

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。

より高級な解析方法として、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