

問題 E-III

X 線回折は、未知の物質の構造を決定したり、既知の物質を同定したりするのに広く用いられている。回折の条件は Bragg の法則 ($2d \sin \theta = n\lambda$) によって与えられるが、これは回折が起こるためには面間隔 d 、回折角 θ 、波長 λ 間に厳しい制約が存在することを示す。以下の問いに答えよ。

- (1) 回折が起こるために、X 線の波長に課せられる条件を求めよ。
- (2) 回折 X 線の方向と強度には m それぞれどのような情報が含まれているか記せ。
- (3) 単結晶と粉末試料を用いる写真法に、それぞれラウエ法とデバイ - シェラー法がある。図 1 の (イ) と (ロ) にそれぞれの場合の配置が示されている。
 - (a) ラウエ法の場合、写真を得るために変化させる量と固定する量は何か答えなさい。また、その理由も併せて述べよ。
 - (b) デバイ - シェラー法の場合、写真を得るために変化させる量と固定する量は何か答えよ。また、一つのデバイ - シェラー環上の黒化度 (X 線の強度) にむらができることがあるが、考えられる原因について述べよ。
- (4) 図 2 のような単原子からなる斜方晶格子 ($a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$) がある。その逆格子空間において、逆格子点 (hkl) の原点からの距離を求めよ。これを用いて (hkl) 面からの回折角を求めよ (計算過程を示すこと)。
- (5) 図 3(イ) の一面心斜方格子、(ロ) の体心斜方格子に対して、(0 0 1) 及び (0 0 2) 反射の構造因子を計算せよ (計算過程を示すこと)

なお、構造因子 $F(hkl)$ は、 j 番目の原子の原子散乱因子を f_j 、格子定数を単位として表した座標を x_j, y_j, z_j として

$$F(hkl) = \sum f_j \exp \{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)\},$$

逆格子の基本並進ベクトル b_1, b_2, b_3 は、結晶格子の基本並進ベクトル a_1, a_2, a_3 により

$$b_1 = (a_2 \times a_3) / \{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)\}$$

で表される。