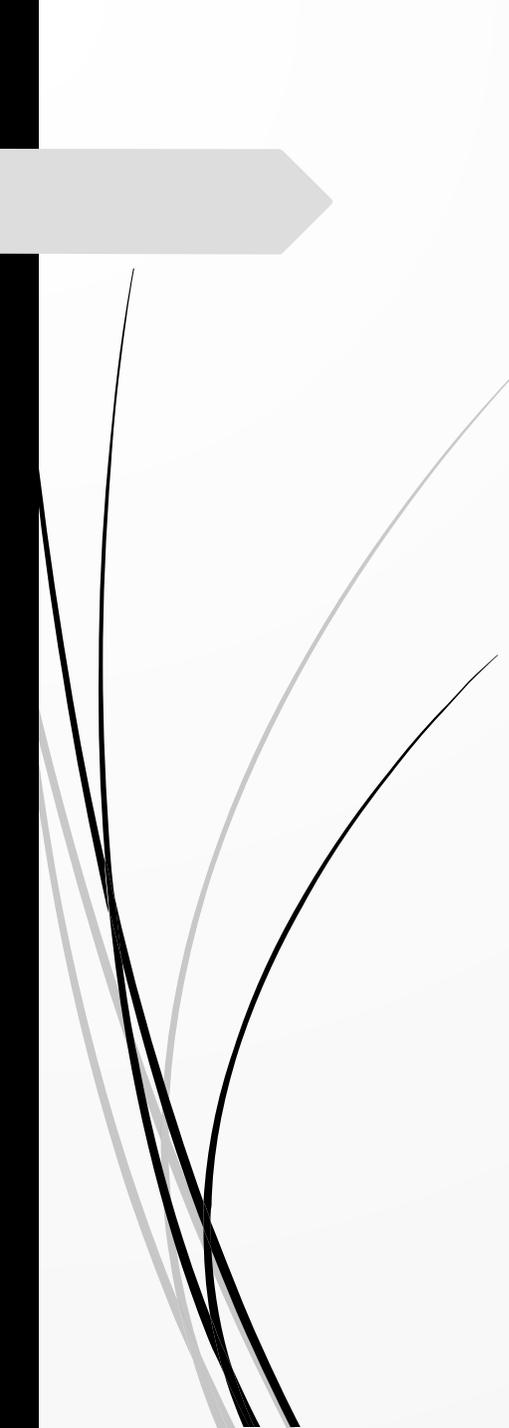




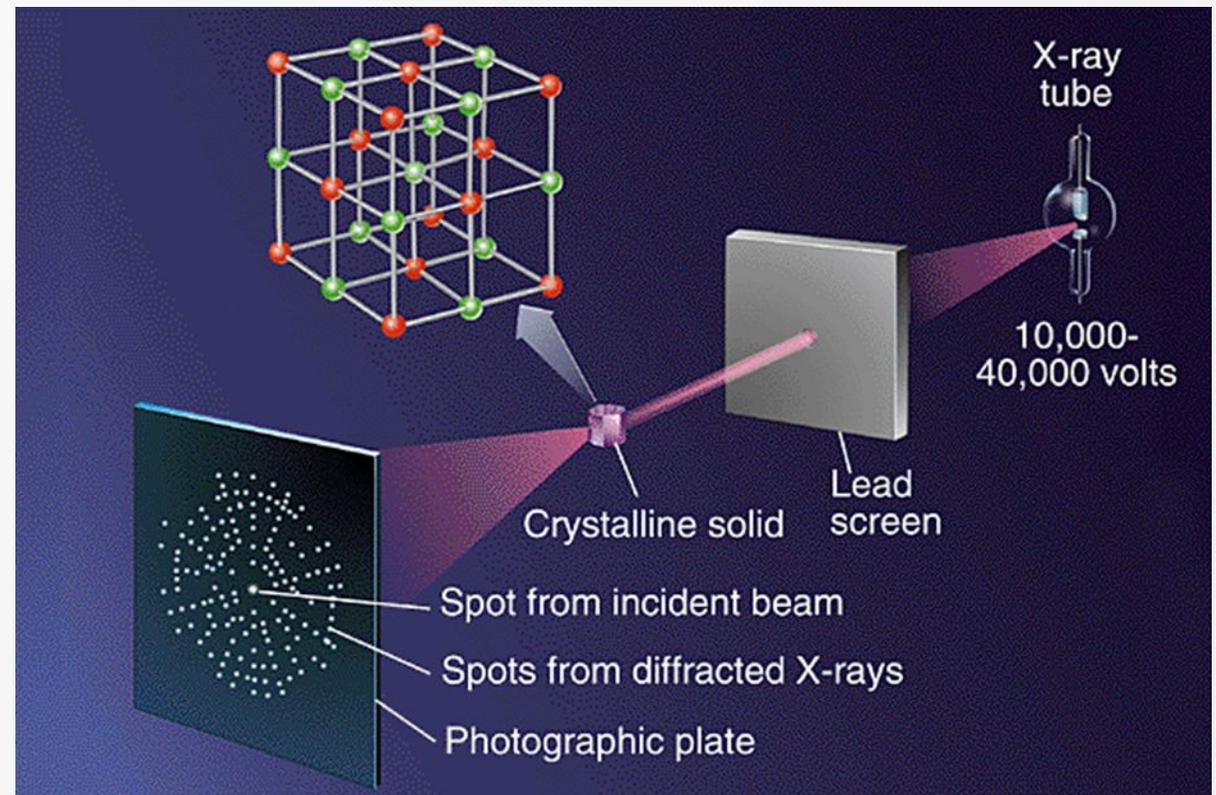
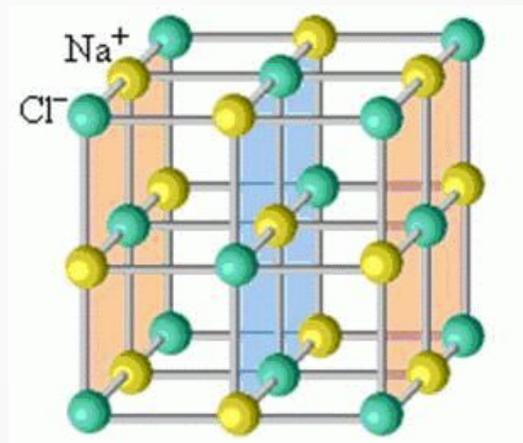
Рентгенофазовый анализ (РФА or XRD по Angliiski)

- качественный и количественный анализ
минералогического состава материалов

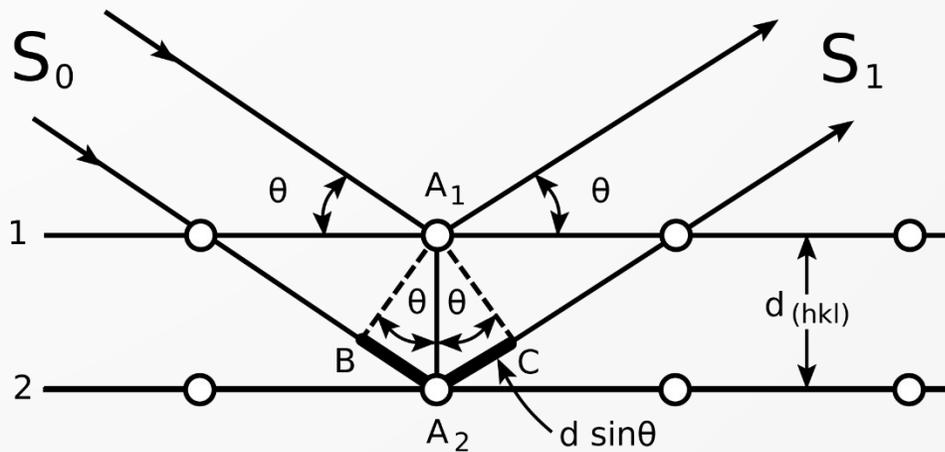


Рентгеноструктурный анализ
позволяет определить формы,
размера и типа элементарной
ячейки, анализ симметрии
кристалла, координат атомов в
пространстве, степени
совершенства кристаллов и наличия
в них дефектов, тип твердых
растворов и т.п.

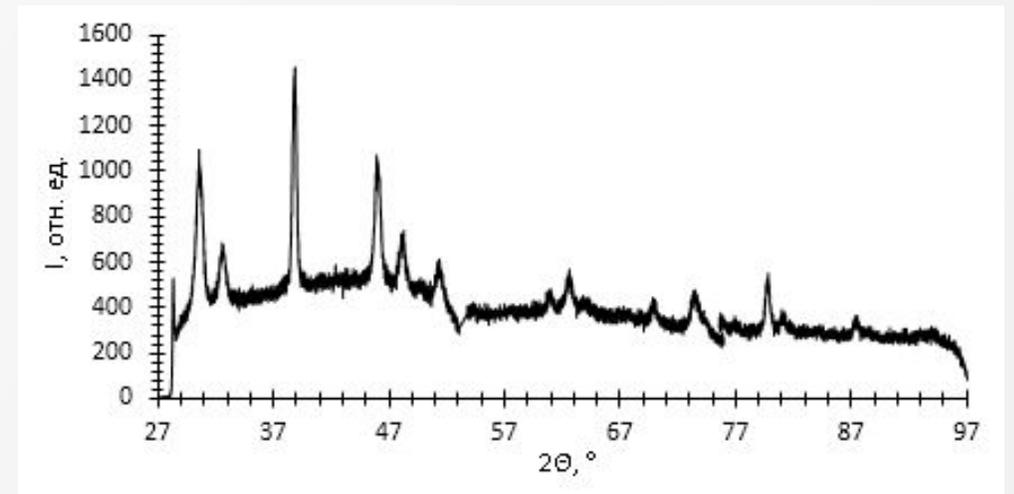
Дифракционная картина — рентгенограмма вещества позволяет определить кристаллическую структуру вещества. Её можно получить, направив на исследуемый объект пучок рентгеновских лучей.



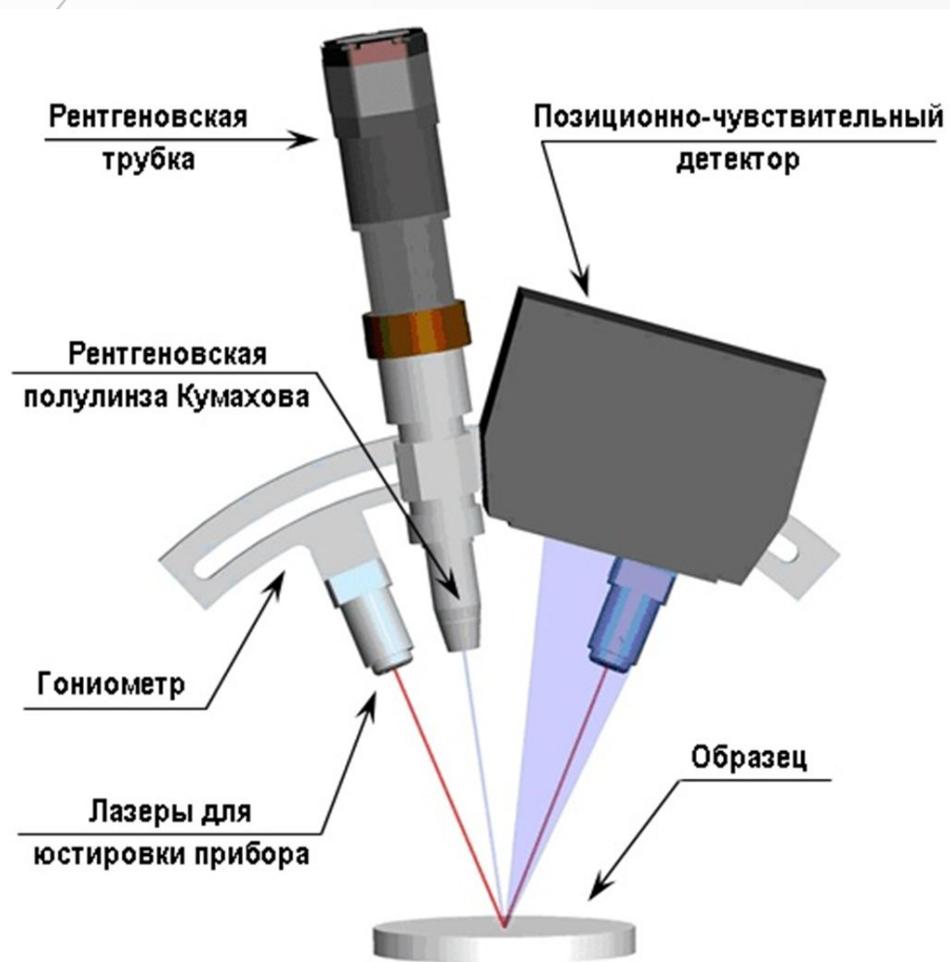
РФА позволяет идентифицировать вещества в смеси по набору его межплоскостных расстояний (d) и относительным интенсивностям (I) – соответствующим линиям на рентгенограмме.



Условие Вульфа-Брэгга: $2d \cdot \sin \theta = n \cdot \lambda$



Гониометр позволяет точно определить угол дифракции и интенсивность рентгеновского излучения



Рентгеновский дифрактометр
Shimadzu XRD-6000

Качественный фазовый анализ проводят сравнением экспериментальных значений межплоскостных расстояний и относительных интенсивностей с эталонными рентгенограммами. С помощью рентгенофазового анализа можно определить состав неметаллических включений в металлах (оксидов, сульфидов, нитридов, карбидов), распределение легирующих элементов в многофазных сплавах.

Количественный фазовый анализ основан на зависимости интенсивности дифракционных отражений от содержания фазы в исследуемом многофазном поликристаллическом образце.

$K_2LuZr(PO_4)_3$	dÅ	Int	hkl	dÅ	Int	hkl
Potassium Lutetium Zirconium Phosphate	5.937	336	111	1.7923	86	441
	5.146	6	200	1.7659	64	530
	4.601	489	210	1.7409	8	351
	4.201	269	211	1.7161	11	442
	3.639	8	220	1.6928	32	160
Rad. CuK α_1 λ 1.540629 Filter Mono d-sp Diff.	3.431	103	221	1.6703	214	352
Cut off 17.7 Int. Diffractometer I/I_{cor} 3.9	3.255	999	130	1.6281	36	260
Ref. Baumer, V., State Scientific Inst., Inst. for Single Crystals, Kharkiv, Ukraine, <i>ICDD Grant-in-Aid</i> , (2007)	3.104	189	311	1.6081	65	261
Sys. Cubic S.G. P2 ₁ 3 (198)	2.972	3	222	1.5888	69	541
a 10.29727(5) b c A C	2.855	89	230	1.5701	9	533
α β γ Z 4 mp	2.751	973	231	1.5523	21	622
Ref. Ibid.	2.574	25	400	1.5350	96	452
	2.497	57	322	1.5181	82	361
D_x 3.828 D_m SS/FOM F ₃₀ =123(.008,31)	2.4265	7	330	1.4861	38	444
	2.3617	31	331	1.4710	47	362
Color Light gray, colorless	2.3022	7	240	1.4562	79	543
Pattern taken at room temperature. Compound was synthesized and provided by Zatovskii, I., Kiev National Univ., Ukraine. Cationic composition was refined from X-ray single crystal data. Pattern was taken using a glass sample holder of 20x20x1 mm. LaB ₆ used as external standard. Single-crystal data used. PSC: cP76.	2.2466	55	421	1.4419	35	551
	2.1947	13	332	1.4143	36	641
	2.1015	216	422	1.4012	18	271
	2.0592	60	340	1.3758	21	462

Достоинства РФА

- **высокая достоверность метода;**
- **метод прямой**, то есть дает сведения непосредственно о структуре вещества;
- **анализ проводят без разрушения исследуемого образца;**
- широкое применение рентгенофазового анализа объясняется хорошо разработанной теорией, простотой приготовления образцов, сохранением образцов без изменения после исследования, возможностью использования поликристаллического материала.

Спасибо
за
внимание

