

# 宮島研究室 2019 年度 B4 XRD 実験

東京理科大学 理学部 応用物理学科  
宮島研究室 B4 渡辺慧

2019 年 5 月 16 日

## 目次

1	本研究の目的	1
2	原理	1
2.1	結晶面 . . . . .	1
2.2	逆格子 . . . . .	2
2.3	回折条件 . . . . .	4
2.4	X 線回折 . . . . .	5
2.5	NaCl の結晶構造 . . . . .	7
2.6	$2\theta/\theta$ 法 . . . . .	8
2.7	NaCl 粉末の回折パターン . . . . .	9
3	NaCl 粉末及び単結晶の回折パターンの観測方法	10
4	NaCl 粉末及び単結晶の回折パターンの解析	12
4.1	NaCl 粉末 . . . . .	12
4.2	NaCl 単結晶 . . . . .	14
5	結論	17

## 1 本研究の目的

本研究の目的は、X 線回折装置によって、NaCl 結晶の X 線回折パターンを測定し、格子定数の導出を行うことである。

## 2 原理

### 2.1 結晶面

図 1(a) のような立方格子を考える。 $\mathbf{a}_1$ 、 $\mathbf{a}_2$ 、 $\mathbf{a}_3$  を各方向への単位ベクトルと考えた時、位置ベクトル  $\mathbf{r}$  は  $\mathbf{r} = h\mathbf{a}_1 + k\mathbf{a}_2 + l\mathbf{a}_3$  と表せる。 $h, k, l$  はミラー指数と呼ばれる。このとき、 $\mathbf{r}$  の方向を  $[h, k, l]$  と表記する。 $[h, k, l]$  方向のベクトルと直交する面を格子面と呼ぶ。格子面は、図 1(b) のように等間隔に無限に並び、その間隔を  $d_{hkl}$  とする。原点から  $d_{hkl}$  の距離にある面を  $(h, k, l)$  と表記する。また、 $(h, k, l)$  と平行な面すべてを内包して  $\{h, k, l\}$  と表記する。 $(h, k, l)$  は、各方向の単位長さを 1 としたとき、それぞれの軸の  $\frac{1}{h}$ 、 $\frac{1}{k}$ 、 $\frac{1}{l}$  の位置を通過する。ただし、方向成分が 0 の方向があるとき、格子面はその方向と平行になる。

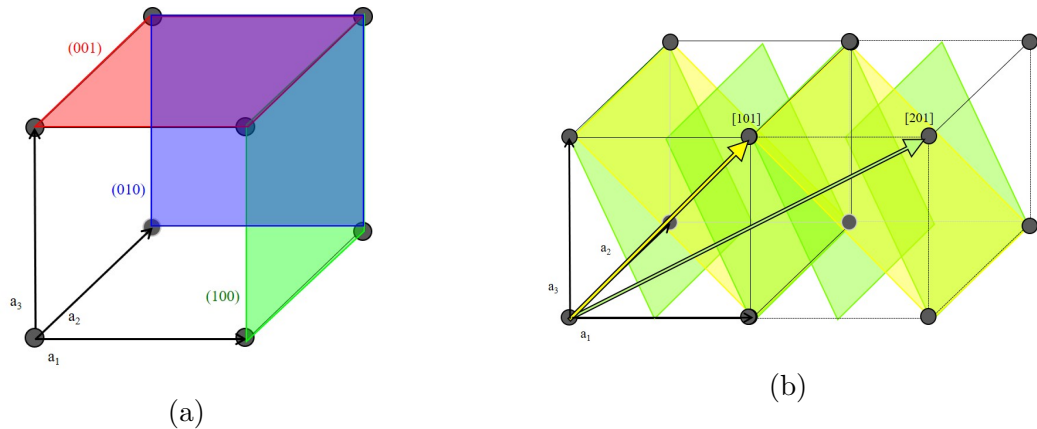


図 1 結晶面の概形.

## 2.2 逆格子

結晶の構造においては、単位格子が空間的に繰り返す周期性がある。ここで、並進操作  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{R}$  に対し不変となるベクトル

$$\mathbf{R} = n_a \mathbf{a}_1 + n_b \mathbf{a}_2 + n_c \mathbf{a}_3$$

が存在する。 $\mathbf{R}$  を実格子ベクトルと呼ぶ。ここで、結晶と同様の周期性を持つ関数  $\phi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r} + \mathbf{R})$  を波数ベクトル  $\mathbf{G}$  でフーリエ展開すると、

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \phi_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad (1)$$

$$\phi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{G}} \phi_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R})} \quad (2)$$

となる。ここで、式 (1) と式 (2) は等しいため、 $\mathbf{R}$  と  $\mathbf{G}$  は

$$e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}} = 1 \leftrightarrow \mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2n\pi \quad (3)$$

を満たさなければならない。このような  $\mathbf{G}$  を

$$\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$$

と定義する。 $hkl$  は回折指数である。 $\mathbf{G}$  を逆格子ベクトルと呼び、(長さ) $^{-1}$  の次元を持つ。この時、 $\mathbf{a}_j$  と  $\mathbf{b}_k$  の間には、

$$\mathbf{a}_j \cdot \mathbf{b}_k = \delta_{jk} \quad (4)$$

$$\begin{cases} \delta_{jk} = 0 (j \neq k) \\ \delta_{jk} = 2\pi (j = k) \end{cases} \quad (5)$$

の関係がある。ここで、 $|a_1| = |a_2| = |a_3|$  かつ  $|b_1| = |b_2| = |b_3|$  のとき、 $|b_j| = \frac{1}{|a_j|}$  である。 $l = 0$  のときの、実格子空間と逆格子空間の簡単な対応を図 2 に示す。

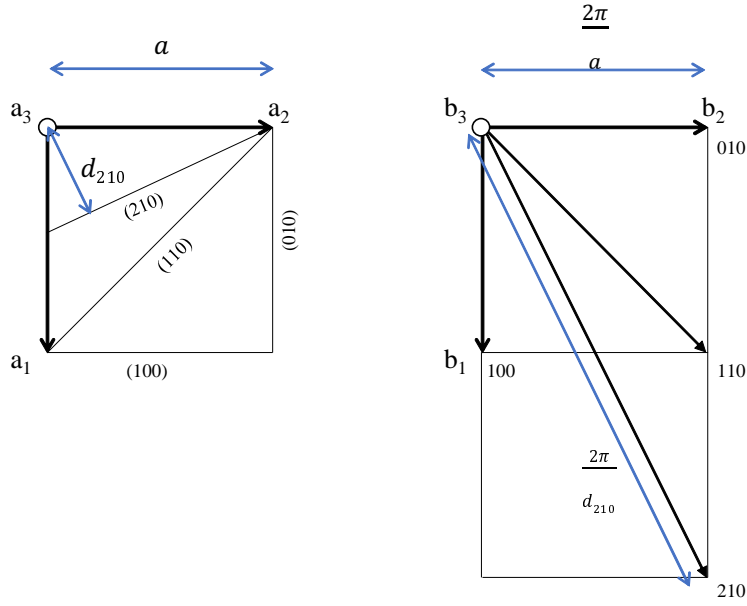


図2 実格子と逆格子の関係.

左が実格子空間、右が逆格子空間である。 $hkl = 210$  を見てみると、逆格子ベクトル  $[210]$  は、実格子における  $(210)$  と垂直である。また、 $\mathbf{G}_{hkl}$  方向の結晶面の間隔  $d_{hkl}$  は

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}_{hkl}|} \times \gcd(h, k, l) \quad (6)$$

と表せる。 $\gcd(h, k, l)$  は  $(h, k, l)$  の最大公約数である。最大公約数が1であるとき、つまり  $(h, k, l)$  の組が互いに素であるとき、回折指数  $hkl$  とミラー指数  $(h, k, l)$  は一致する。

## 2.3 回折条件

実格子空間での X 線の回折の条件を考える。X 線がある結晶面によって散乱を起こすときの光路を図 3(a) に示す。入射光と結晶面の角度を  $\theta$ 、結晶面の間隔を  $d$  としたとき、この時、2 つの光の光路差は  $2d \sin \theta$  である。散乱前後で光の波長が変化しないとき、この光路差が X 線の波長の整数倍であれば、散乱光は強め合う。よって、実格子空間における X 線の回折の条件は

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (7)$$

となる。この条件を Bragg 条件と呼ぶ。

また、逆格子空間での X 線の回折の条件を考える。入射 X 線の波数ベクトルを  $\mathbf{k}_0$ 、散乱 X 線の波数ベクトルを  $\mathbf{k}$  とする。逆格子空間における X 線の散乱を図 3(b) に示す。 $\mathbf{k}_0$  が逆格子空間の原点を向くベクトルだと考えると、 $\mathbf{k}$  の終着点は  $\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}$  で表せる (これを散乱ベクトルと呼ぶ)。ここで、散乱ベクトルが逆格子ベクトル  $\mathbf{G}_{hkl}$  と等しいとき、つまり、散乱 X 線の波数ベクトルの終点が逆格子空間の格子点に等しいとき、回折が起きる。したがって、逆格子空間における X 線の回折の条件は、

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \mathbf{G}_{hkl} \quad (8)$$

となる。この条件を Laue 条件と呼ぶ。

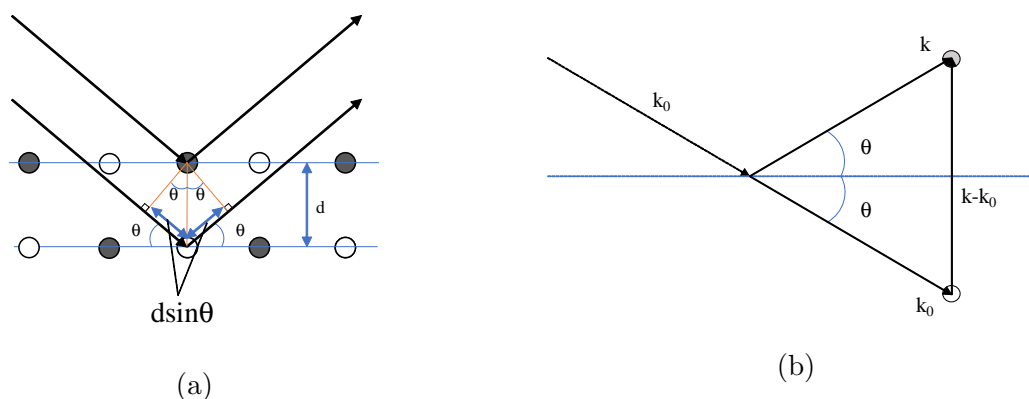


図3 X 線の散乱.

## 2.4 X線回折

X線は電磁波であり、結晶にX線を入射したとき、X線は構成原子の原子核と電子によって散乱される。荷電粒子による電磁波の散乱には、散乱波の波長が元の波長から変化しない Thomson 散乱と、散乱波の波長が元の波長よりも長くなる Compton 散乱の2種類がある。Thomson 散乱は干渉性散乱、Compton 散乱は非干渉性散乱である。結晶による回折においては、干渉性散乱のみを考えればよいので、Thomson 散乱のみを考える。Thomson 散乱において、散乱断面積は散乱体の質量の自乗に反比例するため、X線は電子により散乱される。密度  $\rho(\mathbf{r})$  で空間分布した電子雲によってX線が散乱される場合を、図4を用いて考える。

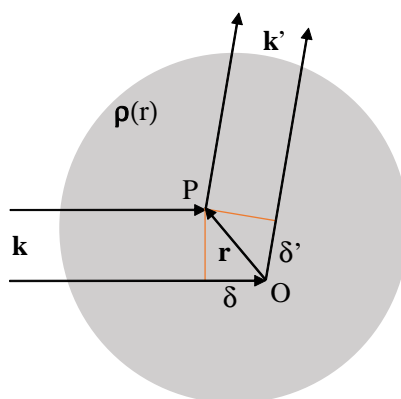


図4 電子雲によるX線の散乱.

電子雲に平面波のX線が入射して、原点Oと点Pで波数  $\mathbf{k}$  から  $\mathbf{k}'$  に散乱された時、位相差は

$$\delta_1 + \delta_2 = (-\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + (\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}) = \mathbf{K} \cdot \mathbf{r} \quad (9)$$

と表せる (散乱ベクトル  $\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$  を定義した)。この時、ある散乱先  $\mathbf{r}'$  における散乱X線の重ね合わせは

$$A\rho(\mathbf{0})e^{i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}')} + A\rho(\mathbf{r})e^{i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}' + \delta_1 + \delta_2)} = A[\rho(\mathbf{0})e^{i(\mathbf{K} \cdot \mathbf{0})} + \rho(\mathbf{r})e^{i(\mathbf{K} \cdot \mathbf{r})}]e^{i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}')} \quad (10)$$

となる (A:定数)。ここで、右辺の [] 内の項は、点O、Pで散乱されたX線の振幅に等しい。よって、電子雲全体での散乱振幅は、

$$f = \int \rho(\mathbf{r})e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (11)$$

に比例することがわかる。

ところで、 $\rho(\mathbf{r})$  は、結晶の構成原子それぞれの電子密度の和

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} \sum_j \rho_j(\mathbf{r} - [\mathbf{R} + \mathbf{r}_j]) \quad (12)$$

で表せる ( $\mathbf{r}_j$ :結晶中の  $j$  番目の原子の位置ベクトル)。これを用いて式 (11) を変形すると、

$$\begin{aligned} f &= \int \rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} \sum_j \rho_j(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{r}_j) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \\ &= \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} \sum_j e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j} \int \rho_j(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{r}_j) e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{r}_j)} d(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} \sum_j f_j e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j} \end{aligned} \quad (13)$$

となる。式 (11) より、 $\int \rho_j(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{r}_j) e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{r}_j)} = f_j$  とした。結晶全体の散乱の和を  $\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} \equiv G(\mathbf{K})$ 、単位格子中の散乱の和を  $\sum_j f_j e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j} \equiv F(\mathbf{K})$  と定義する。この時、散乱 X 線の強度は

$$|f|^2 = |G(\mathbf{K})|^2 |F(\mathbf{K})| \quad (14)$$

に比例する。 $\mathbf{a}_1$ 、 $\mathbf{a}_2$ 、 $\mathbf{a}_3$  方向の格子数を  $N_a$ 、 $N_b$ 、 $N_c$  としたとき、等比級数として計算できる。 $|G(\mathbf{K})|^2$  は、

$$|G(\mathbf{K})|^2 = \frac{\sin^2(N_a \mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_1/2)}{\sin^2(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_1/2)} \frac{\sin^2(N_b \mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_2/2)}{\sin^2(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_2/2)} \frac{\sin^2(N_c \mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_3/2)}{\sin^2(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_3/2)} \quad (15)$$

と表せる。これを Laue 関数と呼ぶ。 $|G(\mathbf{K})|^2$  は、波数ベクトル  $\mathbf{K}$  と各方向成分  $\mathbf{a}_1$ 、 $\mathbf{a}_2$ 、 $\mathbf{a}_3$  の内積が

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_1 = 2\pi h, \mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_2 = 2\pi k, \mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_3 = 2\pi l, \quad (16)$$

のとき有限の値をとり、それ以外の場合はほぼ 0 である。

$G(\mathbf{K})$  が Laue 関数であることから、 $F(\mathbf{K})$  について、 $\mathbf{K} = \mathbf{G}_{hkl}$  として計算できる。よって、

$$\begin{aligned} F_{hkl} &= \sum_j f_j e^{i\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{r}_j} \\ &= \sum_j f_j e^{2\pi i(hb_1 + kb_2 + lb_3)} \end{aligned} \quad (17)$$

となる。 $F_{hkl}$  を結晶構造因子と呼ぶ。結晶構造因子は Laue 関数と同様、特定の条件を満たすとき有限の値をとり、それ以外の場合は 0 である。したがって、Laue 条件を満たしていても、 $F_{hkl} = 0$  のとき回折は観測されない。これを消滅則と呼ぶ。格子の形状によって、有限の値をとる条件が異なるため、結晶構造の解析の際に有用である。



## 2.5 NaCl の結晶構造

NaCl 結晶は、NaCl 型構造をとる。NaCl の構造の概形を図 5 に示す。

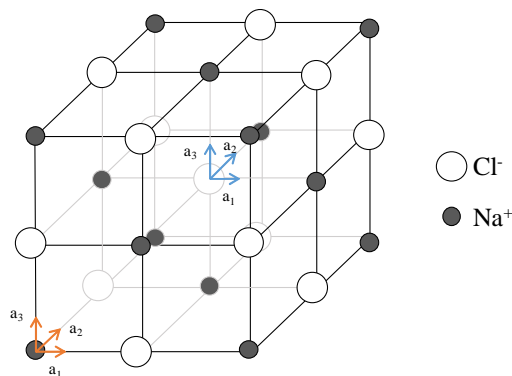


図 5 NaCl の結晶構造.

NaCl 結晶は、Na サイトの面心立方格子と Cl サイトの面心立方格子が入れ子になった構造になっている。NaCl 結晶における結晶構造因子  $F_{hkl}$  を考える。単位格子において、橙の矢印のように単位ベクトル  $\mathbf{a}_i (i = 1, 2, 3) (|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = |\mathbf{a}_3|)$  の原点をとると、Na 原子は

$$\mathbf{r}_1 = 0, \mathbf{r}_2 = \frac{1}{2}\mathbf{a}_1 + \frac{1}{2}\mathbf{a}_2, \mathbf{r}_3 = \frac{1}{2}\mathbf{a}_2 + \frac{1}{2}\mathbf{a}_3, \mathbf{r}_4 = \frac{1}{2}\mathbf{a}_3 + \frac{1}{2}\mathbf{a}_1 \quad (18)$$

の 4 つの非等価な位置に存在している。よって、Na 原子による原子散乱因子を  $f_{\text{Na}}$  とすると、 $F_{\text{Na}}$  は

$$\begin{aligned} F_{\text{Na}} &= \sum_{j=1}^4 f_{\text{Na}} e^{i\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{r}_j} \\ &= f_{\text{Na}} (1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(k+l)} + e^{i\pi(l+h)}) \end{aligned} \quad (19)$$

となる。Cl 原子においては、青の矢印のように  $\mathbf{r} = \frac{1}{2}\mathbf{a}_1 + \frac{1}{2}\mathbf{a}_2 + \frac{1}{2}\mathbf{a}_3$  の位置から考える。Cl 原子による原子散乱因子を  $f_{\text{Cl}}$  とすると、 $F_{\text{Cl}}$  は

$$F_{\text{Cl}} = f_{\text{Cl}} \cdot e^{i\pi(h+k+l)} (1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(k+l)} + e^{i\pi(l+h)}) \quad (20)$$

となる。NaCl 結晶における結晶構造因子は、 $F_{\text{Na}}$  と  $F_{\text{Cl}}$  の合計なので、 $F_{hkl}$  は

$$F_{hkl} = (f_{\text{Na}} + f_{\text{Cl}} \cdot e^{i\pi(h+k+l)}) (1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(k+l)} + e^{i\pi(l+h)}) \quad (21)$$

となる。NaCl 結晶における  $F_{hkl}$  の消滅則は、 $hkl$  の組み合わせから、

$$F_{hkl} = \begin{cases} 4(f_{\text{Na}} + f_{\text{Cl}}) & h, k, l \text{ がすべて偶数} \\ 4(f_{\text{Na}} - f_{\text{Cl}}) & h, k, l \text{ がすべて奇数} \\ 0 & \text{その他} \end{cases} \quad (22a)$$

となる。

## 2.6 $2\theta/\theta$ 法

X 線回折装置の概略図を図 6 に示す。試料台に平行な結晶面と入射 X 線のなす角 (入射角) が  $\theta$  のとき、試料に平行な結晶面と散乱 X 線のなす角も  $\theta$  となる。 $\theta$  の値を変える時、つまり X 線源を動かす時、回折光が観測できるように光検出器も同時に動かす観測方法を  $2\theta/\theta$  法と呼ぶ。試料が単結晶の場合は、図 6(a) のように、試料台に平行な面は  $(h, k, l) = (0, 0, n)$  の面のみであるため、Laue 条件と消滅則を満たす  $(0, 0, n)$  面からの回折のみが観測できる。試料が粉末の場合は、図 6(b) のように、 $(h, k, l) = (0, 0, n)$  以外にも試料台に平行な面があるため、Laue 条件と消滅則を満たせば、様々な  $(h, k, l)$  からの回折が観測できる。

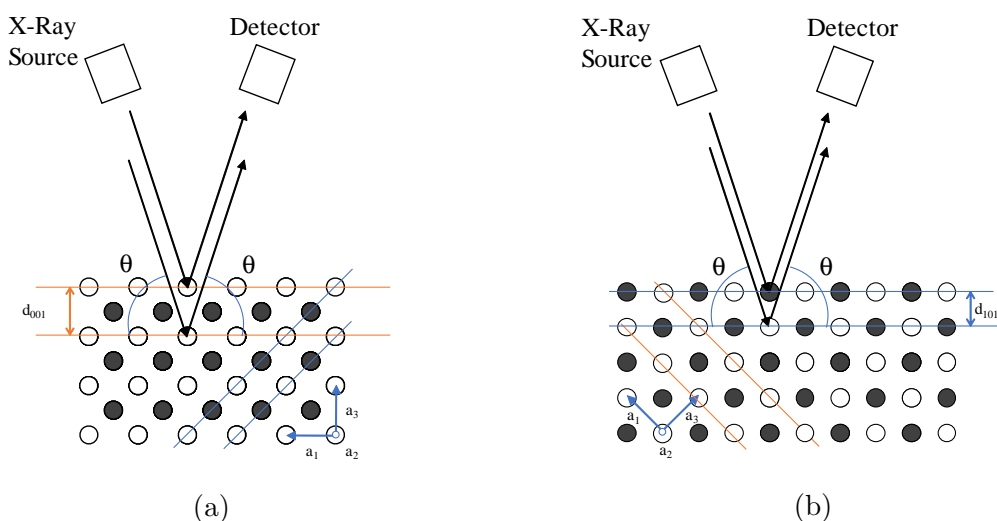


図 6 X 線回折装置概略図.

## 2.7 NaCl 粉末の回折パターン

NaCl 粉末の、 $2\theta$  の値が  $90$  よりも小さいときの回折パターンを表 1 に示す。この表は、入射光と回折光のなす角が  $2\theta$  の時、 $(h, k, l)$  面が試料台に平行で、どの程度の強度で回折光が観測できるかを示している。また、 $(h, k, l)$  面における面間隔も示している。実験データの解析においては、この表のデータを参照する。

表 1 NaCl 粉末の回折パターン [1].

$2\theta(\text{deg})$	$h$	$k$	$l$	Intensity	d-spacing [nm]
26.886	1	1	1	10	0.3312
31.145	2	0	0	99	0.2869
44.629	2	2	0	61	0.2028
52.878	3	1	1	3	0.173
55.426	2	2	2	19	0.1656
64.959	4	0	0	8	0.1434
71.633	3	3	1	2	0.1316
73.797	4	2	0	19	0.1283
82.251	4	2	2	13	0.1171
88.472	5	1	1	2	0.1104

### 3 NaCl 粉末及び単結晶の回折パターンの観測方法

NaCl 粉末及び単結晶の回折パターンを、X 線回折装置”SmartLab”を用いて、 $2\theta/\theta$  法で観測した。SmartLab の構造を図 7 に示す。

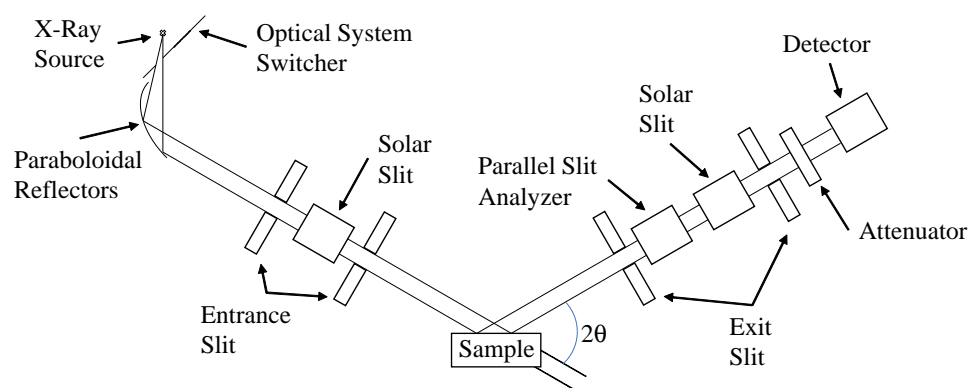


図 7 SmartLab の内部構造.

X 線源から放射された光を NaCl 粉末及び単結晶に照射し、光検出器で回折光を観測した。X 線源のターゲット金属は Cu である。特性 X 線のうち、波長が  $1.543 \text{ \AA}$  の  $K_{\alpha}$  線と、 $1.392 \text{ \AA}$  の  $K_{\beta}$  線を用いた。X 線源から等方的に放射された光を、放物面人工多層膜ミラーを用いて単色化・平行化し、2枚の入射スリットとソーラーズリットを用いて発散を制限した。2枚の出射スリットとソーラーズリットを用いて、試料からの回折光の発散を制限した。アッテネーターを用いて、光検出器に入射する光を減衰させた。PSA(平行スリットアナライザー)を用いて分解能を決定した。 $2\theta$  は入射光と出射光のなす角である。表 2 の実験条件の下、試料ごとに  $2\theta$  を変えてゆき、回折パターンを測定した。試料は NaCl 粉末と NaCl 単結晶の 2 種類である。単結晶試料の寸法を図 8 に示す。

表 2 実験条件.

実験条件	
入射スリット	1 mm
出射スリット	1 mm
ソーラーズリット	0.5 deg
X 線波長	$1.543 \text{ \AA}$ 、 $1.392 \text{ \AA}$

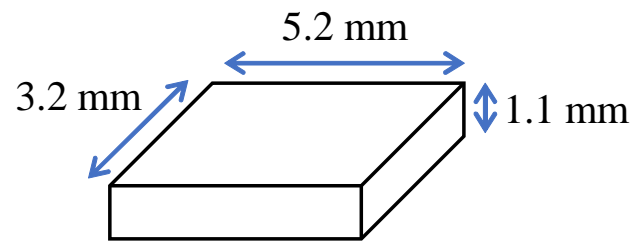


図 8 NaCl 単結晶の寸法.

実験に用いた単結晶は、縦 3.2 mm、横 5.2 mm、高さ 1.1 mm の直方体のものである。この結晶を、最も面積の広い面を下にして試料台に設置した。

## 4 NaCl 粉末及び単結晶の回折パターンの解析

### 4.1 NaCl 粉末

NaCl 粉末における回折パターンを図 9 に示す。

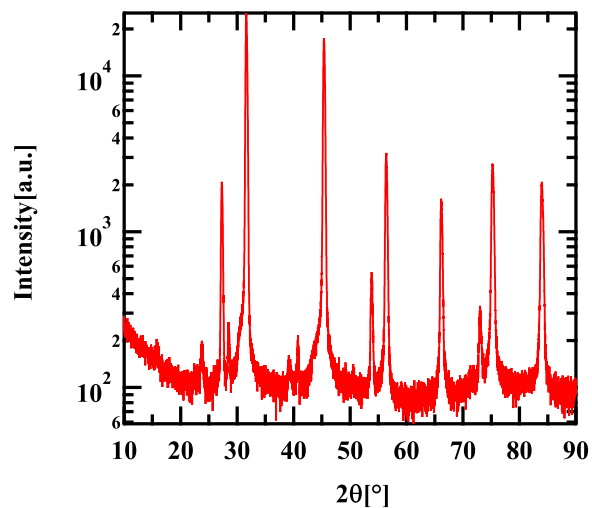


図 9 NaCl 粉末の回折パターン.

横軸は入射光と回折光のなす角、縦軸は回折強度である。グラフから、鋭いピークが複数見られる。これらのピークのうち、頂点における  $2\theta$  が、表 1 の値と近いものだけを抜き出したものを表 3 に示す。

表 3 NaCl 粉末の格子定数.

$2\theta[\text{deg}]$	$2\theta[\text{rad}]$	$G_m$	h	k	l	a
27.306	0.4766	1.9223	1	1	1	5.6583
31.646	0.5523	2.2206	2	0	0	5.6561
45.397	0.7923	3.1427	2	2	0	5.6521
53.828	0.9395	3.6865	3	1	1	5.6500
56.419	0.9847	3.8497	2	2	2	5.6510
66.178	1.1550	4.4462	4	0	0	5.6498
73.041	1.2748	4.8466	3	3	1	5.6480
75.259	1.3135	4.9724	4	2	0	5.6482
83.979	1.4657	5.4484	4	2	2	5.6468

逆格子ベクトルの大きさ  $G_m$  は

$$G_m = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta \quad (23)$$

で計算した。 $\lambda$  は、今回は  $K_\alpha$  線の波長である 1.543 nm を用いた。格子定数  $a$  は、 $G_m$  から

$$a = \frac{2\pi}{G_m} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \quad (24)$$

で計算した。各  $\theta$  における  $a$  の平均をとって、格子定数は

$$a = 5.6511$$

と求まった。

## 4.2 NaCl 単結晶

図 10 に示す。

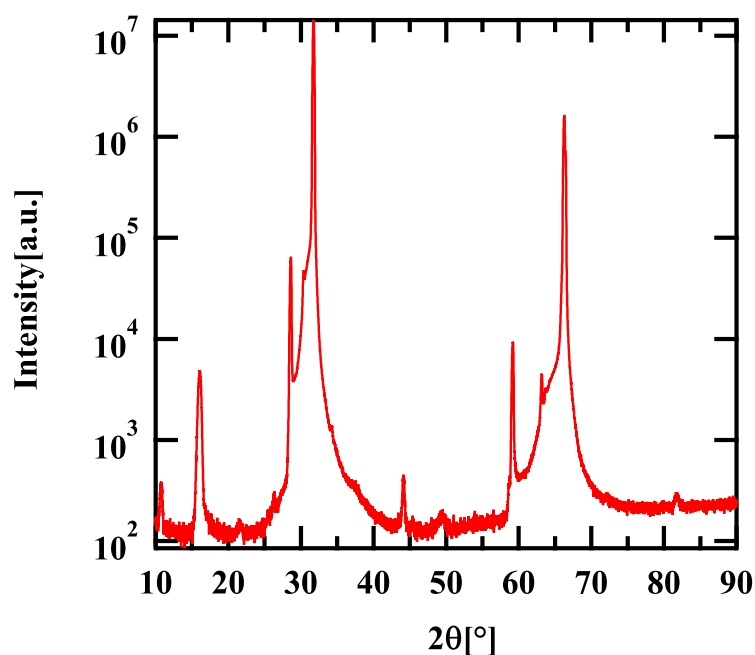


図 10 NaCl 単結晶の回折パターン.

横軸は  $\theta$  の回転角、縦軸は回折強度である。グラフから、鋭いピークが複数見られる。 $2\theta/\theta$  法を用いた単結晶の X 線回折測定では、(001) 面に平行な面での回折しか観測できないため、 $K_\alpha$  線及び  $K_\beta$  線の二つの X 線による回折が観測できる。したがって、どのピークが、どの X 線による回折を示しているのか判断ができない。 $2\theta/\theta$  法を用いた単結晶の X 線回折測定では、(001) 面に平行な面での回折しか観測できないことを利用し、 $(h,k,l)=(0,0,2n)$  となるように回折指数をとり、粉末試料で得た格子定数に近い計算結果が得られるよう、 $2\theta$  を逆算した。その結果を表 4 に示す。

表 4  $2\theta$  の見積もり.

$a$	$\lambda$	$l$	$\theta[\text{rad}]$	$2\theta[\text{deg}]$
5.6511	1.39	2	0.2485	28.478
5.6511	1.54	2	0.2760	31.628
5.6511	1.39	4	0.5143	58.936
5.6511	1.54	4	0.5764	66.053



表 4 から、 $K_\alpha$  線及び  $K_\beta$  線由来の、(0,0,2n) 面による回折角が見積もれた。図 10 のピークのうち、頂点における  $2\theta$  が、表 4 に近いものだけを抜き出したものを表 5 に示す。

表 5 NaCl 単結晶の格子定数.

$2\theta[\text{deg}]$	$2\theta[\text{rad}]$	$G_{m\beta}$	$G_{m\alpha}$	h	k	l	$a_\beta$	$a_\alpha$
28.598	0.4991	2.2317	2.0154	0	0	2	5.6279	6.232
31.739	0.5540	2.4709	2.2313	0	0	2	5.0832	5.6289
59.173	1.0328	4.4614	4.0289	0	0	4	5.6305	6.2350
66.28	1.1568	4.9398	4.4610	0	0	4	5.0852	5.6311

逆格子ベクトルの大きさ  $G_m$  および格子定数  $a$  は、NaCl 粉末と同様の方法で計算した。 $\lambda$  は表 4 のように、 $K_\alpha$  線による回折は 1.543 nm、 $K_\beta$  線による回折は 1.392 nm を用いた。各  $\theta$  における  $a$  の平均をとって、格子定数は

$$a = 5.6296$$

と求まった。

図 5 ににおける  $K_\alpha$  線と  $K_\beta$  線による回折のピークを、直線でつないだものを図 11 に示す。

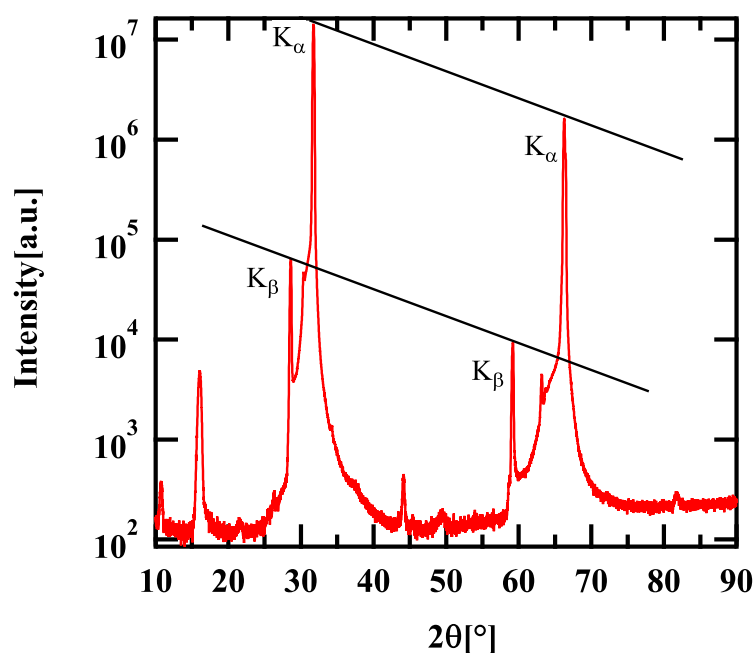


図 11 NaCl 結晶の回折パターン.

片対数グラフにおいて、 $K_\alpha$  線と  $K_\beta$  線による回折のどちらも同じ傾きで回折光強度が減衰していることがわかる。このことについて、逆格子空間における回折を図 12 を用いて考える。

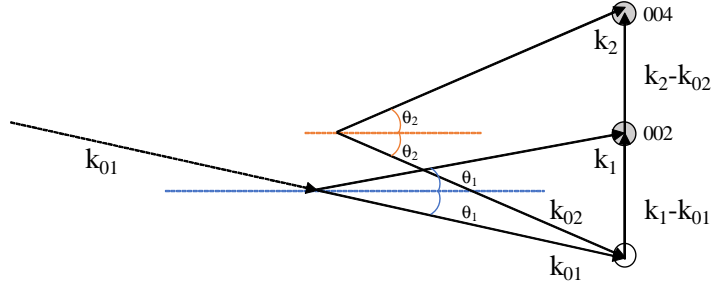


図 12 逆格子空間における回折.

式 (14) より、回折光の強度は  $|f|^2 = |G(\mathbf{K})|^2 |F(\mathbf{K})|^2$  に比例する。今回、 $(h, k, l)$  はすべて偶数であるため、 $F(\mathbf{K})$  は変化しない。図 12 から、回折が観測されるのは  $\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_{01} = \mathbf{G}_{002}$  の時及び  $\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_{02} = \mathbf{G}_{004}$  の時である。 $h = 0, k = 0$  であるため、

$$|G(\mathbf{K})|^2 = \frac{\sin^2(N_c \mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_3/2)}{\sin^2(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_3/2)} \quad (25)$$

となる。この時、 $|G(\mathbf{K})|^2$  の極大値は  $N_c^2$  に比例する。また、図 12 から、 $|\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_{02}| = 2|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_{01}|$  であることがわかる。これは逆格子空間においての、 $\theta_2$  による回折の逆格子間隔が、 $\theta_1$  の場合の 2 倍であることを意味している。この時、回折に携わる結晶の数が  $\frac{1}{2}$  倍となる。したがって、 $\theta_2$  の時の回折光強度は  $\theta_1$  の時の回折光強度の  $\frac{1}{4}$  となる。これは入射 X 線の波長に依存しないため、 $K_\alpha$  線と  $K_\beta$  線のどちらにおいても同じ傾きで回折光強度が減衰する。

## 5 結論

NaCl 結晶の X 線回折パターンを測定し、格子定数を導出した。

## 参考文献

- [1] 無機材料データベース AtomWork NaCl (J. Phys. Soc. Jpn.,1983,52,,3506-3513 )
- [2] 早稲田 嘉夫、松原 栄一郎 X 線構造解析 第 3 版 3 刷 p.35-43,p.131-137