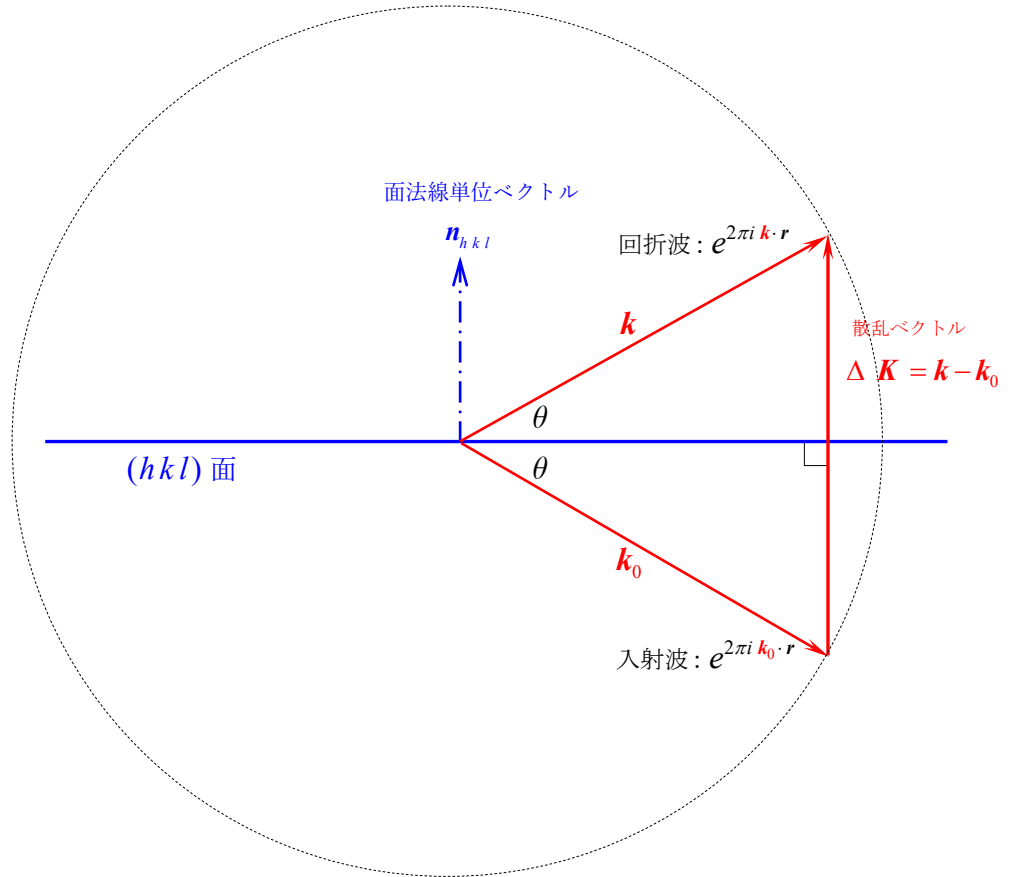


§ 逆空間における回折条件の表現



$$|k| = |k_0| = \frac{1}{\lambda} \quad (1)$$

(hkl) 面の法線単位ベクトル n_{hkl} // G_{hkl}^* : (hkl) 面の逆格子ベクトル

$$\therefore n_{hkl} = \frac{G_{hkl}^*}{|G_{hkl}^*|} \quad (2)$$

散乱ベクトルは $\Delta K = k - k_0$

↓ ← (1) and (2)

$$= 2 \frac{\sin \theta}{\lambda} \frac{G_{hkl}^*}{|G_{hkl}^*|}$$

$$\downarrow \leftarrow d_{hkl} = \frac{1}{|G_{hkl}^*|} \quad : \text{面間隔}$$

$$= \frac{2d_{hkl} \sin \theta}{\lambda} G_{hkl}^*$$

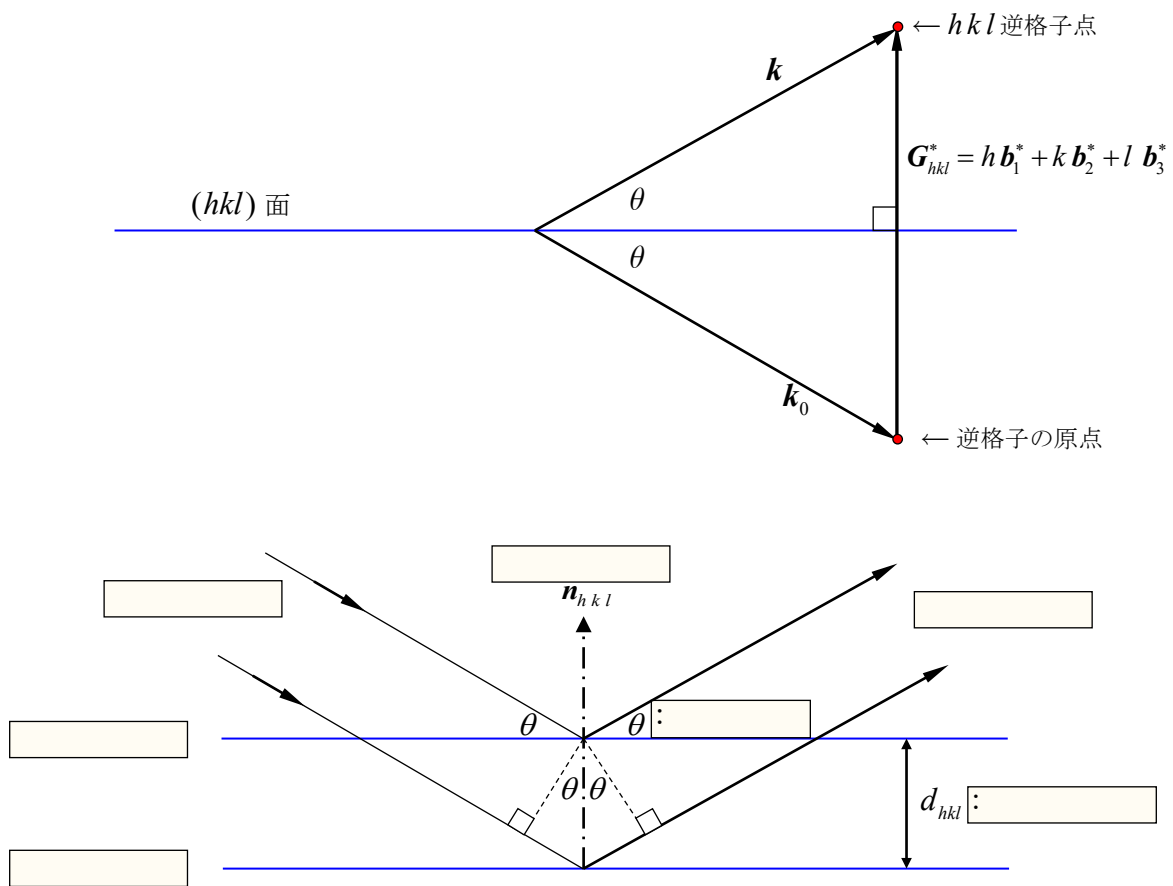
$$\downarrow \leftarrow 2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda \quad : \text{Bragg 反射}$$

$$= n G_{hkl}^*$$

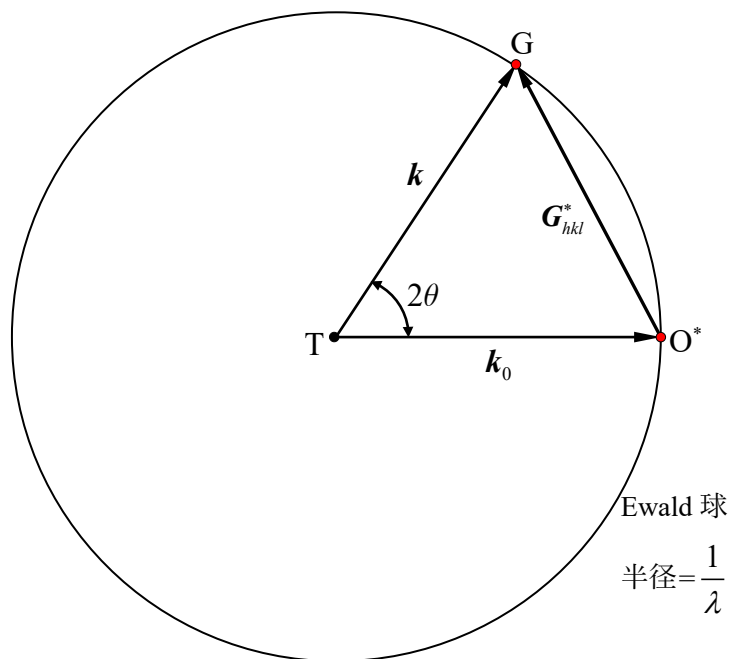
$$\downarrow \leftarrow n=1 \text{ として}$$

$$\therefore \Delta K = k - k_0 = G_{hkl}^* \quad (3)$$

即ち, Bragg 反射の条件は「散乱ベクトル=逆格子ベクトル」のときに回折波が強く生じるということ!

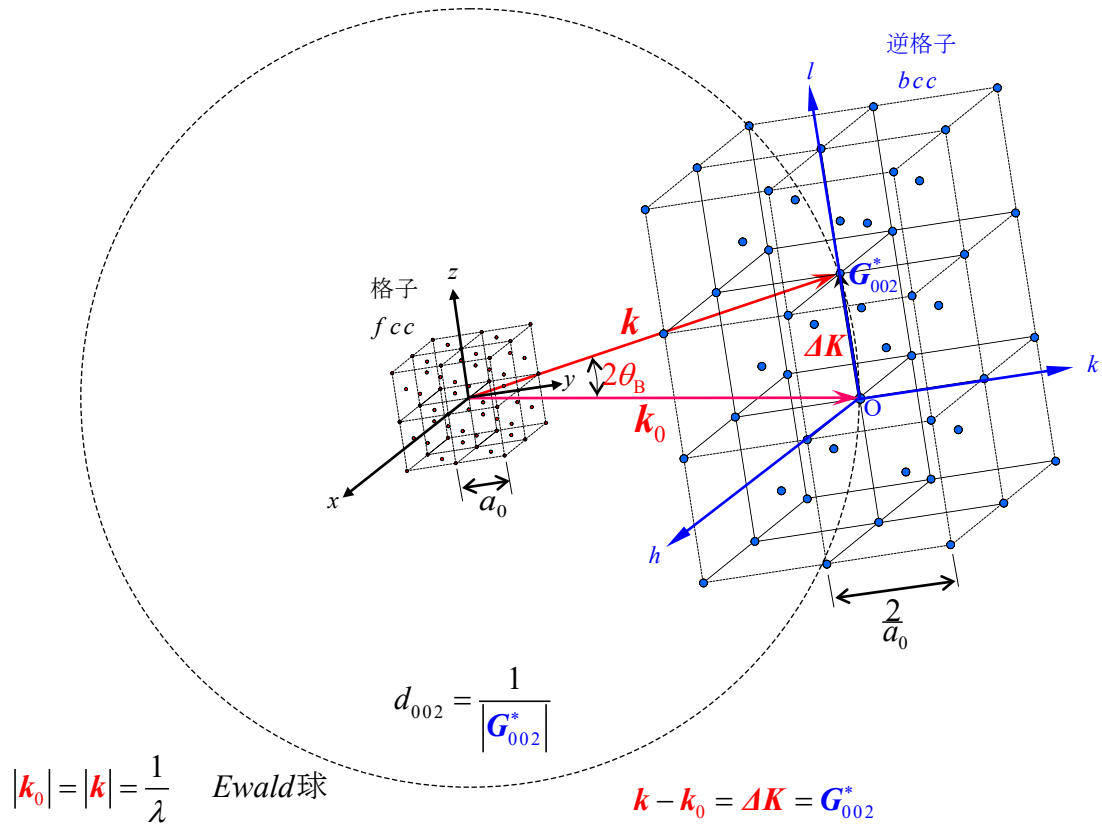


エバルドの作図

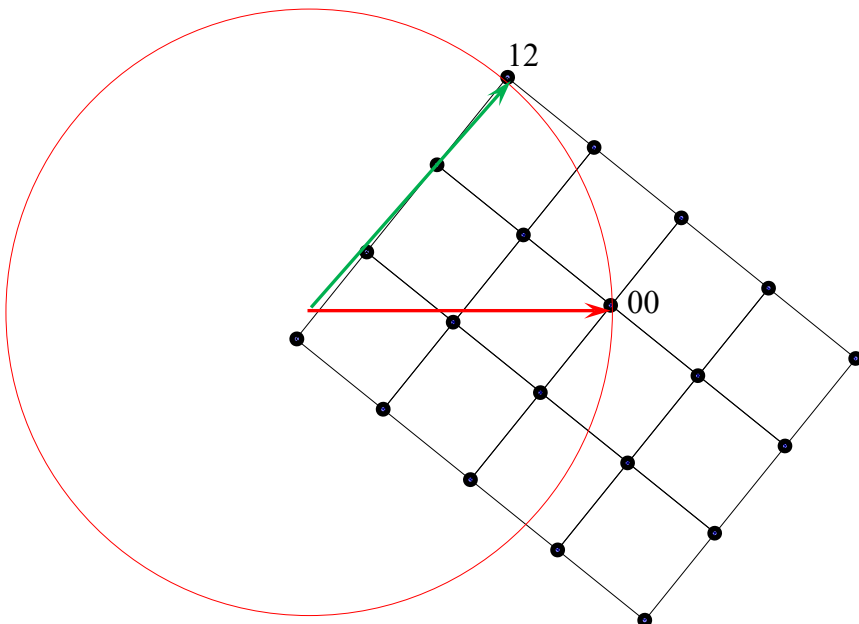
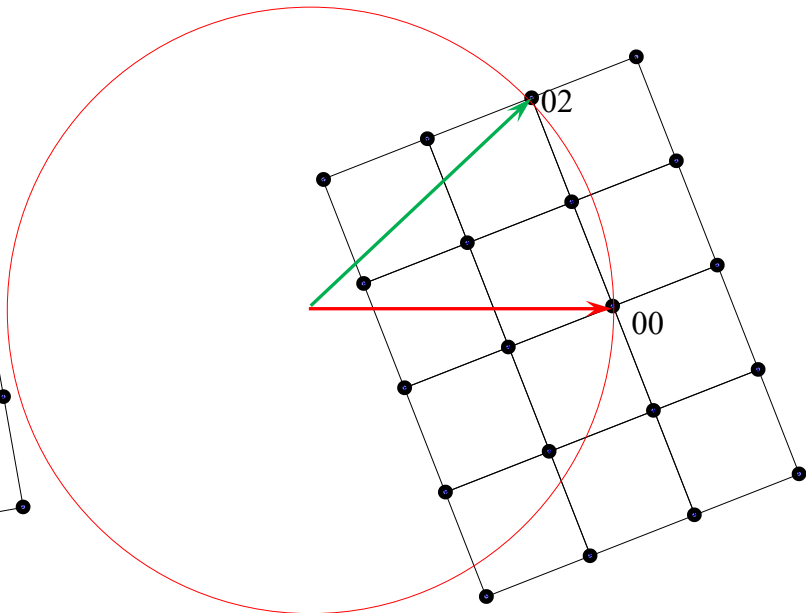
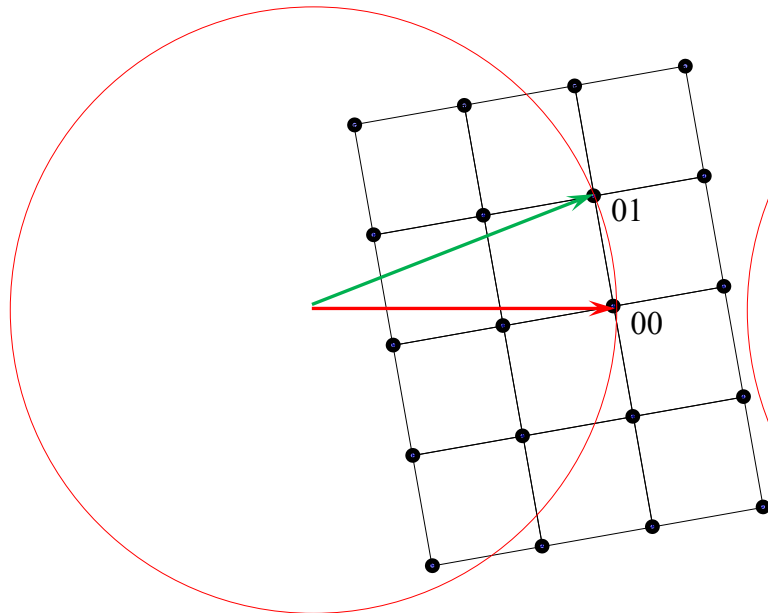
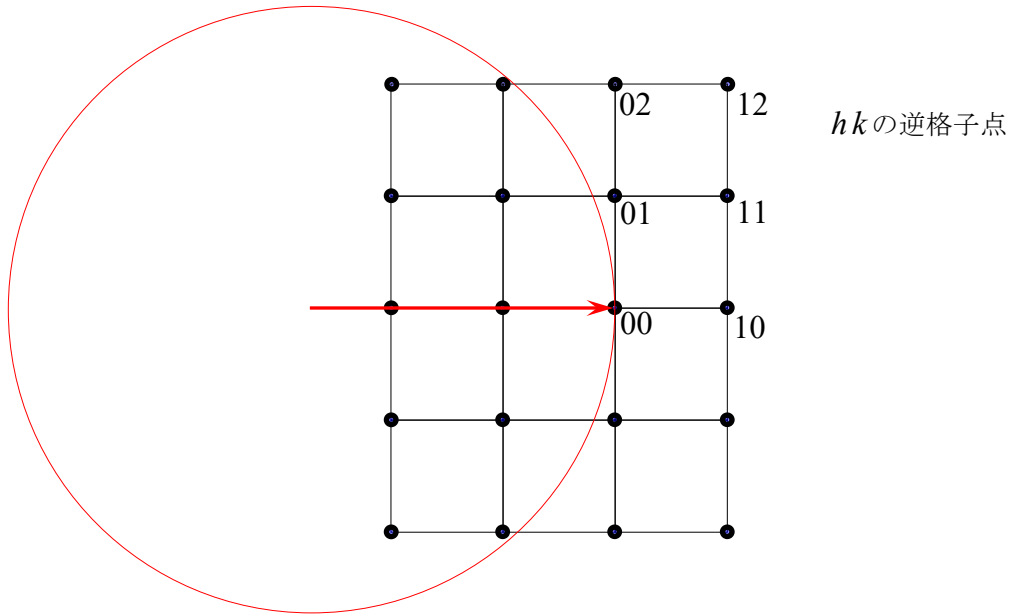


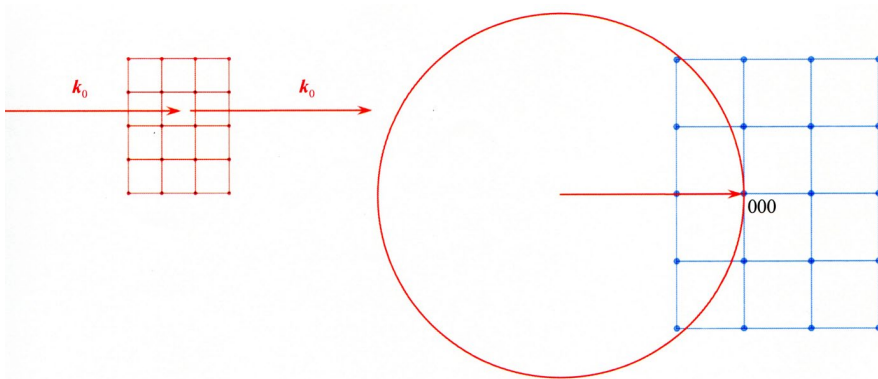
\mathbf{k}_0 : 入射波数ベクトル, \mathbf{k} : 回折波数ベクトル, λ : 波長, 2θ : 回折角, θ : Bragg 角
 O^* : 逆格子原点, G : 逆格子点, \mathbf{G}_{hkl}^* : 逆格子ベクトル, T : Ewald 球の中心

格子・逆格子と回折条件

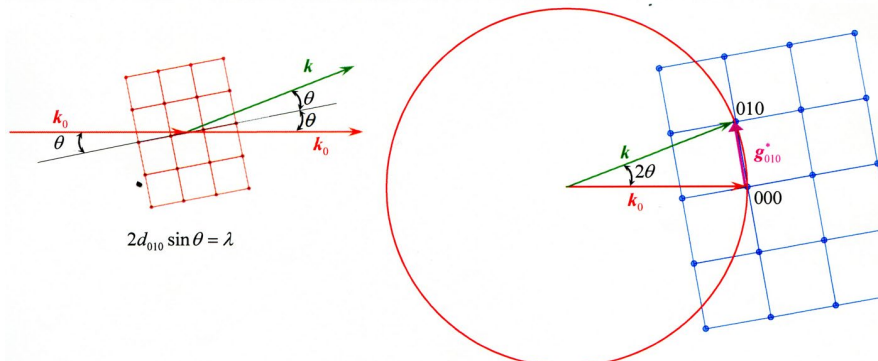


● 逆格子点





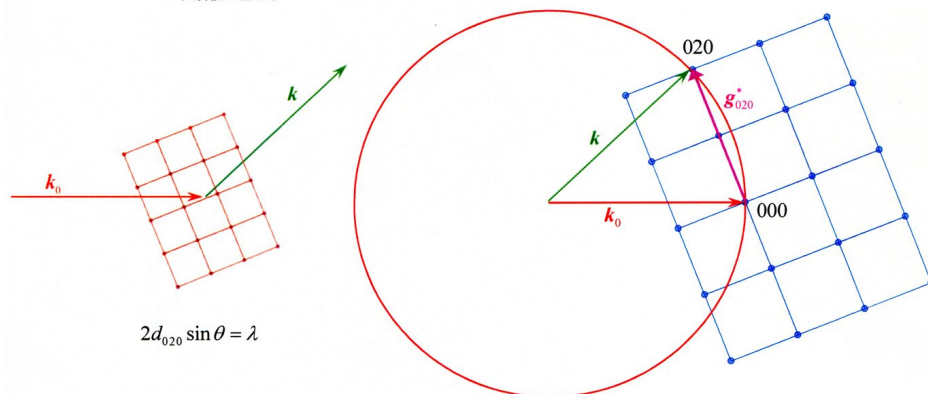
何も起こらない。入射波は透過するだけ。回折波は生じない。



格子を傾ける。→ (010)面が Bragg の式を満たす。

↓
回折波が生じる

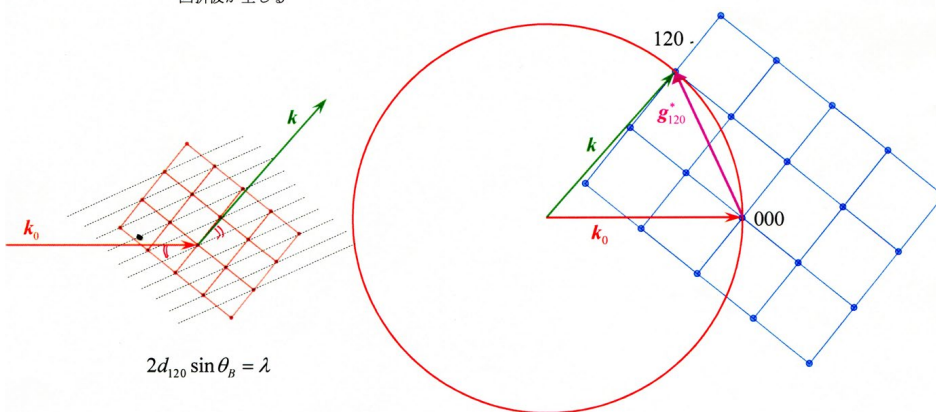
010 逆格子点がエバルド球面上に一致する。
(\mathbf{g}_{010}^* 逆格子ベクトルの終点がエバルド球面上に乗る)



更に格子を傾ける。→ (020)面が Bragg の式を満たす。

↓
回折波が生じる

020 逆格子点がエバルド球面上に一致する。
(\mathbf{g}_{020}^* 逆格子ベクトルの終点がエバルド球面上に乗る)

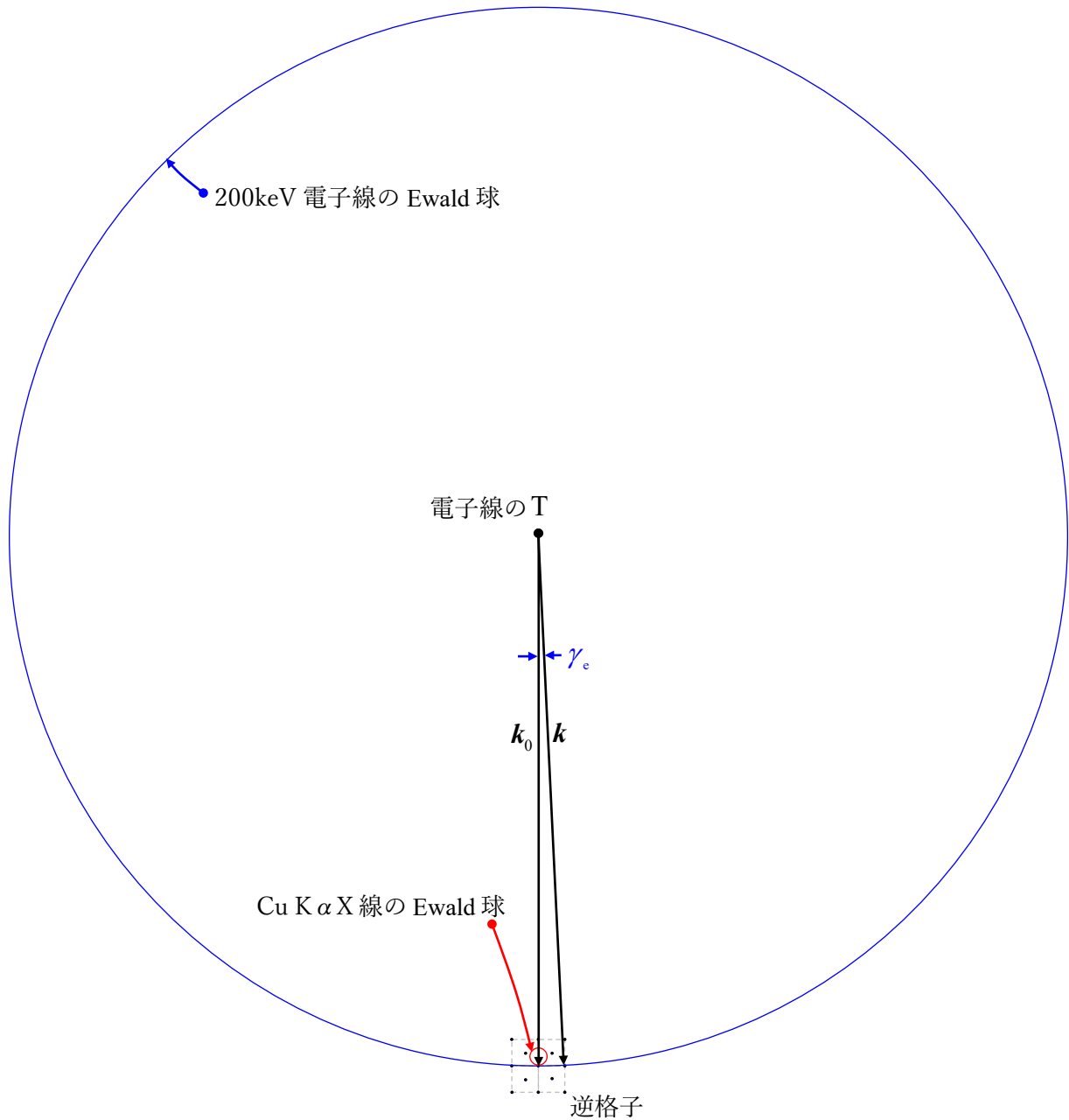


更に格子を傾ける。→ (120)面が Bragg の式を満たす。

↓
回折波が生じる

120 逆格子点がエバルド球面上に一致する。
(\mathbf{g}_{120}^* 逆格子ベクトルの終点がエバルド球面上に乗る)

X 線と電子線の Ewald 球の比較



問題： 格子定数 $a_0 = 4.0 \text{ \AA}$ の bcc の (200) 面の面間隔は $d_{200} = 2.0 \text{ \AA}$ である。
 これに対応する 200keV の電子線（波長 $\lambda_e = 0.02508 \text{ \AA}$ ）の回折角 γ_e
 および、 CuK_α 特性 X 線（波長 $\lambda_X = 1.541738 \text{ \AA}$ ）の回折角 $2\theta_X$ を求めよ。

解：

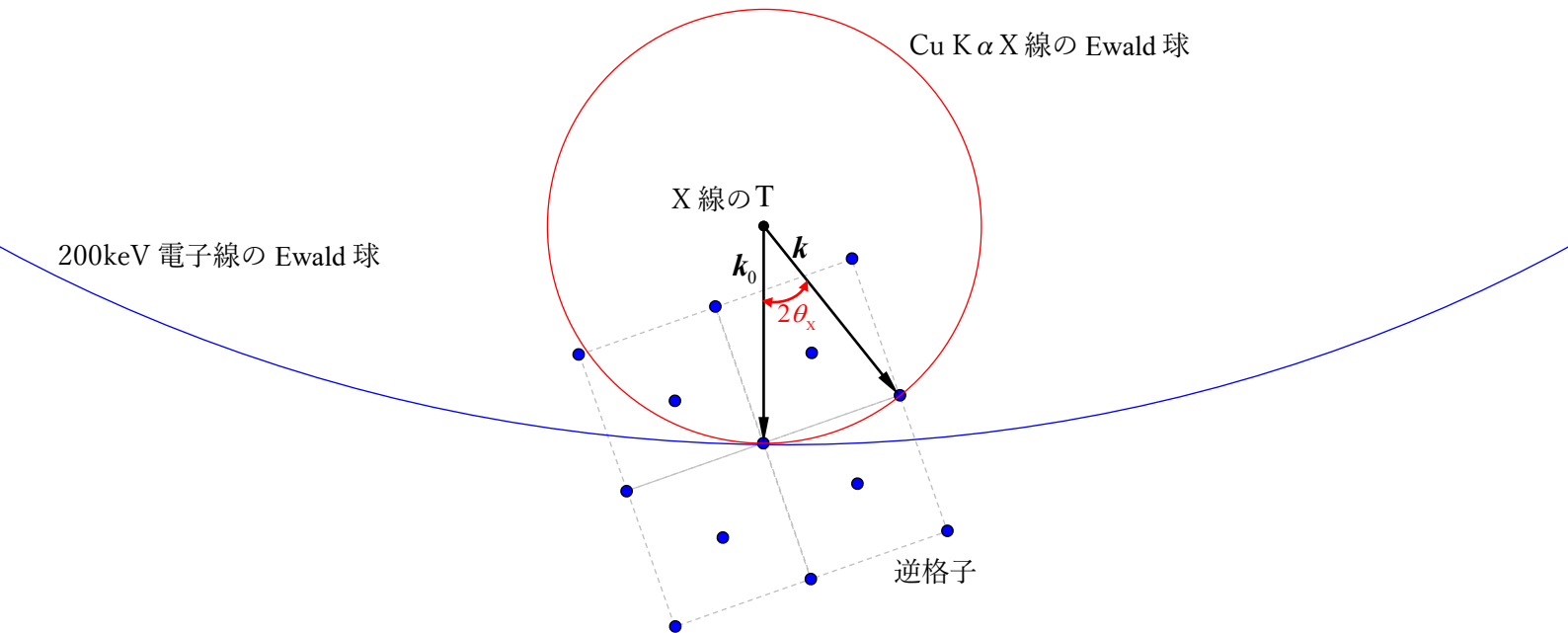
電子線回折では、 $d_{200} \sin \gamma_e = \lambda_e$

$$\therefore \gamma_e = \sin^{-1} \frac{\lambda_e}{d_{200}} = \sin^{-1} \frac{0.02508 \text{ \AA}}{2.0 \text{ \AA}} = 0.01254 \text{ rad} = 0.7185 \text{ deg} \quad //$$

X 線回折では、 $2d_{200} \sin \theta_X = \lambda_X$

$$\theta_X = \sin^{-1} \frac{\lambda_X}{2d_{200}} = \sin^{-1} \frac{1.541738 \text{ \AA}}{2 \times 2.0 \text{ \AA}} = 0.3957 \text{ rad} = 22.67 \text{ deg}$$

$$\therefore 2\theta_X = 45.34 \text{ deg} \quad //$$



X線 回折角が大きい → 角度精度が高い → 格子定数の精密測定 → **単位胞内**で平均構造を表現

電子線 回折角が小さい → 前方散乱 → レンズが使える → 回折像, 像の観察 → **単位胞の外**の構造観察可能

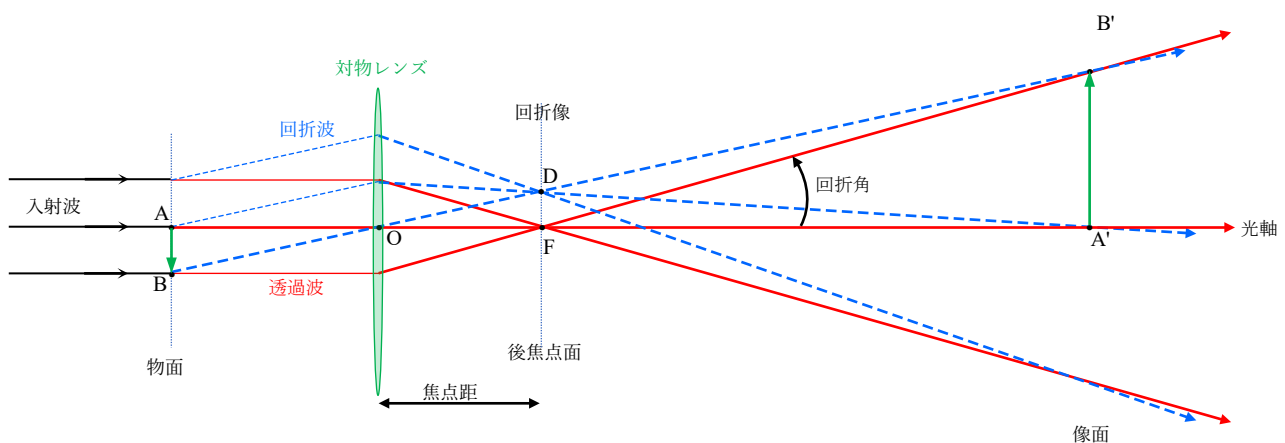


図1 レンズによる回折像と像の形成

X 線回折の要素過程と解析の流れ

入射 X 線 \rightarrow 電子の Thomson 散乱 \rightarrow 原子からの散乱 (原子散乱因子)

\rightarrow 単位胞からの散乱 (結晶構造因子)

\rightarrow 結晶からの散乱 (Laue 関数, 逆格子)

回折実験の流れ

結晶 \Leftrightarrow 原子面 (hkl) の集合 \rightarrow 面間隔 立方晶 正方晶 \cdots

\rightarrow Bragg 回折 $\rightarrow 2d_{hkl} \sin \theta = \lambda$

$\downarrow \leftarrow \lambda$ は既知

$\downarrow \leftarrow 2\theta$ を測定

d_{hkl} が求まる

$\downarrow \leftarrow (hkl)$ が決まる

a_0, b_0, c_0 などの格子定数が決まる

$\downarrow \leftarrow (hkl)$ の消滅則

単位胞内の原子配置が決まる = 結晶構造が決まる