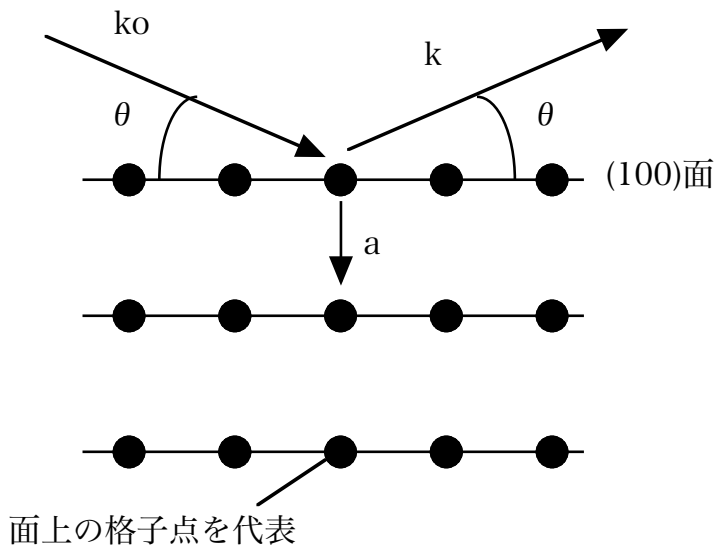


X線回折と結晶構造

山田 明



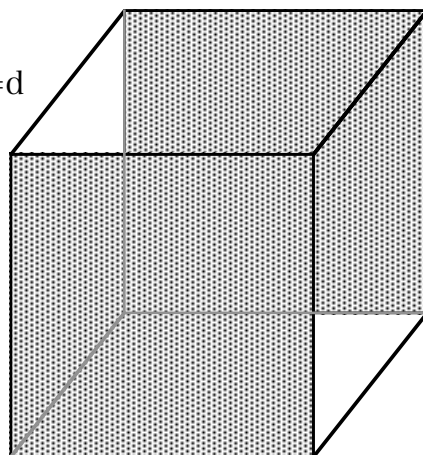
X線回折の条件は、
 $(\vec{k}_0 - \vec{k}) \cdot \vec{a} = 2n\pi$ であった。この時、
 左図のようにX線の入射角と反射角
 が等しいときは、ブラッグの反射式
 $2d \sin(\theta) = n\lambda$ で回折の条件は与えられ
 る。ここで、 d はベクトル $\vec{a}$ の大き
 さ、 λ はX線の波長である。

上記の回折の条件を導いたとき、
 格子点は面内の1点、すなわち結晶構
 造の面を代表させていたことがわか
 る。ここで、結晶は立方格子とす
 ると、代表点は、たとえば(100)面を表
 していたことがわかる。すると、ベ

クトル $\vec{a}$ は、[100]方向で大きさ(d)は格子定数に等しいことがわかる。したがって、X線
 を用いて、入射角と反射角が等しいという条件で回折実験を行うと、(100)面の反射から
 は[100]方向の格子定数 d が、 $d = \sin^{-1}(\frac{\lambda}{2} \times \frac{n}{d})$ から求められる。 $n=1$ の場合を1次の回折と呼
 ぶ。また、 $n=2$ の場合を2次の回折と呼ぶが、これは、見掛け上格子定数が $\frac{d}{2}$ の(200)面か
 らの1次の回折と同じである。下図を参照のこと。同様に、 $n=3$ の場合は、(100)面からの
 3次の回折であるとともに、(300)面の1次の回折と同じである。いずれにしても、X線回
 折は、結晶の格子定数を求める手法として極めて有用である。散乱強度は単位構造中の原
 子の位置や種類によるため、構造評価も可能である。

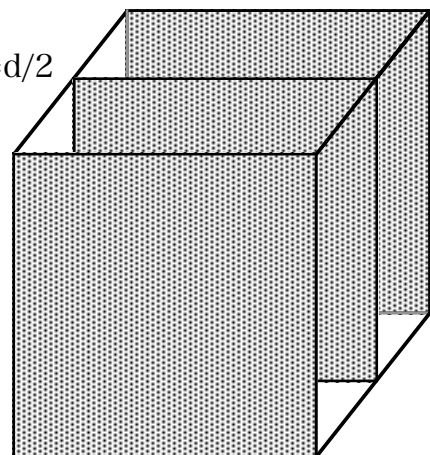
また上記のことから、X線回折にとって、面間隔が極めて重要であることがわかる。因
 に立方格子の(hkl)面の面間隔は、格子定数を d として、 $\frac{d}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$ で与えられる。

面間隔=
格子定数= d



(100)面

面間隔= $d/2$



(200)面