

○代表的なシリカ鉱物のX線回折チャート

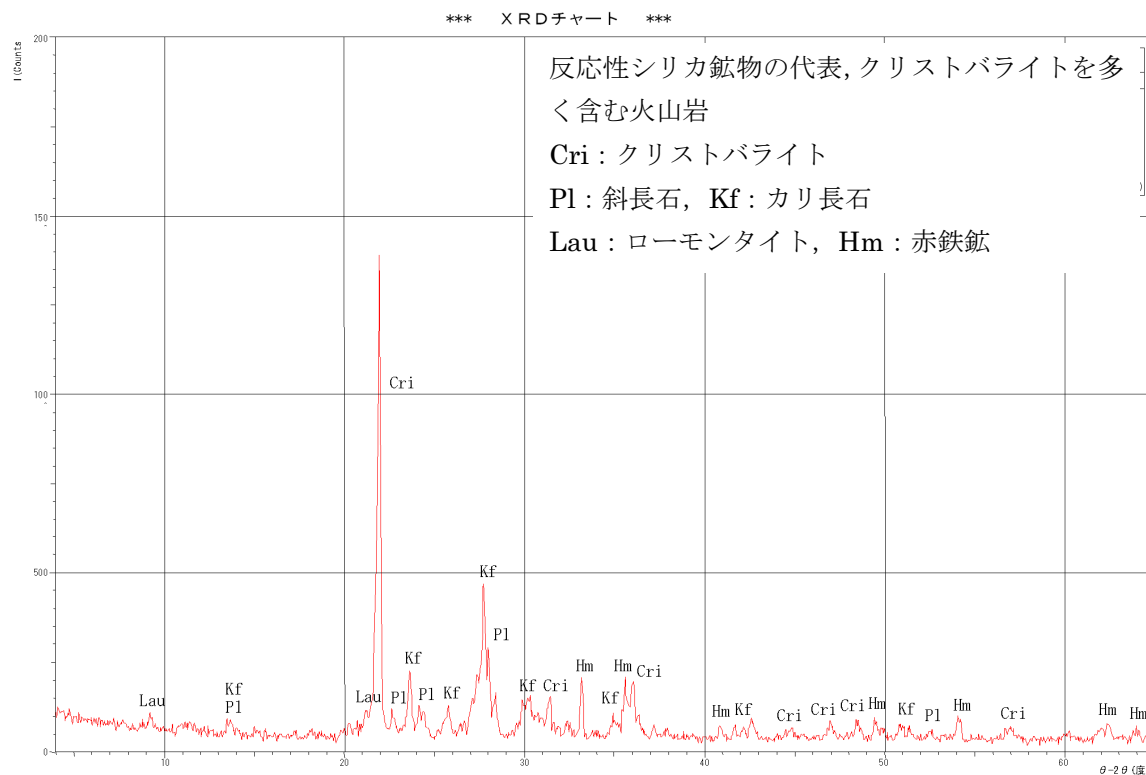
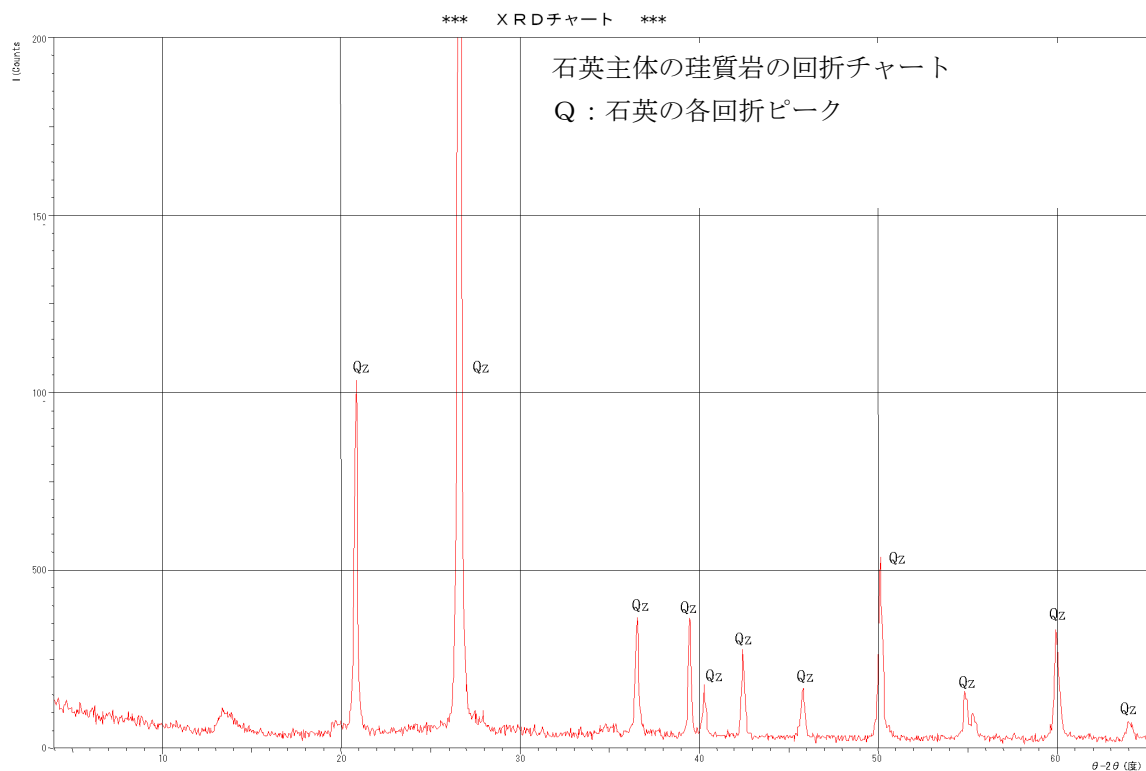


図 6.3.6 代表的 X 線回折チャート (他サイトの例)

(注) 鉱物の同定は、各鉱物の特徴的回折線 (反射角 2θ , 反射相対強度) を ASTM 標準カード等のデータを比較して行う。

○主な鉱物のX線回折線の代表（鉱物の同定は、チャートの反射ピークのこれら3強線に着目して同定を行い、次いで他のピークを確認する）

表 主な鉱物の粉末X線回折データ（3強線）

鉱物名	3 強 線								
	I_1			I_2			I_3		
	面間隔 d (Å)	回折角 2θ (°) Cu, K α	相対強度 I_1/I_1	面間隔 d (Å)	回折角 2θ (°) Cu, K α	相対強度 I_2/I_1	面間隔 d (Å)	回折角 2θ (°) Cu, K α	相対強度 I_3/I_1
α -クリストバライト	4.05	21.9	100	2.49	36.0	20	2.84	31.5	13
トリジマイト	4.10	21.7	100	4.31	20.6	65	3.81	23.3	50
α -石英	3.34	26.7	100	4.26	20.8	35	1.82	50.1	17
黒雲母	10.1	8.7	100	3.37	26.4	100	2.66	33.7	80
白雲母	9.96	8.9	100	4.47	19.8	100	3.32	26.8	100
ドロマイト	2.89	30.9	100	2.19	41.2	30	1.79	51.0	30
ローモンタイト	9.5	9.3	100	4.16	21.3	60	6.9	12.8	35
モンモリロナイト	15.2	5.8	100	4.59	19.3	10	2.56	34.9	10
（15Å） 米処理 エチレンジグリ コール処理	16.8	5.3	100	4.59	19.3	10	2.56	34.9	16
黄鉄鉱	1.63	56.4	100	2.71	33.0	85	2.43	37.0	65

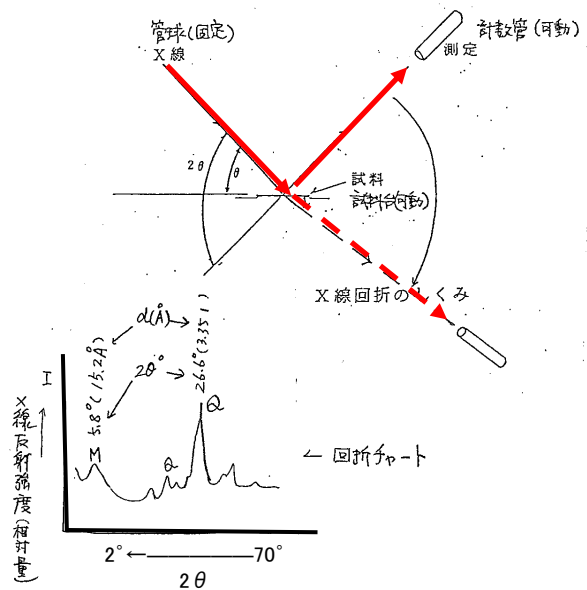
（解説）X線回折による定性分析のしくみ

X線回折は試料面にX線を照射し反射してくるX線の強度を測定する方法です。

どのような物質が試料に含まれているかは、反射X線の位置(2θ)と強度(I)によって決まります。 2θ は平板試料の表面と入射X線のなす角 θ の2倍の角度を意味しています(参考図)。

2θ はX線回折装置(diffractometer)によって高角度から低角度に操作されます。得られたX線回折パターンから、各ピークの 2θ と相対的な強度比 I/I_1 、(最強線の強度 I_1 を100とする)を読み取り、 2θ から結晶の格子面間隔 d を計算します。

d - I/I_1 の組み合わせと文献データを照合し鉱物を同定します。



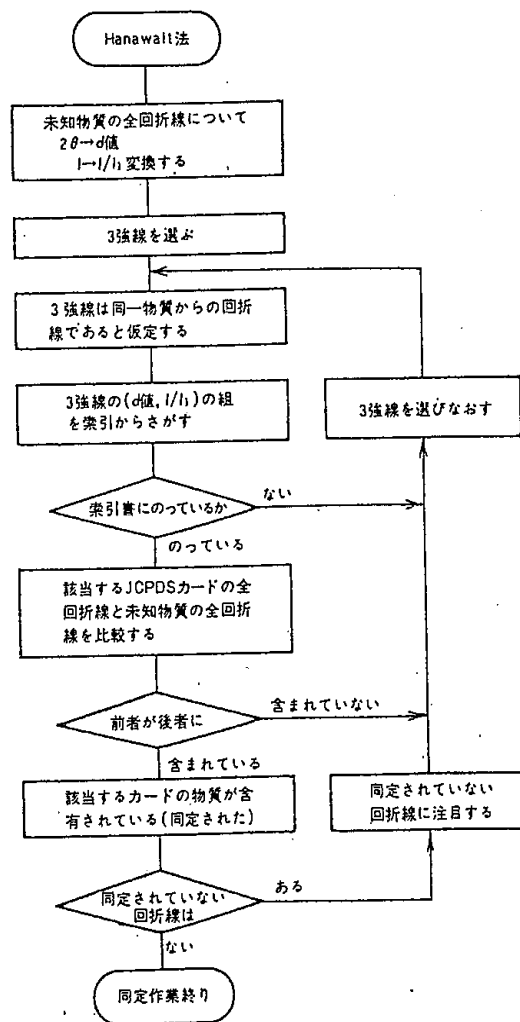
参考図 X線回折試験のしくみ

(解説) X線回折による定性分析、すなわち結晶鉱物の同定法

X線の回折法による定性分析は未知物質の回折図形と既知物質の回折図形とを比較し、前者の中に後者の図形が含まれていれば、前者には後者の物質が含まれていると判定する方法で行なわれる。この方法で定性分析を行なうことから、粉末X線回折法による定性分析のことを同定(identification)とよぶ。

既知物質の回折図形の標準としてはJCPDSカードのデータおよび信頼の高い文献が広く使われている。比較参照の方法として、通常Hanawalt法(最も強い反射ピークから3番目までの強度線を中心に照合を繰り返す方法)が用いられる。

このとき、粘土鉱物や岩石鉱物ではその鉱物に特徴的なピークの組合せ(須藤俊男著「粘土鉱物学」、下田右著「粘土鉱物研究法」等)を利用する方法がある。



参考図 Hanawalt法による同定の手順

- (注) CuK α 線による 2θ (X線回折チャート横軸の走査角度)と d の関係
 (1) $2\theta=2\sin^{-1}(1.5418/2d)$ ただし $2\theta:2\sim60^\circ$ のとき
 (2) $2\theta=2\sin^{-1}(1.5405/2d)$ ただし $2\theta:2\sim60^\circ$ のとき

○主な粘土鉱物及び非粘土鉱物の特徴的回折線 (d Å)

(出典：須藤俊男著「粘土鉱物学」1974)

表6-1粘土鉱物の主なX線粉末回折線

面間隔 d(Å)	回折角		粘土鉱物 ()内に記した鉱物では、弱いX線回折ピークであることを示す
	CuK α 2 θ (°)		
14.0 ~ 15.5	6.3 ~ 5.7		モンモリロナイト, バーミキュライト群, 緑泥石群
12.1	7.3		セピオライト
10.2 ~ 10.5	8.7 ~ 8.4		パリゴルスカイト
9.9 ~ 10.1	8.9 ~ 8.8		雲母粘土鉱物, ハロイサイト
9.2 ~ 9.4	9.6 ~ 9.4		滑石[タルク]
9.1 ~ 9.2	9.7 ~ 9.6		パイロフィライト
7.6	11.6 ~		(セピオライト)
7.2 ~ 7.5	12.3 ~ 11.8		メタハロイサイト
7.0 ~ 7.2	12.6 ~ 12.3		ナクライト, デツカイト, カオリナイト, 蛇紋石群, 緑泥石群, (バーミキュライト群)
6.44	13.8 ~		パリゴルスカイト
5.42	16.4 ~		パリゴルスカイト
5.0	17.7 ~		雲母粘土鉱物, (モンモリロナイト)
4.7 ~ 4.8	18.9 ~ 18.5		緑泥石群, (バーミキュライト群)
4.6 ~ 4.7	19.3 ~ 18.9		滑石[タルク]
4.57	19.4		パイロフィライト

(注) CuK α 線による2 θ (X線回折チャート横軸の走査角度)とdの関係

(1) $2\theta = 2\sin^{-1}(1.5418/2d)$ ただし2 θ : 2~60°のとき

(2) $2\theta = 2\sin^{-1}(1.5405/2d)$ ただし2 θ : 2~60°のとき

【代表的粘土鉱物の略号】

M: モンモリロナイト

Chl: 緑泥石

Mc: 雲母粘土鉱物

(イライト)

K: カオリナイト

【代表的な造岩鉱物の略号】
 Q: 石英
 F: 長石(総称)
 Pl: 斜長石
 Kf: カリ長石
 Cri: クリストバライト
 Tri: トリディマイト
 Py: 黄鉄鉱
 Cal: 方解石(炭酸塩鉱物の代表, 遊離石灰)

表6-2 非粘土鉱物の主なX線粉末回折線

面間隔 d(Å)	回折角		主な非粘土鉱物	()は強度を示す
	CuK α 2 θ (°)			
7.56		11.7	石こう	(100)
6.3 ~ 6.45		14.1 ~ 13.7	長石	(40~60)
5.11		17.4	かんらん石	(50)
4.85		18.3	ギブサイト	(100)
4.30		20.7	トリディマイト	(100)
4.27		20.8	石こう	(50)
4.26		20.9	石英	(35)
4.08		21.8	トリディマイト	(33)
4.04		22.0	クリストバライト	(100)
4.00 ~ 4.2		22.2 ~ 21.2	長石	(80)
3.98		22.3	ダイアスポア	(100)
3.89		22.9	かんらん石	(60)
3.86		23.1	方解石	(12)
3.81		23.4	トリディマイト	(67)
3.80 ~ 3.9		23.4 ~ 22.8	長石	(20~70)
3.73 ~ 3.75		23.9 ~ 23.7	長石	(40~80)
3.64 ~ 3.67		24.5 ~ 24.3	長石	(30~80)
3.50		25.5	硬石こう	(100)
3.44 ~ 3.48		25.9 ~ 25.6	長石	(30~60)
3.40		26.2	あられ石	(100)
3.35		26.6	石英	(100)
3.27		27.3	あられ石	(50)
3.10 ~ 3.25		28.8 ~ 27.4	長石	(70~100)
			(2重線となることもある)	
3.14		28.4	クリストバライト	(12)
3.13		28.5	黄鉄鉱	(36)
3.06		29.2	石こう	(60)
3.03		29.5	方解石	(100)
3.01		29.7	みょうばん石	(85)
2.97 ~ 3.00		30.1 ~ 29.8	長石	(30~70)
2.96		30.2	トリディマイト	(17)
2.86		31.3	スピネル	(40)
2.85		31.4	クリストバライト	(14)
2.85		31.4	硬石こう	(33)
2.81 ~ 2.89		31.9 ~ 30.9	長石	(40~80)
2.77		32.3	かんらん石	(100)
2.71		33.1	黄鉄鉱	(84)
2.70		33.2	あられ石	(50)
2.55		35.2	ダイアスポア	(25)
2.51 ~ 2.55		35.8 ~ 35.2	長石	(40~80)
2.52		35.6	かんらん石	(80)
2.50		35.9	方解石	(14)
2.49		36.1	クリストバライト	(18)
2.49		36.1	トリディマイト	(27)
2.46		36.5	石英	(12)
2.46		36.5	かんらん石	(60)
2.44		36.9	スピネル	(100)
2.42		37.2	黄鉄鉱	(66)
2.38		37.8	ギブサイト	(25)
2.32		38.8	ダイアスポア	(45)
2.31		39.0	トリディマイト	(11)
2.29		39.4	方解石	(18)
2.28		39.5	石英	(12)
2.24		40.3	石英	(6)
2.21		40.9	黄鉄鉱	(52)
2.13		42.5	石英	(9)
2.10		43.1	方解石	(18)
2.08		43.5	ダイアスポア	(50)
2.02		44.9	スピネル	(60)
1.92		47.4	黄鉄鉱	(40)
1.91		47.6	方解石	(17)
1.90		47.9	みょうばん石	(100)
1.89		48.2	方解石	(17)
1.82		50.1	石英	(17)
1.75		52.3	みょうばん石	(88)
1.63		56.5	黄鉄鉱	(100)

(1) $2\theta = 2\sin^{-1}(1.5418/2d)$ ただし $2\theta : 2\sim 60^\circ$ のとき

(2) $2\theta = 2\sin^{-1}(1.5405/2d)$ ただし $2\theta : 2\sim 60^\circ$ のとき

○火山岩中の代表的アルカリ反応性シリカ鉱物のX線回折線

(出典：丸章夫, 骨材品質にかかわる耐久性の診断手法—岩石・鉱物学的手法—, コンクリート工学, Vol. 26, No. 7, July, 1988)

表-9 クリストバライトとトリジマイトの
粉末X線回折データ (Cu, K α)

クリストバライト			トリジマイト		
<i>d</i>	2 θ	<i>I/I</i> ₁	<i>d</i>	2 θ	<i>I/I</i> ₁
4.05	21.94	100	4.31	20.58	65
			4.26	20.84	4
			4.10	21.66	100
3.53	25.20	3	3.81	23.32	50
			3.65	24.36	2
			3.47	25.64	2
			3.25	27.42	16
			3.21	27.86	<1
3.14	28.44	11	3.17	28.12	6
			3.13	28.50	2
			3.11	28.68	2
			3.06	29.16	<1
			3.02	29.56	<1
			2.968	30.08	18
			2.842	31.44	2
2.841	31.46	13	2.815	31.76	2
			2.779	32.18	<1
			2.746	32.58	<1
			2.664	33.62	2
			2.599	34.48	<1
			2.544	35.24	4
			2.485	36.12	14
			2.443	36.76	2
2.485	36.42	5	2.415	37.20	<1
			2.384	37.70	4
			2.344	38.36	<1
			2.304	39.06	14
			2.340	38.44	1
ASTM 11-695			ASTM 16-152		

(注) *d*: 結晶の格子定数, *I/I*₁: 最強回折線に対する強度比
(以下の表も同じ)