

## X 線回折(XRD)

中央試験所 加藤祐一

昨年度、研修会で実習を行った X 線回折について、本年度は基礎的な理論についてポスターで説明を行った。

X 線回折は X-Ray Diffraction(現象)または X-Ray Diffractometer(装置)を略して XRD と呼ばれている。

X 線回折では、物質の結晶構造(原子の並び方)を調べる事ができ、これにより

- 1) データベースと照合して、どんな物質が含まれているか。(定性分析)
- 2) 含有量のわかっている試料と比較して、どのくらいの量が含まれているか。(定量分析)
- 3) 新規につくった物質の結晶構造や、その物性との相関性を調べる。

などの分析が可能である。

X 線とは数ピコメートルから 10 ナノメートル程の波長の電磁波のことで、光と同様、粒子性と波動性を持ち合わせている。X 線回折では X 線の波動性を利用している。

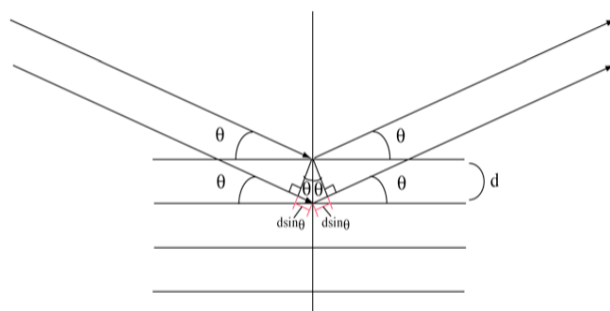
結晶内の原子が回折格子の役割を果たす事で回折現象が起こり、その原子間の距離と回折角がブラッグの条件式(1)に当てはまった時に X 線が強め合う。

$$\lambda = 2d \sin \theta \cdots (1)$$

$\lambda$ :電磁波(X 線)の波長

$d$ :原子(厳密には原子のつくる面)間距離

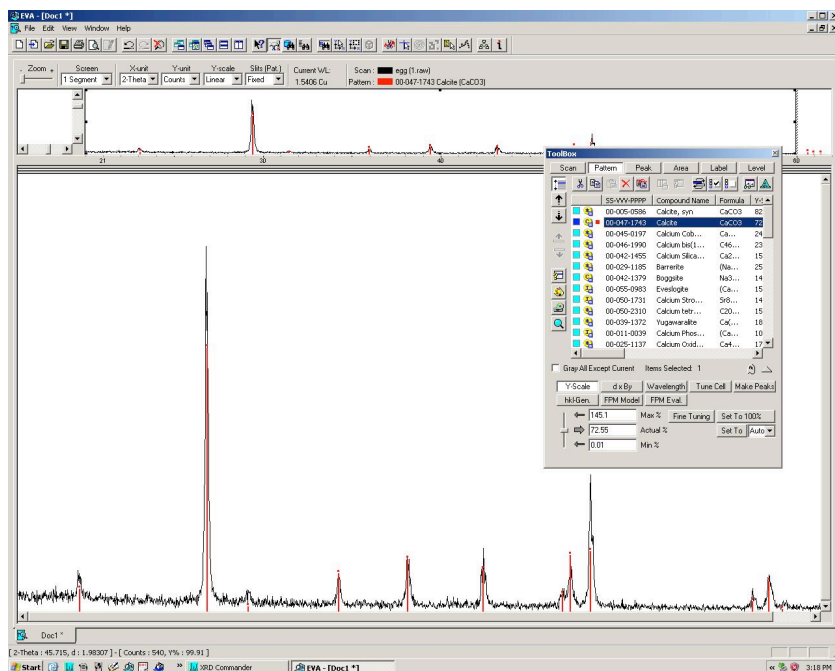
$\theta$ :入射、回折の角度



このとき、X 線の波長を一定にして、強め合う角度を走査すれば、結晶内にある原子間の距離がわかる。X 線回折では、原子の大きさ(数オングストローム)に近い波長の X 線を用いる。

実際に卵の殻を粉碎して分析した結果が下図である。

分析結果をデータベースと照合すると卵の殻はカルサイトと呼ばれる、炭酸カルシウムから出来ている事がわかる。



これらの方法は近年、問題になっているアスベストの分析や、毒物事件が発生した際の毒物の特定などにも利用されている。

現在中央試験所で所有している装置は、超高感度検出器、1/10000 度の精度をもつゴニオメーターなどを装備しており、理工学部の研究、教育に広く利用されている。