

давлением) приводит к нарушению кристаллической структуры препарата, появлению напряжений в кристаллах (а значит, к ухудшению качества рентгенограммы). Следует учесть, что в случае, если размер кристаллов менее 0,1 мкм, то интерференционные линии могут быть размыты (уширение полос спектра), и при малом количестве фазы её линии могут сливаться с фоном.

КАЧЕСТВЕННЫЙ ФАЗОВЫЙ АНАЛИЗ

Качественным фазовым анализом называется установление числа фаз в данной системе и их идентификация. Рентгеновский метод фазового анализа основан на том, что каждое кристаллическое вещество дает специфическую интерференционную картину с определенным количеством, расположением и интенсивностью интерференционных линий, которые определяются природой и расположением атомов в данном веществе. Так как практически не существует двух кристаллических веществ, которые обладали бы одинаковой во всех отношениях кристаллической структурой, то рентгенограмма однозначно характеризует данное вещество. В смеси нескольких веществ каждое из них дает свою картину рентгеновской дифракции независимо от других. Полученная рентгенограмма смеси представляет собой сумму (наложение) ряда рентгенограмм индивидуальных веществ. Идентификация фазового состава образца обычно основана на визуальном или компьютерном сопоставлении его дифрактограммы с экспериментальной или рассчитанной дифрактограммой стандартного образца (сравнивают значения углов 2θ и относительные интенсивности пиков).

При съемке дифрактограмм с органических веществ обычно используют излучение $\text{Cu-K}\alpha$ (интервал значений углов 2θ от 4° до 40°). При этом сходимость углов 2θ для одной кристаллической формы исследуемого вещества и стандартного образца находится в пределах $\pm 0,2^\circ$, тогда как относительные интенсивности пиков могут значительно различаться из-за эффектов преимущественной ориентации массы микрокристаллов.