

<<多晶材料X射线衍射>>

图书基本信息

书名：<<多晶材料X射线衍射>>

13位ISBN编号：9787502460273

10位ISBN编号：7502460276

出版时间：2012-9

出版时间：冶金工业出版社

作者：黄继武，李周 编著

页数：283

字数：446000

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

## <<多晶材料X射线衍射>>

### 内容概要

《多晶材料X射线衍射——实验原理方法与应用》由黄继武和李周编著，内容分为4部分：(1)数据测量方法：介绍了粉末X射线衍射实验设备、样品制备方法及技巧；(2)数据处理软件操作：讲解X射线衍射实验数据处理软件Jade的基本操作方法；(3)X射线衍射传统分析方法：物相定性分析、定量分析、结晶度、点阵常数精确测量、晶粒尺寸与微观应变、残余应力计算；(4)Rietveld全谱拟合精修方法：通过Jade的精修功能模块和Maud软件对Rietveld方法的原理、实验方法、数据处理方法及实验技巧进行详细讲解。

实用性、可操作性和技巧性是本书的特点。

实验原理根据实用原则进行简单讲述，实验操作步骤具体，注意事项全面，对于不具备X射线衍射实验技术知识的读者，可作为入门教材；对于有一定基础的读者及仪器操作人员，通过阅读本书将对实验技术水平的提高很有帮助。

《多晶材料X射线衍射——

实验原理方法与应用》内容全面，用词浅显易懂，各章安排有序而又独立，作为参考书可根据需要选阅相应章节内容。

本书可作为本科生、硕士生和博士生的实验教学用书，也可作为专业技术人员和仪器操作人员的工具书。

## &lt;&lt;多晶材料X射线衍射&gt;&gt;

## 书籍目录

- 1 X射线衍射仪的操作与数据测量
  - 1.1 多晶X射线衍射仪的基本原理与构造
    - 1.1.1 X射线发生器
    - 1.1.2 测角仪
    - 1.1.3 X射线强度测量记录系统
  - 1.2 X射线辐射防护
  - 1.3 X射线衍射仪使用的注意事项
  - 1.4 多晶衍射样品的制备方法
    - 1.4.1 块体样品的制备
    - 1.4.2 粉末样品的制备
    - 1.4.3 平板试样制备的其它一些问题
  - 1.5 测量方式和实验参数的选择
    - 1.5.1 X射线波长的选择
    - 1.5.2 X射线的单色方法选择
    - 1.5.3 管压管流选择
    - 1.5.4 狭缝的选择
    - 1.5.5 扫描参数选择
  - 1.6 Rigaku D/max 2500型X射线衍射仪操作实例
- 2 Jade的基本操作
  - 2.1 Jade的功能
  - 2.2 Jade的用户界面和基本功能操作
    - 2.2.1 窗口功能
    - 2.2.2 菜单功能
    - 2.2.3 主工具栏和编辑工具栏
    - 2.2.4 弹出菜单
    - 2.2.5 基本显示操作按钮
    - 2.2.6 状态栏
  - 2.3 程序设置
    - 2.3.1 显示设置(display)
    - 2.3.2 仪器参数 (Instrument)
    - 2.3.3 报告内容设置(Report)
    - 2.3.4 个性化设置 (Misc)
  - 2.4 数据文件格式与读入文件
    - 2.4.1 读入衍射数据文件
    - 2.4.2 读入文件的参数设置
  - 2.5 建立PDF数据库检索文件
    - 2.5.1 建立PDF卡片索引的方法
    - 2.5.2 建立ICSD数据库索引
  - 2.6 寻峰
    - 2.6.1 寻峰
    - 2.6.2 寻峰报告
  - 2.7 图谱拟合
    - 2.7.1 拟合参数设置
    - 2.7.2 手动拟合方式
    - 2.7.3 拟合函数和误差

## &lt;&lt;多晶材料X射线衍射&gt;&gt;

- 2.7.4 全谱拟合
- 2.7.5 单峰拟合
- 2.7.6 分段拟合
- 2.7.7 拟合报告
- 2.7.8 拟合数据的输出
- 2.8 打印预览
  - 2.8.1 安装打印机
  - 2.8.2 打印预览窗口
  - 2.8.3 布局设置
- 3 Jade的高级操作
  - 3.1 多谱操作
    - 3.1.1 多谱读入
    - 3.1.2 多谱操作
    - 3.1.3 多谱比较
    - 3.1.4 多谱显示与打印
    - 3.1.5 多谱合并
    - 3.1.6 多谱拟合
    - 3.1.7 多谱拟合计算结晶度
  - 3.2 根据d值计算衍射面指数
  - 3.3 检索PDF光盘
  - 3.4 根据晶体结构计算XRD谱图
- 4 物相定性分析
  - 4.1 物相的含义
  - 4.2 物相检索原理
  - 4.3 ICDD PDF卡片
  - 4.4 PDF卡片的检索与匹配
  - 4.5 物相定性分析的实验方法
    - 4.5.1 图谱扫描
    - 4.5.2 Jade物相检索的条件设置
    - 4.5.3 Search/Match Display窗口
    - 4.5.4 确定物相
    - 4.5.5 根据强峰检索物相
    - 4.5.6 物相检索结果的输出
  - 4.6 物相定性分析实例
    - 4.6.1 Al-Zn-Mg合金的物相分析
    - 4.6.2 RuO<sub>2</sub>的物相检索
    - 4.6.3 一个粘土矿物物相检索实例
  - 4.7 X射线衍射物相检索的特点和局限性
    - 4.7.1 粉末法X射线衍射物相检索的特点
    - 4.7.2 粉末法X射线衍射物相分析的局限性
- 5 传统物相定量方法
  - 5.1 质量分数与衍射强度的关系
  - 5.2 K值法定量
    - 5.2.1 K值法原理
    - 5.2.2 K值法定量的实验方法
  - 5.3 绝热法
    - 5.3.1 绝热法定量的原理

## &lt;&lt;多晶材料X射线衍射&gt;&gt;

- 5.3.2 绝热法定量的实验方法
- 5.4 定量分析实例
  - 5.4.1 氧化铁的质量分数计算(绝热法)
  - 5.4.2 Al-Zn-Mg合金中析出相MgZn<sub>2</sub>的质量分数计算(绝热法)
  - 5.4.3 未知物相的RIR值测量和定量分析
  - 5.4.4 K值法定量分析实例
  - 5.4.5 含非晶相和未知相的物相定量实例
- 5.5 传统定量分析的优缺点
  - 5.5.1 传统定量分析的优点
  - 5.5.2 传统定量分析的缺点
- 6 结晶度计算
  - 6.1 结晶度的概念
  - 6.2 结晶度的测量方法
    - 6.2.1. 绝对结晶度测量
    - 6.2.2. 相对结晶度的测量
  - 6.3 结晶度计算实例
    - 6.3.1 用纯样法计算陶瓷析晶过程中的结晶度
    - 6.3.2 差异法求绝对结晶度
    - 6.3.3 大米淀粉相对结晶度计算
    - 6.3.4 陶瓷材料相对结晶度计算
  - 6.4 其它结晶度计算方法
    - 6.4.1 石英的结晶度指数
    - 6.4.2 石墨化度测量
- 7 点阵常数的精密化计算
  - 7.1 点阵常数精确计算的原理与误差来源
    - 7.1.1 衍射仪法测量点阵常数的原理
    - 7.1.2 衍射仪测量点阵常数的误差来源
  - 7.2 内标法校正仪器误差
    - 7.2.1 实验方法
    - 7.2.2 内标法的使用方法及优缺点
    - 7.2.3 内标法的应用实例
  - 7.3 外标法校正仪器误差
    - 7.3.1 外标法原理
    - 7.3.2 实验方法
    - 7.3.3 外标法校正和点阵常数精确计算实例
  - 7.4 精确计算点阵常数的注意事项
  - 7.5 实例分析
    - 7.5.1 ZrB<sub>2</sub>-ZrB双相的点阵常数精确计算
    - 7.5.2 未知物相的点阵常数精确计算
- 8 晶粒大小及微观应变的计算
  - 8.1 材料微结构与衍射峰形的关系
  - 8.2 测量仪器半高宽的方法
  - 8.3 计算微晶尺寸与微应变的方法
  - 8.4 实例分析
    - 8.4.1 CoAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>尖晶石微晶尺寸和比表面积的计算
    - 8.4.2 热处理对CoAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>尖晶石微晶尺寸与微观应变的影响
  - 8.5 峰形分析的注意事项

## &lt;&lt;多晶材料X射线衍射&gt;&gt;

## 9 残余应力测量

## 9.1 残余应力

## 9.2 残余应力的测量原理

## 9.3 实验方法

## 9.3.1 样品准备

## 9.3.2 仪器与数据测量

## 9.3.3 沿深度方向的应力梯度测量：

## 9.3.4 测量图谱

## 9.3.5 数据处理

## 9.4 计算实例

## 9.4.1 测量铝合金抛丸处理后表面的残余应力

## 9.4.2 测量WC-Co硬质合金深冷处理后表面应力

## 9.4.3 轴承钢沿深度方向的残余应力分布

## 10 Rietveld全谱拟合精修--Jade

## 10.1 Rietveld结构精化方法

## 10.2 全谱拟合精修过程

## 10.3 物相的读入

## 10.3.1 结构相与非结构相

## 10.3.2 物相的添加

## 10.4 全局变量精修

## 10.4.1 背景精修

## 10.4.2 无定形峰精修

## 10.4.3 样品和仪器校正

## 10.5 物相参数精修

## 10.5.1 峰形函数和峰形参数精修

## 10.5.2 半高宽精修

## 10.5.3 其它非原子参数精修

## 10.6 物相原子参数精修

## 10.7 精修控制

## 10.7.1 全局精修控制

## 10.7.2 物相精修控制

## 10.8 精修显示与结果输出

## 10.8.1 精修指标

## 10.8.2 精修报告

## 10.8.3 打印精修报告

## 10.9 全谱拟合精修应用实例

## 10.9.1 多相混合物的定量分析

## 10.9.2 含择优取向多相精修

## 10.9.3 含非晶相的多相精修

## 10.9.4 加内标的物相精修定量

## 10.9.5 晶格常数精修

## 11 Rietveld全谱拟合精修--Maud

## 11.1 Maud的功能与安装

## 11.1.1 Maud的功能

## 11.1.2 软件下载与安装

## 11.2 软件自带的例子

## 11.3 简单精修

## <<多晶材料X射线衍射>>

11.4 调整精修参数

11.5 含非晶相的样品处理

11.6 含织构样品的定量分析

参考文献

## &lt;&lt;多晶材料X射线衍射&gt;&gt;

## 章节摘录

版权页：插图：对于有机物和高聚物，结晶部分的成分与非晶成分可能基本相同， $k$ 值接近1，可以忽略 $k$ 值的影响。

而对于陶瓷、玻璃和其他无机材料，从玻璃态中的析出物具有不同的化学组成和物相结构， $k$ 值不可以视为一成不变的系数。

例如，在上面实验中的陶瓷材料，在不同的温度下可能析出不同的物相，在低温下的晶相主要是 $ZrO_2$ 和 $ZrSiO_4$ ，温度升高时，还会析出方石英、菱石英和石英。

当析出不同的晶相时，非晶体（剩余部分）的化学组成也随之改变。

当然 $k$ 值也随之改变。

$k$ 值的改变势必造成结果的不准确性。

结晶度的计算方法多种多样，不同原理和实验方法取得的结果具有不可比性。

XRD结晶度计算方法也有很多。

以上介绍的只是一些简单的分峰方法。

结晶度不能简单地理解为结晶相的相对含量。

它既不是结晶相的质量分数也不是体积分数。

如果需要计算结晶相的质量分数或体积分数，应当使用定量分析方法。

如果一个样品中含有多个结晶相，可以用 $K$ 值法将各种结晶相的质量分数都计算出来，剩下的就是非晶相的质量分数。

6.4其他结晶度计算方法 以上实验中所涉及的结晶度着重于非晶相和结晶相的相对比例这一层面的意思，其特点是试样中含有明显的非晶和结晶部分，在XRD中有明显的非晶散射峰。

结晶度另一层面的意思是结晶的完整性。

如黏土矿物一般都是结晶不完整的。

高岭土、蒙脱土结构中都含有“不确定”的部分。

这种情况的结晶度计算一般根据峰形、峰宽、峰位来确定。

高岭土有无序和有序两种，无序和有序高岭土的结构非常相似，只是各层平行 $L$ 轴任意排列。

其典型的三斜角也就由结晶完好时的 $91.6^\circ$ 转变为 $90^\circ$ ，成为假单斜晶系。

亨利（Hinckley，1963）用高岭石的（110）和（111）晶面反射弧度来衡量其结晶度。



<<多晶材料X射线衍射>>

编辑推荐

《普通高等教育"十二五"规划教材:多晶材料X射线衍射:实验原理、方法与应用》可作为本科生、硕士生和博士生的实验教学用书,也可作为专业技术人员和仪器操作人员的工具书。

<<多晶材料X射线衍射>>

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>