個体構造解析学　第8回：結晶構造，空間群，回折条件の概要

**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

**(ここで**は任意の整数，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。面間隔と入射角との関係式で表される。

・回折の光路差：

(は入射角，は波長，は整数)

・ド・ブロイ波長：

(はプランク定数，は運動量)