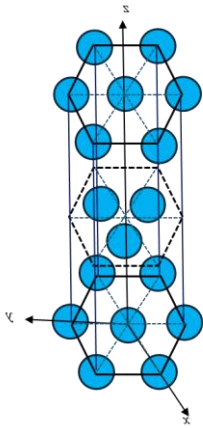


1.

①

Co の結晶構造を図示すると次のようになる



②単位胞内の原子の座標を示すと次のようになる。

$$(0 \quad 0 \quad 0)$$

$$\left(\frac{2}{3} \quad \frac{1}{3} \quad \frac{1}{2}\right)$$

③結晶構造因子は次のように表すことができる。ここで f は原子の散乱因数、 (x_j, y_j, z_j) は原子の結晶内の位置座標、 h, k, l は逆格子ベクトルのミラー指数を表している。

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

結晶構造因子 F を計算すると次のようになる。ただし、Co 原子の原子散乱因数を f とした。

$$F(hkl) = f \left\{ \exp(2\pi i(h \cdot 0 + k \cdot 0 + l \cdot 0)) + \exp\left(2\pi i\left(h \cdot \frac{2}{3} + k \cdot \frac{1}{3} + l \cdot \frac{1}{2}\right)\right) \right\}$$

$$= f \left\{ 1 + \exp\left\{\frac{2}{3}\pi i(2h + k)\right\} \cdot \exp(\pi i l) \right\}$$

(i) l が奇数かつ $2h + k$ が3の倍数のときの場合

$$F(hkl) = f \left\{ 1 + (-1)^{\frac{2}{3}(2h+k)} (-1)^l \right\}$$

$$= 0$$

$$\therefore F(hkl) = 0 \quad l \text{が奇数かつ} 2h + k \text{が} 3 \text{の倍数のとき}$$

(ii) l が偶数かつ $2h + k$ が3の倍数のときの場合
の場合

$$F(hkl) = f \left\{ 1 + (-1)^{\frac{2}{3}(2h+k)} (-1)^l \right\}$$

$$= 2f$$

$$\therefore F(hkl) = 2f \quad l \text{が偶数かつ} 2h + k \text{が} 3 \text{の倍数のとき}$$

(iii) l が奇数かつ $2h + k$ が3の倍数ではない($3m \pm 1$ m は整数)のときの場合

$\frac{2}{3}\pi i(2h+k)$ は $\pm\frac{2}{3}\pi i$ をとるので

$$F(hkl) = f \left\{ 1 + \exp \left\{ \frac{2}{3}\pi i(2h+k) \right\} \cdot \exp(\pi i l) \right\}$$

$$= f \left\{ 1 + \left(\cos\left(\pm\frac{2}{3}\pi\right) + i \sin\left(\pm\frac{2}{3}\pi\right) \right) \cdot (-1) \right\}$$

$$= \left(\frac{3}{2} \pm \frac{\sqrt{3}}{2}i \right) f$$

$$\therefore F(hkl) = \left(\frac{3}{2} \pm \frac{\sqrt{3}}{2}i \right) f \quad l \text{が奇数かつ} 2h+k \text{が} 3 \text{の倍数ではない}(3m \pm 1 \quad m \text{は整数)のとき}$$

(iv) l が偶数かつ $2h+k$ が3の倍数ではない($3m \pm 1$ m は整数)のときの場合

$\frac{2}{3}\pi i(2h+k)$ は $\pm\frac{2}{3}\pi i$ をとるので(iii)と同様にして

$$F(hkl) = f \left\{ 1 + \exp \left\{ \frac{2}{3}\pi i(2h+k) \right\} \cdot \exp(\pi i l) \right\}$$

$$= f \left\{ 1 + \left(\cos\left(\pm\frac{2}{3}\pi\right) + i \sin\left(\pm\frac{2}{3}\pi\right) \right) \cdot (1) \right\}$$

$$= \left(\frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{3}}{2}i \right) f$$

$$\therefore F(hkl) = \left(\frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{3}}{2}i \right) f \quad l \text{が偶数かつ} 2h+k \text{が} 3 \text{の倍数ではない}(3m \pm 1 \quad m \text{は整数)のとき}$$

したがって結晶構造因子は以下になる。

$$F(hkl) = \begin{cases} 0 & (l \text{が奇数かつ} 2h+k \text{が} 3 \text{の倍数のときの場合}) \\ 2f & (l \text{が偶数かつ} 2h+k \text{が} 3 \text{の倍数のときの場合}) \\ \left(\frac{3}{2} \pm \frac{\sqrt{3}}{2}i \right) f & (l \text{が奇数かつ} 2h+k \text{が} 3 \text{の倍数ではない}(3m \pm 1 \quad m \text{は整数)のときの場合}) \\ \left(\frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{3}}{2}i \right) f & (l \text{が偶数かつ} 2h+k \text{が} 3 \text{の倍数ではない}(3m \pm 1 \quad m \text{は整数)のとき}) \end{cases}$$

④ $\frac{F(hkl)}{f}$ を値の分布を逆格子の(hk0)*面, (hkl)*面, (hk2)*面に図示すると以下ようになる。

