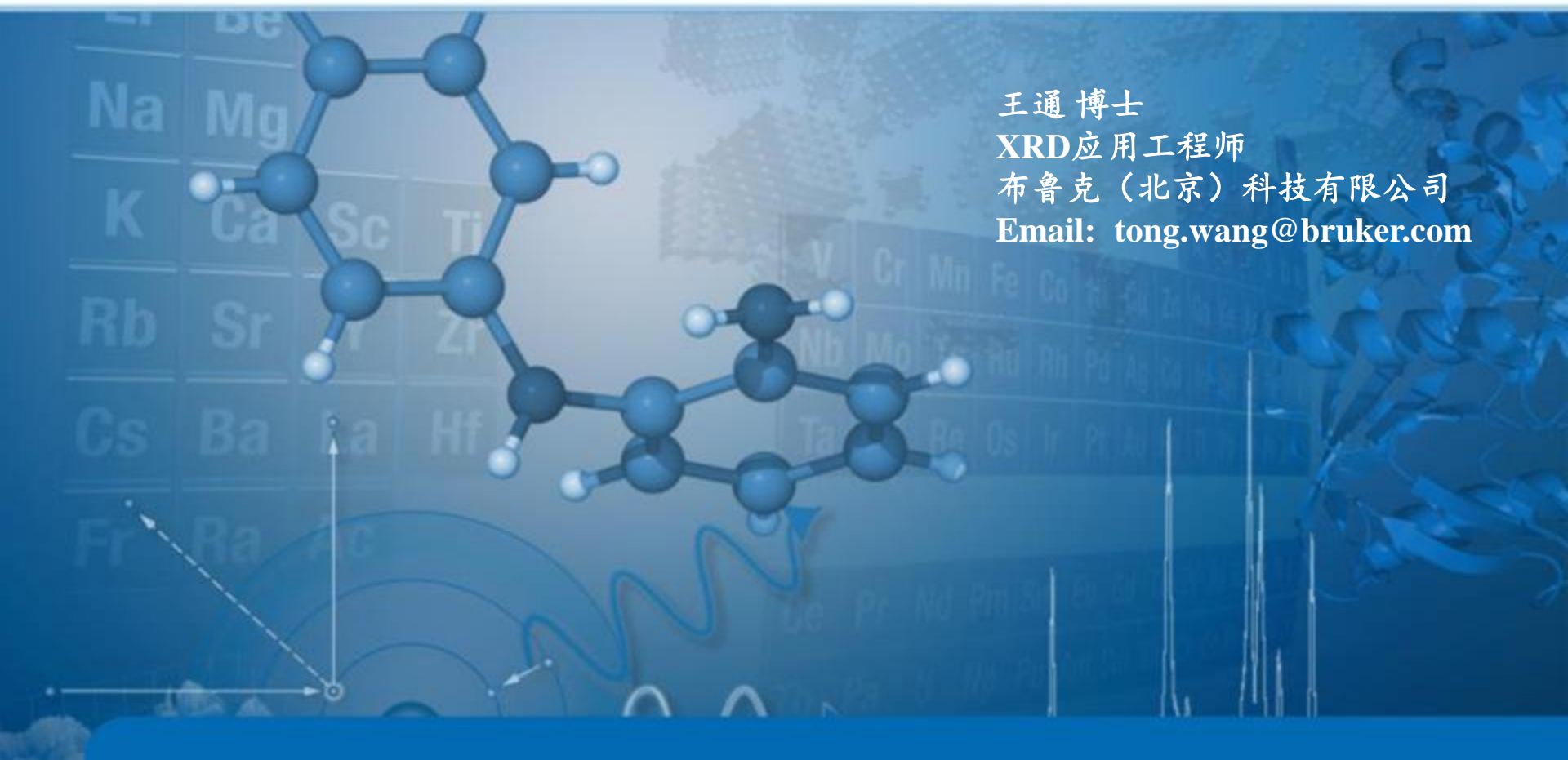




X射线衍射实验技术-6

XRD数据质量的定义

王通 博士
XRD应用工程师
布鲁克（北京）科技有限公司
Email: tong.wang@bruker.com



1. 峰位

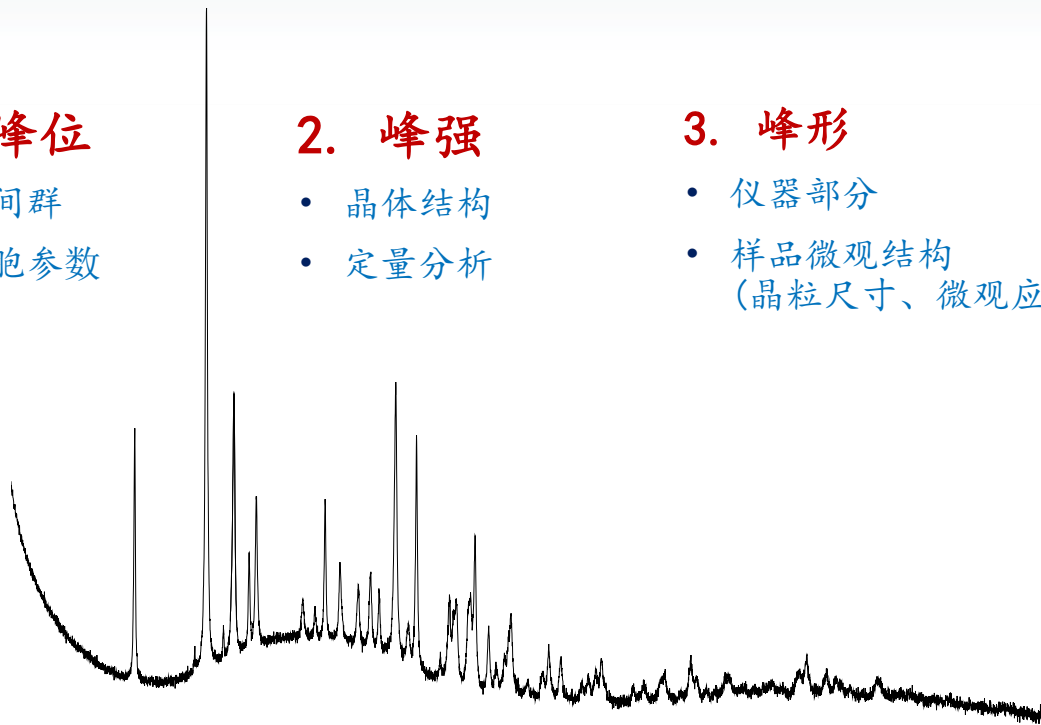
- 空间群
- 晶胞参数

2. 峰强

- 晶体结构
- 定量分析

3. 峰形

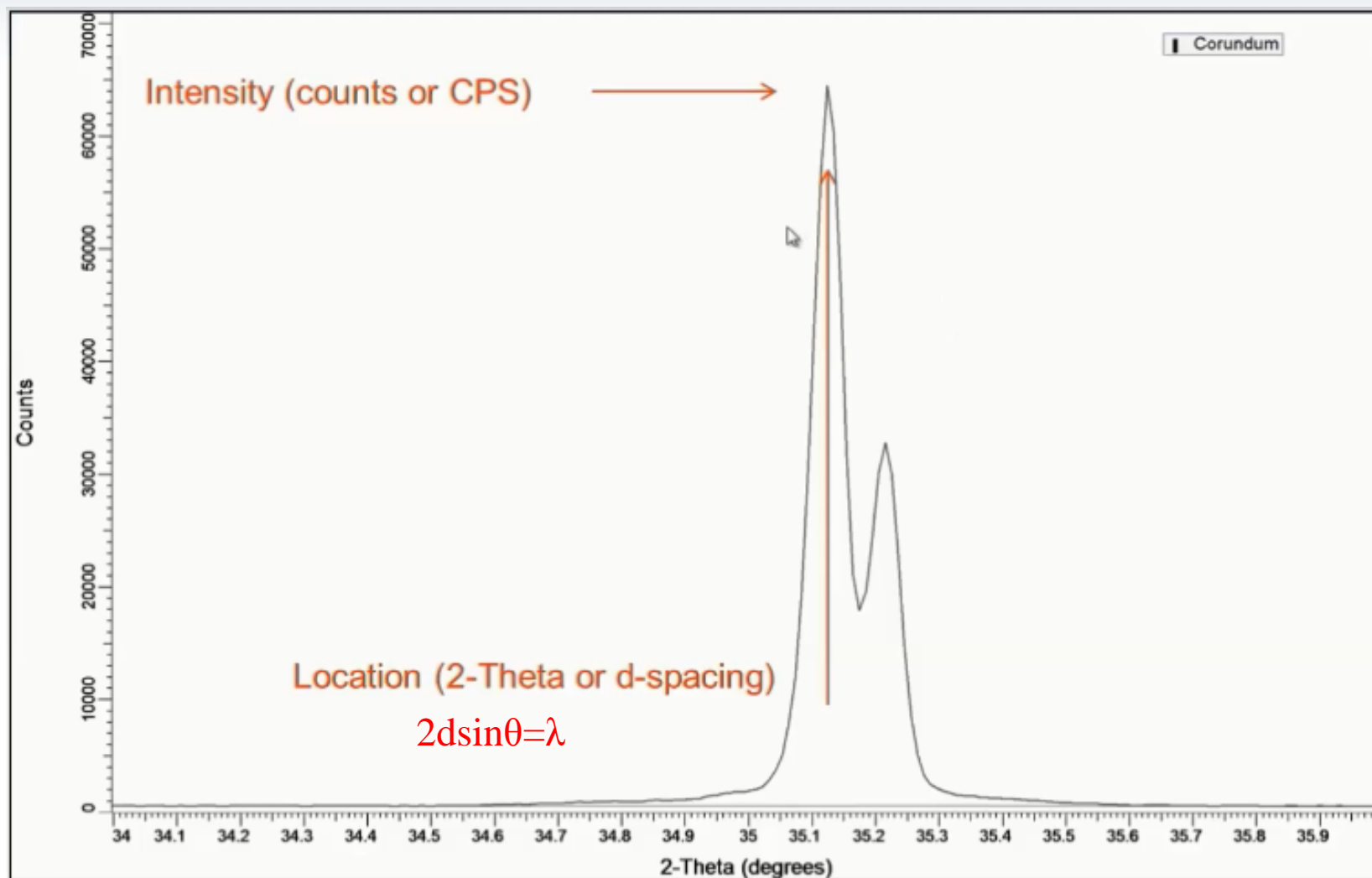
- 仪器部分
- 样品微观结构
(晶粒尺寸、微观应变、缺陷)



□ 背底

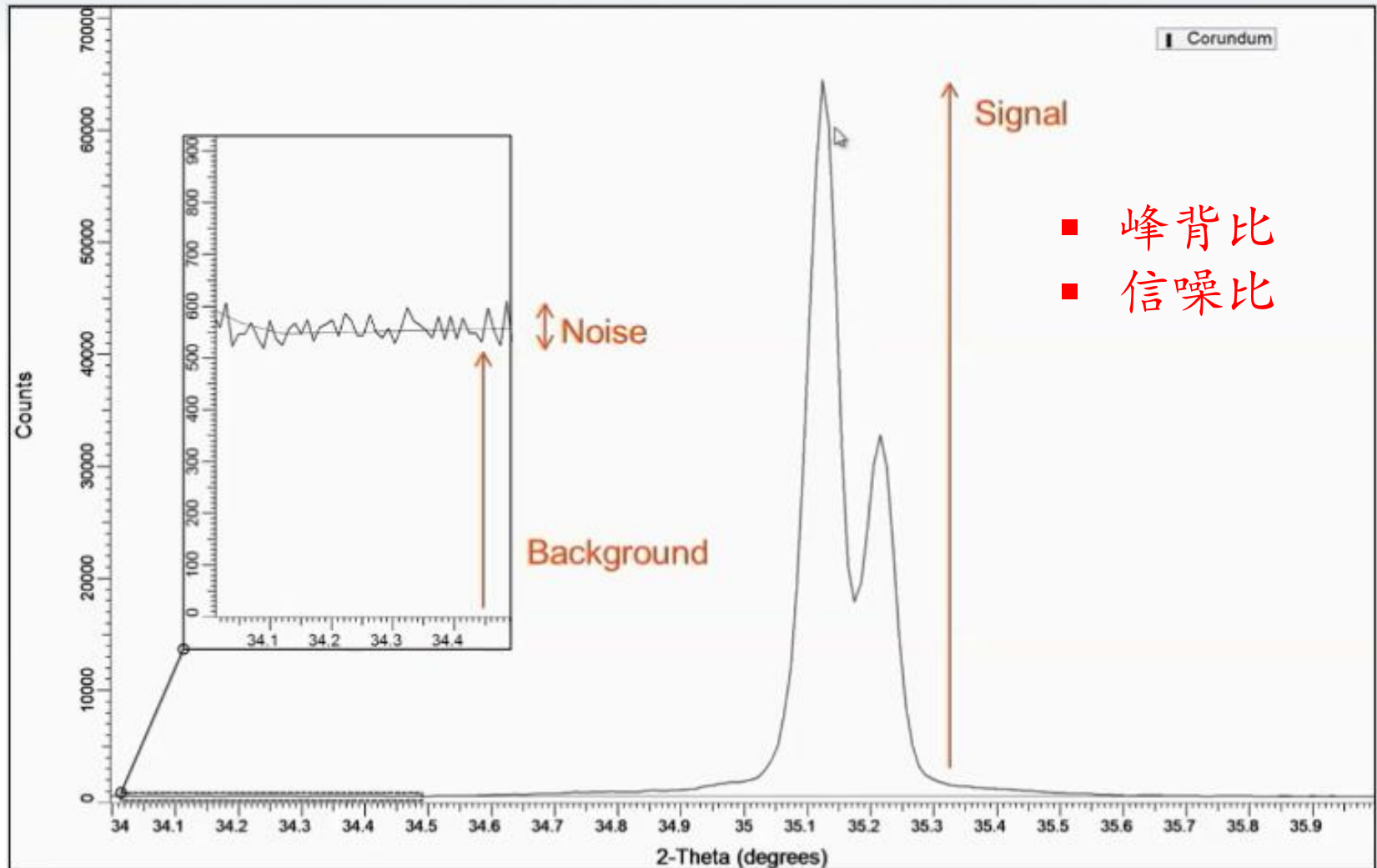
- 空气、样品架等散射
- 局域结构、非相干散射
- 非晶漫散峰, “结晶度”

衍射图谱 峰位和强度

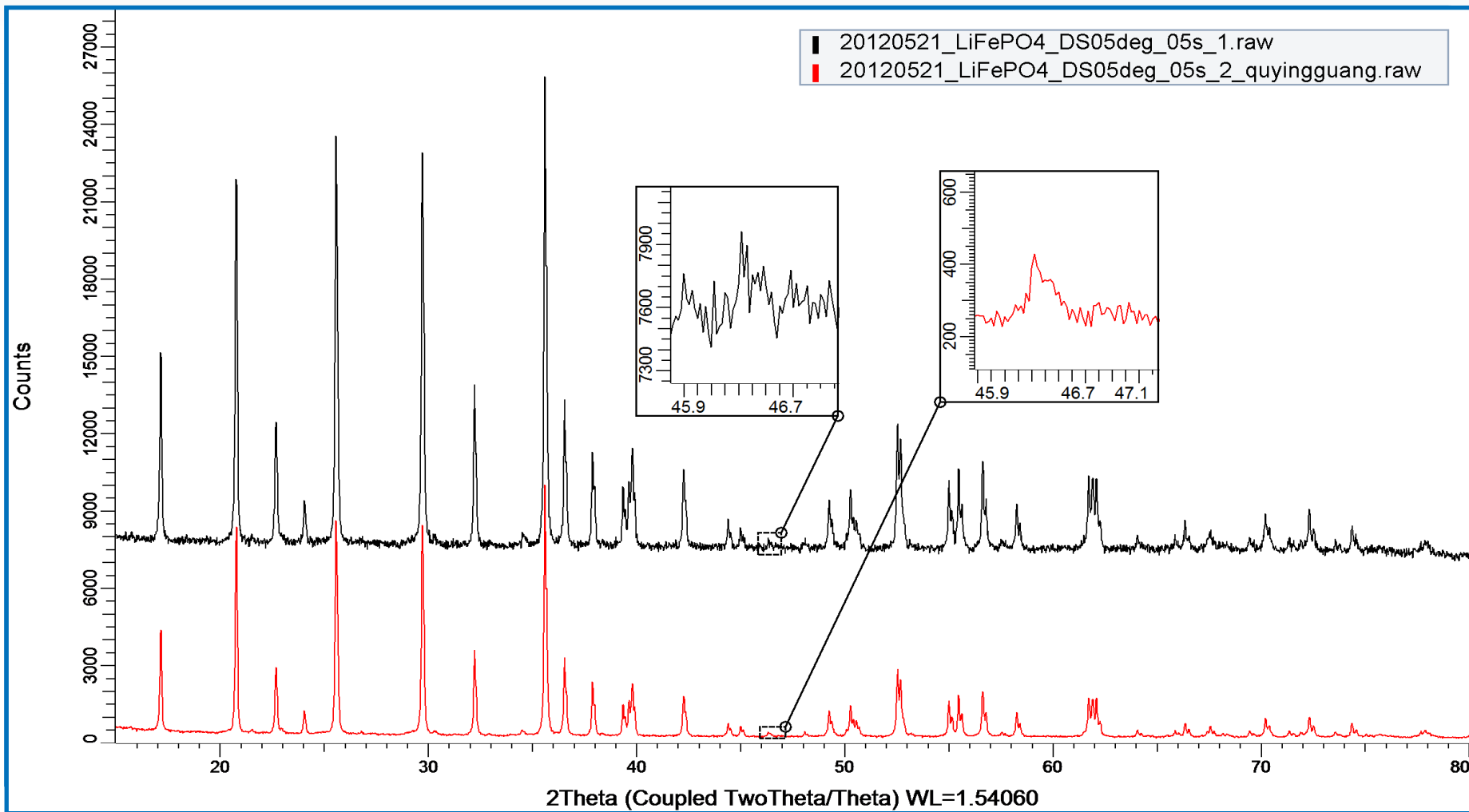


衍射图谱

背底（基线） VS 噪音

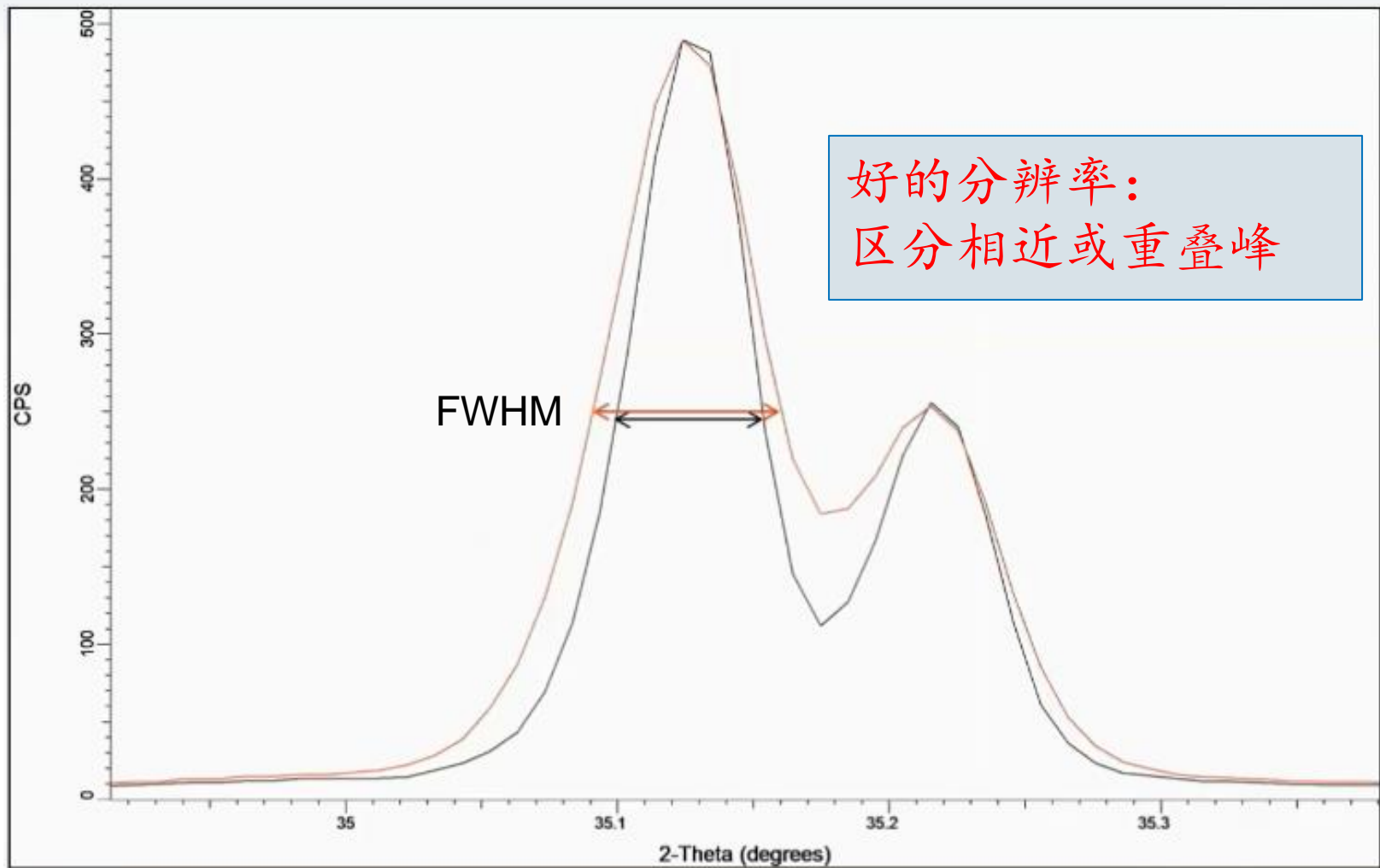


磷酸铁锂样品衍射图谱



衍射图谱

峰形、半高宽 (FWHM) 和分辨率



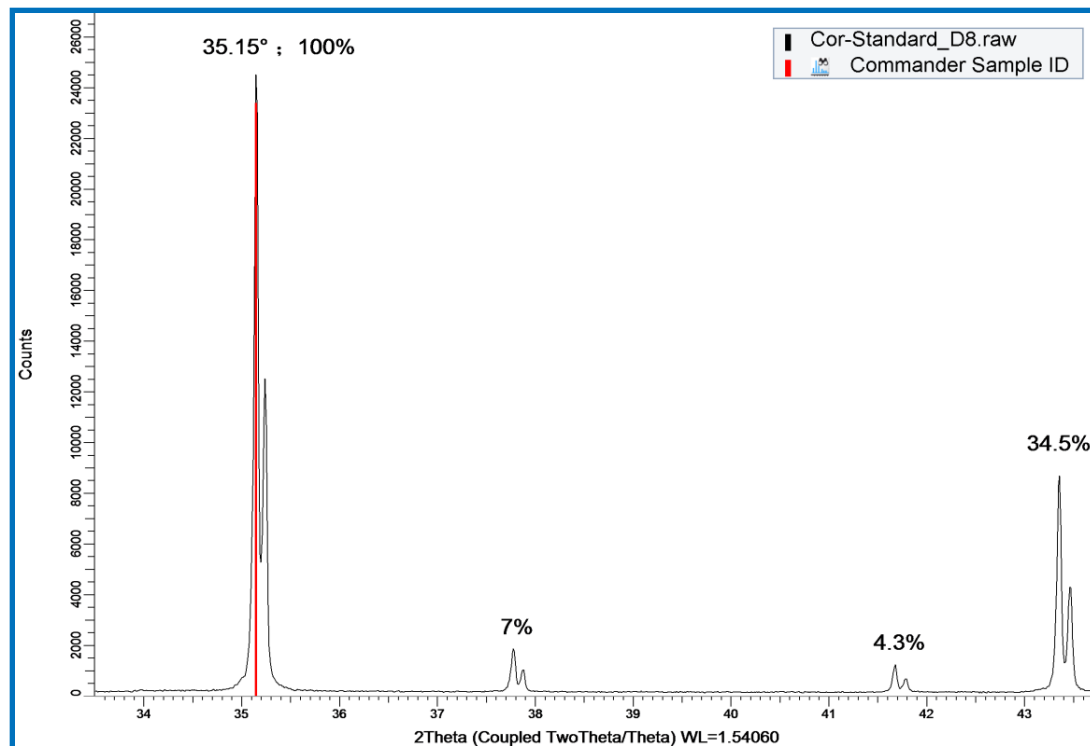
高质量的数据



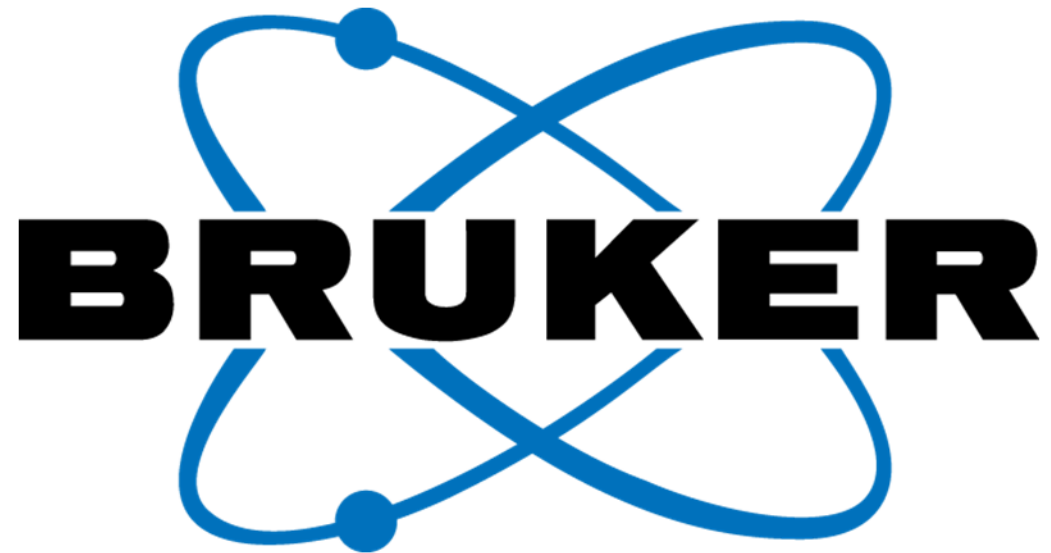
- 峰位准确：ICDD 衍射图谱峰差（测量值与理论值）：

$$\Delta 2\theta \leq \pm 0.04^\circ$$

- 强度：绝对强度高和相对强度准确
- 峰形：半高宽小、对称性高、重叠峰少
- 峰背比（衍射峰与背底比）和信噪比高



- 高质量的衍射数据：
峰位准确、强度高（绝对）且准确（相对）、峰形好（分辨率 高，重叠峰少）、峰背比和信噪比高。
- 高质量的数据获得往往与测试效率成反比，非常耗时。精细的仪器调试、合理的硬件选择以及较长时间的测试。
- 不是每种应用都需要非常高的数据质量。应该根据不同的应用需要，选择合适的硬件及测量条件，得到相应的数据质量，提高测试效率。



www.bruker.com