

日本結晶学会年会サテライトミーティング講演要旨

定量分析の基礎と実際・基礎編 虎谷秀穂（リガクホールディングス株式会社）

X 線を用いて物質の重さを秤のように量ることはできませんが、混合物における各相の相対重量比ならば得意とするところです。定量分析の原理は簡単で、単位重量当たりの散乱・回折強度が得られれば答を出せます。定量分析にはリートベルト法や標準試料を用いた RIR 法、検量線法が広く用いられますが、最近開発された DD (Direct Derivation) 法は、各結晶相の化学組成さえ分かれば単位重量当たりの散乱強度を簡単に計算できます。後は、観測パターンを如何に分解して各相の強度を求めるのかという問題のみです。既存の様々なパターン分解法を使用できますが、今回は新しく開発された、一部の成分にパターンモデルが得られなくても分解できる方法も紹介します。未知相や結晶性が悪くて分解が困難な成分が混在していてもこれで分解し、定量できます。