

エックス線回折データによる結晶構造の解析方法

材料の結晶形態は製品の性能を大きく左右します。未知物質の同定、結晶形態の判定などに用いられ、品質管理や材料開発において基本的な装置として使用されます。

エックス線回折データ解析装置を用いた解析方法について紹介いたします。

測定手順

① 試料の成分分析

- ・蛍光X線分析装置（XRF）
- ・エネルギー分散型分析装置（EDX）
- ・誘導結合プラズマ発光分光分析装置（ICP）など

(例)

元素	O	S	Cr	Fe	Cu	他
mass%	0.2	24.1	0.4	0.7	74.4	0.4

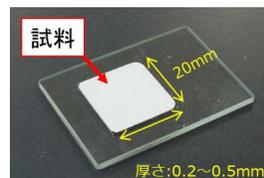
② 試料準備

- ・メノウ乳鉢等で、10~50 μ m程度の粉末にする。
(体積で500円玉くらいを準備する)

③ エックス線回折装置（XRD）で測定

<測定試料>

ガラス試料ホルダーに充填



④ **エックス線回折データ解析装置**で結晶構造を同定

(※元素/ピークが多いと同定が困難になります)

結晶構造の同定作業

④-1 化合物の推定

CuS、Cu₂S、Cu₉S₅
CuSO₄、CuSO₄·5H₂O など

④-2 測定結果をデータベースと照合

