

一文看懂XRD基本原理 XRD物相组成检测

产品名称	一文看懂XRD基本原理 XRD物相组成检测
公司名称	广东省广分质检检测有限公司
价格	.00/件
规格参数	
公司地址	广州市番禺区南村镇新基村新基大道1号金科工业园2栋1层101检测中心
联系电话	020-66624679 13719148859

产品详情

XRD全称X射线衍射 (X-Ray Diffraction), 利用X射线在晶体中的衍射现象来获得衍射后X射线信号特征, 经过处理得到衍射图谱。利用图谱信息不仅可以实现常规显微镜的确定物相, 并拥有“透视眼”来看晶体内部是否存在缺陷(位错)和晶格缺陷等, 下面就让咱们来简要的了解下XRD的原理及应用和分析方法, 下面先从XRD原理学习开始。

1 X射线衍射仪的基本构造

XRD衍射仪的适用性很广, 通常用于测量粉末、单晶或多晶体等块体材料, 并拥有检测快速、操作简单、数据处理方便等优点, 是一个标标准准的“良心产品”。

在X射线衍射仪的世界里, X射线发生系统(产生X射线)是“太阳”, 测角及探测系统(测量 2θ 和获得衍射信息)是其“眼睛”, 记录和数据处理系统是其“大脑”, 三者协同工作, 输出衍射图谱。在三者中测角仪是核心部件, 其制作较为复杂, 直接影响实验数据的精度, 毕竟眼睛是心灵的窗户嘛! 下面是X射线衍射仪和测角仪的结构简图。

X射线是一种频率很高的电磁波, 其波长为 10^{-8} - 10^{-12} m远比可见光短得多, 因为其穿透力很强, 并且其在磁场中的传播方向不受影响。小提示: X射线具有一定的辐射, 对人体有一定的副作用, 目前主要铅玻璃来进行屏蔽。

X射线是由高速运动的电子流或其他高能辐射流(射线、中子流等)流与其他物质发生碰撞时骤然减速, 且与该物质中的内层原子相互作用而产生的。

X射线管的结构

不同的靶材，因为其原子序数不同，外层的电子排布也不一样，所以产生的特征X射线波长不同。使用波长较长的靶材的XRD所得的衍射图峰位沿2θ轴有规律拉伸；使用短波长靶材的XRD谱沿2θ轴有规律地被压缩。但需要注意的是，不管使用何种靶材的X射线管，从所得到的衍射谱中获得样品面间距d值是一致的，与靶材无关。

辐射波长对衍射峰强的关系是：衍射峰强主要取决于晶体结构，但是样品的质量吸收系数（MAC）与入射线的波长有关，因此同一样品用不同靶获得的图谱上的衍射峰强度会有稍微的差别。特别是混合物，各相之间的MAC都随所选波长而变化，波长选择不当很可能造成XRD定量结果不准确。

因为不同元素MAC突变拥有不同的波长，该波长就称为材料的吸收限，若超过了这个范围就会出现强的荧光散射。所以分析样品中的元素选择靶材时，一般选择原子序数比靶的元素原子序数小1至4。就会出现强的荧光散射。例如使用Fe靶分析主要成分元素为Fe Co Ni的样品是合适的，而不适合分析含有Mn Cr V Ti的物质常见的阳极靶材有：Cr, Fe, Co, Ni, Cu, Mo, Ag, W,常用的是Cu靶。

表1-1 常见靶材的种类和用途

靶材种类	主要特长	用途
Cu	适用于晶面间距0.1-1nm测定	几乎全部标定，采用单色滤波，测含Cu试样时有高的荧光背底；如采用Kα滤波，不适用于Fe系试样的测定。
Co	Fe试样的衍射线强，如采用Kα滤波，背底高	适宜于用单色器方法测定Fe系试样
Fe	Fe试样背底小	适宜于用滤波片方法测定Fe系试样
Cr	波长长	包括Fe试样的应用测定，利用PSPOMDG的微区测定
Mo	波长短	奥氏体相的定量分析，金属箔的透射方法测量（小角散射等）
W	连续X射线	单晶的劳厄照相测定