

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

# B-XRD1111 - DD (Direct Derivation) 法による 3成分試料の定量分析

## はじめに

粉末X線回折法による定量分析は長らく、純物質や標準物質を用いて定量既知の試料を調製し検量線を作成する検量線法によって行われてきました。その後、パーソナルコンピューターを用いて結晶構造から計算する、検量線不要の定量分析が可能になりました。しかし、結晶構造が既知でなければならず、分析可能な物質には限りがありました。本方法は、測定プロファイルから得られる各成分の回折線ピークの総積分強度と化学組成だけで定量値が得られる方法です。

## 測定・解析例

コランダム (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) を33.3 mass%、カルサイト (CaCO<sub>3</sub>) を40.0 mass%、アナターゼ (TiO<sub>2</sub>) を26.7 mass%混合した粉末のDD定量分析法による分析例を示します。

- (1) プロファイル測定を行います (図1)。
- (2) 結晶相を同定し各成分の組成を決定します (図2)。
- (3) WPPF (Pawley法) など各成分の回折線ピーク総積分強度を算出し、DD定量法による定量値を求めた結果、混合比と近い定量結果が得られました (図3)。

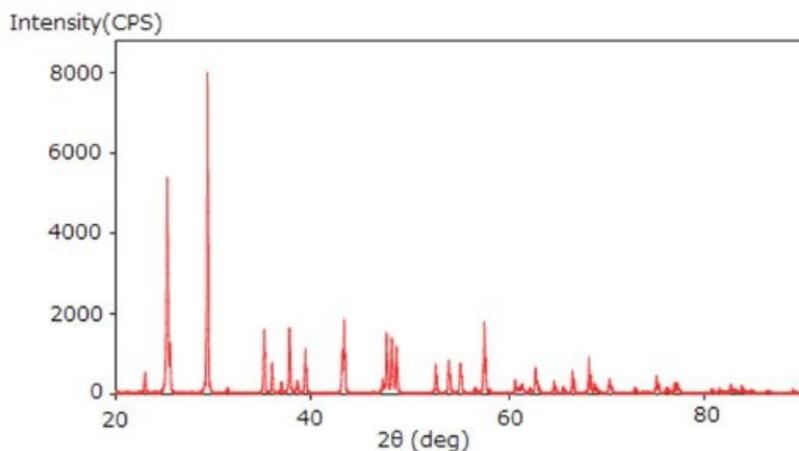


図1 プロファイル測定

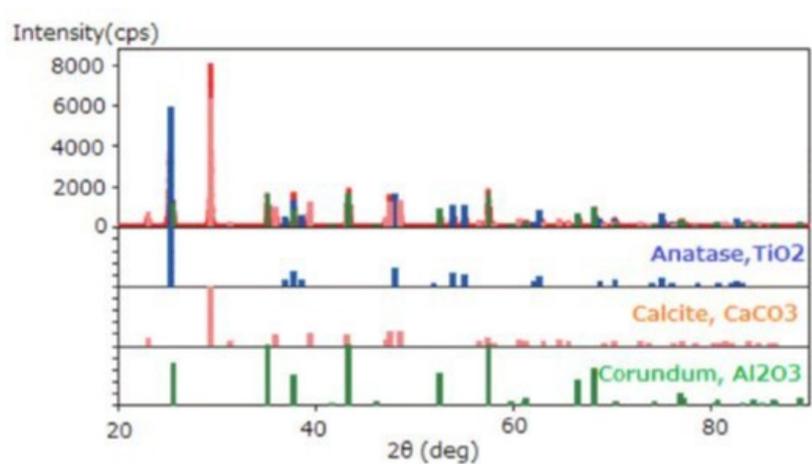


図2 定性分析

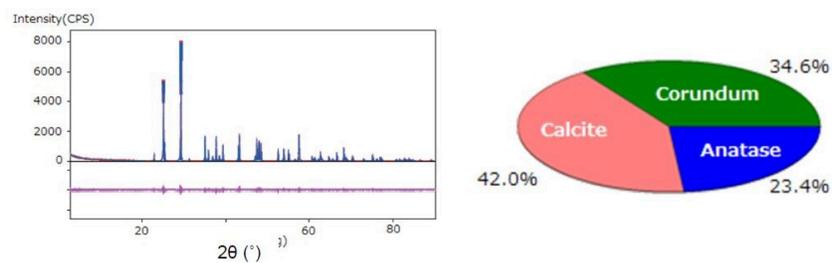


図3 WPPF (Pawley 法) によるフィティングとDD 定量法による定量結果

参考文献： H. Toraya: J. Appl. Cryst., 49(2016) 1508-1516.

H. Toraya: リガクジャーナル, 48(2)(2017) 12-18.

#### 推奨装置・ソフトウェア

- 全自動多目的X線回折装置 SmartLab
- 全自動多目的X線回折装置 SmartLab SE
- デスクトップX線回折装置 MiniFlex
- X線分析統合ソフトウェア SmartLab Studio II (Powder XRDプラグイン)

※ 「DD法」「Direct Derivation Method」「DD Method」は、株式会社リガクの商標または登録商標です。

## 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