

# 矿石品位 物相组织测试

产品名称	矿石品位 物相组织测试
公司名称	广州国检检测有限公司
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房
联系电话	13926218719

## 产品详情

物相分析：

物相是物质中具有特定的物理化学性质的相。同一元素在一种物质中可以一种或多种化合物状态存在;所以，特定物质的物相都是以元素的赋存状态及某种物相(化合物)相对含量的特征而存在的。例如，铜矿石中有辉铜矿( $\text{Cu}_2\text{S}$ )和赤铜矿( $\text{Cu}_2\text{O}$ )，它们分别以铜的硫化物和氧化物的状态存在，两种矿物中的含铜量不同，分别为79.85%和88.80%。还有铁，如果测出 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 含量高的话，那么矿石的可选性就高。在选矿过程中硫化物属于易选，因此要做物相，做完物相以后就可以大致判断出选矿后的精矿品位及回收率。

在地球上，矿产资源丰富。矿石是指可从中提取有用组分或其本身具有某种可被利用的性能的矿物集合体。

常用矿石品位来衡量矿石的价值，但同样有效成分矿石中脉石(矿石中的无用矿物或有用成分含量甚微而不能利用的矿物)的成分和有害杂质的多少也影响矿石价值。从经过矿山中采下来含有某种有价值的矿物质的石块，矿石经过破碎、粉磨等逐级加工后可以应用在金属矿山、冶金工业、化学工业、建筑工业、铁(公)路施工单位、水泥工业及砂石行业等工程领域中。

X射线衍射 ( X-ray diffraction , XRD ) 技术在锂电行业应用极其广泛，尤其对于正极材料物

相的研究。XRD可用于测试和分析材料的晶体结构和物相组成，是一种强大的非破坏性测试。

## X射线衍射仪的结构

X射线衍射仪由X射线发生器、测角仪、样品台、检测器、测量记录系统、计算机系统等构成（如下图所示）。总体可分为X射线发生系统、测角及探测系统、数据记录与处理系统。

图片来源：材料科学与工程技术公众号

## XRD测试原理

X射线是一种频率很高的电磁波，波长约为0.001nm~10nm。其穿透力很强，具有一定的辐射。X射线是由高速运动的电子流或其它高能辐射流（ $\alpha$ 射线、中子流等）与其它物质发生碰撞时速度骤减，与该物质中的内层原子相互作用而产生的。

X射线衍射仪中靶材不同（原子序数不同，外层的电子排布也不同），产生的特征X射线波长也不同。波长较长的靶材得到的衍射图峰位沿 $2\theta$ 轴有规律地被拉伸；波长较短靶材得到的衍射图峰位沿 $2\theta$ 轴有规律地被压缩。但从衍射谱中获得样品面间距d值都是相同的。

因为不同晶体内部的原子排列方式是唯一的，因此对应的衍射花样是唯一的，这也是可以进行物相分析的原因。衍射花样中衍射峰的分布规律由晶胞的大小、形状和位向决定。衍射峰强度是由原子的种类和它们在晶胞中的位置决定，但样品的质量吸收系数与入射线的波长有关，因此同一样品用不同靶材获得的图谱上的衍射峰强度也会不同。

要深入了解XRD的原理，还需清楚一个方程和一个公式：布拉格方程和谢乐公式（两者的具体原理这里不再详细解释，可自行查找相关文献）。

布拉格方程：X射线在晶体中产生衍射需要满足的基本条件，其反映了衍射线方向和晶体结构之间的关系。公式： $2d\sin\theta = n\lambda$ （ $\theta$ 为入射角， $2\theta$ 为衍射角，d为晶面间距，n为衍射级数， $\lambda$ 为X射线波长）。

谢乐公式：用于描述晶粒尺寸与衍射峰半峰宽之间的关系。公式： $D = K / \cos \theta$ （D为晶粒尺寸， $\Delta 2\theta$ 为实测衍射峰半峰高宽度， $\theta$ 为衍射角， $\lambda$ 为X射线波长，K为Scherrer常数）。

X射线衍射图谱三要素（图片来源：张杰男，锂电池研究中的X射线多晶衍射实验与分析方法综述）

### XRD测试条件

对于锂电材料，常见的衍射条件为（可作为参考）：Cu靶，管电压40kV，管电流30mA，衍射角度 $5^\circ \sim 80^\circ$ （根据所测样品材料而定），扫描速度 $1^\circ/\text{min}$ （不同的扫描速度对结果有一定影响）。

### XRD数据分析

XRD数据分析软件一般采用MDI Jade，该软件的使用手册可参考黄继武老师编写的《X射线衍射实验操作指导》。