固体構造解析学　第10回　原子散乱因子

**原子散乱因子とは**

・原子からの散乱波に関する理論で，特にX線回折に焦点を当てている。

・原子散乱因子は，電子密度の分布に基づいて，原子核周りの電子による散乱波の振幅を計算するものである。

**Thomaon散乱**

・1個の自由な電子が真空中にあり，X線が入射すると電子は強制振動し，入射波と同じ振動数の波が発生する。

・この散乱波の強度は，入射波の電界による電子の振動によって決まる。

**原子散乱因子の計算**

1. 電子数密度分布：原子内の電子は原子核周りに数密度で分布している。
2. 電子の散乱強度：1個の電子の散乱強度はに比例する。
3. 位相差：散乱波の位相差はで計算される。
4. 散乱振幅：ｎ番目の電子の散乱振幅はで求める。
5. 原子全体の散乱振幅：原子内の全電子からの散乱振幅を合計し，原子散乱因子はで表される。

**まとめ**

・原子散乱因子は、X線回折における重要なパラメータであり、原子内の電子の分布に依存する。

・散乱波の振幅と位相差を考慮することで、原子全体の散乱特性を理解できる。