固体構造解析学　第12回　結晶構造因子と消滅則

1. **結晶構造因子の基本式**

結晶構造因子は，単位胞内の各原子の位置座標と原子散乱因子を用いて計算される。

ここで，は原子散乱因子，は単位胞内の原子座標である。

1. **単純立方格子**

・原子座標：（0,0,0）

・結晶構造因子：

・すべての に対して構造因子は同じ値を持つ。

1. **面心立方格子**

・原子座標：(0,0,0)，(1/2,1/2,0),(1/2,0.1/2),(0,1/2,1/2)

・消滅則：がすべて奇数またはすべて偶数のときには非零。混合の場合は消滅。

1. **体心立方格子**

・原子座標：(0,０,０)，(1/2,1/2,1/2)

・消滅則：が偶数のときには非零。奇数の場合は消滅。

1. **食塩型格子**

・原子Aの座標：(0,0,0),(1/2,1/2,0),(1/2,0,1/2),(0,1/2,1/2)

・原子Bの座標：(1/2,0,0), (0,1/2,0), (0,0,1/2), (1/2,1/2,1/2)

・消滅則: NaCl構造では、AおよびB原子の寄与が重なるため、特定の条件下で消滅則が適用される。

**まとめ**

結晶構造因子とその消滅則は，結晶の対称性と原子の配置に強く依存している。これらの原理を理解することで，X線回折データの解析や材料の特性評価が可能となる。