

物理化学III

関数電卓の準備を
お願いします

ここから始まる「X線回折(XRD)」では、
三角関数を使った計算があります。

$$y = \sin \theta$$

$$y = \sin^{-1} \theta$$

または(同じ意味の式です)

$$y = a \sin \theta$$

電卓では、角度(Angle)の設定が、一般に3通りあります。

DEG

(Degree: 度)

RAD

(Radian)

GRAD

(Gradian)

円周

$$360 \text{ [deg]} (360^\circ) = 2\pi \text{ [rad]} = 400 \text{ [grad]}$$

X線とは？（極めて高エネルギーの光）



放射線

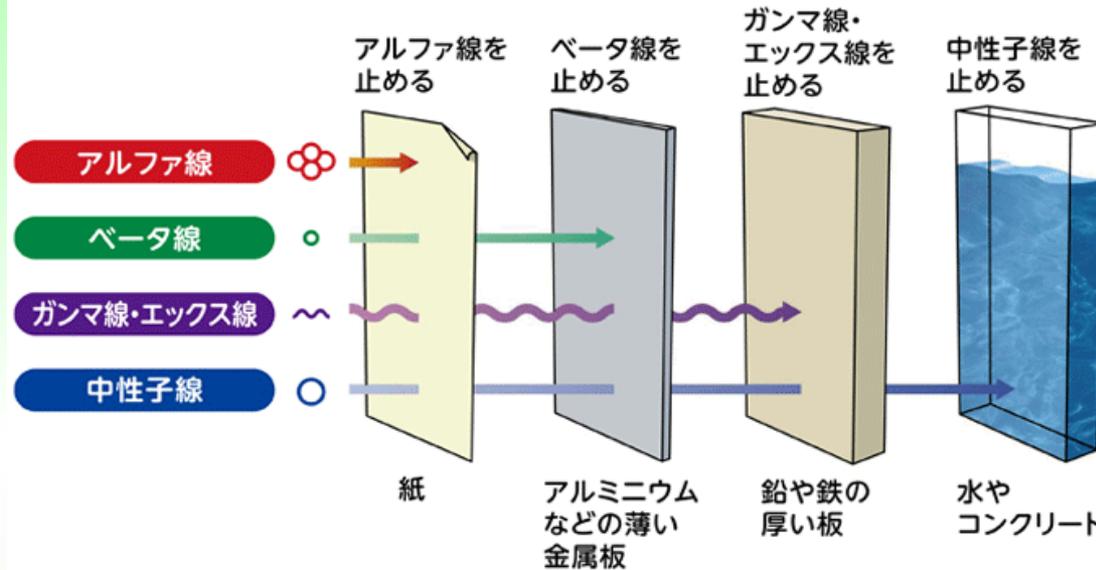
放射性物質から放出される粒子や電磁波のこと。

- ・粒子線であるアルファ線、ベータ線、中性子線
- ・電磁波(光)であるガンマ線、エックス線

放射線の「透過性」

放射線はさまざまな物質で遮ることができる

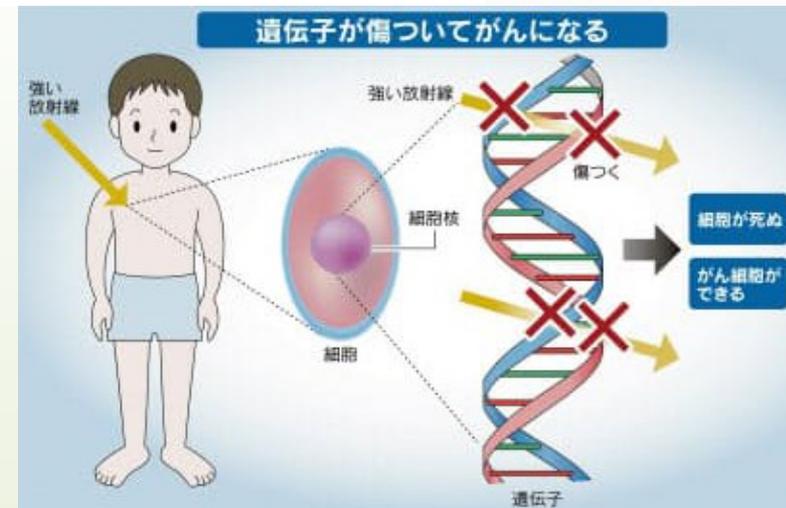
《放射体》
Heの原子核
電子
光(電磁波)
中性子



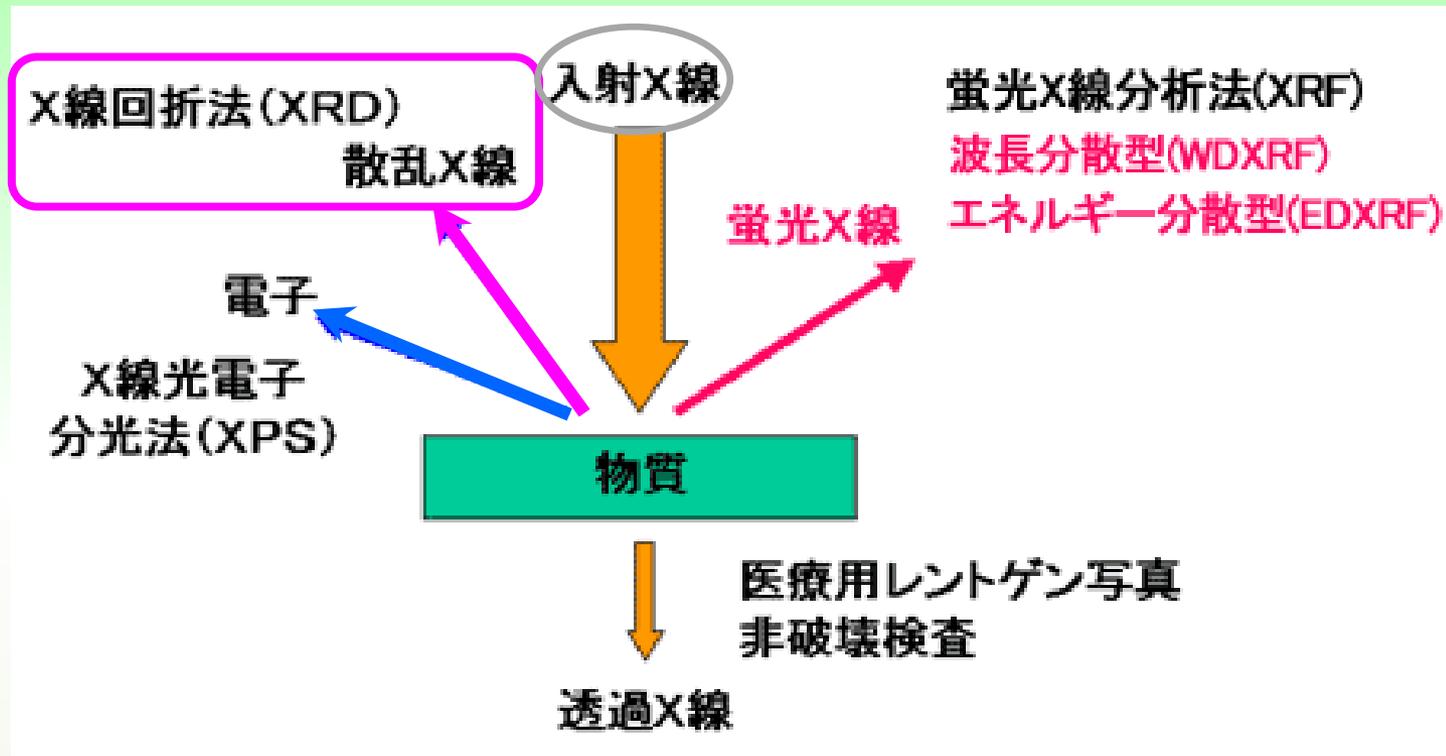
放射線・高エネルギー光

光透過性は高いが、一部でも吸収されると、電子励起にとどまらず結合や構造の破壊を引き起こす。

遺伝子損傷など、人体に深刻な被害も



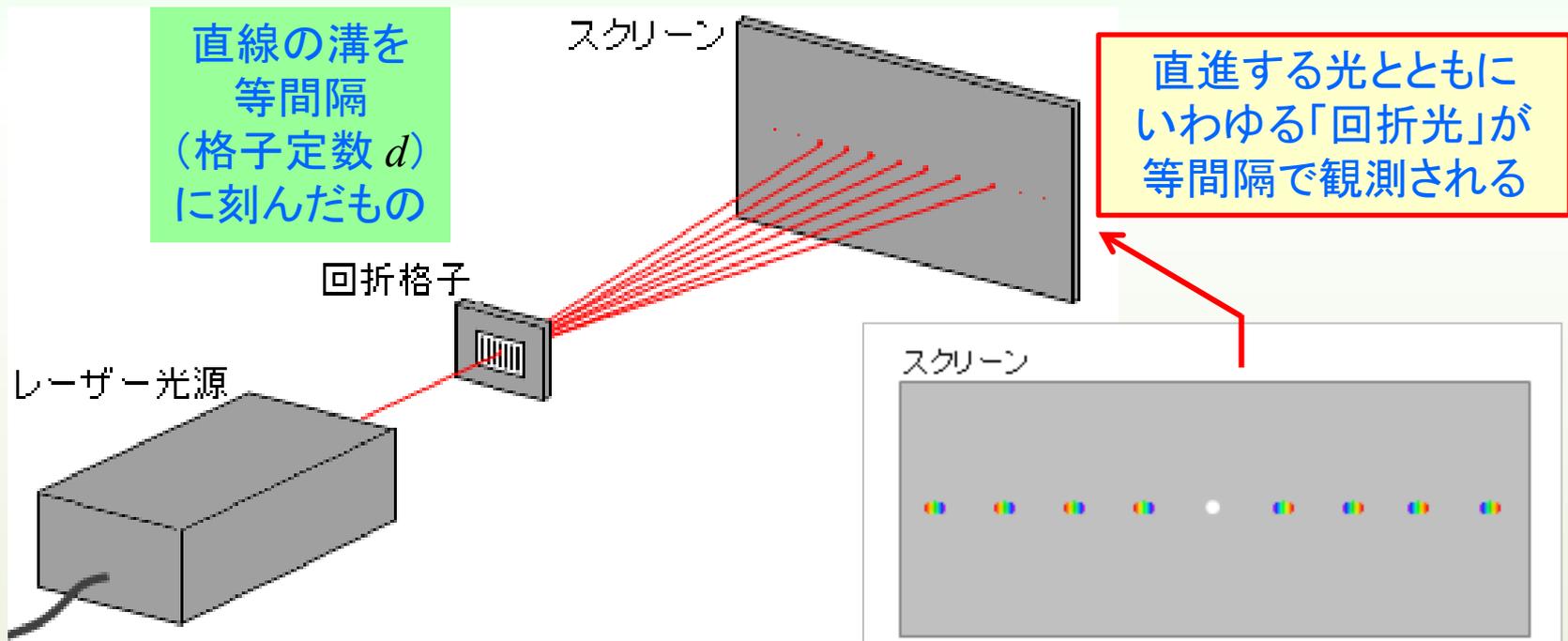
X線を用いた「分光法」



- 蛍光X線分析 [XRF] (蛍光)
- X線回折 [XRD] (回折光)
- X線光電子分光法 [XPS] (吸収)
- X線吸収微細構造 [XAFS] (吸収・透過)

光の「回折」とは？

極めて小さな間隔が規則正しく配列している格子に、その間隔と同程度の波長を持つ光を入射すると、散乱されたX線が、ある特定の方向で干渉し合い、強い光（縞状の散乱光）を生じる。これが「**回折現象**」である。

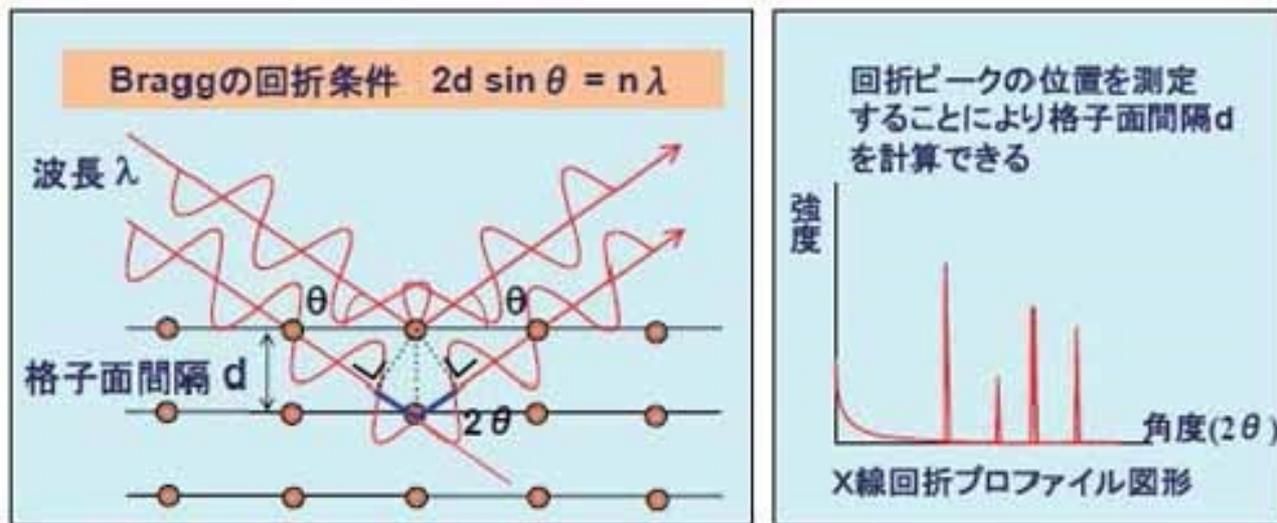


X線回折(XRD)

X線の波長には、一般的な化学結合による原子間距離(約0.1~0.3 nm)に相当するものがある。

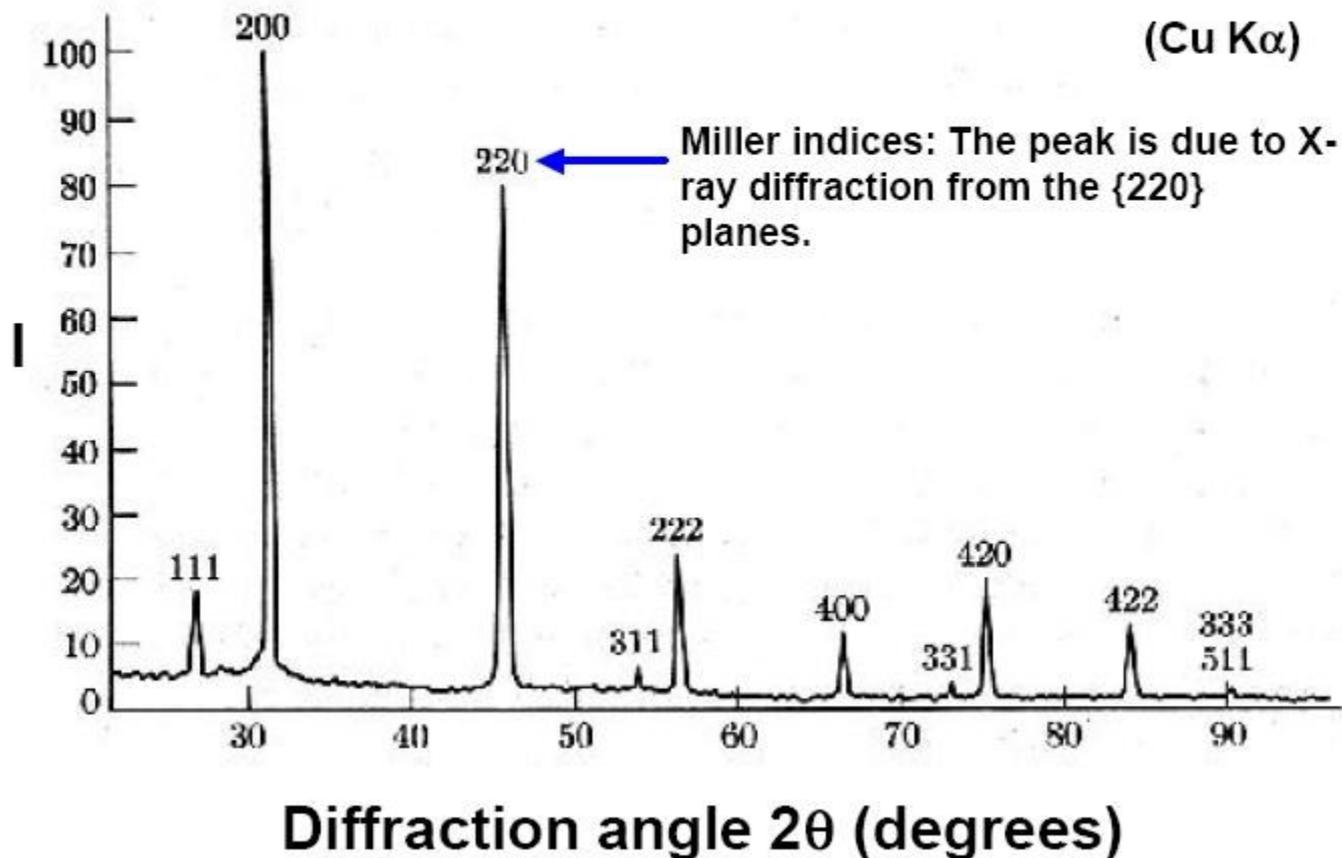
物質が「構造」をつくるとき、原子は定期的な配列をする。
その原子の間隔を、「回折格子」と同じように利用してX線を照射すると、「面間隔」による回折現象が起こる。

これが「X線回折」です。



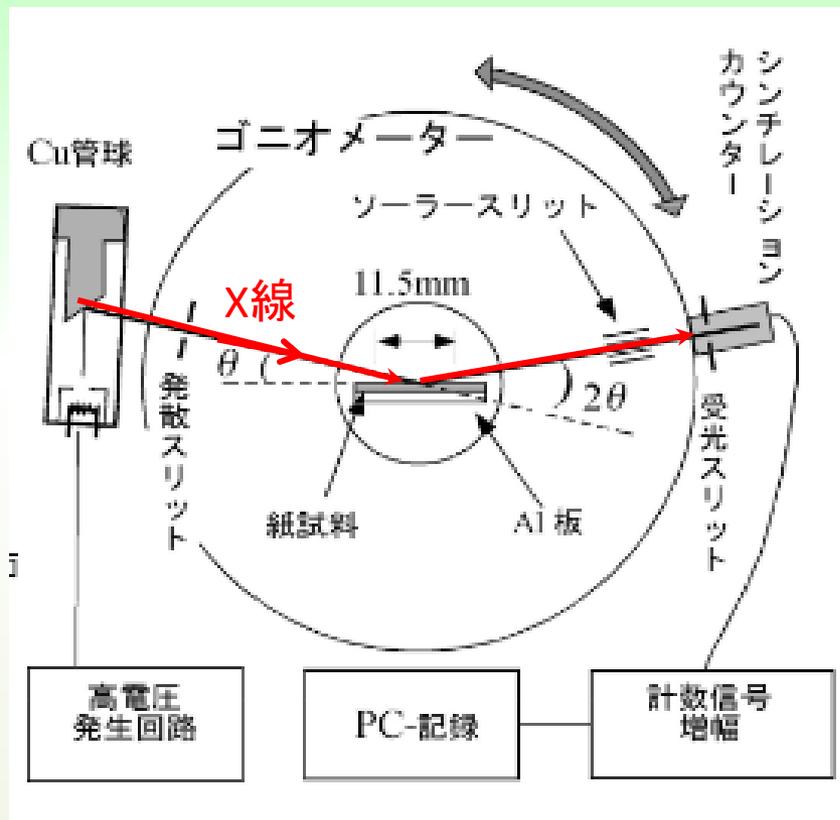
X線回折 (NaCl)

XRD Pattern of NaCl Powder



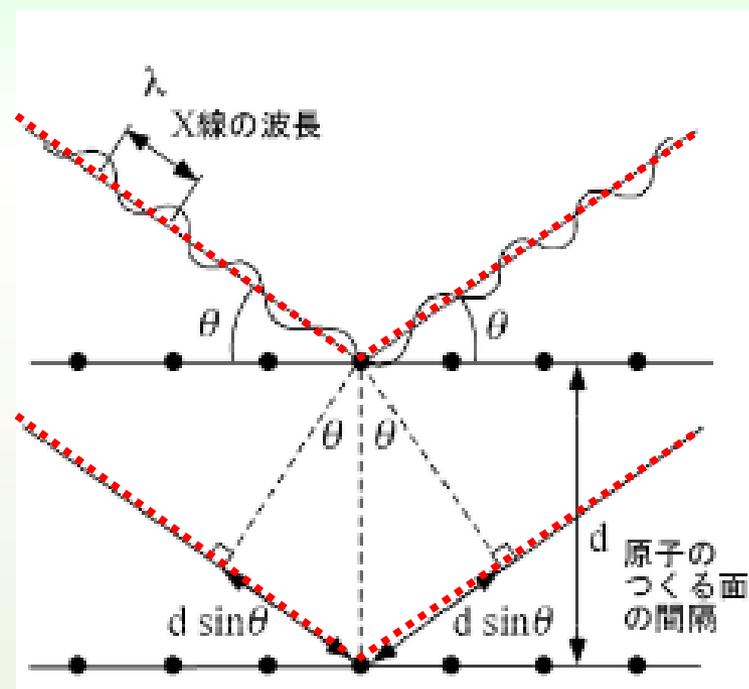
X線回折(XRD)測定装置

XRD測定装置



X線による回折現象

原子の正規な配列が「回折格子」となります



Braggの条件 - 「回折」の基本式

Braggの条件式

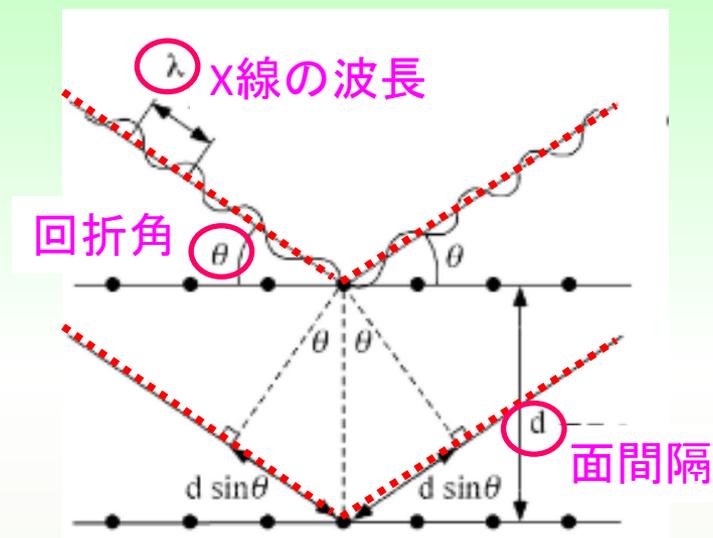
$$2 d \sin \theta = n \lambda$$

d : 面間隔 (nm)

θ : 回折角

λ : X線の波長 (nm)

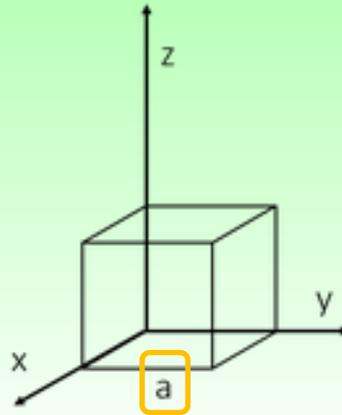
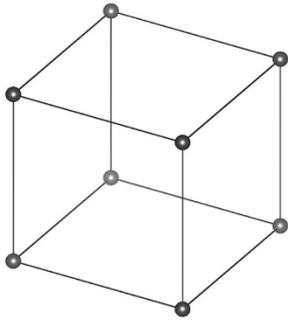
n : 回折の次数【一般には $n = 1$ 】



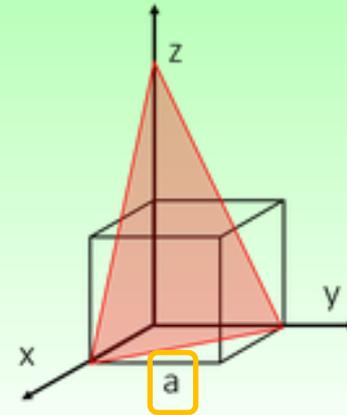
ここで使う「面間隔 (d)」は、
ミラー指数と格子定数から求められる距離のこと。

ミラー指数

単純立方格子



(a) ミラー指数の座標



(b) ミラー指数の表示例

図1 ミラー指数の表示方法

図1(a)のように、 x , y , z 軸上に一辺の長さ a の立方格子を考えます。
各軸の一辺 a に対して、交わる点を結んだ面を表します。

例えば図1(b)の場合、赤く表示した面は x 軸、 y 軸は長さ a の位置で軸と交わっています。一方、 z 軸は a の2倍の長さの位置で軸と交わっています。

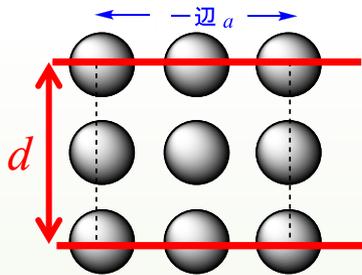
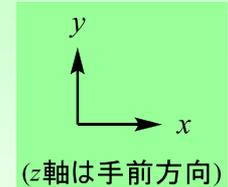
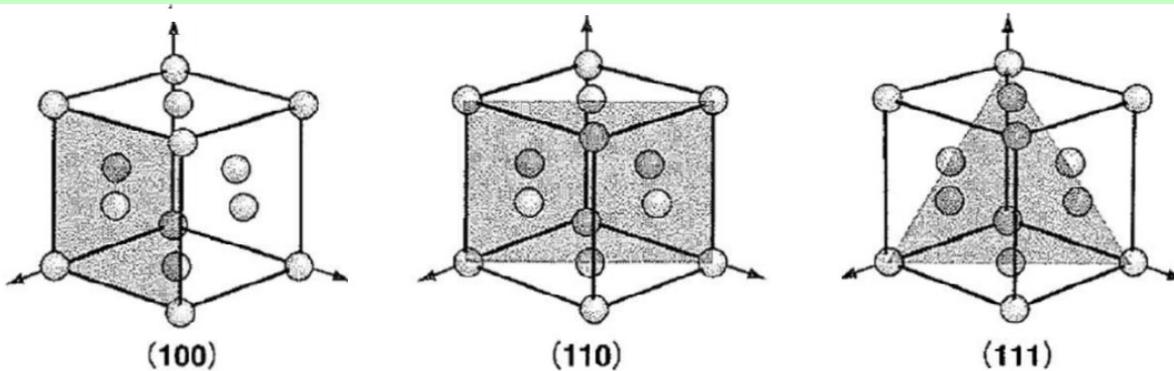
この時の $(x:y:z)$ の交点の比は $(1:1:2)$ です。

ミラー指数の表示方法は、**軸の順に、この交点の逆数を取って、それを整数比で表す**という決まりがあります。

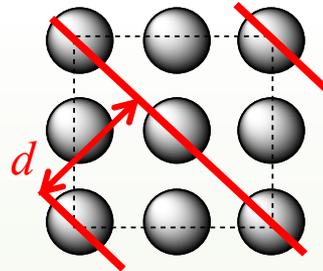
従って図1(b)は、ミラー指数で (221) 面ということになります。

ミラー指数と面間隔

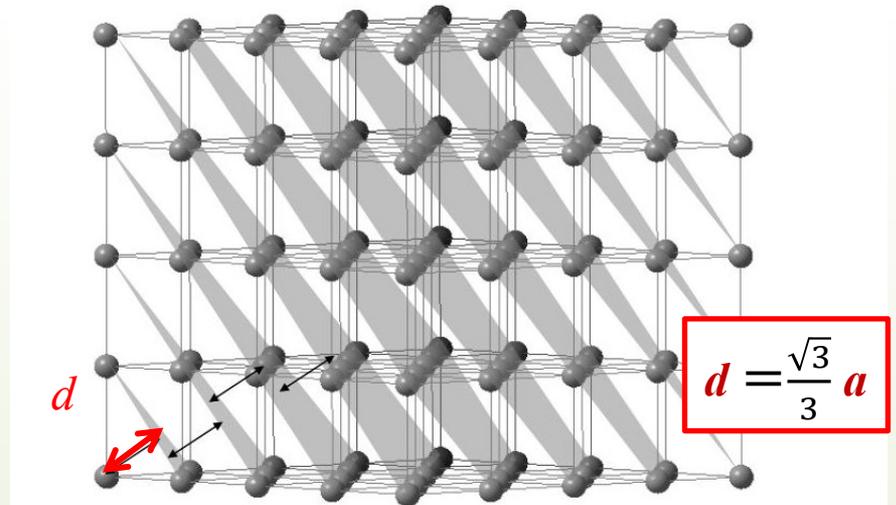
一辺 a の立方格子で、ミラー指数が $(h k l)$ 面であった場合



$$d = a$$



$$d = \frac{\sqrt{2}}{2} a$$



面間隔 (d) は次式で求められる。

$$d = a \left(\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \right)^{-1}$$

各面間の間隔 = 原点と原点に最も近い面までの距離