固体構造解析学　第5講　まとめ

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種類の空間軍が存在する。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sp3およびsp2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。