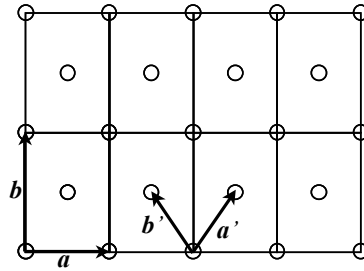


第9回講義レポート課題に関して

2次元面心直方格子について次の問いに答えよ。



(ア) 結晶構造因子 F_{hk} を求めよ

$$2 \text{次元での結晶構造因子: } F_{hk} = \sum f_i(k) \exp(2\pi i(hx_i + ky_i))$$

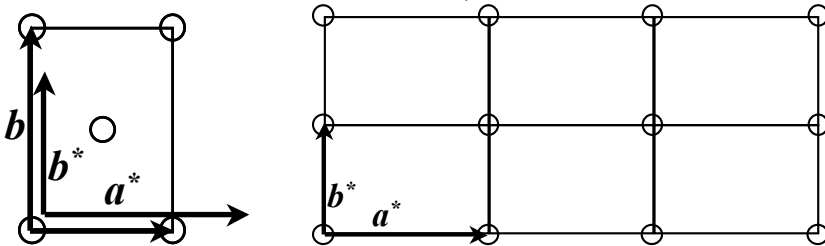
(0,0)と(1/2,1/2)に原子散乱因子 f を持った原子がある。

$$\text{結晶構造因子 } F_{hk} = f[1 + \exp(\pi i(h+k))]$$

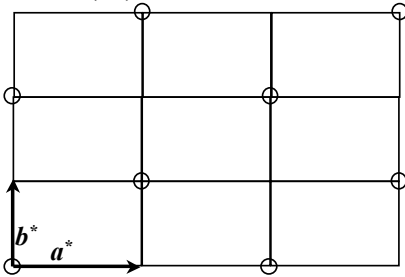
(イ) F_{hk} がゼロになる条件 (消滅則) を求めよ

$$h+k=2n+1 \text{ の時, } F_{hk} = 0$$

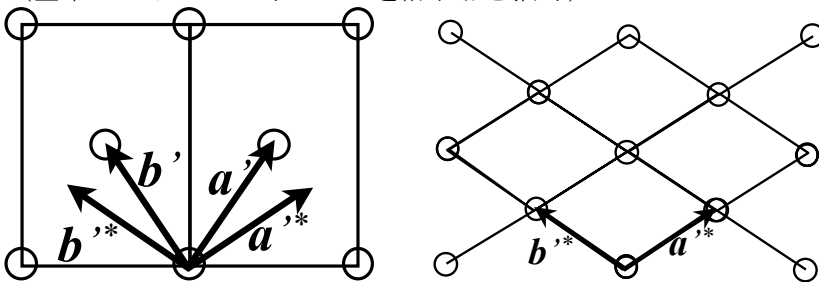
(ウ) ブラベー格子の基本ベクトル a, b から逆格子をつくれ (基本ベクトルといくつかの逆格子点を描く)



(エ) (ウ)の逆格子点のうち、消滅則で $F_{hk}=0$ となる逆格子点を消した図をつくれ



(オ) 基本単位格子(格子点をひとつしか含まない)の基本ベクトル a', b' から逆格子をつくれ (基本ベクトルといくつかの逆格子点を描く)



第8回講義レポート課題に関して

* 座標: 基本ベクトルが a_x, a_y, a_z のとき、ある点 P の位置ベクトル R が

$$R = xa_x + ya_y + za_z$$

と表されるとき、 (x, y, z) を点 P の座標という。

* 実格子の座標 (u, v, w)

単位格子の基本ベクトルを a, b, c とするとき、単位格子の原点から測ったある点までの位置ベクトル R が

$$R = ua + vb + wc$$

と表されるとき、 (u, v, w) を座標という。

* 内部座標: 格子の並進対称性から、すべての原子の座標は u, v, w は 0~1 の範囲の数値で表すことができ、これを内部座標という。

* 実格子における方位 $[uvw]$

$ua + vb + wc$ のベクトルの示す方位を $[uvw]$ で表す。この際、方位を表すだけであればベクトルの長さは

任意に取れるため、 u, v, w がもっとも単純な整数になるように選ぶ。

* 逆格子の座標 hkl

逆格子において、逆格子の基本ベクトルを a^*, b^*, c^* とするとき、逆格子の原点からのベクトルが R^* が

$$R^* = ha^* + kb^* + lc^*$$

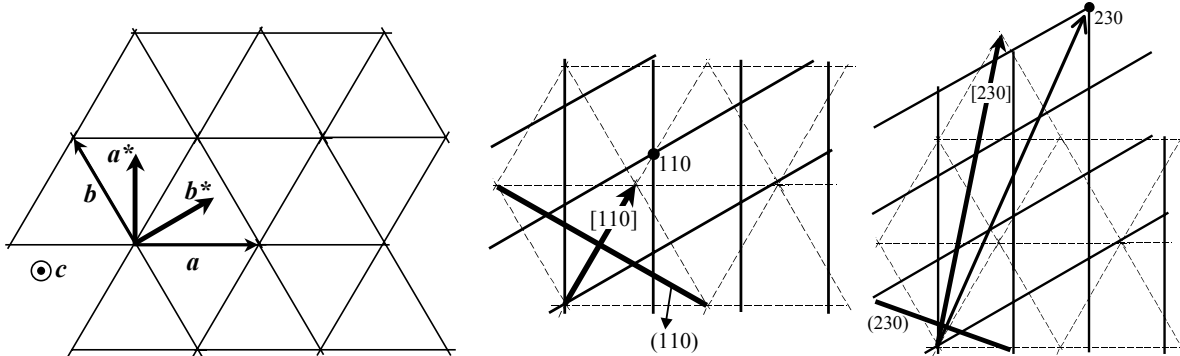
と表されるとき、 hkl を逆格子の位置 (座標) という。

* 逆格子における方位

逆格子において、 $ha^* + kb^* + lc^*$ が示す方位。原点から hkl 点までの逆格子ベクトル G_{hkl} と同じ。

* ミラー面 (hkl)

面が単位格子の基本三軸— a 軸, b 軸, c 軸—と交わる点の座標をそれぞれ $(a/h, b/k, c/l)$ とし、この面を (hkl) と書く。



前回のまとめ

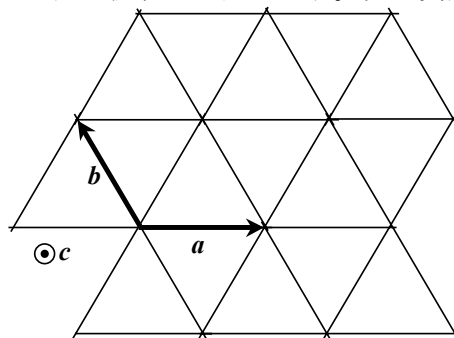
- 1) X線は主に電子によって散乱される。
- 2) X線の干渉強度は電子密度のフーリエ変換で表される。
- 3) 電子密度を球形の原子の電子密度の和に分解することができる。
その結果、原子の電子密度のフーリエ変換として「原子散乱因子 $f(\sin \theta / \lambda)$ 」が定義される。
原子散乱因子は、一つの電子によってどの角度にどれだけ X線が散乱されやすいかを示す因子で、電子数が多くなるほど大きくなる。
- 4) 単位格子一つによってどれだけ X線が散乱されやすいかを示す因子が結晶構造因子 F_{hkl} 。
結晶構造因子は原子散乱因子と原子の部分座標、回折指数 hkl によって決まる。
複合格子などでは、特定の関係を持つ hkl の回折指数の結晶構造因子 F_{hkl} が零になる。これを「消滅則という」
- 5) 消滅則から空間群を限定できる。
- 6) 単位格子が周期的に並んでいることから、 h, k, l が整数のときのみ、鋭い回折線が観測される。
- 7) 回折強度は $|F_{hkl}|^2$ に比例する。そのため、 hkl 回折線間の相対強度は、主に単位格子内の構造 (原子の種類と部分座標) できまる。
- 8) 回折角度は格子定数だけで決まる。
- 9) F_{hkl} を知ることができれば、結晶構造 (原子の種類と部分座標) を知ることができる (結晶構造解析)。
- 10) F_{hkl} に対する原子の寄与は、重い原子ほど大きい (原子散乱因子が大きい)。
そのため、X線結晶構造解析では、軽い原子の位置を決めることは難しい。
- 11) 原子番号が近い原子・イオンは、X線回折では同じように見える。

KCl で奇数指数の回折線が出ない理由

第10回講義 レポート課題

1. 次の問いに答えよ

c 軸方向から見た六方晶の格子を $a-b$ 面に投影した図を示す。次の質問に答えよ。



(ア) $[\bar{1}20]$ ベクトル、 $(\bar{1}20)$ 面と逆格子の $\bar{1}20$ 点を描け。

2. 講義に関する質問、疑問、感想、要望など