

## 演習 (...というわけでもありませんが)

鉄( $\alpha$ Fe)は室温でBCC構造を有し、格子定数は0.286 nm( $2.86\text{\AA}$ )である。銅の $K_{\alpha 1}$ 線を用いて回折をとったとき、ピークの現れる位置とそれぞれの回折線の相対強度を求めよ。

とりあえず  $0 < 2\theta < 90^\circ$  とします。

銅の $K_{\alpha 1}$ 線： $\lambda = 0.154056$  nm

「相対強度」：観測された回折線のうち、  
もっとも強いものを100としたときの  
相対的な強度の値

# 攻め方

$$|F^* \cdot F| \times m \times \frac{1 + \cos^2(2\theta)}{\sin^2 \theta \cdot \cos \theta} \times (B \cdot A_{bs})$$

結晶構造因子 多重度因子 Lorentz偏光因子 温度因子と吸収因子

↑  
一定とみなせる場合が多い

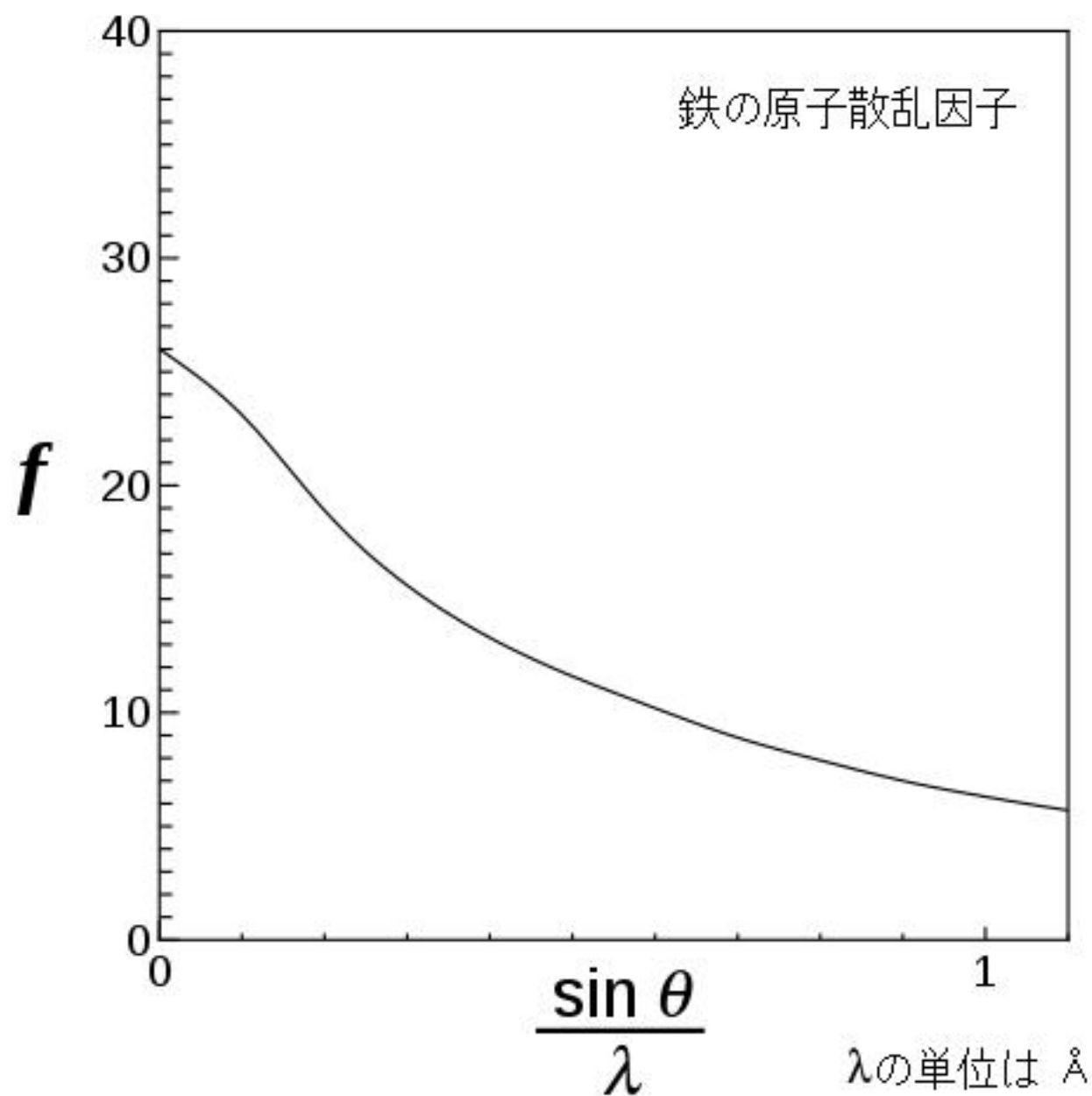
1. まず最初にBragg 条件を用いて、どの角度にピークが出現するかを調べる。
2. 構造因子Fを、各原子の散乱因子を用いて表す
3. 多重度因子、Lorentz因子を乗じ、強度を計算

## 第一段階

この表ができれば勝ち！

$$2d \sin \theta = \lambda \quad d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

$S$	$hkl$	$m$	$\theta$	$2\theta$	Lorenz 偏光因子	$k = \frac{\sin \theta}{\lambda}$
	100					
	110					
	111					
	200					
	210					
	211					
	220					
	221/300					

鉄の原子散乱因子 ( $|k| = |\sin \theta / \lambda|$  の関数として)

$K(\text{\AA}^{-1})$	$f$
0	26
0.1	23.1
0.2	18.9
0.3	15.6
0.4	13.3
0.5	11.6
0.6	10.2
0.7	8.9
0.8	7.9
0.9	7
1	6.3
1.1	5.7
1.2	5.2

# 計算結果

hkl	$2\theta$	$\theta$	LP	k	f	F	F <sup>2</sup>	m	Int	相対強度
100	31.449	15.724	24.4394	0.1759	19.91	0	0.00	6	0	0.0
110	44.777	22.389	11.2113	0.2472	17.34	34.682	1202.84	12	161825	100.0
111	55.614	27.807	6.8523	0.3028	15.54	0	0.00	8	0	0.0
200	65.185	32.592	4.8112	0.3497	14.45	28.9	835.21	6	24110	14.9
210	74.061	37.030	3.7142	0.3909	13.51	0	0.00	24	0	0.0
211	82.557	41.278	3.1087	0.4282	12.82	25.648	657.82	24	49079	30.3

$2\theta$ ~LP( Lorentz偏光因子)、および  
kは電卓/Excelで計算。

fは表から値を読み取って内挿する。

Fは消滅則を考慮して計算する。

mは等価な面の数。

## FCC鉄( $\gamma$ 鉄/「オーステナイト」)の場合

鉄は高温ではFCC構造をとり、格子定数は0.363 nm(3.63Å)である。銅の $K_{\alpha 1}$ 線を用いて回折をとったとき、ピークの現れる位置とそれぞれの回折線の相対強度を求めよ。

$0 < 2\theta < 90^\circ$  とします。

原子散乱因子の値はこのスライドNo.3の値を参照

---

その他、比較的計算が簡単な結晶

各種金属単体

化合物 CsCl、NaCl、KCl、FeS、FeO、CsI

# 計算(Excel を使う)

γ鉄の回折強度計算											
λ	1.54056										
hkl	2θ	θ	LP因子	k	f	F	消滅	F <sup>2</sup>	m	Int	相対強度
100	24.502	12.251	41.5429	0.1377	21.49		0	0.00	6	0	0.0
110	34.927	17.463	19.4657	0.1948	19.12		0	0.00	12	0	0.0
111	43.128	21.564	12.1997	0.2386	17.62		4	1241.86	8	121203	100.0
200	50.255	25.128	8.6297	0.2756	16.41		4	1077.15	6	55773	46.0
210	56.652	28.326	6.5707	0.3080	15.42		0	0.00	24	0	0.0
211	62.635	31.318	5.2480	0.3374	14.74		0	0.00	24	0	0.0
220	73.767	36.884	3.7419	0.3896	13.54		4	733.33	12	32928	27.2
221	79.077	39.538	3.3146	0.4132	13.08		0	0.00	24	0	0.0
310	84.293	42.147	3.0250	0.4356	12.69		0	0.00	24	0	0.0
311	89.463	44.732	2.8421	0.4568	12.33		4	608.12	24	41481	34.2

背景が薄青部を入力 黄色部分は場合に応じて式を変える

hkl 他で計算して入力

f 表から内挿:

F / F<sup>2</sup> 消滅則を考慮して計算(F<sup>2</sup>を最初に求める形なら f は不要)

m 等価な[hkl]面の数

相対強度 最大のものを探してそれを100として計算

# 講義終了

## 到達目標

- ☆ 結晶を七つの結晶系に分類できる (14のブラベー格子についても理解する)
- ☆ 格子定数の記述ができ、与えられたミラー指数の面について、間隔を計算できる
- ☆ 種々の結晶について、粉末X線回折図に出現するピークの位置と強度が計算できる

1 結晶とは何か (単位胞／単位格子と基本構造)

2 七つの結晶系、格子定数、代表的な結晶の例

3 対称性とブラベー格子

4 二次元ブラベー格子

5 二次元格子のスタッキングによる三次元ブラベー格子の構築

6 ミラー指数その1：結晶における面と方向の記述方法

7 ミラー指数その2：六方晶におけるミラー指数

8 面間隔の求め方

9 格子欠陥（原子空孔と転位）・多結晶体

10 X線の発生法・特性X線について

11 ブラッグの条件と面の間隔

12 粉末X線回折による格子定数の求め方

13 (単結晶による解析)

14 ステレオ投影と極点図

15 まとめ