

# リートベルト解析法による 粉末結晶材料の構造精密化

粉末X線回折データから結晶構造の精密化が可能です

測定法 : XRD・計算科学・データ解析

製品分野 : 二次電池・ディスプレイ・バイオテクノロジー・医薬品・化粧品

分析目的 : 構造評価

## 概要

本資料では、リチウムイオン二次電池の正極活物質として利用されているLi(Ni,Mn,Co)O<sub>2</sub>の粉末X線回折データに対するリートベルト解析事例を紹介します。

シミュレーションによって実測の粉末X線回折データを再現するような結晶構造モデルを求めることで、格子定数・各サイトの占有率・カチオンミキシングの割合などの結晶構造パラメーターを精密に算出することが可能であり、これらを基に材料物性を考察することができます。

## データ

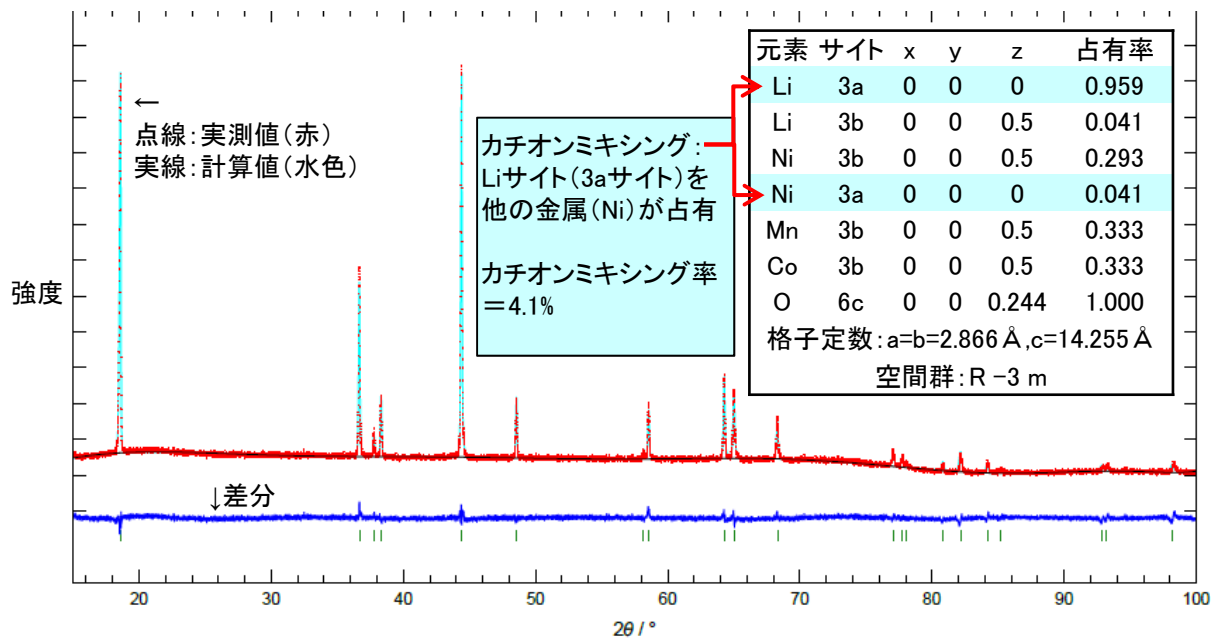


図1 粉末X線回折データのリートベルト解析結果

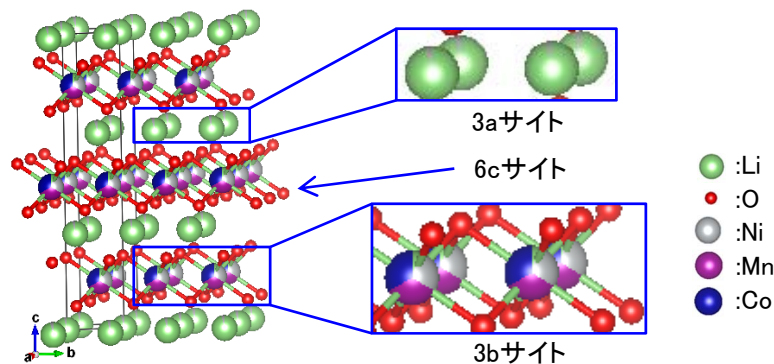


図2 リートベルト解析によって得られたLi(Ni,Mn,Co)O<sub>2</sub>の結晶構造※  
3a,3bサイトの色の割合は、各サイトにおける各元素の占有率を表します。

※VESTA(<https://jp-minerals.org/vesta/jp/>)を利用

分析サービスで、あなたの研究開発を強力サポート!

一般財団法人  
**MST** 材料科学技術振興財団

TEL : 03-3749-2525 E-mail : info@mst.or.jp

URL : <https://www.mst.or.jp/>