

リートベルト法による結晶構造解析

化合物の結晶構造を決定するには単結晶 X 線構造解析法が有効である。しかし、十分なサイズの単結晶が得られないと適用できない。ここでは粉末多結晶試料を XRD(X-ray diffraction) 測定し、リートベルト解析により結晶構造を精密化した事例について紹介する。

▶ リートベルト法とは

Rietveld Method

リートベルト解析では、粉末多結晶試料を XRD 測定した回折パターンに対し、装置関数、結晶構造モデルをパラメータとして非線形の最小二乗法でフィッティングすることで格子定数、占有率、分極座標、原子変位パラメータ等の値を精密化することが出来る。また、複数相が想定される場合は解析により各々の質量分率を求めることが出来る。

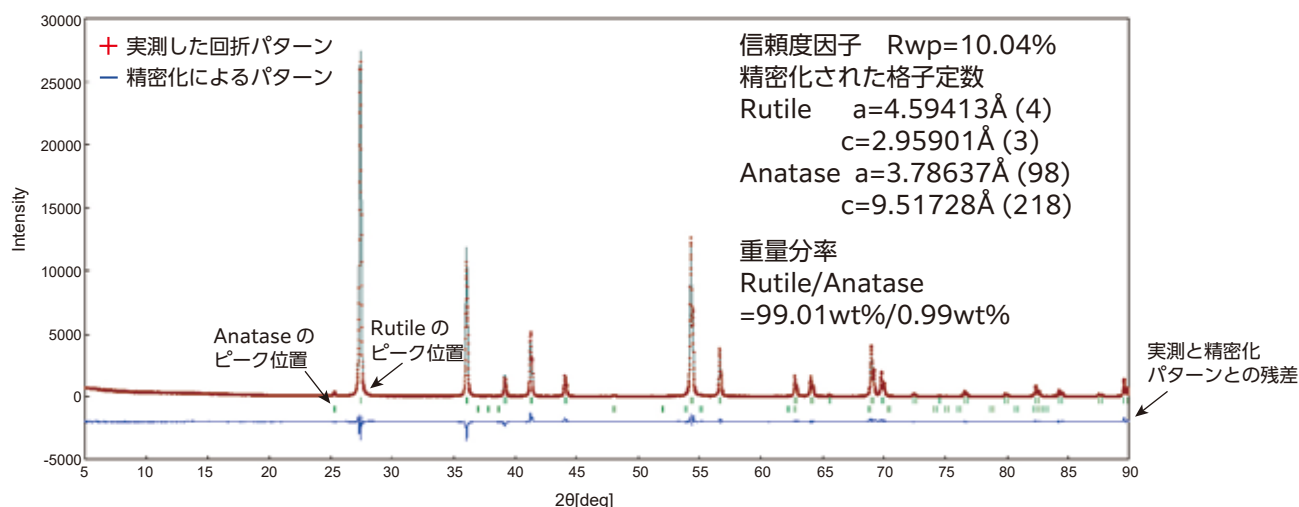
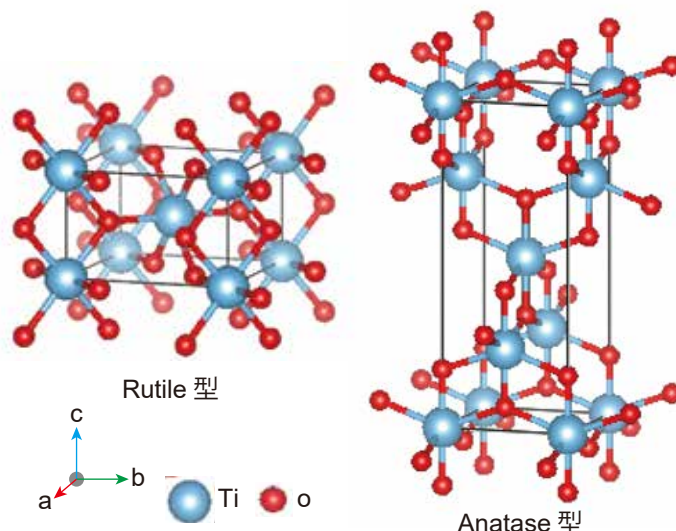
▶ 解析事例

Example

試料：市販 Rutile 型二酸化チタン (TiO_2) 試薬

- ・得られた回折パターンから Rutile 型に加え、Anatase* 型の存在が示唆された
- ・リートベルト解析 (2 相解析) した結果、Anatase 型は 1wt% 程度含有していることがわかった

* TiO_2 は Rutile 型や Anatase 型といった結晶多形を持つ



リートベルト解析では鉱物、酸化物、結晶性化合物などの構造解析が可能で、リチウムイオン二次電池の正極活物質である LiCoO_2 等の構造解析にも適用できる

