

粉末構造解析結果のドキュメンテーション

名古屋工業大学 泉 富士夫

テキストファイルを gnuplot, L^AT_EX, UNIX 系コマンド (とくに grep, sed, awk) など処理することの重要性と効率の高さを説き、最近 RIETAN-FP・VENUS 統合支援環境に追加したマクロ cif2pdf と E2J を応用例として紹介する。リートベルト法や MPF など得られた解析結果から CIF、グラフ、結晶構造図、電子密度分布イメージなどを作成し、cif2pdf によってそれらを付録とともに PDF ファイルとして統合し、さらに E2J で和訳するという一連の手続きを Mac で実演する。

PDF を用いたナノ材料の未知構造解析手法

物質・材料研究機構 富中悟史

二体分布関数 (Pair Distribution Function: PDF) を使用する構造解析を概説し、ナノ材料などの未知構造解析例を紹介するとともに、現在開発中のプログラムの機能や必要性について述べる。

物質・材料の機能は原子配列 (結晶構造) を知ることでその本質に迫れるため、構造解析は基礎・応用のいずれにおいても基本的に重要な技術である。その研究手段としては X 線回折が中心的な役割を担う。しかし、原理的にナノ材料に対しては Bragg ピークのブロード化による限界を抱えている。とくに数 nm の微粒子については相の同定程度に留まざるを得ない上、構造は既知でなければならない。非晶質材料を扱えず、非晶質やナノ結晶が混入している材料中の相の純度を定量できていない可能性があることも、実用上の障害となる。

PDF 解析は主として非晶質材料の分野で使われてきた手法である。強力放射光・パルス中性子源の利用により結晶材料にまで適用が可能になり、この 10 年で飛躍的に利用が増えてきた。PDF は原子間距離と原子ペア密度に関係するデータであり、最近接原子間距離から結晶レベルの長距離に至る情報を得られるので、結晶・ナノ結晶・非晶質に関わらず材料固有の指紋と見なせる。相の同定に使える、非晶質やナノ結晶も考慮した純度が得られる。結晶材料でなくても詳細な構造解析が行えるため、ナノ結晶の歪みや非晶質材料の配位環境などについて議論できる。

PDF 解析は材料固有のデータが得られることから、原理的には良質の結晶以外の材料であっても未知構造解析が可能である。ただし、詳細な解析には高品質の回折データが必要となる。PDF は、X 線や中性子線の全散乱データを高 Q 領域まで収集し、材料からの弾性散乱以外のシグナルを実験的・計算的に除去し、偏光の影響を補正し、原子散乱因子で規格化し、フーリエ変換することにより得られる。非常に複雑で、その過程では多くの配慮が必要となる。また既存プログラムは特定の放射光源の測定環境を想定しており、汎用性に欠けている。

既成ソフトの問題点をできるだけ克服するために、独自のプログラム Materials PDF (仮称) を鋭意開発中である。その代表的機能としては

1. 高品質の PDF を様々なデータ測定環境で迅速に得るための機能、
2. 多成分系の特定の成分の取り扱い (担持触媒などを想定)、
3. 未知構造を解くための補助機能 (回折データと PDF データの同時フィッティングなど)、
4. 高速 PDF フィッティング

が挙げられる。PDF 解析の利便性と信頼性を飛躍的に高めるよう様々な工夫をこらしている。Materials PDF を用いた構造解析の可能性と魅力についても紹介する予定である。