

平成 15 年度 春学期

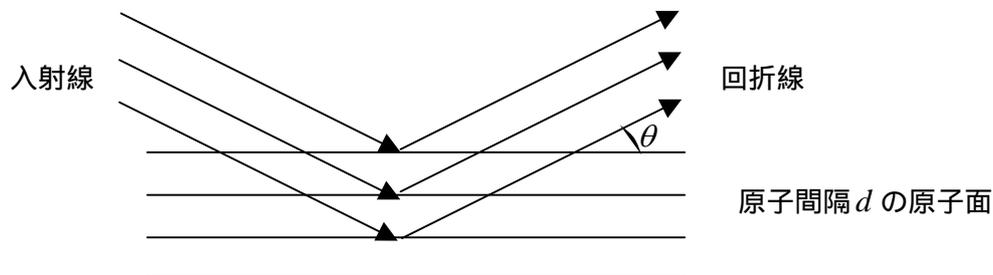
物理情報工学科 3 年生必修 物性工学同演習 (担当者: 伊藤公平)

第 3 回宿題 (合計点 112 点)

提出期限(厳守) 火曜日組 5 月 13 日(火)授業開始時

木曜日組 5 月 15 日(木)授業開始時

問題 1 (10 点) CsCl 結晶の第 1 回折ピークの角度 (最も小さい回折角度 θ の値) と、第 2 回折ピークの角度 (2 番目に小さい回折角度の値) を求めよ。ただし、慣用の立方晶の格子定数は 4.1 で、X 線の波長は 1.54 とする。



問題 2 (計 27 点 各 3 点) 下の文章の空欄を埋めよ。

結晶に X 線を入射したときの、図 1 の様に面間隔が d の格子面による反射を考える。A 面と B 面による反射光の行路差 l は $l = (1)(d \sin \theta)$ (d と θ で表す) である。ただし θ は入射角である。X 線が干渉して強め合うにはその行路差が波長の整数倍でなければならない。よって、波長を λ とし、整数を n とするとブラッグの条件式 $(1) = (2)$ が得られる。

また、ベクトル \vec{d} だけ離れている二つの散乱体を考えよう。X 線は波長 λ を持ち、遠方から \hat{n} 方向に沿って入射してくるとしよう。その波数ベクトルは $\vec{k} = (3)$ となる。2 つのイオンによる散乱 X 線の行路差が波長の整数倍であれば、散乱 X 線は波長 λ を持ち \hat{n}' 方向に観測される。その波数ベクトルは $\vec{k}' = (4)$ である。図 2 より行路差が $l' = (5)$ ((5) はベクトルを用いた表現にすること) となることがわかる。従って、干渉して強め合う条件は m を整数として $\vec{d} \cdot (5) = (6)$ となる。この式の両辺に $2\pi/\lambda$ をかけると、入射 X 線と散乱 X 線の波数ベクトルの条件式 $(7) = 2\pi m$ になる。

次に 2 つの散乱体だけではなく、ブラベー格子の格子点に配列されている散乱体を考えよう。格子点は互いにブラベー格子ベクトル \vec{R} だけ離れている。従ってあらゆる散乱 X 線が干渉して強め合うという条件は $(8) = 2\pi m$ となる。このことはあらゆるブラベー格子

のベクトルに対して $e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{R}} = 1$ と書きなおすことができる。これを逆格子のベクトル \vec{K} の

定義 $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = 1$ と比較すると、 $\vec{K} = (9)$ が逆格子ベクトルであれば散乱が干渉して強め合うというラウエの条件を得る。

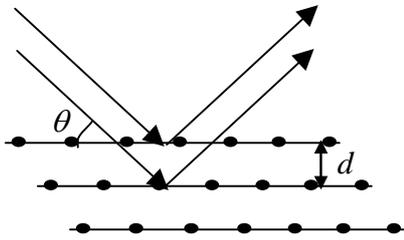


図 1

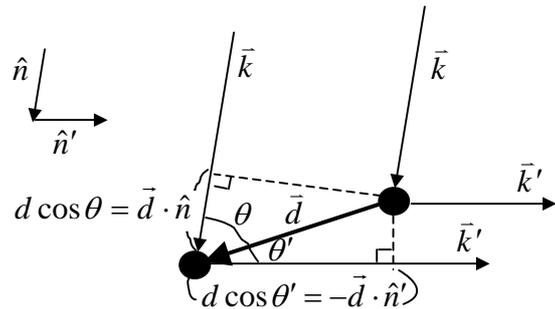


図 2

問題 3 (計 40 点)

- (a) (10 点) 格子定数 a の面心立方格子を、単位構造のある格子定数 a の単純立方格子とみなした場合の構造因子を求めなさい。
- (b) (10 点) 格子定数が a の単純立方格子の逆格子は、一辺 $2\pi/a$ の単純立方格子である。(a) で求めた構造因子が 0 となる逆格子点を白丸、0 とならない逆格子点を黒丸で描き、この逆格子を図示せよ。このとき黒丸が一辺 $4\pi/a$ の体心立方格子となっていることを確認せよ。
- (c) (10 点) ダイヤモンド構造の構造因子を、次の 2 つの方法でそれぞれ求めよ。
 - () 単位構造のある面心立方構造とした場合
 - () 単位構造のある単純立方構造とした場合
- (d) (10 点) (100), (111), (200), (311), (320) 面のうち、面心立方構造、ダイヤモンド構造においてブラッグ反射が起こらない面はどれか。

問題 4 (計 35 点) 3 つの粉末試料 A, B, C の結晶構造をデバイ・シェラー・カメラで調べた (図 1)。この 3 つの試料は全て単原子立方構造であり、1 つは体心立方構造、1 つは面心立方構造、もう 1 つはダイヤモンド構造をとることが分かっている。各試料において最初の 4 つの回折環の近似的な位置は表 1 のようになった。

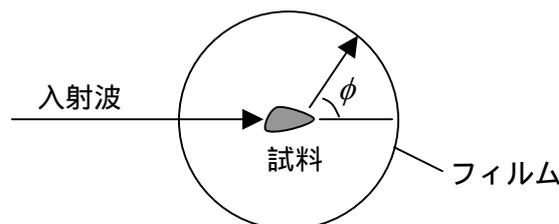


図 1

表1 最初の4つの ϕ の値

A	B	C
42.2°	28.8°	42.8°
49.2	41.0	73.2
72.0	50.8	89.0
87.3	59.6	115.0

- (a) (15点) A,B,Cの結晶構造を決定せよ。
- (b) (10点) 入射X線の波長は1.5 Åである。A,B,Cの慣用立方単位格子の一辺の長さを求めよ。
- (c) (10点) もしダイヤモンド構造の試料が、一辺の長さの等しい立方単位格子のセン亜鉛構造だった場合、最初の4つの回折環は何度の角度で生じるか。