# 繊維構造のX線解析

# 回折・散乱強度測定系の模式図

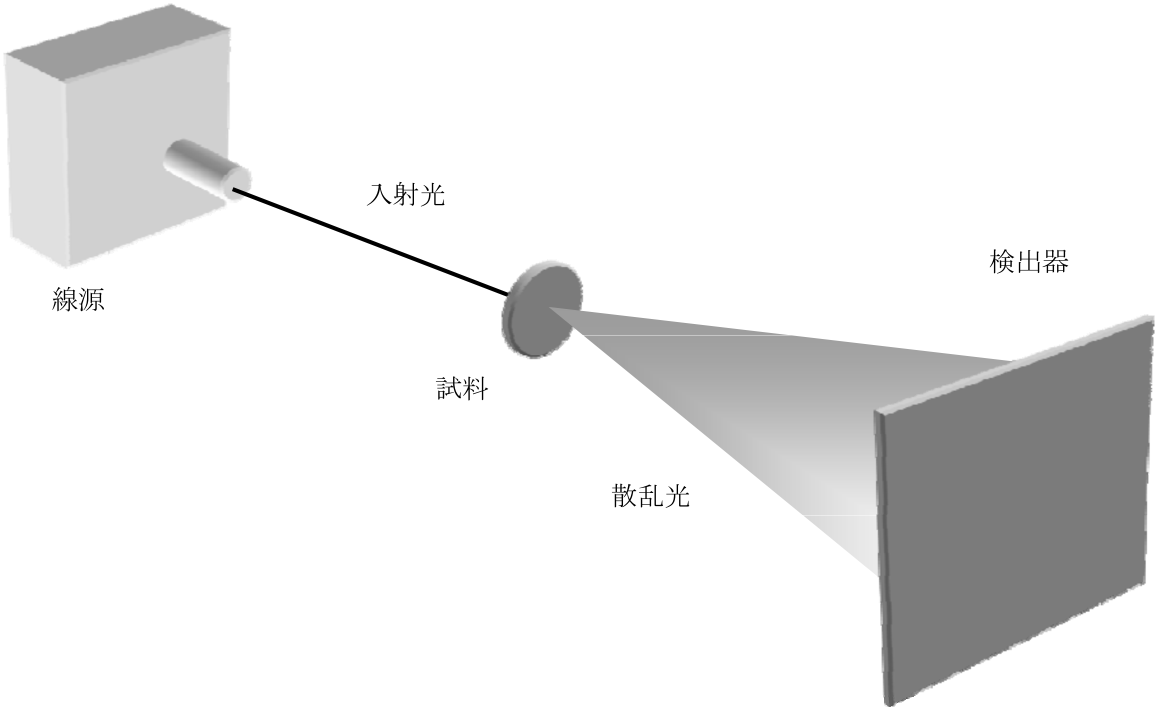
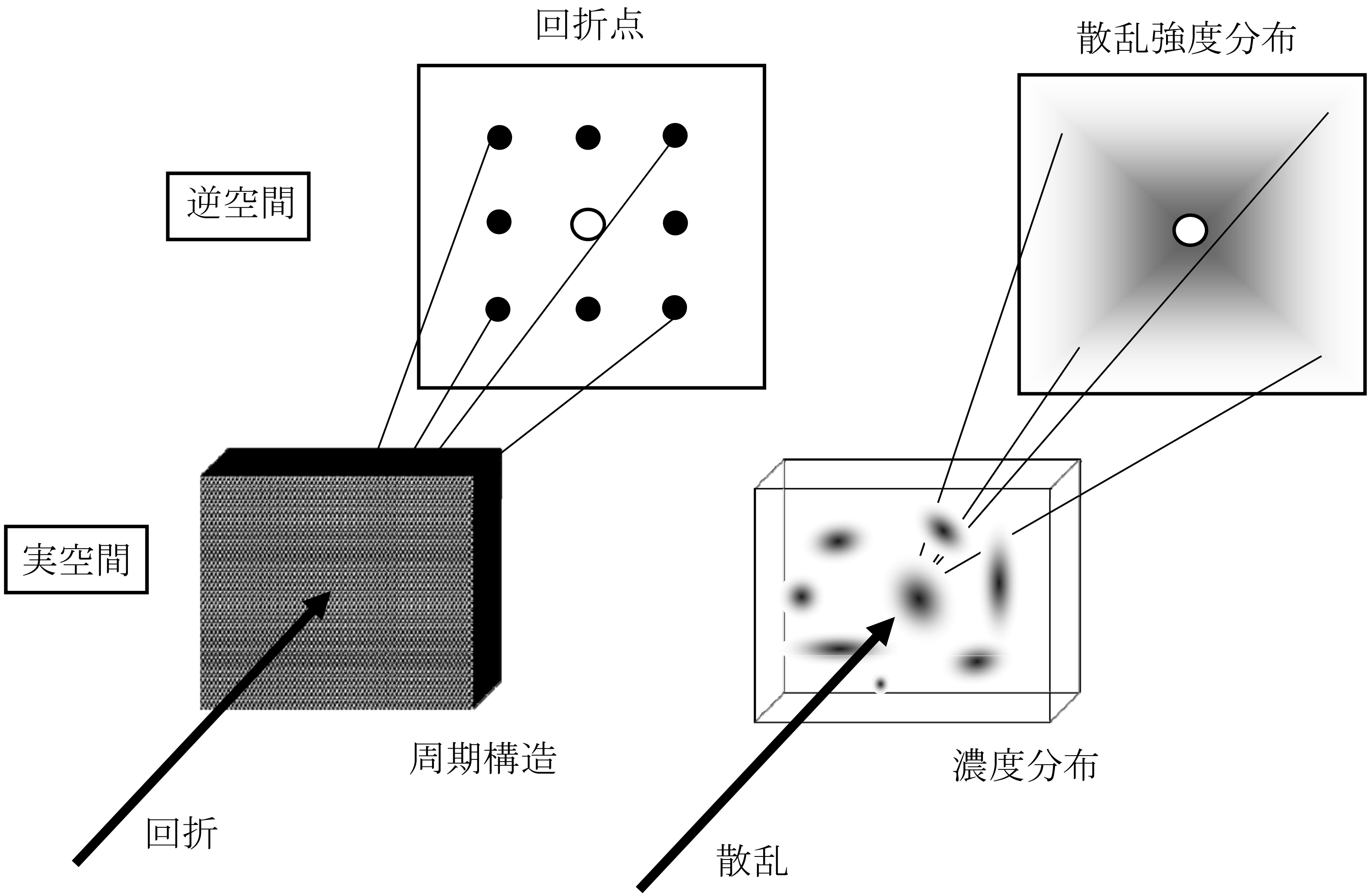
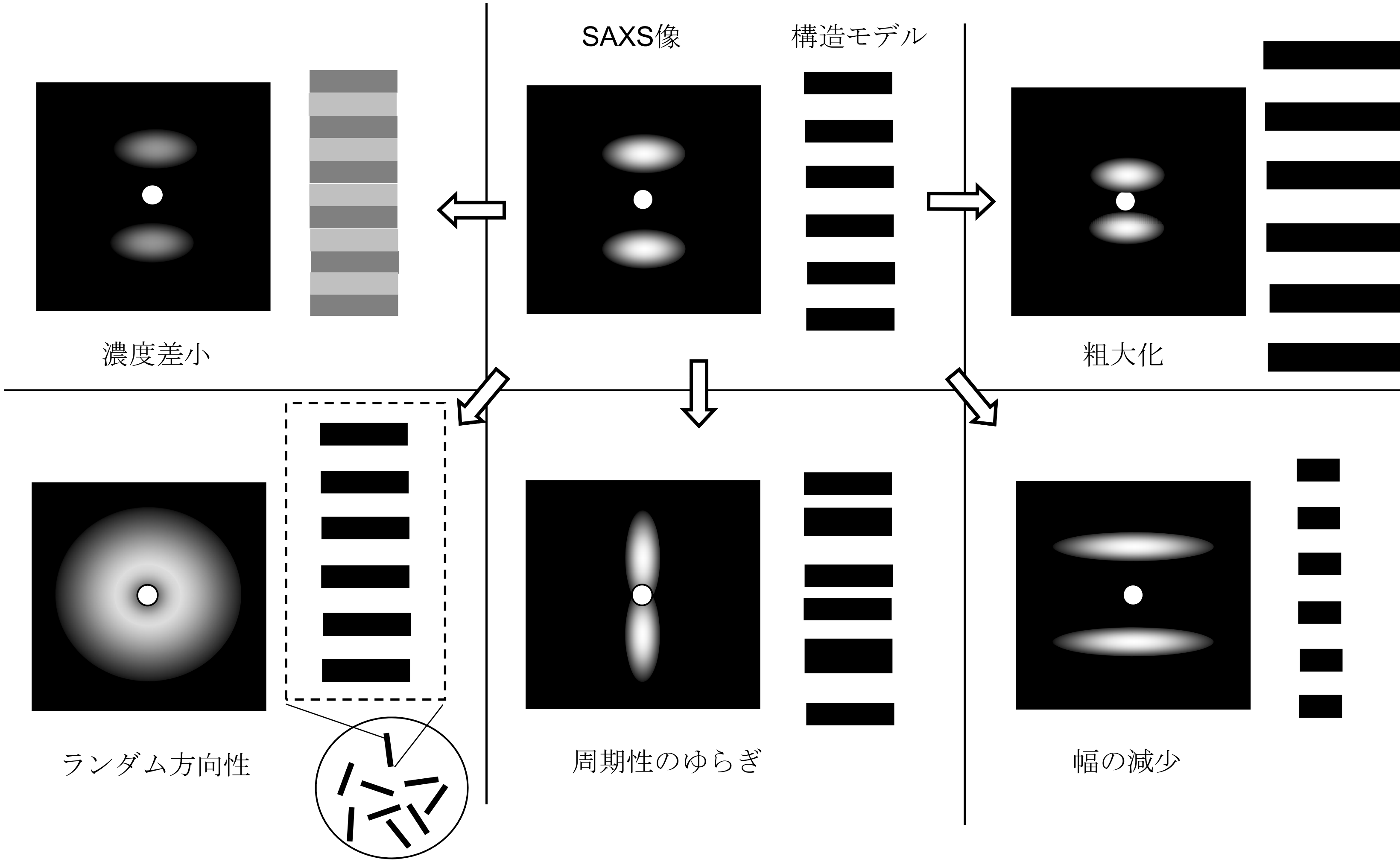



図１　回折・散乱強度測定系の模式図

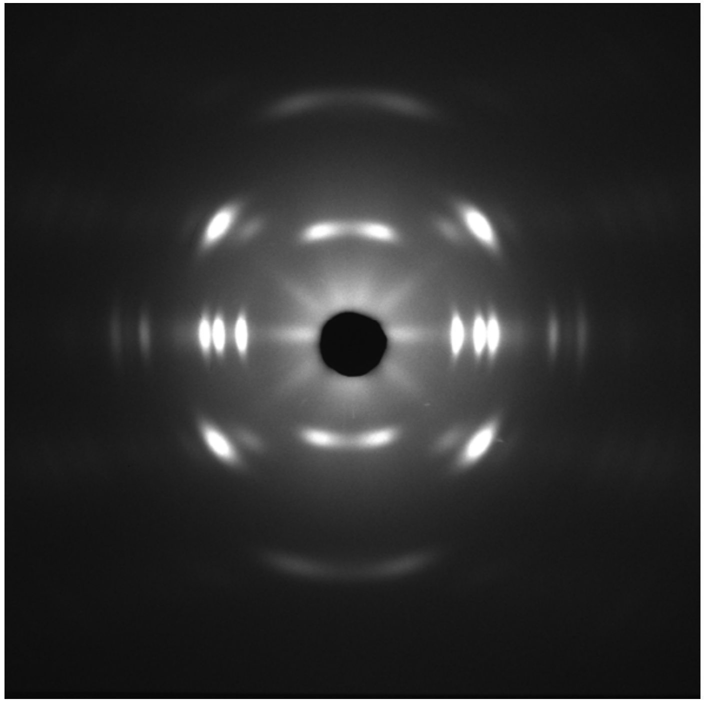



**回折と散乱の概念の違い**

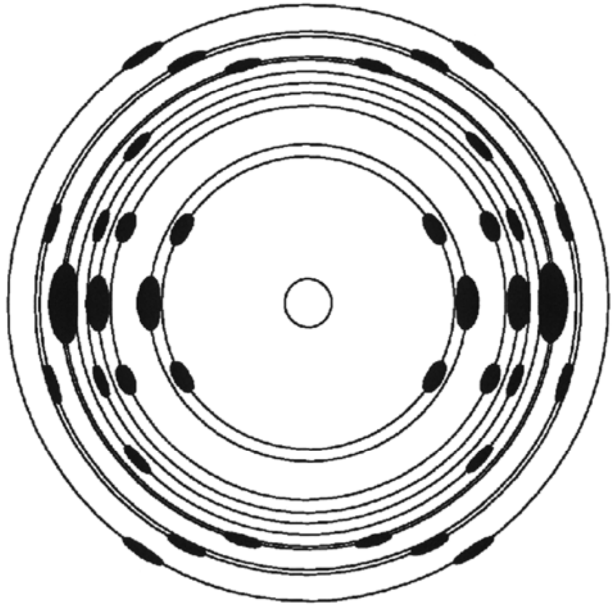
# 構造モデルと散乱像の関係



# 繊維の広角X線回折像

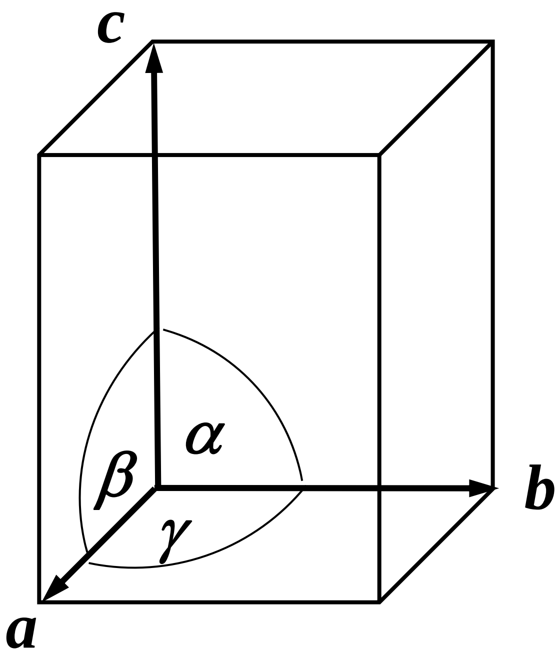


ポリプロピレン繊維



ポリエチレンテレフタレート繊維
（計算結果）

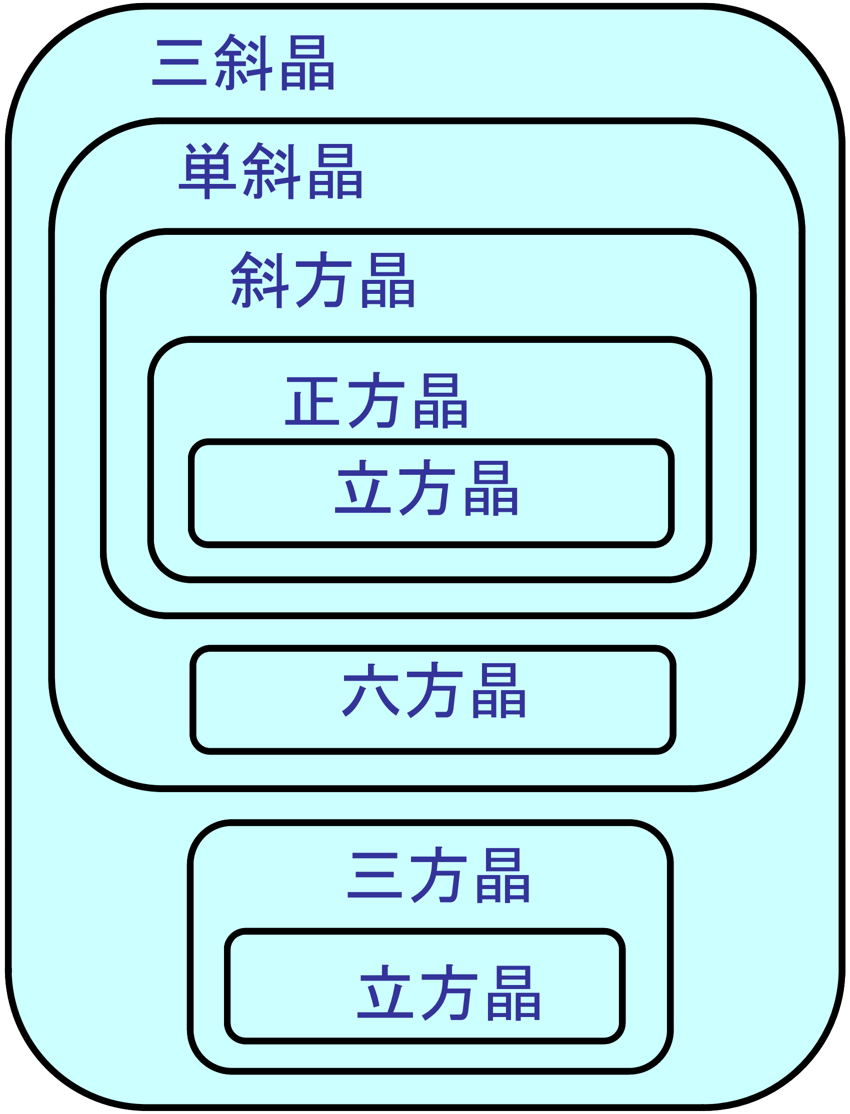
# 七つの晶系




結晶単位格子
パラメータ

| 晶系 | 軸長 | 軸角 |
|---|---|---|
| 立方晶 | $a=b=c$ | $\alpha=\beta=\gamma=90^o$ |
| 六方晶 | $a=b\neq c$ | $\alpha=\beta=90^o, \gamma=120^o$ |
| 三方晶 | $a=b=c$ | $\alpha=\beta=\gamma\neq 90^o, <120^o$ |
| 正方晶 | $a=b\neq c$ | $\alpha=\beta=\gamma=90^o$ |
| 斜方晶 | $a\neq b\neq c$ | $\alpha=\beta=\gamma=90^o$ |
| 単斜晶 | $a\neq b\neq c$ | $\alpha=\beta=90^o\neq\gamma$ |
| 三斜晶 | $a\neq b\neq c$ | $\alpha\neq\beta\neq\gamma$ |

# 晶系間の包含関係




| 晶系 | 軸長 | 軸角 |
|---|---|---|
| 立方晶 | $a=b=c$ | $\alpha=\beta=\gamma=90^{\circ}$ |
| 六方晶 | $a=b\neq c$ | $\alpha=\beta=90^{\circ}, \gamma=120^{\circ}$ |
| 三方晶 | $a=b=c$ | $\alpha=\beta=\gamma\neq 90^{\circ}, <120^{\circ}$ |
| 正方晶 | $a=b\neq c$ | $\alpha=\beta=\gamma=90^{\circ}$ |
| 斜方晶 | $a\neq b\neq c$ | $\alpha=\beta=\gamma=90^{\circ}$ |
| 単斜晶 | $a\neq b\neq c$ | $\alpha=\beta=90^{\circ}\neq\gamma$ |
| 三斜晶 | $a\neq b\neq c$ | $\alpha\neq\beta\neq\gamma$ |

## 逆ベクトルの定義

空間中の同一平面にない3つのベクトル a, b, c に対し逆ベクトル a*, b*, c*は次式で定義される.

$$\mathbf{a}^* = \frac{\mathbf{b}\times\mathbf{c}}{V}, \quad \mathbf{b}^* = \frac{\mathbf{c}\times\mathbf{a}}{V}, \quad \mathbf{c}^* = \frac{\mathbf{a}\times\mathbf{b}}{V}$$

ここで体積 $V$ は $V = \mathbf{a}\cdot(\mathbf{b}\times\mathbf{c})$

## 逆ベクトルの性質

$$\mathbf{a}\cdot\mathbf{a}^* = \mathbf{b}\cdot\mathbf{b}^* = \mathbf{c}\cdot\mathbf{c}^* = 1$$

$$\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}^* = \mathbf{a}\cdot\mathbf{c}^* = \mathbf{b}\cdot\mathbf{c}^* = \cdots = 0$$

$$V^* = \mathbf{a}^*\cdot(\mathbf{b}^*\times\mathbf{c}^*) = \frac{1}{V}$$

$$(\mathbf{a}^*)^* = \mathbf{a}, \quad (\mathbf{b}^*)^* = \mathbf{b}, \quad (\mathbf{c}^*)^* = \mathbf{c}$$

任意のベクトルAは，次式で記述できる

$$\mathbf{A} = (\mathbf{A}\cdot\mathbf{a}^*)\mathbf{a} + (\mathbf{A}\cdot\mathbf{b}^*)\mathbf{b} + (\mathbf{A}\cdot\mathbf{c}^*)\mathbf{c}$$

$$\mathbf{A} = (\mathbf{A}\cdot\mathbf{a})\mathbf{a}^* + (\mathbf{A}\cdot\mathbf{b})\mathbf{b}^* + (\mathbf{A}\cdot\mathbf{c})\mathbf{c}^*$$

直交系単位ベクトル i, j, k について

$$\mathbf{i}^* = \mathbf{i} \qquad \mathbf{j}^* = \mathbf{j} \qquad \mathbf{k}^* = \mathbf{k}$$

面法線ベクトル$\mathrm{N}_{hkl}$を次式で定義する

$$\mathrm{N}_{hkl} = h\,\mathbf{a}^* + k\,\mathbf{b}^* + l\,\mathbf{c}^*$$

$\mathrm{N}_{hkl}$をの終端がEwaldの反射球上にあるとき，ブラッグの回折条件を満たす.

,

$\mathrm{N}_{hkl} \perp \ hkl$面,

,

$$\left|\mathbf{N}_{hkl}\right| = \frac{1}{d_{hkl}}$$

単位格子(Unit cell)のパラメータ　$a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ に対し

単位格子の体積

$$V = abc\begin{vmatrix} 1 & \cos\gamma & \cos\beta \\ \cos\gamma & 1 & \cos\alpha \\ \cos\beta & \cos\alpha & 1 \end{vmatrix}^{1/2}$$

$hkl$ 面の 面間隔 $d_{hkl}$

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{\dfrac{h}{a}\begin{vmatrix} \dfrac{h}{a} & \cos\gamma & \cos\beta \\ \dfrac{k}{b} & 1 & \cos\alpha \\ \dfrac{l}{c} & \cos\alpha & 1 \end{vmatrix} + \dfrac{k}{b}\begin{vmatrix} 1 & \dfrac{h}{a} & \cos\beta \\ \cos\gamma & \dfrac{k}{b} & \cos\alpha \\ \cos\beta & \dfrac{l}{c} & 1 \end{vmatrix} + \dfrac{l}{c}\begin{vmatrix} 1 & \cos\gamma & \dfrac{h}{a} \\ \cos\gamma & 1 & \dfrac{k}{b} \\ \cos\beta & \cos\alpha & \dfrac{l}{c} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & \cos\gamma & \cos\beta \\ \cos\gamma & 1 & \cos\alpha \\ \cos\beta & \cos\alpha & 1 \end{vmatrix}}$$