



Факультет Химии НИУ «ВШЭ»

ИОНХ РАН



Определение фазового состава наноматериалов методом рентгеновской дифракции

Участник НУГ, студентка 2 курса Шейченко Е.Д.

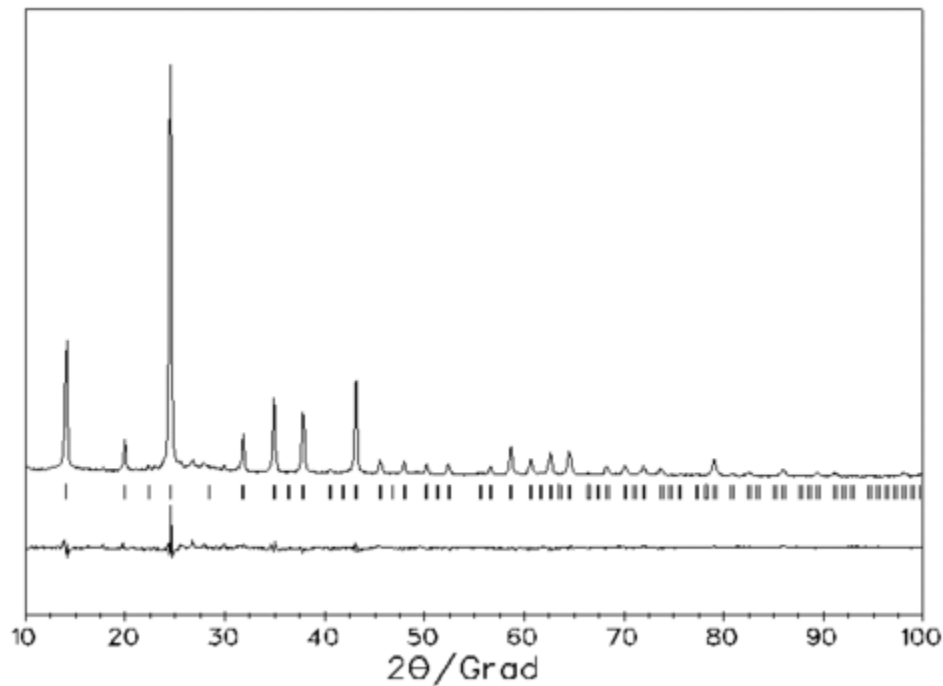


Дифрактограмма

• Фазовый анализ – какие пики к каким фазам относятся. Может быть качественным и количественным.

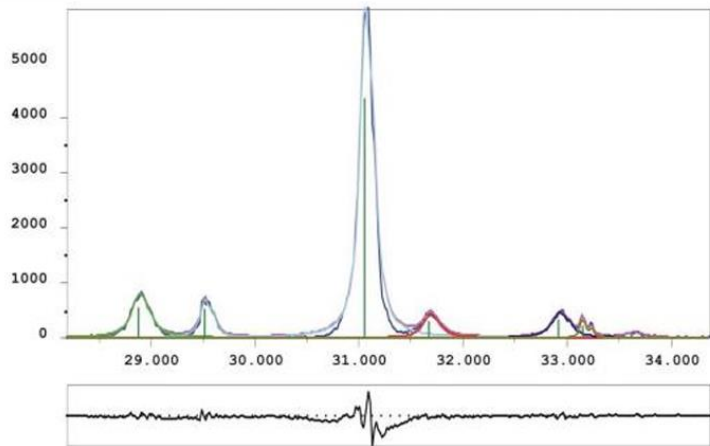
2. Анализ формы пиков → размер кристаллитов, микронапряжения

• 3. Анализ положения и интенсивностей пиков, $I(F2)$ → структура (параметры решетки, Ритвельд, радиальная функция распределения)





Профильный анализ



Профильный анализ проводят с целью определения основных параметров рефлексов. Уточняемые параметры:

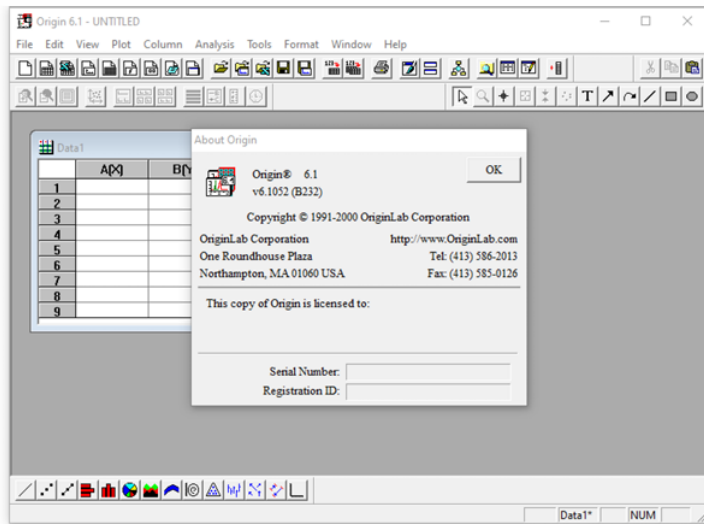
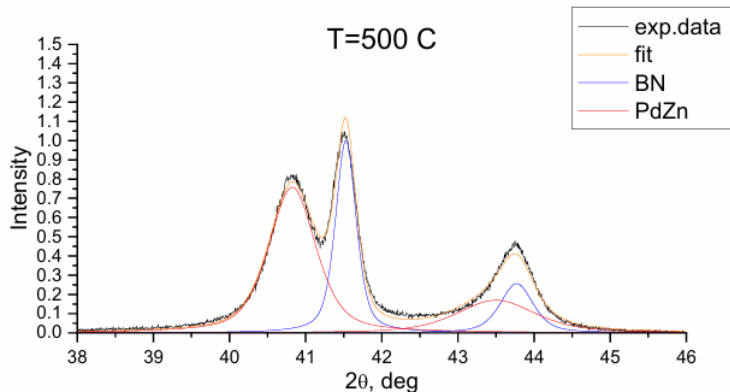
- Функция фона (+гало)
- Профильные функции рефлексов
- Положения, полуширины, интенсивности рефлексов

2 основных подхода:

- Анализ формы отдельных пиков
- Полнопрофильный анализ

Профильный анализ

Если пики перекрываются, их нужно разделить.

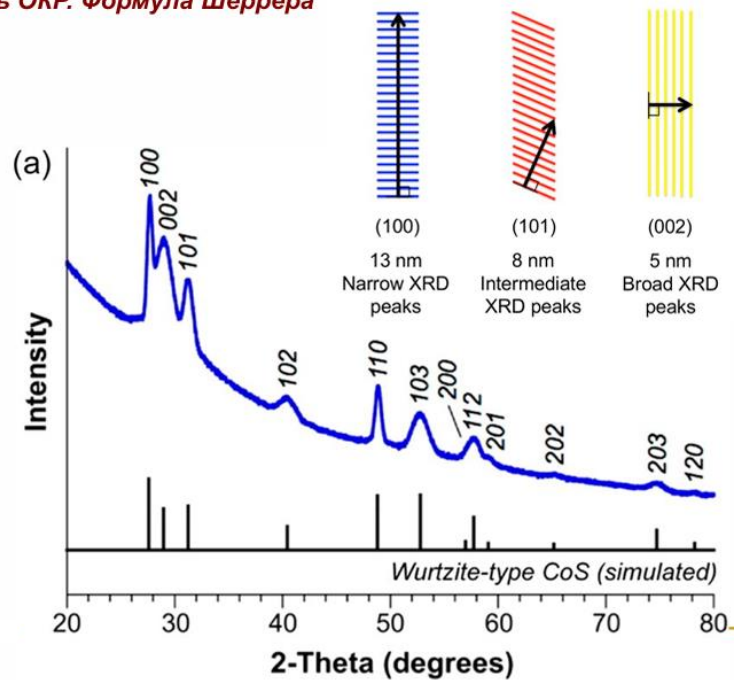


QtiPlot и SciDAVis (свободные клоны Origin)



Основные вклады в уширение

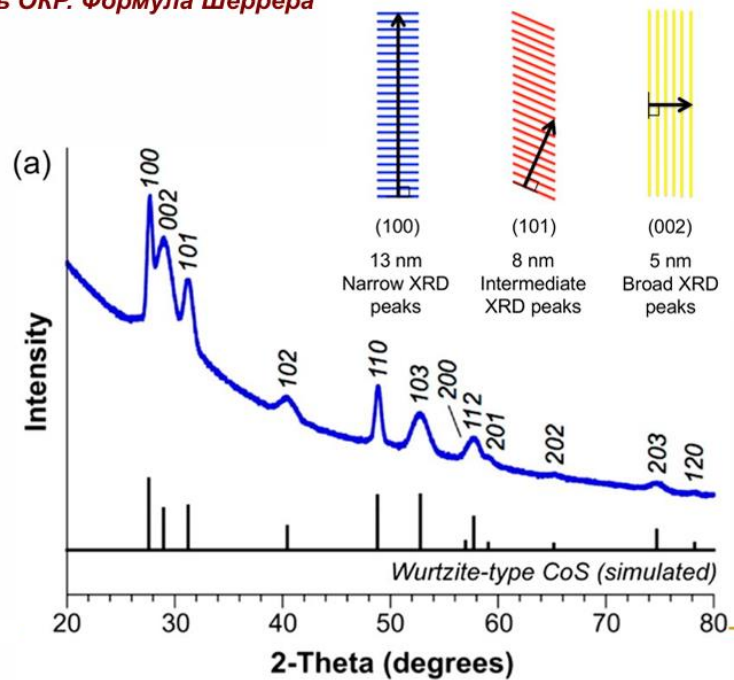
Дисперсность ОКР. Формула Шеррера





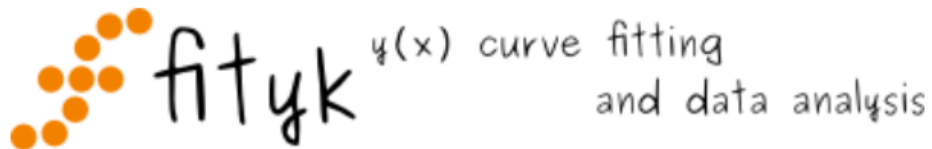
Основные вклады в уширение

Дисперсность ОКР. Формула Шеррера





Программа для профильного анализа дифрактограмм



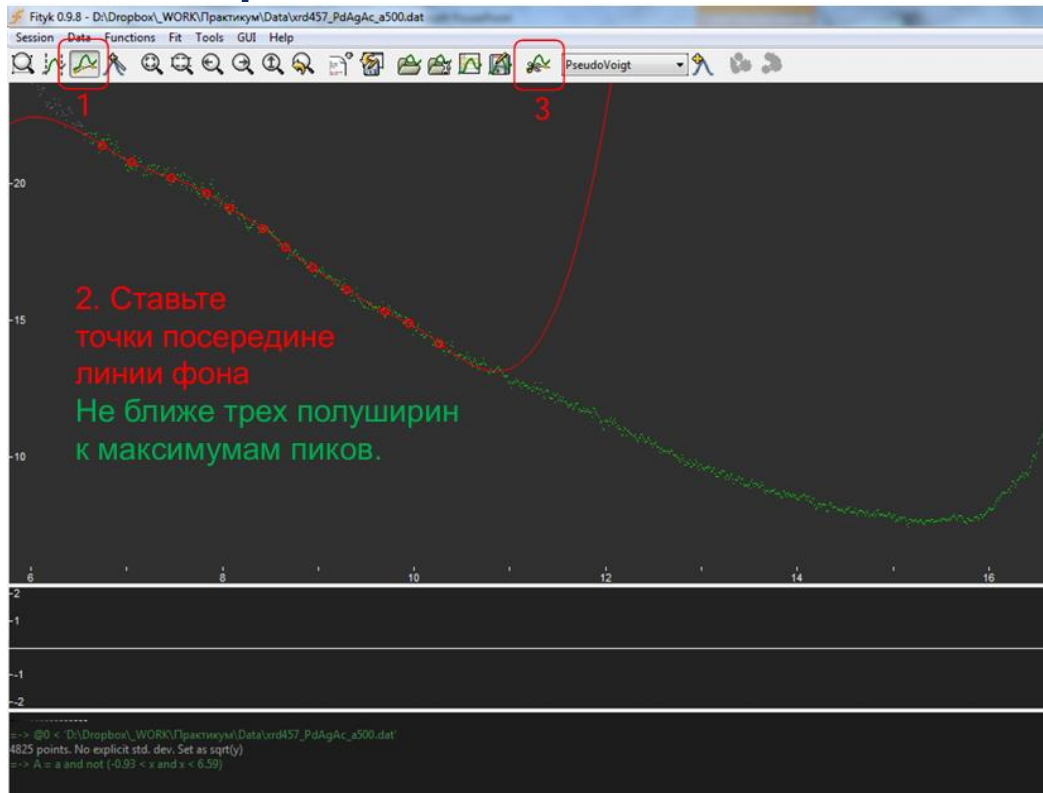
 MS Windows: [fityk-1.3.1-setup.exe](#)

 Mac OS X (10.6 or later): [fityk-1.3.1-osx.zip](#)

 Linux: binary packages are available [in many distros](#) and on [Flathub](#).

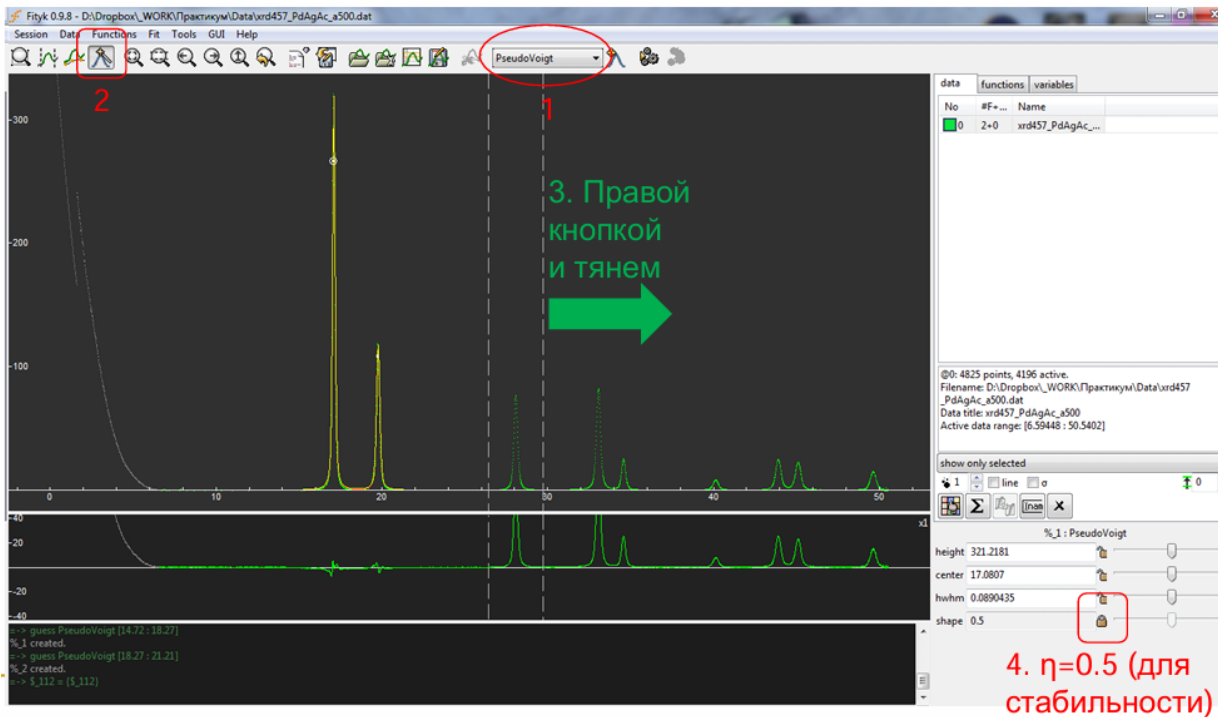


Алгоритм: вычитаем фон



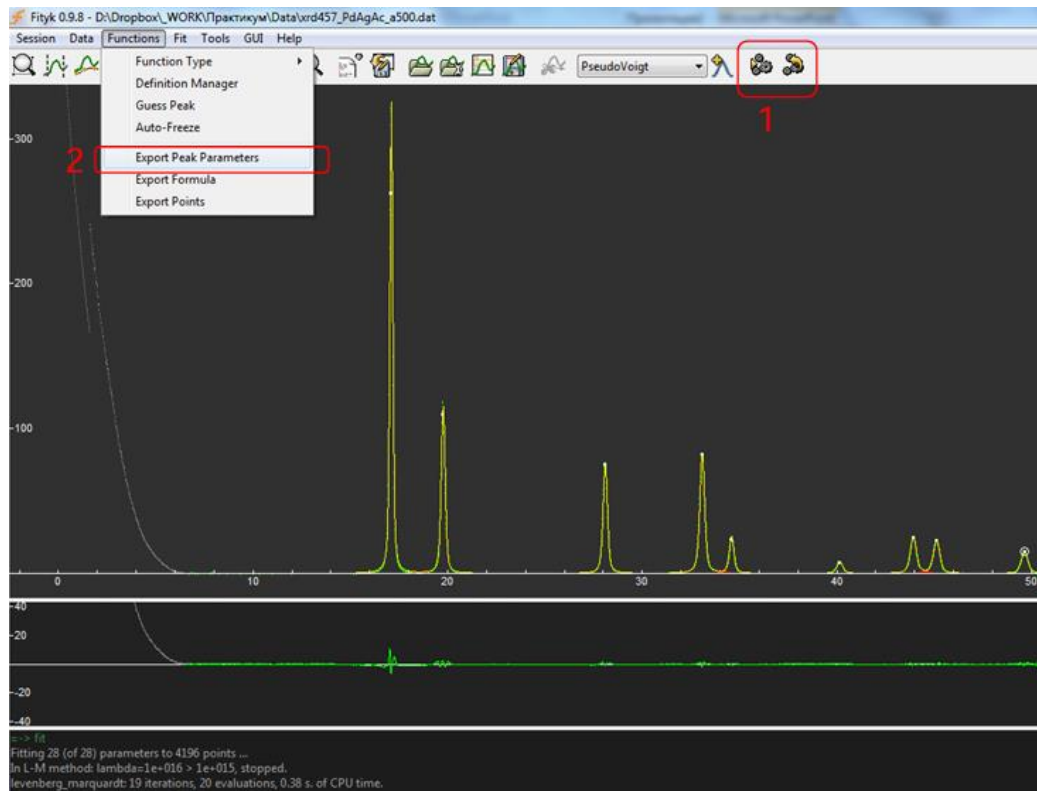


Алгоритм: добавляем пики



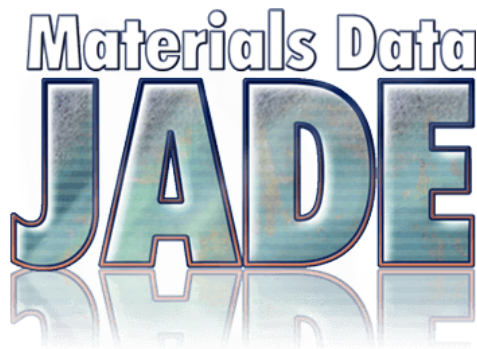


Алгоритм: экспорт результатов





Программы для анализа фазового состава:





Факультет Химии НИУ «ВШЭ»

ИОНХ РАН



Спасибо за внимание!