

リートベルト解析 (Rietveld analysis) とは

XRD等の測定データの解析から結晶内原子配置等の詳細な情報が得られます

リートベルト解析の概要

リートベルト解析とはXRD(X線回折法)や中性子線回折法の測定データを解析する手法の一種です。既存手法による格子定数・空間群などの同定に加え、試料の結晶構造モデル(候補)がある場合は単位格子内部の原子配置など、より詳細な結晶構造情報を得ることが可能です。

リートベルト解析の特徴

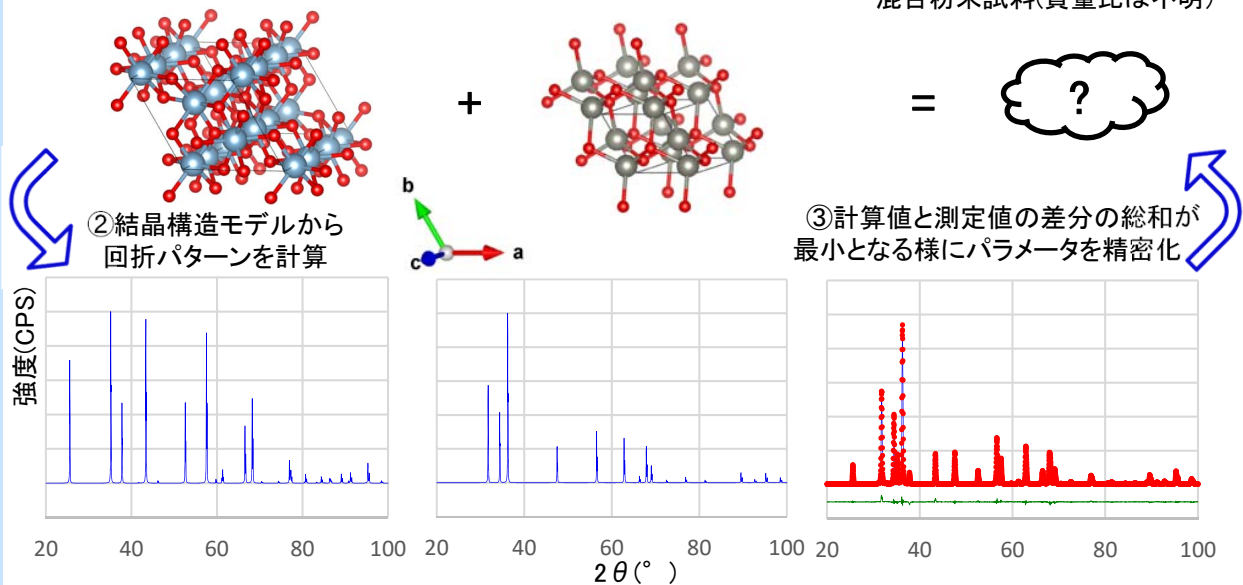
- **どのような試料が解析可能か？**
 - ・ 結晶試料(非晶質は不可)
 - ・ 粒径1~5 μm以下の粉末試料
 - ・ 試料の結晶構造モデル(候補を含む)がある
- **どのような物性情報が得られるか？**
 - ・ 物理反応・化学反応の前後における結晶構造の変化
 - ・ 構造欠陥(置換・欠損)による結晶構造の変化
 - ・ 既存手法では困難な、分子/結晶構造が互いに類似する多相試料の同定
 - ・ 結晶相の数が多く、解析が困難な多相試料の同定

リートベルト解析実行例

①結晶の構造モデルを作成



混合粉末試料(質量比は不明)



赤色点: XRDによる測定値 青色線: リートベルト解析による計算値 緑色線: 測定値と計算値の差分
構造モデルのパラメータ

試料/単位格子の辺	辺長[Å]	質量比[%]
Al_2O_3	a,b	50.56
	c	
ZnO	a,b	49.44
	c	



**XRD等の測定データに
リートベルト解析を行うことで
結晶内部の詳細な構造を評価出来ます**

※結晶構造図はVESTAを利用
(<https://jp-minerals.org/vesta/jp/>)

分析サービスで、あなたの研究開発を強力サポート!