

X線回折法における簡易定量プログラムの精度

宮内宏哉^{*1}

中村知彦^{*2}

日置正^{*3}

従来、粉末X線回折法は主として金属やセラミックス粉体の結晶相の定性分析に用いられており、酸化チタン粉体の結晶相の定性分析についても、粉末X線回折法によることがJISに規定されている。一方、近年のデータ処理技術の進展により、市販の解析ソフトを用いて、定性分析結果と同時に簡易定量分析結果が得られるようになった。

このX線回折法による粉体試料の簡易定量分析において、試料調整・測定・データ解析の各操作が簡易定量分析結果に与える影響を調べ、X線回折法による簡易定量プログラム分析を利用する際の留意事項について検討した。

検討の結果、混合した各試薬の粒径が異なる場合のガラス試料板への充填量及び解析ソフト上での簡易定量プログラム分析の計算に用いるピーク数による影響が大きかった。また、簡易定量分析結果と秤量値に基づく組成比に差が生じたが、解析ソフトの外部標準機能を用いて補正することにより、簡易定量分析結果の正確さが向上することを確認した。

日本分析化学会X線分析研究懇談会編：X線分析の進歩37, pp. 247-256, 2006年 に掲載

* 1 応用技術室 技師

* 2 応用技術室 専門員

* 3 応用技術室 主任研究員

(本研究に用いたX線回折装置は、平成16年度競輪の補助金(日本自転車振興会)により整備した。)