



中华人民共和国国家标准

GB/T 37054—2018

纳米技术 纳米二氧化钛中锐钛矿型与 金红石型比率测定 X射线衍射法

Nanotechnology—Testing ratio of anatase to rutile in nano-titanium dioxide—
X-ray diffraction

2018-12-28 发布

2018-12-28 实施

国家市场监督管理总局
中国国家标准化管理委员会 发布

目 次

前言	III
1 范围	1
2 规范性引用文件	1
3 原理	1
4 仪器	2
5 参考样品	2
6 试样制备	3
7 分析步骤	3
8 结果计算	3
9 结果不确定度	3
10 实验报告	4
附录 A (资料性附录) 纳米二氧化钛中锐钛矿型与金红石型比率测量的不确定度评定实例	5
参考文献	8

前 言

本标准按照 GB/T 1.1—2009 给出的规则起草。

本标准由中国科学院提出。

本标准由全国纳米技术标准化技术委员会(SAC/TC 279)归口。

本标准起草单位:上海交通大学、纳米技术及应用国家工程研究中心。

本标准主要起草人:何琳、韩海波、郭新秋、何丹农、路庆华、梁齐。

纳米技术 纳米二氧化钛中锐钛矿型与 金红石型比率测定 X 射线衍射法

1 范围

本标准规定了用 X 射线衍射方法测定纳米二氧化钛中锐钛矿晶型与金红石晶型比率方法的原理、仪器、参考样品、样品制备、分析步骤、结果计算及结果报告。

本标准适用于含有锐钛矿与金红石晶型的纯度不低于 99% 的纳米二氧化钛粉体。

2 规范性引用文件

下列文件对于本文件的应用是必不可少的。凡是注日期的引用文件，仅注日期的版本适用于本文件。凡是不注日期的引用文件，其最新版本(包括所有的修改单)适用于本文件。

JJG 629 多晶 X 射线衍射仪检定规程

JJF 1059.1—2012 测量不确定度评定与表示

3 原理

晶体具有特征的 X 射线衍射图案。由多种结晶物组成的混合物中，一种组分引起的衍射峰的强度取决于混合物中该组分的量，某一组分的峰强也依赖于其他组分的质量吸收系数。

对于一个由 N 个物相组成的混合物，其第 j 项的某条衍射线的强度 I_j 与其质量分数 m_j 之间满足下面的式(1)：

$$I_j = K_j \frac{m_j}{\rho_j \mu_m} \dots\dots\dots (1)$$

式中：

K_j ——第 j 相的某条衍射线的固有常数；

m_j ——第 j 相的质量分数；

ρ_j ——第 j 相的密度；

μ_m ——混合物的质量吸收系数。

对于混合物中的某一物相而言，式(1)中的 K_j 、 ρ_j 是固有的常数，式(1)可以简化为下面的式(2)：

$$I_j = K \frac{m_j}{\mu_m} \dots\dots\dots (2)$$

其中的 K 与衍射几何条件、物理常数、被测物相的性质等参数有关，由此可见 K 是一个变化的常数，只有当被测物相、衍射实验条件确定之后， K 才是一个常数。

由锐钛矿和金红石组成的二氧化钛粉体，由于锐钛矿与金红石是同分异构体，它们的质量吸收系数相同，因此有二氧化钛样品的质量吸收系数 $\mu_m = m_A \mu_{mA} + m_R \mu_{mR} = \mu_{mA} = \mu_{mR}$ 。由式(2)此时锐钛矿或金红石的衍射线强度分别为式(3)、式(4)：

$$I_A = K \frac{m_A}{\mu_m} \dots\dots\dots (3)$$