

白頭山、天池气象台の東側にある溶岩に 関する単斜晶系の格子定数

沢 勲 Isao SAWA
劉 忠 傑 Zhong-Jie LIU
河 野 久 征 Hisayuki KOHNO

[*The Lattice Constants with Monoclinic System by X-Ray diffraction Method of the Volcanic Rock on the East of Heaven Weather Station in Mt.Peakdu-san Group*]

ABSTRACT

Mt.Peakdu-san is situated in the north of the main peninsula, commanding the Korean strait, geographically coordinated between longitude W ($127^{\circ} 15' - 128^{\circ} 00'$) and E ($128^{\circ} 15' - 120^{\circ} 00'$), and between latitude S ($41^{\circ} 15' - 42^{\circ} 00'$) and N ($42^{\circ} 10' - 42^{\circ} 40'$).

It can be suggested that these facts are related to the crystal structure, lattice constants and lattice ratio on the volcanic rock on the east of heaven weather station in Mt.Peakdu-san by X-ray diffraction method. X-ray observation on the crystal structure of these materials is monoclinic system. In the monoclinic system, it is found that the lattice constants (A, B and C axis), and axis angle (β) are,

$A=8.4310 \text{ \AA}, B=12.9400 \text{ \AA}, C=7.1640 \text{ \AA}$ and $\beta=116.00^{\circ}$ in upper area,

$A=8.4500 \text{ \AA}, B=12.9800 \text{ \AA}, C=7.1130 \text{ \AA}$ and $\beta=116.06^{\circ}$ in lower area,

$A=8.4405 \text{ \AA}, B=12.9600 \text{ \AA}, C=7.1385 \text{ \AA}$ and $\beta=116.03^{\circ}$ in mean value.

[*The Review of Osaka University of Economics and Law, vol 63 (1996), pp 19-47*]

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数（沢、劉、河野）

1 はじめに

白頭山は、東アジアにおいて日本の富士山に次ぐ名山であり、海拔2750m（白頭峰）がある。白頭山の地理的位置は北緯はS（ $41^{\circ} 15' - 42^{\circ} 00'$ ）からN（ $42^{\circ} 10' - 42^{\circ} 40'$ ）までであり、また、東経は、W（ $127^{\circ} 15' - 128^{\circ} 00'$ ）からE（ $128^{\circ} 15' - 129^{\circ} 00'$ ）までである。白頭山は、今から古くは約86～61万年前に形成とか、約61～51万年前に形成との報告がある¹⁻³⁾。

本研究に用いた天池気象台（長白気象台）の東側にある火砕流の試料は、2種類である。すなわち、上層部は約9万年前、下層部は不明である。これらは白頭山北側の頂上にあるため年代は、若いと考えられる。これらの試料をX線回折法によって分析した。その結果、結晶構造は、六方晶系⁴⁾と単斜晶系の混晶である。ここでは、この単斜晶系の格子定数（A軸・B軸・C軸の3軸の長さ）および軸角 β （ $^{\circ}$ ）についてのみ報告する。すなわち、上層部では、 $A=8.4310 \text{ \AA}$ 、 $B=12.9400 \text{ \AA}$ 、 $C=7.1640 \text{ \AA}$ および $\beta=116.00^{\circ}$ 、下層部では、 $A=8.4500 \text{ \AA}$ 、 $B=12.9800 \text{ \AA}$ 、 $C=7.1130 \text{ \AA}$ および $\beta=116.06^{\circ}$ 、平均値では、 $A=8.4405 \text{ \AA}$ 、 $B=12.9600 \text{ \AA}$ 、 $C=7.1385 \text{ \AA}$ および $\beta=116.03^{\circ}$ である。ここで、上層部のA軸・B軸と軸角 β は、下層部よりも小さく、C軸はその逆であることが確認された⁴⁾。

2 実験方法

2.1 ピーク・サーチの定性分析

本研究に用いた試料は⁴⁾、ボールミルで200メッシュ以下に粉碎し、さらに、メノウの乳鉢で混合させた。希釈率としてガラスビート法は、サンプルには0.400gと LiB_4O （四ホウ酸リチウム）を融剤として4.000gを加えた。

これらを十分に混合させてから白金ルツボに入れて、そのルツボの蓋をかぶせ、高周波炉の溶融温度と加熱時間は、それぞれ 1200°C と7分である。最初の

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数（沢、劉、河野）

2分間は1200°Cに加熱して、その後、加熱したまま5分間も内動揺動させた。隔離剤としてはハロンガスを用いた。測定にはステンレス材マスクの測定試料径（30mmφ）を用いた。測定装置は、理学電機製のX線回折装置RINT-1200（湾曲グラファイト・モノクロメータ使用）である。ピーク・サーチの定性分析の測定条件は、次のとおりである。

- | | |
|---------------------|-------------------|
| ① X線の管球（Cu） | ② 発散スリット（1°） |
| ③ 散乱スリット（1°） | ④ 管内の電圧（40kV） |
| ⑤ 管内の電流（50mA） | ⑥ 走査軸（2θ/θ） |
| ⑦ 受光スリット（0.15mm） | ⑧ サンプリング幅（0.020°） |
| ⑨ アタッチメント（標準試料ホルダー） | ⑩ 走査速度（4.00°/min） |
- ⑪ ゴニオメーター（広角ゴニオメーター）および
⑫ データ処理に用いたX線の波長（1,54056 Å）である。

このデータ処理に用いたコンピュータのプログラム言語は、FORTRAN⁵⁾ およびC言語である。このプログラムに従ってデータの処理を行った平滑化点数は11である。その結果、この定性分析のチャートはFig. 1のとおりである。回折角度は、CuKα線の2θを3度から90度までの範囲で行った。Fig. 1の定性分析を行うため、ピーク・サーチを行ったものがTable 1である。ここで、上層部をB 4または下層部をB 5とし、括弧内の数字は面指数である。面指数は回折角度によってそれぞれが異なっている。回折角度と面間隔d（Å）は、ブラッグの反射条件式によって決定される⁶⁾。

$$n \lambda = 2 d \sin \theta \quad \dots\dots\dots (1)$$

ここで、λは波長（Å）、dは面間隔（Å）およびθは回折角度（°）である。この回折角度（20~90°）と波長によって計算した面間隔の範囲は、Table 1のとおりで、（6.5~1.4Å）である。

したがって、上（B 4）から下（B 5）層部への変化するにつれ、面間隔が大きくなっている面指数（Table 1の↑表示）は、（020）面、（-201）面、（111）面、（-312）面または（280）面の5の面指数である。また、上（B 4）から下

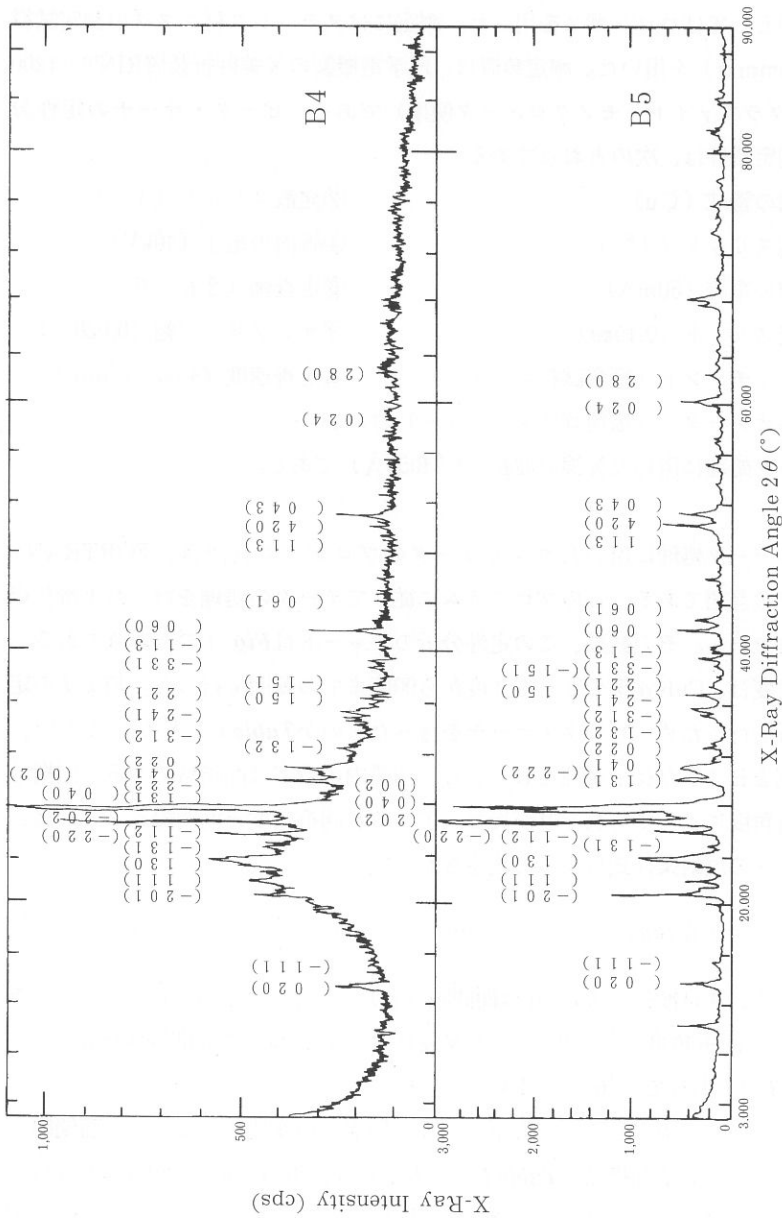


Fig. 1 The X-Ray Diffractograms of Upper Area (B4) and Lower Area (B5) on the East of Heaven Weather Station in Mt. Peakdu-san Group

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数（沢、劉、河野）

Table 1 The X-Ray Data (Miller Index, Lattice Distance Å, Relative Intensity and Half-Width Å) of Upper Area (B4), and Lower Area (B5)

Peak No.	Miller Index	Lattice Distance (Å)			Relative Intensity (I/I ₀)			Halfwidth (Å)		
		H K L	B4	B5		B4	B5		B4	B5
1	0 2 0	6.4771	6.4866	↑	19	10	↓	0.18	0.21	↑
2	- 1 1 1	5.9726	5.7938	↓	13	4	↓	0.21	0.33	↑
3	- 2 0 1	4.2468	4.2549	↑	34	24	↓	0.24	0.21	↓
4	1 1 1	4.0478	4.0698	↑	34	9	↓	0.00	0.42	↑
5	1 3 0	3.7605	3.7636	—	42	18	↓	0.00	0.21	↑
6	- 1 3 1	3.6072	3.6072	—	32	5	↓	0.00	0.30	↑
7	- 1 1 2	3.4503	3.4503	—	41	15	↓	0.21	0.21	—
8	- 2 2 0	3.3409	3.3434	—	69	100	↑	0.21	0.24	↓
9	- 2 0 2	3.2805	3.2735	↓	31	14	↓	0.00	0.15	↑
10	0 4 0	3.2361	3.2408	—	73	49	↓	0.18	0.18	—
11	0 0 2	3.2042	3.2065	—	100	55	↓	0.27	0.30	↑
12	1 3 1	3.0661	2.9820	↓	22	11	↓	0.18	0.30	↑
13	- 2 2 2	2.9781	2.9210	↓	31	7	↓	0.18	0.00	↓
14	0 4 1	2.9266	2.8915	↓	23	10	↓	0.00	0.24	↑
15	0 2 2	2.8915	2.8733	↓	28	7	↓	0.15	0.00	↓
16	- 1 3 2	2.7527	2.7560	—	19	6	↓	0.21	0.24	↑
17	- 3 1 2	2.5830	2.6034	↑	17	3	↓	0.21	0.00	↓
18	- 2 4 1	2.5644	2.5658	—	17	6	↓	0.00	0.24	↑
19	2 2 1	2.5308	2.5391	—	18	7	↓	0.33	0.21	↓
20	1 5 0	2.4571	2.4571	—	15	9	↓	0.00	0.21	↑
21	- 1 5 1	2.4087	2.4100	—	14	4	↓	0.00	0.24	↑
22	- 3 3 1	2.3144	2.3133	—	13	3	↓	0.00	0.30	↑
23	- 1 1 3	2.2817	2.2817	—	13	7	↓	0.24	0.24	—
24	0 6 0	2.1592	2.1612	—	24	11	↓	0.24	0.24	—
25	0 6 1	2.0483	2.0483	—	12	3	↓	0.00	0.00	—
26	1 1 3	1.8469	1.8441	—	11	3	↓	0.00	0.00	—
27	4 2 0	1.8172	1.8186	—	13	14	↑	0.33	0.18	↓
28	0 4 3	1.7886	1.7892	—	19	11	↓	0.21	0.33	↑
29	0 2 4	1.5619	1.5420	↓	10	11	↑	0.00	0.18	↑
30	2 8 0	1.4831	1.4930	↑	11	5	↓	0.00	0.00	—

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数（沢、劉、河野）

(B 5) 層部への変化するにつれ、面間隔が小さくなっている面指数 (*Table 1* の↓表示) は、(-111) 面、(-202) 面、(131) 面、(-222) 面、(041) 面、(022) 面および (024) 面の7つの面指数である。この他として、この上 (B 4) または下 (B 5) 層部が、共に、面間隔が一致している面指数は *Table 1* の一表示である。

相対強度が20%以上になっているのは、*Table 1* と *Fig. 2* より *Fig. 4* までである。すなわち、面指数をピーク順にすれば、次のとおりである。上層部では、(-201) 面、(111) 面、(130) 面、(-131) 面、(-112) 面、(-220) 面、(-202) 面、(002) 面、(131) 面、(-222) 面、(041) 面、(022) 面および (060) 面の13個の面指数である (*Table 1* と *Fig. 1* と *2*)。これらの面指数の面間隔は、2.87から4.25までのオングストロームの範囲に集中している。下層部では、(-201) 面、(-220) 面、(040) 面および (002) 面の4個の最も少ない面指数である (*Table 1* と *Fig. 1* と *3*)。相対強度が20%以上になっている上層部の数は、下層部よりも多いことが認められた。

したがって、上 (B 4) から下 (B 5) 層部への変化するにつれ、相対強度が大きくなっている面指数 (*Table 1* の↑表示) は、(-220) 面、(420) 面または (024) 面の3個の面指数である。また、上 (B 4) から下 (B 5) 層部への変化するにつれ、相対強度が小さくなっている面指数 (*Table 1* の↓表示) は、上記の以外の全部である。

さらに、半値幅が 0.24° 以上の面指数は、*Table 1* のとおりである。すなわち、上層部では、(-201) 面、(002) 面、(221) 面、(-113) 面、(060) 面および (420) 面の6つの面指数である。下層部では、(-111) 面、(111) 面、(-131) 面、(-220) 面、(002) 面、(131) 面、(041) 面、(-132) 面、(-241) 面、(-151) 面、(-331) 面、(-113) 面、(060) 面および (043) 面の14個の面指数である。半値幅が 0.24° 以上になっている上層部の数は、下層部よりも少ないことが認められた。

したがって、上 (B 4) から下 (B 5) 層部への変化するにつれ、半値幅が

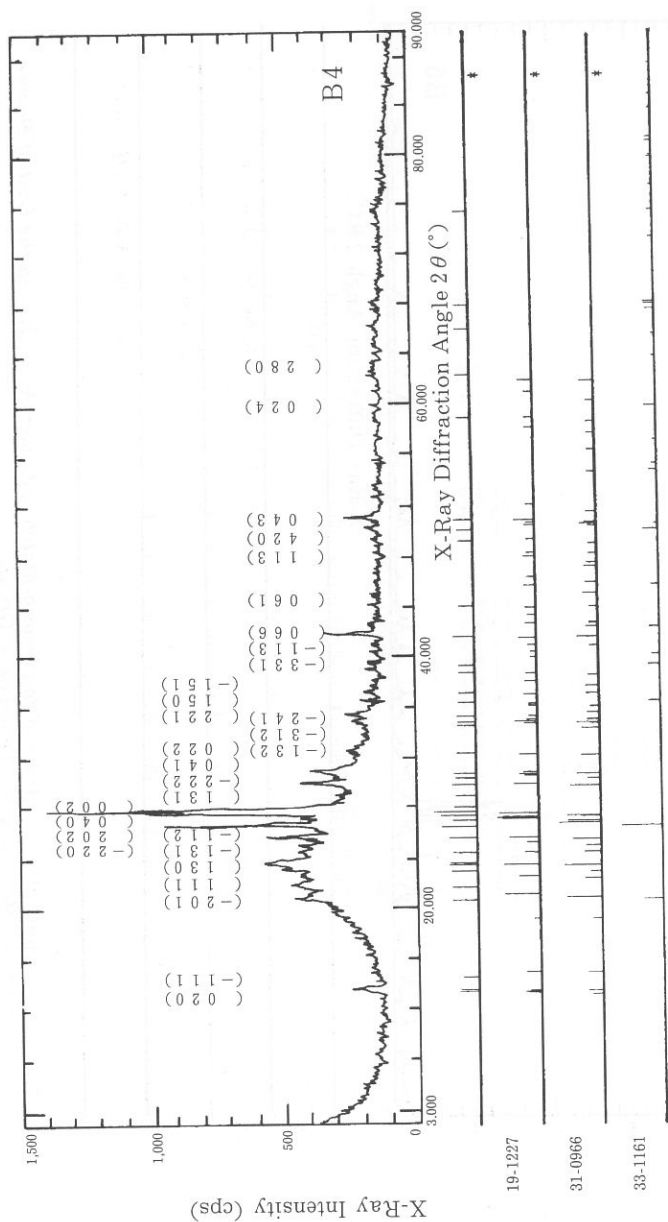


Fig. 2 The Qualitative Analysis of 2nd Search-Match of Upper Area (B4) on the East of Heaven Weather Station in Mt. Peakdu-san Group

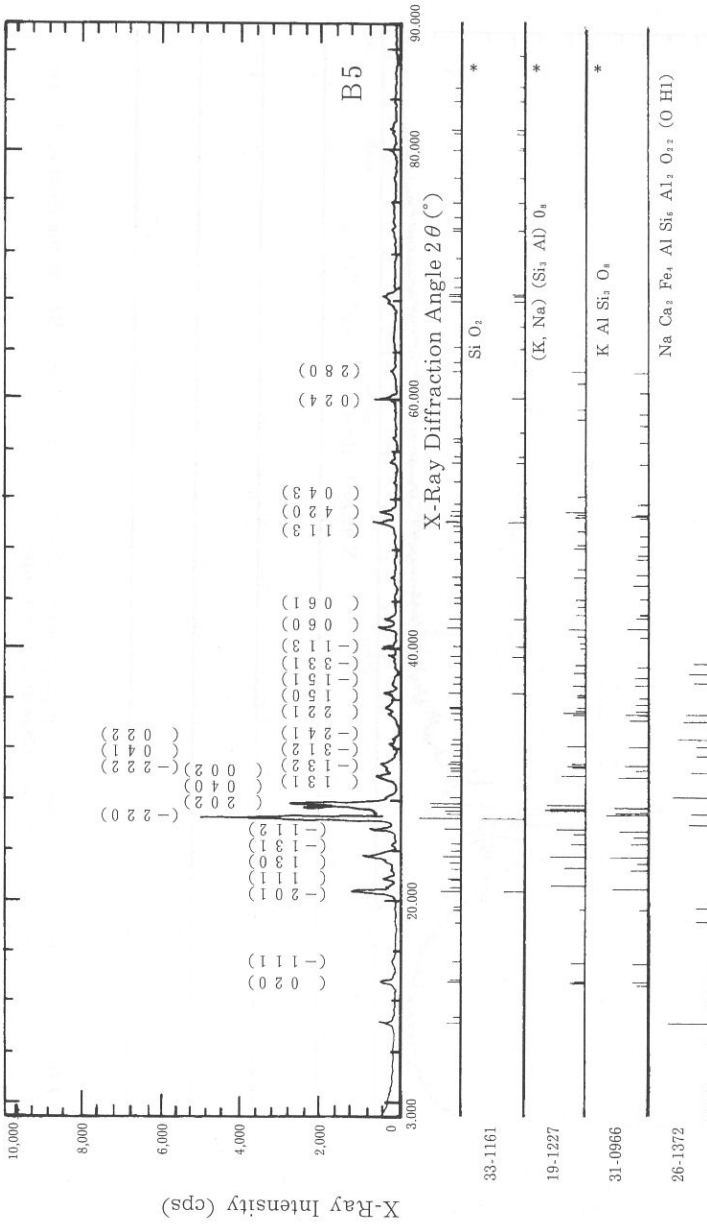


Fig. 3 The Qualitative Analysis of 2nd Search-Match of Lower Area (B5) on the East of Heaven Weather Station in Mt. Peakdu-san Group

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数（沢、劉、河野）

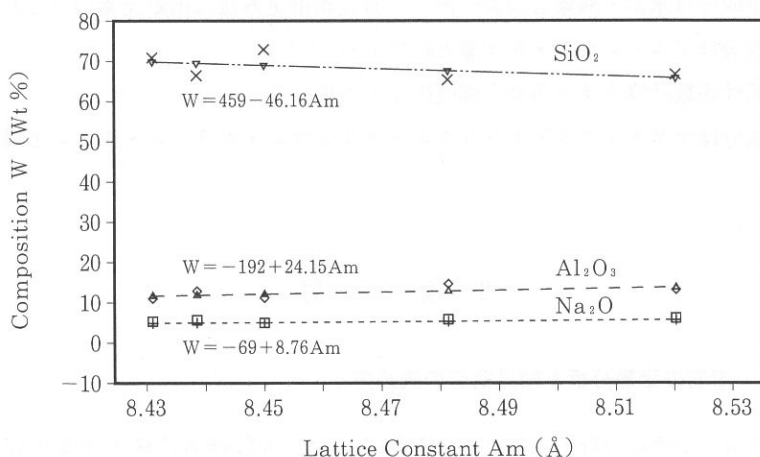


Fig.4 Relation between the Composition and Lattice Constant Am on the East of Heaven Weather Station in Mt. Peakdu-san Group

等しくなっている面指数 (Table 1 の - 表示) は、(-112) 面、(040) 面、(-113) 面、(060) 面、(113) 面または (280) 面の 5 の面指数である。また、上 (B 4) から下 (B 5) 層部への変化するにつれ、面間隔が小さくなっている面指数 (Table 1 の ↓ 表示) は、(-201) 面、(-220) 面、(-222) 面、(022) 面、(-312) 面、(221) 面および (420) 面の 7 つの面指数である。この半値幅は不純物の割合によって歪みが影響する。したがって、不純物は上層部よりも下層部の方が多くなっている。

2. 2 二次検索の定性分析

一次検索の定性分析を行うための検索条件は、次のとおりである。すなわち、

- | | |
|-------------------|-----------------------------------|
| ①信頼性係数再評価は行う | ②平滑化点数は11である |
| ③最低一致率は10%である | ④一致判定許容幅は3である |
| ⑤信頼性係数閾値は50である | ⑥回折角度は $2\theta = 3 \sim 80$ 度である |
| ⑦検索ファイルは鉱物ファイルである | ⑧検索方法はファイル1だけ検索する |

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数（沢、劉、河野）

- ⑨不定成分は水素・酸素と炭素である ⑩元素指定方法は指定元素のみである
⑪主成分はアルミニウム・ケイ素と鉄である
⑫信頼性係数計算方法は角度と強度因子とも用いる
⑬微成分はマグネシウム・ナトリウム・カルシウム・カリウム・チタンと燐である。

3 検 討

3.1 溶岩の定量分析と結晶構造の決め方

この溶岩の定量分析値（重量百分率Wt%）は、大阪経済法科大学論集57号の自動定性オーダー分析によると⁶⁾、次のとおりである。すなわち、

上層部（B4）では、

Na₂O (5.90), MgO (0.09), Al₂O₃ (12.00), SiO₂ (72.00), P₂O₅ (0.01),
SO₃ (0.02), K₂O (4.90), CaO (0.24), TiO₂ (0.24), MnO (0.10),
Fe₂O₃ (4.30), NiO (0.04), CuO (0.01), ZnO (0.04), Ga₂O₃ (0.01),
Rb₂O (0.05), Y₂O₃ (0.02), ZrO₂ (0.27) とNb₂O₅ (0.03) の19成分である。

このサンプルに近い成分は、**Table 2** と **Fig. 2** における左側のJCPDS物質の番号が考えられる。すなわち、

第1にNo.19-1227の(K, Na)(Si₃Al)O₈という長石(Sanidine)の単斜晶系
第2にNo.31-0966のKAlSi₃O₈という正長石(Orthoclase)の単斜晶系および
第3にNo.33-1161のSiO₂という石英(QUARTZ, Low)の六方晶系などに近い成分の結晶構造である。ここで、定量分析値に対応する結晶構造の面指数は単斜晶系である第1の長石であるJCPDSのNo.19-1227を引用した。

下層部（B5）では、

Na₂O (5.80), Al₂O₃ (12.00), SiO₂ (72.00), P₂O₅ (0.02), SO₃ (0.02),
K₂O (4.90), CaO (0.37), TiO₂ (0.25), MnO (0.09), Fe₂O₃ (4.60),

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数（沢、劉、河野）

Table 2 The Chemical Formula, JCPDS Number and Crystal Structure for Qualitative Analysis of 2nd Search-Match in Upper Area (B4), and Lower Area (B5)

Position	Chemical Formula	JCPDS No.
Upper Area (B4)	(K, Na)(Si ₃ Al)O ₈ Sanidine 長石 (単斜晶系)	19-1227 (Monoclinic)
	KAlSi ₃ O ₈ Orthoclase 正長石 (単斜晶系)	31-0966 (Monoclinic)
	SiO ₂ Quartz 石英 (六方晶系)	33-1161 (Hexagonal)
	非晶質成分	-----
Lower Area (B5)	SiO ₂ Quartz 石英 (六方晶系)	33-1161 (Hexagonal)
	(K, Na)(Si ₃ Al)O ₈ Sanidine 長石 (単斜晶系)	19-1227 (Monoclinic)
	KAlSi ₃ O ₈ Orthoclase 正長石 (単斜晶系)	31-0966 (Monoclinic)
	Ca ₂ Fe ₄ AlSi ₃ Al ₂ O ₂₂ (OH) ₂ Ferro-pargasite	26-1372
	LiTiS ₂ H ₂ O -----	39-0492

NiO (0.04), CuO (0.01), ZnO (0.04), Rb₂O (0.05), Y₂O₃ (0.02), ZrO₂ (0.29)とNb₂O₅ (0.03) の17成分である。

このサンプルに近い成分は、**Table 2**と**Fig. 4**における右側のJCPDS物質の番号が考えられる。

第1にNo.33-1161のSiO₂という石英 (QUARTZ) の六方晶系、

第2にNo.19-1227の (K, Na)(Si₃Al)O₈という長石 (Sanidine) の単斜晶系お

よび第3にNo.31-0966のKAlSi₃O₈という正長石 (Orthoclase) の単斜晶系

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数（沢、劉、河野）などに近い成分の結晶構造である。ここで、定量分析値に対応する結晶構造の面指数は単斜晶系である第2の長石であるJCPDSのNo.19-1227を引用した。

3.2 単斜晶系の格子定数の決め方

単斜晶系の格子定数は、面間隔（d）と面指数（hkl）によって求められる。これらの関係式は、次のとおりである⁷⁾。

$$\frac{1}{d(hkl)^2} = \frac{h^2}{A^2 \sin^2 \beta} + \frac{k^2}{B^2} + \frac{l^2}{C^2 \sin^2 \beta} - \frac{2hlc \cos \beta}{AC \sin^2 \beta} \dots\dots\dots (2)$$

面間隔[d(hkl)]は、ブラッグの反射条件式の面指数（hkl）と格子定数（AとC）によって求められる。面指数（hkl）は、Table 1のように決定し、格子定数を求めるためにデータシートを表示した。Table 1における面間隔（d）と面指数（hkl）から最小2乗法によって、格子定数のA軸とC軸が求められる仕組みを行った。A軸、B軸、C軸および軸率βの値を手計算と平行して、HITAC M-660-120EシステムでBrent法による数値計算も試みた。結果は、精密解と少なくとも有効数字4桁まで一致し、実用上遜色はなかった。なお、Brent法は日立製品名は「日立数値計算プログラムライブラリMSL II」である。計算の手順は式(1)を書きかえると次のようになる。

式(2)の右辺第1項より第4項の未知の部分それぞれX₁、・・・、X₄と略記し、これらを最小2乗法で求める。次に確定となったX₁、・・・、X₄を使って、条件(*)の基でA、B、C、βを次のように連立させて求める。(*)のA、B、Cは正の実数、π/2 < β < πとする。

$$\frac{1}{A^2 \sin^2 \beta} = X_1 \dots\dots\dots (3)$$

$$\frac{1}{B^2} = X_2 \dots\dots\dots (4)$$

$$\frac{1}{C^2 \sin^2 \beta} = X_3 \dots\dots\dots (5)$$

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数（沢、劉、河野）

$$\frac{-2 \cos \beta}{AC \sin^2 \beta} = X_4 \dots\dots\dots (6)$$

3. 2 α 格子定数（B）の求め方

式(4)を $B^2 = 1 / X_2$ と書き換えると、条件（*）から次のように格子定数Bが求められる。

$$B = \sqrt{1 / X_2} \dots\dots\dots (7)$$

3. 2 β 軸角（β）の求め方

X_1 と X_3 は式(3)と(5)である。この式(3)と(5)や条件（*）より

$$\sqrt{X_1 X_3} = 1 / (AC \sin^2 \beta) \dots\dots\dots (8)$$

がえられる。この等式の右辺を式(6)の左辺と比べれば、等式

$$-2 \cos \beta \sqrt{X_1 X_3} = X_4 \dots\dots\dots (9)$$

が得られる。これから式(9)を書きかえると式(10)のようになる。

$$\cos \beta = -\frac{1}{2} \frac{X_4}{\sqrt{X_1 X_3}} \dots\dots\dots (10)$$

また、 $\cos \beta$ から式(11)のような軸角の $\sin^2 \beta$ が求まる。

$$\sin^2 \beta = 1 - \cos^2 \beta = 1 - \frac{1}{4} \frac{X_4^2}{X_1 X_3} \dots\dots\dots (11)$$

したがって、式(11)より軸角（β）は、 $\pi / 2 < \beta < \pi$ の範囲で求まる。

$$\beta = \cos^{-1} \left(-\frac{1}{2} \frac{X_4}{\sqrt{X_1 X_3}} \right) \dots\dots\dots (12)$$

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数（沢、劉、河野）

3. 2 γ 格子定数 (A) の求め方

式(3)を A^2 について解くと、次のようになる。

$$A^2 = \frac{1}{X_1} \frac{1}{\sin^2 \beta} = \frac{1}{X_1} \frac{4X_1X_3}{4X_1X_3 - X_4^2} = \frac{4X_3}{4X_1X_3 - X_4^2} \dots\dots\dots (13)$$

したがって、条件(*)から格子定数Aは、式(14)のように求められる。

$$A = 2\sqrt{X_3 / (4X_1X_3 - X_4^2)} \dots\dots\dots (14)$$

3. 2 δ 格子定数 (C) の求め方

式(5)を C^2 について解くと、 A^2 の場合と同様に、式(15)が得られる。

$$C^2 = \frac{4X_1}{4X_1X_3 - X_4^2} \dots\dots\dots (15)$$

したがって、条件(*)から格子定数Cは、式(16)のように求まる。

$$C = 2\sqrt{X_1 / (4X_1X_3 - X_4^2)} \dots\dots\dots (16)$$

3. 3 手計算による連立方程式の解法 (クラーメルの公式)

面間隔(d)から $1/d(hkl)^2 = \mu$ 、面指数(hkl)から $h^2 = \alpha$ 、 $k^2 = \beta$ 、 $l^2 = \gamma$ および $hk = \delta$ と書くと X_1 、 \dots 、 X_4 を求める正規方程式の係数から作られる行列式は次のようになる。

$$\Delta = \begin{vmatrix} \Sigma \alpha^2 & \Sigma \alpha \beta & \Sigma \alpha \gamma & \Sigma \alpha \delta \\ \Sigma \alpha \beta & \Sigma \beta^2 & \Sigma \beta \gamma & \Sigma \beta \delta \\ \Sigma \alpha \gamma & \Sigma \beta \gamma & \Sigma \gamma^2 & \Sigma \gamma \delta \\ \Sigma \alpha \delta & \Sigma \beta \delta & \Sigma \gamma \delta & \Sigma \delta^2 \end{vmatrix} \dots\dots\dots (17)$$

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数（沢、劉、河野）

まず、式(3)の X_1 を求めるクラームルの公式とその値は、式(18)のようになる。

$$X_1 = \frac{1}{\Delta} \begin{vmatrix} \Sigma \alpha \mu & \Sigma \alpha \beta & \Sigma \alpha \gamma & \Sigma \alpha \delta \\ \Sigma \beta \mu & \Sigma \beta^2 & \Sigma \beta \gamma & \Sigma \beta \delta \\ \Sigma \gamma \mu & \Sigma \beta \gamma & \Sigma \gamma^2 & \Sigma \gamma \delta \\ \Sigma \delta \mu & \Sigma \beta \delta & \Sigma \gamma \delta & \Sigma \delta^2 \end{vmatrix} \dots\dots\dots (18)$$

のようになる。式(18)を X_1 値として、上層部B 4は0.017414であり、下層部B 5は0.017354である。つぎに、式(4)の X_2 を求めるクラームルの公式とその値は、式(19)のようになる。

$$X_2 = \frac{1}{\Delta} \begin{vmatrix} \Sigma \alpha^2 & \Sigma \alpha \mu & \Sigma \alpha \gamma & \Sigma \alpha \delta \\ \Sigma \alpha \beta & \Sigma \beta \mu & \Sigma \beta \gamma & \Sigma \beta \delta \\ \Sigma \alpha \gamma & \Sigma \gamma \mu & \Sigma \gamma^2 & \Sigma \gamma \delta \\ \Sigma \alpha \delta & \Sigma \delta \mu & \Sigma \gamma \delta & \Sigma \delta^2 \end{vmatrix} \dots\dots\dots (19)$$

のようになる。式(19)を X_2 値として、上層部B 4は0.005970であり、下層部B 5は0.005931である。または、式(5)の X_3 を求めるクラームルの公式とその値は、式(20)のようになる。

$$X_3 = \frac{1}{\Delta} \begin{vmatrix} \Sigma \alpha^2 & \Sigma \alpha \beta & \Sigma \alpha \mu & \Sigma \alpha \delta \\ \Sigma \alpha \beta & \Sigma \beta^2 & \Sigma \beta \mu & \Sigma \beta \delta \\ \Sigma \alpha \gamma & \Sigma \beta \gamma & \Sigma \delta \mu & \Sigma \gamma \delta \\ \Sigma \alpha \delta & \Sigma \beta \delta & \Sigma \gamma \mu & \Sigma \delta^2 \end{vmatrix} \dots\dots\dots (20)$$

のようになる。式(20)を X_3 値として、上層部B 4は0.024117であり、下層部B 5は0.024496である。最後に、式(6)の X_4 の値を求めるクラームルの公式とその値は、式(21)のようになる。

$$X_4 = \frac{1}{\Delta} \begin{vmatrix} \Sigma \alpha^2 & \Sigma \alpha \beta & \Sigma \alpha \gamma & \Sigma \delta \mu \\ \Sigma \alpha \beta & \Sigma \beta^2 & \Sigma \beta \gamma & \Sigma \delta \mu \\ \Sigma \alpha \gamma & \Sigma \beta \gamma & \Sigma \gamma^2 & \Sigma \delta \mu \\ \Sigma \alpha \delta & \Sigma \beta \delta & \Sigma \gamma \delta & \Sigma \delta \mu \end{vmatrix} \dots\dots\dots (21)$$

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数（沢、劉、河野）

のようになる。式(21)を X_4 値として、上層部B4は0.017966であり、下層部B5は0.018117である。

3. 4 上層部（B4）のグループ分析値と単斜晶系の格子定数

上層部のグループ分析による重量百分率（Wt%）は、大阪経済法科大学論集57号によると⁶⁾、Table 3のとおりである。すなわち、

Na₂O(5.306), MgO(0.044), Al₂O₃ (11.010), SiO₂ (70.820), P₂O₅ (0.006), K₂O(4.668), CaO(0.197), TiO₂ (0.219), MnO(0.075) および Fe₂O₃(4.044) などの成分である。

格子定数Aは、式(14)から式(22)のように求められる。

$$A = 2 \sqrt{0.0241170 / (4 * 0.0174140 * 0.0241170 - 0.0179660^2)} \dots\dots\dots (22)$$
$$= 8.4310 \text{ \AA}$$

格子定数Bは、式(7)から式(23)のように求められる。

$$B = \sqrt{1 / 0.005970} \dots\dots\dots (23)$$
$$= 12.9400 \text{ \AA}$$

格子定数Cは、式(16)から式(24)のように求められる。

$$C = 2 \sqrt{0.0174140 / (4 * 0.0174140 * 0.0241170 - 0.0179660^2)} \dots\dots\dots (24)$$
$$= 7.1640 \text{ \AA}$$

軸角 (β) は、式(12)から式(25)のように求められる。

$$\beta = \cos^{-1} \left(-\frac{1}{2} \frac{0.0179660}{\sqrt{0.0174140 * 0.0241170}} \right) \dots\dots\dots (25)$$
$$= 116.00^\circ$$

なお、手計算と平行して行ったコンピュータによる数値計算では、回帰係数の標準偏差 (Table 3) は、 $X_1 : 0.0001486$ 、 $X_2 : 0.0000313$ 、 $X_3 : 0.0001231$

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数（沢、劉、河野）

Table 3 The Standard Error of Regression Coefficients for Upper Area (B4) and Lower Area (B5)

Area	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄
B4	0.0001486	0.0000313	0.0001231	0.0003131
B5	0.0001363	0.0000287	0.0001130	0.0002872
Average	0.0001424	0.0000300	0.0001180	0.0003001

Table 4 The Initial Vector for Upper Area (B4) and Lower Area (B5)

Area	A _m	B _m	C _m	β _m
B4	9.0000	10.0000	9.0000	1.5700
B5	8.4310	12.9428	7.1642	2.0245
Average	8.7155	11.4714	8.0821	1.7973

Table 5 The Computed T Values for Upper Area (B4) and Lower Area (B5)

Area	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄
B4	117.18	190.70	195.87	57.39
B5	127.29	206.52	216.85	63.07
Average	122.24	206.52	206.36	60.23

および X₄ : 0.0003131 である。また、Brent法に適用した初期ベクトル (**Table 4**) は、A_m=9.0000、B_m=10.0000、C_m=9.0000 および β_m=1.5700 である。T 値 (**Table 5**) は、X₁ : 117.18、X₂ : 190.70、X₃ : 195.87 および X₄ : 57.39 である。決定係数 (**Table 6**) は 0.99933、多重相関係数は 0.99966、残差の標準偏差は 0.002906 および F 値は 12862 である。これらの統計量から、**Table 7** に示すように格子定数は A 軸=8.4310 Å、B 軸=12.9400 Å、C 軸=7.1640 Å および軸角の β は 116.00° であることが統計的に検証された。

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数（沢、劉、河野）

Table 6 *The Coefficient of Determination, Multiple Correlation Coefficient, Standard Error of Dependent Variable and F-Value for Upper Area (B4) and Lower Area (B5)*

Area	Coefficient of Derermination	Multiple Correlation Coefficient	STD.Error of Dependent Variable	F-Value
B4	0.99933	0.99966	0.002906	12862
B5	0.99943	0.99972	0.002666	15304
B4-B5	-0.00010	-0.00006	0.000240	-442
Average	0.99938	0.99969	0.002786	14083

Table 7 *The Lattice Constants (Å for A, B and C) and Lattice Angle (° for β) for Upper Area (B4) and Lower Area (B5)*

Area	Am (Å)	Bm (Å)	Cm (Å)	βm (°)
B4	8.4310	12.9400	7.1640	116.00
B5	8.4500	12.9800	7.1130	116.06
B4-B5	-0.0190	-0.0400	0.0510	-0.06
Average	8.4405	12.9600	7.1385	116.03
31-0966	8.5560	12.9800	7.2050	116.01
19-1227	8.4270	13.0000	7.1680	116.10

3. 5 下層部 (B5) のグループ分析値と単斜晶系の格子定数

下層部のグループ分析による重量百分率 (Wt%) は、大阪経済法科大学論集57号によると⁶⁾、**Table 3**のとおりである。すなわち、 Na_2O (4.993), MgO (0.039), Al_2O_3 (11.220), SiO_2 (72.870), P_2O_5 (0.008), K_2O (4.689), CaO (0.307), TiO_2 (0.247), MnO (0.081) および Fe_2O_3 (4.304) などの成分である。

格子定数Aは、式(14)から式(20)のように求められる。

$$A = 2 \sqrt{0.0244960 / (4 * 0.0173540 * 0.0244960 - 0.0181170^2)} \dots\dots\dots (26)$$

$$= 8.4500 \text{ \AA}$$

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数（沢、劉、河野）

格子定数Bは、式(7)から式(27)のように求められる。

$$B = \sqrt{1 / 0.005931} \dots\dots\dots (27)$$
$$= 12.9800 \text{ \AA}$$

格子定数Cは、式(16)から式(28)のように求められる。

$$C = 2 \sqrt{0.0173540 / (4 * 0.0173540 * 0.0244960 - 0.0181170^2)} \dots\dots\dots (28)$$
$$= 7.1130 \text{ \AA}$$

軸角 (β) は、式(12)から式(29)のように求められる。

$$\beta = \cos^{-1} \left(-\frac{1}{2} \frac{0.0181170}{\sqrt{0.0173540 * 0.0244960}} \right) \dots\dots\dots (29)$$
$$= 116.06^\circ$$

B 4 と同様に、コンピュータによる数値計算では、回帰係数の標準偏差（**Table 3**）は $X_1 : 0.0001363$ 、 $X_2 : 0.0000287$ 、 $X_3 : 0.0001130$ および $X_4 : 0.0002872$ である。また、Brent法に適用した初期ベクトル（**Table 4**）は $A_0 = 8.4310$ 、 $B_0 = 12.9428$ 、 $C_0 = 7.1642$ および $\beta_0 = 2.0245$ である。T 値（**Table 5**）は $X_1 : 127.29$ 、 $X_2 : 260.52$ 、 $X_3 : 216.85$ および $X_4 : 63.07$ である。決定係数（**Table 6**）は 0.99938、多重相関係数は 0.99969、残差の標準偏差は 0.002786 および F 値は 14083 である。これらの統計量から **Table 7** に示すように格子定数は A 軸 = 8.4500 \AA 、B 軸 = 12.9800 \AA 、C 軸 = 7.1130 \AA および軸角の β は 116.06° であることが統計的に検証された。

3. 6 グループ分析値と単斜晶系の格子定数（A）との関係

格子定数の A 軸は 8.4310 \AA から 8.4500 \AA までの範囲である。その差は 0.0190 \AA (0.23%) であり、天池瀑布の東側にある溶岩と比べると、その差は小さいのである。格子定数の A 軸は、天池瀑布の東側にある溶岩と合わせて、重量百分率との関係を検討をした（**Table 8**）。グループ分析により求めた重量百分率が 4 Wt% 以上の成分は、酸化ナトリウム、酸化アルミニウム、ケイ酸、酸化

Table 8 The Quantitative Analysis using XRF, Lattice Constants (Å for A, B and C) and Lattice Angle (° for β) for Upper Area (B4) and Lower Area (B5)

Component	Atomic Number	HWS			HW				TOTAL AVERAGE	
		Heaven Weather Station			Heaven Waterfall					
		Upper Area (B4)	Lower Area (B5)	Average	Upper Area (B1)	Middle Area (B2)	Lower Area (B3)	Average		
Na ₂ O	③ 11	5.306	4.993	5.150	5.688	6.103	5.776	5.856	-0.706	5.503
MgO	③ 12	0.044	0.039	0.042	0.057	0.058	0.178	0.098	-0.056	0.070
Al ₂ O ₃	③ 13	11.010	11.220	11.115	12.900	13.170	14.580	13.550	-2.435	12.333
SiO ₂	③ 14	70.820	72.870	71.845	66.420	66.570	65.250	66.080	5.765	68.963
P ₂ O ₅	③ 15	0.006	0.008	0.007	0.016	0.022	0.055	0.031	-0.024	0.019
K ₂ O	④ 19	4.668	4.689	4.679	4.952	5.029	5.545	5.175	-0.497	4.927
CaO	④ 20	0.197	0.307	0.252	0.237	0.157	0.355	0.250	0.002	0.251
TiO ₂	④ 22	0.219	0.247	0.233	0.371	0.382	0.450	0.401	-0.168	0.317
MnO	④ 23	0.075	0.081	0.078	0.161	0.181	0.141	0.161	-0.083	0.120
Fe ₂ O ₃	④ 24	4.044	4.304	4.174	5.882	6.208	5.394	5.828	-1.654	5.001
TOTAL		96.389	98.758	97.574	96.684	97.880	97.724	97.429	0.144	97.501
A-axis (Å)		8.4310	8.4500	8.4405	8.4385	8.5203	8.4813	8.4800	-0.040	8.460
B-axis (Å)		12.9400	12.9800	12.9600	12.9989	13.0543	12.9441	12.9991	-0.039	12.980
C-axis (Å)		7.1640	7.1130	7.1385	7.1582	7.1682	7.1850	7.1705	-0.032	7.154
β (°)		116.00	116.06	116.03	116.08	116.37	116.45	116.30	-0.27	116.17

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数（沢、劉、河野）

カリウムと酸化第2鉄である。これらの5成分と単斜晶系の格子定数（Am）との関係を、つぎのような回帰係数と R^2 の決定係数を求めた。

$$W_{SiO_2} = 459.11 - 46.16Am \quad \dots\dots\dots (R^2=0.268) \quad \dots\dots\dots (30)$$

$$W_{K_2O} = -38.29 + 5.11Am \quad \dots\dots\dots (R^2=0.280) \quad \dots\dots\dots (31)$$

$$W_{Na_2O} = -68.59 + 8.76Am \quad \dots\dots\dots (R^2=0.558) \quad \dots\dots\dots (32)$$

$$W_{Fe_2O_3} = -141.20 + 17.29Am \quad \dots\dots\dots (R^2=0.442) \quad \dots\dots\dots (33)$$

$$W_{Al_2O_3} = -191.84 + 24.15Am \quad \dots\dots\dots (R^2=0.360) \quad \dots\dots\dots (34)$$

正の回帰係数は、酸化カリウム（5.11）、酸化ナトリウム（8.76）、酸化第2鉄（17.29）および酸化アルミニウム（24.15）の4成分である。負の回帰係数は、ケイ酸（-46.16）のみである。決定係数の小さい値から大きい順にすれば、ケイ酸（0.268）、酸化カリウム（0.280）、酸化アルミニウム（0.360）、酸化第2鉄（0.442）や酸化ナトリウム（0.558）の順である。その範囲は、0.268から0.558までであり、その差は0.290である。

グループ分析によって求めた5Wt%以上である平均重量百分率の成分は、酸化ナトリウム（5.150Wt%）、酸化アルミニウム（11.115Wt%）とケイ酸（71.845Wt%）順の3成分である。この3成分を含めた天池瀑布の重量百分率に対すると格子定数（Am）との関係はFig. 4のとおりである。格子定数（Am）の値が大きくなるにつれ、重量百分率が小さくなる成分は、ケイ酸であり、大きくなる成分は酸化ナトリウムと酸化アルミニウムである。これは、原子間距離と金属間距離に影響していると考えられる。その理由は、原子間距離と金属間距離は、イオン半径と共有結合半径よりも大きいからである。

3. 7 グループ分析値と単斜晶系の格子定数（B）との関係

格子定数のB軸は12.9400 Åから12.9800 Åまでの範囲である。その差は0.0400 Å（0.31%）であり、天池瀑布の東側にある溶岩と比べると、その差は小さいのである。格子定数のB軸は、天池瀑布の東側にある溶岩と合わせて、重量百分率との関係を検討をした（Table 8）。グループ分析により求めた重量百

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数（沢、劉、河野）

分率が4 Wt%以上の成分は、酸化ナトリウム、酸化アルミニウム、ケイ酸、酸化カリウムと酸化第2鉄である。これらの5成分と単斜晶系の格子定数(Bm)との関係、つぎのような回帰係数と R^2 の決定係数を求めた。

$$W_{Na_2O} = -61.44 + 5.16Bm \quad \dots\dots (R^2=0.312) \quad \dots\dots (35)$$

$$W_{Al_2O_3} = -48.50 + 4.70Bm \quad \dots\dots (R^2=0.022) \quad \dots\dots (36)$$

$$W_{SiO_2} = 302.30 - 18.02Bm \quad \dots\dots (R^2=0.066) \quad \dots\dots (37)$$

$$W_{K_2O} = 11.89 - 0.53Bm \quad \dots\dots (R^2=0.005) \quad \dots\dots (38)$$

$$W_{Fe_2O_3} = -185.17 + 14.66Bm \quad \dots\dots (R^2=0.512) \quad \dots\dots (39)$$

正の回帰係数は、酸化ナトリウム(5.16)、酸化アルミニウム(4.70)と酸化第2鉄(14.66)の3成分である。負の回帰係数は、ケイ酸(18.02)と酸化カリウム(0.53)の2成分である。決定係数の小さい値から大きい順にすれば、酸化カリウム(0.005)、酸化アルミニウム(0.022)、ケイ酸(0.066)、酸化ナトリウム(0.312)や酸化第2鉄(0.512)の順である。その範囲は、0.005から0.512までの大きい値で、その差は0.507である。

グループ分析によって求めた5Wt%以上である平均重量百分率の成分は、酸化ナトリウム(5.150Wt%)、酸化アルミニウム(11.115Wt%)とケイ酸(71.845Wt%)順の3成分である。この3成分を含めた天池瀑布の重量百分率に対する格子定数(Bm)との関係はFig. 5のとおりである。格子定数(Bm)の値が大きくなるにつれ、重量百分率が小さくなる成分は、ケイ酸であり、大きくなる成分は酸化ナトリウムと酸化アルミニウムである。これは、原子間距離と金属間距離に影響していると考えられる。その理由は、原子間距離と金属間距離は、イオン半径と共有結合半径よりも大きいからである。

3. 8 グループ分析値と単斜晶系の格子定数(C)との関係

格子定数のC軸は7.1640 Åから7.1130 Åまでの範囲である。その差は0.0510 Å(0.71%)であり、天池瀑布の東側にある溶岩と比べると、その差は小さいのである。格子定数のC軸は、天池瀑布の東側にある溶岩と合わせて、重量百

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数（沢、劉、河野）

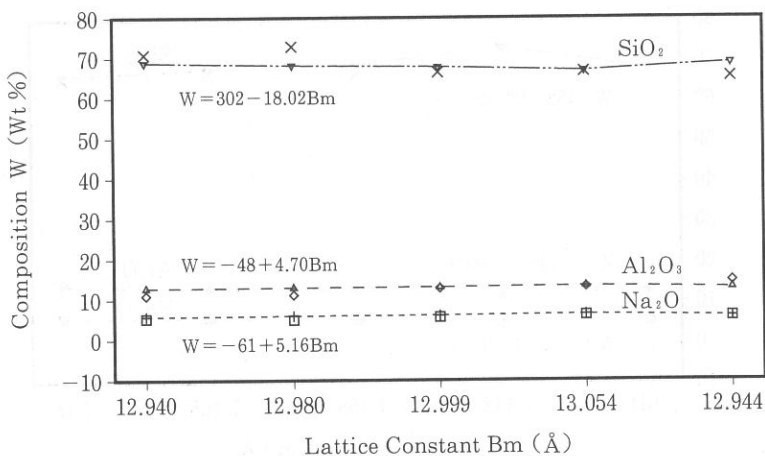


Fig.5 Relation between the Composition and Lattice Constant Bm on the East of Heaven Weather Station in Mt. Peakdu-san Group

分率との関係を検討をした (Table 8)。グループ分析により求めた重量百分率が 4 Wt%以上の成分は、酸化ナトリウム、酸化アルミニウム、ケイ酸、酸化カリウムと酸化第 2 鉄である。これらの 5 成分と単斜晶系の格子定数 (Cm) との関係、つぎのような回帰係数と R² の決定係数を求めた。

$$W_{\text{Na}_2\text{O}} = -82.01 + 12.24\text{Cm} \quad \dots\dots (R^2 = 0.583) \quad \dots\dots (40)$$

$$W_{\text{Al}_2\text{O}_3} = -264.12 + 38.66\text{Cm} \quad \dots\dots (R^2 = 0.493) \quad \dots\dots (41)$$

$$W_{\text{SiO}_2} = 787.64 - 100.49\text{Cm} \quad \dots\dots (R^2 = 0.679) \quad \dots\dots (42)$$

$$W_{\text{K}_2\text{O}} = -61.73 + 9.32\text{Cm} \quad \dots\dots (R^2 = 0.498) \quad \dots\dots (43)$$

$$W_{\text{Fe}_2\text{O}_3} = -116.01 + 16.93\text{Cm} \quad \dots\dots (R^2 = 0.227) \quad \dots\dots (44)$$

正の回帰係数は、酸化ナトリウム (12.24)、酸化アルミニウム (38.66)、酸化カリウム (9.32) と酸化第 2 鉄 (16.93) である。負の回帰係数は、ケイ酸 (100.49) のみである。決定係数の小さい値から大きい順にすれば、酸化第 2

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数（沢、劉、河野）

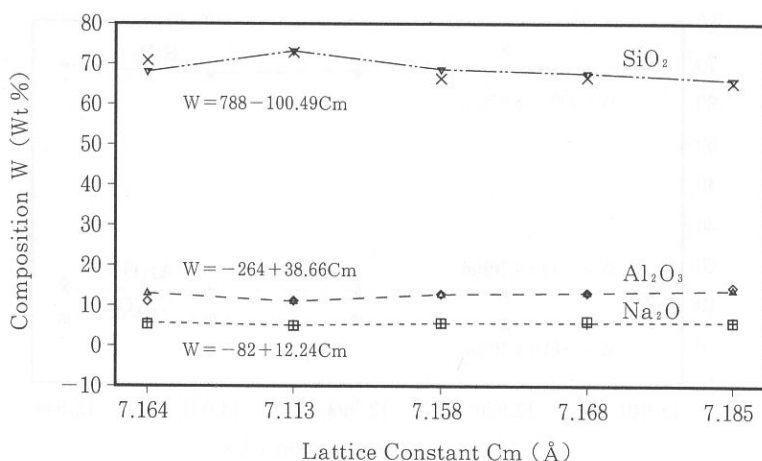


Fig.6 Relation between the Composition and Lattice Constant Cm on the East of Heaven Weather Station in Mt. Peakdu-san Group

鉄 (0.227)、酸化アルミニウム (0.493)、酸化カリウム (0.498)、酸化ナトリウム (0.583) とケイ酸 (0.679) の順である。その範囲は、0.227から0.679まで値で、その差は0.452である。

グループ分析によって求めた5Wt%以上である平均重量百分率の成分は、酸化ナトリウム (5.150Wt%)、酸化アルミニウム (11.115Wt%) とケイ酸 (71.845Wt%) 順の3成分である。この3成分を含めた天池瀑布の重量百分率に対する格子定数 (Cm) との関係はFig. 6のとおりである。格子定数 (Cm) の値が大きくなるにつれ、重量百分率が小さくなる成分は、ケイ酸であり、大きくなる成分は酸化ナトリウムと酸化アルミニウムである。これは、原子間距離と金属間距離に影響していると考えられる。その理由は、原子間距離と金属間距離は、イオン半径と共有結合半径よりも大きいからである。

4 おわりに

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に対して、X線回折図形とコンピュータの情報処理によって、単斜晶系の格子定数を決定することができた。その結果は、次のとおりである。

(a) ピーク・サーチの定性分析

回折角度の 2θ ($3\sim 90^\circ$) の範囲において、それぞれ30個のピークをサーチした。その特徴の内容として、①面間隔：上層部よりも下層部の方が大きい面間隔は4ピーク、上層部よりも下層部の方が小さい面間隔は7ピーク、また、この両者とも同じピークは19ピークである。②相対強度：上層部よりも下層部の方が大きい相対強度は3ピーク、上層部よりも下層部の方が小さい面間隔は27ピークである。③半価幅：上層部よりも下層部の方が大きい半価幅は16ピーク、上層部よりも下層部の方が小さい半価幅は7ピーク、また、この両者とも同じピークは7ピークである。そのデータの結果からそれぞれの特徴と相違点が明白になった。

(b) 二次検索の定性分析

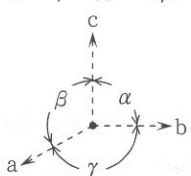
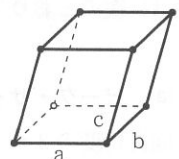
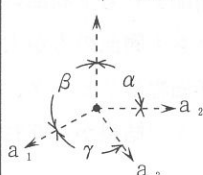
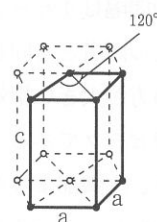
白頭山、天池気象台の東側にある溶岩の成分は、それぞれの化学式を決定することができた。その決定に対して、元素標準ピーク本数、一致本数および信頼性係数から確認することができた。各層に近いJCPDSの化学式と結晶構造は、次のように比較・検討することが可能である。

上層部（B4）では、このサンプルに近い成分の化学式と結晶構造は、①No.19-1227の $(K, Na)(Si_3Al)O_8$ という長石の単斜晶系、②No.31-0966の $KAlSi_3O_8$ という正長石の単斜晶系、③No.33-1161の SiO_2 という石英（QUARTZ）の六方晶系および④非晶質を含め4つの混晶からなっているのである。

下層部（B5）では、このサンプルに近い成分の化学式と結晶構造は、①No.33-1161の SiO_2 という石英の六方晶系、②No.19-1227の $(K, Na)(Si_3Al)O_8$ とい

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数（沢、劉、河野）

Table 9 The Crystal System, Crystallographic Axis, Bravais Lattice, Space Lattice for Upper Area (B4) and Lower Area (B5)

Crystal System	Crystallographic Axis	Bravais Lattice	Space Lattice
単斜晶系 Monoclinic	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$ 	単純格子 P (Primitive Lattice) 底心格子 C (Base Centered Lattice)	
六方晶系 Hexagonal	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$ 	単純格子 P (Primitive Lattice)	

う長石の単斜晶系、③Na31-0966のKAlSi₃O₈という正長石の単斜晶系やその他を含め5つの混晶からなっているのである。

(c) 結晶構造と格子定数

この溶岩のサンプルは、石英、長石および正長石と同質であることが、蛍光X線分析の含有率とX線分析の回折によって相関性を認めた。また、結晶構造は六方晶系や単斜晶系であることが確認された。この単斜晶系や六方晶系に関する結晶系、結晶の軸長と軸間角、ブラベー格子と格子記号、または、特徴を表す図形を比較したのが**Table 9**である。ここでは、この単斜晶系の格子定数は、回折角度より求めた面間隔と面指数を用いて、最小二乗法によるコンピュー

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数（沢、劉、河野）

タ処理を行った。すなわち、

上層部では、格子定数はA軸=8.4310 Å、B軸=12.9400 Å、C軸=7.1640 Å
および軸角の β は116.00°である。

下層部では、格子定数はA軸=8.4500 Å、B軸=12.9800 Å、C軸=7.1130 Å
および軸角の β は116.06°である。

平均値では、格子定数はA軸=8.4405 Å、B軸=12.9600 Å、C軸=7.1385 Å
および軸角の β は116.03°である。

ここで、格子定数のA軸は8.4310 Åから8.4500 Åまでの範囲で、その差は0.0190 Å（0.23%）である。天池瀑布の東側にある溶岩と比べると、その差は小さいのである。格子定数のB軸は12.9441 Åから13.0543 Åまでの範囲で、その差は0.1102 Å（0.31%）である。天池瀑布の東側にある溶岩と比べると、その差は小さいのである。格子定数のC軸は7.1582 Åから7.1850 Åまでの範囲で、その差は0.0268 Å（0.71%）である。天池瀑布の東側にある溶岩と比べると、その差は大きいのである。この百分率を比較すれば、A軸が小さく、BからCの順に大きくなっている現象である。

格子定数の軸間角は116.00°から116.06°までの範囲である。その差は0.06°であり、天池瀑布の東側にある溶岩と比べると、その差は小さいのである。一方、格子定数のA軸・B軸と軸間角は上層部（B4）から下層部（B5）になるにつれ大きくなっていることが認められた。

(d) 重量百分率と格子定数

一方、この火砕流における上層部（B4）より下層部（B5）に変化するにつれ格子定数A軸、B軸、C軸および軸角は、各成分に対する重量百分率に大きく関係する。その特徴の要因は、次のように要約できる。

① 格子定数の平均値に関して、JCPDSの31-0966や19-1227と比べると、格子定数A軸の平均値は、JCPDSの中間に存在し、格子定数のB・C軸はJCPDSよりも小さい値になっている。それは含有率における原子位置の置き換えによって異なっている。

② 軸間角（ β ）の平均値は、JCPDSの31-0966や19-1227と比べると、そ

白頭山、天池気象台の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数（沢、劉、河野）

の中間に存在し、極端な差異は認められなかった。それは重量百分率には影響がないことが認められた。

③ 全体の格子定数は、蛍光X線分析によって得られた5 Wt%以上の重量百分率の酸化ナトリウム、酸化アルミニウム、ケイ酸、酸化カリウムおよび酸化鉄などの5成分に強く影響があると考えられる。

④ 格子定数の3つの軸と軸間角の平均値は、ナトリウムとアルミニウムにおける含有率のイオン半径、金属半径、共有結合半径および原子間距離の集合により大きく依存している影響が考えられる。

⑤ 格子定数 (A_m と C_m) の値が大きくなるにつれ、重量百分率が小さくなる成分は、ケイ酸の1成分であり、大きくなる成分は酸化ナトリウム・酸化アルミニウム・酸化カリウム・酸化第2鉄の4成分である。その理由は、原子間距離と金属間距離は、イオン半径と共有結合半径よりも大きく影響していると考えられる。決定係数は良好である。

⑥ 格子定数 (B_m) の値が大きくなるにつれ、重量百分率が小さくなる成分は、ケイ酸と酸化カリウムの2成分であり、大きくなる成分は酸化ナトリウム・酸化アルミニウム・酸化第2鉄の3成分である。その理由は、原子間距離と金属間距離は、イオン半径と共有結合半径よりも大きく影響していると考えられる。決定係数は小さい値である。これは負の回帰係数が2成分も存在するからである。

謝 辞

この研究は、本学研究補助金と国際共同研究補助金「東アジアにおける文化交流の諸問題」による成果である。この試料の採集などには、中国延辺大学の田景・林哲浩先生と崔京氏および本学の藤田智変主任に感謝の意を表します。この論文のデータ作成にあたって、理学電機工業（株）閑歳浩平氏・（株）リガクの入江成夫氏に多くのご協力を頂きました。さらに、第1回白頭山国際共同研究調査団員（板谷徹丸博士、洪始煥博士、傍島茂雄氏、鄭大聲博士、中岡愛彦氏、中島保教授ならびに林信太郎博士）の関係各位に感謝の意を表します。

参 考 文 献

- (1) 王季平編「白頭山誌」吉林文史出版社（1989）
- (2) 洪永国「白頭山の地質」*Jour. Geol. Soc. Korea* 26（1990）p.199～126
- (3) 沢勲「白頭山への道」大阪経済法科大学出版部（1992）
- (4) 沢勲・劉忠傑・河野久征：「白頭山、天池気象駅の東側にある溶岩に関する六方晶系の格子定数」大阪経済法科大学東アジア研究 9（1995）P.91～107
- (5) 沢 勲：「THE FORTRAN」弘文社（1987）
- (6) 沢勲・劉忠傑・林哲浩・河野久征：「白頭山、天池気象駅の東側にある溶岩と濟州火山島の定量分析」大阪経済法科大学論集 57（1994）P.59～84
- (7) 沢勲・劉忠傑・采山寛幸・河野久征：「白頭山、天池瀑布の東側にある溶岩に関する単斜晶系の格子定数」大阪経済法科大学論集 60（1995）P.49～75

