

# 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  $\mu\text{m}$ 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

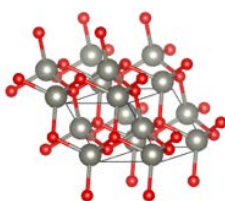
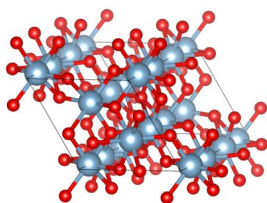
## リートベルト解析実行例

### ①結晶の構造モデルを作成

$\text{Al}_2\text{O}_3$

ZnO

混合粉末試料(質量比は不明)



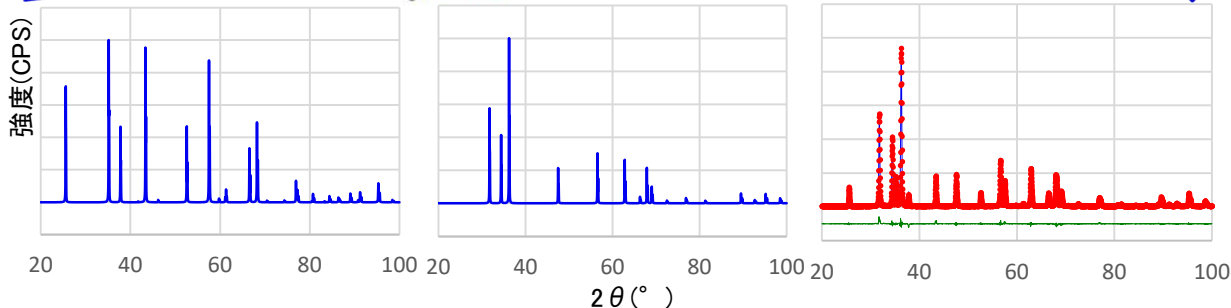
+

=



### ②結晶構造モデルから回折パターンを計算

### ③計算値と測定値の差分の総和が最小となる様にパラメータを精密化



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[%]	
$\text{Al}_2\text{O}_3$	a,b	4.7615	50.25
	c	12.998	
ZnO	a,b	3.2510	49.75
	c	5.2083	



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!