

リートベルト法による石英微結晶の格子歪の解析

Rietveld analysis of structural strains in microcrystalline quartz

門馬 綱一[1]; 長瀬 敏郎[2]; 工藤 康弘[1]; 田中 雅彦[3]

Koichi Momma[1]; Toshiro Nagase[2]; Yasuhiro Kudoh[1]; Masahiko Tanaka[3]

[1] 東北大・理; [2] 東北大・総学博; [3] 高エネ研・放射光

[1] Tohoku Univ; [2] Tohoku Univ. Muse.; [3] Photon Factory, KEK

低温の熱水溶液からは熱力学的に安定な石英以外の opal-CT やモガナイトなどのシリカ鉱物や、メノウやブラジル双晶など、特徴的な組織を持ったシリカ鉱物が生成するが、その成因は十分明らかにはされていない。これまで、こうした鉱物に対して、光学顕微鏡や電子顕微鏡を使用した組織の観察、研究が行われてきたが、成因の解明には平均構造の詳細な比較が欠かせない。

本研究では主に微粒子効果に注目して、合成および天然の石英微結晶の格子歪をリートベルト解析で精密化することにより、核形成後間もない石英の結晶が持つ構造の欠陥と、粒径や組織との関連を調べた。

合成試料はシリカゲル約 3g と 0.1mol/l 水酸化カリウム水溶液をオートクレーブに入れ電気炉で 200 °C・15atm に保持し、シリカゲルと石英の溶解度の違いを利用した溶液媒介相転移により合成した。天然試料としては山形県小国町、福島県宝塚、モンゴル、ブラジルの各産地のカルセドニーを測定した。X線粉末回折パターンの測定は高エネルギー加速器研究機構・放射光実験施設の BL-4B2 を使用した。リートベルト解析にはコンピューターソフト RIETAN-2000 を使用し、Thompson et al.(1987)により提唱されたプロファイル関数を使用した。

その結果、異方性を求めた合成の 2 試料と小国町産のメノウのいずれも、{101}面に垂直方向に異方的な格子歪が生じていることが明らかになった。粒径、組織とも大きく異なる合成試料と天然試料でいずれも同一の方向に異方的な格子歪が生ずることから、格子歪の方向は粒径によらないことが明らかになった。

Kihara(1990)の単結晶構造解析結果と比較すると、いずれの試料も格子定数が大きい。合成試料と天然の試料では c/a の比が異なる傾向が見られた。合成試料ではより低温で合成するほど、また、より合成時間が短いほど格子定数が大きくなる傾向があり、 c/a の軸率はほぼ一定のままであった。一方、天然試料では a 軸がより大きくなっており、軸率の変化と試料中におけるモガナイトの含有量にはある程度の相関が見られた。石英の構造中に部分的にモガナイト構造が含まれる場合、石英とモガナイトの格子サイズの違いから c 軸に垂直な一方向に石英の格子が膨らむことが予想される。天然試料の軸率とモガナイト含有量との相関はモガナイトの存在が石英の構造に影響を与えることを示唆している。