atmosféře. Mohou působit jako kondenzační jádra, která ovlivňují výskyt a druh srážek, působí jako polutanty, které mohou mít vliv na živé organismy (např. respirační onemocnění u savců) a mohou na svém povrchu adsorbovat další, převážně organické, polutanty. Tyto částice jsou také odpovědné za optické vlastnosti atmosféry (viditelnost, radiační bilance, atd.) Působení jednotlivých částic je spíše závislé na jejich fázovém složení, než na složení elementárním, které je obvykle velmi podobné v rámci skupiny anorganických polutantů (např. aluminosilikáty).

Složení aerosolu, elektrarenských popílků^{1,2}, vulkanického prachu³, prachu v městských aglomeracích⁴ a dalších pevných částic v atmosféře bylo studováno také práškovou rentgenovou difrakcí. Většina studií se však zabývala jen elementárním složením a nikoliv fázovým složením vzorku. V závislosti na cíli práce bývá obvykle stanovována jen vybraná skupina prvků, jejichž celkový obsah ve vzorku může být leckdy velmi nízký⁵. Množství článků zabývajících se fázovým (mineralogickým) složením je mnohem nižší a v mnoha případech v nich jsou analyzovány obsahy jen jedné sloučeniny nebo minerálu. Tato sloučenina, nebo minerál je obvykle zásadně důležitá pro cíl článku^{6,7}. V 90. letech a na počátku tohoto milénia byla prášková rentgenová difrakce použita ve Španělsku Querolem a spol.^{8–10} ke studiu aerosolu na různých mís-

tech, mineralogické složení městského aerosolu studoval Moreno a spol.¹¹. Ke kvantitativní fázové analýze byla prášková difrakce použita v práci Esteve a spol.¹² pro stanovení obsahu křemene, sádrovce a vápence v okolí Castellónu (Španělsko). V tomto případě byly vzorky odebrány kaskádním impaktorem. Další užitečnou metodou, která poskytuje informace o složení tuhé frakce atmosférického aerosolu je elektronová mikroskopie v kombinaci s energiově disperzní rentgenovou spektroskopií (Energy-dispersive X-ray spectroscopy, EDS). Tato metoda byla klíčová ve studiích prováděných Gaudichetem a spol.¹³, kteří studovali mineralogické složení aerosolu na ostrově Amsterdam v jižním Indickém oceánu, Kalderon-Asaelem a spol.¹⁴, kteří studovali mineralogické a chemické složení prachu v jižním středomoří nebo Delgadem a spol.¹⁵, kteří studovali atmosférický aerosol na Tenerife. Atmosférický aerosol v průmyslových oblastech (např. v okolí „keramiček“) studoval Goméz a spol.^{16,17}.

Na konci minulého století jsme studovali mineralogické složení tuhé frakce atmosférického aerosolu v silně znečištěné oblasti (Kopisty u Mostu, SZ Čechy) s použitím 80 m vysokého meteorologického stožáru a impaktoru jako odběrného zařízení. Chemické a mineralogické složení jsme stanovovali v hladinách 2, 20, 40, 60 a 80 m nad zemským povrchem^{18–20}.

Na tomto místě je nezbytné poznamenat, že naše výsledky byly jedinečné, neboť závisely jednoznačně na geografickém umístění observatoře a na aktuální meteorologické situaci. Později jsme provedli obdobnou studii na stejném místě, avšak za odlišných meteorologických podmínek. Potvrdila se závislost na meteorologické situaci, zejména na „stavu půdního povrchu“. Analogické měření jsme zorganizovali také na dvou dalších místech v severozápadních Čechách, na Dlouhé Louce (15 km od Kopist na hřebenu Krušných hor) a na Milešovce (20 km od Kopist). Vzorky byly odebrány na skleněné filtry (zachyceno 2 až 13 mg prachu) v hladinách 2, 20, 40, 60, 80 m v Kopistech, 1, 15, 30, 48 m na Dlouhé Louce a v 1 a 20 m na Milešovce. Také jsme změnili metodu analýzy práškovou rentgenovou difrakcí. V této studii jsme nepoužívali klasické Bragg-Brentanovo uspořádání, ale metodu paralelního svazku, užívanou ke studiu tenkých vrstev. Výsledky těchto studií byly doposud publikovány jen na konferencích^{21,22}, avšak nikdy jako ucelený článek v odborném časopise.

Je třeba podotknout, že právě vertikální profily nám mohou poskytnout informaci o původu odebraného prachu. Jeho mineralogické složení v přízemních vrstvách je překryto prachem z povrchu poblíž odběrného místa (půda, pouliční prach, atd.) a podle našich zjištění koncentrace ostatních minerálů zde leží pod detekčním limitem. Vzorkování na skleněné filtry (Whatman GF/C) nám umožňuje použít tyto filtry přímo do práškového rentgenového difraktometru. V tomto případě můžeme s výhodou použít právě metodu paralelního svazku namísto klasického Bragg-Brentanova uspořádání. Proto se domníváme, že publikování těchto výsledků může být užitečné komukoliv, kdo se zabývá studiem pevných částic v atmosféře.

Experimentální část

Observatoře

Odběry byly prováděny na třech meteorologických observatořích v severočeské uhelné pánvi a jejím okolí – v Kopistech u Mostu, na Dlouhé Louce u Litvínova a na Milešovce. Všechny tři observatoře jsou majetkem Ústavu fyziky atmosféry AV ČR, v.v.i. Tyto observatoře disponují meteorologickými stožáry s platformami v různých výškách nad zemským povrchem. Umístění observatoří a vyznačení nejvýznamnějších zdrojů znečištění ovzduší severočeské krajiny je uvedeno na obr. 1 (cit.²³).

Kopisty

Observatoř je umístěna v lokalitě Kopisty nedaleko Mostu v severozápadní části Čech v nadmořské výšce 240 m n.m. (tab. I, obr. 1 – označení „1“).

V nejbližším okolí observatoře se nachází petrochemický podnik Chemopetrol v Litvínově a několik povrchových hnědouhelných lomů, na kterých již v současné době převážně probíhá rekultivace a dále pak tepelné elektrárny Komořany a Ledvice. Nezanedbatelný vliv na ovzduší má i značná intenzita zejména nákladní automobilové dopravy spojená s intenzivním průmyslovým využitím oblasti.

Součástí observatoře je meteorologický stožár o výšce 80 m, který umožňuje umístění odběrového zařízení do výšek 20, 40, 60 a 80 m. Kromě výškových měření byly odběry prováděny i v hladině 2 m nad povrchem.

Dlouhá Louka

Obec Dlouhá Louka se nachází na hřebeni Krušných hor severně od Litvínova v severozápadní části Čech. Na východním okraji obce je situována meteorologická observatoř. (tab. I, obr. 1 – označení „2“). Observatoř se tak nachází na okraji plochých vrcholových partií Krušných hor a zároveň přímo nad průmyslovou mosteckou pánví.

V areálu observatoře je instalován meteorologický stožár o výšce 51 m. Stožár je vybaven plošinami umožňujícími umístění odběrového zařízení do výšek 15, 30 a 48 m. Odběry byly prováděny i u paty stožáru, tj. ve výškové hladině 1 m nad povrchem.

Milešovka

Milešovka je nejvyšší hora Českého středohoří s nadmořskou výškou 837 m n.m. Jedná se o osamocený kuželovitý útvar vyčnívající cca 400 m nad okolí. Milešovka je vulkanického původu z období třetihor a minerální složení jejích hornin lze zařadit k fonolitu. Meteorologická observatoř je umístěna na vrcholu hory (tab. I, obr. 1 – označení „3“).

Observatoř umožňuje umístění odběrového zařízení ve výšce 20 m. Obdobně jako u výše jmenovaných observatoří byly odběry prováděny také v přízemní výškové hladině 1 m.



Obr. 1. Mapa. 1 – observatoř Kopisty, 2 – observatoř Dlouhá louka, 3 – observatoř Milešovka, A – elektrárna Komořany, B – elektrárna Ledvice, C, D, E – povrchové uhelné doly, F – Krušné hory, G – České středohoří

Tabulka I
Geografické souřadnice a nadmořská výška observatoří

Observatoře	Geografické souřadnice		Nadm. výška / m n.m.
Kopisty	50°32'40,96" N	13°37'23.92" E	240
Milešovka	50°33'17,33" N	13°55'52.42" E	837
Dlouhá louka	50°38'52,46" N	13°39'22.63" E	880

Odběrné zařízení

Vzorkovací zařízení je složeno z olejové rotační vývěvy o čerpacím výkonu 6–8 m³ h⁻¹, propojovací hadice a odběrové hlavy („Davis Consulting“, B. L. Davis, School of Mines and Technology, Rapid City, South Dakota, USA), která zprostředkovává prosávání vzduchu přes výměnný filtr a zároveň zabráňuje nasávání vody v případě deště. Pro odběry byly používány nedifraktující skleněné filtry Whatman GF/C o průměru 47 mm a porozitě < 1,2 μm. Aktivní plocha filtru použitá pro odběr vzorku byla vzorkovacím zařízením omezena na terč o průměru 2 cm, tj. 3,14 cm².

Odběry

Vzorky byly odebírány v průběhu šesti let, v období 1995–2000. Ve spolupráci s Českým hydrometeorologickým ústavem a Ústavem fyziky atmosféry AV ČR v.v.i. byly pro odběry vybrány velmi podobné meteorologické situace. V průběhu odběru byla, po vysušení filtru, kontrolována hmotnost odebraného materiálu. Z předchozích měření bylo známo, že minimální množství zachyceného vzorku postačující pro následné analýzy bylo cca 2 mg, tj. cca 0,65 mg/cm² účinné plochy filtru. Doba trvání každého

odběru byla tudíž závislá na obsahu prachových částic ve vzduchu a pohybovala se od 47 do 149 hodin. Obecně se prašnost pohybovala okolo 2 μg m⁻³ na lokalitě Dlouhá Louka a do 20 μg m⁻³ na lokalitě Milešovka. Údaje o odběrech (výšce, času a době vzorkování a množství zachyceného prachu) jsou uvedeny v tab. II.

Fázová analýza

Kvantitativní fázová analýza byla provedena práškovou rentgenovou diffrakcí. Vzorky odebrané na skleněné filtry byly proměřeny za laboratorní teploty metodou paralelního svazku na difraktometru HZG4. Přístroj byl vybaven Cu anodou (Cu K_α; λ=1,54178 Å). Úhel dopadajícího svazku byl nastaven na 4° nebo 8° s krokem 0,05° 2θ. Stejně filtry byly také proměřeny v klasickém Bragg-Brentanově uspořádání. Kvalita záznamů z paralelního svazku byla nesrovnatelně vyšší, nežli z klasického Bragg-Brentanova uspořádání. Poloha píků a jejich integrálních intenzit byla vyhodnocena za použití programu Difpatan²⁴. K identifikaci fázového složení jsme použili databázi PDF-2 (Powder Diffraction File)²⁵. Pro naše interní použití jsme vytvořili subdatabázi minerálů, které se potenciálně mohly vyskytovat v našich vzorcích.

Tabulka II
Informace o odběrech

Observatoř	Výška nad povrchem [m]	Datum	Trvání odběru [h]	Hmotnost vzorku [mg]	Střední hmotnost odebraného prachu za 24 h [mg]
Kopisty	2	9.–10.11.1995	47	2,1	1,07
	20	10.–12.11.1995	47	2,0	1,02
	40	10.–12.1.1996	47	1,8	0,92
	60	12.–14.1.1996	47	2,0	1,02
	80	14.–15.1.1996	47	2,3	1,17
Milešovka	1	27.–31.10.2000	96	13,1	3,28
	20	20.–24.10.2000	89	7,7	2,08
Dlouhá louka	1	20.–26.10.1999	149	2,1	0,34
	15	26.–29.10.1999	68	3,5	1,24
	30	29.10.–3.11.1999	117	6,2	1,27
	48	3.–6.11.1999	68	2,2	0,78

Meteorologická situace

Výsledky měření jsou silně závislé na meteorologických podmínkách v průběhu odběrů. V následujících podkapitolách jsou uvedeny celkové meteorologické situace v Evropě i v místě vzorkování a tab. III–V shrnují základní meteorologické charakteristiky vzorkovaného místa v době odběru vzorků.

Kopisty

9. – 12. listopad 1995:

Nad střední Evropou byl teplý vzduch ve vyšších atmosférických hladinách přenášen podél západního okraje oblasti vysokého tlaku.

Kopisty:

Teplotní inverze, zataženo, mírné povětrnostní podmínky
10. – 15. leden 1996:

Podél východního okraje cyklónu situovaného nad Atlantickým oceánem a západní Evropou byl přítomen přesun teplého vzduchu z jihu do vyšších atmosférických hladin. Na konci popisovaného období převaha oblasti vysokého tlaku nad evropskou částí Ruska zastavila přenos teplého vzduchu.

Kopisty:

Teplotní inverze, zataženo kromě 14. ledna, bezvětří, do 14. ledna nízké denní srážky. Lokální meteorologické podmínky jsou uvedeny v tab. III.

Dlouhá Louka

20. říjen – 6. listopad 1999:

Na začátku tohoto období, se oblast vysokého tlaku přemístila ze Skandinávie nad evropskou část Ruska, začal přenos teplého vzduchu z jihu a atmosférická fronta dosáhla střední Evropy. Od 27. října převládala oblast vysokého tlaku nad jižní a střední Evropou, která dovolila přechod jen několika front.

Dlouhá Louka:

Větrno, ze začátku nízké denní srážky, od 27. října se objevily občasně mírné deště. Lokální meteorologické podmínky jsou uvedeny v tab. IV.

Milešovka

20. – 31. říjen 2000:

Na začátku bylo počasí ovlivněno oblastí vysokého tlaku nad východní Evropou a přesuny teplého vzduchu od JZ. Od 24. října převládl zonální proud vzduchu s individuálními frontálními přechody.

Milešovka:

Po většinu období sběru vzorků bylo větrno, na začátku bylo slunečno, nízké úhrny srážek uprostřed období (kromě 26. října – kdy se nevzorkovalo). Lokální meteorologické podmínky jsou uvedeny v tab. V.

Výsledky a diskuse

V tab. VI–VIII jsou shrnuty výsledky experimentu zabývajícího se mineralogickým složením prachu v různých výškách nad povrchem země na třech meteorologických observatořích v České republice. Součástí výsledkových tabulek je název příslušného minerálu nalezeného v pevné frakci atmosférického prachu, jeho chemický vzorec, číslo karty v databázi PDF-2 a jeho původ. Podle původu jsou minerály rozděleny do tří skupin. První skupina zahrnuje minerály přírodního původu, tedy takové, které se do ovzduší dostaly ze zemského povrchu. Druhá skupina zahrnuje minerály, o kterých nelze jednoznačně rozhodnout, zdali pocházejí ze zemského povrchu nebo se do ovzduší dostaly díky činnosti člověka. Ve většině případů pocházejí tyto minerály z obou zdrojů. Třetí skupina pak zahrnuje minerály, které se dostaly do ovzduší díky činnosti člověka. Jejich výskyt je způsoben převážně spalováním hnědého uhlí v tepelných elektrárnách (křemen, mulit, silimanit, hematit, sádrovec, kalcit, grafit), exhalacemi z chemických provozů, které v kombinaci s oxidem siřičitým ze spalovacích procesů vedou k tvorbě sekundárního aerosolu (síran hořečnatu-vápenatý, koktait, natrolit, anhydrit) a hustým automobilovým provozem. Souhrnně je můžeme pojmenovat jako minerály antropogenního původu.

Tabulka III

Meteorologická situace na observatoři Kopisty u Mostu

Datum	Teplota vzduchu [°C]	Srážky [mm]	Relativní vlhkost [%]	Směr větru	Rychlost větru [m s ⁻¹]
9.11.1995	3,0	–	97	JV	0,7
10.11.1995	4,2	–	98	V	0,7
11.11.1995	3,0	–	91	JV	1,7
12.11.1995	3,5	–	89	V	1,7
10.1.1996	0,4	0,1	96	JV	0,3
11.1.1996	–0,3	0,3	98	–	0,0
12.1.1996	1,0	0,6	98	–	0,0
13.1.1996	1,4	0,3	98	–	0,0
14.1.1996	0,4	–	90	–	0,0
15.1.1996	–1,1	–	94	–	0,0

Tabulka IV
Meteorologická situace na observatoři Dlouhá Louka

Datum	Teplota vzduchu [°C]	Srážky [mm]	Relativní vlhkost [%]	Směr větru	Rychlost větru [m s ⁻¹]
20.10.1999	-1,2	–	83	V	11,9
21.10.1999	0,0	0,1	88	V	17,0
22.10.1999	2,9	0,4	93	V	12,1
23.10.1999	4,3	1,5	99	JV	9,7
24.10.1999	5,9	0,2	97	JV	7,8
25.10.1999	6,9	1,8	100	JV/Z	4,2/7,9
26.10.1999	8,8	0,1	96	JZ	12,6
27.10.1999	7,9	–	98	Z	12,9
28.10.1999	9,0	–	96	Z	7,9
29.10.1999	7,3	–	95	SZ/V	5,4/6,5
30.10.1999	5,3	0,0	93	JV	10,3
31.10.1999	6,9	3,2	86	JZ	10,8
01.11.1999	6,0	–	84	J	9,6
02.11.1999	8,1	3,2	91	JZ	9,7
03.11.1999	4,8	–	92	SZ	7,2
04.11.1999	2,9	–	91	V	8,8
05.11.1999	2,7	0,1	99	JV	10,0
06.11.1999	3,7	5,3	99	JV/Z	8,1

Tabulka V
Meteorologická situace na observatoři Milešovka

Datum	Teplota vzduchu [°C]	Srážky [mm]	Relativní vlhkost [%]	Směr větru	Rychlost větru [m s ⁻¹]
20.10.2000	6,8	–	99	JV	9,9
21.10.2000	5,0	–	89	JV	11,3
22.10.2000	5,7	–	84	J	4,0
23.10.2000	5,1	0,1	88	J	5,6
24.10.2000	6,6	0,3	90	Z	9,8
25.10.2000	8,8	1,2	87	Z	13,7
26.10.2000	7,8	13,5	94	Z	11,2
27.10.2000	4,8	0,5	88	Z	10,4
28.10.2000	6,6	0,6	99	JZ	8,2
29.10.2000	6,5	–	93	JZ	11,5
30.10.2000	5,6	–	87	J	13,9
31.10.2000	6,5	0,0	91	JZ	10,1

K dispozici je série pěti vzorků z observatoře v Kopistech, čtyři vzorky odebrané na observatoři Dlouhá Louka u Litvínova a nakonec dva vzorky z observatoře na Milešovce. Všechny tři observatoře se liší polohou i nadmořskou výškou. Kopisty představují meteorologický

stožár umístěný pod Krušnými horami v silně znečištěné oblasti, Dlouhá Louka je horskou observatoří na okraji náhorní planiny Krušných hor vzdálená asi 15 km severně od Kopist. Milešovka svým charakterem připomíná samostatný stožár na vrcholu nejvyšší hory Českého středohoří.

Je vzdálená přibližně 21 km od Kopist i od Dlouhé Louky.

Celkem bylo ve vzorcích nalezeno 28 chemických individuí, převážně minerálů. 13 z nich pochází jednoznačně z půd v okolí observatoří. Další 8 pochází naopak jednoznačně z antropogenních zdrojů. Třetí skupinu tvoří minerály, jejichž zdrojem může být jak půda, tak antropogenní zdroje. Pro srovnání observatoří v Kopistech a na Dlouhé Louce jsme zvolili tzv. „Procentuální zastoupení půdních minerálů“ ve vzorku. Tento parametr jsme definovali jako procento nalezených fází jednoznačně přirozeného původu z celkového počtu nalezených fází v daném vzorku a dospěli tak k následujícím výsledkům, které jsou zobrazeny na obr. 2.

Kopisty:

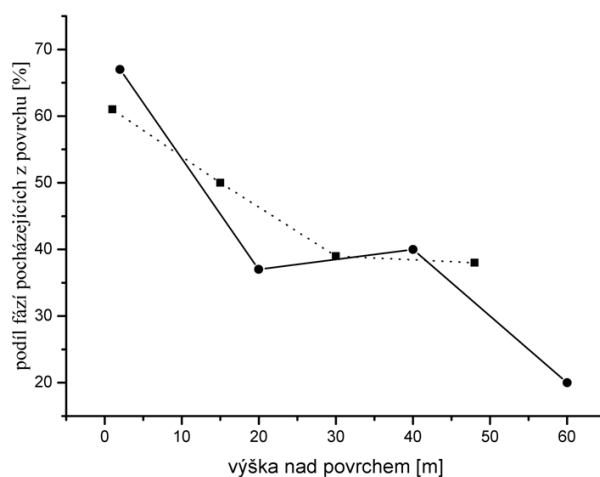
Procentuální zastoupení půdních minerálů je v přízemní hladině nejvyšší (67 %) a nelineárně klesá až do 60 m (20 %). V hladinách 20 a 40 m zůstává prakticky stejné (37 % ve 20 m a 40 % ve 40 m), i když je celkový počet nalezených minerálů ve 40 m podstatně menší než ve 20 m. Dominantní podíl v nejvyšší hladině (80 m) představuje mikrokrytalický grafit přecházející do amorfni uhlikaté fáze.

Dlouhá Louka:

Vzhledem k výšce stožáru na Dlouhé Louce lze říci, že výškový profil je na této lokalitě téměř identický s profilem v Kopistech. Oba odběry byly provedeny za přibližně stejné meteorologické situace, kdy proudění směřovalo převážně od Kopist k Dlouhé Louce. Vzhledem k charakteru terénu šlo tedy vlastně o posun vzduchového sloupce z Kopist nad Dlouhou Louku. Nejnížší hladina není mineralogicky nejbohatší, ale obsahuje přibližně stejné procento půdních minerálů (61 %, v Kopistech 67 %). Nejpestřejší vzorek odebraný ve 30 m je jen o málo bohatší než hladina v 15 m. To přesně odpovídá profilu z Kopist, kde byla jednoznačně nejbohatší hladina ve 20 m (v Kopistech chybí plošiny v 15 a 30 m). Procentuální zastoupení půdních minerálů nelineárně klesá s rostoucí výškou od 61 % v 1 m přes 50 % v 15 m a 39 % ve 30 m až k 38 % ve 48 m. Podobně jako v Kopistech dosahuje v hladinách mezi 20 a 48 m necelých 40 %.

Milešovka:

Složení prachu v obou hladinách na Milešovce (1 a 20 m) je velmi podobné a odpovídá nejlépe nejvyšší hladině v Kopistech. Ve vzorcích je patrná přítomnost mikrokrytalického grafitu s velkým podílem amorfni fáze. Observatoř na Milešovce nám díky svému charakteru „několikasetmetrového stožáru“ umožnila nahlédnout do hladin ležících o několik set metrů výše než je umístěna nejvyšší platforma v Kopistech. Zcela překvapivé je celkové množství odebraného prachu, které několikanásobně převyšuje nejbohatší hladiny ze dvou výše zmiňovaných observatoří v Kopistech a na Dlouhé Louce. Podle těchto výsledků vzrůstá ve vysokých hladinách celkové množství prachu, který pochází převážně z antropogenních zdrojů.



Obr. 2. Procentuální zastoupení půdních minerálů z celkového počtu nalezených minerálů (viz text). Plnou čarou je označen profil z Kopist, tečkovanou profil z Dlouhé Louky

Předložená práce dokumentuje výškové profily mineralogického složení prachu v silně znečištěné oblasti severních Čech. Vzhledem k jedinečnosti geografické polohy observatoří a dané meteorologické situaci máme velmi málo možností srovnání s dříve publikovanými daty. Jediné racionální srovnání nabízí publikovaná studie zabývající se mineralogickým profilem prachu v Kopistech u Mostu²⁰. Oba profily mají podobnou závislost celkového množství odebraného prachu v závislosti na výšce. Toto množství nejprve klesá do cca 40 m a poté začíná stoupat. Rozdíl však spočívá především v absolutním množství prachu v přízemní hladině 2 m. Zatímco v citované studii je toto množství jednoznačně nejvyšší, v předložené práci je podstatně menší. Stejně tak byla v naší studii pozorována menší „mineralogická pestrost“ této přízemní hladiny. Vysvětlení nalezneme v meteorologických datech (tab. III až V). Zatímco v době původní studie neprobíhaly v průběhu odběrů žádné srážky, v této studii jsou drobné srážky pozorovány sice ve velmi malé míře, ale prakticky denně. Přihlédneme-li k nízké teplotě, vysoké relativní vlhkosti a téměř bezvětří, byl zemský povrch v okolí odběrného místa zřejmě mokrá, zatímco v původní studii mokrá nebyl. Proto lze v původní studii předpokládat vyšší místní prašnost a tedy vyšší podíl půdních minerálů v nejnížší hladině. Vlhký nebo mokrá povrch naopak vede k efektu, který lze přirovnat k mucholapce. V blízkosti mokrého povrchu na něm díky turbulentnímu míchání ulpívají prachové částice a snižují tak jejich koncentraci v nejnížší hladině. Ve vyšších hladinách se prachové částice do kontaktu s mokřým povrchem nedostanou a jsou-li v těchto hladinách přítomny, zůstávají.

Tabulka VI
Mineralogické složení atmosférického prachu odebraného v Kopistech

Místo odběrů: Kopisty				
Výška nad povrchem	Minerál	Chemický vzorec	Číslo karty v databázi PDF	Původ
2 m	muskovit M21	$\text{KMgAlSi}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	21-993	přírodní
	muskovit M25	$(\text{K,Ca,Na})(\text{Al,Mg,Fe})_2(\text{Si,Al})_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	25-649	
	kaolinit	$\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$	14-164	
	mikroklin	KAlSi_3O_8	19-932	
	ortoklas	KAlSi_3O_8	31-966	
	křemen	SiO_2	33-1161	přírodní nebo antropogenní
20 m	sádrovec	$\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	21-816	antropogenní
	muskovit M21	$\text{KMgAlSi}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	21-993	přírodní
	muskovit M25	$(\text{K,Ca,Na})(\text{Al,Mg,Fe})_2(\text{Si,Al})_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	25-649	
	mikroklin	KAlSi_3O_8	19-932	
	lizardit	$(\text{Mg,Al})_3(\text{Si,Al})_2\text{O}_5(\text{OH})_4$	11-386	
	berthierin	$(\text{Fe,Al})_3(\text{Si,Al})_2\text{O}_5(\text{OH})_4$	31-618	
	illit	$(\text{K,H}_3\text{O})\text{Al}_2\text{Si}_3\text{AlO}_{10}(\text{OH})_2$	26-911	
	biotit	$\text{K}(\text{Mg,Fe}^{+2})_3(\text{Al,Fe}^{+3})\text{Si}_3\text{O}_{10}(\text{OH,F})_2$	42-1437	
	calcit	CaCO_3	5-586	přírodní nebo antropogenní
	hematit	Fe_2O_3	33-664	
	sádrovec	$\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	21-816	
	křemen	SiO_2	33-1161	
	síran hořečnatý vápenatý	$\text{CaMg}_3(\text{SO}_4)_4$	19-241	
	mulit	$\text{Al}_6\text{Si}_2\text{O}_{13}$	15-776	
sillimanit	Al_2SiO_5	38-471		
40 m	koktait	$(\text{NH}_4)_2\text{Ca}(\text{SO}_4)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	11-475	antropogenní
	natrolit	$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$	44-1413	
	muskovit M21	$\text{KMgAlSi}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	21-993	přírodní
	muskovit M25	$(\text{K,Ca,Na})(\text{Al,Mg,Fe})_2(\text{Si,Al})_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	25-649	
	kaolinit	$\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$	14-164	
	lizardit	$(\text{Mg,Al})_3(\text{Si,Al})_2\text{O}_5(\text{OH})_4$	11-386	
	berthierin	$(\text{Fe,Al})_3(\text{Si,Al})_2\text{O}_5(\text{OH})_4$	31-618	
	sádrovec	$\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	21-816	přírodní nebo antropogenní
	křemen	SiO_2	33-1161	antropogenní
	koktait	$(\text{NH}_4)_2\text{Ca}(\text{SO}_4)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	11-475	antropogenní
mulit	$\text{Al}_6\text{Si}_2\text{O}_{13}$	15-776		
grafit	C	25-284		
60 m	muskovit M21	$\text{KMgAlSi}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	21-993	přírodní
	muskovit M25	$(\text{K,Ca,Na})(\text{Al,Mg,Fe})_2(\text{Si,Al})_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	25-649	
	křemen	SiO_2	33-1161	přírodní nebo antropogenní
	calcit	CaCO_3	5-586	
	magnetit	FeFe_2O_4	19-629	

Tabulka VI
pokračování

Výška nad povrchem	Minerál	Chemický vzorec	Číslo karty v databázi PDF	Původ
80 m	muskovit M25	$(K,Ca,Na)(Al,Mg,Fe)_2(Si,Al)_4O_{10}(OH)_2$	25-649	přírodní
	kaolinit	$Al_2Si_2O_5(OH)_4$	14-164	
	illit	$(K,H_3O)Al_2Si_3AlO_{10}(OH)_2$	26-911	
	sádrovec	$CaSO_4 \cdot 2H_2O$	21-816	přírodní nebo antropogenní
	křemen	SiO_2	33-1161	
	grafit	C	25-284	

Tabulka VII
Mineralogické složení atmosférického prachu odebraného na Milešovce

Místo odběrů: Milešovka				
Výška nad povrchem	Minerál	Chemický vzorec	Číslo karty v databázi PDF	Původ
1 m	muskovit M21	$KMgAlSi_4O_{10}(OH)_2$	21-993	přírodní
	muskovit M25	$(K,Ca,Na)(Al,Mg,Fe)_2(Si,Al)_4O_{10}(OH)_2$	25-649	
	kaolinit	$Al_2Si_2O_5(OH)_4$	14-164	
	illit	$(K,H_3O)Al_2Si_3AlO_{10}(OH)_2$	26-911	
	tridymit	SiO_2	14-260	
	sádrovec	$CaSO_4 \cdot 2H_2O$	21-816	přírodní nebo antropogenní
	křemen	SiO_2	33-1161	
	wollastonit-2M	$CaSiO_3$	43-1460	
	koktait	$(NH_4)_2Ca(SO_4)_2 \cdot H_2O$	11-475	antropogenní
	síran hořečnato vápenatý	$CaMg_3(SO_4)_4$	19-241	
grafit	C	25-284		
20 m	kaolinit	$Al_2Si_2O_5(OH)_4$	14-164	přírodní
	biotit	$K(Mg,Fe^{+2})_3(Al,Fe^{+3})Si_3O_{10}(OH,F)_2$	42-1437	
	illit	$(K,H_3O)Al_2Si_3AlO_{10}(OH)_2$	26-911	
	chlorit	$Na_{0,5}A_{16}(Si,Al)_8O_{20}(OH)_{10} \cdot H_2O$	39-381	
	berthierin	$(Fe,Al)_3(Si,Al)_2O_5(OH)_4$	31-618	
	ortoclas	$KAlSi_3O_8$	31-966	
	lizardit	$(Mg,Al)_3(Si,Al)_2O_5(OH)_4$	11-386	
	afwillit	$Ca_3(SiO_3OH)_2 \cdot 2H_2O$	29-330	
	sádrovec	$CaSO_4 \cdot 2H_2O$	21-816	přírodní nebo antropogenní
	křemen	SiO_2	33-1161	
	kalцит	$CaCO_3$	5-586	
wollastonit-2M	$CaSiO_3$	43-1460		
natrolit	$(NH_4)_2Al_2Si_3O_{10}$	85-1786		

Tabulka VII
pokračování

Výška nad povrchem	Minerál	Chemický vzorec	Číslo karty v databázi PDF	Původ
20 m	koktait	$(\text{NH}_4)_2\text{Ca}(\text{SO}_4)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	11-475	antropogenní
	síran hořečnato vápenatý	$\text{CaMg}_3(\text{SO}_4)_4$	19-241	
	anhydrit	CaSO_4	37-1496	
	grafit	C	25-284	
	hydrát křemičitanu hlinitého	$2\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	10-478	

Tabulka VIII
Mineralogické složení atmosférického prachu odebraného na Dlouhé Louce

Místo odběrů: Dlouhá Louka						
Výška nad povrchem	Minerál	Chemický vzorec	Číslo karty v databázi PDF	Původ		
1m	biotit	$\text{K}(\text{Mg}, \text{Fe}^{+2})_3(\text{Al}, \text{Fe}^{+3})\text{Si}_3\text{O}_{10}(\text{OH}, \text{F})_2$	42-1437	přírodní		
	muskovit M21	$\text{KMgAlSi}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	21-993			
	muskovit M25	$(\text{K}, \text{Ca}, \text{Na})(\text{Al}, \text{Mg}, \text{Fe})_2(\text{Si}, \text{Al})_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	25-649			
	illit	$(\text{K}, \text{H}_3\text{O})\text{Al}_2\text{Si}_3\text{AlO}_{10}(\text{OH})_2$	26-911			
	berthierin	$(\text{Fe}, \text{Al})_3(\text{Si}, \text{Al})_2\text{O}_5(\text{OH})_4$	31-618			
	kaolinit	$\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$	14-164			
	ortoklas	KAlSi_3O_8	31-966			
	mikroklin	KAlSi_3O_8	19-932			
	chlorit	$\text{Na}_{0,5}\text{Al}_6(\text{Si}, \text{Al})_8\text{O}_{20}(\text{OH})_{10} \cdot \text{H}_2\text{O}$	39-381			
	sádrovec	$\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	21-816		přírodní nebo antropogenní	
	křemen	SiO_2	33-1161			
	kalцит	CaCO_3	5-586			
	15m	koktait	$(\text{NH}_4)_2\text{Ca}(\text{SO}_4)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$		11-475	antropogenní
		biotit	$\text{K}(\text{Mg}, \text{Fe}^{+2})_3(\text{Al}, \text{Fe}^{+3})\text{Si}_3\text{O}_{10}(\text{OH}, \text{F})_2$		42-1437	přírodní
muskovit M21		$\text{KMgAlSi}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	21-993			
muskovit M25		$(\text{K}, \text{Ca}, \text{Na})(\text{Al}, \text{Mg}, \text{Fe})_2(\text{Si}, \text{Al})_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	25-649			
illit		$(\text{K}, \text{H}_3\text{O})\text{Al}_2\text{Si}_3\text{AlO}_{10}(\text{OH})_2$	26-911			
leucit		KAlSi_2O_6	38-1423			
chlorit		$\text{Na}_{0,5}\text{Al}_6(\text{Si}, \text{Al})_8\text{O}_{20}(\text{OH})_{10} \cdot \text{H}_2\text{O}$	39-381			
berthierin		$(\text{Fe}, \text{Al})_3(\text{Si}, \text{Al})_2\text{O}_5(\text{OH})_4$	31-618			
lizardit		$(\text{Mg}, \text{Al})_3(\text{Si}, \text{Al})_2\text{O}_5(\text{OH})_4$	11-386			
afwillit		$\text{Ca}_3(\text{SiO}_3\text{OH})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	29-330			
ortoklas		KAlSi_3O_8	31-966			
mikroklin		KAlSi_3O_8	19-932			
kaolinit		$\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$	14-164			

Tabulka VIII
pokračování

Výška nad povrchem	Minerál	Chemický vzorec	Číslo karty v databázi PDF	Původ	
15 m	sádrovec	$\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	21-816	přírodní nebo antropogenní	
	magnetit	FeFe_2O_4	19-629		
	křemen	SiO_2	33-1161		
	kalцит	CaCO_3	5-586		
	hematit	Fe_2O_3	33-664		
	koktait	$(\text{NH}_4)_2\text{Ca}(\text{SO}_4)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	11-475	antropogenní	
	mulit	$\text{Al}_6\text{Si}_2\text{O}_{13}$	15-776		
	síran hořečnato vápenatý	$\text{CaMg}_3(\text{SO}_4)_4$	19-241		
	30 m	muskovit M21	$\text{KMgAlSi}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	21-993	přírodní
muskovit M25		$(\text{K,Ca,Na})(\text{Al,Mg,Fe})_2(\text{Si,Al})_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	25-649		
biotit		$\text{K}(\text{Mg,Fe}^{+2})_3(\text{Al,Fe}^{+3})\text{Si}_3\text{O}_{10}(\text{OH,F})_2$	42-1437		
berthierin		$(\text{Fe,Al})_3(\text{Si,Al})_2\text{O}_5(\text{OH})_4$	31-618		
kaolinit		$\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$	14-164		
chlorit		$\text{Na}_{0,5}\text{Al}_6(\text{Si,Al})_8\text{O}_{20}(\text{OH})_{10} \cdot \text{H}_2\text{O}$	39-381		
lizardit		$(\text{Mg,Al})_3(\text{Si,Al})_2\text{O}_5(\text{OH})_4$	11-386		
ortoklas		KAlSi_3O_8	31-966		
mikroklin		KAlSi_3O_8	19-932		
afwillit		$\text{Ca}_3(\text{Si}_3\text{OH})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	29-330		
limonite, goethite		FeOOH	29-713		
sádrovec		$\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	21-816	přírodní nebo antropogenní	
magnetit		FeFe_2O_4	19-629		
křemen		SiO_2	33-1161		
kalцит		CaCO_3	5-586		
hematit		Fe_2O_3	33-664		
sillimanit		Al_2SiO_5	38-471	antropogenní	
mulit	$\text{Al}_6\text{Si}_2\text{O}_{13}$	15-776			
natrolit	$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$	44-1413			
koktait	$(\text{NH}_4)_2\text{Ca}(\text{SO}_4)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	11-475			
anhydrit	CaSO_4	37-1496			
grafit	C	25-284			
síran hořečnato vápenatý	$\text{CaMg}_3(\text{SO}_4)_4$	19-241			
48 m	kaolinit	$\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$	14-164		přírodní
	chlorit	$\text{Na}_{0,5}\text{Al}_6(\text{Si,Al})_8\text{O}_{20}(\text{OH})_{10} \cdot \text{H}_2\text{O}$	39-381		
	muskovit M21	$\text{KMgAlSi}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	21-993		
	muskovit M25	$(\text{K,Ca,Na})(\text{Al,Mg,Fe})_2(\text{Si,Al})_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	25-649		
	illit	$(\text{K,H}_3\text{O})\text{Al}_2\text{Si}_3\text{AlO}_{10}(\text{OH})_2$	26-911		
	mikroklin	KAlSi_3O_8	19-932		
	křemen	SiO_2	33-1161	přírodní nebo antropogenní	
	kalцит	CaCO_3	5-586		
	sillimanit	Al_2SiO_5	38-471	antropogenní	
	mulit	$\text{Al}_6\text{Si}_2\text{O}_{13}$	15-776		
	grafit	C	25-284		
	síran hořečnato vápenatý	$\text{CaMg}_3(\text{SO}_4)_4$	19-241		
	anhydrit	CaSO_4	37-1496		

Závěr

Vzorky prachu na skleněných filtrech byly odebrány na třech observatořích v silně znečištěné oblasti severních Čech. Kopisty u Mostu představují výškový profil 2–80 m nad zemským povrchem a Dlouhá Louka výškový profil 1 až 48 m nad zemským povrchem. Milešovka představuje sice jen výškový profil 1–20 m nad zemským povrchem, svým charakterem izolované kuželové hory však její vrchol sahá do podstatně vyšších vrstev troposféry. V celkem jedenácti vzorcích odebraných za velmi podobné meteorologické situace bylo identifikováno celkem 28 fází, které byly rozděleny na minerály přirozeného (půdního) původu, na minerály jednoznačně antropogenního původu a na minerály, které mohou pocházet z obou zdrojů. Zastoupení půdních minerálů nelineárně klesá s výškou nad úrovní terénu a je v podstatě stejné v Kopistech u Mostu a na Dlouhé Louce. Vlhký nebo mokrý povrch obsah půdních minerálů v nejnižších vrstvách výrazně snižuje. Předpokládáme-li tedy transport vzduchového sloupce z Kopist nad Dlouhou Louku nad vlhkým nebo mokrým povrchem zalesněných svahů Krušných hor, dojde k výraznému vyčištění nejnižší hladiny, což je zřejmé z vůbec nejnižší pozorované hodnoty průměrné prašnosti za 24 hodin v 1 m nad povrchem na Dlouhé Louce (0,34 mg/24 h) (tab. II). Obsah minerálů antropogenního původu je jednoznačně nejvyšší na Milešovce, tedy v nejvyšších hladinách dosažitelných v této studii. Překvapivým zjištěním je zároveň vůbec nejvyšší prašnost zjištěná právě na této observatoři – 3,28 mg/24 h v 1 metru a 2,08 mg/24 h ve 20 metrech. Bezpochyby velmi zajímavé by bylo sledovat mineralogické složení prachu v ještě vyšších hladinách a potvrdit tak závěr, že prachové znečištění částicemi antropogenního původu stoupá s výškou nad zemským povrchem. V určité výšce však musí prašnost opět začít klesat. Předložená studie byla realizována v období, kdy byly (ve srovnání s osmdesátými léty) výrazně sníženy emise z tepelných elektráren a tento stav se dodnes příliš nezměnil²⁶. Daleko větší problém představují v současné době ovzduší velkých měst, kde dosahuje prašnost mnohem vyšších hodnot nežli v podkrušnohorské oblasti. Do budoucna tedy hodláme použít obdobnou metodiku výškových profilů v městských oblastech. Předběžné studie byly v roce 2012 provedeny v Plzni^{27–29}.

LITERATURA

- Havlíček D., Příbil R., Kratochvíl B.: *Atmos. Environ.* 23, 701 (1989).
- Havlíček D., Příbil R., Školoud O.: *Atmos. Environ.* 27A, 655 (1993).
- Davis B. L., Johnson R. L., Griffen D. T., Phillips W. R., Stevens R. K., Maughan D.: *J. Appl. Meteorol.* 20, 922 (1981).
- Davis B. L., Jixiang Guo: *Atmos. Environ.* 34, 2703 (2000).
- Davis B. L., Maughan A. D.: *J. Air Pollut. Control Assoc.* 34, 1198 (1984).
- Davis B. L., Johnson L. R., Stevens R. K., Courtney W. J., Safriet D. W.: *Atmos. Environ.* 18, 771 (1984).
- Harrison R. M., Sturges W. T.: *Atmos. Environ.* 18, 1829 (1984).
- Querol X., Alastuey A., Lopez-Soler A., Mantilla E., Plana F.: *Atmos. Environ.* 30, 3557 (1996).
- Querol X., Alastuey A., Puigercus J. A., Mantilla E., Riuz C. R., Lopez-Soler A., Plana F., Juan R.: *Atmos. Environ.* 32, 719 (1998).
- Querol X. et al.: *Atmos. Environ.* 34, 239 (2000).
- Moreno T., Gibbons W., Jones T., Richards R.: *Atmos. Environ.* 37, 4265 (2003).
- Esteve V., Rius J., Ochando L. E., Amigó J. M.: *Atmos. Environ.* 31, 3963 (1997).
- Gaudichet A., Lefevre R., Gaudryz A., Ardouin B., Lambert G., Miller J. M.: *Tellus 41B*, 344 (1989).
- Kalderon-Asael B., Erel Y., Sandler A., Dayan U.: *Atmos. Environ.* 43, 3963 (2009).
- Delgado J. D., García O. E., Díaz A. M., Díaz J. P., Expósito F. J., Cuevas E., Querol X., Alastuey A., Castillo S.: *Natural Science 2/10*, 1119 (2010).
- Gomez E. T., Sanfeliu T., Rius J., Vicente A.B.: *Air Pollut. IX, Adv. Air Pollut.* 10, 619 (2001).
- Gomez E. T., Sanfeliu M., Jordan M. M., Rius J., De la Fuente C.: *Env. Geol.* 45, 536 (2004).
- Havlíček D., Sedlák P.: *Anales Geophysicae, Supplement II to Vol. 12, Part II*, C349 (1994).
- Havlíček D., Příbil R., Dobiášová L., Dubovský O.: *EPDIC IV, European Powder Diffraction Conference, Chester, Great Britain, 10 - 14 July 1995, Book of Abstracts* (Cernik R. J., Warburton B., Matthews V., Porter V., Travis D. ed.), str. 31.
- Havlíček D., Příbil R., Dubovský O., Dobiášová L., Sedlák P.: *Atmos. Environ.* 34, 3237 (2000).
- Havlíček D., Dobiášová L.: *7th European Powder Diffraction Conference EPDIC-7, Barcelona, Spain, 20 - 23 May 2000, Book of Abstracts* (Rius J., Torrelles X. ed.), str. 16.
- Havlíček D., Dobiášová L., Plocek J., Sedlák P.: *21st European Crystallographic Meeting, Durban, South Africa, 24 - 29 August 2003, Book of Abstracts* (Liles D., Dillen J. ed.), str. 234.
- <http://www.mapy.cz>, staženo 7. 8. 2008.
- Kužel R.: DIFPATAN, Program for X-ray diffraction powder pattern analysis, peak decomposition, pattern combination and comparison, Faculty of Mathematics and Physics, Charles University, Ke Karlovu 5, 121 16 Prague 2, Czech Republic, Version 1.5, March (1996).
- Powder Diffraction File, release 2011, ICDD, Pennsylvania, USA.
- Hůnová I., Šantroch J., Ostatnická J.: *Atmos. Environ.* 38, 887 (2004).
- Klán M., Havlíček D., Plocek J.: *Ochrana ovzduší* 4, 24 (2013).
- Havlíček D., Plocek J., Klán M.: *Acta Crystallogr., Sect. A: Found. Adv.* 68, Supplement S, 191 (2012).
- Klán M., Pokorná P., Havlíček D., Vik O., Racek M., Plocek J., Hovorka J.: *Environ. Sci. Pollut. Res.* 25, 30488 (2018).

D. Havlíček^{a,c} and J. Plocek^b (^a *Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Charles University,* ^b *Institute of Inorganic Chemistry of the Czech Academy of Sciences,* ^c *Department of Chemistry and Chemical Education, Faculty of Education, Charles University*): **Vertical Profiles of Mineralogical Composition of Atmospheric Dust in North-West Bohemia (Kopisty, Dlouhá Louka, Milešovka)**

This work describes the results of a study of the mineralogical composition of atmospheric aerosol in dependence on the height above the surface of the ground. The study was performed at three different locations – Kopisty near Most, Dlouhá Louka and Milešovka – in NW Bohemia. A total of 28 minerals were identified in the air, minerals of natural origin, minerals derived unambiguously from anthropogenic activities and minerals that could be

both anthropogenic and natural in origin. In general, it can be stated that the content of natural minerals decreases while the fraction of minerals arising from human activities increases with increasing height above the surface of the earth within the range of altitudes studied here. It was demonstrated that a wet or damp surface has a very substantial effect on removing dust impurities from the ground-level layers of the atmosphere. The solitary Milešovka hill acts like a "tall tower" – in contrast to the Ore Mountains where the whole mass of air is lifted up together with the impurities it contains. The composition and content of impurities in Ore Mountains are almost identical to those observed at the same height above the Most basin.

Keywords: air pollution, mineralogical composition, altitude profile, powder X-ray diffraction