

## 無機固体化学

### 第 8 回 X線回折と結晶構造解析(2006/6/23)

#### 教科書

粉末 X 線解析の実際ーリートベルト法入門、中井泉、泉富士夫編著、朝倉書店、2002

#### 参考

#### X 線回折の基礎：

X 線構造解析、早稻田嘉夫、松原栄一郎著、内田老鶴圃、1998

結晶・準結晶・アモルファス、竹内伸、枝川圭一著、内田老鶴圃、1997

#### 粉末 X 線構造解析プログラム RIETAN2000

<http://homepage.mac.com/fujioizumi/index.html>

## 関係ない話

ウィキペディアフリー百科事典

<http://ja.wikipedia.org/wiki/>

米国型企业統治における役職名

(日本の商法では、会社の代表権を持つのは  
代表取締役。下記の役職は名前だけ)

最高経営責任者(CEO: Chief Executive Officer)

経営全般に対して責任を持つ

会長

最高執行責任者(COO: Chief Operating Officer)

日々の営業に責任を持つ

社長

最高財務責任者(CFO: Chief Financial Officer)

財務部長・財務本部長

最高管理責任者(CAO: Chief Administrative Officer)

経理、総務等の管理部門全体をとりまとめる

最高技術責任者(CTO: Chief Technical? Officer)

最高情報責任者(CIO: Chief Information Officer)

情報や情報技術に関する

情報担当取締役、情報担当理事

最高知識責任者(CKO: Chief Knowledge Officer)

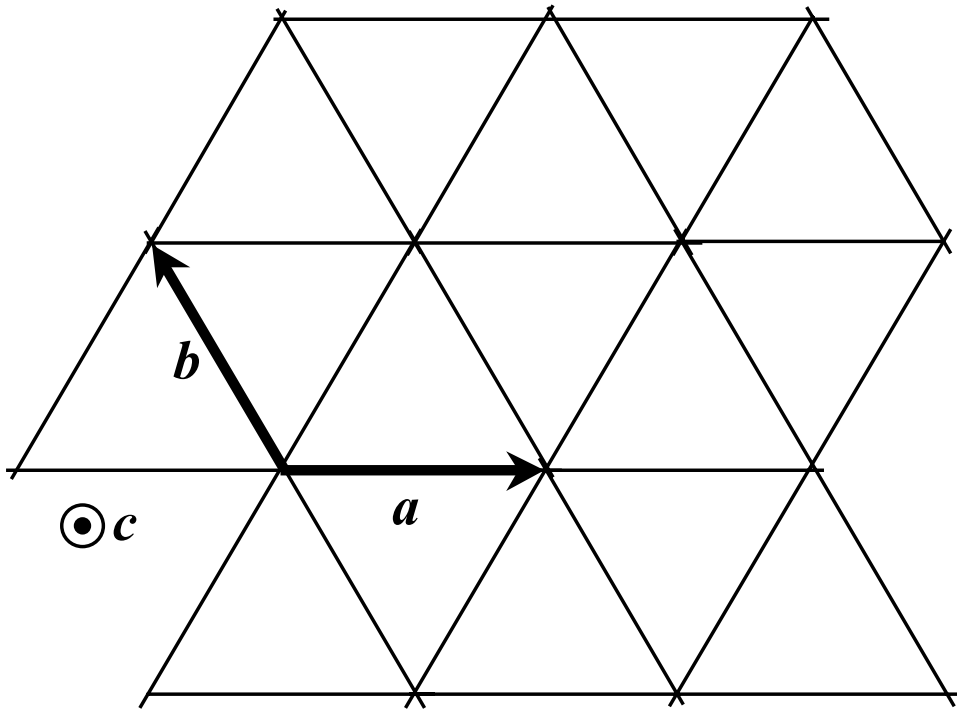
情報だけではなく知識も扱う

最高個人情報保護責任者(CPO: Chief Personal  
information? Officer)

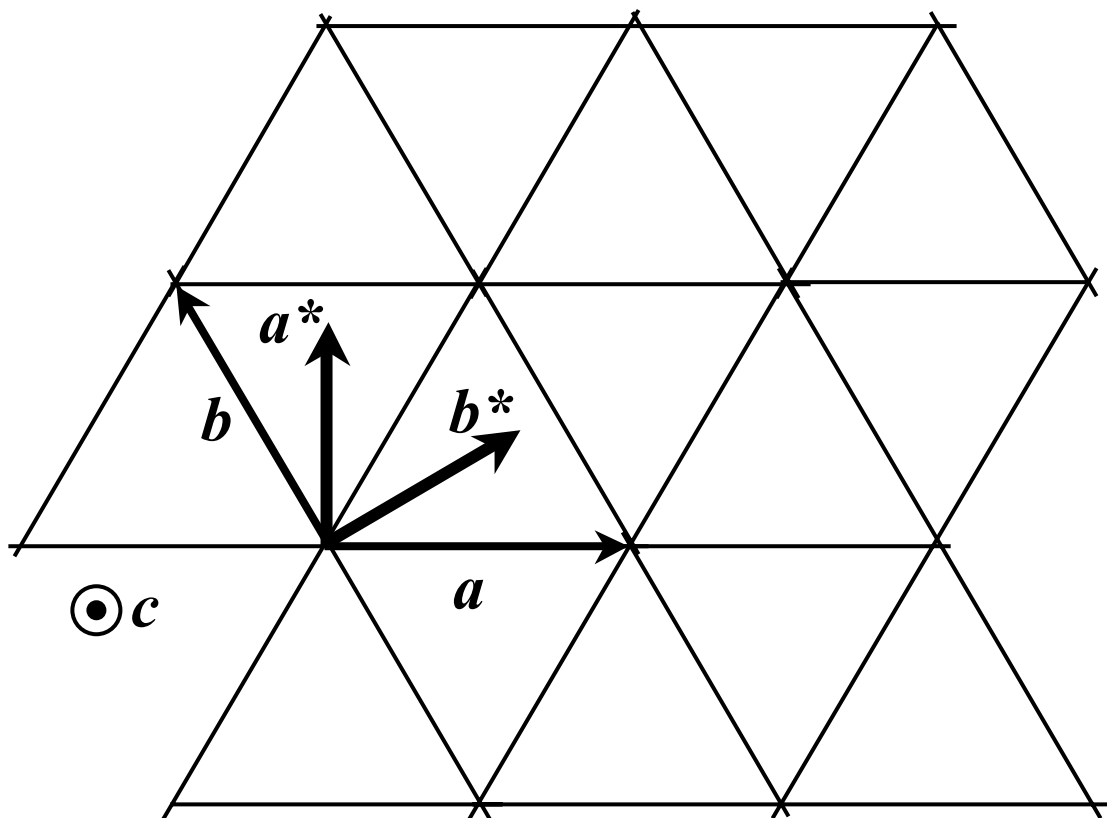
## 第8回講義 レポート課題

次の問いに答えよ

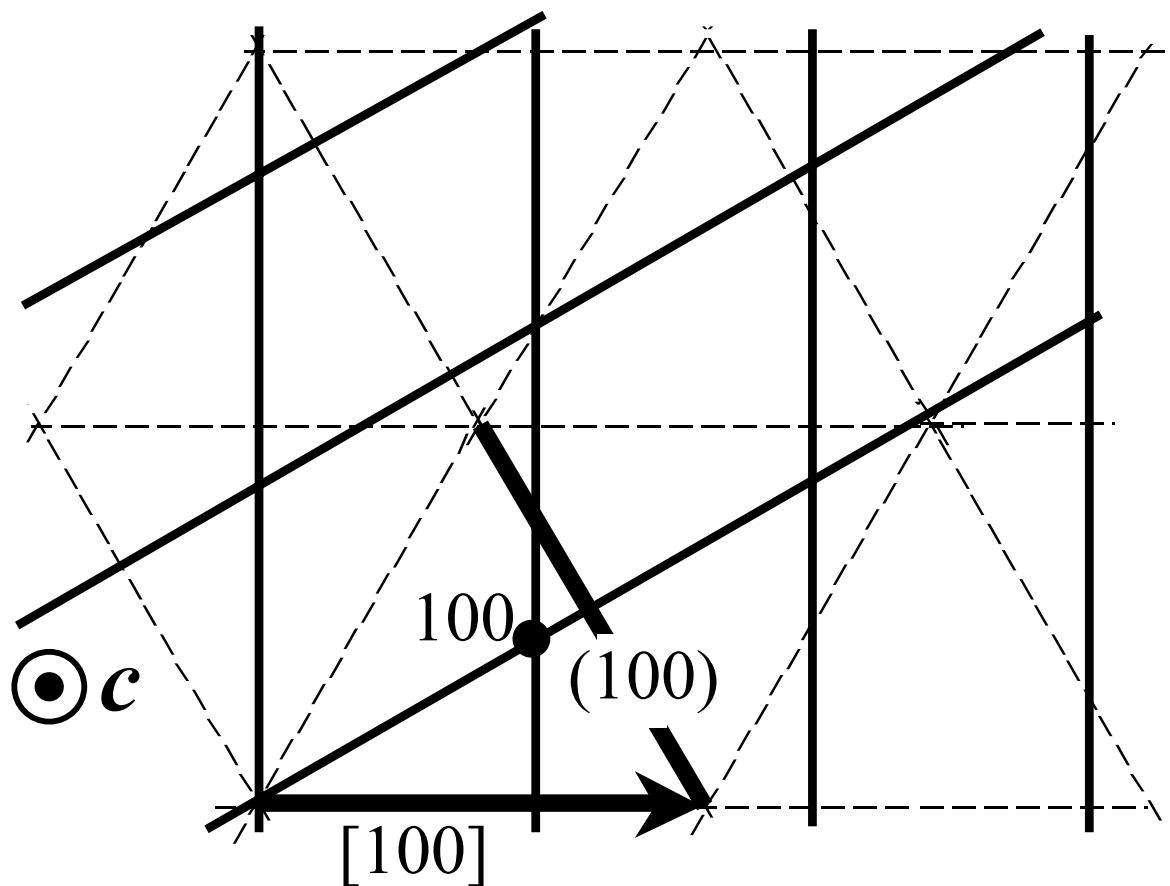
ZnO は六方晶系に属する結晶である。下に、 $c$  軸方向から見た ZnO の格子を  $a$ - $b$  面に投影した図を示す。次の質問に答えよ。



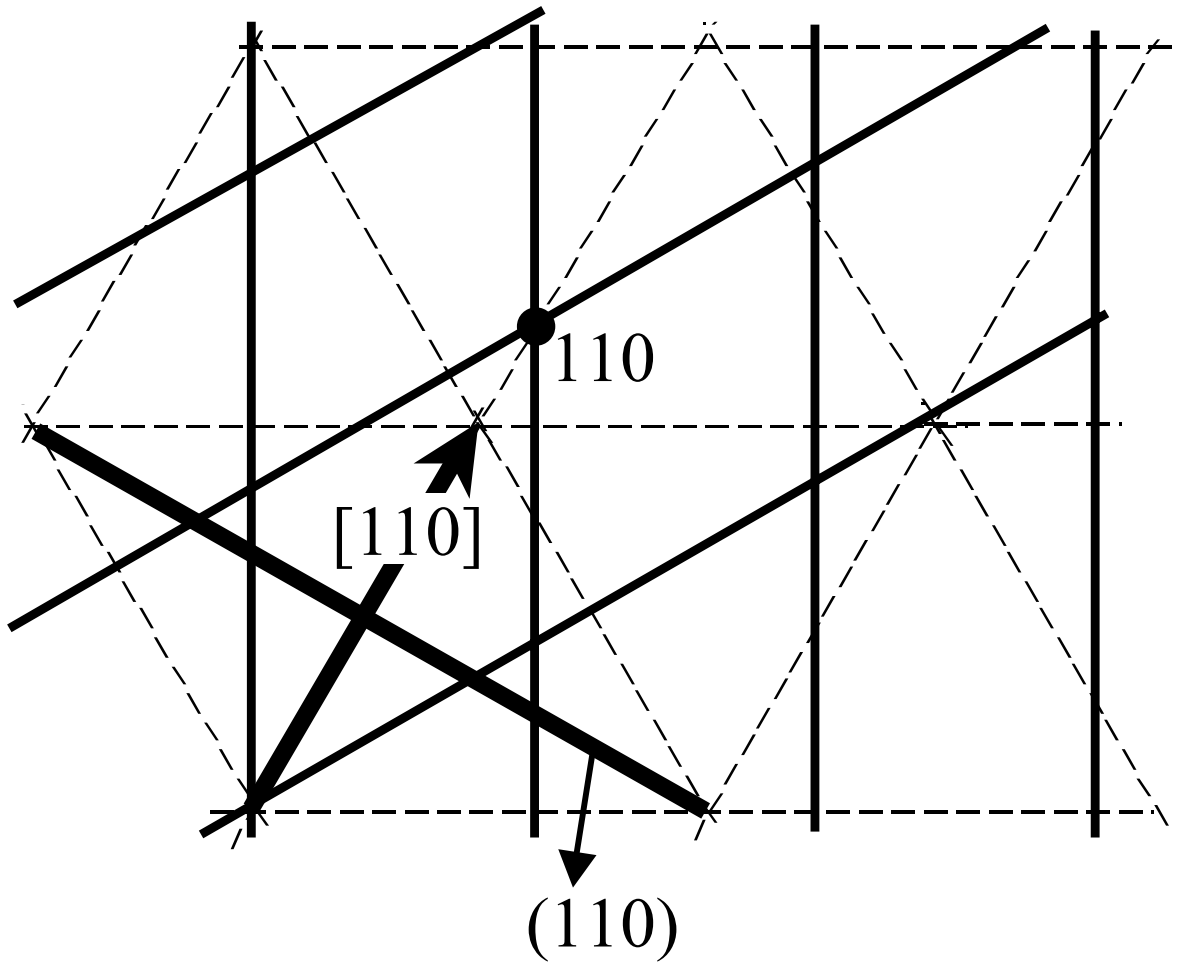
逆格子ベクトルと逆格子を描け。



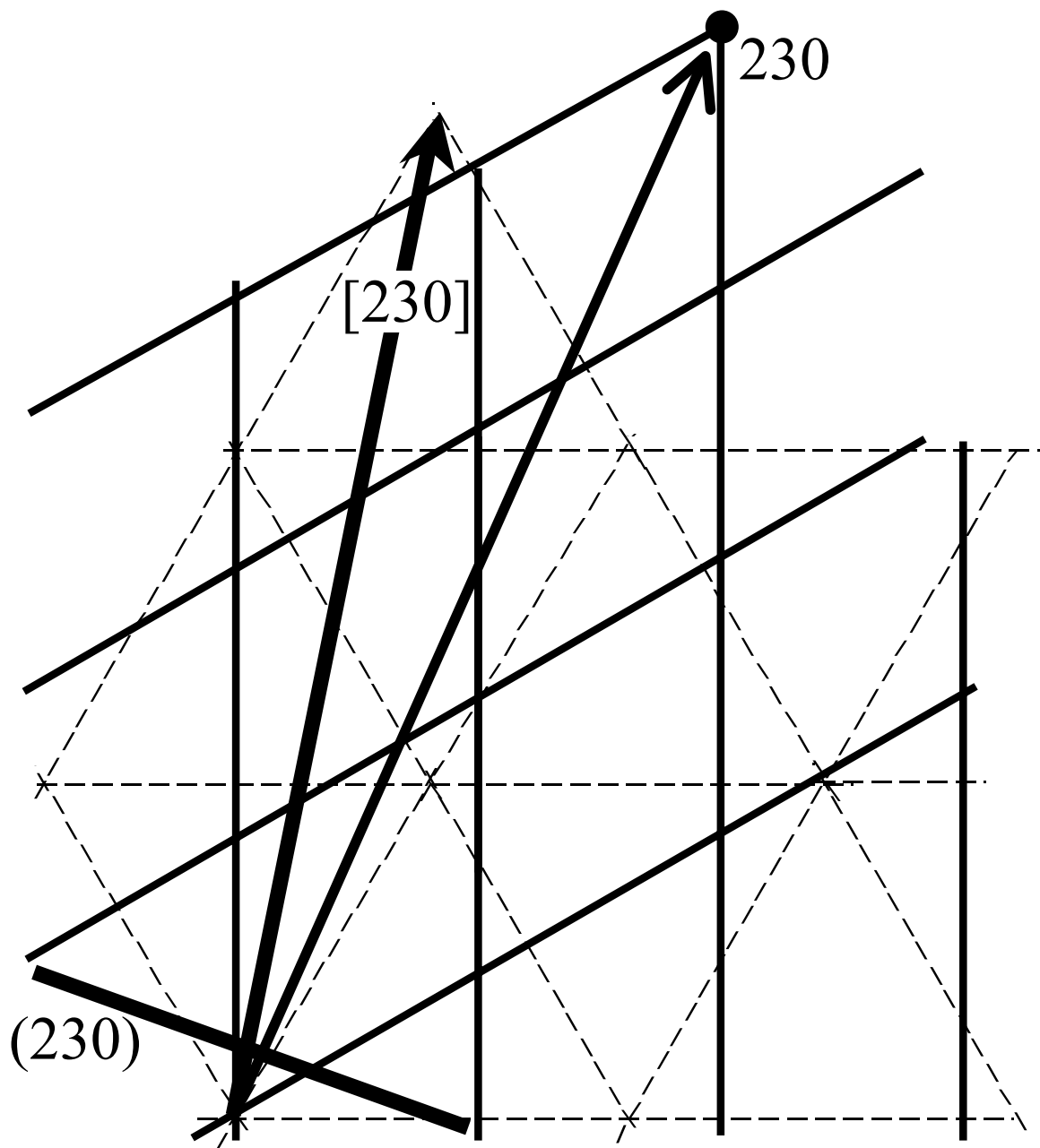
[100]、(100)面、逆格子の 100 点を描け。



[110]、(110)面と逆格子の 110 点を描け。



[230]、(230)面と逆格子の 230 点を描け。



## 質問：部分座標の表示( $0 \leq x < 1$ )について

便利のため、 $-1 \leq x \leq 1$  (あるいはそれ以外でも)使われることがある。

ただし、試験などでは  $0 \leq x < 1$  に直して答えるべき。

## 質問：ヘルマン・モーガン記号の説明

(a) P1 (No.1)：対称要素の無い空間群

P 格子 (単純格子)

主軸(c 軸)の回転対称性がない。

対称性がないから三斜晶。

(b) P2 (No.3)

単純格子

主軸に 2 回軸

2 回軸が一つあるから単斜晶。

(c) C2/m (No.12)

C 格子 (C 一面心格子)

主軸に 2 回軸

主軸の 2 回軸に垂直な鏡映面

2 回軸が一つあるから単斜晶。

(d) P2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub> (No.19)

単純格子

主軸(c 軸)に 2<sub>1</sub> らせん軸

主軸に垂直な独立方向(a 軸)に 2<sub>1</sub> らせん軸

もう一つの独立な軸方向(b 軸)にも 2<sub>1</sub> らせん軸

3つの2回軸/2回らせん軸が共存するのはそれぞれが90度で交わる場合だけ：斜方晶

(e)  $P4/mmm$  (No.123)

単純格子

主軸に4回軸

主軸の4回軸に垂直な鏡映面

主軸に独立な方向(a軸)に垂直な鏡映面

もう一つ独立な方向([110])に垂直な鏡映面

4回軸が一つだけあるから正方晶。

(f)  $R\bar{3}m$  (No.166)

菱面体格子：菱面体晶

主軸([111]方向)に3回回反軸

主軸に独立な方向(垂直方向)に鏡映面

(g)  $Fm\bar{3}$  (No.202)

面心格子

主軸以外に3回回反軸があるので立方晶

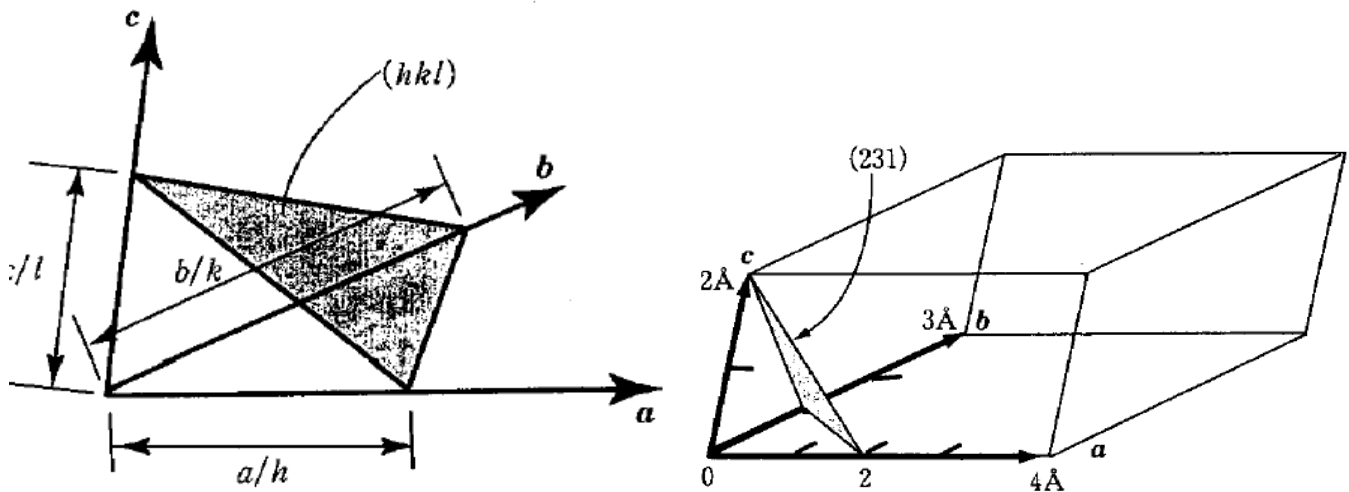
主軸(c軸)を含む鏡映面



# 実験室系の粉末 X 線回折装置のまとめ

- ブラッグ・ブレンターノ集中光学系  
「円周角の定理」を利用して分解能、回折 X 線強度の両方のバランスをとる
- 広く使われている X 線源は  $\text{Cu K}_\alpha$  線
- ギニエ光学系  
湾曲モノクロメータにより  $\text{Cu K}_\beta$  線をカット

## ミラー指数



単位格子の a 軸, b 軸, c 軸と  $a/h$ ,  $b/k$ ,  $c/l$  の座標で交わる面:  $(hkl)$ 面

$(hkl)$ : 面をあらわす

$\{hkl\}$ : 等価な面の集合 (型面) をあらわす

$hkl$ : 回折指数、逆格子点の座標

$[uvw]$ : 実空間の方向や軸

$\langle uvw \rangle$ : 等価な方向や軸の集合 (型方向)

$u, v, w$ : 実格子点の座標

### 3-15. まとめ：逆格子の重要な特徴

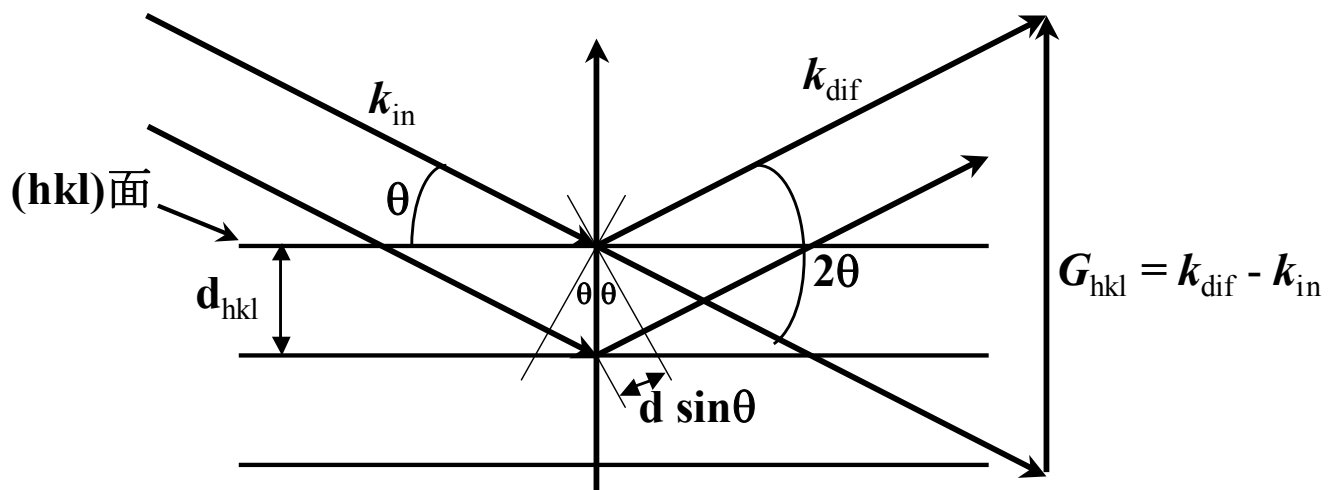
1. 逆格子の基本ベクトルは実格子の基本ベクトルに直交する。
2. 逆格子の長さは実格子は逆数に対応する(厳密には非直交軸角を考慮する必要がある)。
3. 逆格子ベクトル  $\mathbf{G}_{hkl}$  は(hkl)面の法線ベクトルである。

4.  $d_{hkl} = 1/|\mathbf{G}_{hkl}|$

5. ブラッグの回折条件：  $\mathbf{G}_{hkl} = \mathbf{k}_{dif} - \mathbf{k}_{in}$

hkl 回折線は(hkl)面により回折される

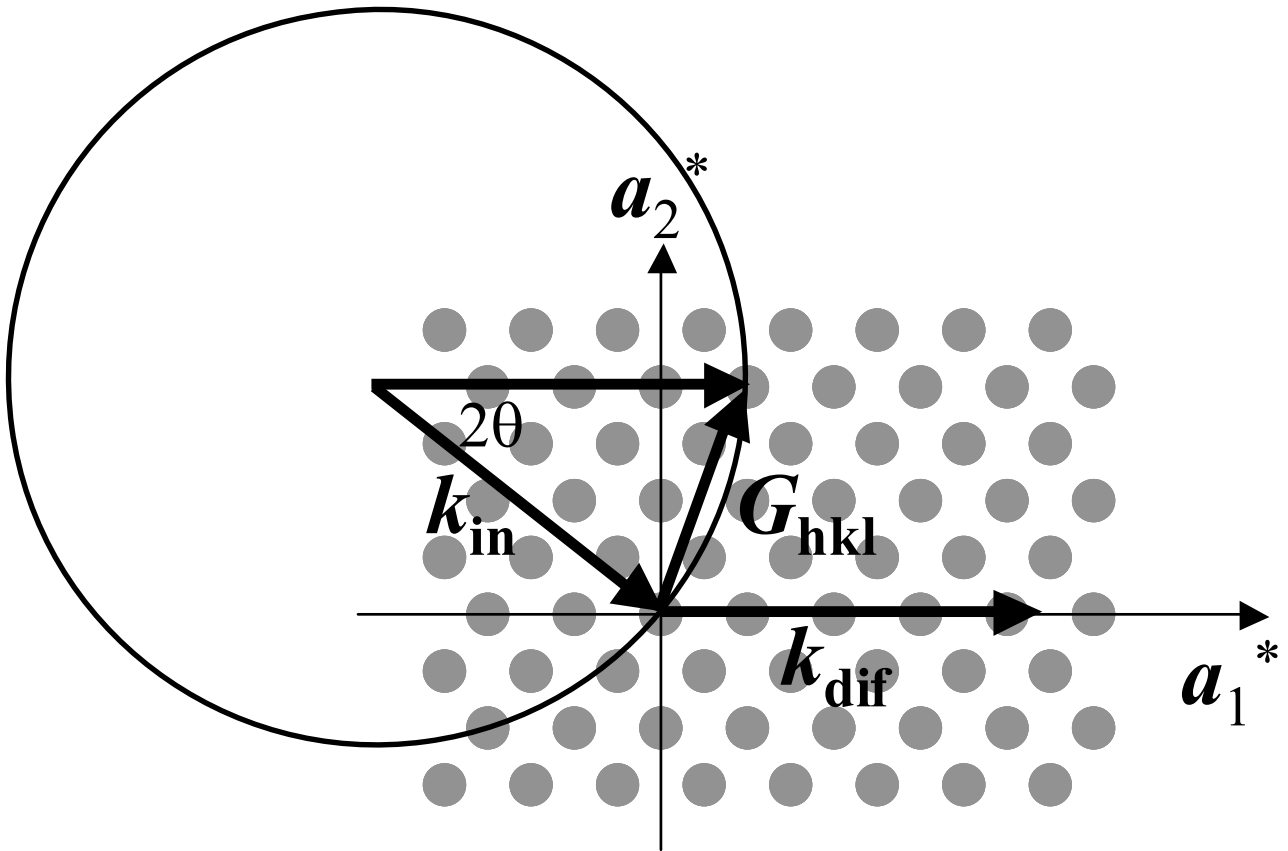
hkl 回折において、 $\mathbf{G}_{hkl}$  は入射 X 線と回折 X 線の 2 分角の方向



6. ブラッグの回折条件は「Ewald の作図法」によって図示できる。

### 3-14. Ewald の作図法

1. 逆格子点（上図の●）を作図する。



2. 入射 X 線のベクトル  $\mathbf{k}_{in}$  を、その終点が逆格子点の原点に一致するように描く。

3.  $\mathbf{k}_{in}$  の始点を中心として、半径  $1/\lambda$  の球を描く。  
「Ewald 球」

4.  $\mathbf{k}_{dif}$  の始点を  $\mathbf{k}_{in}$  の始点とあわせて  $\mathbf{k}_{dif}$  を描くと、その終点は Ewald 球の表面に乗る。

5. ブラッグの回折条件  $\mathbf{G}_{hkl} = \mathbf{k}_{dif} - \mathbf{k}_{in}$  は、このようにしてとった  $\mathbf{k}_{dif}$  の終点が、いずれかの逆格子点に一致することに等価である。

# 回折線が観測されるための条件

- 1) 「試料が単結晶か多結晶か」
- 2) 「試料を固定するか回転させるか」
- 3) 「X線が単色 X線か連続 X線か」

## 1. 粉末 X線回折

異なる向きの単結晶  
単色 X線

## 2. 単結晶カメラ法（ラウエ法）

向きを固定した単結晶  
連続 X線

## 3. 4軸単結晶 X線回折装置

単結晶  
単色 X線  
回転機構を使い、単結晶を回転させる

### 3-17. 線形最少自乗法による格子定数の精密決定

$$1) \quad F = \sum_{h_1, h_2, h_3} \left( \frac{1}{d_{h_1 h_2 h_3}^2} - \sum_{i, j=1, 3} S_{ij} h_i h_j \right)^2$$

を最少にする  $S_{ij}$  を求める。

2)  $(S_{ij})$  の逆行列を求める  $\Rightarrow$  実格子の計量  $(g_{ij})$

3)  $a = \sqrt{g_{11}}$  などの関係から格子定数を求める。

立方：
$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$$

正方：
$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

六方：
$$\frac{1}{d^2} = \frac{4}{3} \left( \frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} \right) + \frac{l^2}{c^2}$$

斜方面体：
$$\frac{1}{d^2} = \frac{(h^2 + k^2 + l^2) \sin^2 \alpha + 2(hk + kl + hl)(\cos^2 \alpha - \cos \alpha)}{a^2(1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha)}$$

斜方：
$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

単斜：
$$\frac{1}{d^2} = \frac{1}{\sin^2 \beta} \left( \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2 \sin^2 \beta}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} - \frac{2hl \cos \beta}{ac} \right)$$

三斜：
$$\frac{1}{d^2} = \frac{1}{V^2} (S_{11} h^2 + S_{22} k^2 + S_{33} l^2 + 2S_{12} hk + 2S_{23} kl + 2S_{13} hl)$$

三斜晶の式において  $V =$  単位格子の体積 (下式参照)

$S_{11} = b^2 c^2 \sin^2 \alpha, = b^* c^*$

$S_{22} = a^2 c^2 \sin^2 \beta, = a^* c^*$

$S_{33} = a^2 b^2 \sin^2 \gamma, = a^* b^*$

$S_{12} = abc^2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma), = a^* b^* c^* \cos \alpha \cos \beta - c^*$

$S_{23} = a^2 bc (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha), = a^* b^* c^* \cos \beta \cos \gamma - a^*$

$S_{13} = ab^2 c (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta), = a^* b^* c^* \cos \gamma \cos \alpha - b^*$

# 結晶構造を決める手順

1. 単結晶を成長させる
2. 単結晶 X 線回折測定を行い、面方位を決める  
Laue 法
3. 晶系、ブラベー格子、空間群を決める  
ワイセンベルグカメラ  
プリセッションカメラ
4. 回折線（スポット）に回折指数  $hkl$  をつける
5. 回折角度から面間隔  $d_{hkl}$  を求める
6.  $hkl$  と  $d_{hkl}$  の関係から、格子定数を決める  
最少自乗法
7. 密度と化学組成を測定し、単位格子中の化学式量を決める
8. 可能な空間群と単位格子中の原子数から、可能な *Wyckoff* 位置を選び出す
  - ・ 場合によっては、この時点でほぼ結晶構造モデルが決まる。
  - ・ その他の多くの場合、ここからがパズル
9. 結晶構造モデルが決まったら、可変な構造パラメータを、測定した構造因子  $|F_{hkl}|^2$  に一致するように精密化する
10. 場合によっては、Fourier 法、MEM 法により

電子密度を計算し、実測値との比較を行いながら、「より確からしい」結晶構造を決定していく

## 前回の課題

$\text{Al}_2\text{O}_3$  の結晶構造

空間群： $R\bar{3}c$

晶系：菱面体晶

格子定数： $a = 0.512 \text{ nm}$ ,  $\alpha = 55.28^\circ$

原子の種類、部分座標( $x, y, z$ )

$\text{Al}$      $0.355$      $0.355$      $0.355$

$\text{O}$      $0.553$      $-0.053$      $0.25$

- ア) 菱面体格子の単位胞体積を求めよ。
- イ)  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  の密度を調べよ。
- ウ) 菱面体格子の単位胞には  $\text{Al}_2\text{O}_3$  の化学式量がいくつ含まれているか。
- エ)  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  の  $\text{Al}$ ,  $\text{O}$  イオンはどの Wyckoff 位置に属するか。

## Positions

Multiplicity,  
Wyckoff letter,  
Site symmetry

## Coordinates

12	<i>f</i>	1	(1) $x, y, z$	(2) $z, x, y$	(3) $y, z, x$
			(4) $\bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	(5) $\bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}$	(6) $\bar{z} + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}$
			(7) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$	(8) $\bar{z}, \bar{x}, \bar{y}$	(9) $\bar{y}, \bar{z}, \bar{x}$
			(10) $y + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$	(11) $x + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}$	(12) $z + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}$
6	<i>e</i>	.2	$x, \bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, x, \bar{x} + \frac{1}{2}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, x$
			$\bar{x}, x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \bar{x}, x + \frac{1}{2}$	$x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{x}$
6	<i>d</i>	$\bar{1}$	$\frac{1}{2}, 0, 0$	$0, \frac{1}{2}, 0$	$0, 0, \frac{1}{2}$
			$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$
4	<i>c</i>	3.	$x, x, x$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \bar{x}, \bar{x}$
			$x + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}$		
2	<i>b</i>	$\bar{3}$ .	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	
2	<i>a</i>	32	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	



### 3-17. 電子による X 線の散乱

X 線：電磁波

電場によって電子を強制振動

点 O に電荷  $e$ 、質量  $m$  の粒子

$z$  方向に電場偏光した電磁波

$$z = -\frac{e}{m\omega^2} E_0 \cos(\omega t + \delta) = -\frac{e}{m\omega^2} E$$

⇒ 電子の振動運動によって電磁波を放射  
(双極子放射)

点 O から距離  $R$

$z$  軸と OP のなす角  $\phi$  の点 P

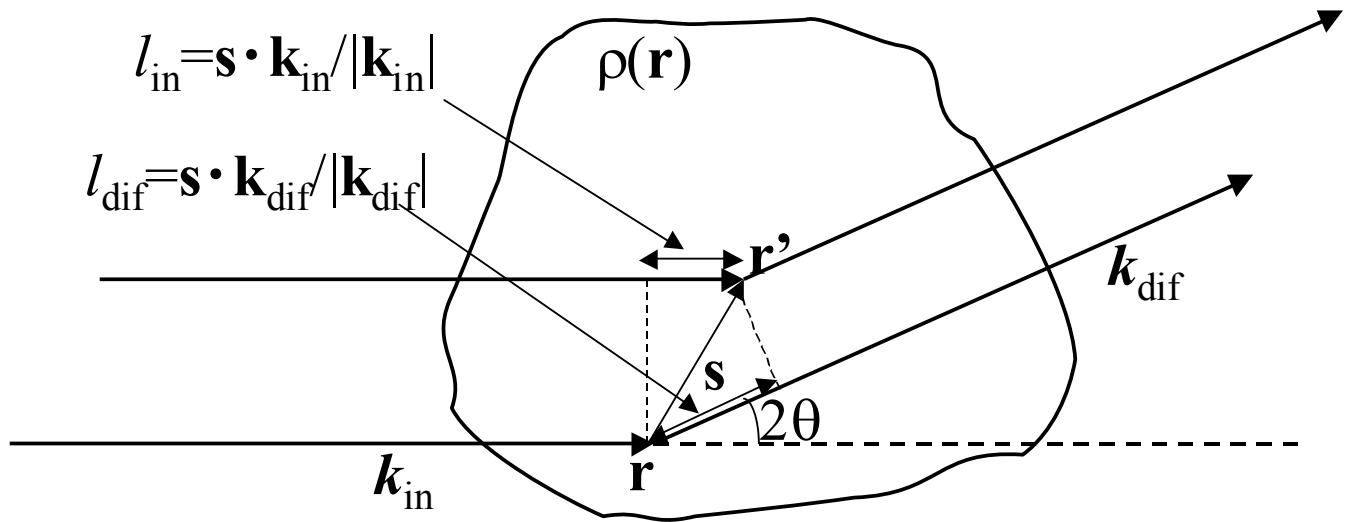
$$I_{rad} = I_{in0} \left( \frac{\mu_0}{4\pi} \right)^2 \left( \frac{e^2 \sin \phi}{m R} \right)^2$$

「トムソン散乱」

※ X 線は主に電子によって散乱される

<=> 非弾性散乱 (コンプトン散乱等)

### 3-18. 電子の集合による X 線の散乱



光路差  $\Delta$

$$\Delta = l_{\text{dif}} - l_{\text{in}} = \mathbf{k}_{\text{dif}} \cdot \mathbf{s} / |\mathbf{k}_{\text{dif}}| - \mathbf{k}_{\text{in}} \cdot \mathbf{s} / |\mathbf{k}_{\text{in}}|$$

位相差  $\delta$  ( $|\mathbf{k}_{\text{in}}| = |\mathbf{k}_{\text{dif}}| = 1/\lambda$ )

$$\delta = 2\pi (\mathbf{k}_{\text{dif}} - \mathbf{k}_{\text{in}}) \cdot \mathbf{s}$$

散乱 X 線の強度は電子密度に比例する

$$E_{\text{dif}} = \int \rho(\mathbf{r}) \exp\{i(\omega t + \delta(\mathbf{s}))\} d\tau = F \exp(i\omega t)$$

$$F = \int \rho(\mathbf{r}) \exp(i\delta(\mathbf{s})) d\tau$$

F : 「構造因子」

散乱 X 線の強度

$$I_{\text{dif}} \propto E_{\text{dif}} E_{\text{dif}}^* = |F|^2$$

干渉は2つの波の相対的な関係だけが問題：

$\mathbf{s} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}$  で  $\mathbf{r}$  を原点に固定する

散乱ベクトル  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_{\text{dif}} - \mathbf{k}_{\text{in}}$  を使う

$$F(\mathbf{k}) = \int \rho(\mathbf{r}) \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d\tau$$

### 3-19. 原子による X 線の散乱

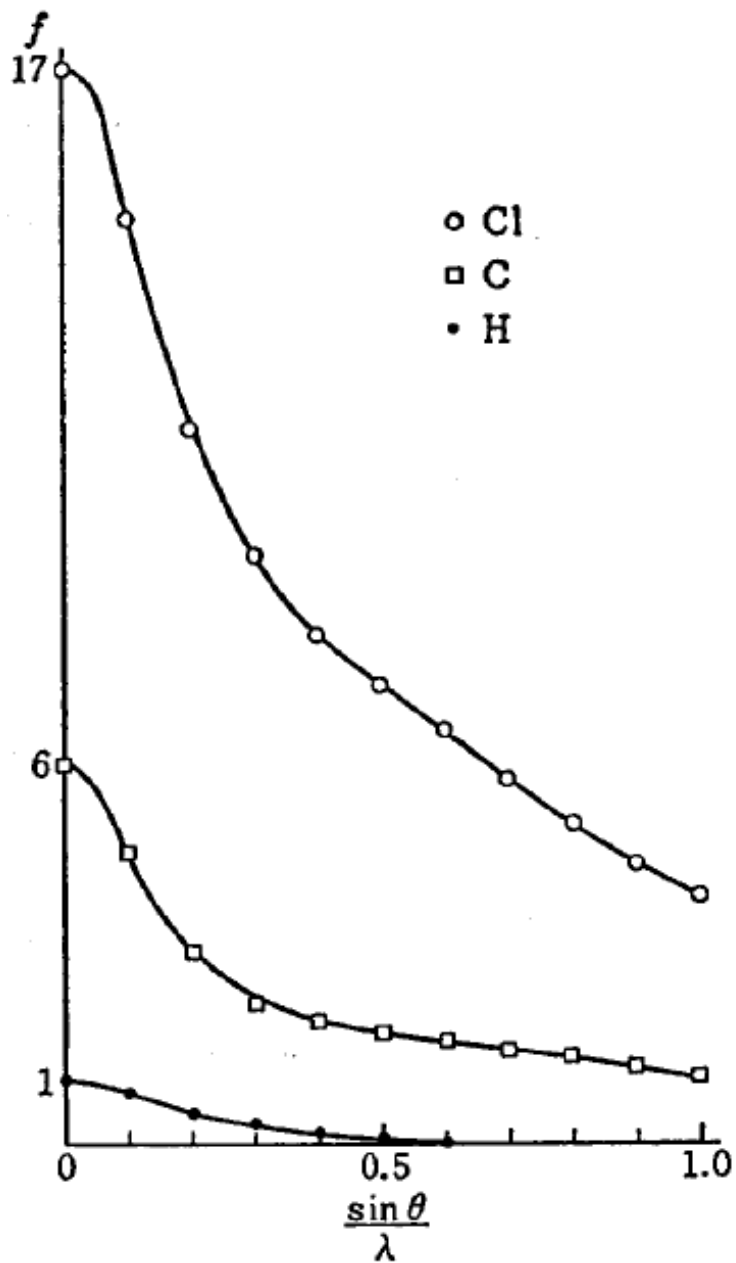
原子、イオンを球形とする

電子密度は中心からの距離  $r$  だけの関数  $\rho_{\text{atom}}(\mathbf{r})$

$$\begin{aligned} f(s) &= \int \rho_{\text{atom}}(\mathbf{r}) \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d\tau \\ &= 4\pi \int_0^\infty r^2 \rho_{\text{atom}}(r) \exp(sr) / (sr) dr \end{aligned}$$

「原子散乱因子」

- $f(s)$  は実数（異常分散を無視）
- $k$  が大きくなると  $f(k)$  は急激に小さくなる
- $f(0)$  は原子・イオンが持つ全電子数に等しい  
例： $\text{K}^+$  イオンと  $\text{Cl}^-$  イオンは X 線的にはほぼ同じイオンのように見える。



(a) 原子構造因子の例

- 回折現象を扱う場合には、 $\sin \theta / \lambda$  を変数とすることで、X 線の波長や回折角といった測定系に依存する量が出てこなくなる

水素様原子の場合：

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^2}} \exp(-r/a_0)$$

$$f^H(r) = \frac{1}{\left(1 + 4\pi^2 a_0^2 (\sin \theta / \lambda)^2\right)^2}$$

フーリエ変換 (Fourier transformation)

定義： $f^*(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp(ikx) dx$

$$f(x) = \exp\left[-(x/w)^2\right]$$

のフーリエ変換を考える

$$f^*(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-(1/w)^2(x - iw^2k/2)^2 - k^2w^2/4\right] dx \propto \exp(-k^2w^2/4)$$

$$f^*(k) \exp(-k^2w^2/4)$$

フーリエ変換の特徴

- ・ 変数の次元が逆数になる ( $\exp(i\omega t)$ の指数部  $\omega t$ は無次元だから)

- $x$  について広がった関数のフーリエ変換は  $k$  について狭い関数になる  
幅  $\Delta x=w$  が、 $\Delta k=2/w$  になる
- $x$  について狭い範囲の情報は大きい  $k$  の  $f^*(k)$  に、 $x$  について広い範囲の情報は小さい  $k$  の  $f^*(k)$  に反映される。

### 3-20. 単位格子による X 線の散乱

単位格子中の電子密度  $\rho_{\text{lat}}(\mathbf{r})$

構成原子  $i$  の電子密度  $\rho_i(\mathbf{r})$

$$\rho_{\text{lat}}(\mathbf{r}) = \sum \rho_i(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$$

$$\begin{aligned} F(\mathbf{k}) &= \int \rho_{\text{lat}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d\tau \\ &= \sum \int \rho_i(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \exp(2\pi i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)) \exp(2\pi i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i) d\tau \end{aligned}$$

$$F(\mathbf{k}) = \sum f_i(k) \exp(2\pi i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i)$$

ブラッグの回折条件  $\mathbf{k} = \mathbf{G}_{hkl}$

$$F_{hkl} = \sum f_i(k) \exp(2\pi i\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{r}_i)$$

$$\mathbf{G}_{hkl} = h\mathbf{a}_1^* + k\mathbf{a}_2^* + l\mathbf{a}_3^*$$

$$\mathbf{r}_i = x_i\mathbf{a}_1 + y_i\mathbf{a}_2 + z_i\mathbf{a}_3$$

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j^* = \delta_{ij}$$

$$\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{r}_i = hx_i + ky_i + lz_i$$

$$F_{hkl} = \sum f_i(k) \exp(2\pi i(hx_i + ky_i + lz_i))$$

$F_{hkl}$  : 「結晶構造因子」

※ 結晶構造因子は、単位格子中の原子の内部座標だけで決まる

※ 結晶構造因子は、回折指数  $hkl$  に対して定まる

※  $F(\mathbf{k})=F(-\mathbf{k})$

実格子に反転対称性が無くても、逆格子は反転対称性が常にある：ラウエ群

ただし、異常分散が無視できない場合には、回折パターンは中心対称でなくなる。

※  $F_{hkl}$ 、つまり回折強度に影響するのは、原子座標の  $G_{hkl}$  方向の成分だけである。

※  $G_{hkl}$  方向の並進を含む対称要素により消滅側が発生する



### 3-21. 有限な数の単位格子からの X 線の散乱 : Laue 関数

単位格子が散乱ベクトル方向に  $N$  個並んだときの散乱の式

電子密度  $\rho_{crystal}$  : 単位格子の電子密度  $\rho_{lat}$

$$\rho_{crystal}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1, N} \rho_{lat}(\mathbf{r} - \mathbf{t}_i)$$

$$\begin{aligned} F(\mathbf{G}_{hkl}) &= \int \rho_{crystal}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{r}) d\tau \\ &= \sum \int \rho_{lattice}(\mathbf{r} - \mathbf{t}_i) \exp(2\pi i \mathbf{G}_{hkl} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{t}_i)) \exp(2\pi i \mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{t}_i) d\tau \end{aligned}$$

$$F(\mathbf{G}_{hkl}) = F_{hkl} \sum_{i=1, n} \exp(2\pi i \mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{t}_i)$$

$$= F_{hkl} \frac{1 - \exp(2\pi i N \mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{t})}{1 - \exp(2\pi i \mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{t})}$$

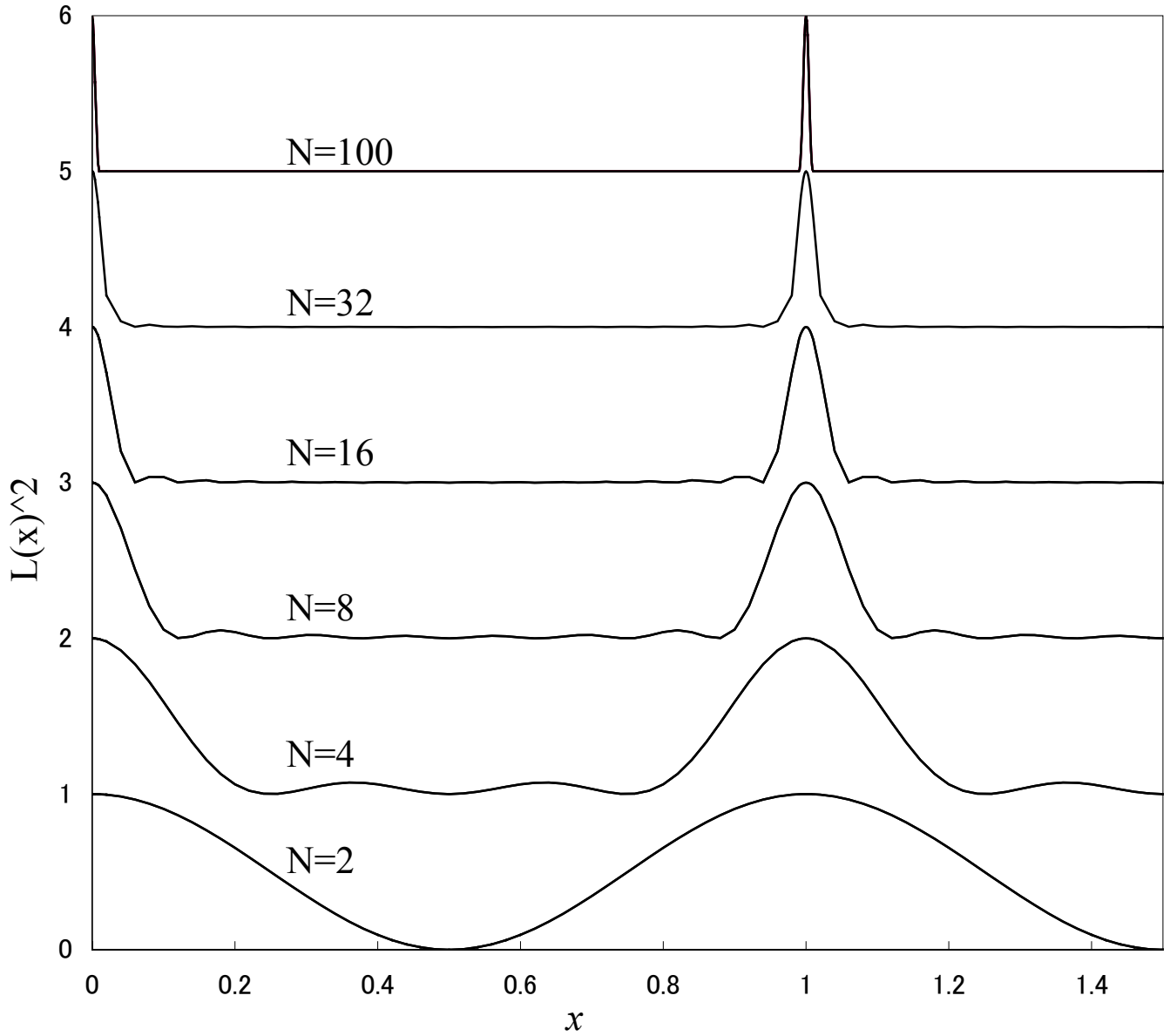
$$= F_{hkl} \frac{\sin(\pi N \mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{t})}{\sin(\pi \mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{t})}$$

最後の項を「Laue 関数」と呼ぶ

\*  $t = a, b, c$

\*  $h, k, l$  が整数のとき、鋭い回折線が観測される

$$|L(x)|^2 = \left( \frac{\sin(\pi Nx)}{\sin(\pi x)} \right)^2$$



### 3-22. 複合格子による X 線の回折：消滅則

代表的な格子の結晶構造因子

$$F_{hkl} = \sum f_i(k) \exp(2\pi i(hx_i + ky_i + lz_i))$$

- (i) 単純格子：(0,0,0)に原子散乱因子  $f$  を持つ原子だけがある場合

$$F_{hkl} = f$$

- (ii) 体心立方格子：(0,0,0)と(1/2,1/2,1/2)に原子散乱因子  $f$  を持つ原子だけがある場合

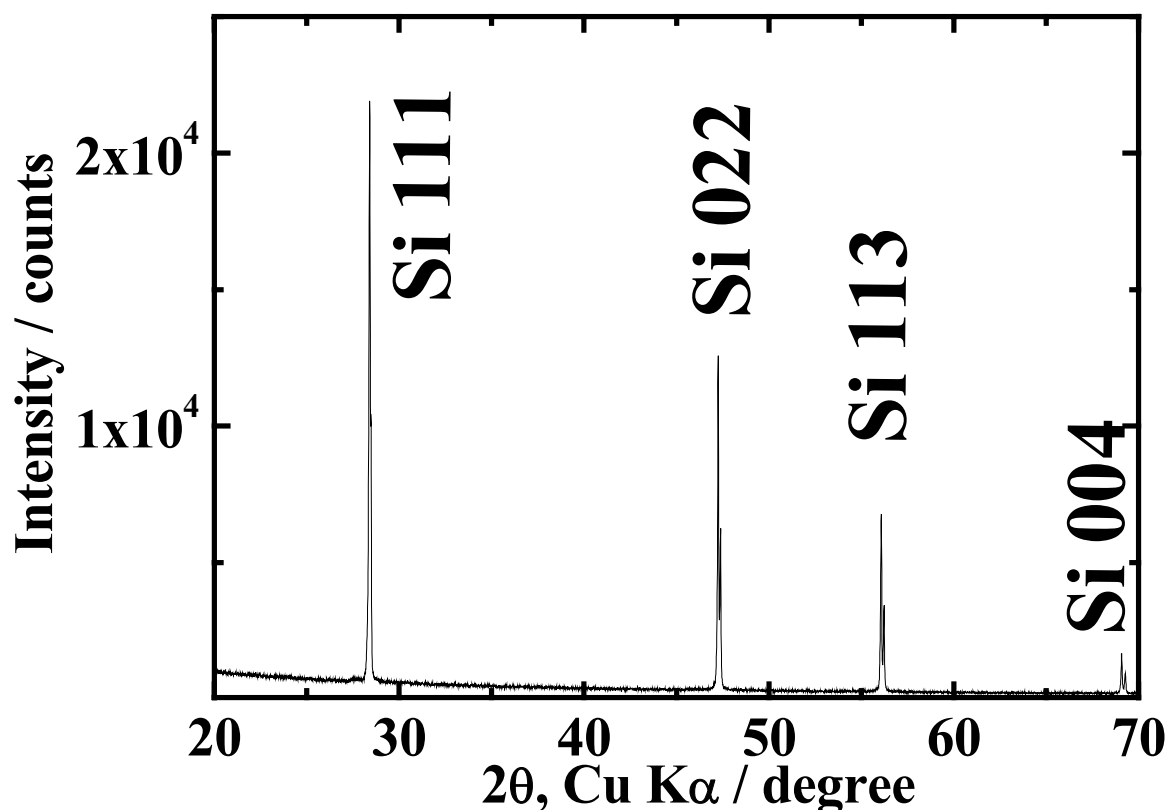
$$F_{hkl} = f [1 + \exp(\pi i(h + k + l))]$$

$h+k+l$  が偶数のときのみ回折線が出る

- (iii) 面心立方格子：(0,0,0), (1/2,1/2,0), (1/2,0,1/2), (0,1/2,1/2)に原子散乱因子  $f$  を持つ原子だけがある場合、

$$F_{hkl} = f [1 + \exp(\pi i(h + k)) + \exp(\pi i(h + l)) + \exp(\pi i(k + l))]$$

$h,k,l$  が非混合指数であるときのみ回折線が出る



## Si の XRD 図形

$l$  が 4 の倍数の  $00l$  回折線のみ観測  
非混合指数が出ていない

(iv) 岩塩型構造： NaCl の場合、 $\text{Na}^+$  と  $\text{Cl}^-$  がそれぞれ面心立方格子の位置に存在し、それぞれの位置が  $(1/2, 1/2, 1/2)$  ずれているので、

$$F_{hkl} = (f_{\text{Na}} + f_{\text{Cl}} \exp(\pi i(h + k + l))) [1 + \exp(\pi i(h + k)) + \exp(\pi i(h + l)) + \exp(\pi i(k + l))]$$

FCC 消滅則を含む

$h+k+l$  が奇数：  $F_{hkl}$  は  $f_{\text{Na}} - f_{\text{Cl}}$  に比例

