

繊維構造のX線解析

回折・散乱強度測定系の模式図

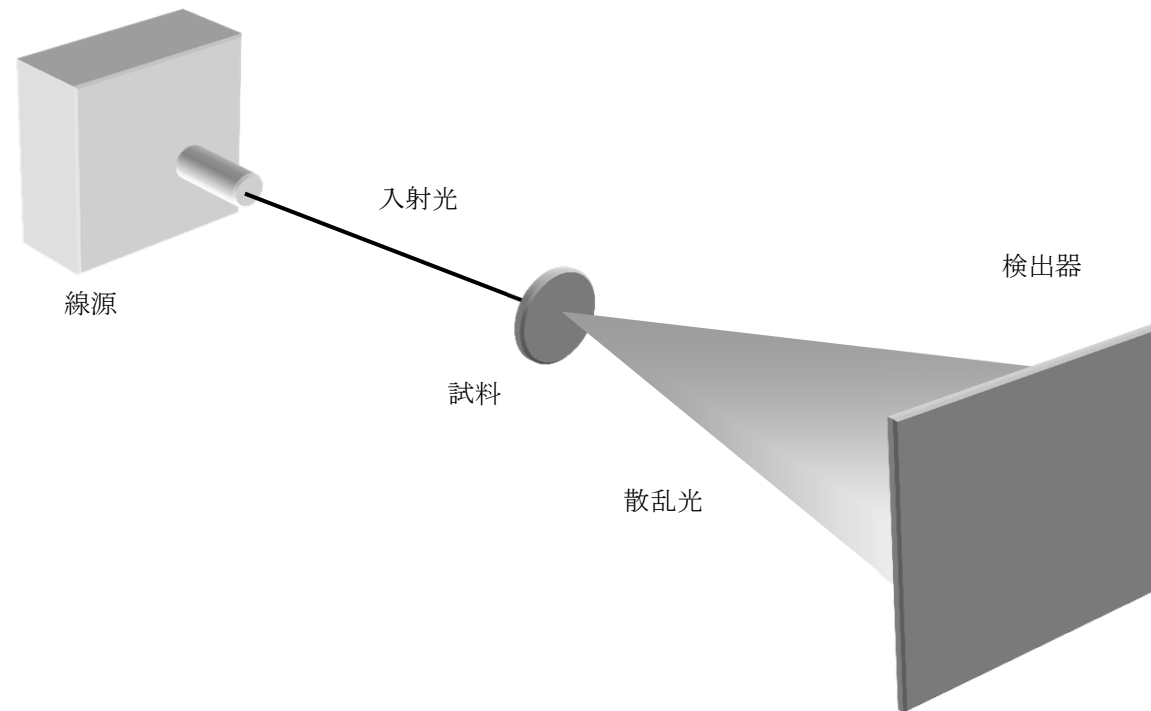
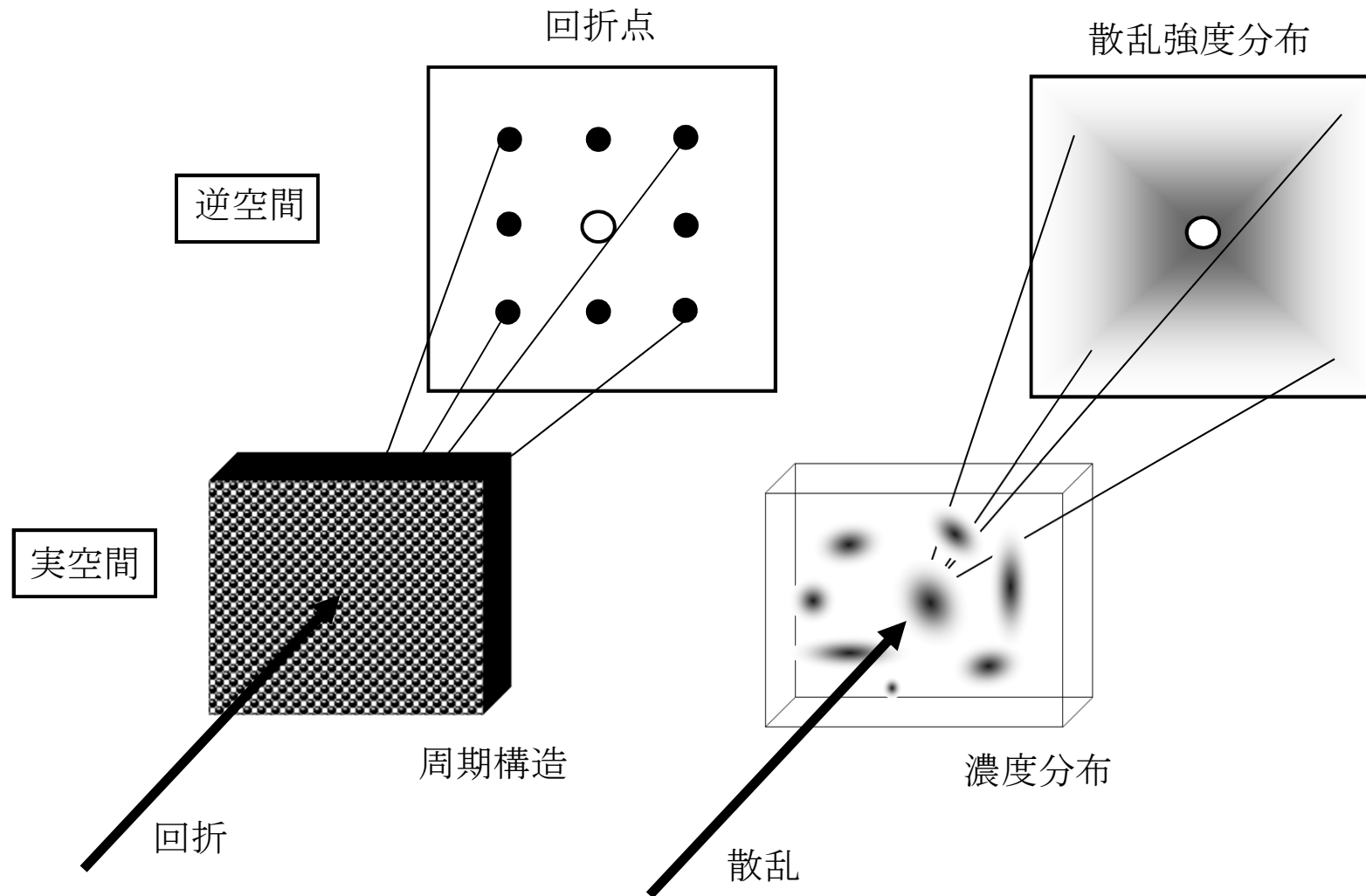


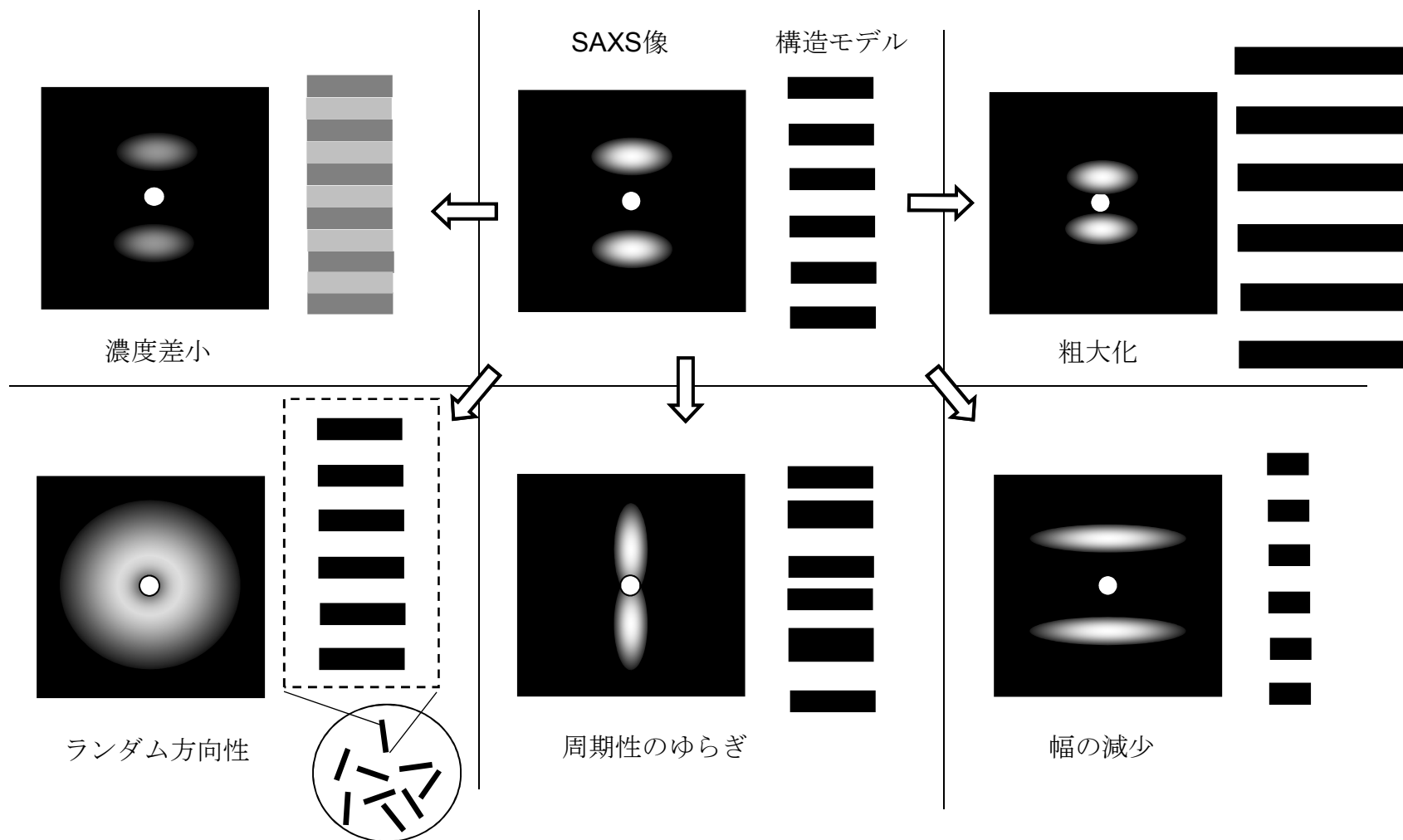
図 1 回折・散乱強度測定系の模式図

繊維・複合材料2回目

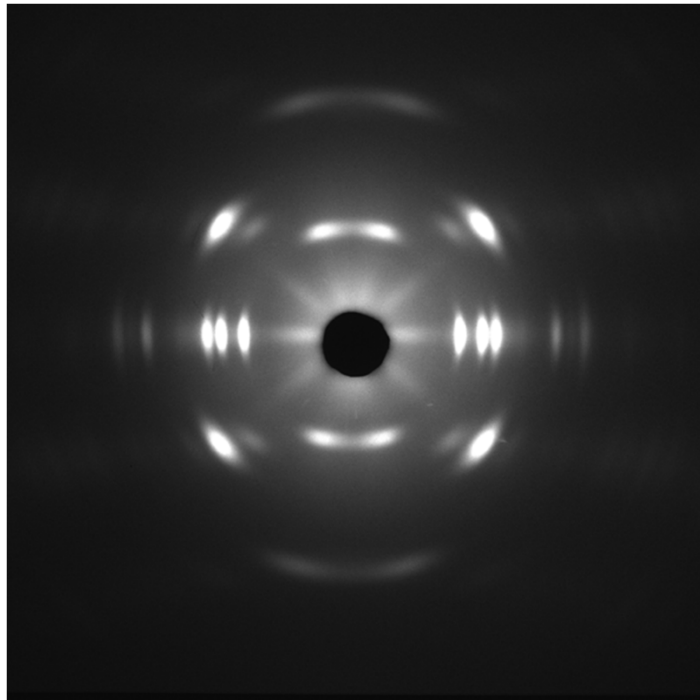


回折と散乱の概念の違い

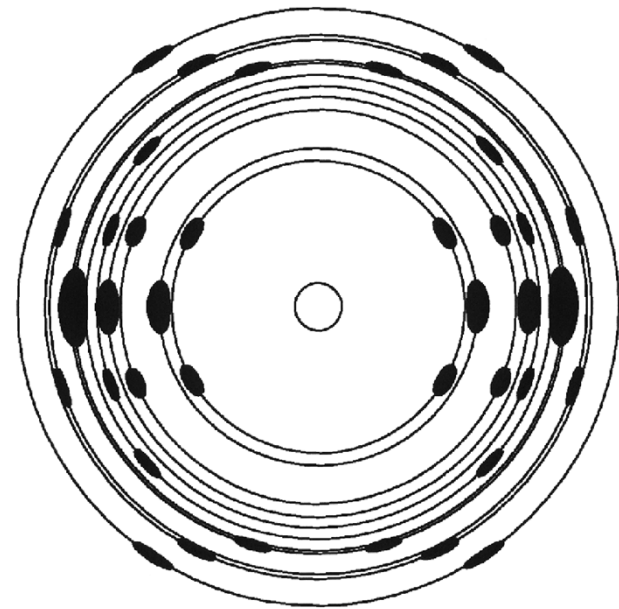
構造モデルと散乱像の関係



繊維の広角X線回折像

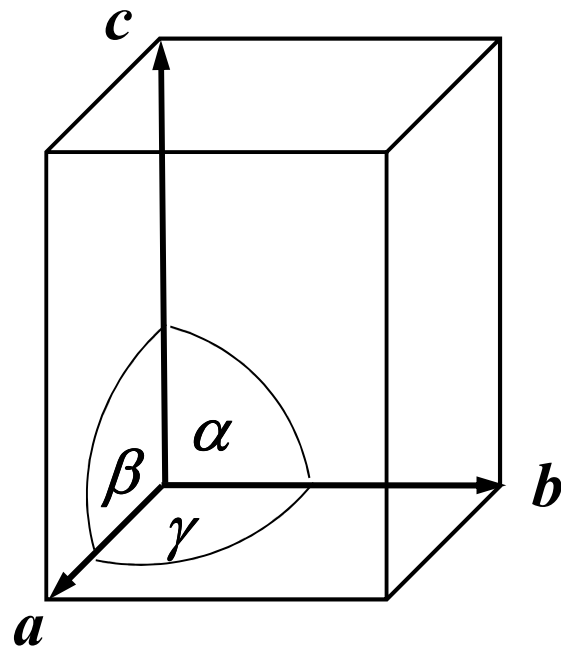


ポリプロピレン繊維



ポリエチレンテレフタレート繊維
(計算結果)

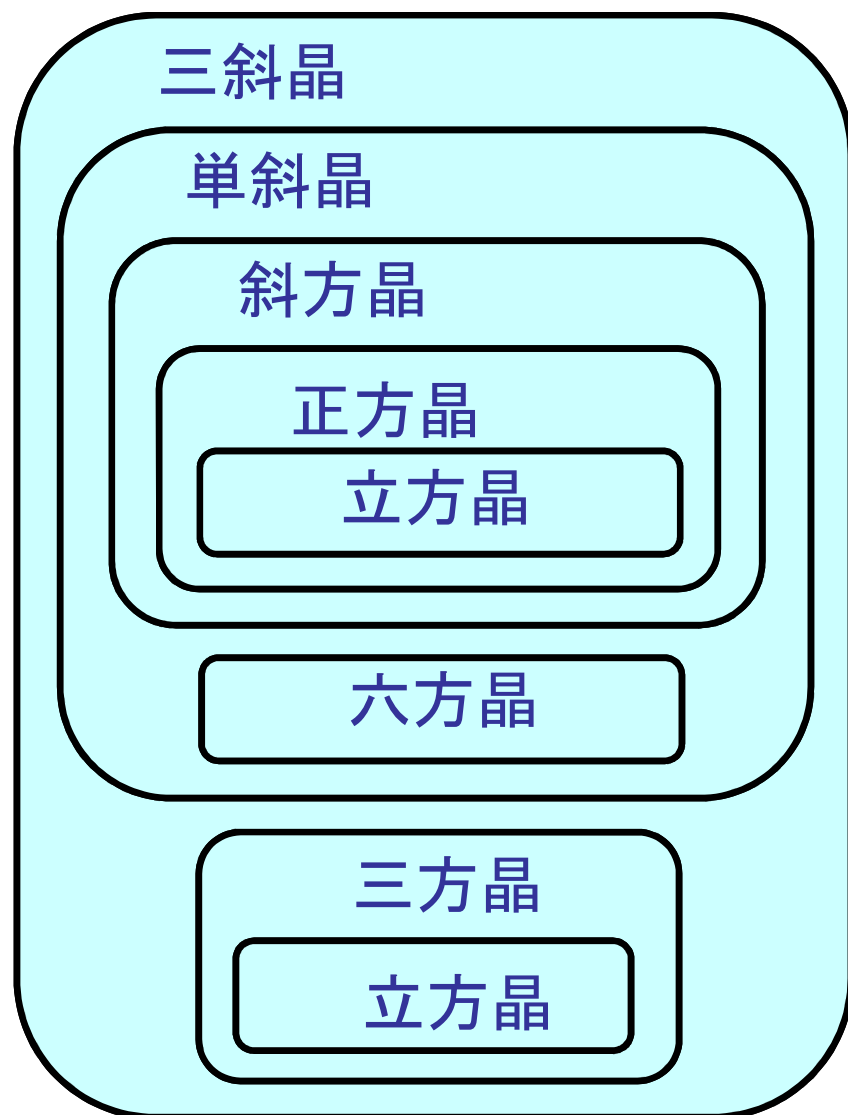
七つの晶系



結晶単位格子
パラメータ

晶系	軸長	軸角
立方晶	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
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	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$

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 $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ に対し逆ベクトル $\mathbf{a}^*$, $\mathbf{b}^*$, $\mathbf{c}^*$ は次式で定義される.

$$\mathbf{a}^* = \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{V}, \quad \mathbf{b}^* = \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{V}, \quad \mathbf{c}^* = \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{V} \quad \text{ここで体積 } V \text{ は} \quad V = \mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})$$

逆ベクトルの性質

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

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

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

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

任意のベクトル $\mathbf{A}$ 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 $\mathbf{i}$, $\mathbf{j}$, $\mathbf{k}$ について

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

面法線ベクトル $\mathbf{N}_{hkl}$ を次式で定義する

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

$\mathbf{N}_{hkl}$ 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.

$$\mathbf{N}_{hkl} \perp hkl \text{ 面},$$

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

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

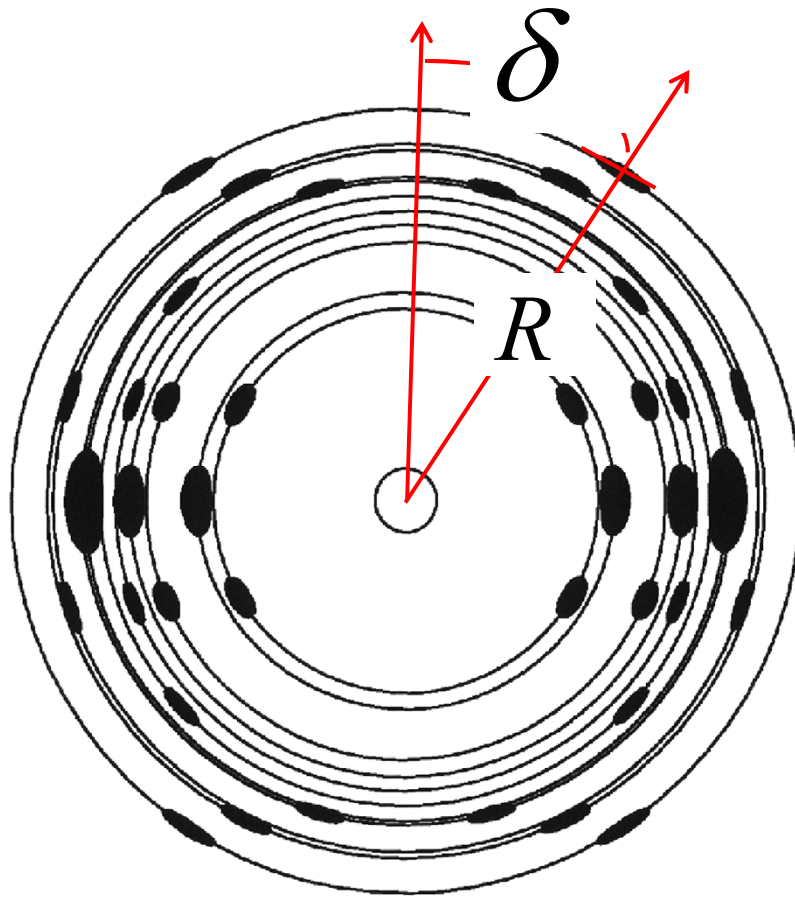
単位格子の体積

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

hkl 面の 面間隔 d_{hkl}

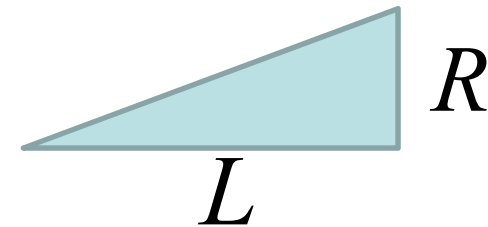
$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{\frac{h}{a} \begin{vmatrix} \frac{h}{a} & \cos \gamma & \cos \beta \\ \frac{k}{b} & 1 & \cos \alpha \\ \frac{l}{c} & \cos \alpha & 1 \end{vmatrix} + \frac{k}{b} \begin{vmatrix} 1 & \frac{h}{a} & \cos \beta \\ \cos \gamma & \frac{k}{b} & \cos \alpha \\ \cos \beta & \frac{l}{c}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

繊維の広角X線回折像



$$2d \sin \theta = \lambda$$

$$\frac{R}{L} = \tan 2\theta$$



$$\cos \varphi = \cos \theta \cos \delta$$

$$\cos \varphi = \frac{\ell}{c} d_{hkl}$$