

## 逆格子

ブラベ格子をなす  $\mathbf{R}$  の周期性をもつ平面波

$$e^{i\vec{K}\cdot(\vec{r}+\vec{R})} = e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}$$

$$\therefore e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}} = 1$$

この場合の  $\mathbf{K}$  (または  $\vec{K}$ ) の集合を逆格子と呼ぶ ( $\mathbf{K}$  を  $\mathbf{G}$  とかくこともある)

逆格子もブラベ格子

逆格子ベクトル

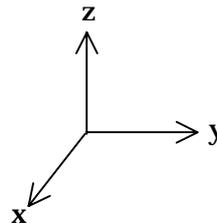
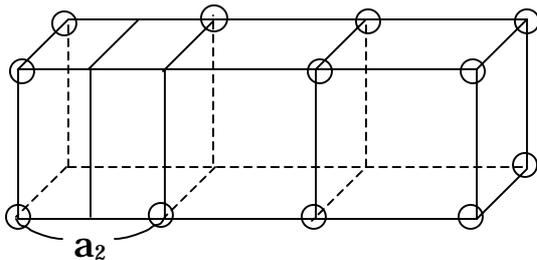
$$\left\{ \begin{aligned} \vec{b}_1 &= 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \\ \vec{b}_2 &= 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \\ \vec{b}_3 &= 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \end{aligned} \right.$$

(基本単位ベクトル)

$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

$$\left\{ \begin{aligned} \delta_{ij} &= 0 \text{ when } i \neq j \\ \delta_{ij} &= 1 \text{ when } i = j \end{aligned} \right.$$

$hkl$ 面



(010)面

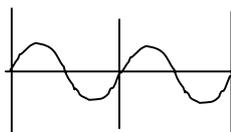


$\mathbf{K}$  は

$$\vec{K} = \vec{b}_2$$

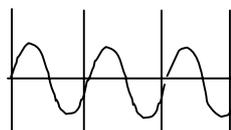
$$|\vec{b}_1| = \frac{2\pi}{|\vec{a}_2|} = \frac{2\pi}{a}$$

(020)面

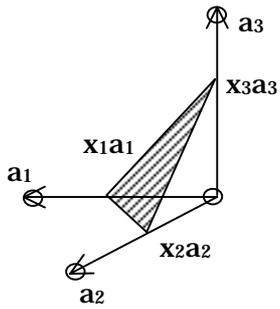


$$2\vec{K}$$

(030)面



$$3\vec{K}$$



$$h:k:l = \frac{1}{x_1} : \frac{1}{x_2} : \frac{1}{x_3}$$

(100)(010)(001)面は、まとめて {100} 面

[100][010][001][100][010]... 方面は、まとめて <100> 方向

### X線回折

#### ブラッグの法則

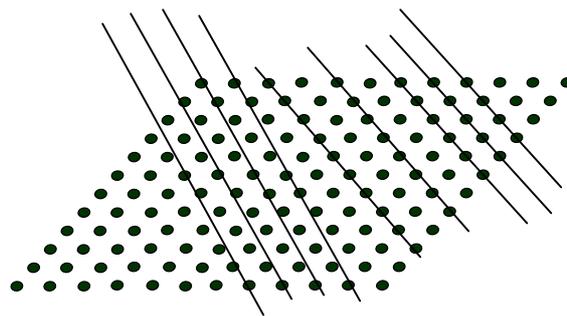
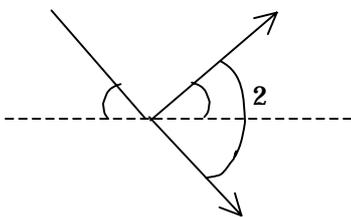
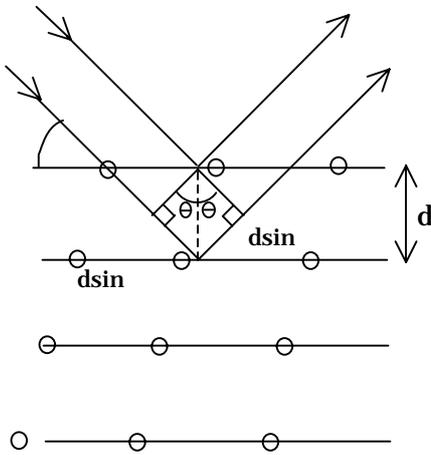
波長  $\lambda$  を面間隔  $d$  に対して  $\theta$  の角度で入射する。  $d$  は大体  $10^{-10}m$  位の必要あり。

$$\hbar\omega > \frac{hc}{\lambda} = \frac{hc}{10^{-10}m} \approx 12.3 \times 10^3 eV \quad \text{X線}$$

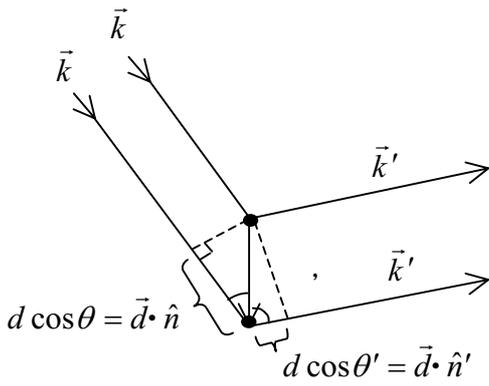
と の光路差  $2 \times d \sin \theta$

光路差が波長の整数倍  $n$  になれば干渉する。

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



いろいろな格子面  
全てに適用される。  
その分割の方法は  
無限大。



ラウエの法則

$$\left. \begin{array}{l} \text{入射} \quad \vec{k} = \frac{2\pi\hat{n}}{\lambda} \\ \text{散乱後} \quad \vec{k}' = \frac{2\pi\hat{n}'}{\lambda} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{波長は} \\ \text{変化しない} \end{array}$$

光路差

$$d \cos \theta + d \cos \theta' = \vec{d} \cdot (\hat{n} - \hat{n}')$$

干渉して強めあうためには、

$$\vec{d} \cdot (\hat{n} - \hat{n}') = m\lambda$$

$$\vec{d} \cdot \left( \frac{2\pi\hat{n}}{\lambda} - \frac{2\pi\hat{n}'}{\lambda} \right) = m \frac{2\pi\lambda}{\lambda}$$

両辺  
×  $\frac{2\pi}{\lambda}$

$$\vec{d} \cdot (\vec{k} - \vec{k}') = 2\pi m \quad \left. \begin{array}{l} \text{dをRで} \\ \text{おきかえる} \end{array} \right\}$$

$$\vec{R} \cdot (\vec{k} - \vec{k}') = 2\pi m$$

$$e^{i2\pi m} = e^{i\vec{R} \cdot (\vec{k} - \vec{k}')} = 1$$

逆格子の定義！

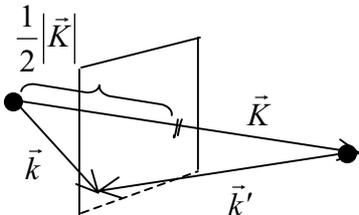
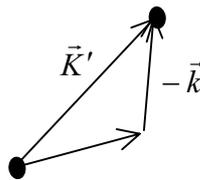
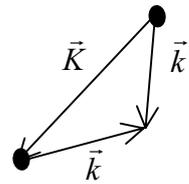
$$e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{R}} = 1$$

よって、 $\vec{k}' - \vec{k} = \vec{K}$  (又は $\vec{G}$ ) すなわち逆格子ベクトルであるときに光は干渉して強めあう。

ここで、 $\vec{k}' - \vec{k}$  が逆格子ベクトルなら

$\vec{k} - \vec{k}'$  も逆格子ベクトル

さらに  $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$

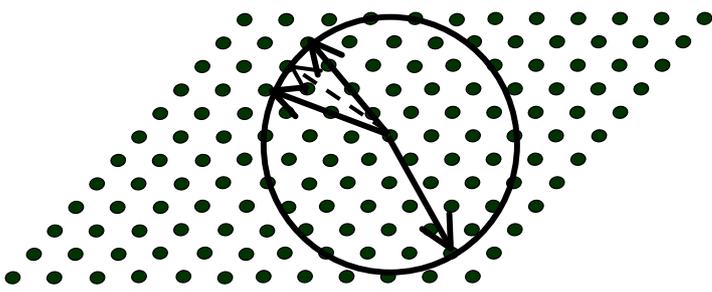


$$\vec{k} \cdot \hat{K} = \frac{1}{2} |K|$$

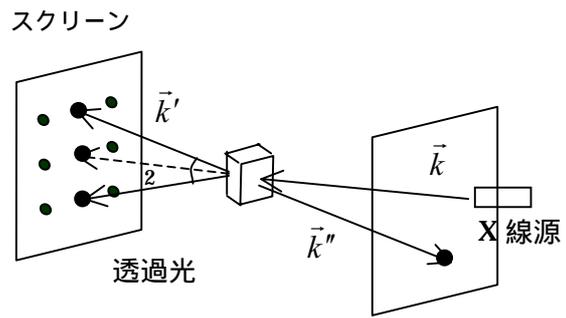
$$\vec{k}' \cdot \hat{K} = \frac{1}{2} |K|$$

# エバルト球

逆格子



ラウエ法



入射光  $k$  の大きさは で決まる。

$$|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

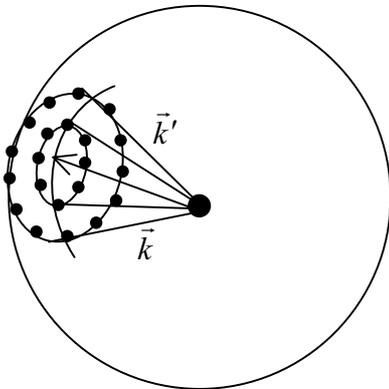
よって球の半径が入射光によって変化する。

$$|\vec{k}| = \frac{2\pi}{10^{-10}} [m^{-1}] = 10^{10} m^{-1} \gg |\vec{b}| \text{ (逆格子ベクトル)}$$

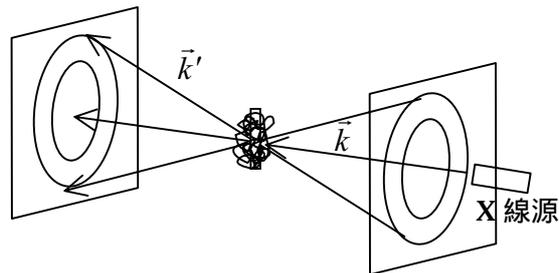
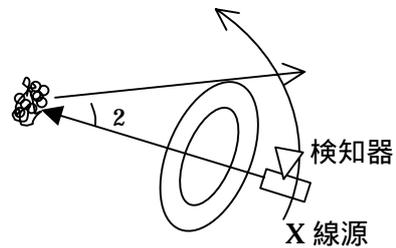
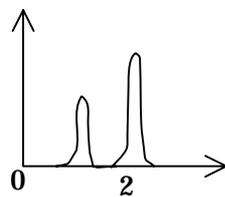
でも逆格子点が完全な点なら球との接点はない。

完全な点ではなく、有限の  $k$  (体積) をもつ。なぜ？

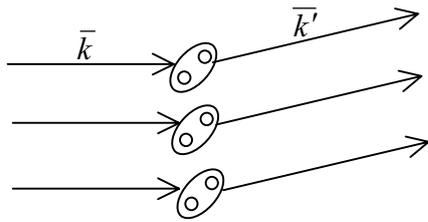
粉末法



X線強度



単位構造のある単原子格子による回折



本来の回折方向 の影響は？

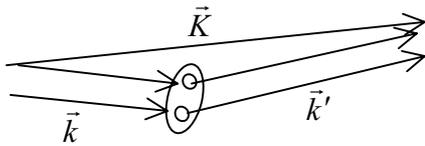
単位構造内に  $n$  個の同一の原子があり、

$\vec{d}_1 \dots \dots \vec{d}_n$  の位置をしめるとする。

単位構造同士の回折条件は  $\vec{k}' - \vec{k} = \vec{K}$

ある  $\vec{K}$  に対するブラッグピークに関して単位構造の影響を考えると、

$d_i$  と  $d_j$  の 2 つの原子間の光路差は



$\vec{K} \cdot (\vec{d}_i - \vec{d}_j)$  である。よって  $\vec{K}$  の位相は

$e^{i\vec{K} \cdot (\vec{d}_i - \vec{d}_j)}$  だけ変化する。単位構造全体を考慮すると、X 線は  $n$  個の散乱 X 線の和によってあらわされ、その振幅（干渉の度合い）は

$S_{\vec{K}} = \sum_{j=1}^n e^{i\vec{K} \cdot \vec{d}_j}$  の構造因子をもつ。単位構造内の原子同士が干渉してブラッグピーク 強度が弱まる。

例 単純立方格子としての体心立方格子

$\vec{d}_1 = 0$  と  $\vec{d}_2 = \left(\frac{a}{2}\right)(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$  が単位構造をもつとすると

$\vec{a}_1 = a\hat{x}$   $\vec{a}_2 = a\hat{y}$   $\vec{a}_3 = a\hat{z}$  の単純立方となる。

逆格子は一辺が  $\frac{2\pi}{a}$  の立方晶

$$S_{\vec{K}} = \sum_{j=1}^2 e^{i\vec{K} \cdot \vec{d}_j} = e^0 + e^{i\vec{K} \cdot \vec{d}_2}$$

$$= 1 + \exp\left[i\vec{K} \cdot \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})\right]$$

単位格子の任意の逆格子ベクトルは

$$\vec{K} = \frac{2\pi}{a}(n_1\hat{x} + n_2\hat{y} + n_3\hat{z})$$

これを  $S_{\vec{K}}$  に代入すると

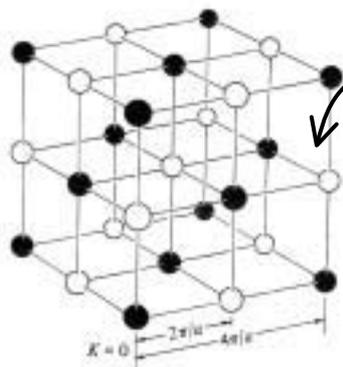
$$S_{\vec{K}} = 1 + \exp[i\vec{K} \cdot \vec{d}_2]$$

$$= 1 + \cos(\vec{K} \cdot \vec{d}_2) + i \sin(\vec{K} \cdot \vec{d}_2)$$

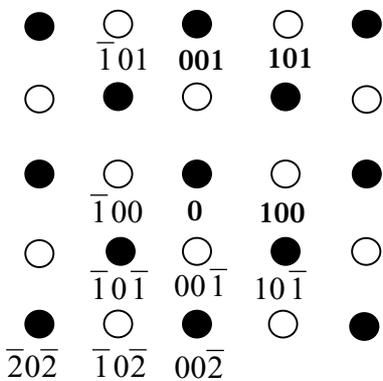
$$= 1 + (-1)^{n_1+n_2+n_3}$$

$$= \begin{cases} 2 & n_1+n_2+n_3 \text{ 偶数} \\ 0 & n_1+n_2+n_3 \text{ 奇数} \end{cases}$$

3つの基本ベクトルの



この面だけ見てみると



h と k と l すべてが奇数又は偶数

体心 h+k+l=偶数 回折あり

h+k+l=奇数 回折なし

面心 h と k と l すべてが奇数又は偶数 回折あり

h と k と l で奇数と偶数まじっている 回折なし