

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)】

1C No.28 アモルファス材料の XRD では、なぜ明瞭なピークが観測されないのですか？アモルファス材料の XRD パターンから、原子間距離（動径分布関数）の解析をする方法について教えてください。

作成日： 2019 年 1 月 21 日

担当者： 林 遼治

原子が規則正しく配列している物質に、原子の間隔と同程度の波長（ $0.5\text{\AA}\sim 3\text{\AA}$ ）を持つ X 線が入射すると、各原子の電子により X 線が散乱される。散乱した X 線は干渉し合い、特定の方向で強め合う。これを X 線回折と呼ぶ。X 線回折が起こる条件は以下ブラッグの式で表される。

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

アモルファス材料は規則性のない無秩序な構造であるため、回折現象を起こす条件を見たいしていない。そのため、アモルファス材料の XRD では明瞭なピークは観測されない。

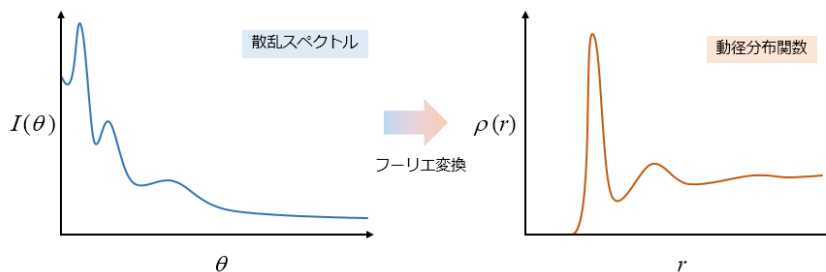
アモルファス材料の XRD パターンから原子間距離（動径分布関数）を求めることができる。まず、回折強度の測定データを以下のパターン関数 $P(r)$ にフーリエ変換する。

$$P(r) = \int \rho(r') \rho(r' - r) dr'$$

この式は簡単にいうとベクトル r で結ばれる 2 つの原子がどれくらいあるかを示す量である。次に次式で定義される動径分布関数によってアモルファス材料の構造を表現する。

$$D(r) = \frac{1}{4\pi} \int_{r=|r|} P(r) d\omega$$

$d\omega$ は微小立体角素片、積分は $r = |r|$ の球殻上で行う。簡単に言うと、距離 r の原子対が方向に関係なくどのくらいあるかを示す量である。以下に回折パターンから得た動径分布関数の図を示す。



参考文献

竹内伸 「結晶・準結晶・アモルファス」

HPC system 技術情報 https://www.hpc.co.jp/chem/library/c_rdf/