

JADE の使用例(15) 全パターンフィッティング/Rietveld 解析による定量 1

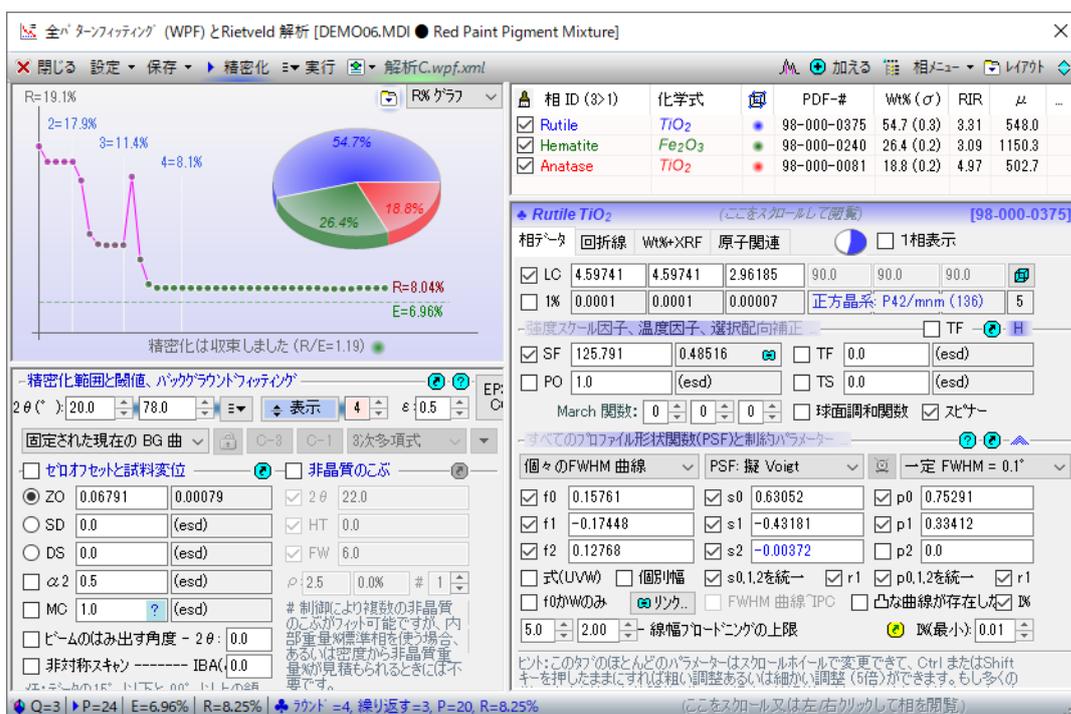
以下のようなごく簡単な流れで解析を行ってみましょう。

- ① データを読み込み、相同定を実行
- ② 同定したデータの構造をもとに WPF/Rietveld 解析で定量

WPF は非常に多くのパラメータを含んでおり、ダイアログで設定できる項目もたくさんありますが、JADE はすべてのパラメータを適切な値に事前初期化するため、ほとんどのパラメータを無視して、精密化を実行できます。

ただ、適切に解析を行うためには WPF/Rietveld がどのように機能するかについてある程度理解している必要があります。解析の詳細については、リートベルト解析に関する内容を含む XRD の書籍などをご参照ください。

↓プロットウィンドウの下にある「WPF」ボタンから実行します



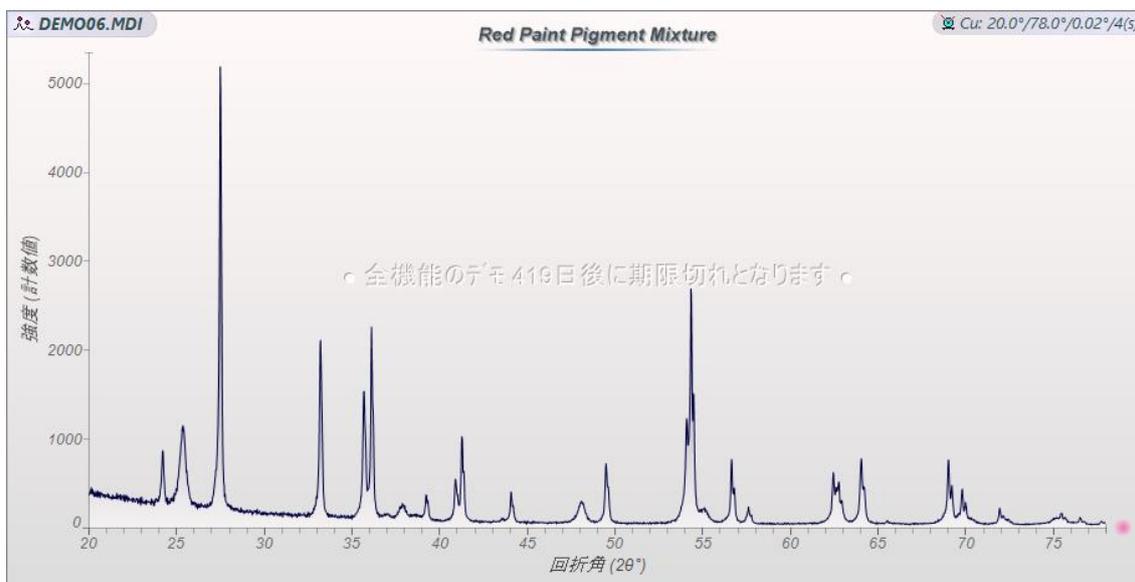
操作方法

ごく簡単な例で使い方の流れを把握しましょう。

① データを読み込み、相同定を実行

1. 解析したいデータを JADE で開きます。

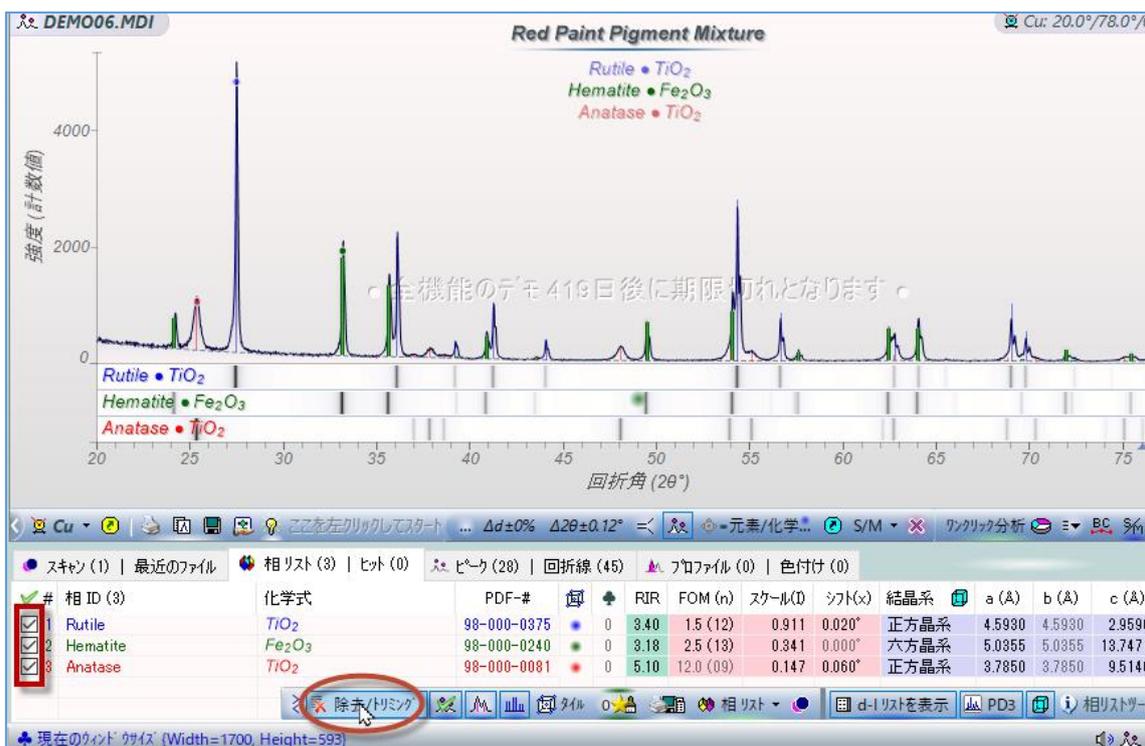
※適当なサンプルデータがない場合、JADE のサンプルデータに含まれる「DEMO06.MDI」(下図)を開いてください。



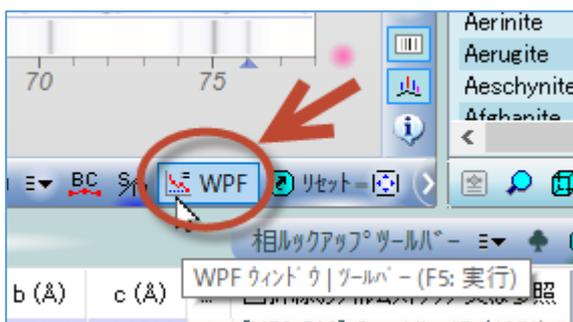
2. プロットウィンドウの右下にある「S/M」ボタンをクリックし、相同定を実行します。



- データベースとの照合が行われ、「相リスト」タブに候補の一覧が表示されます。回折パターンとデータベースのピークとその強度のリストを見比べるなどして、サンプルに含まれていると思われる相にチェックを付けてください。
チェックを付けた相以外を候補リストから削除するには「除去/トリミング」ボタンをクリックします。



- プロットウィンドウの右下にある「WPF」ボタンをクリックして、WPF(全パターンフィッティング)/Rietveld 解析による定量を行います。



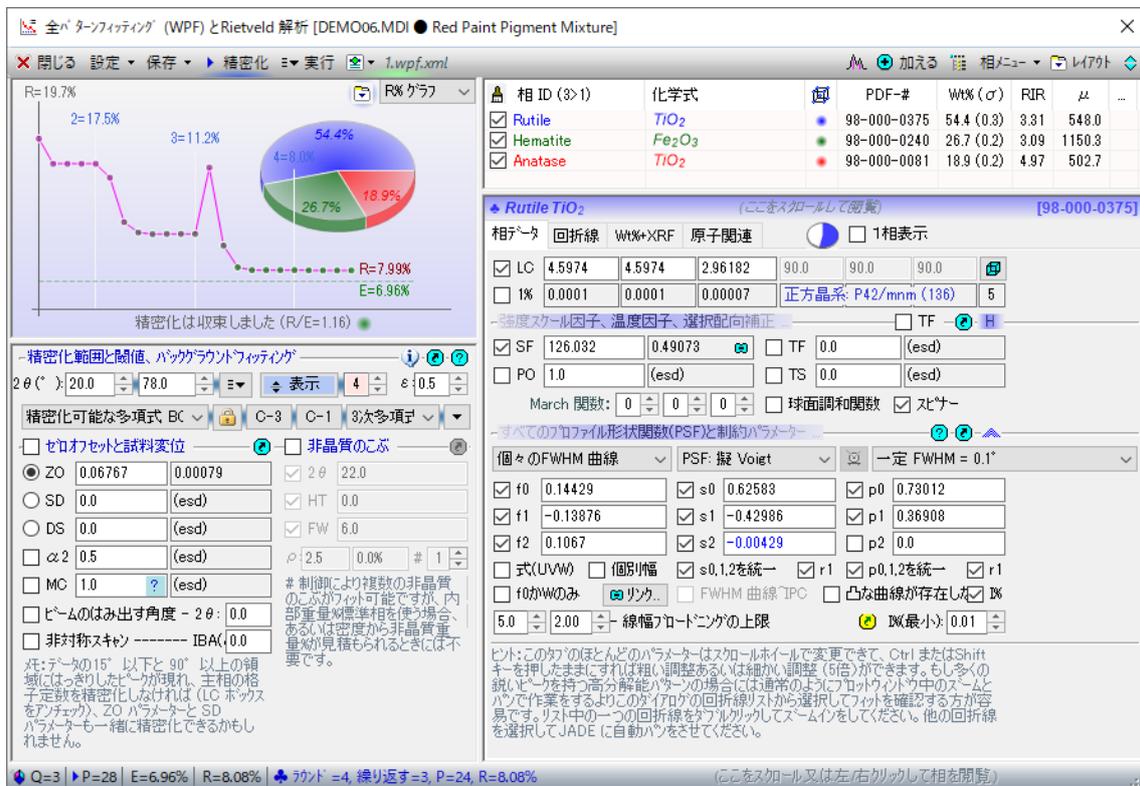
5. WPF(全パターンフィッティング)/Rietveld 解析を行うためのダイアログ(下図)が開きます。右上の相リストを表示する欄に、事前に相同定を行った結果の結晶相が含まれていることを確認してください。

※ダイアログの中には使い方のヒントなども表示されており、役立つ内容です。これらについても一通り目を通してみてください。

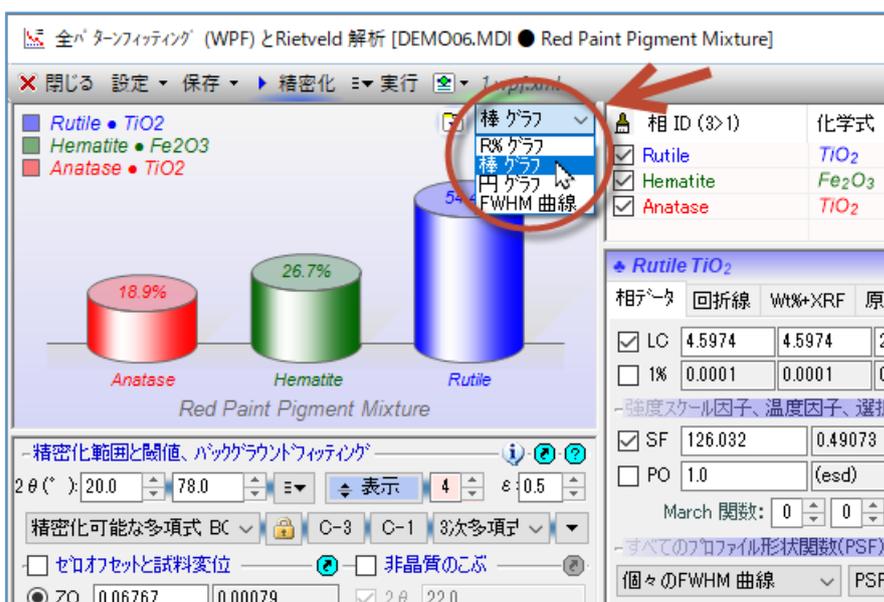
相 ID (3>1)	化学式	PDF-#	Wt% (σ)	RIR	μ
<input checked="" type="checkbox"/> Rutile	TiO ₂	98-000-0375	56.5 (0.0)	3.31	549.6
<input checked="" type="checkbox"/> Hematite	Fe ₂ O ₃	98-000-0240	27.1 (0.0)	3.09	1153.5
<input checked="" type="checkbox"/> Anatase	TiO ₂	98-000-0081	16.4 (0.0)	4.97	503.4

6. バックグラウンドや精密化範囲を変更したり、パラメータを固定する項目を決めるなど細かい設定もできますが、今回は JADE の初期設定のまま「精密化」ボタンをクリックし、精密化を実行してみましょう。

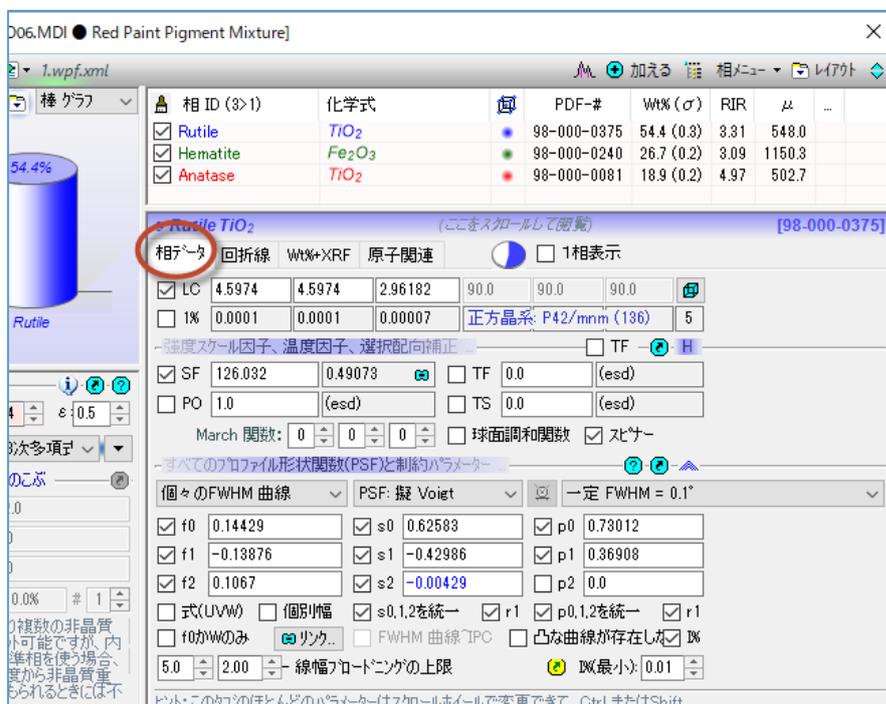
7. 精密化の結果が表示されます。左上のグラフには、重量%濃度で組成が表示されます。



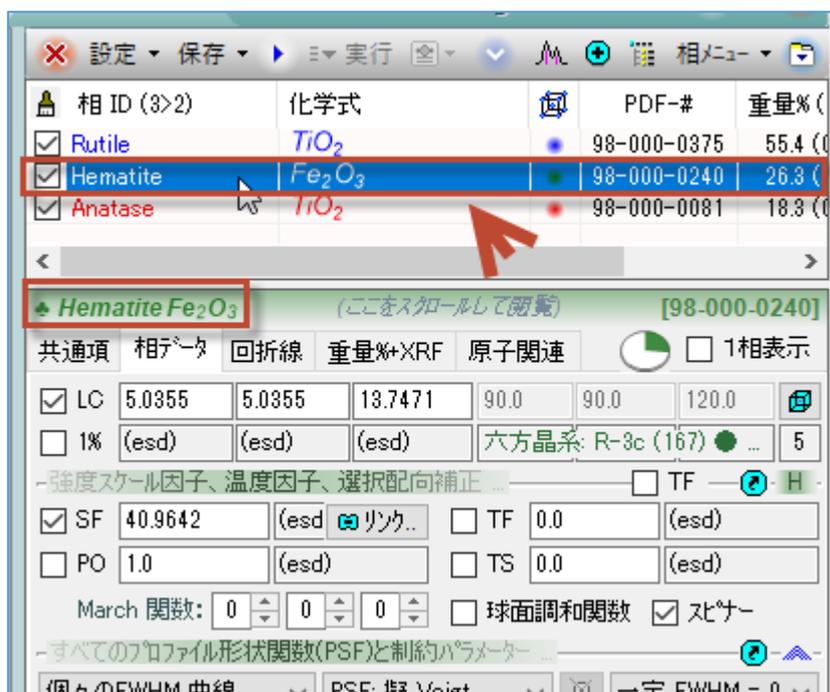
8. 下図のドロップダウンメニューで、グラフの種類を変更したり、FWHM 曲線を表示させることができます。



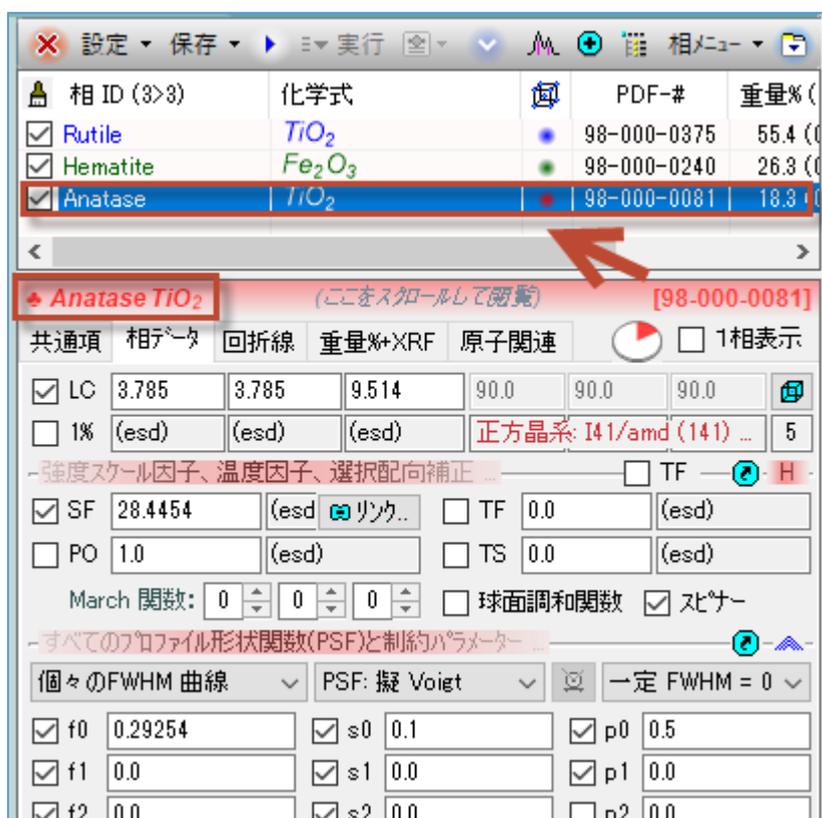
9. 「相データ」タブについては、同じ WPF/Rietveld ダイアログにある相リストで相を選ぶことで、どの相のパラメータが表示されるか切り替わります。



※例えば相リストで「Hematite」を選べば、「相データ」タブに表示される格子定数などの相パラメータは Hematite のパラメータが表示されます。



※相リストで「Anatase」を選べば、「相データ」タブは Anatase の相パラメータになります。



※「原子関連」タブの情報には、JADE PRO を購入した場合のみアクセスできます。JADE Standard Level 2B や Level 3 の WPF/Rietveld 機能では利用できません。

