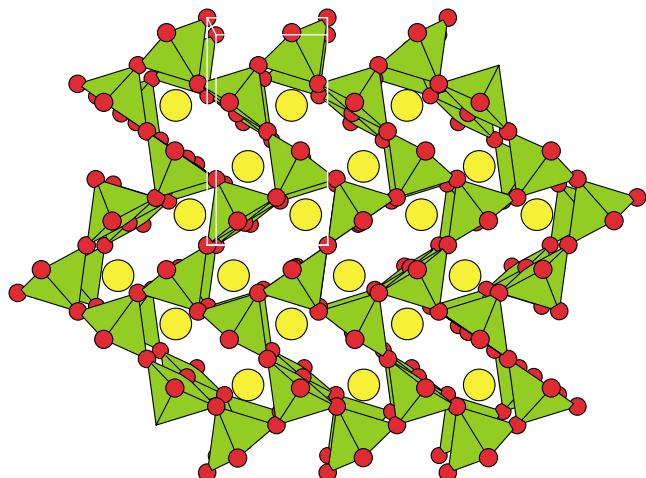


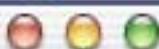
粉末回折データを用いた 構造の精密化

無機材質研究所
泉 富士夫



日本セラミックス協会年会
「セラミストのためのパソコン講座」
ミニシンポジウム

2001年3月22日



戻る



進む



中止

更新



ホーム



自動入力



プリント



メール

アドレス : http://www2.nirim.go.jp/~izumi/rietan/angle_dispersive/angle_dispersive.html

› 移動

[Live Home Page](#) [アップルコンピュータ](#) [サポート](#) [Apple Store](#) [MacTopia Japan](#) >

Multi-Purpose Pattern-Fitting System RIETAN-2000

My image of RIETAN-2000 is a white dewy flower of lotus floating quiet on a muddy pond evolving poisonous air.

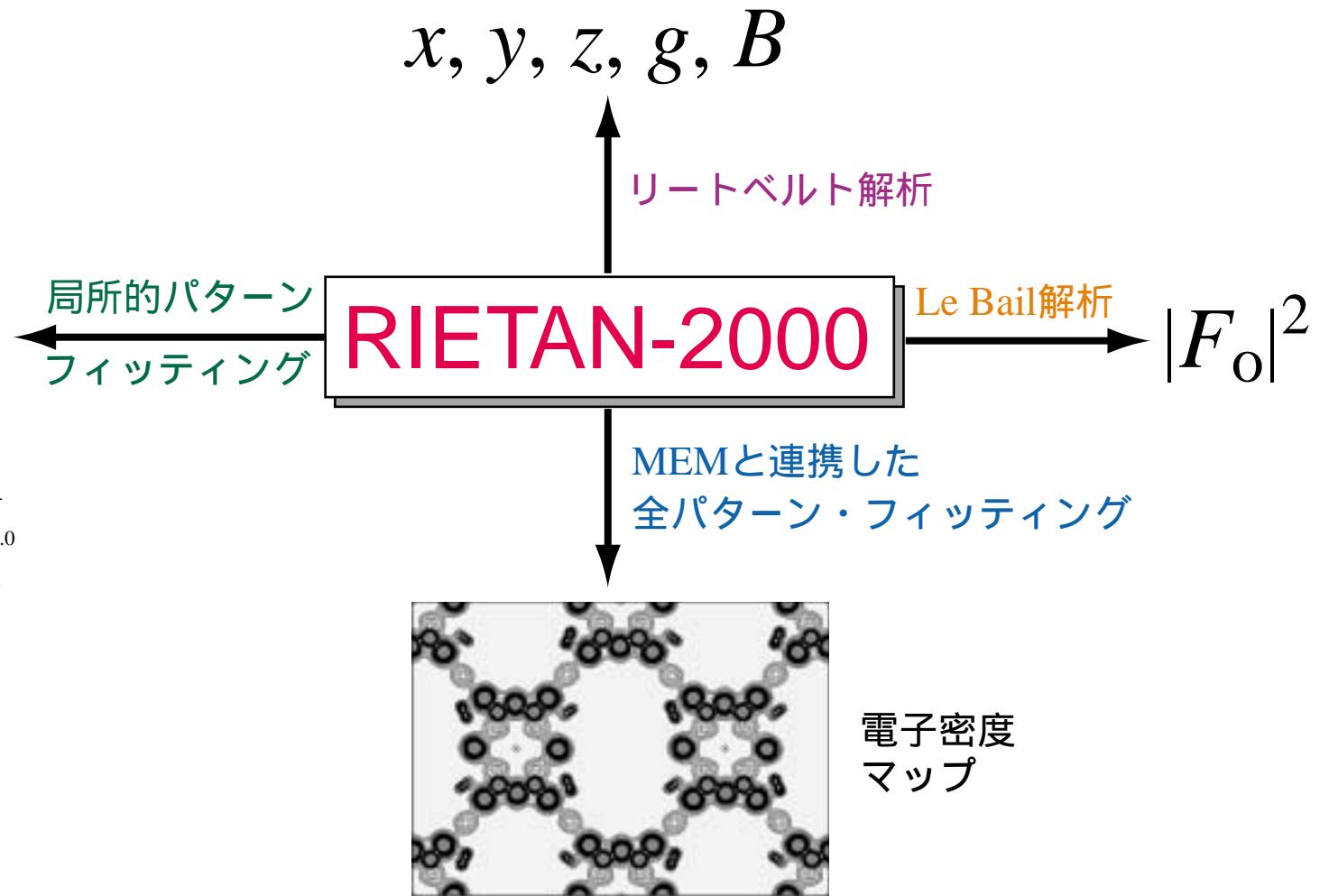
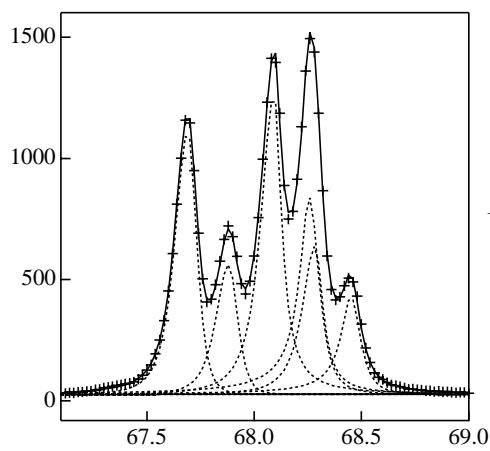
This is the reason why the present page has a background of pure white.

Contents

- 1. Distribution of RIETAN-2000 and the license agreement**
- 2. What can we do with RIETAN-2000?**
- 3. Refine different**
- 4. Tink different**
- 5. Supported platforms and auxiliary software**
- 6. Archive, editing, and conversion utilities**
- 7. Archive files for RIETAN-2000, ORFFE, and templates**
- 8. Source programs and Fortran compilers**
- 9. Template files**
- 10. PDF documents and other copyrighted articles**
- 11. Known problems**
- 12. Feedback and suggestions**
- 13. Announcements**
- 14. Forthcoming revision under consideration/construction**
- 15. Acknowledgments**
- 16. HOME**

1. Distribution of RIETAN-2000 and the license agreement

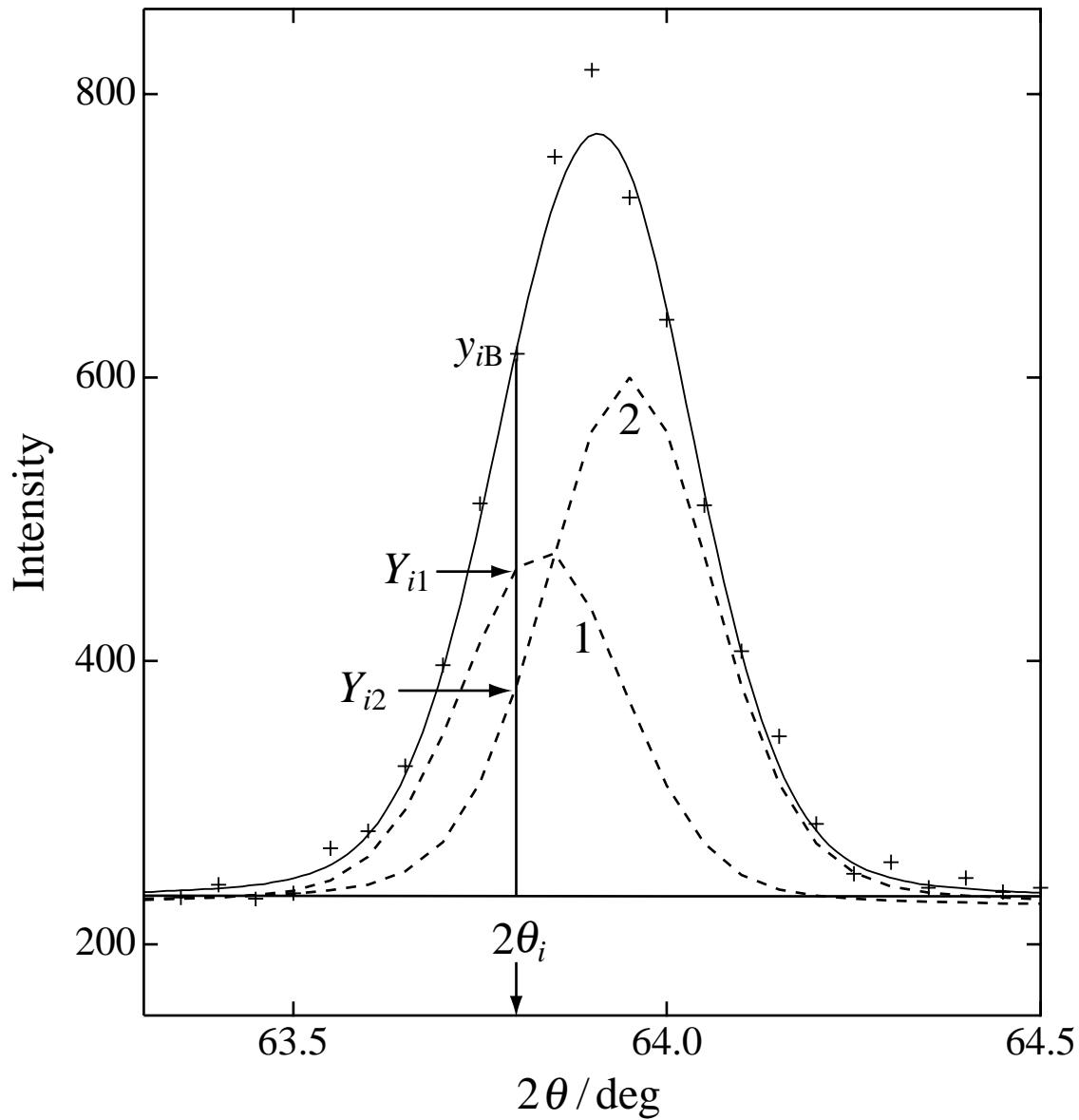
I am proud to announce that I have been distributing a versatile pattern-fitting system, RIETAN-2000, for angle-dispersive X-ray and neutron powder diffraction in this page as of August 1, 2000. It is a



三種のパターン分解法とリートベルト法の比較

局所的プロファイル・ Pawley 法 フィッティング法		Le Bail 法	リートベルト法	
解析の目的	パターン分解	パターン分解 格子定数の精密化	パターン分解 格子定数の精密化	構造パラメータと 格子定数の精密化
解析対象範囲	パターンの一部	パターン全体	パターン全体	パターン全体
プロファイル	2θ依存性なし	2θ依存性あり	2θ依存性あり	2θ依存性あり
ピーク位置	独立パラメータ	格子定数の関数	格子定数の関数	格子定数の関数
積分強度	独立パラメータ	独立パラメータ	精密化後に計算	構造パラメータの関数

Estimation of 'observed' integrated intensity



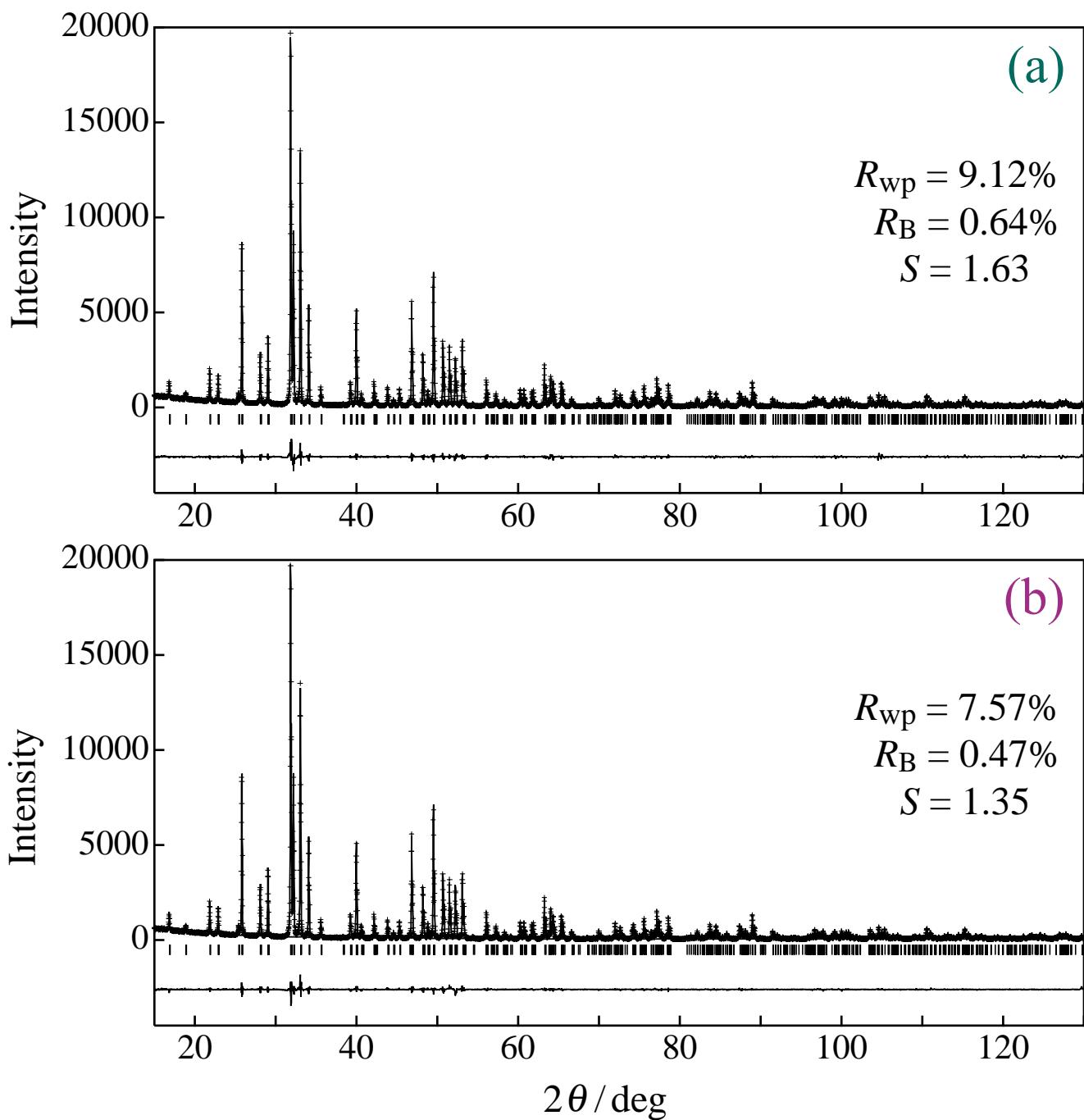
$$I_{ok} = \sum_i y_{iB} \frac{Y_{ik}}{\sum_K Y_{iK}}$$

$$Y_{ik} = sm_k P_k L_k |F_k|^2 f(2\theta_i - 2\theta_k)$$

Results of Le Bail refinements of fluorapatite with initial integrated intensities estimated

(a) by Wilson's statistics

(b) estimated from structure parameters



部分プロファイル緩和のもとでの リートベルト解析

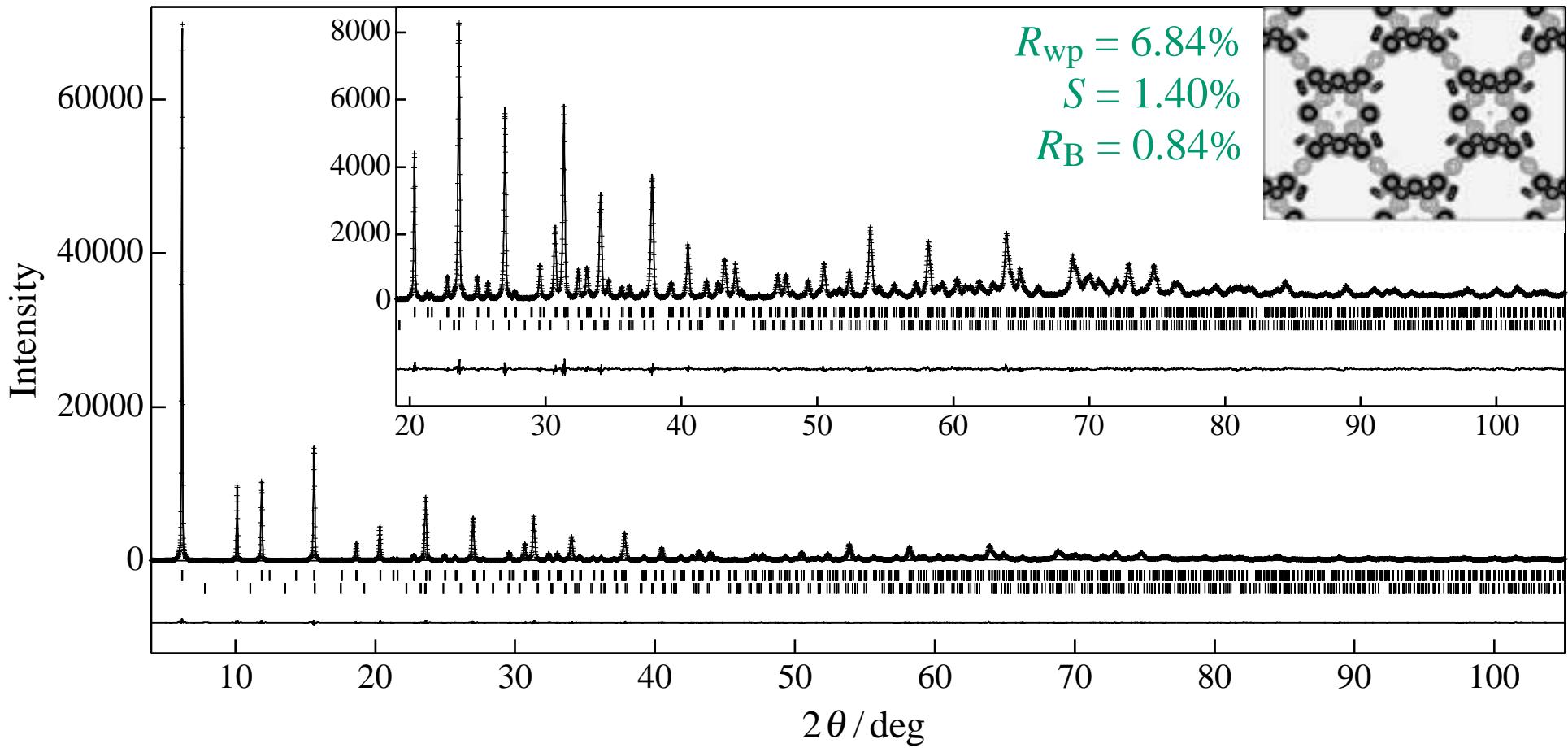
$$H_k = (U \tan^2 \theta_k + V \tan \theta_k + W)^{1/2}$$

Primary Profile Parameter: **PPP** (H_k)

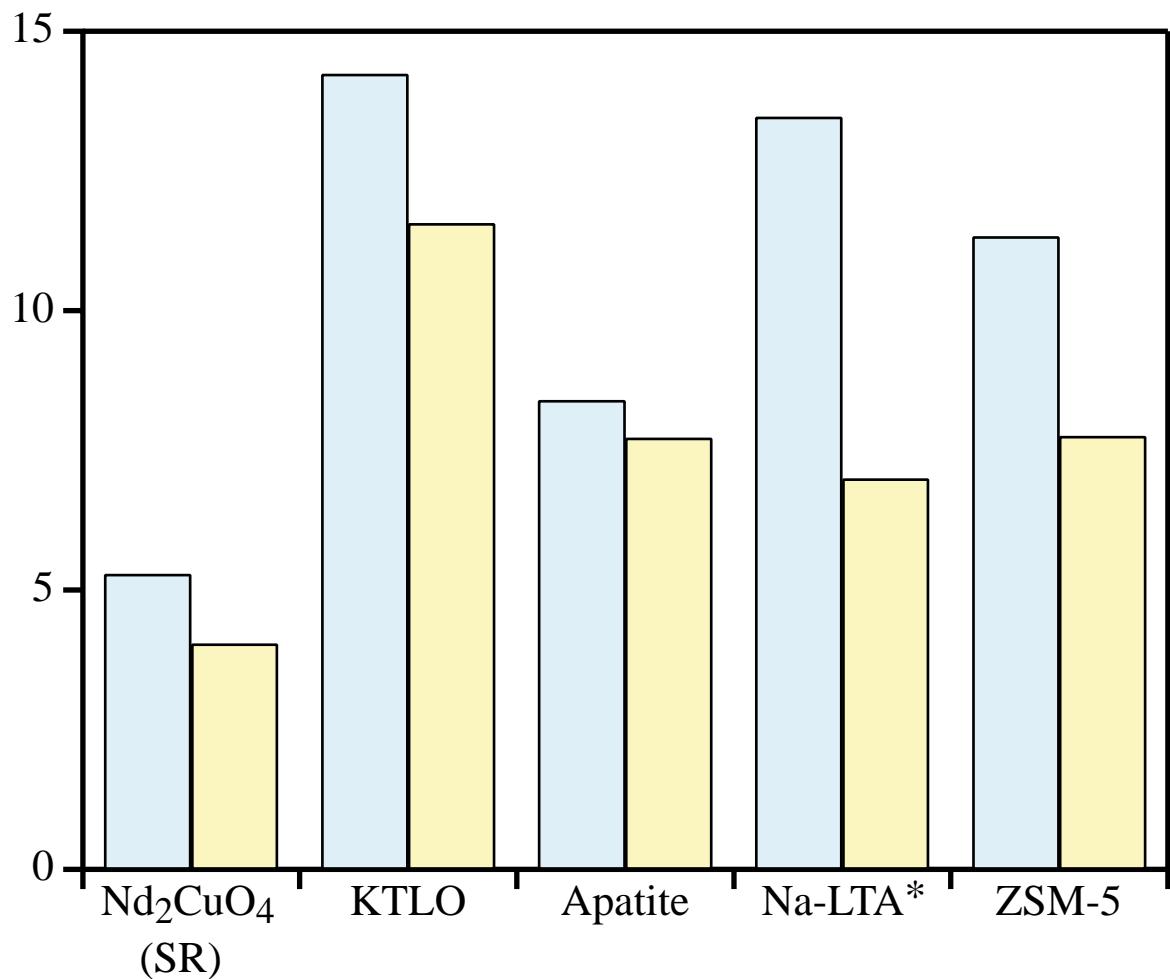
Secondary Profile Parameter (U, V, W)

- 1) フィットのよくない(半)孤立反射のPPPを直接, 精密化する.
PPPに関する近似や仮定はいっさい必要ない.
- 2) すべての反射のピーク位置と積分強度は, 通常のリートベルト解析同様, それぞれ格子定数と構造パラメーターから計算する.

Dehydrated zeolite Li-FAU



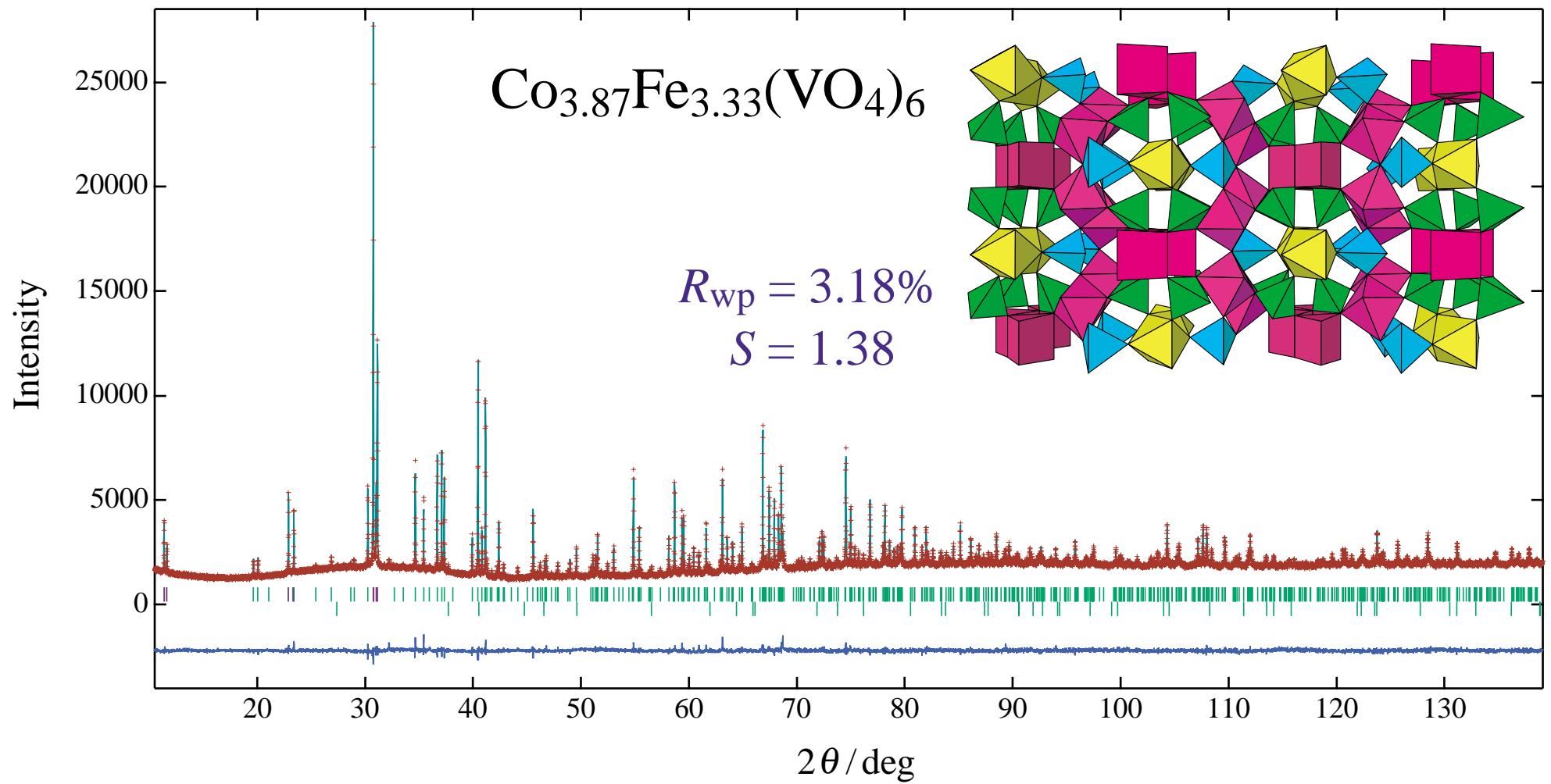
Comparison of R_{wp} 's obtained with two different profile functions



- Pseudo-Voigt function of TCH + asymmetry correction of FJC
- Split-type pseudo-Voigt function + **partial profile relaxation**

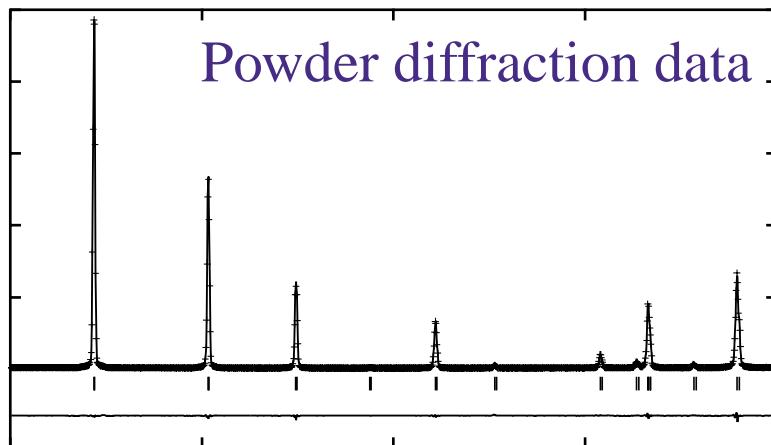
* Angular aperture of Soller slits = 5°

SPring-8, BL15XU, $\lambda = 1.745 \text{ \AA}$



Imaging of diffraction data by the MEM

Sakata *et al.*

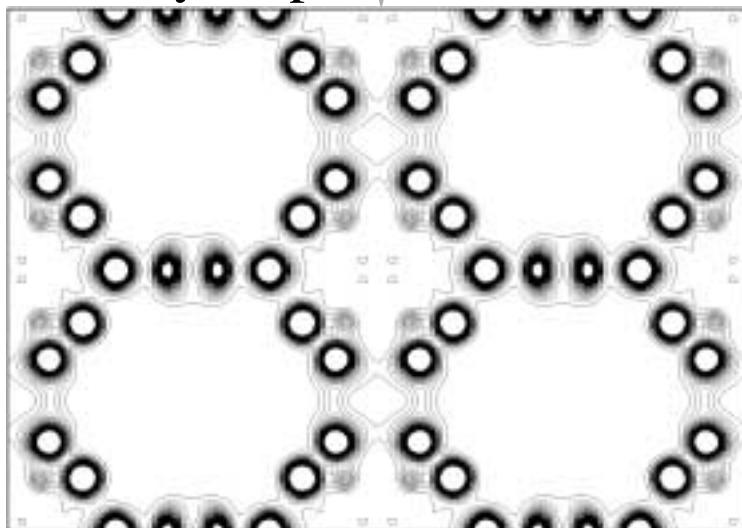


Individual profile fitting
Pawley & Le Bail methods
Rietveld method

$hkl, F_O, \sigma(F_O)$

MEM

Density map



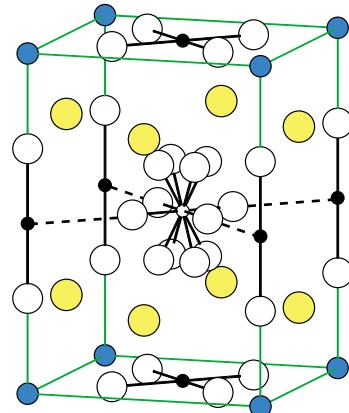
More adequate modeling of

1. disordered atomic arrangements

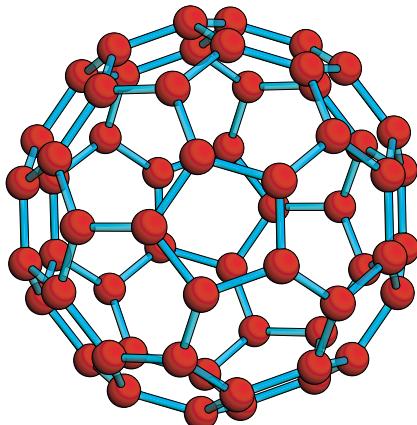
Split-atom model



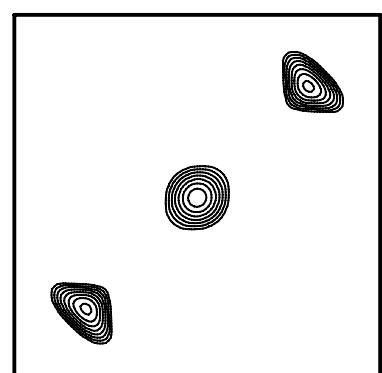
Electron/nuclear-density distribution



2. covalent bondings

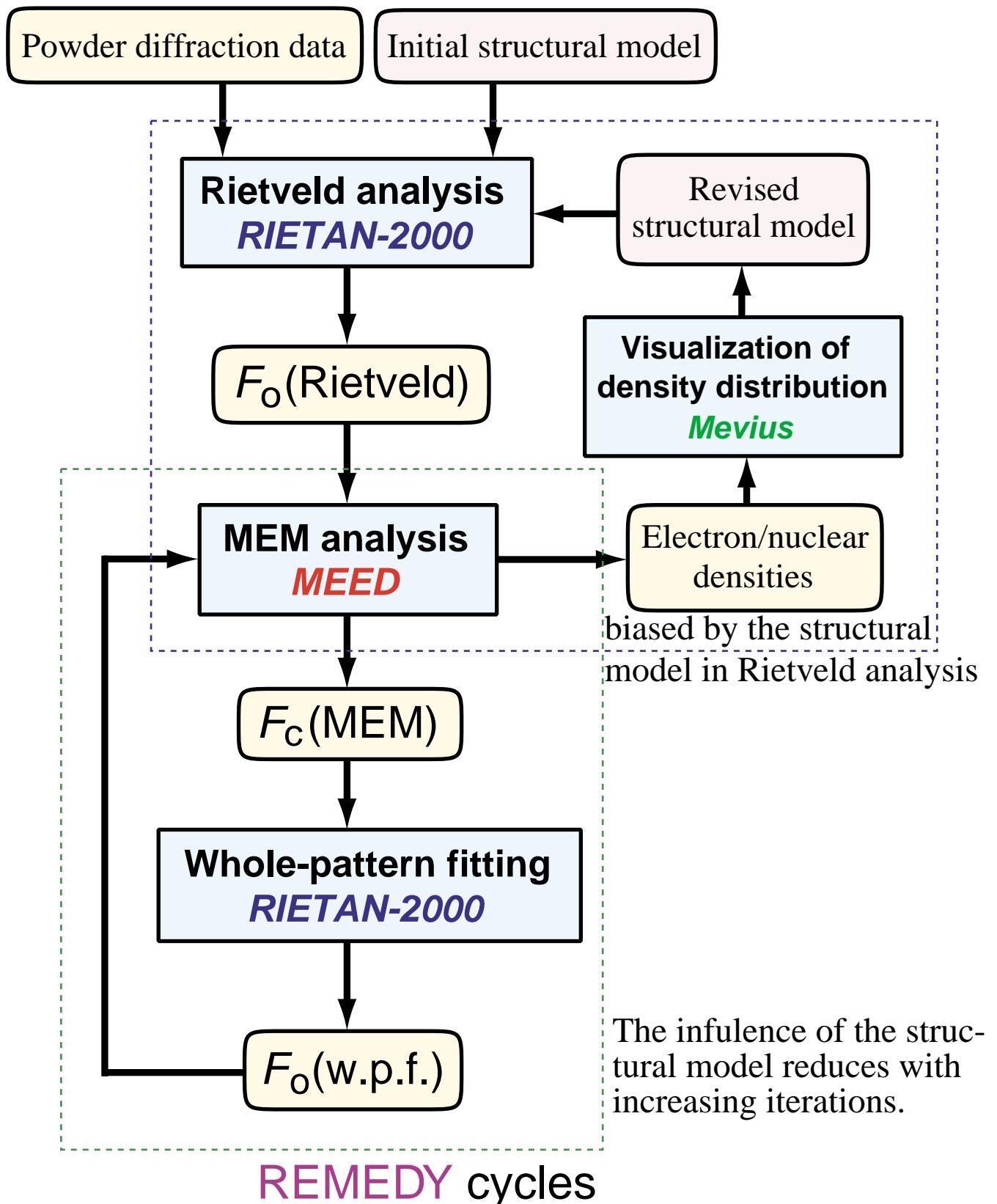


3. nonlocalized electrons

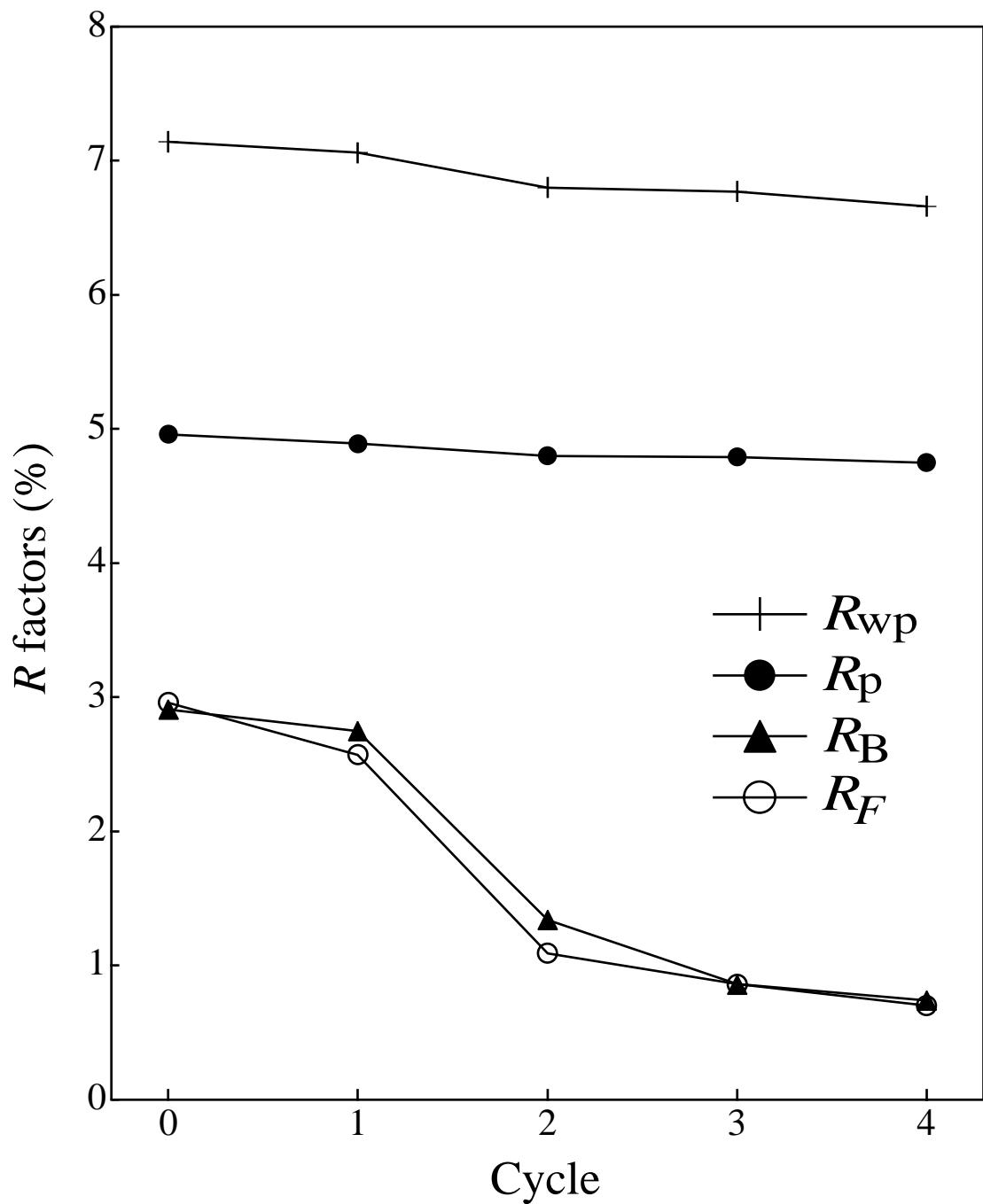


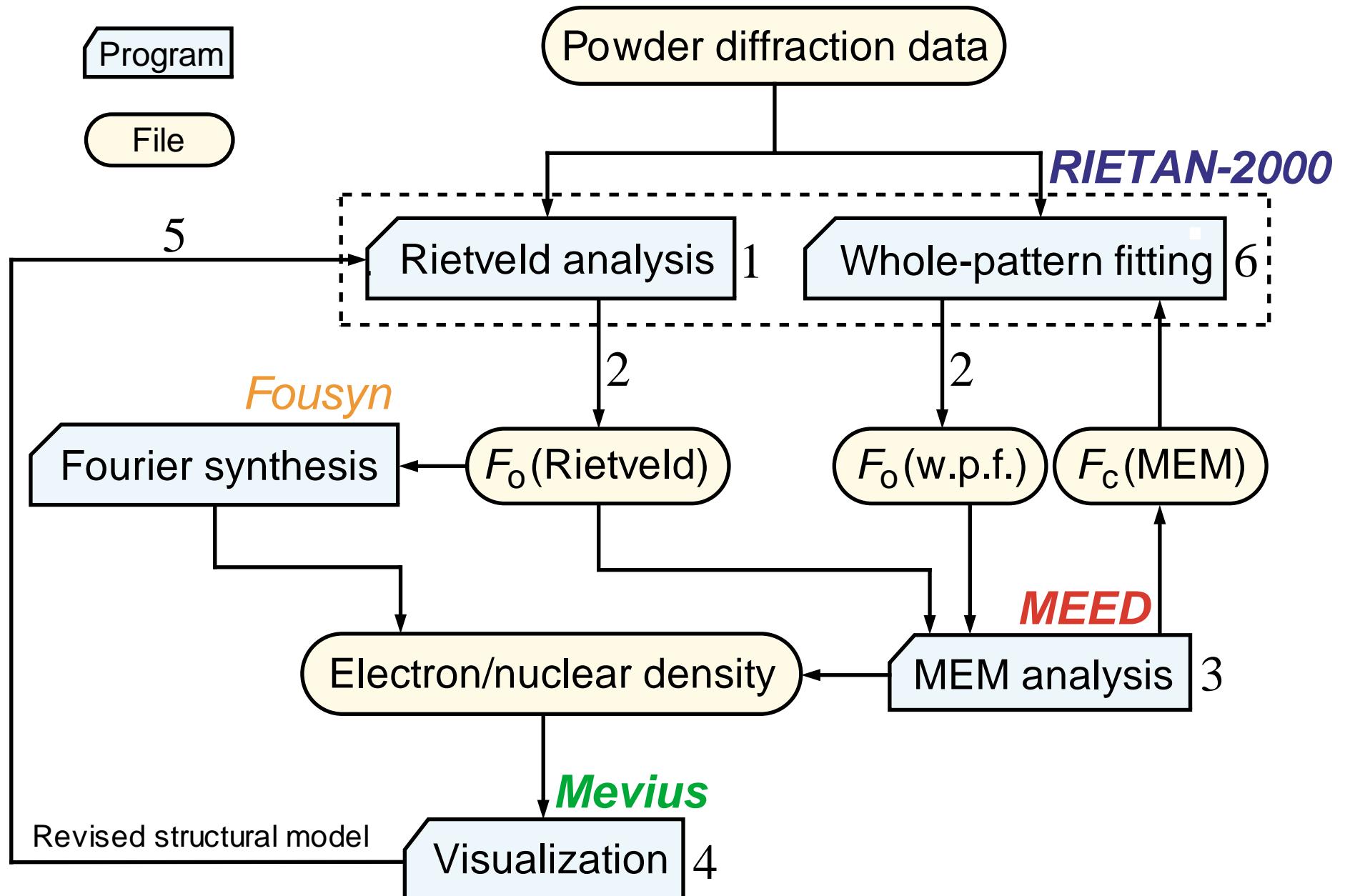
4. anharmonic thermal vibration

RIETAN-2000 + MEED = REMEDY

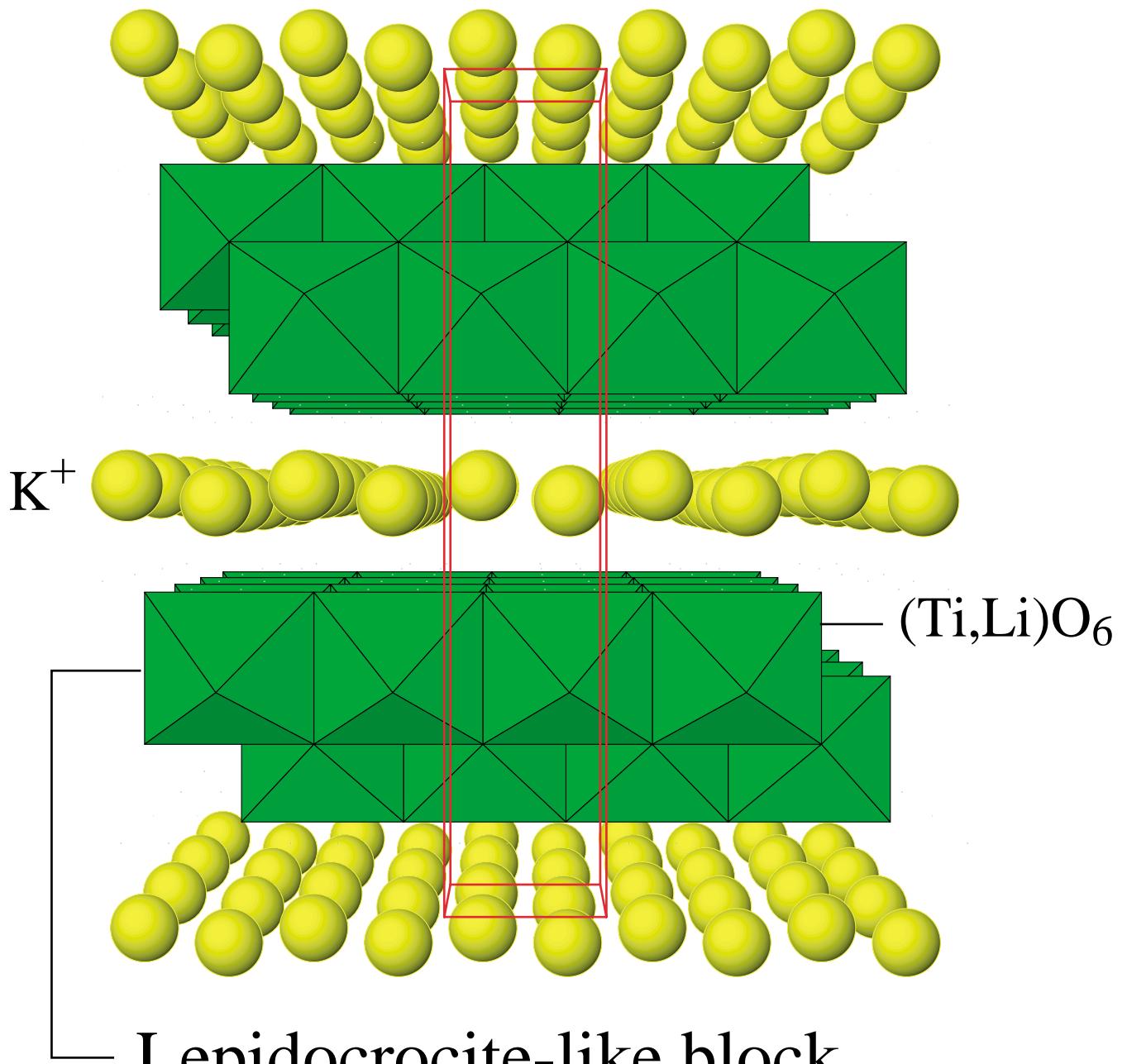


MEMと連携した全回折パターン・フィッティングによるNa-LTAの構造精密化過程における R 因子の変化



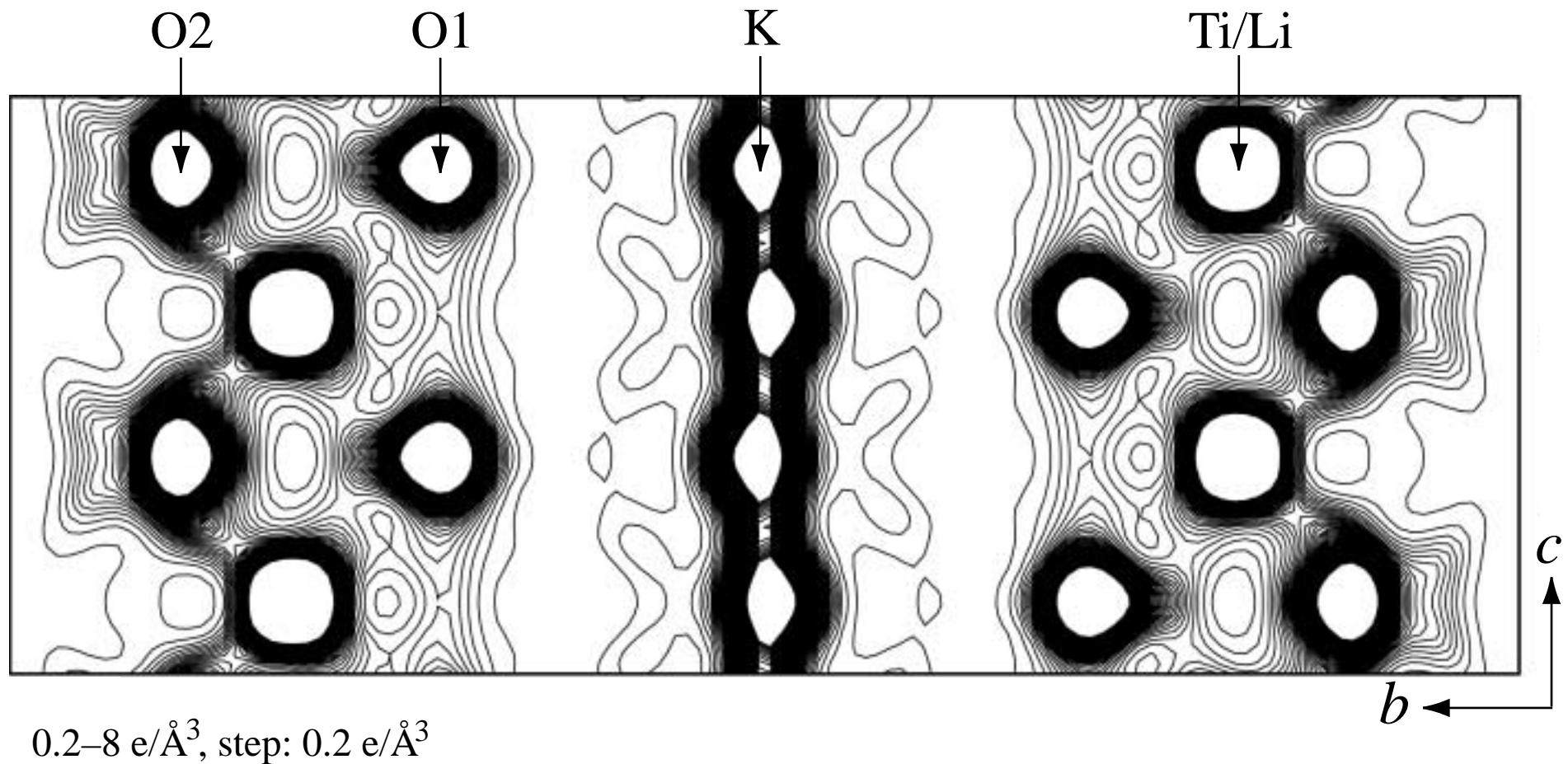


Idealized layered structure of $K_xTi_{2-x/3}Li_{x/3}O_4$ ($x = 0.8$)



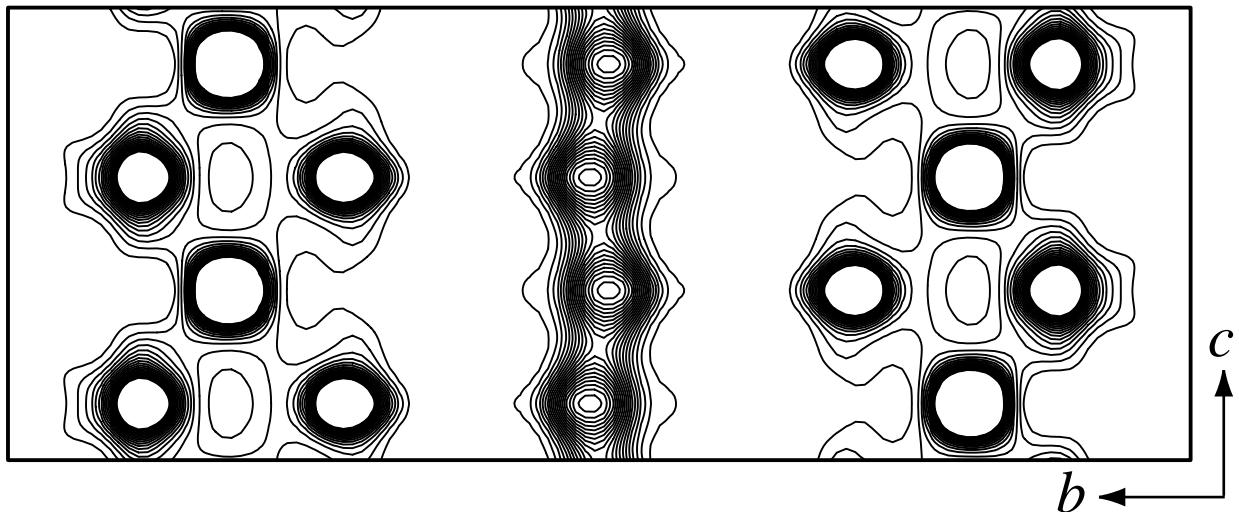
Neutron diffraction
 $B(K) \approx 10 \text{ \AA}^2$

Electron-density distribution in $K_xTi_{2-x/3}Li_{x/3}O_4$ ($x = 0.8$)



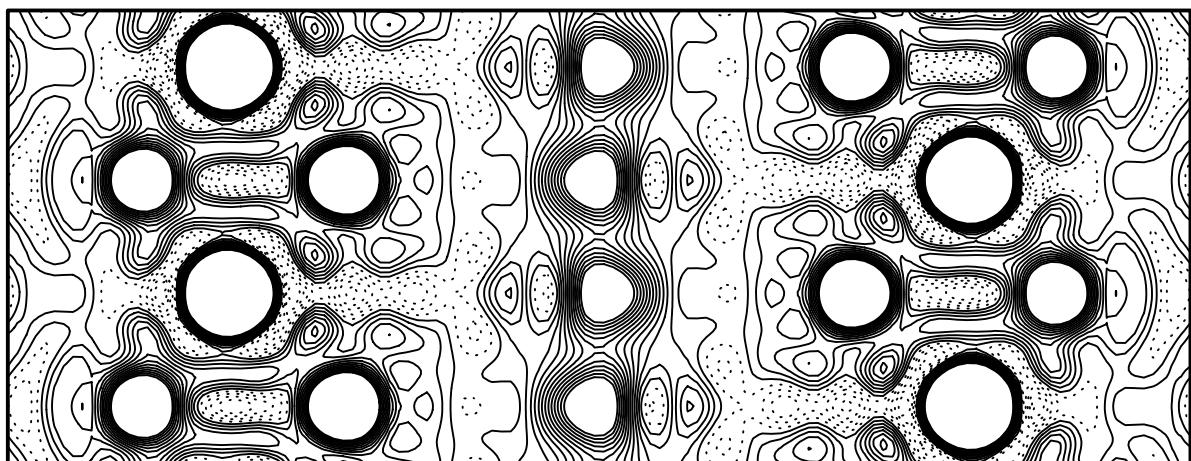
(100) Section of $\text{K}_x\text{Ti}_{2-x/3}\text{Li}_{x/3}\text{O}_4$ ($x = 0.8$)

MEM analyses (3 iterations)



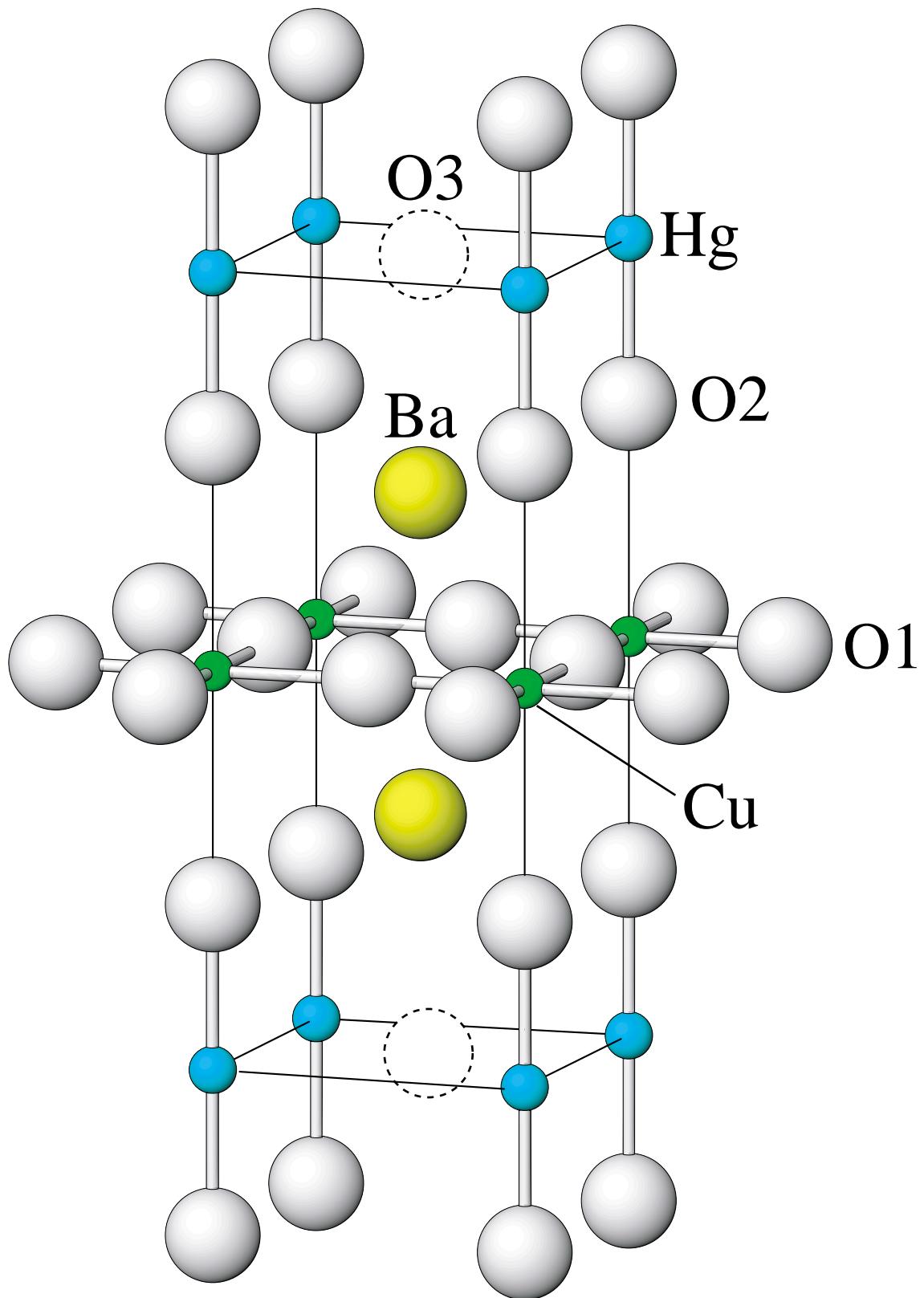
No negative densities or ripples appear by virtue of estimation of F for truncated reflections

Fourier synthesis

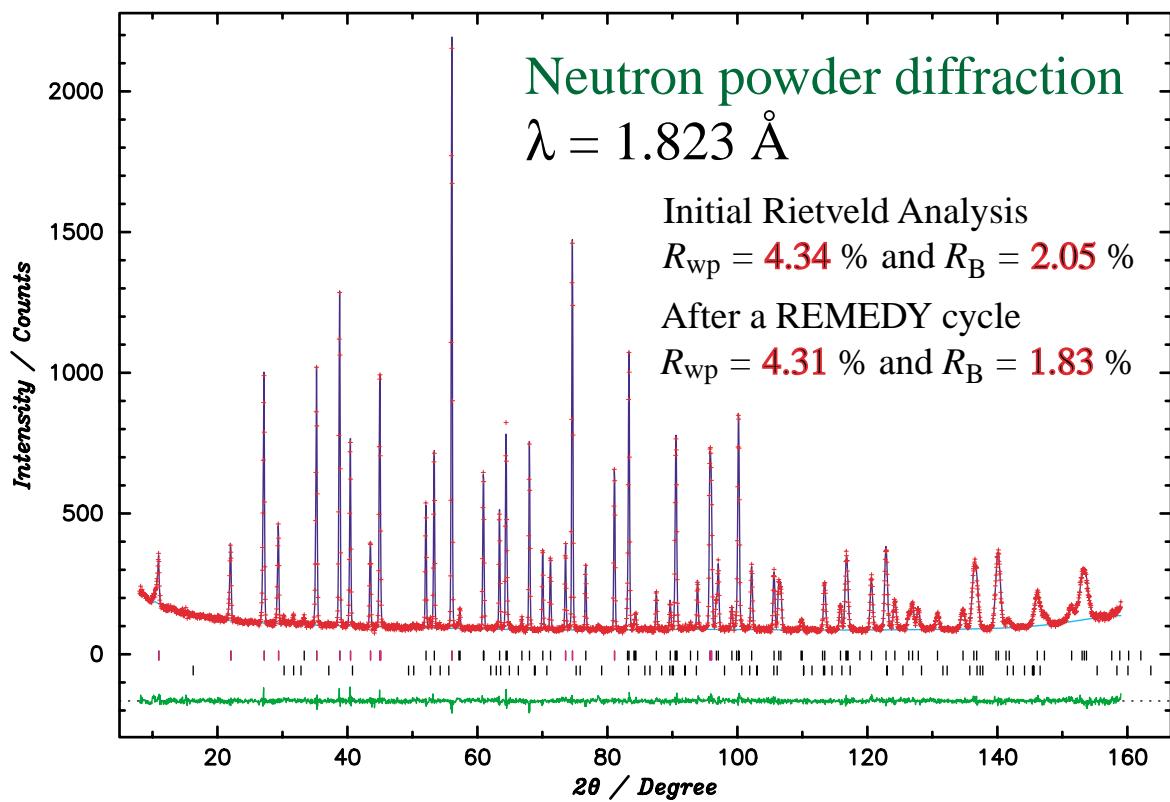
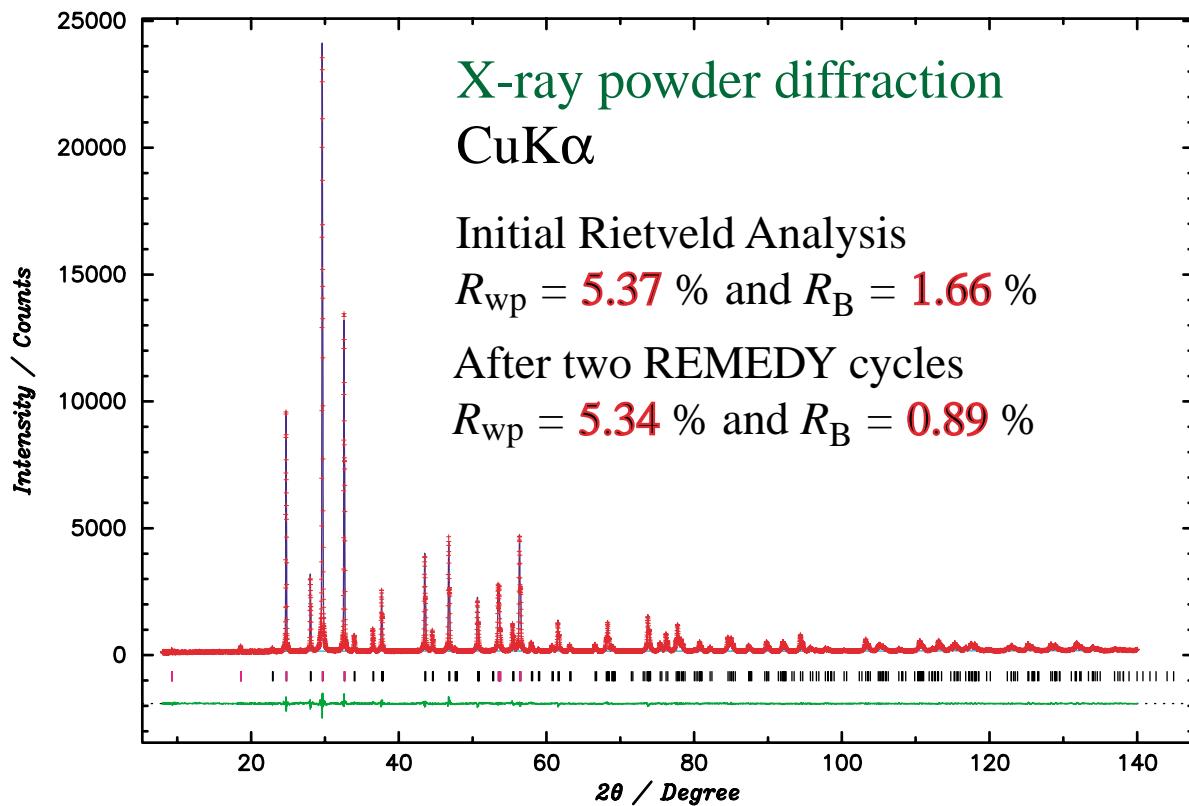


Full of ripples mainly because of the truncation of small- d reflections

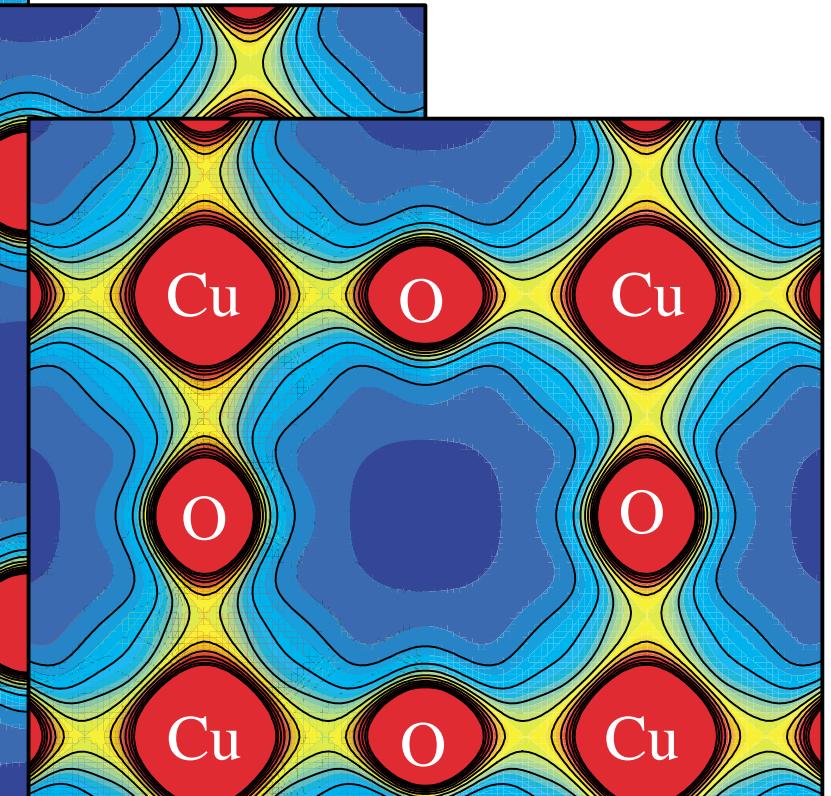
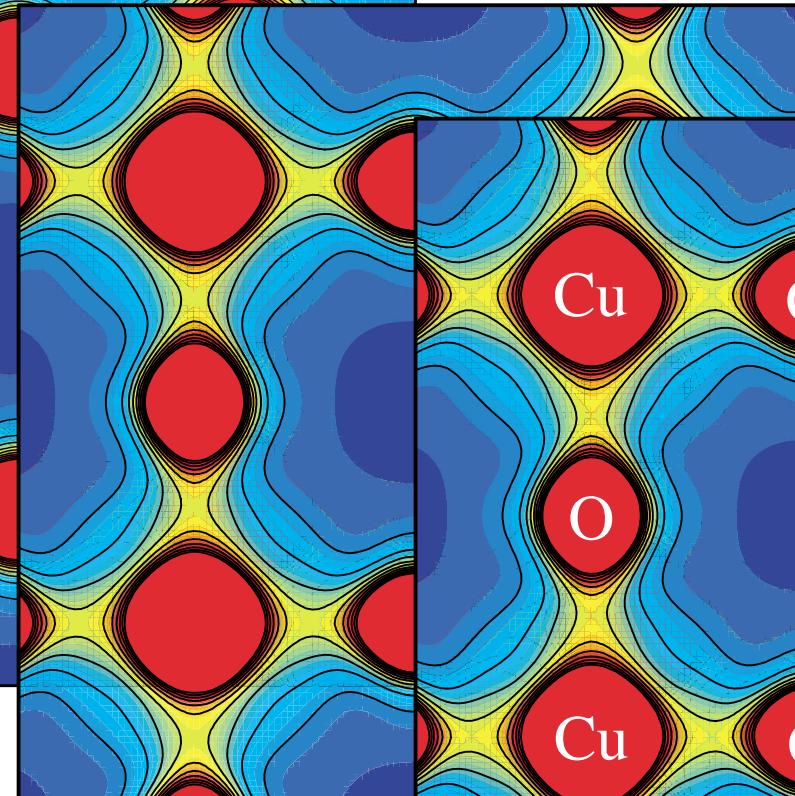
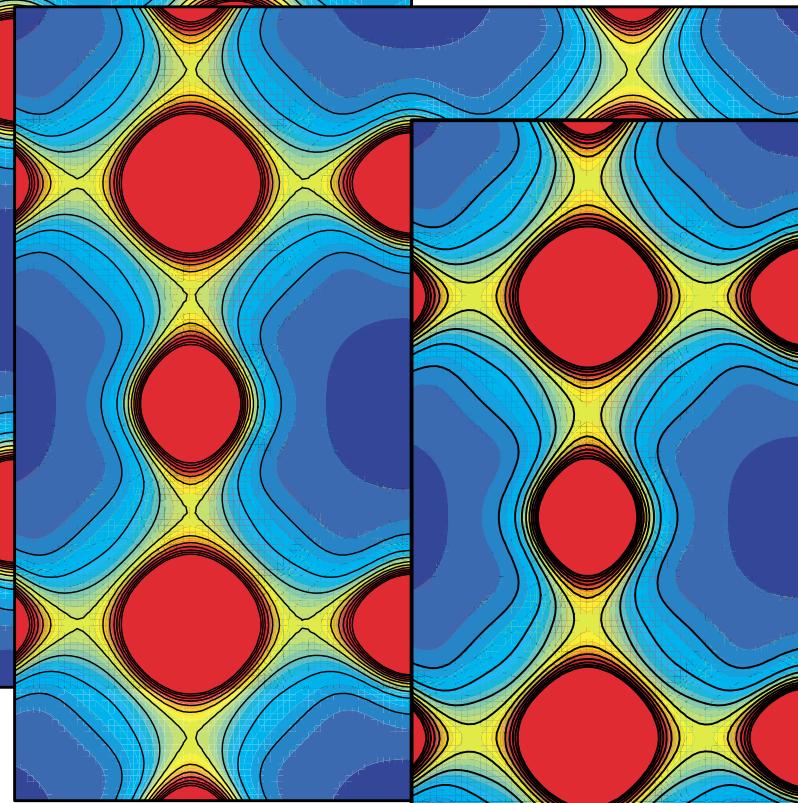
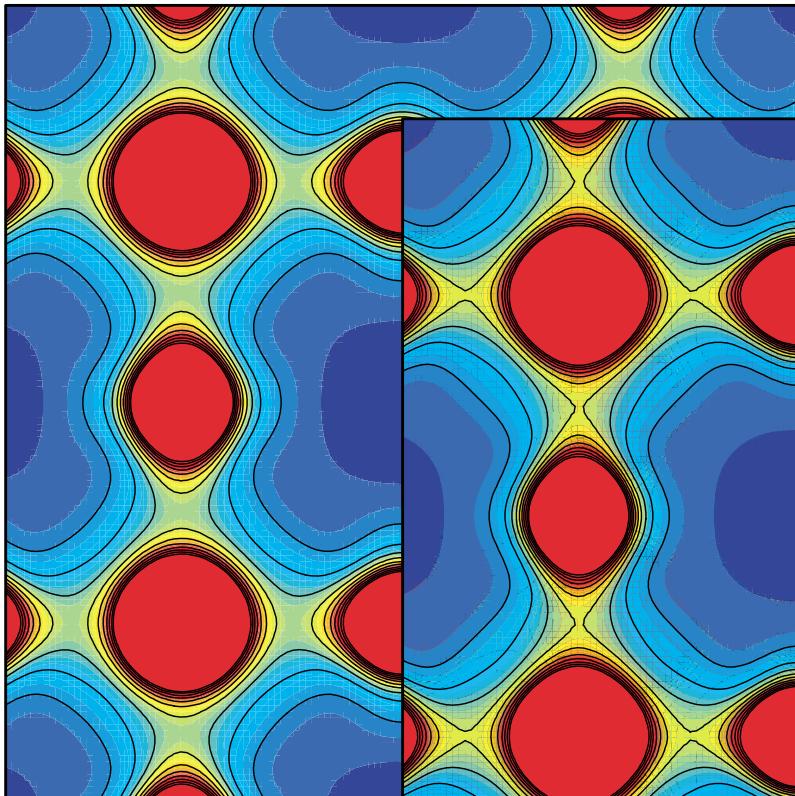
Structural model of $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$



$\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ ($T_c = 98$ K)



Changes in electron densities on the CuO₂ plane in HgBa₂CuO₂₊

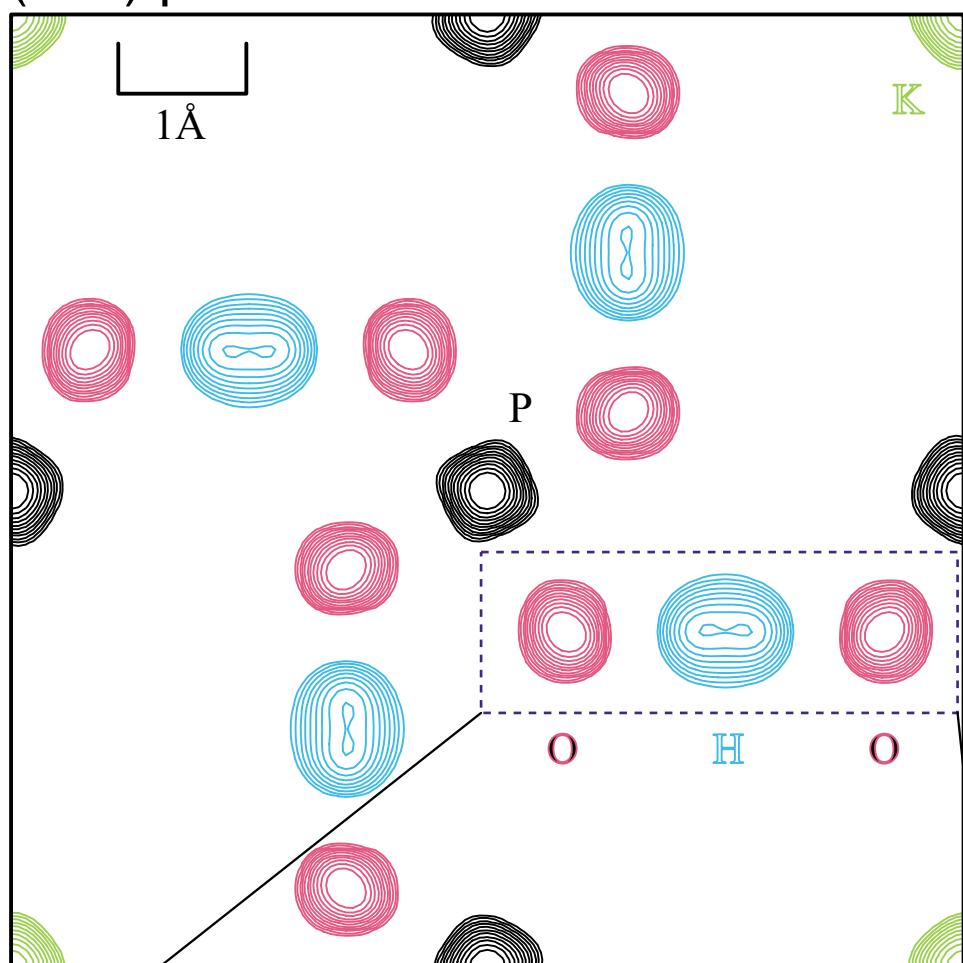


Contour range;
0–3 e/Å³ with a step of 0.3 e/Å³

Nuclear-density map for the paraelectric phase of KH_2PO_4

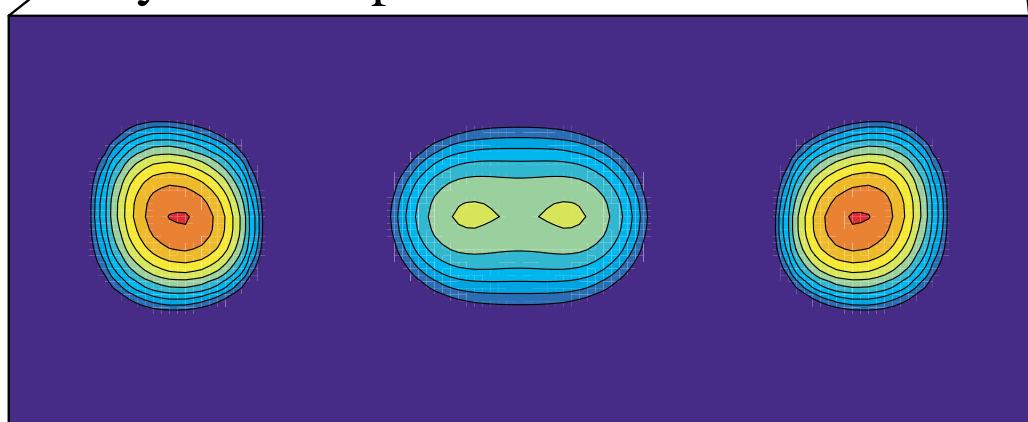
(001) plane

Kumazawa et al.

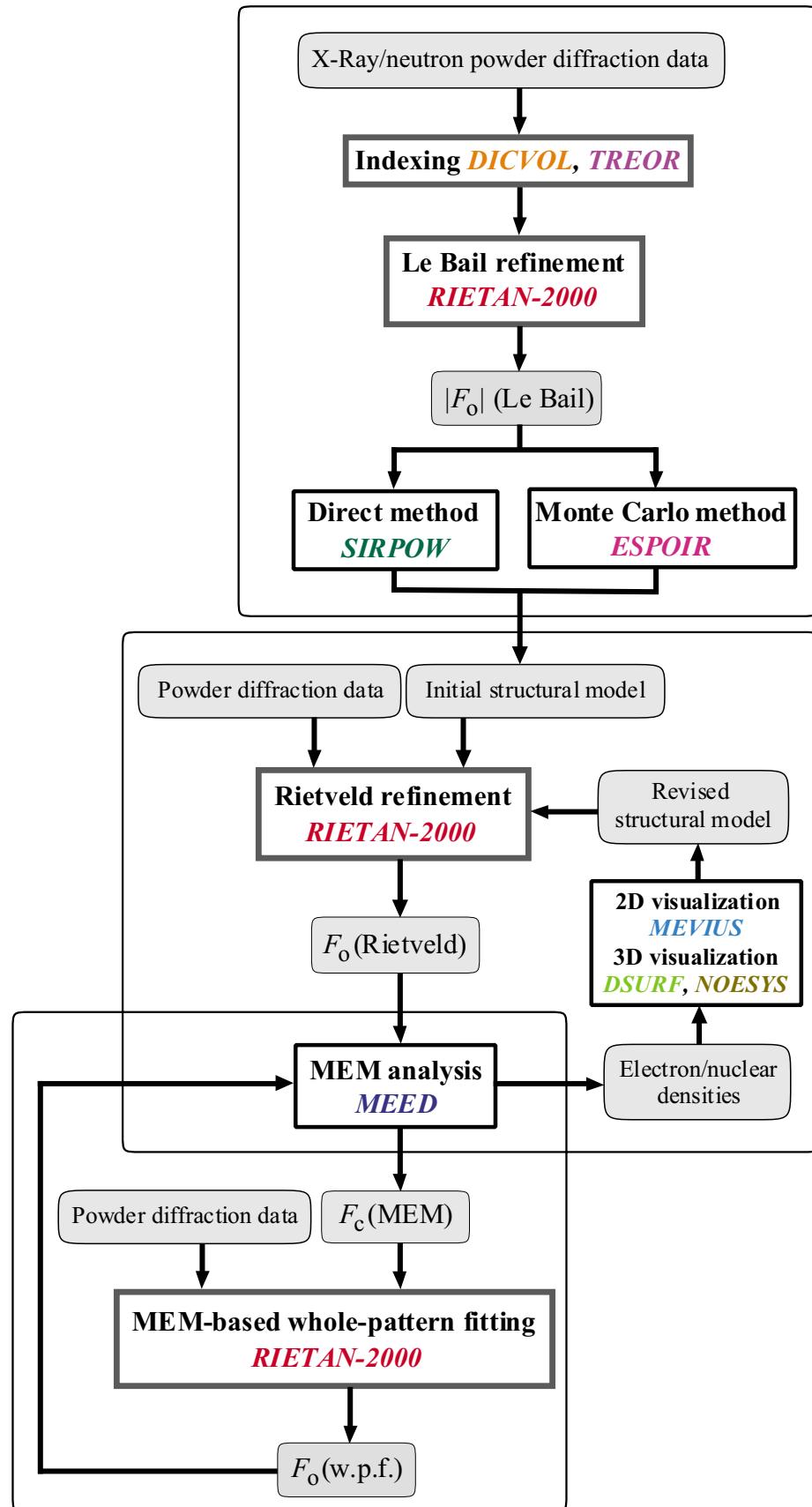


$$l(\text{H}-\text{H}) \approx 0.36 \text{\AA}$$

Symmetric potential with twin minima



A series of structure analyses using powder diffraction data and several programs



入力ファイル == Tink ==> 入力データ

If NBEAM = 1 and NTRAN = 1 then

DSANG = 0.5: 最低角で照射幅が SWIDTH となるような発散スリットの角度/°.

RGON = 185.0: ゴニオメータ-半径/mm.

SWIDTH = 20.0: 試料の照射幅/mm.

else if NBEAM = 1 and NTRAN = 2 then

PCOR1 = 0.5: 完全結晶の寄与の分率.

SABS = 1.0: (線吸収係数) × (有効厚み).

else if NBEAM = 1 and NTRAN = 3 then

XMUR1 = 0.0: (線吸収係数) × (キャビラリー内試料の半径).

end if

If NBEAM = 0 then

試料に含まれる(中性) 化学種と物質量. 最後に'/'を置く. 物質量は吸収補正に使う. 磁気散乱が観測される場合に限り, 磁性原子の元素記号の後に'*'を付加する.

例: 'Fe*', 'Ni*'.

'O' 12.0 'P' 3.0 'Ca' 5.0 'F' 1.0 /

磁性原子名に'*'を付けたなら, LCMFF(0に固定)とCMFF(I)(I=1~7)を磁性原

子の数と同じ行数だけ入力する. ただしLCMFFとCMFFは"International Tables,"

Vol. C, pp. 391-399中の(4.4.5.2)式と(4.4.5.3)式中のiと7つの係数である.

たとえばFe²⁺(化学種名としては'Fe'を入力)の場合, 次のように入力する:

0 0.0263 34.960 0.3668 15.943 0.6188 5.594 -0.0119

'*'つきの原子の数はすでにわかっているので, '}'は不要.

else

試料に含まれる化学種. どんな化学種が入力できるかは, データベース・ファイルasfdcを参考のこと. 行の最後に'/'を置く.

'O-' 'P' 'Ca²⁺' 'F-' /

end if

If NBEAM = 2 then

使用した波長における異常分散の補正項($\Delta f'$ と $\Delta f''$)を化学種の数(NREAL)だけ繰り返し入力する.

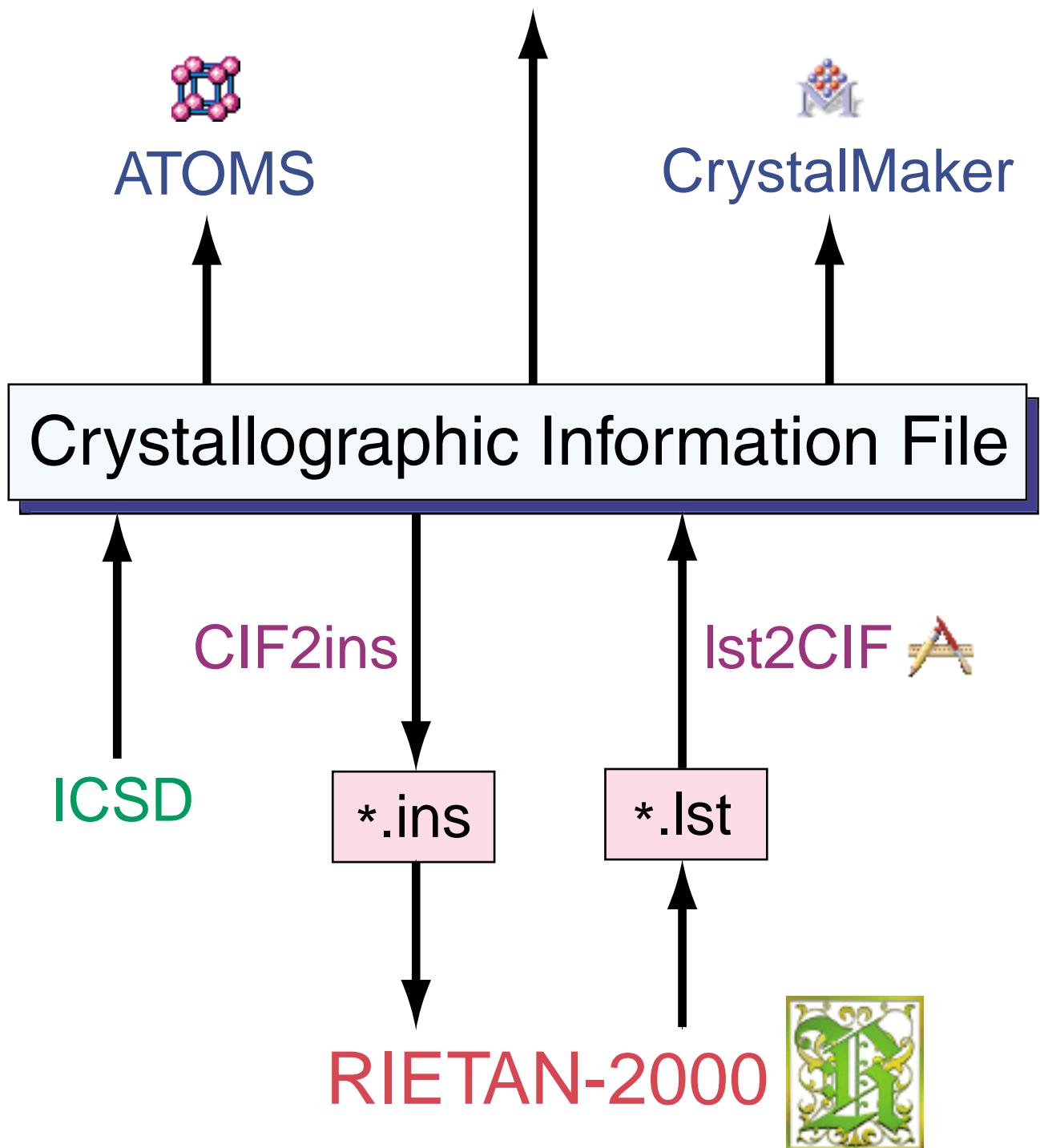
RIETAN中の入力文: READ(5,*) (DELTf1(J), DELTf2(J), J = 1, NREAL)

入力データの数(2×NREAL)はすでにわかっているので,'/'も'}'も不要.

end if

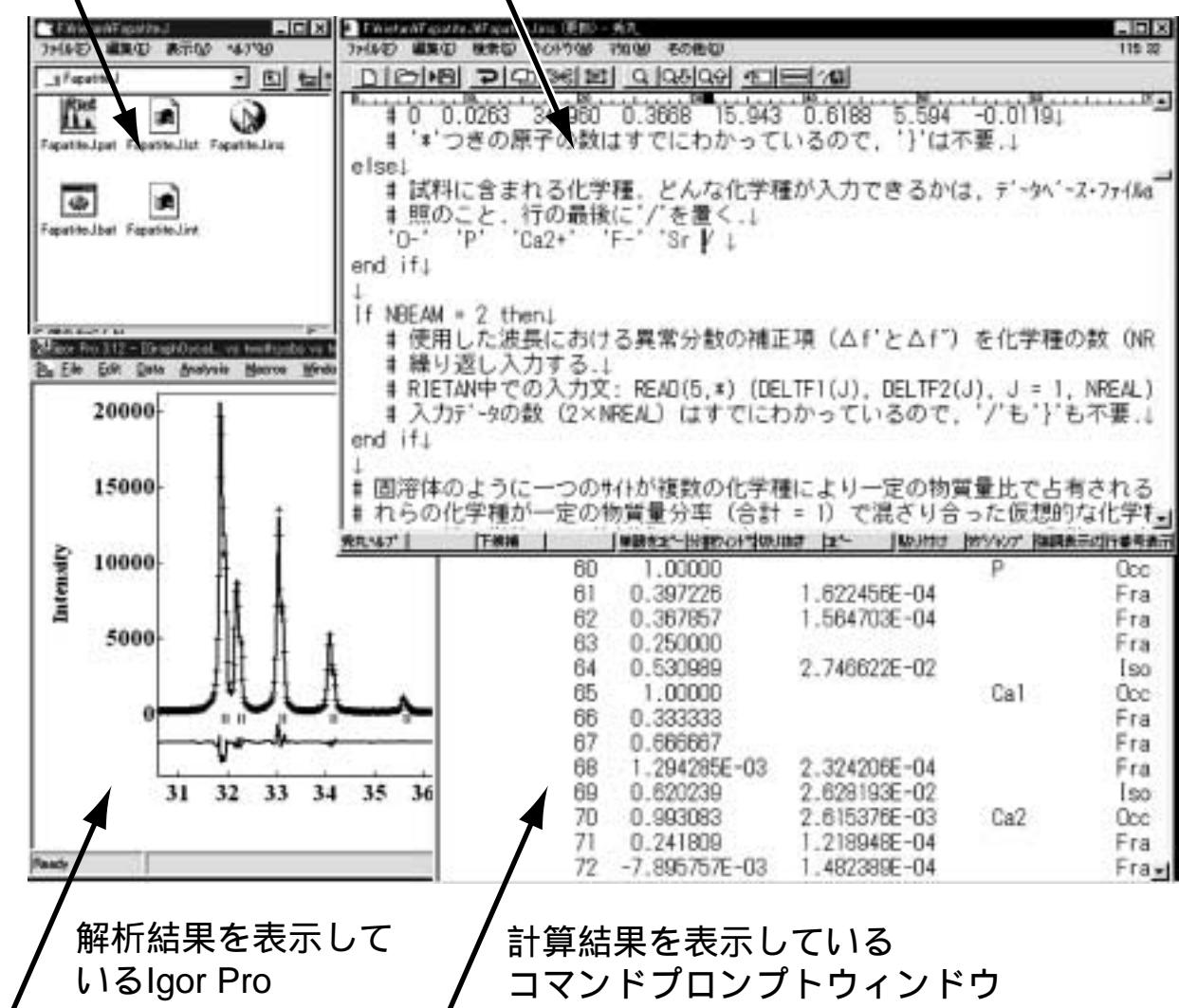
CIFの徹底活用

Other structure-drawing
programs (CrystalDesigner, Diamond, etc.)



Windows 2000上でRIETAN-2000 , ORFFE , Igor Proの実行結果

ファイル一覧ウィンドウ 入力ファイル編集中のエディタ



将来計画

近未来：Mac OS X対応Carbonアプリケーションの作成



長期的計画：東海で5年後から稼働予定の大強度陽子加速器を利用したTOF粉末中性子回折装置用のソフト開発

