



# リートベルト法による回折データの精密解析

結晶が膨らんでいる？原子位置は正常？微量な成分がないか？ 疑問に答えます

## リートベルト法を用いた結晶構造解析

多結晶試料をX線回折測定または中性子線回折測定することで得られる回折パターンは、物質の結晶構造によって決まります。リートベルト法は、測定回折パターンに対して結晶構造モデルより理論計算したパターンをパラメータフィッティングすることで、結晶構造を精密化する解析方法です。リートベルト解析により、結晶の格子定数、原子位置、結晶相毎の存在割合(定量分析)などの情報が得られます。材料の製造方法・化学反応・劣化による僅かな結晶構造の変化を、数値化して比較・検討できることから、製造方法の最適化や材料劣化要因の特定などに有用です。

## 解析事例 ～複相試料の場合～

結晶性の $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{SiO}_2$ およびSiの3成分混合粉末試料をリートベルト解析をした結果を図1に示します。測定回折パターンに対して、結晶構造モデルより理論計算した回折パターンをフィッティングすることで、各結晶相の存在割合がわかりました。標準試料を既知量添加混合することで、非晶質成分の存在割合も、合わせて算出可能です。

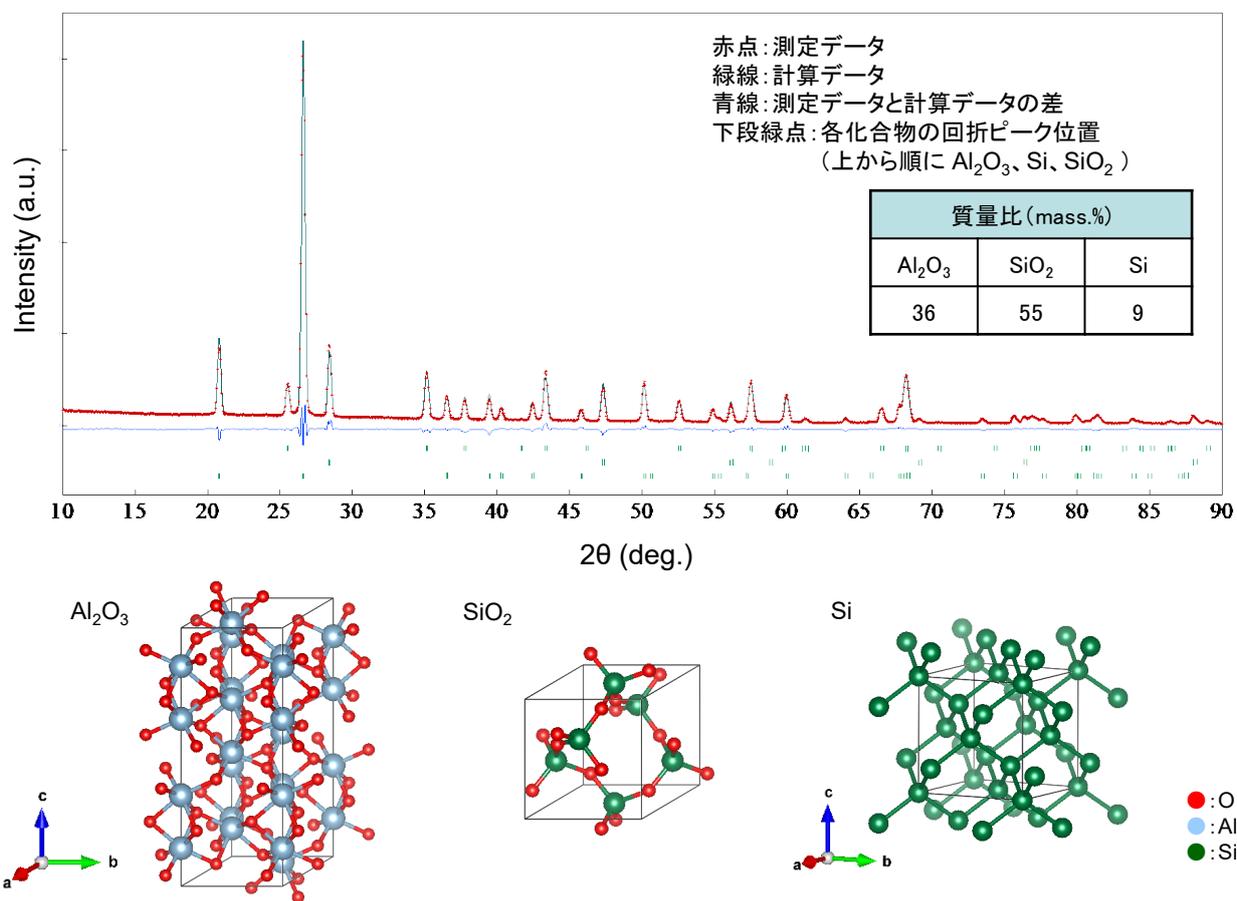


図1  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{SiO}_2$  および Si の3成分混合材のリートベルト解析結果(上段) および計算に使用した各結晶相の結晶構造モデル(下段)

### ※ 中性子線の利用

中性子線は、X線と比較して「バルク平均情報が得られる」、「軽元素情報に有利」、「原子番号近接元素の識別能力がある」などのメリットがあります。X線では評価困難な材料分野で中性子線を利用した解析もご提供いたします。

【利用分野例】「リチウムイオン二次電池の正極材料Li (Ni,Mn)  $\text{O}_2$ の結晶構造解析」



JFE テクノリサーチ 株式会社

<https://www.jfe-tec.co.jp>

0120-643-777

Copyright ©2023 JFE Techno-Research Corporation. All Rights Reserved.  
 本資料の無断複製・転載・webサイトへのアップロード等はおやめ下さい。