



# 中华人民共和国国家标准

GB/T 23413—2009

---

## 纳米材料晶粒尺寸及微观应变的测定 X射线衍射线宽化法

Determination of crystallite size and micro-strain of nano-materials—  
X-ray diffraction line broadening method

2009-04-01 发布

2009-12-01 实施

---

中华人民共和国国家质量监督检验检疫总局  
中国国家标准化管理委员会 发布

## 前 言

本标准的附录 A 为规范性附录。

本标准由全国微束标准化技术委员会提出并归口。

本标准起草单位：钢铁研究总院、首钢技术研究院。

本标准主要起草人：方建锋、郑毅、李琪、张晋远、柳春兰、朱瑞珍。

## 引 言

晶粒尺寸和微观应变对纳米晶功能材料的电磁、光电、催化等性能和结构材料的相变强化、形变强化等强韧化性能有着十分重要的影响。因此,这两个结构参数的规范化测定对于纳米晶材料的基础研究和产品开发有着重要的理论意义和实用价值。而目前的多数实验室的测试方法不够规范和统一,从而使得对同一样品在不同实验室测定的数据有较大的差别。

目前较为常用的测定纳米级晶粒尺寸及微观应变的数据处理方法主要有:近似函数法,瓦伦-艾弗巴赫(Warren-Averbach)傅氏分析法、方差分析法和 Rietveld 全谱图拟合法等。根据目前大多数实验室可以达到的测试水平,以及目前在纳米晶测定方面的文献所采用的方法,在该标准中采用近似函数法作为纳米级晶粒尺寸和微观应变的分析方法。

# 纳米材料晶粒尺寸及微观应变的测定

## X 射线衍射线宽化法

### 1 范围

本标准规定了利用 X 射线衍射线宽化法来测定纳米材料晶粒尺寸和微观应变的方法。本标准采用的计算方法是近似函数法。

本标准适用于测定晶粒尺寸一般不大于 100 nm, 微观应变一般不大于 0.1% 的纳米材料。

### 2 规范性引用文件

下列文件中的条款通过本标准的引用而成为本标准的条款。凡是注日期的引用文件, 其随后所有的修改单(不包括勘误的内容)或修订版均不适用于本标准, 然而, 鼓励根据本标准达成协议的各方研究是否可使用这些文件的最新版本。凡是不注日期的引用文件, 其最新版本适用于本标准。

GBW(E)130014 X 射线衍射硅粉末标准物质

GBW(E)130016 X 射线衍射仪校正用  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 标准物质

### 3 符号

本标准所用公式中符号的含义如下:

- $D_{hkl}$ : 沿晶面(hkl)法线方向的晶粒尺寸, 单位为纳米(nm);
- $\epsilon$ : 微观应变, 用均方根值表示, 它表示了材料内点阵微观畸变的程度;
- $\epsilon_{hkl}$ : 沿晶面(hkl)法线方向的微观应变;
- $\lambda$ : 入射 X 射线的波长, 单位为纳米(nm);
- $B$ : 综合衍射线形的积分宽度, 单位为弧度;
- $B_0$ : 剥离  $K_{a2}$  后综合衍射线形的积分宽度, 单位为弧度;
- $b$ : 标准样品衍射线形的积分宽度, 单位为弧度;
- $b_0$ : 剥离  $K_{a2}$  后标准样品衍射线形的积分宽度(也称仪器宽度或几何宽度), 单位为弧度;
- $\beta$ : 由于物理宽化效应造成的衍射线加宽的积分宽度, 单位为弧度;
- $B_0^{\frac{1}{2}}$ : 剥离  $K_{a2}$  后综合衍射线形的半高宽度, 单位为弧度;
- $m$ : 由于晶粒细化造成的衍射线宽化的积分宽度, 单位为弧度;
- $n$ : 由于微观应变造成的衍射线宽化的积分宽度, 单位为弧度;
- $\zeta$ : 积半比, 某种衍射线形的积分宽度和半高宽的比值;
- $\theta$ : 布拉格(Bragg)角, 单位为度;
- $\theta_{hkl}$ : 布拉格(Bragg)角, 单位为度;
- $h(2\theta)$ : 综合衍射线形;
- $g(2\theta)$ : 仪器宽化线形(标准样品的衍射线形);
- $f(2\theta)$ : 由物理宽化效应加宽的衍射线形;
- $M(2\theta)$ : 由晶粒度细化效应加宽的衍射线形;
- $N(2\theta)$ : 由微观应变效应加宽的衍射线形;
- $K$ : 与晶粒形状和晶面指数(hkl)有关的常数, 其值接近于 1, 本标准中取为 1。