## JADE の使用例(12) 結晶化度の算出

JADE のプロファイルフィッティングの機能を使い、回折パターンのピークの面積を求める ことで、結晶化度を算出することができます。

## ●プロファイルフィッティングの実行

粉末回折パターンのデータを読み込み、「プロファイル」タブを開きます。プロファイルフ ィッティングを実行するためのツールバーが表示されます。





「初期化」ボタンをクリックします。現在の表示範囲のプロファイルが初期化されます。

回折パターンのさらに上に表示されている図は、実測の回折パターンと表示されているプ ロファイルの残差です。

・手動でピークを追加したい場合、ピークを追加したい位置でマウスを左クリックします。 ・ブロードなピーク(非晶質ピーク)を追加したい場合、キーボードの[Shift]キーを押しなが ら、ピークを追加したい位置でマウスを左クリックします。



## ピークを追加したい位置で左クリックします。



ピークが追加されます。



キーボードの[Shift]キーを押しながらマウスを左クリックすると、ブロードなピーク(非晶 質成分)を追加できます。



ブロードなピークを追加すると、下図のようになります。



ブロードなピークは単純に幅が広いピークというだけでなく、JADEの中で非晶質成分とし て認識されます。「プロファイル」タブのピーク情報のリストを見ると、下図のように「AP」 欄にドット(●印)が表示されます。結晶化度を算出するときにこの情報が使われます。



ピーク情報のリストの中で、特定のピークを非晶質ピークと設定することもできます。その 場合、表の中でピークを選び右クリックし、「非晶質ピーク」を選びチェック印をつけます。

n VII	• XIII • M	初期化	<ul> <li>7&lt;&gt;¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬¬</li></ul>	≣▼ 実行	😂 rir 💆	IPC 🖄	結晶	7… ×	E.	вс
折線 (0) 🔺 プロファイル (10)   色付け (0) その他: 42										∆26
<mark>(α1)</mark>	面積(α1)%	非対称 <sup>1</sup>	形状因子	FWHM(°)	積分幅 <mark>(°)</mark>	XS(Å)	AP	(h k l)		
6 (?)	19.7 (?)%	(	ドーカ位置		4 (?)	210				
7 (?)	41.1 (?)%	•	с лада ++		୍ଲ i0 (?)	173				
6 (?)	94.7 (?)%	(	BC		当 (?)	14	٠			
1 (?)	100.0 🔊		FWHM		10 6 (?)	185				
2 (?)	4.9 (?)%		形状因子		新 1(?)	194				
2 (?)	4.7 (?)%		非対称性		🕅 3 (?)	178				
9 (?)	8.4 (?)%	<ul> <li></li> </ul>	非晶質ピーク		5 (?)	156				
7 (?)	11.4 (?)%			20	3 (?)	161				
0 (?)	11.8 (?)%	( □ □ □	平坦な頂部	をスキッフ。チェ	ックを入れると、	結晶化	度%を	計算しま	đ 👔	
表示	できます	#	FWHM を指	定…		<b>()</b> )		< <24.	5°>	δ=(

「フィッティング」ボタンをクリックすると、プロファイルフィッティングが実行されます。 実測の回折パターンに重ね合わせる形でフィット結果のパターンがピンク色で表示されま す。上部に表示される残差もチェックしてください。



回折パターンの上と、JADE のウィンドウのいちばん下に結晶化度が表示されます。

