

粉末X線回折法による化学分析

名古屋工業大学 先進セラミックス研究センター
井田 隆

1. はじめに

X線回折実験に利用される**X線**は人体にとって有害な放射線であり、X線回折測定実験は防X線壁により遮蔽された空間内で、遠隔操作・自動測定により実施される。このことから、化学を専門とする多くの人にとって親しみにくいかもしれない。一方で、「物質は『原子』や『分子』から構成される」という化学の分野では基本的な考え方の正しさはX線回折実験から確認された面があり、生物の自己複製・分化の機能が分子構造の観点から解明されたことも主にX線回折実験の結果に基づくものである。

X線回折と呼ばれる現象を利用する実験・解析手法は多岐にわたるが、その中で「**粉末X線回折法**」は、**化学分析**を主な目的として利用される。この方法は、試料調製と測定などの実験操作、結果の解釈が比較的簡便である。一方で、物質を特定するための決定的な手段という性格も持ち、主に無機化学に関連する分野で広く利用されてきた。最近では有機化合物を対象とした利用も拡大する傾向にある。

粉末X線回折法による分析の対象となるのは、天然の鉱物、金属やセラミックスなどの実用材料、医薬品が主なものである。試料の結晶性が高い場合に特に有効な手法であるが、産業的に重要な高分子化合物はそれぞれ特徴的な回折強度図形を示すことから、限定的ではあるが、非晶質を特定するために、その技術が応用される場合もある。塊状の物質は粉碎して測定試料として用いる場合が多いが、板状の試料を粉碎せず測定に用いる場合もある。