

X線散乱強度

X線回折の回折点の位置だけでなく強度を議論するには・・・ 波動としてみたX線

3つのpoint

X線の散乱振幅は電子密度分布のフーリエ変換で表される
(強度は散乱振幅の二乗)

$$E(\mathbf{s}) = \int \rho(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{s} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} = \mathfrak{F}[\rho(\mathbf{r})]$$

原子, 分子, 単位格子, 結晶子など, 幾つかの要素が組み合わさってできる電子密度分布は, 各要素の空間分布関数の畳み込みで表される

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_1(\mathbf{r}) * \rho_2(\mathbf{r})$$

二つの関数の畳み込みのフーリエ変換は, 各々の関数のフーリエ変換の積に等しい

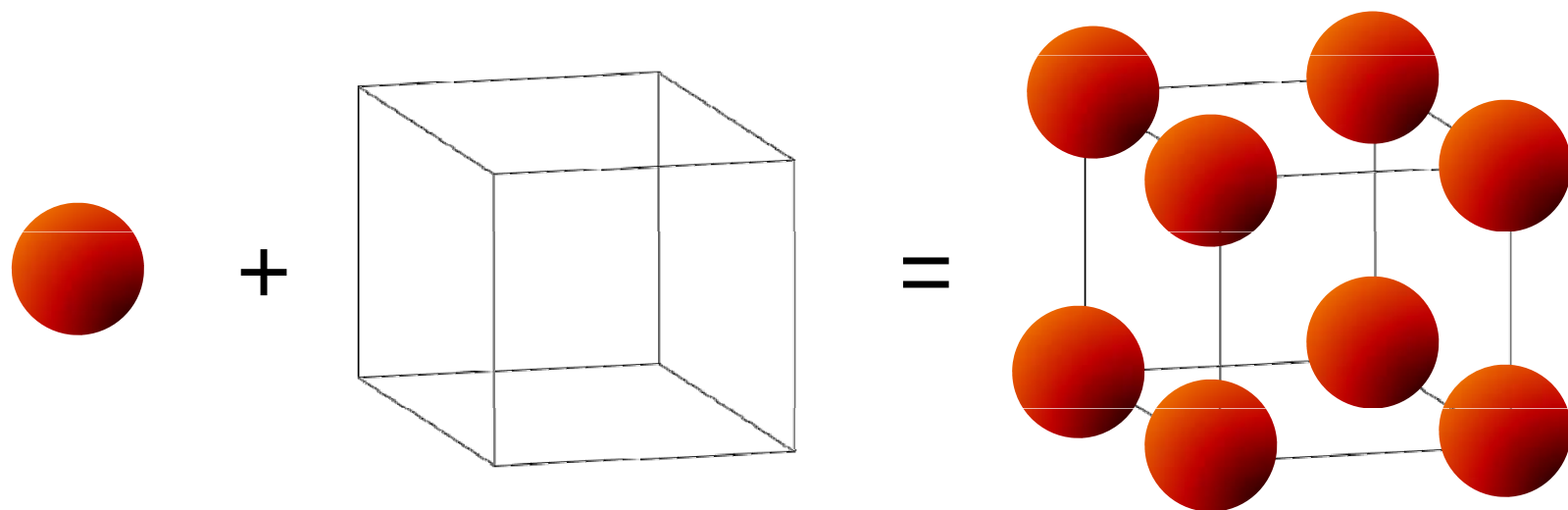
$$\mathfrak{F}[f(\mathbf{r}) * g(\mathbf{r})] = \mathfrak{F}[f(\mathbf{r})] \mathfrak{F}[g(\mathbf{r})]$$

実際の材料のX線回折強度分布を計算するには、
空間中の電子密度分布が数式で表せればよい・・・

しかし、実際の材料の中の電子密度分布は複雑・・・

原子、分子、結晶単位格子、結晶子など、各々の構造要素の
空間分布関数は数式で記述できる

それぞれの空間分布関数をフーリエ変換し、その積を求めれば
それが、散乱強度分布になる！

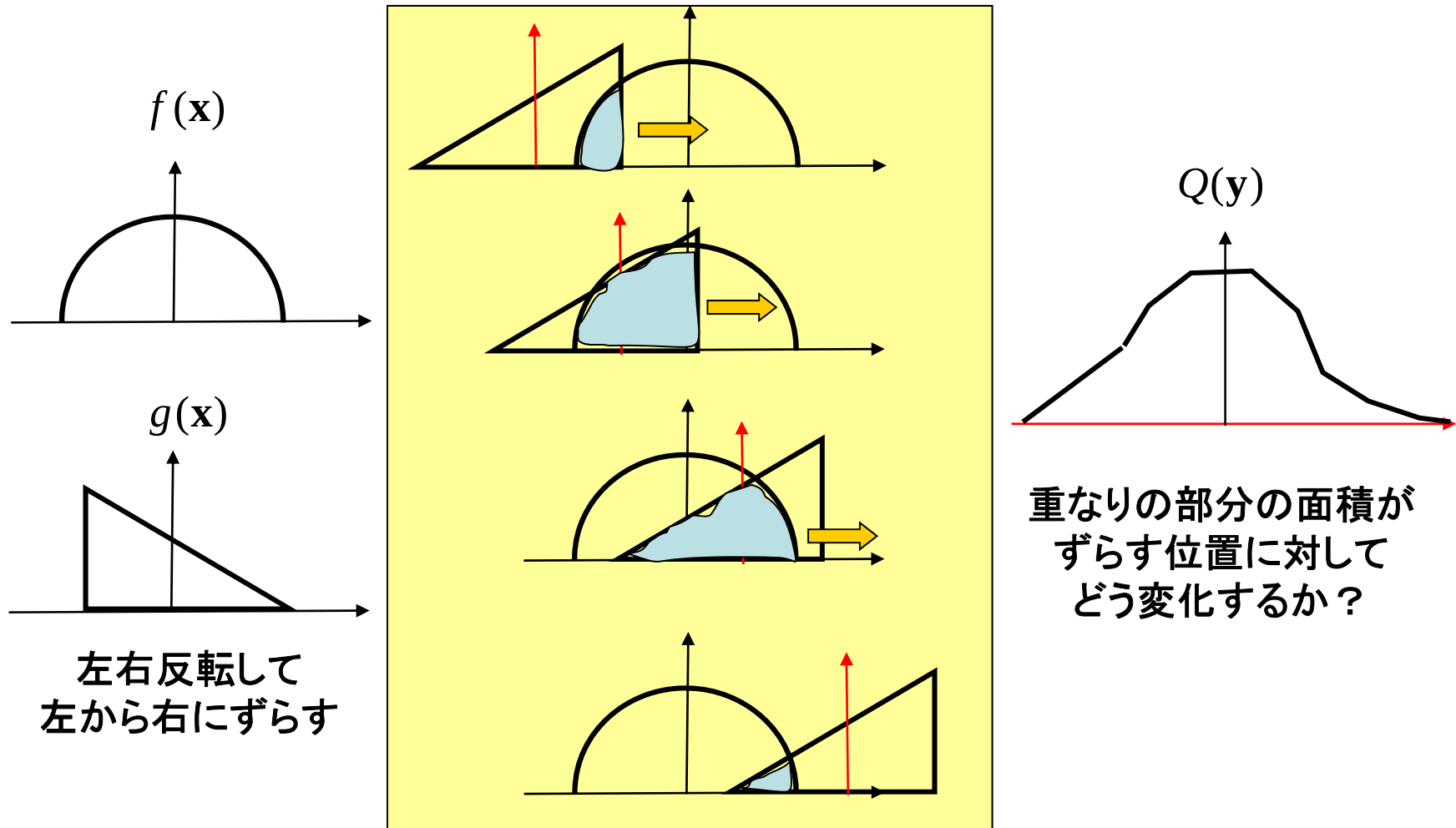


Convolution

畳み込み(Convolution)

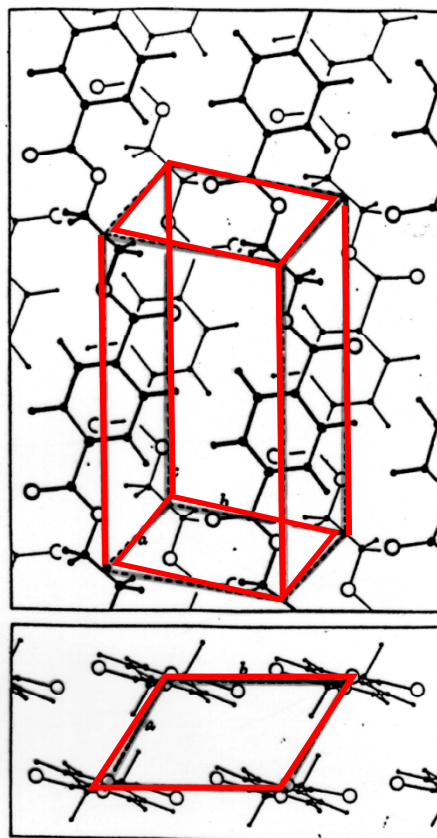
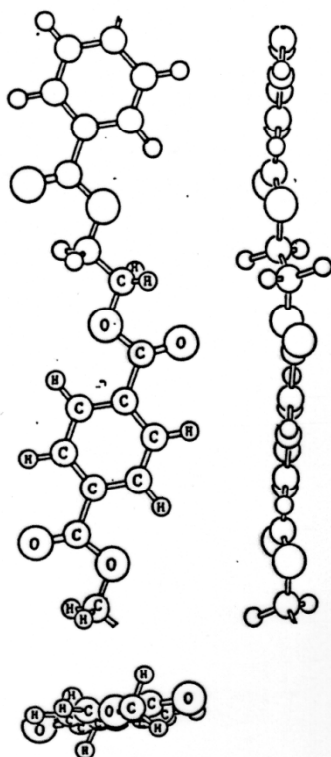
二つの関数 $f(x)$, $g(x)$ に対し

$$Q(y) = \int f(x)g(y-x)dx$$

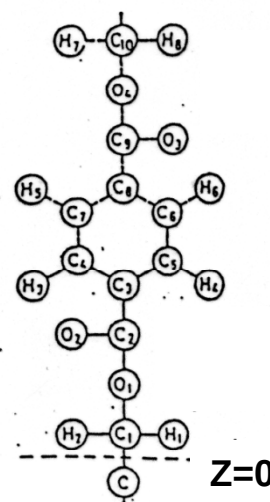


単位格子と原子座標

Poly(ethylene terephthalate)



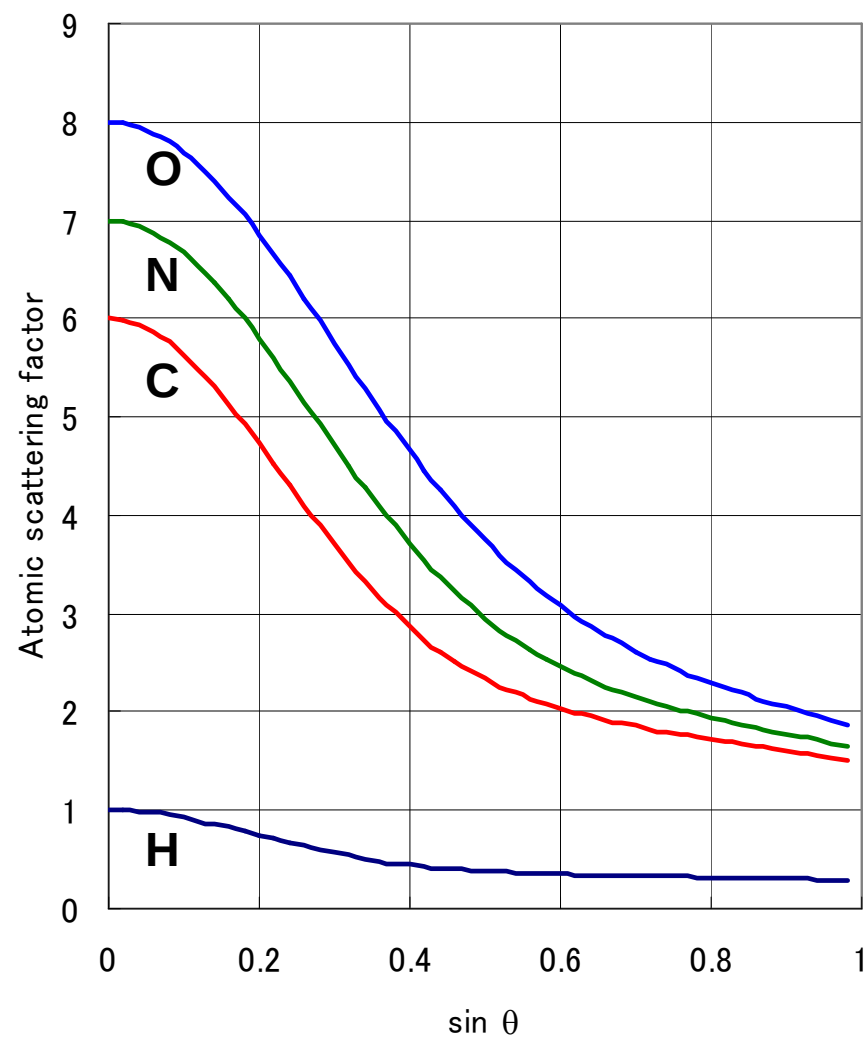
$a = 4.52 \text{ \AA}$	$\alpha = 101^\circ$
$b = 5.98 \text{ \AA}$	$\beta = 118^\circ$
$c = 10.77 \text{ \AA}$	$\gamma = 111^\circ$



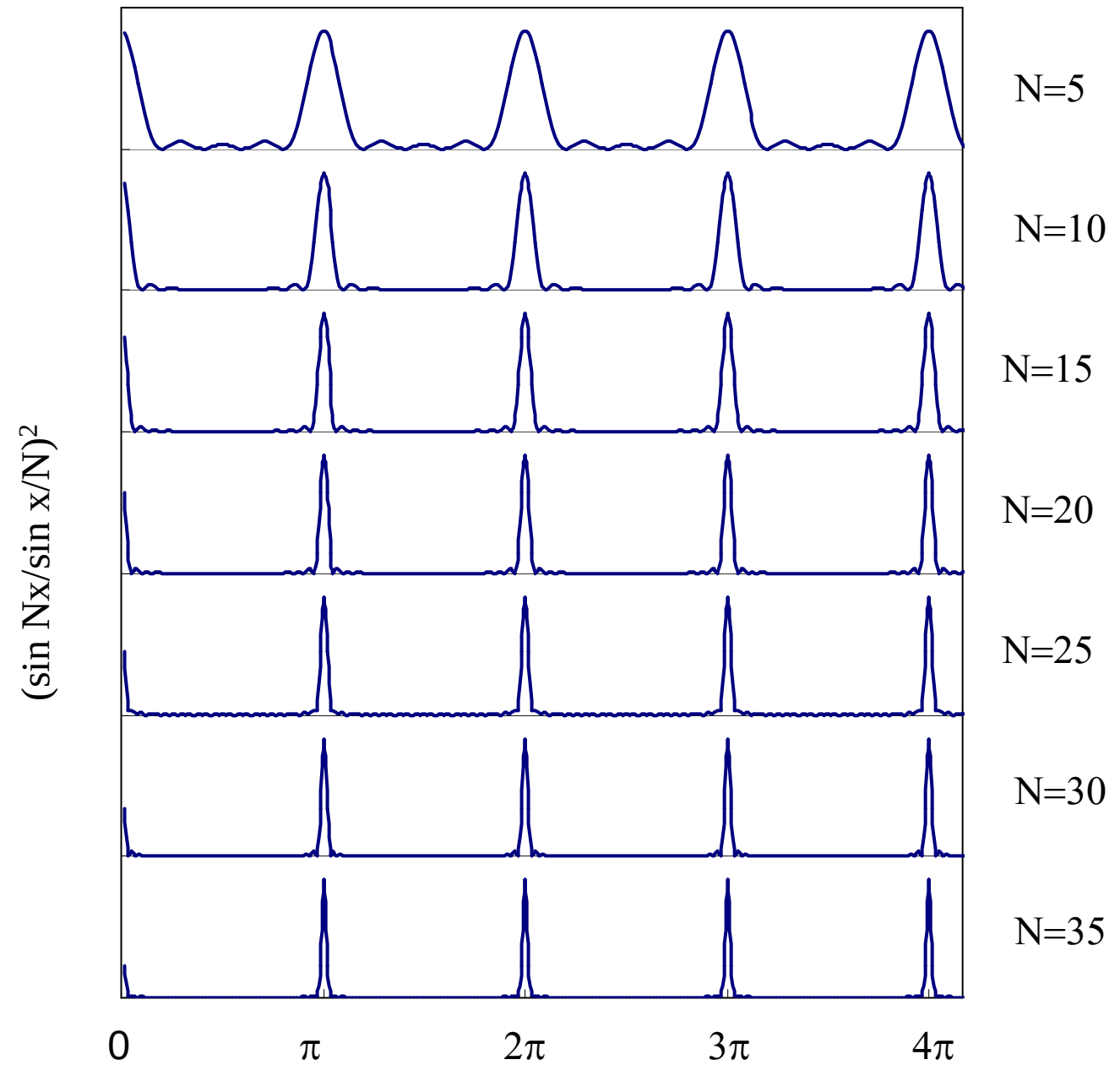
Z=0

	X	Y	Z
C ₁	0.1356	-0.5382	0.4308
C ₂	-0.1808	-1.0764	2.5848
C ₃	0.0904	-0.5382	4.2003
C ₄	-0.3616	-1.5548	4.8680
C ₅	0.5876	1.0764	4.7927
C ₆	0.3616	1.5548	5.9020
C ₇	-0.5876	-1.0764	5.9773
C ₈	-0.0904	0.5382	6.5697
C ₉	0.1808	1.0764	8.1852
C ₁₀	-0.1356	0.5382	10.3392
O ₁	0.4520	0.0000	2.0463
O ₂	-0.3616	-2.4518	2.2079
O ₃	0.3616	2.4518	8.5621
O ₄	-0.4520	0.0000	8.7237
H ₁	-0.7232	-1.9136	-0.2154
H ₂	0.3842	-1.3455	-0.2477
H ₃	-0.9040	-2.9900	4.4157
H ₄	0.8136	1.9734	4.1465
H ₅	-0.8136	-1.9734	6.6235
H ₆	0.9040	2.9900	6.3543
H ₇	0.7232	1.9136	10.9854
H ₈	-0.3842	1.3455	11.0177
C	0.1356	0.5382	-0.4308

原子散乱因子 (Atomic scattering factor)

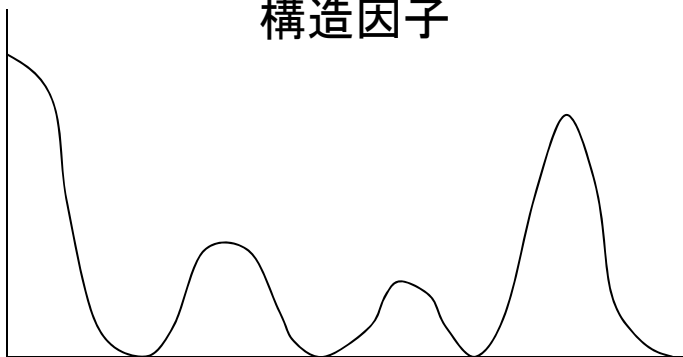


ラウエ関数

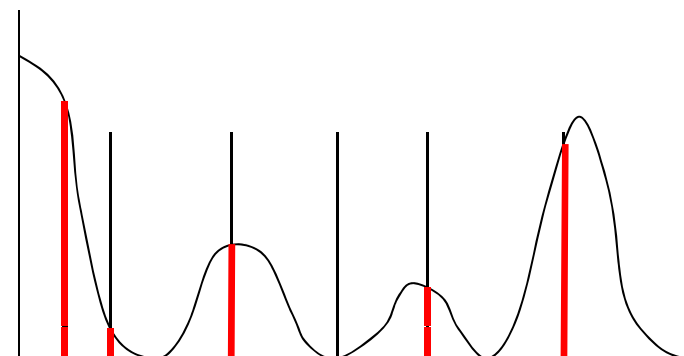


構造因子とラウエ関数

構造因子



観測される各結晶面の回折強度



ラウエ関数

