

繊維・複合材料A-5回目

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

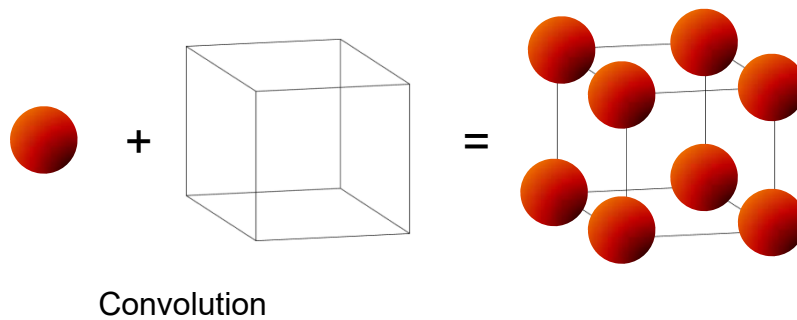
$$\mathfrak{F}[f(\mathbf{r}) * g(\mathbf{r})] = \mathfrak{F}[f(\mathbf{r})] \mathfrak{F}[g(\mathbf{r})]$$

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

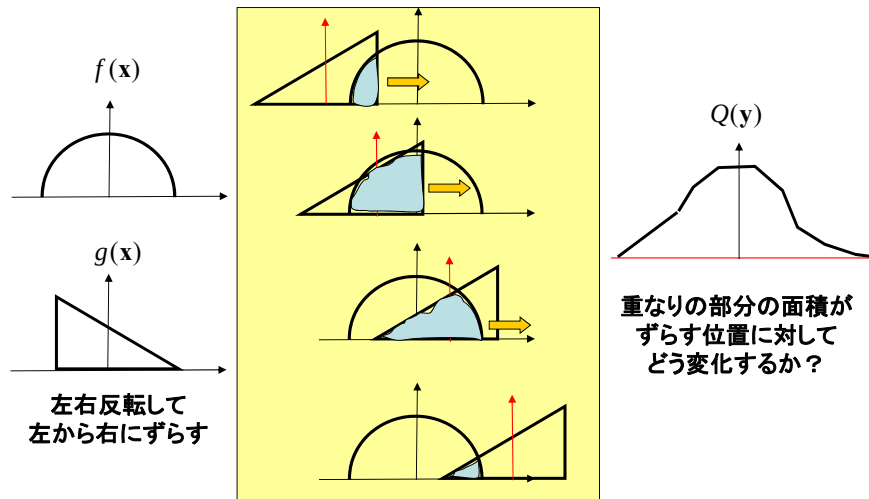
それぞれの空間分布関数をフーリエ変換し、その積を求めれば
それが、散乱強度分布になる！



畳み込み(Convolution)

二つの関数 $f(x), g(x)$ に対し

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



結晶のX線散乱強度

1個の電子による散乱 → 散乱強度 I_e

1個の原子による散乱 → 原子散乱因子 f

1個の結晶格子による散乱(原子座標) → 構造因子 $F(hkl)$
消滅則

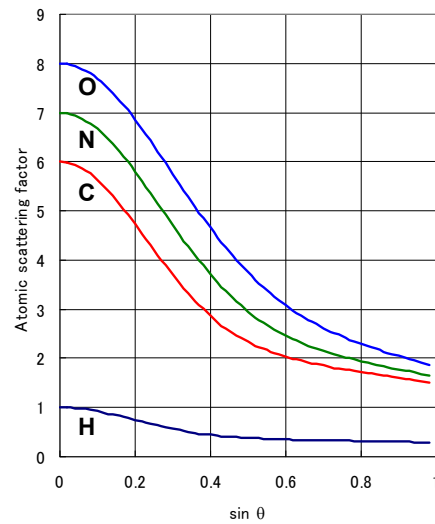
結晶格子の集合体(結晶子)による散乱 → ラウエ関数 L

各々の要素の空間分布関数の畳み込み → フーリエ変換 → X線散乱振幅

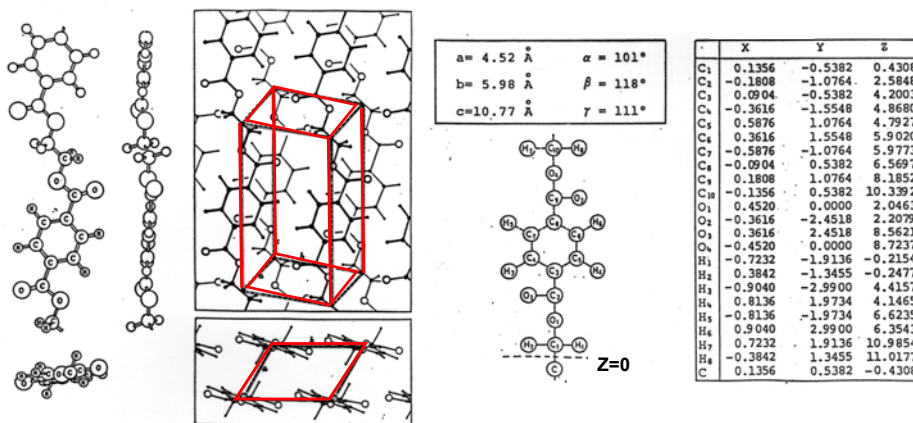


各々の要素の空間分布関数のフーリエ変換 → 結果の積 → X線散乱振幅

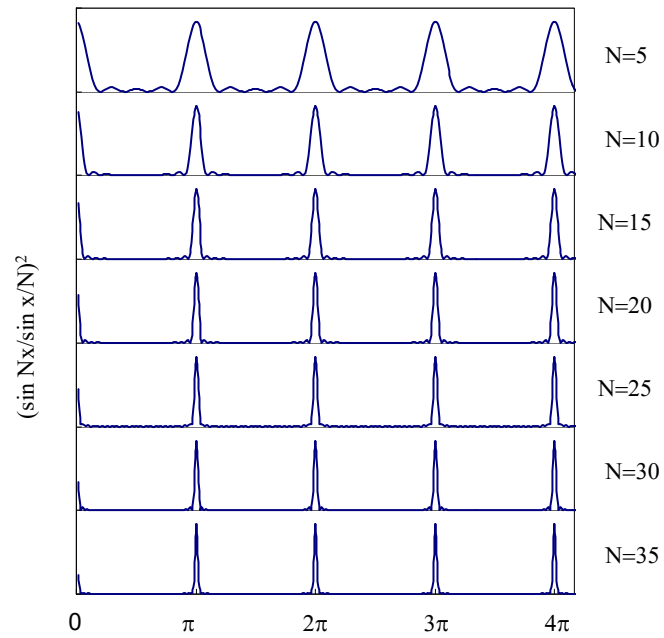
原子散乱因子 (Atomic scattering factor)



単位格子と原子座標 Poly(ethylene terephthalate)

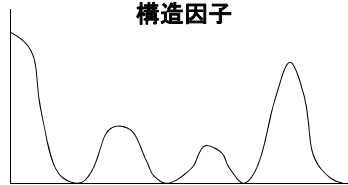


ラウエ関数

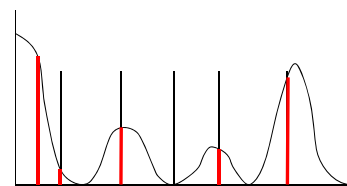


構造因子とラウエ関数

構造因子



観測される各結晶面の回折強度



ラウエ関数

