

はじめにお読みください

この文章は、研究室に所属する学生が研究活動の一環として作成してくれたものです。研究室セミナーの時間に輪番で発表してもらい、研究に関連した事項の基礎知識の向上をはかりました。内容・文章ともに未だ不完全なものもありますが、2018 年度に調査してくれたものを公開いたします。

※学生の作成してくれたファイルをそのまま公開しております。ところどころ誤った記述もあるため、内容については保証いたしかねます。ご注意ください。
(2019 年度以降、少しずつ改訂していく予定です。)

2018 年 3 月 名古屋工業大学 川崎・石井研究室
<http://kawasaki.web.nitech.ac.jp/jp/tips/index.shtml>

【執筆者一覧】

・ 卒研究生

伊達 怜実、堀之内 理紗、山田 えみり、吉谷 駿、渡邊 裕介

・ M1

浅井 七海、亀岡 真祐子、近藤 航平、長谷川 毅、横井 和真、高橋 実夏子

・ M2

石亀 弘基、久野 潤也、中村 元海、林 遼治、松下 一樹、眞鍋 駿

・ D3

李 蒼昊

【X線回折】

XRDでH、He、Li、Beなどの軽元素の原子座標を決定するのが難しい理由を教えてください。これらの元素の結晶内座標を決定するには、どのような測定が有効ですか。

作成日： 2018年4月21日

担当者： 堀之内 理紗

XRDの測定原理は、試料にX線を照射した際に、X線が原子の周りにある電子によって散乱、干渉することで起こる回折を解析することであり、原子の核外電子あるいは物質内の電子密度の分布状態についての情報を知ることができます。X線が試料に当たると、X線の電場成分により試料内の電子は強制振動し、この振動電子が周りに電磁波である散乱光を放射します。試料表面にX線が入射するとき、結晶を構成している原子によるレイリー散乱が互いに干渉することによって反射が生じ、X線の回折が起きることによって散乱X線の強度が算出され、試料の結晶構造を調べることができます。しかし、XRDでは、原子番号の増大とともに散乱能が増加するため、電子数が少ない軽元素は回折の強度が小さく、回折が見えにくいいため、XRDはあまり有効ではありません。

したがって、軽元素の測定には中性子線回折が有効だと考えられます。XRDではX線が電子に当たって散乱するのに対し、中性子回折では中性子線が原子核に当たって散乱することによって結晶構造を調べることができ、原子核の位置や運動状態についての情報を得ることができます。また、軽原子、重原子とも同程度の振幅を示します。したがって、中性子線回折は電子の数に左右されず、軽元素の測定に適しています。また、原子核は電子に比べて大きいいため、原子座標も求めやすくなります。このことから、軽元素の結晶内座標を決定するには中性子線回折が適していると考えられます。Table 1にXRDと中性子線回折の比較を示します。

Table 1 XRDと中性子線回折の比較

XRD	中性子線回折
・ X線を電子に当てる ・ 原子番号が小さいものはあまり適していない ・ 原子番号が大きいほど散乱振幅が大きい ・ 装置が比較的小さい ・ 原子座標が求めにくい ・ 原子番号が大きいほど回折強度が大きい ・ 相互作用の大きさが比較的小さい ・ 非破壊分析が可能	・ 中性子線を原子核に当てる ・ 軽元素でも測定可能 ・ 散乱振幅はほとんどの原子核について同程度 ・ 原子炉が必要で大掛かりで高価 ・ 原子座標が求めやすい ・ 水素が最も回折強度が大きい ・ 同位元素により異なる値をとる ・ 磁気モーメントの測定が可能

参考文献

[1] X 線分析 基礎分析化学講座 24

[2]X 線分析最前線

[3]実験物理講座 22 中性子回折

[4]X 線物理学の基礎