

23. 粉末X線回折

粉末X線回折について

C 点に置いた単結晶に波長 λ のX線を照射するとき、図1に示した様に逆格子ベクトル d^*_{hkl} の終点 P が結晶を中心とする半径 $1/\lambda$ の球（反射球）上に乗るように結晶の向きを調整すると hkl 面からの回折X線が CP 方向に観測される（Bragg の条件）。

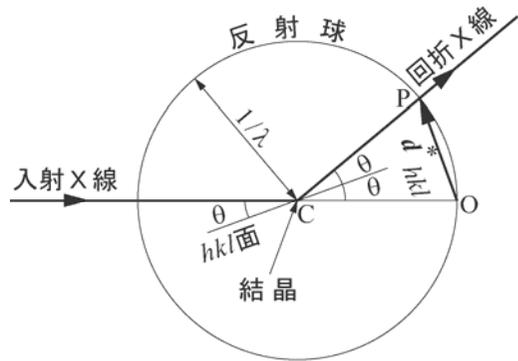
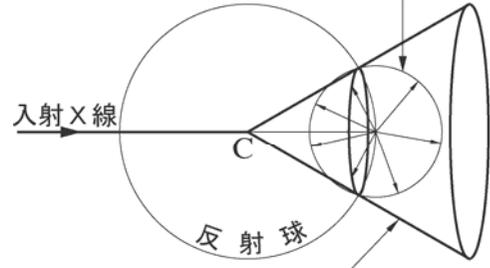


図1. Braggの条件

図1のC点に単結晶ではなく粉末(理想的にはあらゆる方向を向いた無数の微細結晶)を置いたときには各微結晶に対応する逆格子ベクトル d^*_{hkl} も逆格子の原点 O を始点としてあらゆる方向を向き、その終点は O 点を中心とした半径 OP の球となる。そのうちで Bragg の条件を満たす逆格子点はその球と反射球との交わる円周上にあるので、回折X線は図2に示すような円錐方向に起きる。

C点に粉末を置いたときに逆格子ベクトルの終点の描く軌跡



回折X線はこの円錐上に観測される

図2. 粉末試料によるX線の回折

従って、回折角 2θ の異なる（面間隔 d の異なる）回折は図3に示すように多数の円錐を同一軸上に重ねたものとなる。試料粉末が理想的にランダムな方向を向いていれば円錐上のすべての方向で回折強度は一定であるので測定は試料 C を中心とした1つの円周上のみについて行えばよい。得られる回折図形は回折角 2θ (面間隔 d) のみを変数となつて、単結晶からの回折とは異なり回折の方向に関する情報は失われる。しかし、簡単な結晶構造では指数付けができるので、そこから格子定数などの結晶学的データを求めることが可能となる。

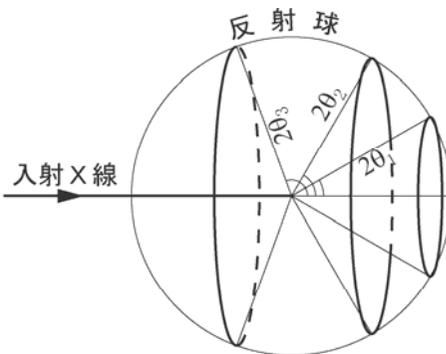


図3. 様々な面間隔による粉末X線回折
 $\theta_1 = \sin^{-1}(\lambda/2d_1)$, $\theta_2 = \sin^{-1}(\lambda/2d_2)$, $\theta_3 = \sin^{-1}(\lambda/2d_3)$

また、粉末回折図形は各結晶構造（化合物ではなく）に特有のパターンを示すので未知試料の同定に用いることが出来る。