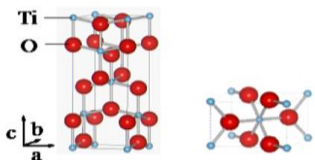
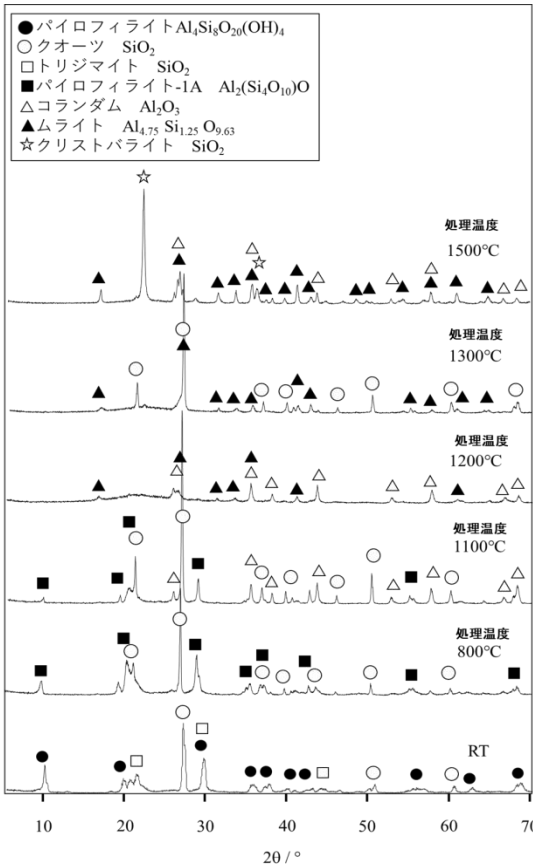


X線回折装置 (XRD)



事例紹介

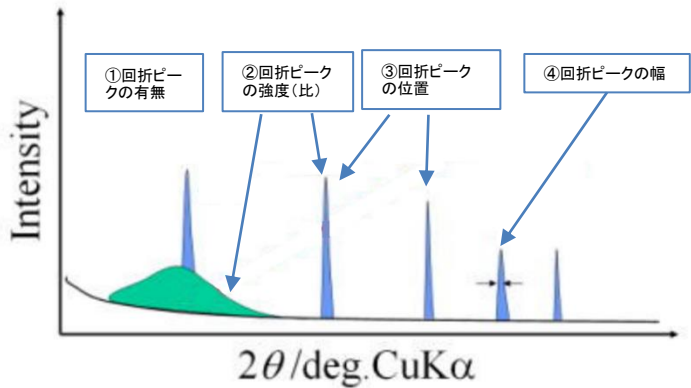
ロー石原料の結果



左)アナターゼ 右)ルチル

設置年度	2013年度
型式	Ultima IV
製造所	(株)リガク
仕様	<ul style="list-style-type: none"> ・X線発生装置部 最大定格出力:3 kW 定格電圧:20~50 kV 定格電流: 2~60 mA ・ゴニオメータの駆動軸の最小送り幅は0.0001・以下 ・2θ 測角範囲が1~160° 以上であり、光学系の自動調整機能 ・検出下限は数wt%~0.1wt%程度 ・10試料以上同時に搭載でき、各試料を測定中に自動で交換し、かつ各試料台が100 rpm以上で回転可能 ・微量試料、繊維状試料の測定が可能 ・解析装置はパソコン上で各解析が可能(結晶相の同定、バックグラウンド補正、スムージング、ピークサーチ、結晶子サイズ算出、多重ピーク分離、結晶子サイズ、格子定数の精密化、結晶化度などの解析) ・試料の形状、条件等: 30 μ 以下、10g程度の粉末
用途	耐火物製品(含:使用後品)及び原料の結晶相同定など

粉末X線回折パターンからわかること



- ① 回折ピークの有無⇒結晶質・非晶質の判定
- ② 回折ピークの強度(比): 結晶の形と構成元素に依存⇒定量分析、定性分析
- ③ 回折ピークの位置: 結晶の形に依存⇒格子定数、定性分析
- ④ 回折ピークの幅⇒結晶性、結晶子サイズ・格子ひずみ

1) 定性分析の長所

- ⇒元素ではなく、化合物として同定ができる。e.g.) 酸化鉄(Fe₂O₃, Fe₃O₄)
- ⇒同じ化学式でも結晶構造が異なるので別の物質として同定できる。e.g.) 酸化チタン(TiO₂)

2) 定性分析の短所

- ⇒非晶質は同定できない、微量成分の検出はできない
- ⇒データベースに存在していないものは難しい
- ⇒物質が異なっても結晶構造が同じである場合、X線回折パターンの区別が難しい