$\boxed{\text{逆格子}}$

ブラベ格子をなす R の周期性をもつ平面波

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

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

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

逆格子もブラベ格子

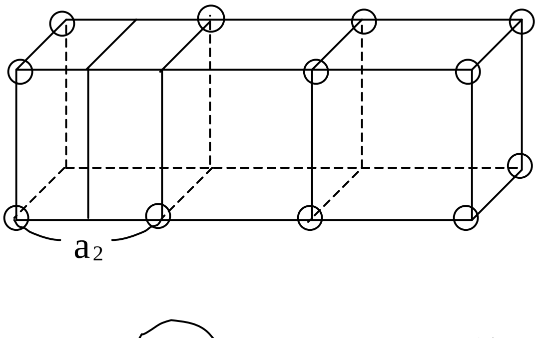
逆格子ベクトル

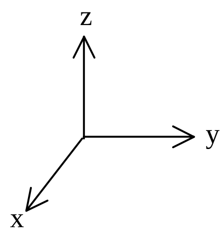
（基本単位ベクトル）

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = 2\pi \dfrac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \bullet (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \\[2ex] \vec{b}_2 = 2\pi \dfrac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \bullet (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \\[2ex] \vec{b}_3 = 2\pi \dfrac{\vec{a}_1 \times \vec{a}2}{\vec{a}_1 \bullet (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \end{cases}$$

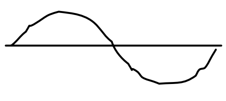
$$\boxed{\begin{gathered} \vec{b}_i \bullet \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij} \\ \begin{cases} \delta_{ij} = 0 \quad \text{when} \quad i \neq j \\ \delta_{ij} = 1 \quad \text{when} \quad i = j \end{cases} \end{gathered}}$$

*hkl*面

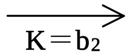




(010)面

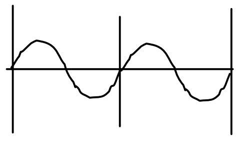


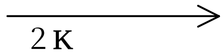
K は



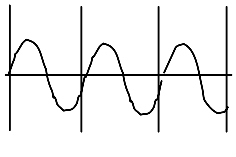
$$\left|\vec{b}_1\right| = \frac{2\pi}{\left|\vec{a}_2\right|} = \frac{2\pi}{a}$$

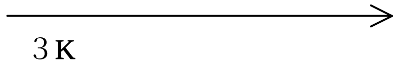
(020)面

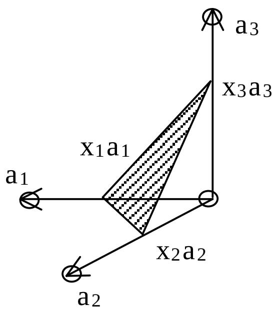




(030)面





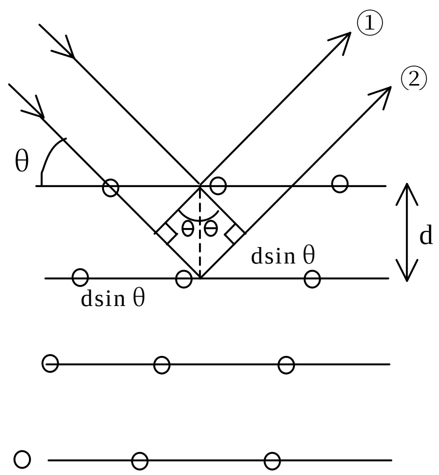


$$h:k:l=\frac{1}{x_1}:\frac{1}{x_2}:\frac{1}{x_3}$$

(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

$\boxed{\text{X 線回折}}$



ブラッグの法則

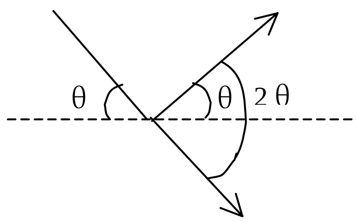
波長λを面間隔ｄに対してθの角度で入射する。ｄは大体 10^{-10}m 位の必要あり。

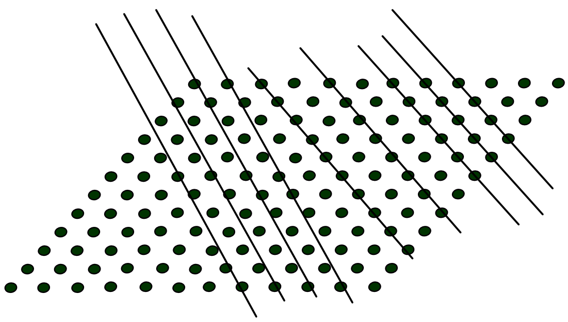
$$\hbar\omega>\frac{\boldsymbol{hc}}{\lambda}=\frac{\boldsymbol{hc}}{10^{-10}\boldsymbol{m}}\approx 12.3\times10^{3}\boldsymbol{eV}\quad \text{X 線}$$

①と②の光路差　2×d sinθ

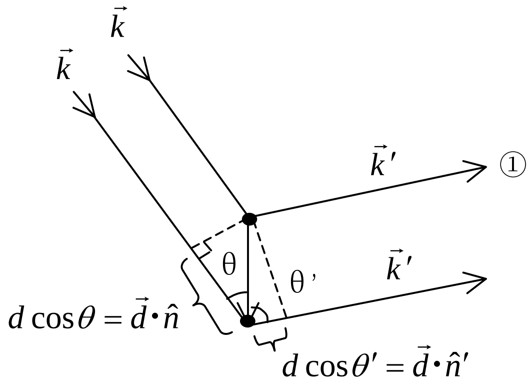
光路差が波長の整数倍ｎλになれば干渉する。

2d sinθ＝nλ





いろいろな格子面
全てに適応される。
その分割の方法は
無限大。



ラウエの法則

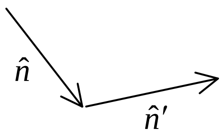
入射 $\vec{k} = \dfrac{2\pi\hat{n}}{\lambda}$

散乱後 $\vec{k}' = \dfrac{2\pi\hat{n}'}{\lambda}$

波長は変化しない

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、

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

両辺 $\times \dfrac{2\pi}{\lambda}$

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

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

d を R で
おきかえる

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

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

逆格子の定義！

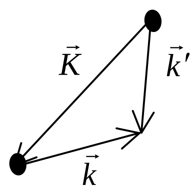
$$e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{\mathrm{R}}} = 1$$

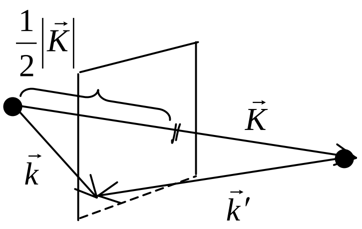
よって、$\vec{k}' - \vec{k} = \vec{K}$ （又は$\vec{G}$ ）すなわち逆格子ベクトルであるときに光は干渉して強めあう。

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

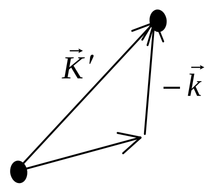
さらに　| k | = | k’ |





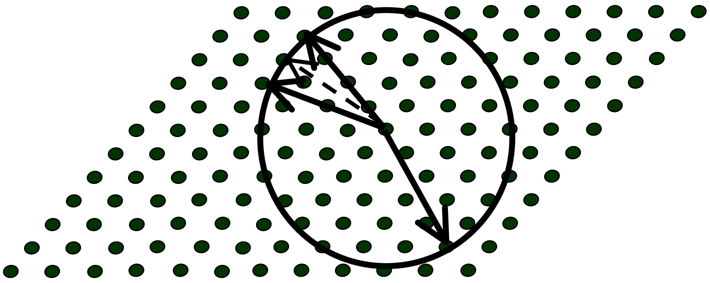
$$\vec{k}\bullet\hat{K} = \frac{1}{2}|K|$$

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

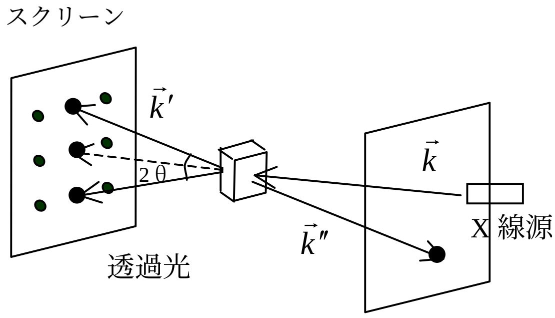


エバルト球

逆格子



ラウエ法



入射光　ｋの大きさはλで決まる。

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

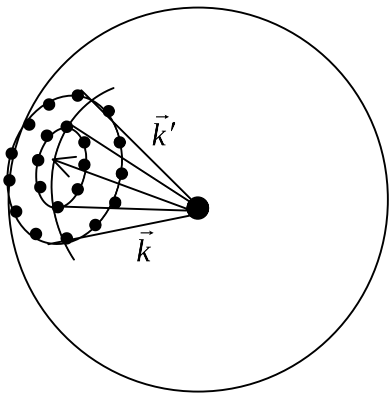
よって球の半径が入射光によって変化する。

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

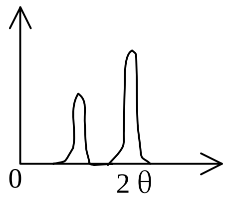
でも逆格子点が完全な点なら球との接点はない。

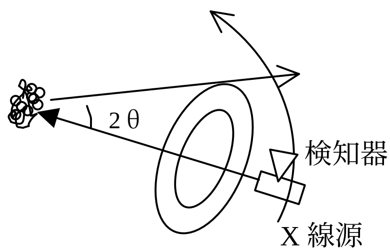
完全な点ではなく、有限のΔｋ（体積）をもつ。なぜ？

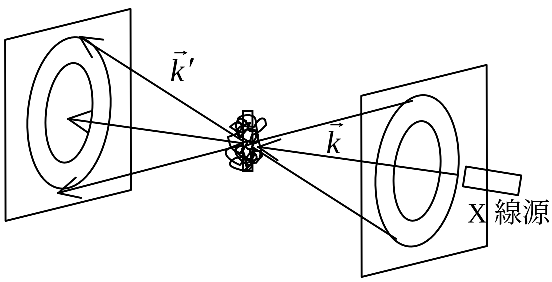
粉末法



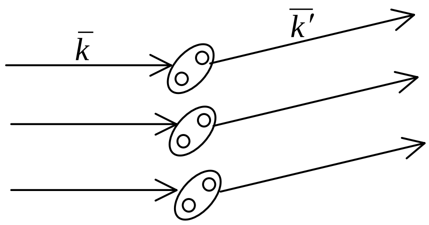
X 線強度







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？

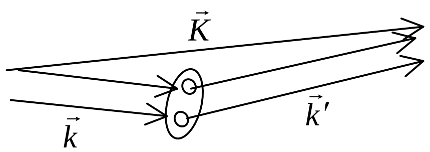
単位構造内に n 個の同一の原子があり、

$\bar{d}_1 \cdots\cdots \vec{d}_n$ 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①と②の位相は

$e^{iK\cdot(d_i - d_j)}$ 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クピーク　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

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

逆格子は一辺が $\frac{2\pi}{a}$ の立方晶

$$S_K = \sum_{j=1}^{2} e^{i\vec{K}\cdot\vec{d}_j} = e^{o} + e^{i\vec{K}\cdot\vec{d}_j}$$

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

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_K に代入すると

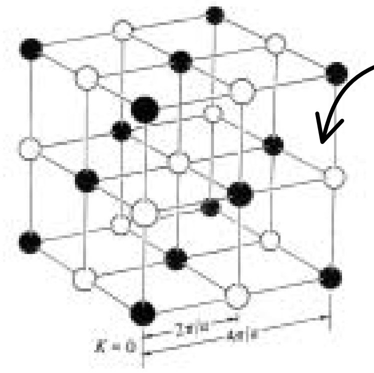
$S_K = 1 + \exp[i\pi(n_1+n_2+n_3)]$

$= 1 + \cos\pi(n_1+n_2+n_3) + \overset{0}{i\sin\pi(n_1+n_2+n_3)}$

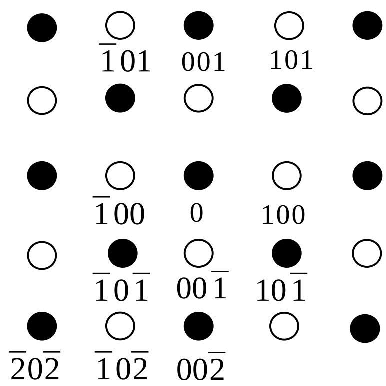
$= 1 + (-1)^{n1+n2+n3}$

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

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