

XRD应用报告

D2 桌面型衍射仪

金红石的定量相分析

D2 PHASER是一台便携式X射线衍射仪，它可广泛应用于研究和质量控制。它操作简便，使用方便。配备了LYNXEYE探测器的D2 衍射仪是目前市场上速度最快，精度最高的桌面衍射仪系统。

本报告介绍了D2 衍射仪分析氧化钛中金红石型含量的应用。

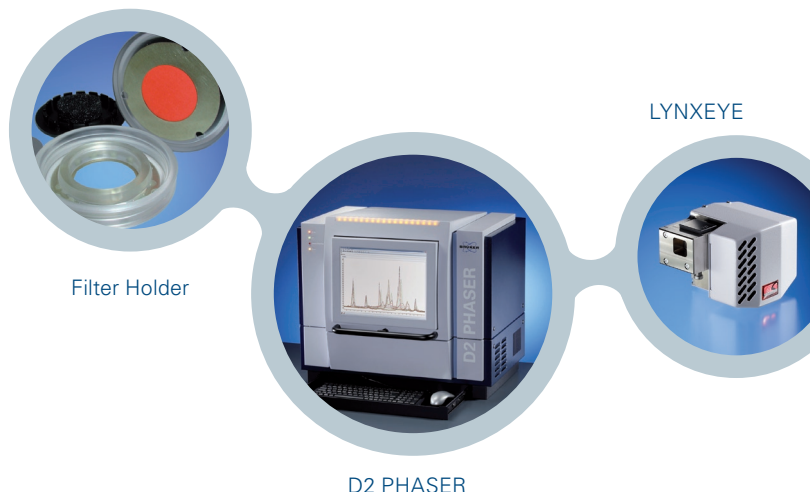


表1 实验仪器和参数

D2 PHASER, LYNXEYE探测器
Cu靶 (30kV, 10mA), Ni滤波片
连续扫描: 2Theta (27° - 29°)
步长: 0.01°
计数时间: 2秒/步
扫描时间: 大约5分钟
2.5° 索拉狭缝, 1mm发散狭缝
8mm防空气散射狭缝
LYNXEYE探测器开口: 5° (2Theta)

近年来，随着电力工业的发展和对环保要求的日益提高，催化剂材料在火电厂排放系统中的应用越来越广泛。氧化钛 (TiO₂) 作为脱硝 (NO_x) 催化剂的主要载体材料获得大量应用。氧化钛的存在两种主要晶型，金红石型和锐钛矿型。而有效的脱硝催化剂材料是锐钛矿型氧化钛。这就对材料中的金红石含量有一定的要求 (<4%)。所以快速准确的测量和计算金红石含量是非常重要的。

X射线衍射能够区分不同氧化钛的晶型，同时进行定量分析。其定量分析基本原理是衍射峰的强度和物相的含量成正比。我们可以通过一系列的混合标准样品，确定衍射峰强度和含量的线形关系，从而实现测量和计算的自动化。

在本应用报告中我们使用了六个金红石和锐钛矿的混合物，其金红石的含量分别为0.4%，0.75%，1.0%，1.5%，2%和4%。表1列出所有实验参

数。金红石和锐钛矿的晶体结构不同，其衍射谱图也不一样。图1显示了含量不同的样品的金红石（110）衍射峰，其强度与金红石的含量成正比。

根据衍射峰强度和含量的对应关系我们可以绘制标定曲线。布鲁克公司的DQUANT分析软件可以自动完成这个

工作。在之后的未知样品测量中，DQUANT也可以自动完成定量计算。

使用D2 PHASER衍射仪，金红石的检出限可以达到0.4%。如果延长测量时间，可以进一步降低检出限。对金红石含量低于4%的样品，定量分析的绝对误差小于0.2%，相对误差小于15%。

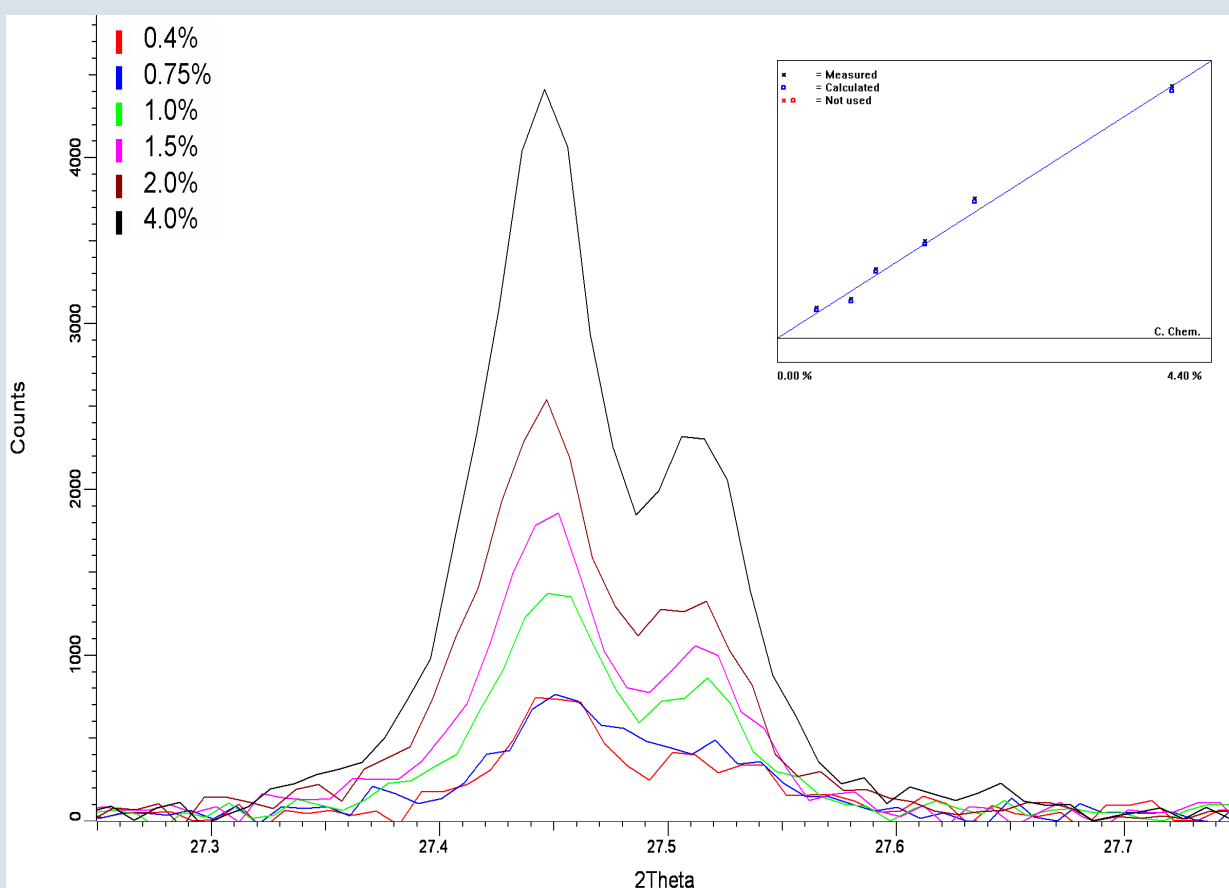


图1：不同含量的样品的金红石最强衍射峰衍射图谱。测量时间为2秒/步。
其中的插图为衍射强度与样品浓度的标定曲线。