

[rigaku.com](https://www.rigaku.com)で見る

B-XRD1001 - WPPF法による混合試料の定量分析

はじめに

WPPF (Whole Powder Pattern Fitting; 全パターンフィッティング) 法は、格子定数の情報をもとに、比較的広い角度範囲をプロファイルフィッティングする手法です。WPPF法を混合試料に適用すると、各回折ピークの角度と強度が精密化され、含有結晶相の回折パターンのスケール因子が求められます。スケール因子とデータベースのRIR (Reference Intensity Ratio) 値から、各相の重量比を簡便に算出することが可能です。ここでは、高速1次元検出器を搭載したデスクトップX線回折装置を用いて高強度の回折プロファイルを短時間で測定し、WPPF法により定量分析した例を示します。

測定・解析例

WPPF法による4成分混合試料の解析結果を図1に示しました。約10分の測定時間で最強ピークの強度が10,000 countsを超え、WPPF法による解析に十分な回折強度が得られました。WPPF法による4成分の定量結果は試料調製値に非常に近い値が得られました (表1と図2)。

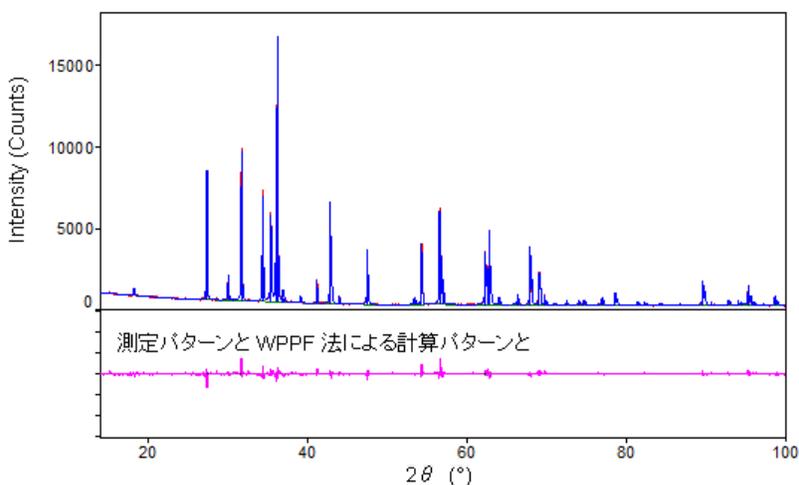


図1 4成分からなる粉末試料のWPPF法による解析結果

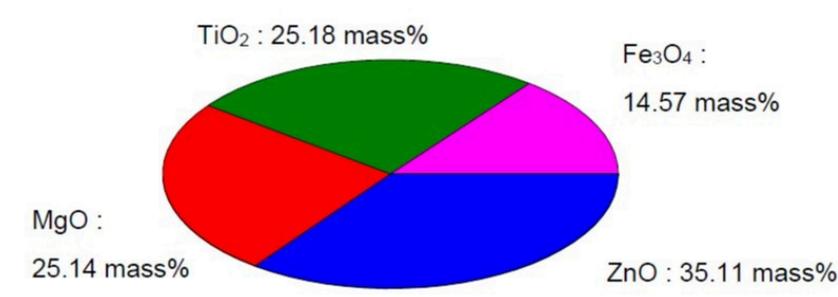


図2 WPPF法より得られた定量結果グラフ

表1 測定試料の成分とWPPF法による定量結果

成分名	調整値	WPPF法による定量結果
ZnO	35.8	35.11(10)
MgO	26.3	25.14(17)
TiO ₂	24.7	25.18(10)
Fe ₃ O ₄	13.2	14.57(10)

推奨装置とソフトウェア

- デスクトップX線回折装置 MiniFlex + 高速1次元X線検出器 D/teX Ultra2
- X線分析統合ソフトウェア SmartLab Studio II (Powder XRDプラグイン)

おすすめの製品



MiniFlex

デスクトップX線回折装置 *MiniFlex*

卓上タイプの高性能多目的粉末回折分析装置。



SmartLab

全自動多目的X線回折装置 *SmartLab*

装置が最適条件を教えてくれるガイダンス機能を実現。



SmartLab SE

全自動多目的X線回折装置 *SmartLab SE*

リガクの分析ノウハウを凝縮した「ガイダンス」機能を搭載。



SmartLab Studio II

X線分析統合ソフトウェア *SmartLab Studio II*

測定から解析まで、X線分析のすべてをこなす統合ソフトウェア