Proceedings of the Annual Joint Conference,
Petrological Society of Korea and Mineralogical Society of Korea
The International Conference of the 10th Anniversary of Petrological Society of Korea,

Siroquant 프로그램을 이용한 X-선 회절분석법의 정량화연구

송윤섭[1], 박찬수[1], 여상진[2]
[1]한국기초과학지원연구원(sys0129@kbsi.re.kr), [2]서울대학교 지구환경과학부

1. 서론

X-선 회절분석법은 광물 동정에 있어 손쉽게 측정 가능하고, 비파괴 측정법으로 국내외에서 넓이 사용되는 분석법이다. 그러나 광물의 정량분석시 시료의 상태에 따라 상대강도 값이 극단적으로 변화할 수 있으므로 내부표준물질첨가해서 측정하거나 또는 측정한 모든 회절선에 대해 표준 데이터와 비교 및 대조를 통해 종합적으로 판단해야 하므로 매우 시간적, 비용적으로 불편한 점이 있다.

따라서 국내외에서는 X-선 회절분석에 의한 광물의 정성분석 및 정량분석에 Siroquant 프로그램을 사용하여 손쉽게 결과를 산출한다. Siroquant 프로그램은 광물에 대해서 모든 회절선의 강도, 반치 폭(half width : U, V, W), 6개의 광물기본격자(a, b, c, α, β, γ), 피크모양 및 방향성을 종합적으로 고려하여 정성분석 및 정량분석을 할 수 있다.

본 연구는 Siroquant 프로그램을 사용하여 규산염광물인 장석과 층상규산염광물인 스멕타이트(smectite), 일라이트(illite), 녹니석(chlorite)등의 광물에 대한 정성 및 정량적 정확도에 대해 검증하였다.

2. 연구방법 및 결과

장석-일라이트, 스멕타이트-일라이트, 녹니석-일라이트의 3가지경우를 가정하여 각각의 단성분 혼합물을 100 wt.%로 하여 한쪽 단성분을 20 wt.%씩 증가시키면서 혼합하여 2성분계의 광물에 대해 정성 및 정량적 정확도를 검증하였다.

각각의 2성분계의 광물에 대해서 실제 함량 값(wt. %)과 계산된 값(wt. %)의 상관계수는 장석-일라이트 0.98, 스멕타이트-일라이트 0.98, 녹니석-일라이트 0.99로 모두 0.98이상의 상관관계를 보여 매우 높은 상관성을 나타낸다.

이상의 결과를 종합하면, 장석 및 층상규산염광물은 0.98 이상의 매우 높은 상관관계를 보이며 실제 측정오차 또한 5%내외의 높은 정량적 정확도를 보여준다.