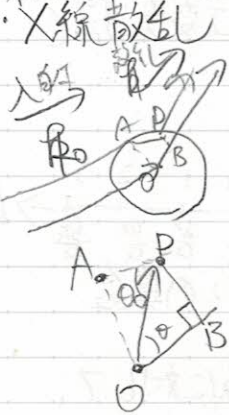


・ブリューアンゾーン、逆格子空間における基本単位胞
 実空間のメッシュ=サイト胞と等しい

・結晶による回折



入射・散乱で波数ベクトル k の大きさは変わらない
 向きだけが変わる
 原子中心から r だけ離れた P にある電子によって
 X線が散乱されると、中心 O で散乱される場合の光路差は

$$\frac{2\pi}{\lambda} (AP - OB) = \frac{2\pi}{\lambda} OP (\cos\theta_0 - \cos\theta) = \frac{2\pi}{\lambda} r (\cos\theta_0 - \cos\theta)$$

入射・散乱の波数ベクトル k を用いて $\frac{2\pi}{\lambda} (AP - OB) = (k - k_0) \cdot r$
 散乱ベクトル $k = k - k_0$ を定義して、 $k \cdot r$ と書けるようになる。

位置ベクトル r の地点の電子分布密度を $\rho(r)$ とすると、

X線の振幅 E は $E \propto \int \rho(r) e^{-ik \cdot r} dr$

$\Rightarrow f(k) = \int \rho(r) e^{-ik \cdot r} dr$ 、これを原子散乱因子あるいは原子形状因子という。

・結晶によるX線回折

原子1個 \rightarrow 有限結晶全体への拡大

$$A(k) = \int \rho(r) e^{-ik \cdot r} dr$$

ここで $\rho(r)$ は周期性をもつので、基本並進ベクトルを使って
 $\rho(r + n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3) = \rho(r)$ である。

単位胞あたりの積分を行い、あとで単位胞の数だけ足し合わせるのと
 同じ意味になる

$$\Rightarrow A(k) = \sum_{n_1=0}^{N_1-1} \sum_{n_2=0}^{N_2-1} \sum_{n_3=0}^{N_3-1} \int_{\text{単位胞}} \rho(r) e^{-ik \cdot (n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3 + r)} dr$$

この部分を $F(k)$ を
 結晶構造因子という。

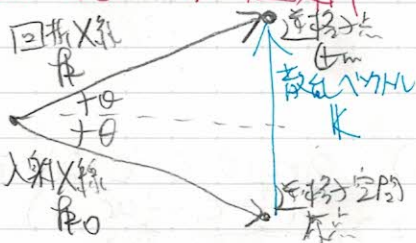
$A(k)$ の総和部については、これをそれぞれ層間で処理して、

$$G(k) = e^{-i\frac{M-1}{2}k \cdot a_1} \frac{\sin \frac{M}{2}k \cdot a_1}{\sin \frac{k \cdot a_1}{2}} + e^{-i\frac{M-1}{2}k \cdot a_2} \frac{\sin \frac{M}{2}k \cdot a_2}{\sin \frac{k \cdot a_2}{2}} + e^{-i\frac{M-1}{2}k \cdot a_3} \frac{\sin \frac{M}{2}k \cdot a_3}{\sin \frac{k \cdot a_3}{2}}$$

この絶対値は $\frac{\pi}{2} + 2\pi m_i = \frac{k \cdot a_i}{2}$ のとき一番大きくなる。(他の方向も同じ)

$\llcorner \llcorner N_i \gg \llcorner$ のときは $k \cdot a_i = 2\pi m_i$ と近似すれば、強い散乱を得るためには上記の関係を満たしている必要がある。

なお、上記関係は逆格子点と同型の式となっており、すなわち
 散乱ベクトル $k =$ 逆格子点ベクトル G_m となるのがX線回折が起る条件
 といえる \Rightarrow ラウエ条件



ラウエ条件を満たしているとき、
 $|k| = |G_m| = 2|k| \sin \theta$
 よって性質上 $|G_m| = \frac{2\pi}{d}$ であるので、
 ただし単軸立方格子では
 $\frac{2\pi}{d} = \frac{2\pi}{a} \sqrt{m_1^2 + m_2^2 + m_3^2}$

$d = \frac{a}{\sqrt{m_1^2 + m_2^2 + m_3^2}}$ であることから実際に $|k| = |G_m|$ を示せる。

また、 $|k| = 2\pi/\lambda$ なので、別の変形をせよ

$$2 \cdot \frac{2\pi}{\lambda} \sin \theta = \frac{2\pi}{d} \Rightarrow 2d \sin \theta = \lambda \quad (\text{ブラッグの法則})$$

を計算から導くことができる。

結晶構造因子の具体的な求め方

回折には $|k| = |G_m|$ が必要条件、ただし結晶構造因子 $F(k)$ も影響してくる

$$F(k) = \int \rho(r) e^{-ik \cdot r} dr \quad \text{について、単胞内の電荷分布密度は近似的に} \rho(r) = \sum_{j=1}^N \rho_j(r - r_j)$$

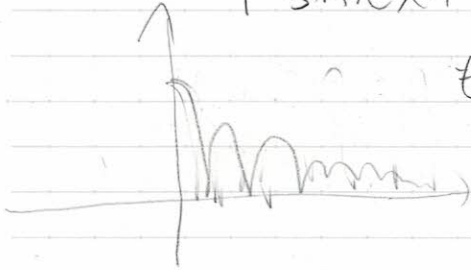
さらに電子密度は他の原子の影響を受けないと仮定し、各原子についてのみ積分すること、

$$F(k) = \sum_{j=1}^N f_j(k) e^{-ik \cdot r_j} \quad \text{となる。つまり、結晶構造因子は}$$

$$F(G_m) = \sum_{j=1}^N f_j(G_m) e^{-iG_m \cdot r_j} \quad \text{で求められる。}$$

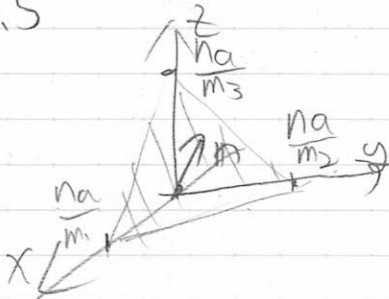
$$3.4 \quad f(x) = \left| \frac{\sin 20\pi x}{\sin \pi x} \right|$$

x	0	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{\pi}{2}$
分子	0	0	0
分母	0		1



その3に「sinc関数」なのかわかる。
 2πがπに2倍して出てくる。

3.5



$$3.6 \quad \text{ダイヤモンド結晶} \rightarrow N_1 = (1, 0, 0), N_2 = \left(\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{a}{4}\right)$$

$$N_1 \text{ に対しては } \mathbf{G}_1 \cdot \mathbf{H}_1 = 0$$

$$N_2 \text{ に対しては } \mathbf{G}_2 \cdot \mathbf{H}_2 = \frac{a}{4} f \quad (\mathbf{G}_2 \text{ が逆格子のベクトルに比例)}$$

3.7