

















名前	更新日時	種類	サイズ
 01 固体構造解析学 8223036 栗山淳.docx	2024/04/12 13:01	Microsoft Word 文書	40 KB
 02 固体構造解析学 8223036 栗山淳.docx	2024/04/19 12:33	Microsoft Word 文書	19 KB
 03 固体構造解析学 8223036 栗山淳.docx	2024/04/28 22:02	Microsoft Word 文書	20 KB
 04 固体構造解析学 8223036 栗山淳.docx	2024/05/10 12:08	Microsoft Word 文書	20 KB
 05 固体構造解析学 8223036 栗山淳.docx	2024/05/19 22:18	Microsoft Word 文書	19 KB
 06 固体構造解析学 8223036 栗山淳.docx	2024/05/26 20:01	Microsoft Word 文書	19 KB
 07 固体構造解析学 8223036 栗山淳.docx	2024/06/03 10:53	Microsoft Word 文書	20 KB
 08 固体構造解析学 8223036 栗山淳.docx	2024/06/10 8:56	Microsoft Word 文書	19 KB
 09 固体構造解析学 8223036 栗山淳.docx	2024/06/17 11:45	Microsoft Word 文書	19 KB
 10 固体構造解析学 8223036 栗山淳.docx	2024/06/22 10:35	Microsoft Word 文書	20 KB
 11 固体構造解析学 8223036 栗山淳.docx	2024/06/30 19:36	Microsoft Word 文書	19 KB
 12 固体構造解析学 8223036 栗山淳.docx	2024/07/07 7:58	Microsoft Word 文書	20 KB
 13 固体構造解析学 8223036 栗山淳.docx	2024/07/12 14:34	Microsoft Word 文書	18 KB
 14 固体構造解析学 8223036 栗山淳.docx	2024/07/19 13:07	Microsoft Word 文書	18 KB
 固体構造解析学 1回～14回復習レポート 822...	2024/07/21 15:35	Microsoft Word 文書	14 KB
 固体構造解析学 1回～14回復習レポート 822...	2024/07/21 15:35	Microsoft Edge PDF ...	38 KB

スカラー量とベクトル量

R を z 軸周り θ 回転

$r = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$ とすると

$$\begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \cos \theta + y \sin \theta \\ -x \sin \theta + y \cos \theta \\ z \end{bmatrix}$$

〈求め方〉

まず xy 平面上における $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ の回転について考えてみる

これらを θ だけ回転すると、

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \pi/2 \\ \sin \pi/2 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \cos(\pi/2 + \theta) \\ \sin(\pi/2 + \theta) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix}$$

であることを考え、 $R_\theta = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ に代入すると

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix},$$

すなわち、

$$\begin{pmatrix} a \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} b \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix}$$

であるから $R_\theta = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$ となるので

$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ を原点中心(z 軸周り)に θ だけ回転させた点は次のように表される

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \cos \theta + y \sin \theta \\ -x \sin \theta + y \cos \theta \end{pmatrix} \text{ となる}$$

外積 $\vec{a} \times \vec{b}$

$\vec{a} = \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix}, \vec{b} = \begin{pmatrix} b_x \\ b_y \\ b_z \end{pmatrix}$ と置き、 x, y, z 軸方向の単位ベクトルをそれぞれ $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ とおくと

$$\vec{a} \times \vec{b} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ a_x & a_y & a_z \\ b_x & b_y & b_z \end{vmatrix}$$

$$= (a_y b_z - a_z b_y) \vec{i} + (a_z b_x - a_x b_z) \vec{j} + (a_x b_y - a_y b_x) \vec{k} \text{ より}$$

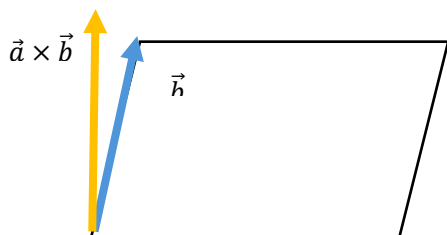
外積 $\vec{a} \times \vec{b}$ の成分表示は次のように表される

$$\begin{pmatrix} a_y b_z - a_z b_y \\ a_z b_x - a_x b_z \\ a_x b_y - a_y b_x \end{pmatrix}$$

また外積 $\vec{a} \times \vec{b}$ は θ を用いると次のようにも表せる

$$|\vec{a} \times \vec{b}| = |\vec{a}| |\vec{b}| \sin \theta \text{ これは下図に示す平行四辺形の面積と等しい}$$

外積 $\vec{a} \times \vec{b}$ を具体的な図で表すと次のようになる



波と数学的表現

波は三角関数や複素数を用いて表現される。基本的な波の形は正弦関数や余弦関数で記述され、複素数を使うと指数関数の形式で表現できる。

音波の例

音叉の振動によって生じる音波は、空気中を伝わる疎密波として表現される。変位波と密度波の数式を示すと以下のようになる。

$$d = d_0 \sin(\omega t - kx)$$

$$\rho = \rho_0 \cos(\omega t - kx)$$

ここで ω は各振動数、 k は角波数を表す。媒質の位置によって波の進行方向が決まる。

三角関数と複素数

三角関数はピタゴラスの定理に基づいており、複素数の実部と虚部に対応している。複素数 $z = A(\cos \theta + i \sin \theta)$ は波の振幅 A と偏角 θ で表される。この形式を使うことで、波の位相と進行を書くことができる。

複素数の極形式と指数関数

オイラーの公式($e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$)により、複素数は指数関数的に表される。これは波の式において重要な役割を果たし、波の進行は以下のように表すことができる。

$$z = Ae^{i(kx - \omega t)}$$

微分と積分

波の微分と積分は、三角関数や指数関数を使って簡単に行うことができる。複素数形式の波の微分は以下の通りに表すことができる。

$$\frac{dz}{dx} = ikz$$

$$\frac{dz}{dt} = -i\omega z$$

波の式はピタゴラスの定理から始まり、三角関数、複素数、オイラーの公式を経て波の表現をすることができる。この一連の公式などは物理的な波を正確に記述し、解析するための基盤となる。特に複素数の形式を用いることで、波の計算が効率的かつ直感的に行うことができる。

固体構造解析学 第 3 講

平面波・球面波・波の重ね合わせ

1. 平面波

平面波は空間の一定方向に進む波であり, 複素数を用いて以下のように表現される。ここで, 振幅 A , 波数 $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, 振動数 $\nu = \frac{1}{T}$, 位相 $(\omega t - kx)$ を示す。

- ・ 軸正の無機に進行する平面波

$$Ae^{i(2\pi\nu t - kx)} \quad \text{または} \quad Ae^{i(kx - \omega t)}$$

- ・ 軸負の無機の進行する平面波

$$Ae^{i(2\pi\nu t + kx)} \quad \text{または} \quad Ae^{i(-kx - \omega t)}$$

2. 3 次元空間の平面波

3 次元空間での平面波は次のように記述することができる。ここで \mathbf{r} は空間ベクトル, \mathbf{k} は波数ベクトルである。位相が一定の平面が波面となり, これは波数ベクトルに垂直です。

$$Ae^{i(2\pi\nu t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}$$

2. 球面波

球面波は波源中心から全方向に進行し, 振幅が距離 r に反比例する

$$\frac{A}{r} e^{i(2\pi\nu t - kr)}$$

ここで, 波源中心からの距離 r が増大すると球面波は平面波に近づく。

3. 波の重ね合わせ

複雑な波形は複数の正弦波や余弦波の重ね合わせで表現できる。この手法をフーリエ変換といい, 波を周波数ごとに分解することができる。

1. 波の重ね合わせ

- ・基本概念：複数の波源から発生した球面波が重なり合うと、干渉が生じる。
- ・単一フォトンによるヤングの干渉実験では、光が 2 つのスリットを通過する際に干渉縞が観察される

2. 位相空間の構造と観察

- ・波の記述：波は以下のように表現される。

$$\psi(r, t) = Ae^{i(2\pi(k \cdot r - vt))}$$

- ・空間の対応：実空間、波数空間、位相空間、エネルギーの対応があり、Fourier 変換でそれぞれが変換される。
- ・構造解析の目的：実空間で原子の位置 r を決定すること。

3. スリットによる回折

- ・スリット関数：開口幅 a のスリットを通過した波の振幅は、遠方の点 P で次のように与えられる。

$$\Phi(P) = \frac{\sin\left(2\pi a \sin\left(\frac{\gamma}{\lambda}\right)\right)}{2\pi a \sin\left(\frac{\gamma}{\lambda}\right)}$$

- ・回折像：観測される強度は、上記の式の 2 乗で表現される。

4. 回折格子

- ・回折格子の説明：回折格子は多くのスリットが規則的に並んだもので、各スリットの間隔を d とし、回折格子の関数は次のようになる。

$$q(x) = \begin{cases} 1 & jd \leq x \leq jd + a \\ 0 & \text{その他} \end{cases}$$

- ・波の振幅：点 P での波の振幅は以下の積分で与えられる。

$$\Phi(P) = \sum_{j=1}^M \int_{jd}^{jd+a} e^{ikx \sin \gamma} dx$$

- ・回折像：観測される強度は上記の式を 2 乗したもの。

結晶、液体、非晶質の構造とキルヒホッフの回折理論

結晶構造

結晶は規則正しい原子配列を持ち、概形の対称性によって分類される。結晶系は 7 種類あり、それぞれの結晶系に対して 14 種類のブラベー格子、32 種類の点群、230 種類の空間群が存在する。結晶の例としては、単純立方格子、ダイヤモンド構造、グラファイト構造、ガリウムナイトライドなどがある。

共有結合とイオン結合

結晶の結合方式には共有結合とイオン結合がある。共有結合の例としてダイヤモンドやグラファイトがあり、これらは炭素原子の sp^3 および sp^2 混成軌道による結合で特徴づけることができる。一方、食塩のような結晶はイオン結合によるものである。共有結合とイオン結合の両方を持つ結晶も存在し、これにより多様な物性が現れる。

液体と非晶質

液体と非晶質(アモルファス)構造では、原子の配列が規則的でないため、結晶とは異なる物性を示す。例えば、溶融状態の $CuBr$ のイオン分布は逆モンテカルロシミュレーションによってモデル化され、実験データから部分動径分布関数が算出される。非晶質の代表例としては、石英ガラスが挙げられる。

キルヒホッフの回折理論

キルヒホッフの回折理論は、光波が障害物の縁で解説する現象を説明する理論である。ホイヘンスの原理を基に、回折波の振幅を計算する。回折理論は、光学機器や材料の微細構造解析において重要な役割を果たす。特に、光の波長と障害物の寸法の関係が回折パターンに影響を与えるため、高精度な解析が求められる。

結晶の対称性や原子配列の規則性が物性に与える影響を理解することは、材料科学や固体物理の基礎を学ぶ上で重要である。

対称操作と対称要素

対称操作：ある操作を行い、元の形に重なる場合、その操作を対称操作と呼ぶ。

対称軸：物体をある角度回転させても元の形と一致する軸。

対称面：物体をこの面で鏡に映した場合、元の形と一致する面。

回映軸：回転と鏡映を組み合わせた軸。

対称心：物体の各点を中心に反転させた場合、元の形と一致する点。

点群と結晶対称

点群：不動点の周りの対称操作を組み合わせたもの。結晶の対称性を分類する際に用いる。全体で 32 種類存在する。

空間投影：結晶の対称性を表す手法として、球面投影やステレオ投影を使用する。

- ・球面投影：結晶の中心に半径 1 の球を置き、結晶面を法線で表す。
- ・ステレオ投影：球面投影を平面に図示する方法。北半球の点と南極点を結ぶ直線が赤道面と交わる点を示す。

対称要素の記号と符合

対称要素は Hermann-Mauguin 記号や Schoenflies 記号で表され、特殊符号も用いられる。

主要な点群

1. 回反心のみを持つ点群: 例えば、図 10 のステレオ投影。
2. n 回軸と 2 回軸が直交する点群: 例えば、点群 222 や 422 。
3. n 回軸に垂直な対称面を持つ点群: 例えば、点群 $3/m$ 。
4. n 回軸に平行な対称面を持つ点群: 例えば、点群 $3m$ 。
5. 複数の対称軸や対称面を持つ点群: 例えば、点群 mmm や点群 432 。

行列と行列式

物質の構造における対称性は、3 次元空間における変換として 3×3 の行列で表される。行列から逆行列を求める方法は以下の通りである。

- ・行列式：置換に関する和を取る。
- ・逆行列：行列の要素から求める。

映進面

鏡映と平行移動の組み合わせで、特定の距離だけ移動する操作。

- ・ a 映進面: a 軸方向に $1/2$ 周期移動。
- ・ c 映進面: c 軸方向に $1/2$ 周期移動。

格子の基本概念

- ・ 格子とは、格子点の周期的な集合である。3 次元の格子は 14 種類のブラベー格子に分類される。
- ・ 結晶構造は、ブラベー格子の格子点に基底を置いたものである。基底は原子や分子の単位構造を指す。

格子の分類

1. 三斜格子

- ・ 対称心のみを持ち、 $a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma$

2. 単斜格子

- ・ 2 回軸を 1 本持ち、 $a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta > 90^\circ$

3. 直方格子

- ・ 3 本の 2 回軸が直交し、 $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

4. 正方格子

- ・ 1 本の 4 回軸とそれに垂直な 2 回軸を持ち、 $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

5. 菱面体格子と六方格子

- ・ それぞれ 3 回回反軸や 6 回軸を持つ。六方格子は 120° の γ 角を持ち、 $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$

菱面体格子の場合は $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$

6. 立方格子

- ・ 3 本の 4 回軸が直交し、 $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

逆格子

- ・ 逆格子は、格子ベクトルの集合で、実空間の格子の逆数の次元を持つ。基本ベクトル a_1, a_2, a_3 に対し、逆格子の基本ベクトルは b_1, b_2, b_3 である。

幾何学的諸量の公式

- ・ 単位格子の体積や面間隔、Bragg 反射の公式が含まれる。
- ・ 単位格子の体積：

$$V = a \cdot (b \times c)$$

- ・ 面間隔(d)：

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

- ・ Bragg 反射：

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

(θ は Bragg 角, λ は波長)

結晶構造

- ・結晶構造は，空間格子と単位構造から構成される。固体では，原子や分子が 3 次元的に規則正しく配列される。
- ・並進対称：結晶内の任意の 2 点の周囲の原子配列が同じ場合，これらの点を結ぶベクトル(並進ベクトル)によって定義される。

- ・並進ベクトル

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} + n_3 \mathbf{c}$$

(ここで n_1, n_2, n_3 は任意の整数， $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ は基本並進ベクトル)

空間格子と単位胞

- ・空間格子は純粋に幾何学的な概念であり，各点に単位構造を配置すると結晶構造となる。
- ・単純単位胞：格子点の対称性を最もよく表す基本並進ベクトルによって定義される平行六面体。

空間群

・14 種類のブラベー格子に 32 種類の点群及び並進を含む対称要素を組み合わせることで 230 種類の空間群が存在する

回折条件

- ・結晶による回折条件は，結晶中の原子間距離が波長と同程度またはそれ以下の場合に顕著に現れる。
- ・ラウエ条件：入射波と散乱波の波数ベクトルが基本並進ベクトルと整数倍の関係にあるときに成立する。
- ・ブラッグ条件：格子面からの反射による回折条件。面間隔 d と入射角 θ との関係式 $2d \sin \theta = n\lambda$ で表される。
- ・回折の光路差：

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

(θ は入射角， λ は波長， n は整数)

- ・ド・ブローイ波長：

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

(h はプランク定数， p は運動量)

逆空間における回折条件の表現

- ・ 散乱ベクトル： $\Delta K = k - k_0$
- ・ 逆格子ベクトル： G_{hkl}
- ・ Bragg 反射の条件：散乱ベクトルと逆格子ベクトルが等しい時，強い回折波が生じる。
- ・ 回折条件： $2d_{hkl}\sin\theta = \lambda$
- ・ 面間隔： $d_{hkl} = \frac{1}{G_{hkl}^*}$

エバルドの作図

- ・ 要素：入射波数ベクトル k_0 ，回折波数ベクトル k ，波長 λ ，回折角 2θ ，Bragg 角 θ
- ・ エバルド球：半径 $\frac{1}{\lambda}$ ，中心 T
- ・ 逆格子：原点 O^* ，逆格子点 G
- ・ 関係式： $k_0 + G_{hkl} = k$

格子と逆格子

- ・ 逆格子点の配置： h, k, l に対応する逆格子点の位置を示す。
- ・ 逆格子の構造：逆格子は元の格子の空間周波数を表し，エバルド球との交点で回折条件が満たされる。

回折実験の流れ

- ・ 結晶構造解析：
- ・ 入射 X 線が原子面で散乱し，回折角 2θ を測定。
- ・ 測定データから面間隔 d_{hkl} を算出。
- ・ 格子定数 a, b, c を決定し，単位胞内の原子配置を解析。

原子散乱因子とは

- ・原子からの散乱波に関する理論で、特に X 線回折に焦点を当てている。
- ・原子散乱因子は、電子密度の分布に基づいて、原子核周りの電子による散乱波の振幅を計算するものである。

Thomaon 散乱

- ・1 個の自由な電子が真空中にあり、X 線が入射すると電子は強制振動し、入射波と同じ振動数の波が発生する。
- ・この散乱波の強度は、入射波の電界による電子の振動によって決まる。

原子散乱因子の計算

1. 電子数密度分布：原子内の電子は原子核周りに数密度 $\rho(x)$ で分布している。
2. 電子の散乱強度：1 個の電子の散乱強度 I_e は $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2}$ に比例する。
3. 位相差：散乱波の位相差は $\delta = \frac{2\pi}{\lambda} \mathbf{s} \cdot \mathbf{r}$ で計算される。
4. 散乱振幅：n 番目の電子の散乱振幅 q_n は $\int \rho_n(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}$ で求める。
5. 原子全体の散乱振幅：原子内の全電子からの散乱振幅を合計し、原子散乱因子 f は $\sum q_n$ で表される。

まとめ

- ・原子散乱因子は、X 線回折における重要なパラメータであり、原子内の電子の分布に依存する。
- ・散乱波の振幅と位相差を考慮することで、原子全体の散乱特性を理解できる。

結晶からの X 線回折と Laue 関数

- ・ 散乱波の強度：散乱波の強度 I は以下の式で表される。

$$I = I_0 C \left| \int \rho(\mathbf{r}) e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \right|^2$$

ここで、 I_0 は入射波強度、 C は散乱断面積に比例する定数、 \mathbf{k} は散乱ベクトルである。

- ・ Fourier 変換： $\rho(\mathbf{r})$ の Fourier 変換 $G(S)$ は次のように定義される。

$$G(S) = \int \rho(\mathbf{r}) e^{2\pi i \mathbf{S} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

結晶の電子密度分布と単位胞

- ・ 電子密度分布：結晶全体の電子密度分布 $\rho_{c_{ry}}(\mathbf{r})$ は、次のように X 線散乱波の振幅 $G(S)$ を与える。

$$G(S) = \int \rho_{c_{ry}}(\mathbf{r}) e^{2\pi i \mathbf{S} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

- ・ 単位胞からの散乱：単位胞の電子密度分布を $\rho_{UC}(\mathbf{r}')$ とし、並進対称性を考慮すると、次の式が得られる。

$$\rho_{UC}(\mathbf{r}') = \rho_{UC}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_{n_1 n_2 n_3})$$

ここで、 $\mathbf{R}_{n_1 n_2 n_3}$ は並進ベクトル。

Laue 関数と結晶構造因子

- ・ 結晶構造因子：結晶構造因子 $F(S)$ は以下のよう定義される。

$$F(S) = \int \rho_{UC}(\mathbf{r}) e^{2\pi i \mathbf{S} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

- ・ Laue 関数：Laue 関数 $L(S)$ は次のよう定義される。

$$L(S) = \sum_{n_1=0}^{N_1-1} \sum_{n_2=0}^{N_2-1} \sum_{n_3=0}^{N_3-1} e^{2\pi i (n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3) \cdot \mathbf{S}}$$

ここで、 a_1, a_2, a_3 は基本並進ベクトル。

- ・ X 線散乱波の強度：散乱波の強度は次のように表される。

$$I(\mathbf{S}) = I_0 C |G(\mathbf{S})|^2 = I_0 C |F(\mathbf{S}) \cdot L(\mathbf{S})|^2$$

1. 結晶構造因子の基本式

結晶構造因子 $F(hkl)$ は、単位胞内の各原子の位置座標と原子散乱因子を用いて計算される。

$$F(hkl) = \sum_j f_j \exp [2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)]$$

ここで、 f_j は原子散乱因子、 x_j, y_j, z_j は単位胞内の原子座標である。

2. 単純立方格子

- ・原子座標：(0,0,0)
- ・結晶構造因子： $F(hkl) = f$
- ・すべての h, k, l に対して構造因子は同じ値を持つ。

3. 面心立方格子

- ・原子座標：(0,0,0), (1/2,1/2,0), (1/2,0,1/2), (0,1/2,1/2)
- ・消滅則： h, k, l がすべて奇数またはすべて偶数のときに $F(hkl)$ は非零。混合の場合は消滅。

4. 体心立方格子

- ・原子座標：(0, 0, 0), (1/2,1/2,1/2)
- ・消滅則： $h + k + l$ が偶数のときに $F(hkl)$ は非零。奇数の場合は消滅。

5. 食塩型格子

- ・原子 A の座標：(0,0,0), (1/2,1/2,0), (1/2,0,1/2), (0,1/2,1/2)
- ・原子 B の座標：(1/2,0,0), (0,1/2,0), (0,0,1/2), (1/2,1/2,1/2)
- ・消滅則: NaCl 構造では、A および B 原子の寄与が重なるため、特定の条件下で消滅則が適用される。

まとめ

結晶構造因子とその消滅則は、結晶の対称性と原子の配置に強く依存している。これらの原理を理解することで、X 線回折データの解析や材料の特性評価が可能となる。

1. X 線回折とは

X 線の発生: 電界をかけて加速した電子を金属ターゲットに衝突させて X 線を発生させる方法。入射電子の非弾性散乱による連続 X 線と、電子のエネルギー遷移による特性 X 線がある。

特性 X 線: Cu ターゲットの場合、 $K\alpha$ 線の波長は 0.154173 nm である。

2. 実験室レベルの X 線発生

- ・方法: 強制水冷した金属ターゲットに電子を衝突させて発生。非弾性散乱で連続 X 線、電子のエネルギー遷移で特性 X 線が発生。
- ・特性 X 線の種類: L 殻から K 殻への遷移は $K\alpha$ 線、M 殻から K 殻への遷移は $K\beta$ 線。

3. X 線回折装置

- ・構造: X 線管球、カウンター、ディフラクトメータ円、スリットなどで構成。
- ・スキャン方法: 2θ スキャンで X 線の回折条件を設定し、結晶面の情報を取得。

4. 放射光施設

- ・例: KEK-PF、Spring-8、ESRF、APS などが挙げられる。
- ・用途: 高エネルギー加速器を用いて高輝度の X 線を発生させ、構造解析に利用する。

5. 実験配置と逆空間の回折条件

- ・回折条件の設定: 逆空間における回折条件を設定し、結晶構造を解析する。 $2\theta - \theta$ スキャンで詳細なデータを取得。

6. キャノンサイエンスラボの放射光

- ・光の放射: 円軌道で運動する電子から放射される電磁波の角度分布を解析し、非相対論的および相対論的分布を研究。

空間と時間の認識

- ・4次元プロジェクト「みたか」では、宇宙の広さや大きさを実感するための動画が紹介されています。
- ・James Webb Space Telescope による観測で、過去の宇宙を「今」見えています。
- ・宇宙の歴史として、45 億年前の地球誕生から現代までの進化が描かれています。

人間の認識と進化

- ・ゲノム解析: ヒトとチンパンジーの違いに注目し、特に大脳皮質のしわ形成に関与する HAR1 領域について言及。
- ・歴史的進化: 20 万年前のミトコンドリア・イブから、1 万年前の農業革命、5000 年前の都市革命、2400 年前の宗教・哲学革命、300 年前の産業革命へと続く進化の過程が説明されています。

見る・視る・観るの違い

- ・見る: 目に見えていること。
- ・視る: 意図をもって見ること。
- ・観る: 全体像を捉えて見ること。
- ・聞く・訊く・聴く: 耳に聞こえることから、尋ねること、理解して応えることへ。
- ・思う・想う・念う: 単に思い浮かべることから、大切に思うこと、実現を強く願うことへ。

科学的観察方法

- ・感性と科学的思考: 感性は科学的な方法と論理的な思考によって補完されます。
- ・時空と逆空間: 時空間の認識が逆空間とリンクしています。

具体的な観察技術

- ・顕微鏡観察: 光学顕微鏡、電子顕微鏡、分析電子顕微鏡など、さまざまな方法が紹介されています。
- ・分光分析: X 線回折、紫外可視近赤外分光、ラマン分光、光電子分光などの技術が用いられています。

芸術と視点

- ・モネと印象派: 光量子や複数の視点による表現。
- ・キュビズム: パブロ・ピカソの作品を通じて、異なる視点からの観察が示されています。

科学的手法の重要性

- ・専門用語の必要性: 科学的思考と伝達には共通の言葉（専門用語）が必要。
- ・偏った見方の価値: 科学を究めるためには、多くの視点から物事を見ることが重要である。