

数学作业纸

(科目:)

班级:

姓名:

编号:

第 2 页

K值的获得途径: ① 已知成分 ② 参比强度 $K = \frac{I_s/I_c}{I_b/I_c}$ ③ 理论计算

6. 用内标法分析, Al_2O_3 为标准物, 它与 $CaCO_3$, $BaSO_4$ 按 20:80 混合时衍射线强度比 $I_{CaCO_3} = I_{BaSO_4} = I_{Al_2O_3} = 4:5.2=1$. 求 $CaCO_3$ 和 $BaSO_4$ 的含量. 已知 $CaCO_3$ 与 $BaSO_4$ 的参比强度分别为 2.00 和 2.60.

$$\text{解: } \frac{I_{CaCO_3}}{I_{Al_2O_3}} = K \cdot \frac{W_{CaCO_3}}{W_{Al_2O_3}} \quad W_{Al_2O_3} = \frac{20}{20+80} \times 100\% = 20\%$$

$$K = \frac{I_{CaCO_3}/I_{Al_2O_3}}{I_{BaSO_4}/I_{Al_2O_3}} = \frac{2.00}{5.2} = \frac{1}{2.6}, \therefore W_{CaCO_3} = \frac{I_{CaCO_3}}{I_{Al_2O_3}} \cdot \frac{W_{Al_2O_3}}{K} = 4 \times 0.5 \times 20\% = 40\%$$

$$W_{CaCO_3} = \frac{W_{CaCO_3}}{1 - W_{Al_2O_3}} = \frac{40\%}{1 - 20\%} = 50\% \quad \therefore CaCO_3 \text{ 占 } 50\% \\ BaSO_4 \text{ 占 } 50\%$$

7. Ag, Fe 的混合粉末, 固溶度极小. 计算在 2θ 属于 $[45^\circ, 110^\circ]$ 范围内衍射线条数. $\lambda = 1.973 \text{ \AA}$. Fe 为 BCC 结构, $a = 2.866 \text{ \AA}$. Ag 为 FCC 结构, $a = 4.086 \text{ \AA}$.

解: 立方晶系中, $d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$ 为晶面 (hkl) 的面间距.

$$\text{布拉格公式 } 2d \sin \theta = \lambda, \therefore \sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{4d^2} = \frac{\lambda^2}{4a^2} (h^2 + k^2 + l^2) = km$$

$$\because 2\theta \in [45^\circ, 110^\circ] \therefore \theta \in [22.5^\circ, 55^\circ], \sin^2 \theta \in [0.146, 0.671]$$

$$\text{对 Fe, 为 BCC 结构, } K_1 = \frac{\lambda^2}{4a^2}, \frac{1}{K_1} = \frac{4a^2}{\lambda^2} = \frac{4 \times 2.866^2}{1.973^2} = 8.44$$

$$\therefore m = h^2 + k^2 + l^2 = \frac{\sin^2 \theta}{K_1} \in [1.232, 5.663]$$

对于 BCC 结构, 由消光条件知, 当 $h+k+l = \text{偶数}$ 时, 才可能产生衍射线

$\therefore (hkl)$ 为 $(110), (200), (211), (220) \dots$

对应的 m 值为 $2, 4, 6, 8 \dots$

\therefore Fe 可产生衍射线的条数为 2 条.