

NEWMOD[®]를 이용한 불규칙 일라이트-스멕타이트 혼합층광물의 결정자 두께분포에 관한 연구

강일모^{1*}, 문희수¹, 김윤중², 송운구¹, 이원표¹

¹연세대학교 지구시스템과학과(claykang@yonsei.ac.kr)

²한국기초과학지원연구원

스멕타이트는 구조적으로 몇 개의 단위층으로 구성된 결정자로 해석될 수 있으며 결정자 내 층간이 팽창할 수 있는 독특한 산업광물이다. 따라서 스멕타이트의 높은 비표면적, 양이온교환능, 수분흡착력은 결정자를 구성하는 단위층의 개수, 즉 결정자 두께와 결정자 내 층간 팽창성에 영향을 받는다(Šrodoň *et al.*, 1992; Stepkowska *et al.*, 2004). 강일모 등(2002)은 이러한 결정자 두께와 팽창성이 상호 의존적 관계에 있음을 설명하였다. X-선분말회절분석(XRD)은 스멕타이트 결정자 두께와 팽창성을 통계적으로 측정하고 해석하는 범용장비로써 폭 넓게 활용되고 있다(Moore and Reynolds, 1998). 그러나 기존 연구에서 제안된 대부분의 XRD 분석기술은 결정자두께와 팽창성을 개별적으로 측정하기 때문에 이 두 변수의 상관관계를 해석하는데 제한적이다. 이에 본 연구는 NEWMOD[®](Reynolds & Reynolds, 1996)를 이용한 모사실험을 통하여 스멕타이트 결정자두께와 팽창성의 관계를 고찰하고, 나아가 이 두 변수를 동시에 고려할 수 있는 XRD 분석방법을 제안하고자 한다.

본 연구에서는 모사실험을 위하여 Mystkowski *et al.*(2000)이 측정한 와이오밍산 스멕타이트의 결정자두께분포를 기준분포모델로 사용하였다. 혼합층 형태로 불규칙 일라이트-스멕타이트 혼합층광물(R0 I-S)을 가정하였으며 일라이트 함량을 0-50%까지 단계적으로 모사하였다. 단 팽창성 층간에는 Na가 존재하고 에틸렌글리콜이 포화되었다고 가정하였다. MudMater(Eberl *et al.*, 1996)를 이용하여 모사된 1.7nm 회절선으로부터 결정자두께분포를 역측정함으로써 팽창성에 따른 결정자 두께분포의 변화를 관찰하였다.

모사실험결과, 일라이트 함량이 증가할수록, 즉 팽창성이 감소할수록 1.7nm 회절선으로부터 측정된 결정자두께분포는 초기 분포모델인 로그정규분포에서 점차적으로 "L"자형 분포형태로 왜곡이 심화되었다. 강일모 등(2003)은 일라이트 함량이 증가함에 따라 발생하는 이러한 분포의 왜곡현상을 Méring의 원칙으로 설명하였다. 본 연구에서는 측정된 두께분포가 기준분포에 대하여 얼마만큼 왜곡되었는지를 다음과 같은 식을 통하여 정량화하였다.

$$A = \frac{1}{2} \sum |f_{obs} - f_{std}| \quad (1)$$

f_{obs} 는 각 결정자두께에 대한 빈도수를 측정한 값이고 f_{std} 는 각 결정자두께에 대한 기준분포 모델의 빈도수를 의미한다. 따라서 A 는 분포도상에서 두 분포가 서로 일치하지 않는 면적을 지시한다. A 와 일라이트 함량을 비교해본 결과, 두 가지 선형관계가 존재함을 확인 할 수 있었다(그림 1). 이러한 결과는 A 를 사용하여 일라이트 함량에 대한 정량이 가능함을 지시하며 분석감도를 고려할 때 0-30% 범위가 적당함을 의미한다.

결론적으로 본 연구는 R=0 I-S의 1.7nm 회절선으로부터 측정된 결정자두께분포의 왜곡현상을 정량화할 수 있었으며 이를 이용한 일라이트 함량에 대한 정량화 가능성을 확인하였다. 앞으로

본 연구 결과를 국내 벤토나이트에 적용함으로써 국내 벤토나이트의 품위를 조사하는데 적합한 XRD 분석기술로 개발하고자 한다.

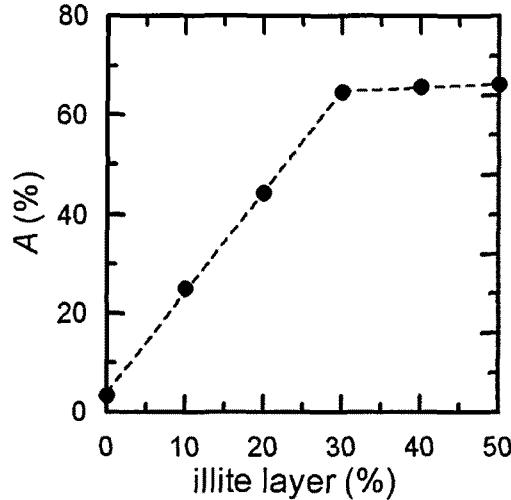


Fig. 1. Linear relationships between A and illite-layer contents.

참고문헌

- 강일모, 문희수, 김재곤, 송윤구 (2002) 일라이트-스멕타이트 혼합층광물의 팽창성과 MacEwan 결정자 및 기본입자두께에 관한 연구. *한국광물학회지*, **15**, p.95-103.
- 강일모, 박석찬, 문희수, 유장한 (2003) 감포와 연일 지역 벤토나이트의 팽창성 및 X-선 부합성 산란영역 크기에 관한 연구. *자원환경지질*, **36**, p.1-8.
- Eberl, D.D, Drits, V., Środoń, J., and Nüesch, R. (1996) *MudMaster*: A program for calculating crystallite size distributions and strain from the shapes of X-ray diffraction peaks. USGS Open File Report 96-171.
- Moore, D.M. and Reynolds, R.C. (1997) *X-ray diffraction and the identification and analysis of clay minerals*. 2nd (ed.), Oxford University Press, Oxford and New York, 378p.
- Mystkowski, K., Środoń, J., and Elsass, F. (2000) Mean thickness and thickness distribution of smectite crystallites. *Clays Minerals*, **35**, p.545-557.
- Reynolds, R.C. and Reynolds, R.C. (1995) *NEWMOD[©] for Windows*: A program for the calculation of one-dimensional diffraction patterns of mixed-layered clays. Published by the authors, 8 Brook Road, Hanover, New Hampshire, USA.
- Środoń, J., Elsass, F., McHardy, W.J., and Morgan, D.J. (1992) Chemistry of illite-smectite inferred from TEM measurements of fundamental particles. *Clay Minerals*, **27**, p.137-158.
- Stepkowska, E.T., Pérez-Rodríguez, J.L., Maqueda, C., and Starnawska, E. (2004) Variability in water sorption and in particle thickness of standard smectites. *Applied Clay Science*, **24**, p.185-199.