物相分析

pc. 1 2 3 4 5 6 8 9 (...
BCC 2 4 6 8 10 12 14 (16 18 20...
FCC. 3 4 8 11. (12 (16 19 20. 24...

定性相分析 目的：判断试样的物质组成

1. 获得实验的衍射图样
2. 计算d值和测定 I/I_1
3. 检索卡片.
4. 新物质相的判断

简单立方
$m=1,2,3,4,5,6,8,9,10,11,12,13,14,16,17$

$m=2,4,6,8,10,12,14,16,18,20$ 体心立方

$m=3,4,8,11,12,16,19,20,24$ 面心立方

$m=3,8,11,16,19$ 金刚石结构

$m=2$ 为主 四方结构

$m=3$ 为主 六方结构

定量相分析

目的：确定多相混合物中各相的含量.

基础：单相试样衍射线积分强度：$I=\frac{I_0\lambda^3}{32\pi R V_0^2}\cdot\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 F^2(LP)\cdot P T\frac{\varepsilon_0}{2\mu}$

试样为 α 相与 β 相的双相混合物时，衍射线的强度与其体积分数 C_α 和 C_β 有关，分别为：

$$I_\alpha=\frac{I_0\lambda^3}{32\pi R V_\alpha^2}\cdot\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2[F^2(LP)PT]_\alpha\cdot\frac{C_\alpha\varepsilon_0}{2\mu_\alpha}$$

$$I_\beta=\frac{I_0\lambda^3}{32\pi R V_\beta^2}\cdot\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2[F^2(LP)PT]_\beta\cdot\frac{C_\beta\varepsilon_0}{2\mu}$$

μ 为混合物的线吸收系数.

1. 外标法：以外部试样为标样（纯的待测物质）

$$I_\alpha=k\frac{C_\alpha}{\mu},\quad \mu=\frac{\sum\mu_i C_i}{\sum C_i},\quad C_\alpha=\frac{W_\alpha/\rho_\alpha}{\sum W_i/\rho_i},\quad \mu=\frac{\mu^*}{\sum W_i/\rho_i}$$

$$\therefore I_\alpha=k\frac{W_\alpha}{\rho_\alpha\cdot\mu^*}$$ 对于纯 α 相试样，$I_{\alpha_0}=k\frac{1}{\rho_\alpha\cdot\mu_\alpha^*}$

$$\therefore\frac{I_\alpha}{I_{\alpha_0}}=\frac{\mu_\alpha^*}{\mu^*}\cdot W_\alpha$$ μ^* 为混合物质量吸收系数.

$$\mu^*=W_\alpha\mu_\alpha^*+W_\beta\mu_\beta^*=W_\alpha(\mu_\alpha^*-\mu_\beta^*)+\mu_\beta^*$$

$$\therefore\frac{I_\alpha}{I_{\alpha_0}}=\frac{W_\alpha\mu_\alpha^*}{W_\alpha(\mu_\alpha^*-\mu_\beta^*)+\mu_\beta^*}$$ （μ_α^* 与 μ_β^* 均为常数）