

格子定数の精密化

1. 格子定数の精密化

ピーク値のみから格子定数を算出する方法

⇒ どのピークから算出するかによって格子定数が変わってしまう。

実験誤差が考慮されていない etc.

従って、あまり正確には格子定数を算出できない。

そこで、全ピークを用いて、なるべくどのピーク位置も再現するように格子定数を Fitting する。

さらに、実験誤差、バックグラウンド等も Fitting パラメーターに入れる。

= 格子定数の精密化

本課題演習では TOPAS というプログラムを用いて、WPPD 法で解析する。

さらに、単位胞内の原子の位置まで決定したりできる Rietveld 法もある。

2. 解析の手順

実験室のマニュアル参照

“Laboratory Work in Physics B4” -- Handout No.10

Your name (_____) Jan 23th, 2017 (Mon.)

Lattice-constant refinement

1. Refining lattice constant

Evaluation of lattice constants using single peak position

⇒ The evaluated constant depends on the peak you choose

Experimental errors are not well considered etc.

Thus, it is difficult to evaluate the lattice constant accurately

A better way is to fit all the peaks by varying the lattice constants so that most peak positions are reproduced

Also, experimental errors are also included in the fitting parameters

= “Lattice constant refinement”

Here we use a program called “TOPAS” and analyze the data with the WPPD method.

If you want to determine atomic positions within the unit cell, you should use the Rietveld method.

2. Analysis procedure

Refer to the manual in the lab.