

# 数学作业纸

(科目: )

班级:

姓名:

编号:

第

页

## 第八讲. 线形分析与物相分析.

### 衍射线的线形分析

线形: 指衍射线的强度按衍射角 $2\theta$ 的分布.

方法: 1. 图形法. 2. 曲线近似法. 3. 重心法.  $\langle 2\theta \rangle = \frac{\int 2\theta I d2\theta}{\int I d2\theta} = \frac{\sum 2\theta_i I_i}{\sum I_i}$

衍射线的强度: 1. 峰高强度 $I_p$ . 2. 积分强度 $\int I(2\theta) d2\theta$

衍射线的宽度: 1. 半高宽度 $B_{1/2} = 2\theta_2 - 2\theta_1$ . 2. 积分宽度 $B = \frac{\int I(2\theta) d2\theta}{I_p}$   
3. 方差 $\langle B^2 \rangle = \frac{\int (2\theta - \langle 2\theta \rangle)^2 I(2\theta) d2\theta}{\int I(2\theta) d2\theta}$

实测线形: 用衍射仪直接测量的线形. 影响因素: 实验条件(狭缝, 试样位置, 探测器),  $K\alpha$ 双线, 第1因素.

真实线形: 能反映试样内部情况的线形. 在微晶大小, 微应变应力限度中必须分离获得真实线形.

### $K\alpha$ 双线的分离.

$K\alpha_1$ 与 $K\alpha_2$ 的分布一样,  $K\alpha_1$ 的强度是 $K\alpha_2$ 强度的2倍.

$I_2(2\theta) = \frac{1}{2} I_1(2\theta - \Delta 2\theta)$ .  $\Delta 2\theta$ 为双线分离度.

$\therefore I(2\theta) = I_1(2\theta) + I_2(2\theta) = I_1(2\theta) + \frac{1}{2} I_1(2\theta - \Delta 2\theta)$

$2d \sin \theta = \lambda \Rightarrow \Delta 2\theta = \frac{2\Delta \lambda}{\lambda} \tan \theta$ .

分离方法: 1. 图形分离法.

2. Rachinger法. 将整个衍射线 $I$ 等分, 其中 $\Delta 2\theta$ 相当于为 $m$ 等分

$I_i = I - \frac{1}{2} I_{i+m}$ .

3. 傅里叶级数分离法