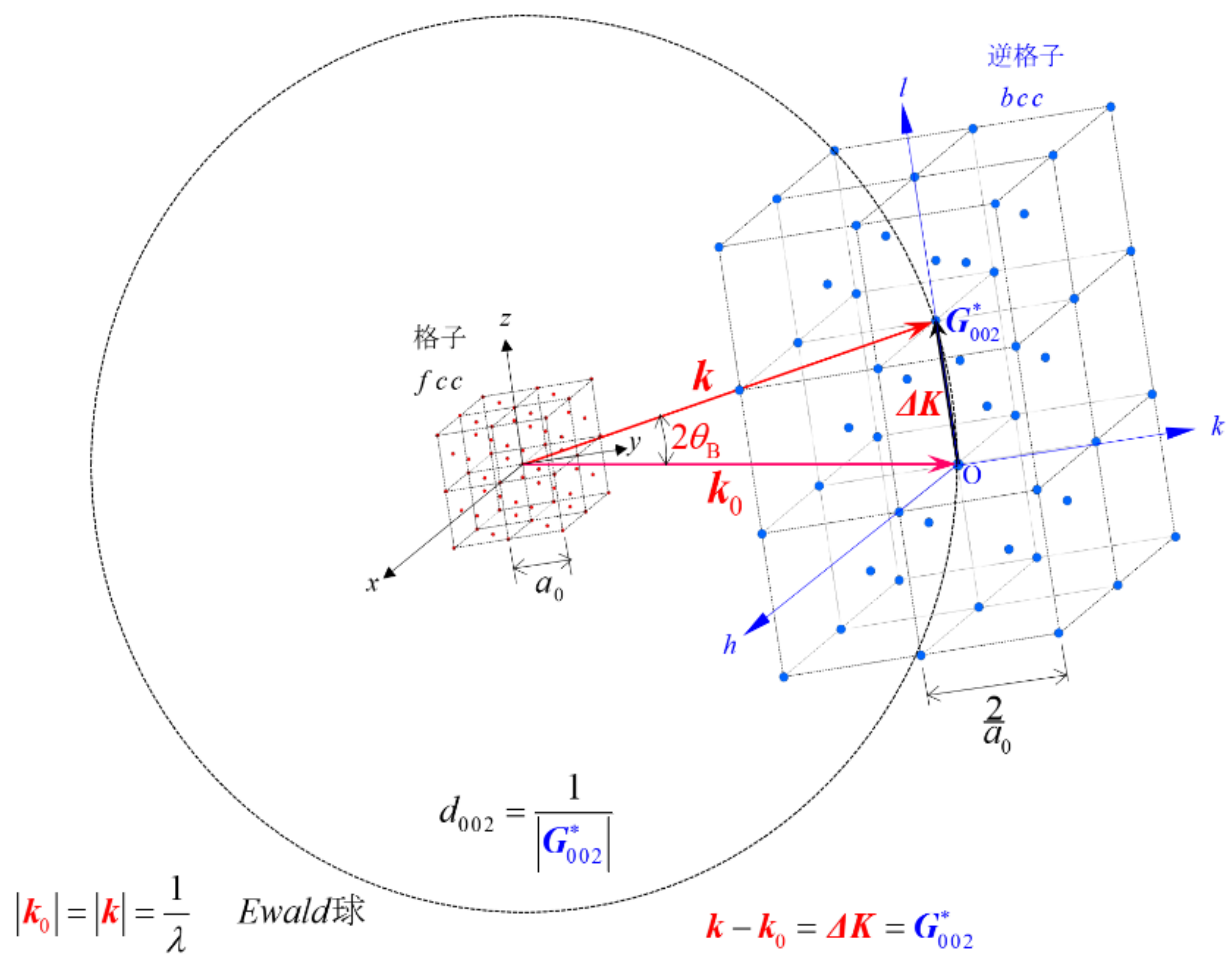


## § § X線回折



## § 実験室レベルの X 線発生

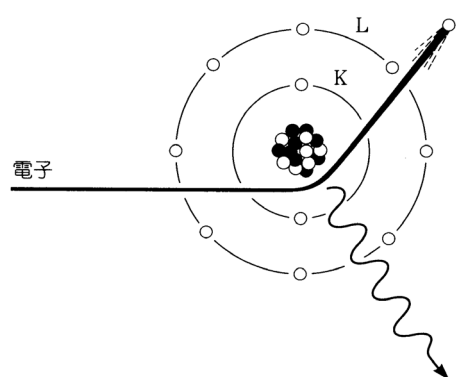
通常の実験室では、X 線は電界をかけて加速した電子を強制水冷した金属ターゲットに衝突させて発生させる。

入射した電子が、原子核近傍で軌道を変える加速度運動する場合は非弾性散乱となり**連続 X 線**が発生する。

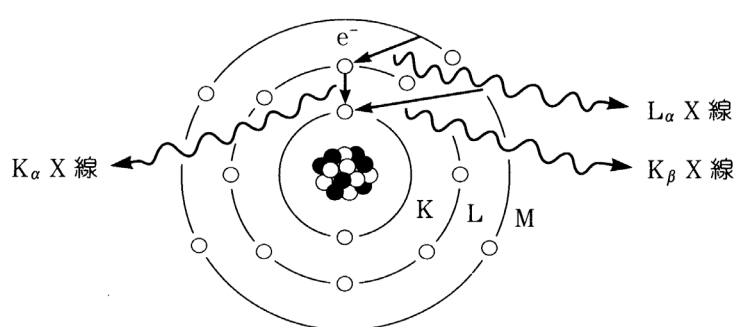
別に、入射電子のエネルギーを受けて、原子核に束縛されていた電子が励起し、空席となった電子状態により高い束縛電子が遷移することにより、**特性 X 線**が発生する。

特性 X 線は内殻電子のエネルギー準位間の遷移によるため、決まった波長となる。 $L$  殻から  $K$  核への遷移を  $K\alpha$  線、 $M$  殻から  $K$  核への遷移を  $K\beta$  線と呼ぶ。

たとえば、 $Cu$  ターゲットの  $K\alpha$  線は波長  $\lambda_{K\alpha_1} = 0.154050 \text{ nm}$ 、 $\lambda_{K\alpha_2} = 0.154434 \text{ nm}$ 、これらの相対強度の重み 2:1 で加重平均を取ると、 $\lambda_{K\alpha} = 0.154173 \text{ nm}$  である。



連続 X 線（制動放射）



特性 X 線

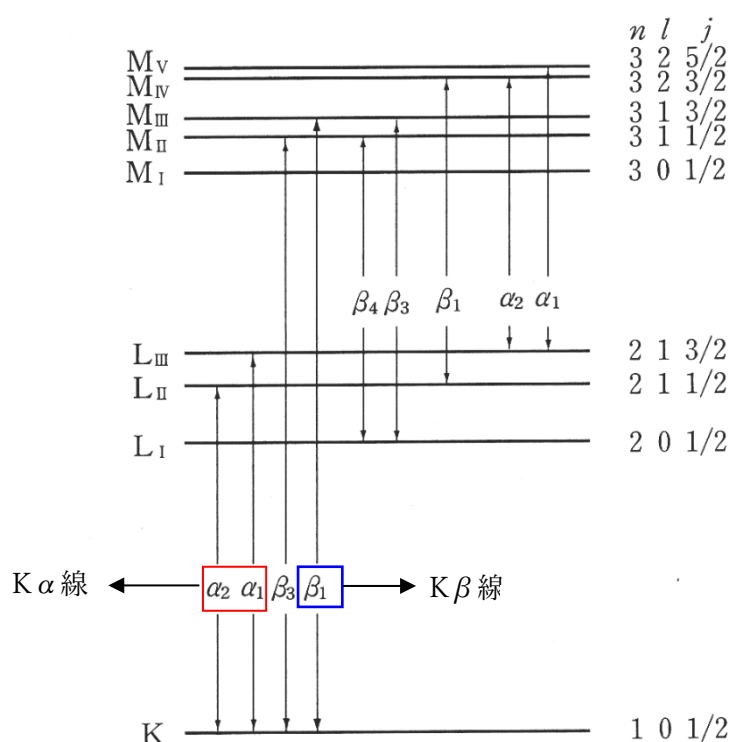
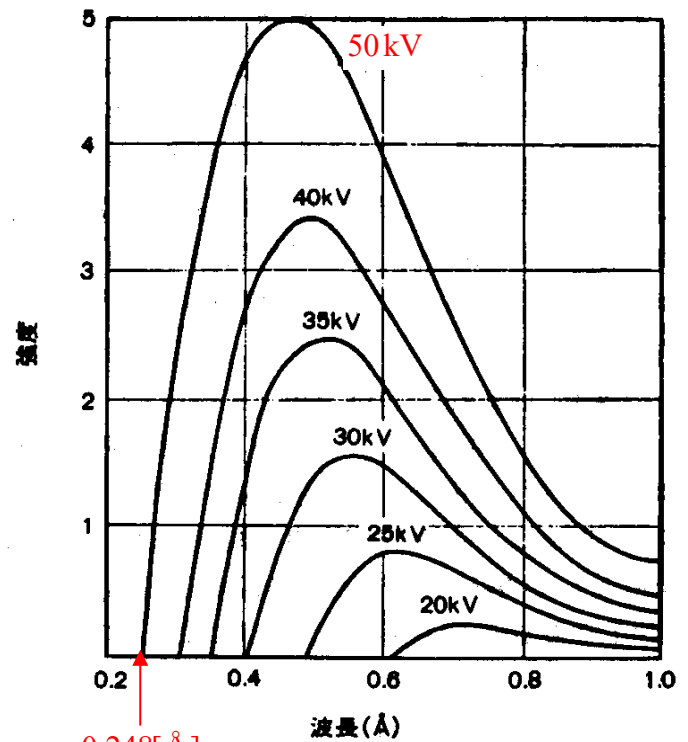
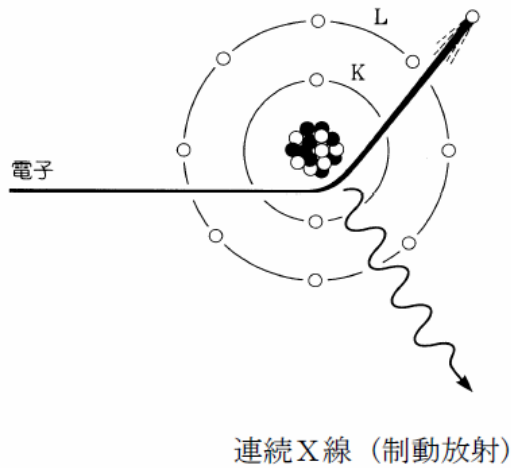
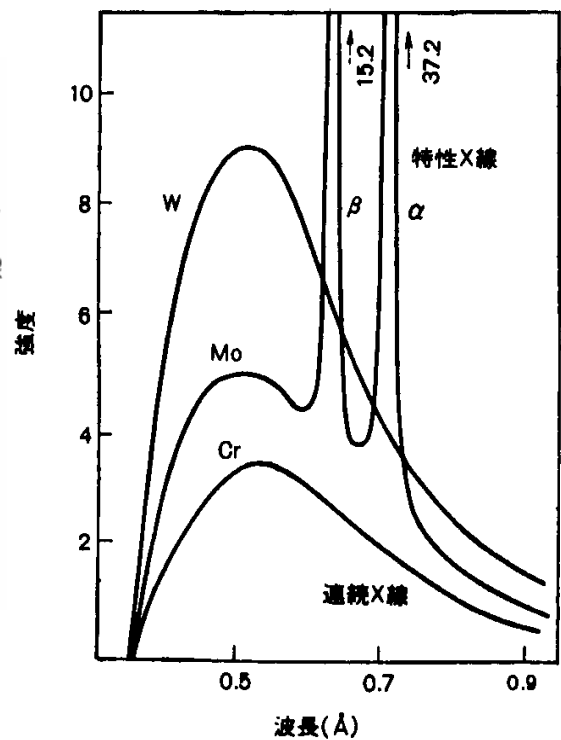
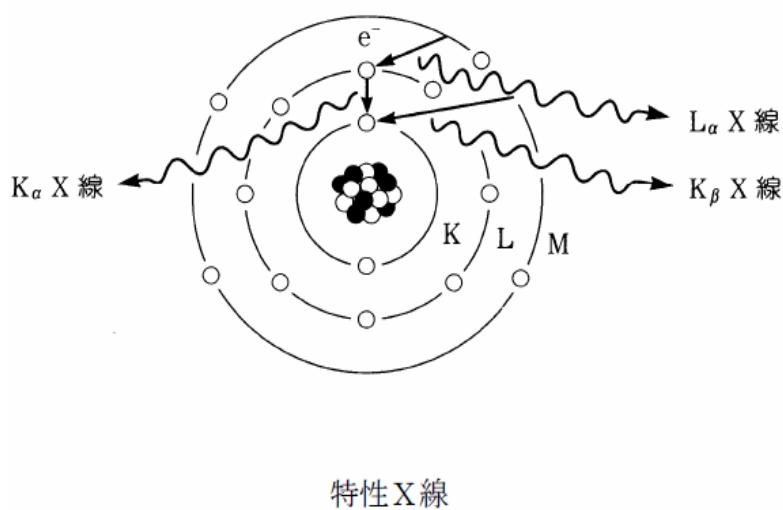


図 1.4 各種特性 X 線とエネルギー準位との関係(模式図)

$$\lambda[\text{m}] = \frac{hc}{eV} = \frac{6.62607 \times 10^{-34} [\text{J} \cdot \text{s}] \times 2.99792 \times 10^8 [\text{m/s}]}{1.60217662 \times 10^{-19} [\text{C}] \times V [\text{Volt}]}, \quad \lambda[\text{\AA}] = \frac{12.3984}{V_k [\text{kV}]}, \quad \lambda[\text{nm}] = \frac{1239.84}{\varepsilon [\text{eV}]} \quad (60)$$



電圧とX線スペクトル  
(ターゲット タングステン)



X線スペクトル

表 1.1 構造研究に利用される代表的な特性 X 線の波長。

元素	$K\alpha$ (加重平均)*	$K\alpha_2$ 強い	$K\alpha_1$ 非常に強い	$K\beta_1$ 弱い
Cr	2.29100	2.293606	2.28970	2.08487
Fe	1.937355	1.939980	1.936042	1.75661
Co	1.790260	1.792850	1.788965	1.62079
Cu	1.541838	1.544390	1.540562	1.392218
Mo	0.710730	0.713590	0.709300	0.632288

\*  $K\alpha_1$  は  $K\alpha_2$  の 2 倍の重みをつけ、 $K\alpha_2$  と平均した。

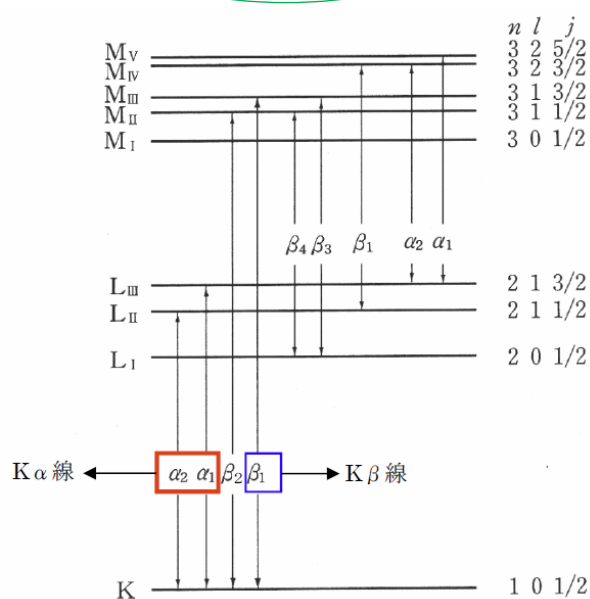
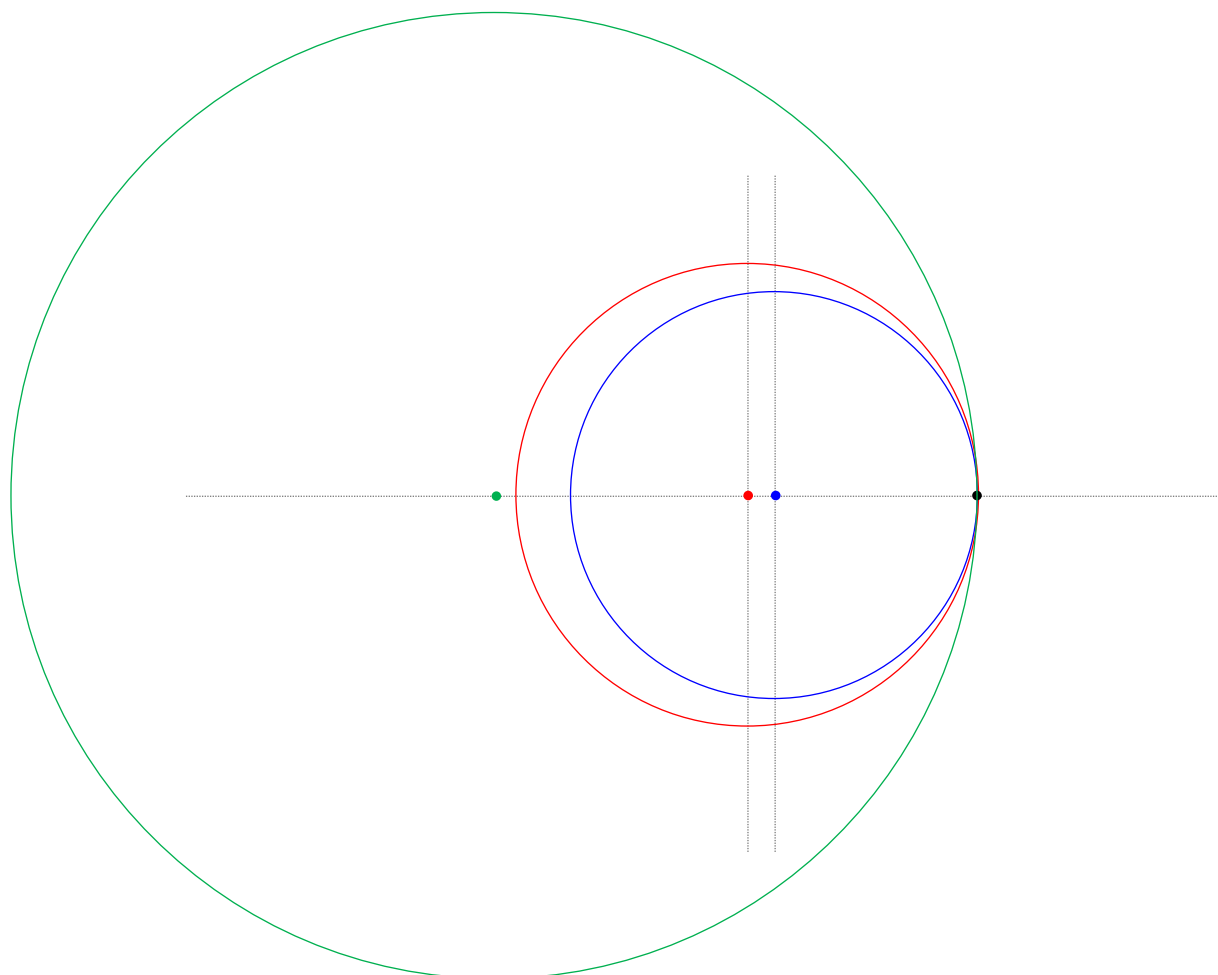
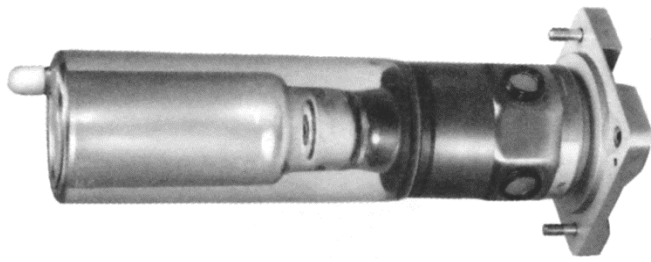
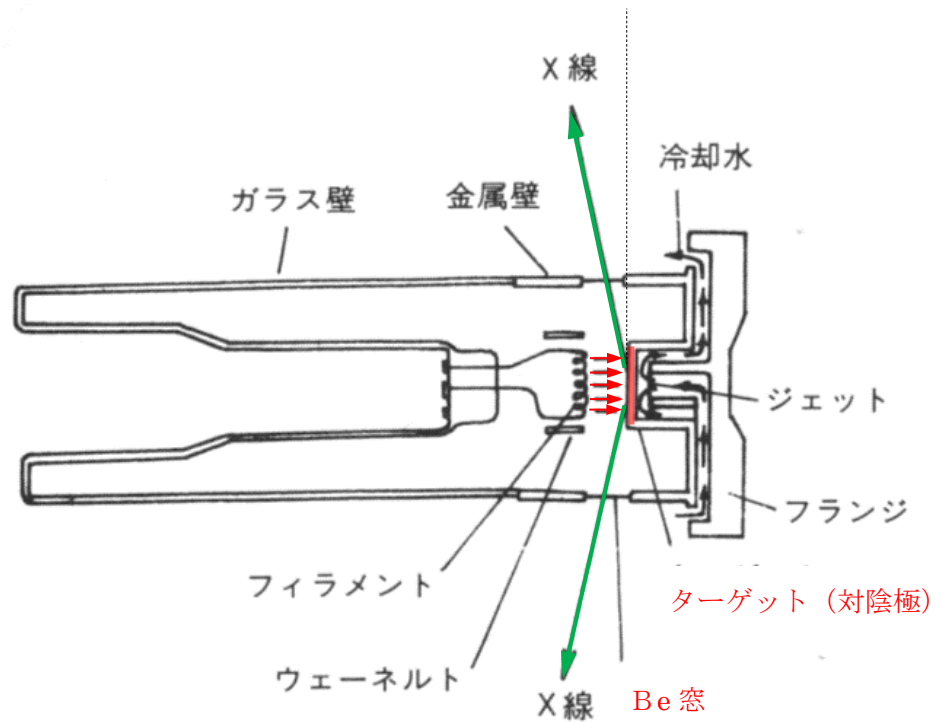


図 1.4 各種特性 X 線とエネルギー準位との関係 (模式図)



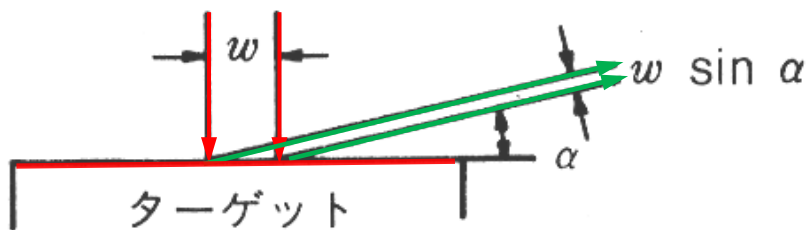
← 封入型 X 線管球

(a) 外観



(b) 断面概略図

X 線の取り出し角



1 mm × 10 mm の X 線発生源  
を  $\alpha = 6^\circ$  の方向から見ると



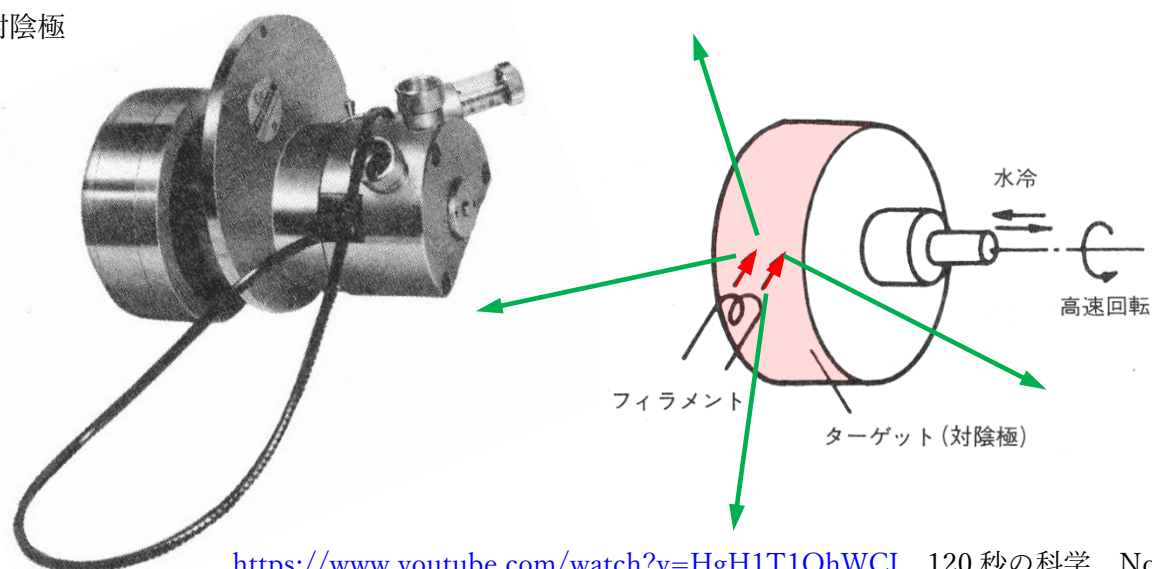
1 mm × 1 mm → ポイントフォーカス



0. 1 mm × 10 mm → ラインフォーカス



回転対陰極



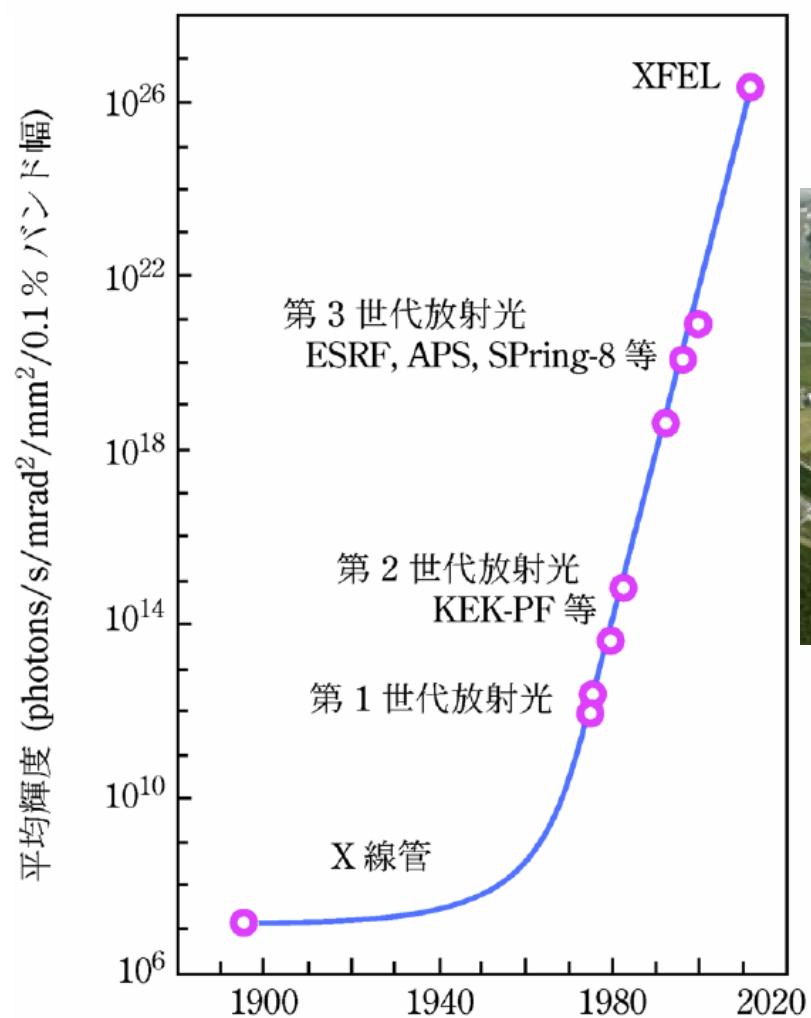
<https://www.youtube.com/watch?v=HgH1T1OhWCI>

120 秒の科学 No.49 磁性流体

<https://www.youtube.com/watch?v=4ytnVKb0jIo>

不思議な動き 磁性流体

## § 放射光



Spring-8

KEK-PF(高エネルギー加速器機構 フォトンファクトリー)

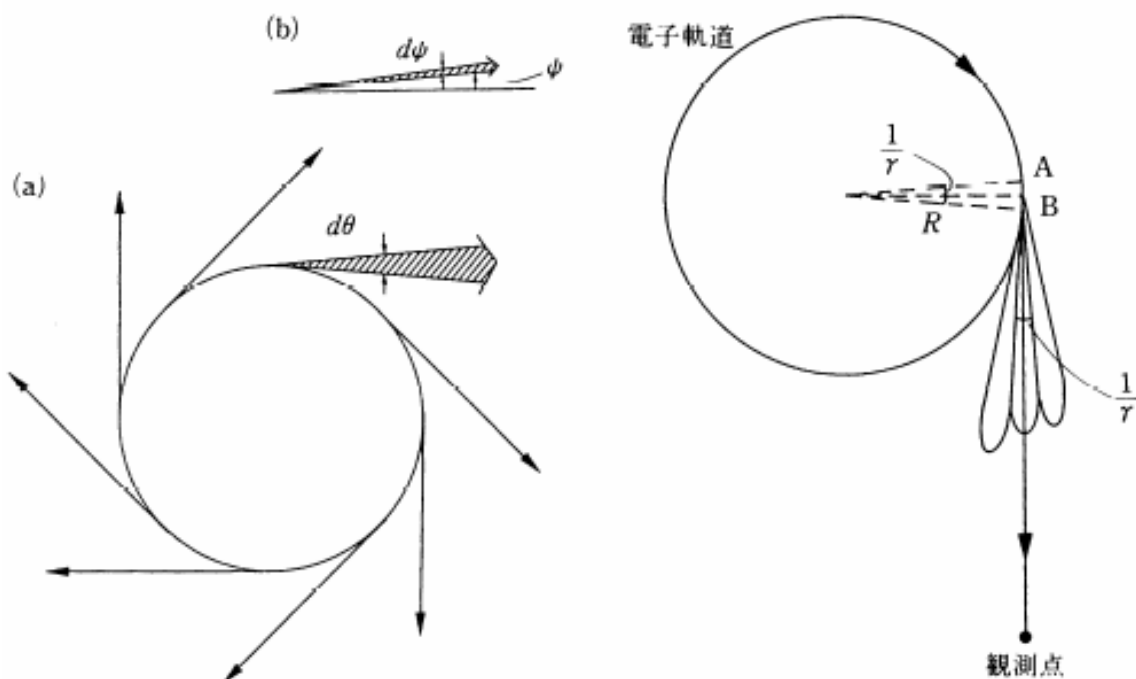
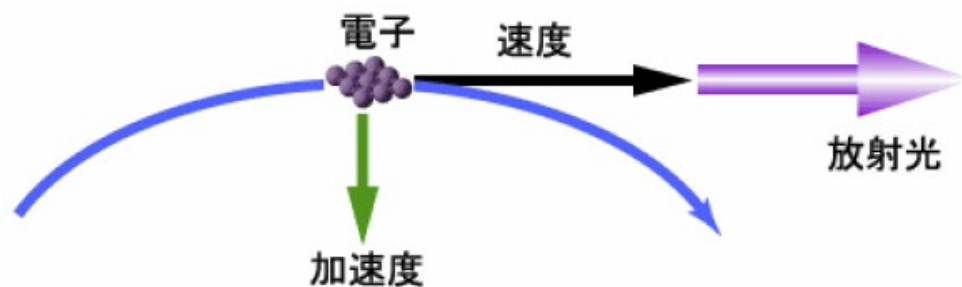
SPring-8(8GeV, 1436m)

ESRF (European Synchrotron Radiation Facility 仏 グルノーブル)(6GeV, 844m)

APS(Advanced photon Source 米アルゴンヌ)(7GeV, 1104m)

キャノンサイエンスラボ 放射光 (電荷の加速度運動により光の衣を脱ぎ捨てる)

[https://global.canon/ja/technology/s\\_labo/light/004/02.html](https://global.canon/ja/technology/s_labo/light/004/02.html)



例えば円軌道

電子軌道

加速度  
ベクトル

90°

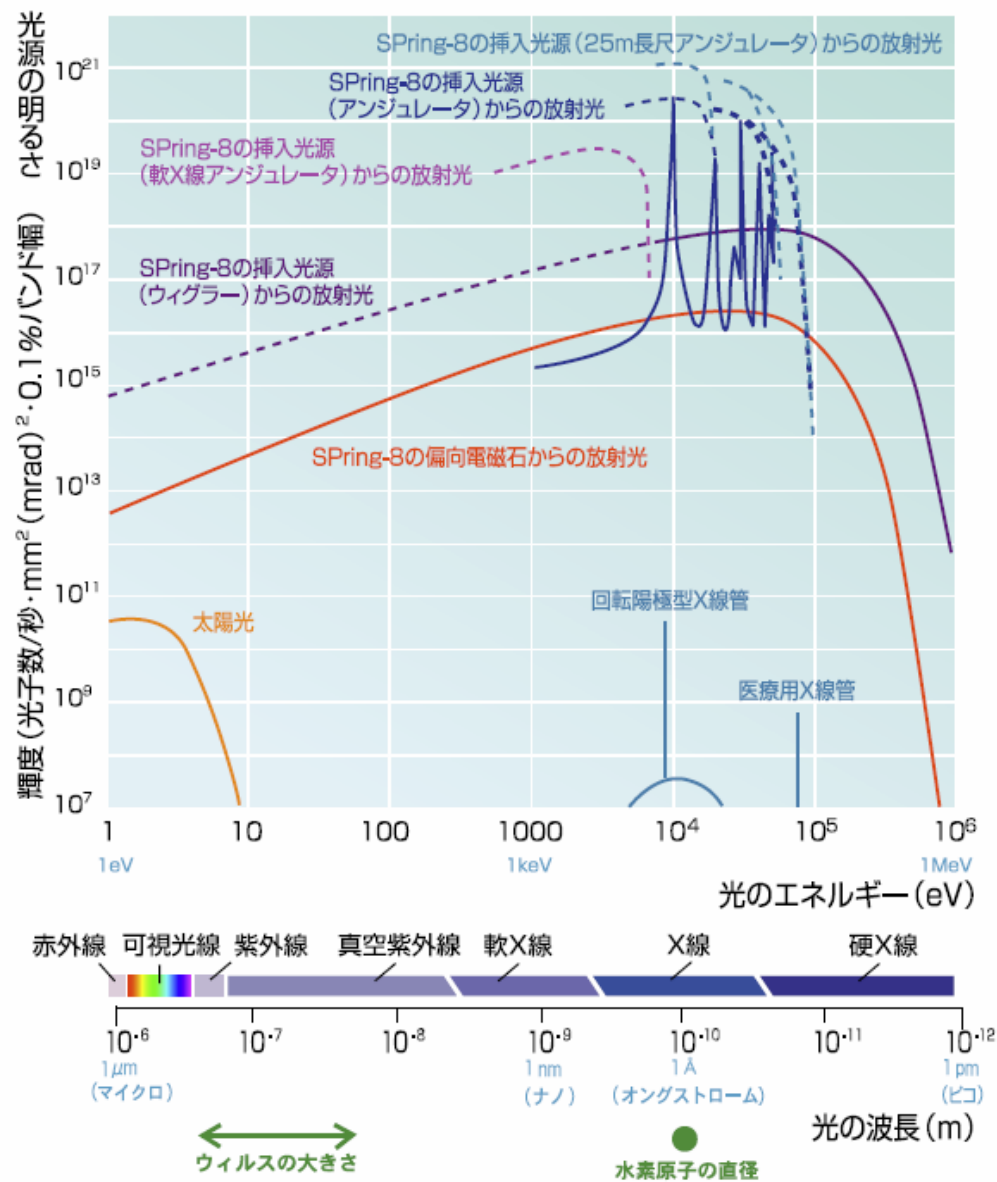
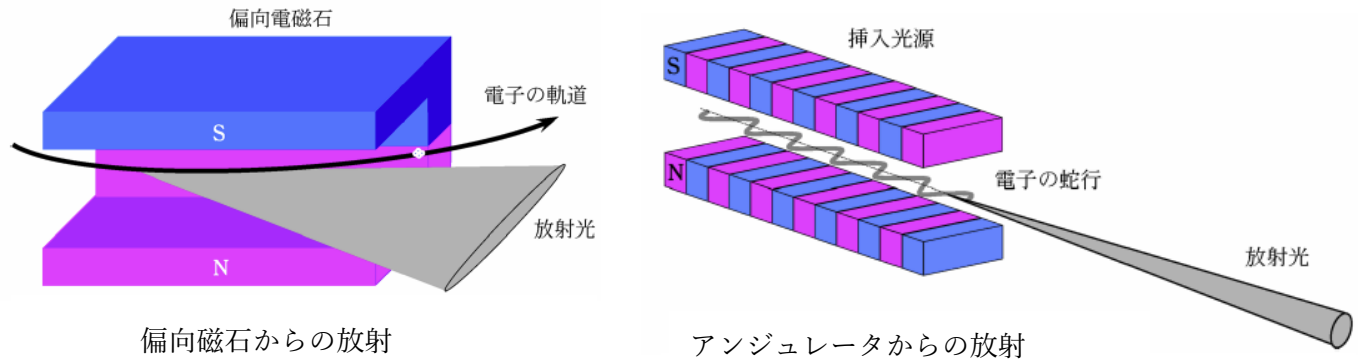
電子軌道

加速度  
ベクトル

$\frac{1}{r}$

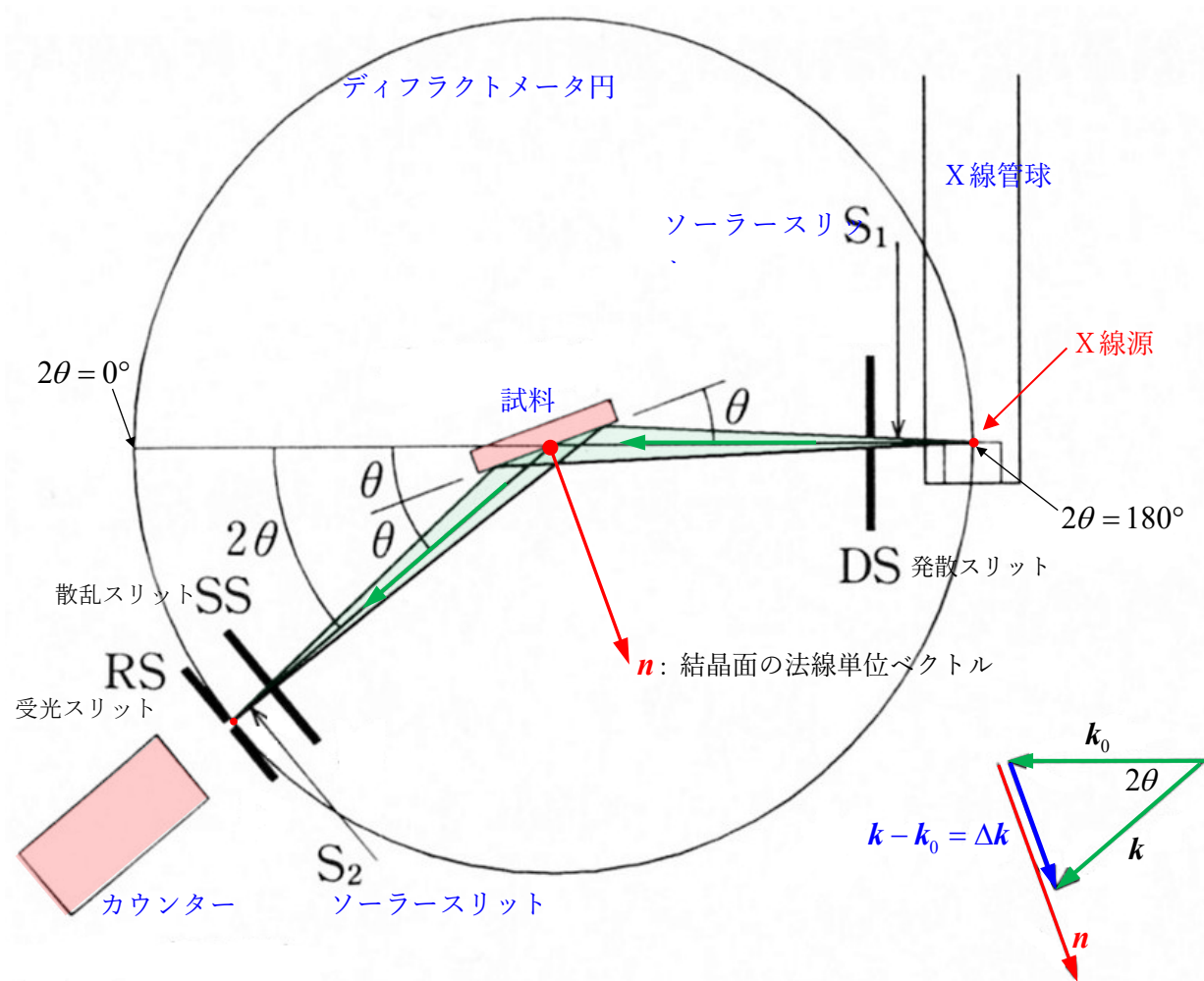
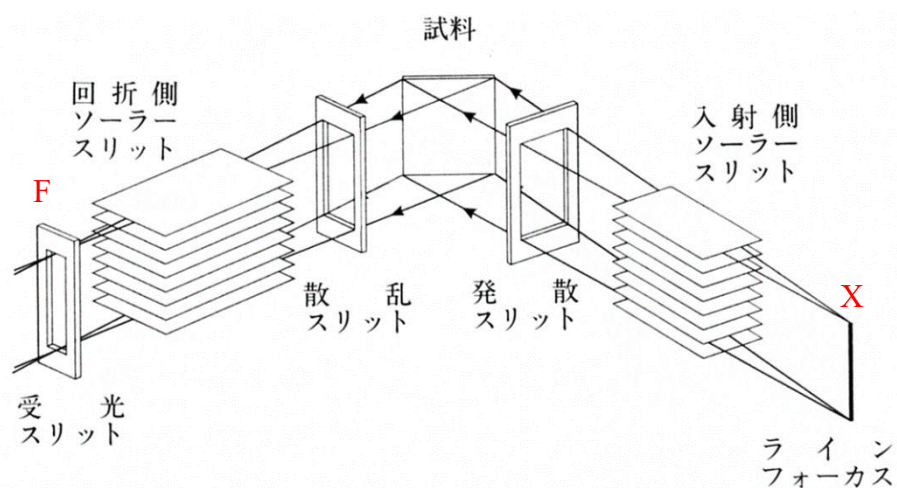
円軌道で運動する電子から放射される電磁波強度角度分布

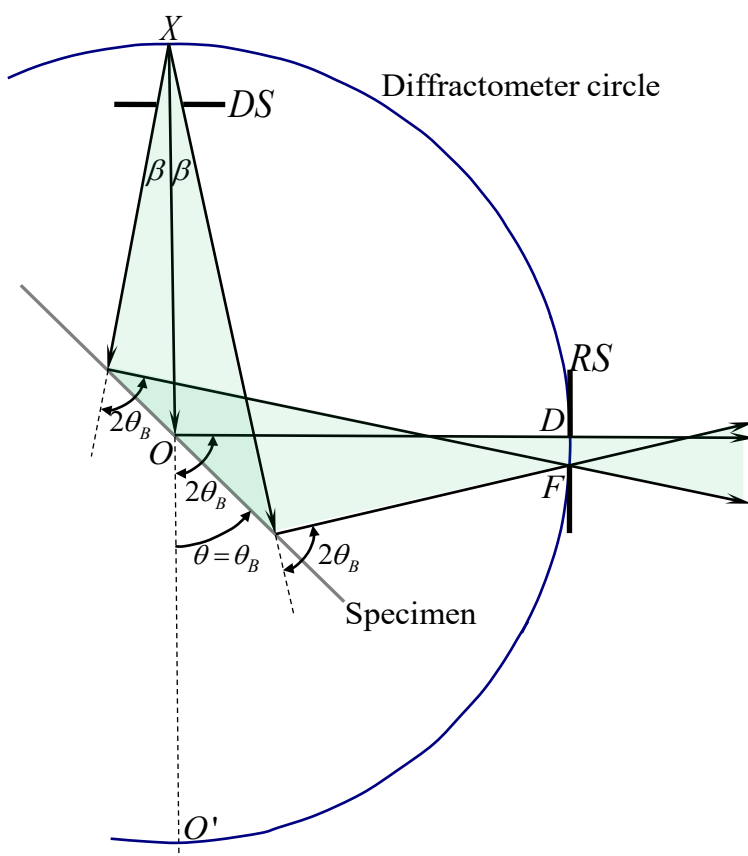
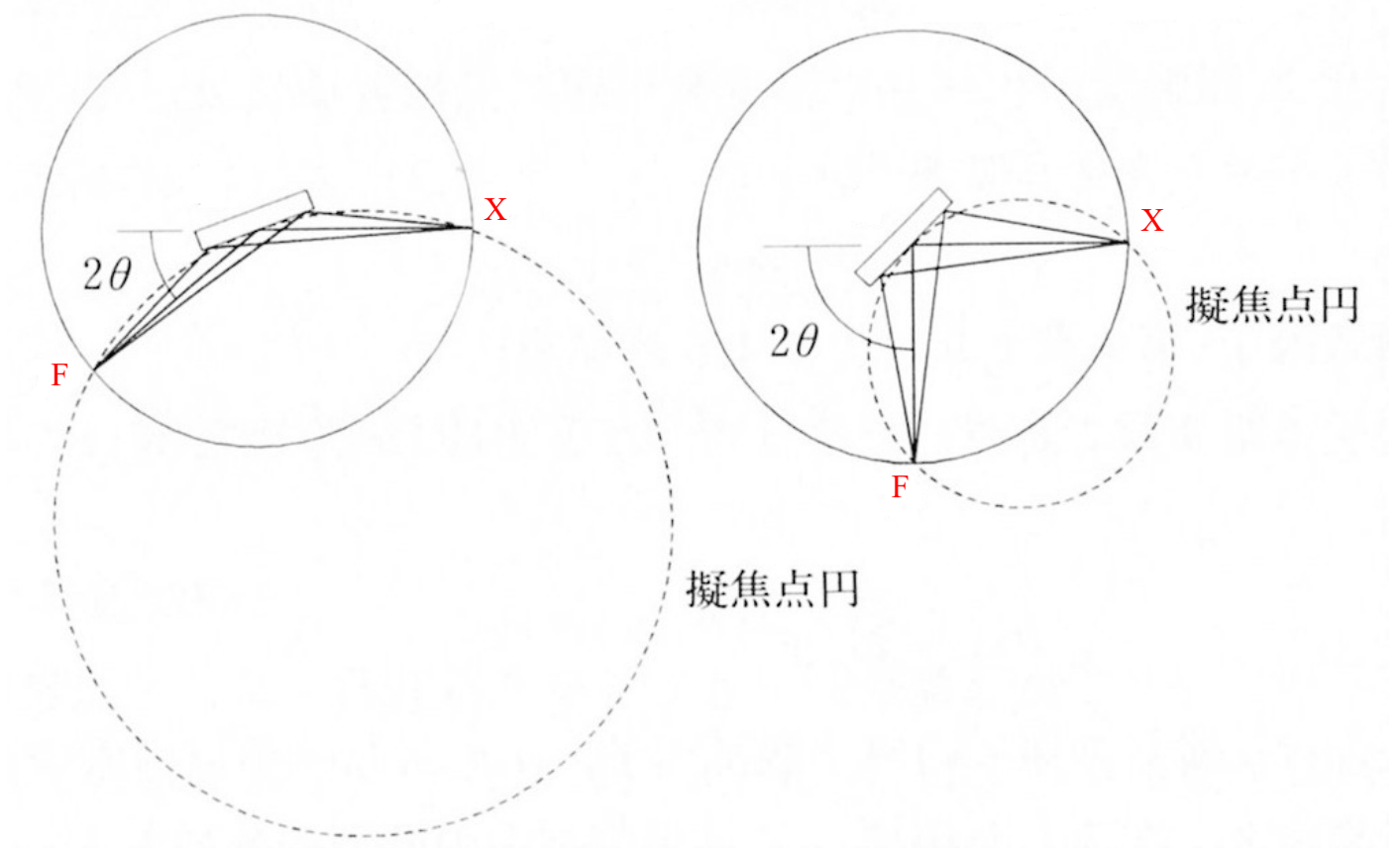
左：非相対論的、右：相対論的分布

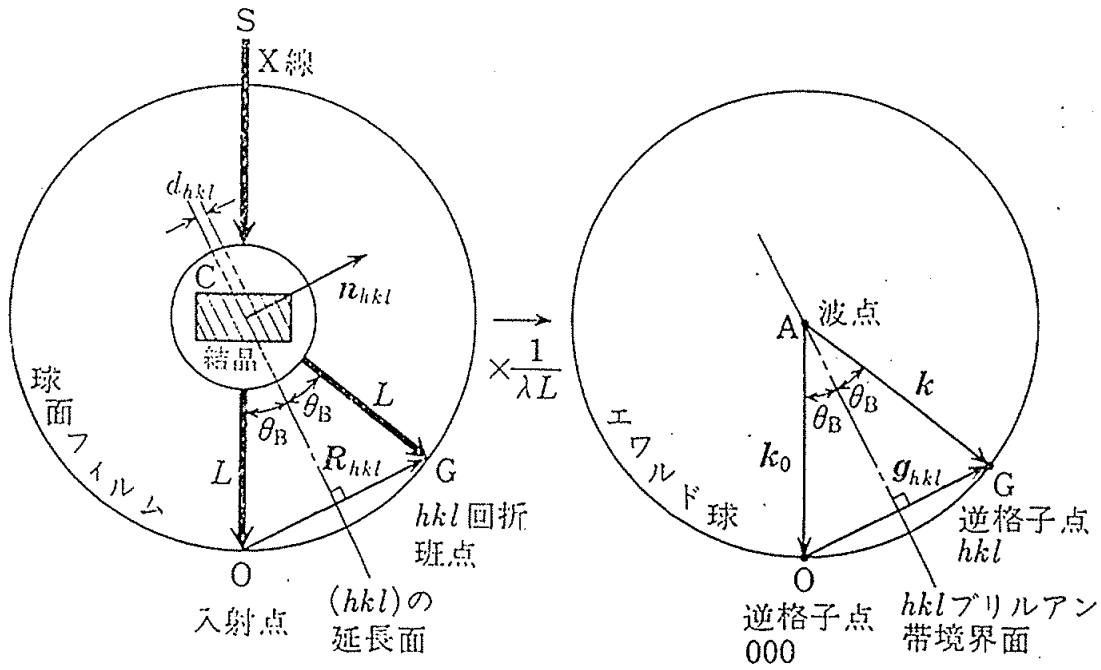




## § ディフракトメータの幾何学 {集中法}

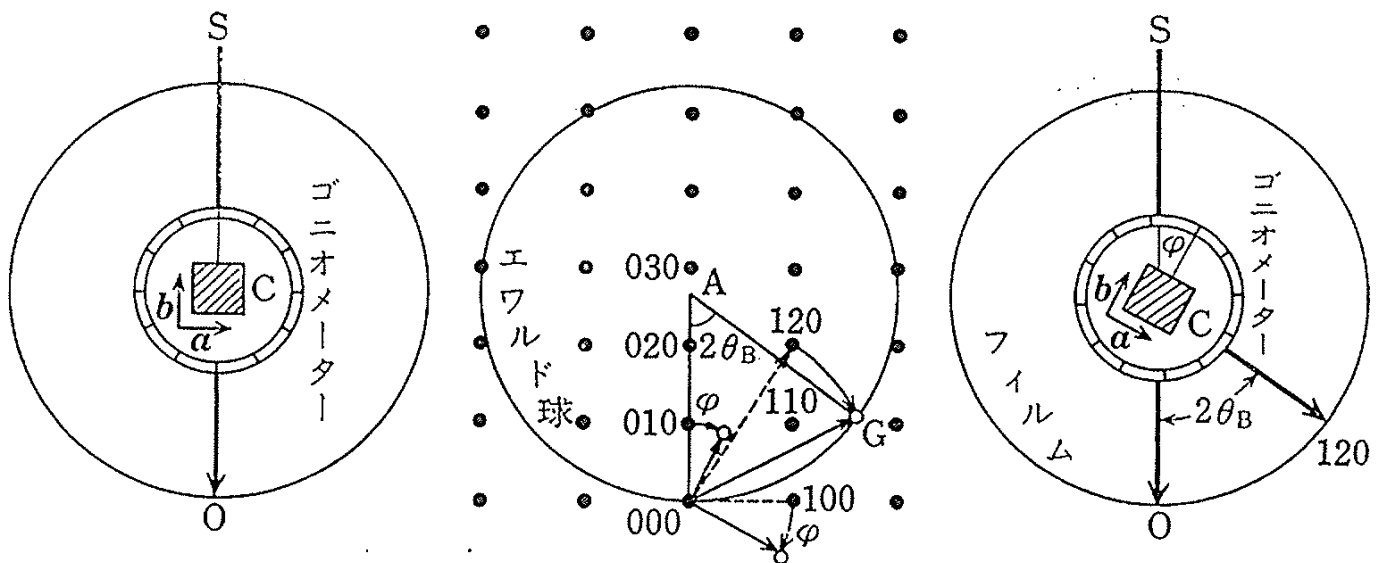
 $\theta$ - $2\theta$  スキャン

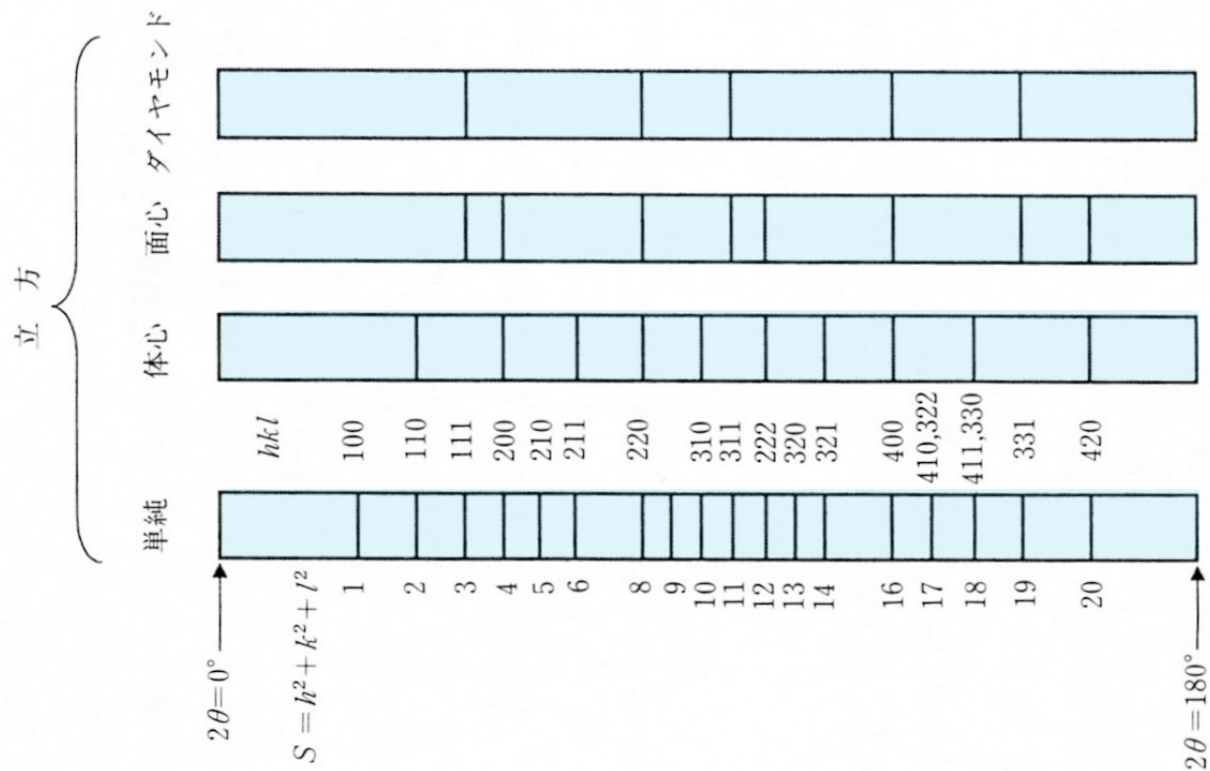
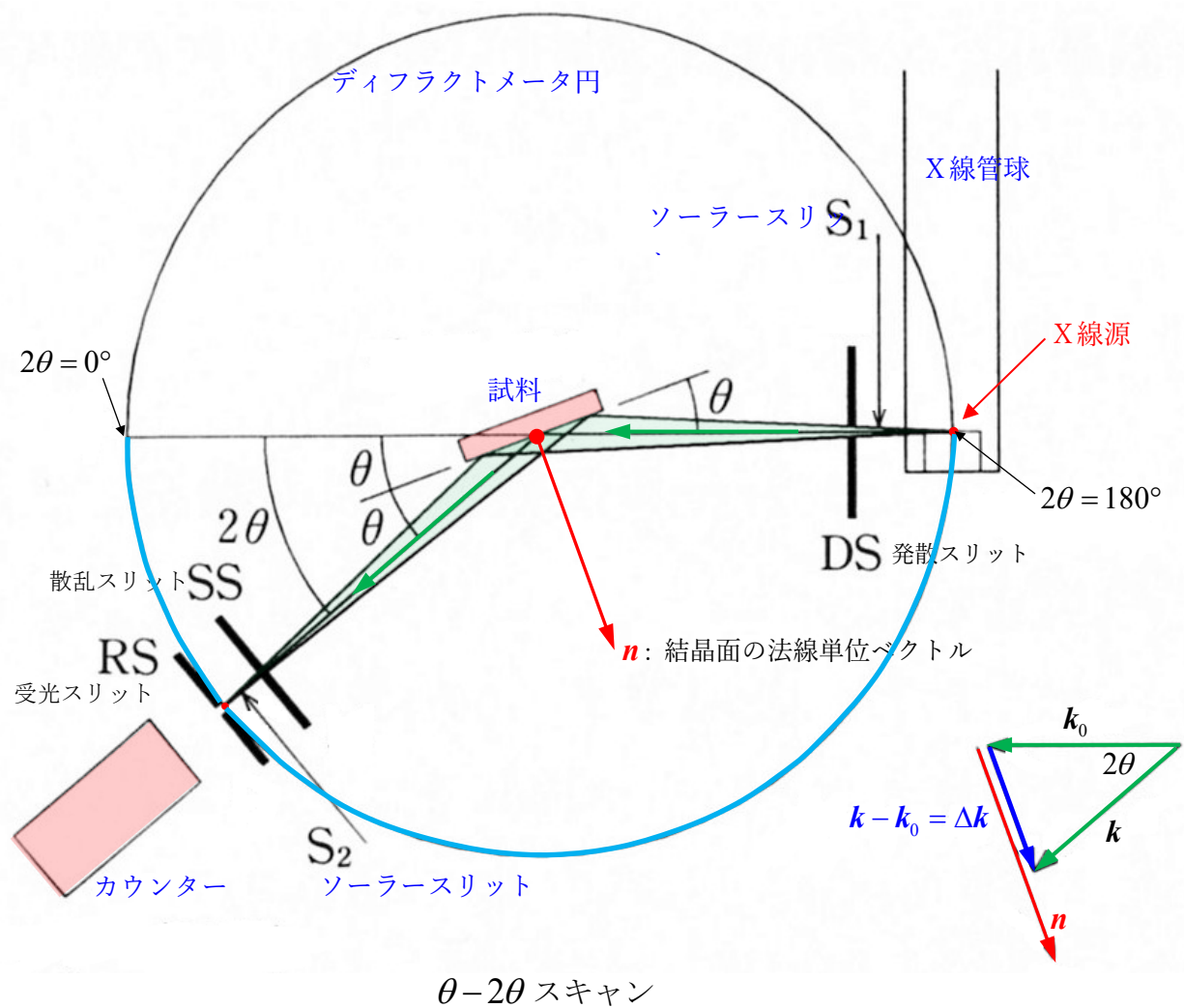




## 実験配置

## 逆空間における回折条件





立方晶 格子定数=3.50 Å, CuKα線の場合

## § ディフラクトメータによる測定例 (酸化マグネシウムの例)

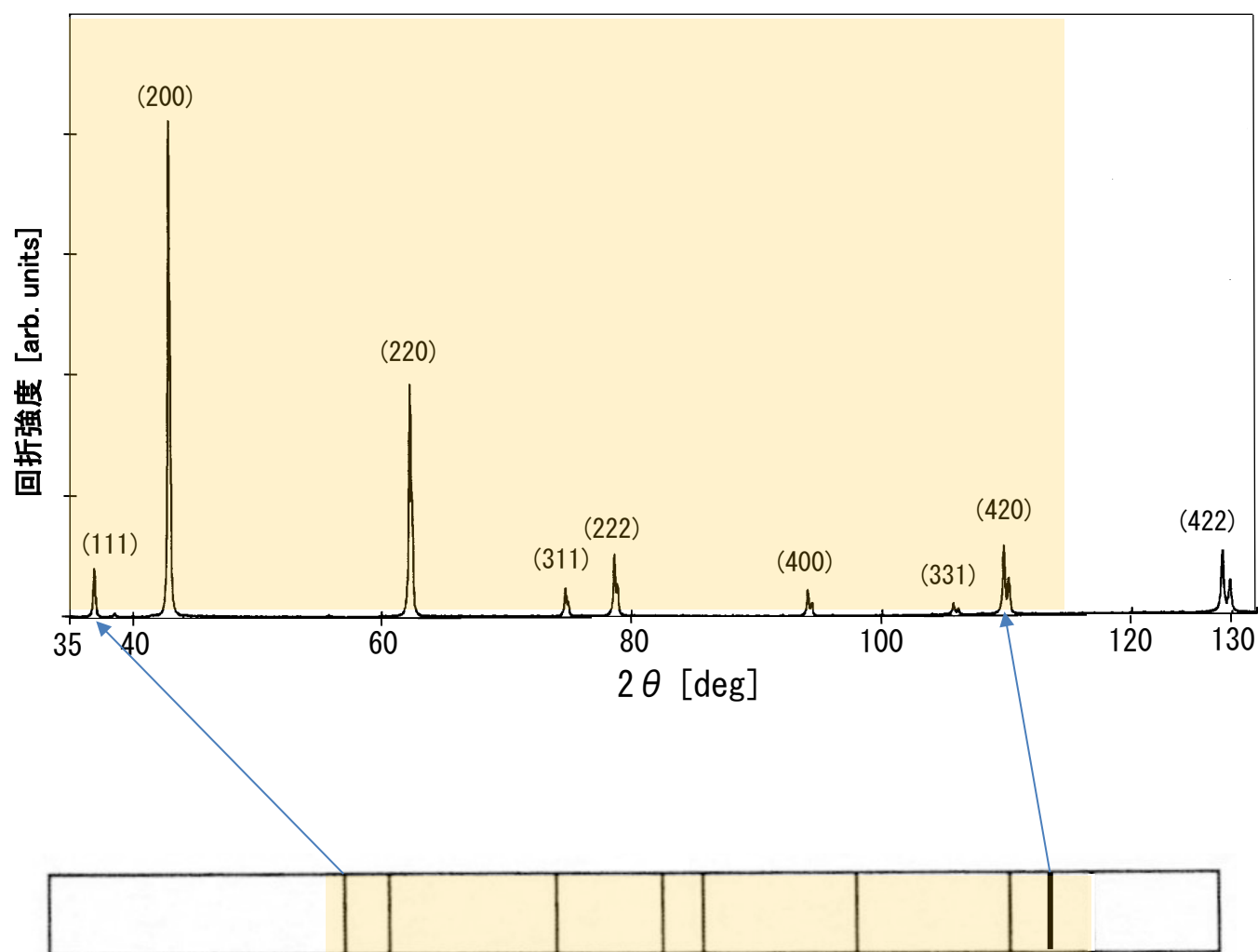
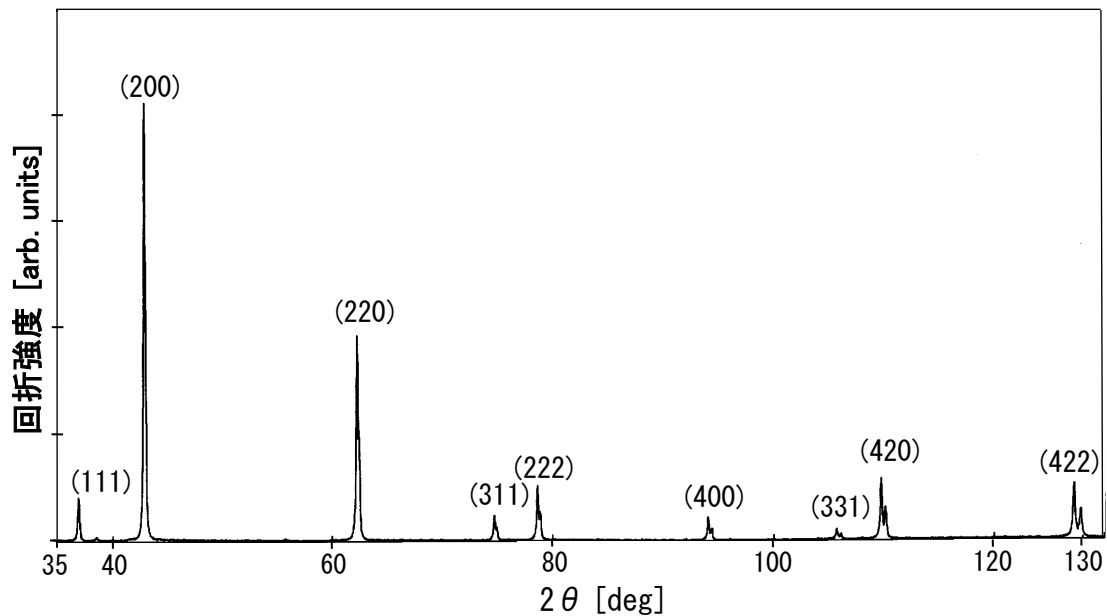


図2 ディフラクトメータにより測定した MgO 粉の X線回折パターン

$$2\theta_B \text{ を測定} \rightarrow d = \frac{\lambda}{2 \sin \theta_B} \quad \text{ここで } \lambda = 1.541838 [\text{\AA}] (\text{CuK}\alpha)$$

↓ ← if cubic  $h k l$  を仮定

$$d = d_{hkl} \rightarrow a_0 = d_{hkl} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \quad \text{ここで、} a_0 \text{ は格子定数}$$



回折強度の計算

$$\frac{\sin \theta}{\lambda} = \frac{1}{2d_{hkl}} \quad \text{原子散乱因子； } f^X \left( \frac{\sin \theta}{\lambda} \right) \text{ を計算}$$

$$\downarrow \leftarrow F(h, k, l) = \sum_j^{\text{unit cell}} f^X \cdot e^{2\pi i(h x_j + k y_j + l z_j)} \quad \text{結晶構造因子}$$

↓ ←  $m$  : 各反射の多重度      逆格子点原点から等距離にある逆格子点の数

$$\downarrow \leftarrow L.P. = \frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin^2 \theta \cdot \cos \theta} \quad \text{ローレンツ偏光因子}$$

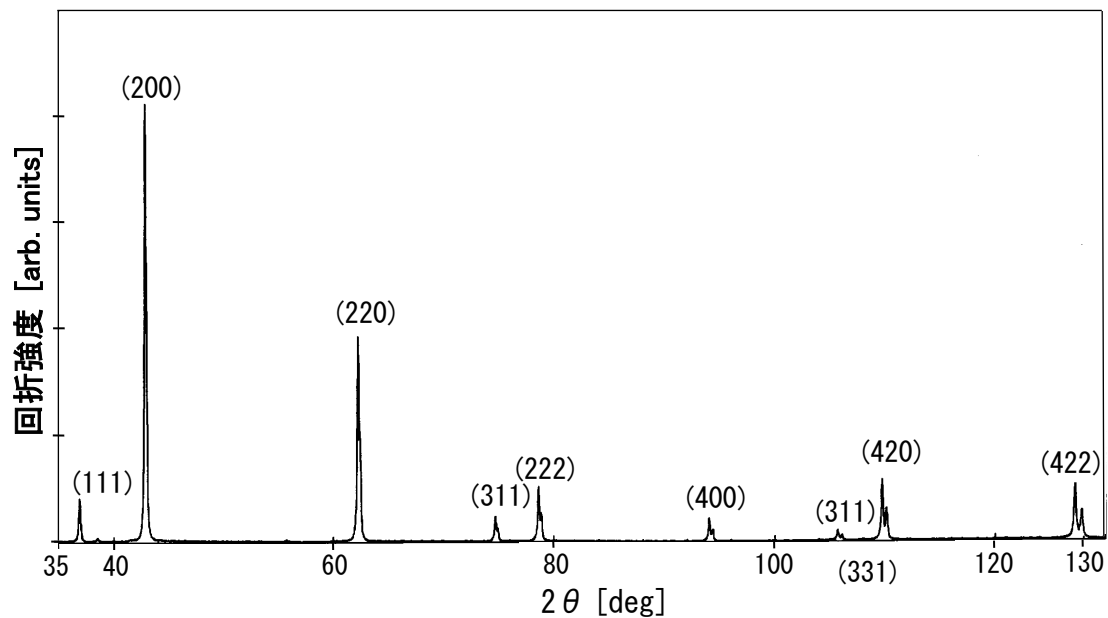
これは装置の幾何学的特性に起因した補正項である。

$$I = |F(h, k, l) \cdot m \cdot L.P.|^2 \quad \text{回折強度が求まる}$$

表 1 に計算された相対強度は、実験結果と良い一致を示す。

$hkl$	面間隔 $d_{hkl}[\text{nm}]$	$\frac{\sin \theta}{\lambda}[\text{nm}^{-1}]$	$m$	$L.P.$ ローレンツ因子	$f_{\text{Mg}^{2+}}^X\left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right)$	$f_{\text{O}^{2-}}^X\left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right)$	$I =  F ^2 m \cdot L.P.$	相対強度 $I^R$	回折角 $2\theta_B[\text{deg}]$
111	0.24324	2.0556	8	17.15	8.67	6.05	942	6.9	36.95
200	0.21065	2.3736	6	12.28	8.30	5.32	13668	100.0	42.93
220	0.14895	3.3568	12	5.292	7.04	3.68	7298	53.4	62.34
311	0.12703	3.9361	24	3.647	6.26	3.04	908	6.6	74.73
222	0.12162	4.1112	8	3.347	6.05	2.87	21301	15.6	78.67
400	0.10533	4.7470	6	2.755	5.28	2.40	975	7.1	94.09
331	0.09665	5.1731	24	2.799	4.80	2.18	461	3.4	105.80
420	0.09421	5.3.75	24	2.896	4.68	2.12	3214	23.5	109.83
422	0.08600	5.8141	24	3.844	4.17	1.94	3444	25.2	127.38

表 1 X線回折パターンの計算



原子散乱因子の近似式 International Tables for X-ray Crystallography vol. 4 Table 2.2B

$$f\left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right) = \sum_{j=1}^4 a_j e^{-b_j \left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right)^2} + c$$