

2012年1月5日(木) 作成

粒子統計理論の応用

BaSO₄ の構造解析

粒子統計理論を応用することにより粉末回折データから正確な結晶構造を推定できる新しい解析方法 (Ida-Izumi 法) が開発されました [1]。

BaSO₄ の粉末回折データについて Rietveld 法と新しい構造解析法，単結晶構造解析法の結果を比較します。Fig. 1 に，最適化された原子の分率座標が単結晶構造解析の結果 (Miyake *et al.*, 1978) からどれだけずれているかを示し，Fig. 2 に3つの方法で求められた原子変位パラメータの値の比較を示します。

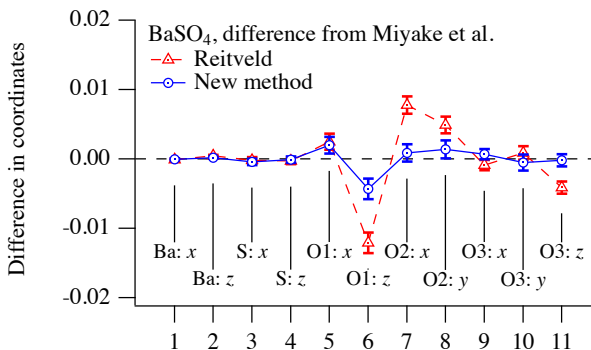


Fig. 1 Deviations of the fractional coordinates optimized by the Rietveld and new methods, which are respectively marked by triangles and circles, from those obtained by the single-crystal X-ray analysis by Miyake *et al.* (1978) for BaSO₄.

新解析法で最適化された原子座標 (Fig. 1の青いマーカ) は Rietveld 法の結果 (赤いマーカ) に比べてむしろ単結晶構造解析の結果に近いことがわかります。

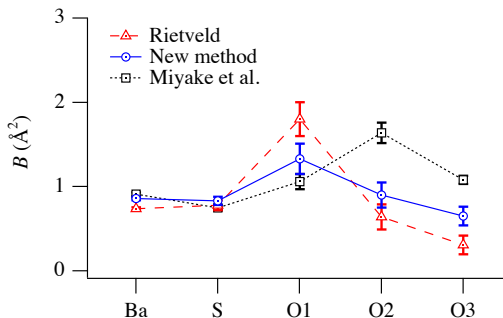


Fig. 2 Isotropic atomic displacement parameters optimized by the Rietveld and new methods (triangles and circles, respectively) and equivalent isotropic atomic displacement parameters calculated from the single-crystal data (Miyake *et al.*, 1978).

参考文献

- [1] Ida, T. & Izumi, F. “Application of a theory for particle statistics to structure refinement from powder diffraction data”, *J. Appl. Cryst.* **44**(5), 921-927 (2011).

名古屋工業大学

セラミックス基盤工学研究センター

[井田 隆](#)