

ブラッグ反射と結晶構造解析

() 組 () 番 氏名 ()

分子の構造解析

化学における分子構造はどのようにして調べたのだろうか。現在でも X 線を利用した構造解析は分子構造の研究手段として重要な位置を占めている。特に、X 線構造解析においては、強い X 線源が必須のものであり、兵庫県西播磨の SPRING8 (放射光施設) は国際的にも注目の施設である。

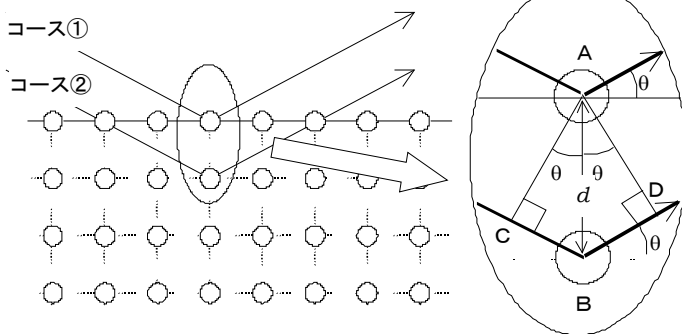
結晶の構造を見る → 単結晶に X 線を当ててその反射 X 線を調べる (X 線構造解析法) 「ラウエ斑点」
「ラウエ斑点」の様式を見ると結晶の種類分け可能。

詳細な結晶構造の解析法 (原子間距離などの測定) は、ブラッグ父子の研究功績 (結晶で反射される X 線の条件を発見) ブラッグの条件 $2d \sin \theta = n\lambda$ により可能となり現在でも、ブラッグの条件を使っているいろいろな分子構造などの解析に使われている。

ブラッグの条件 ※角度の測り方に注意!
($n=1,2,3,\dots$)
$$2d \sin \theta = n\lambda$$

ブラッグの条件を求める

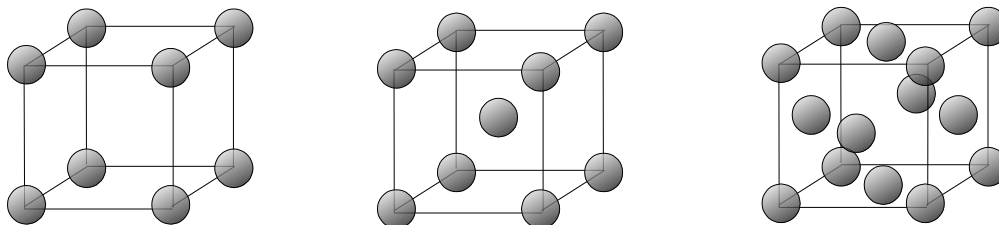
結晶面に対して θ の角度で入ってきた X 線が結晶の原子面で反射された二つのコース①、②についての干渉を調べてみる。



- 1 二つのコースの距離の差を求める。
- 2 強めあう条件、弱め合う条件を求めなさい。
- 3 強め合う (強く反射する) 条件を求めなさい。これが「ブラッグの条件」である。

通常実験で使われる X 線での実験では $n=1$ の条件がほとんどである。また、X 線構造解析実験では非常に強く放射される「固有 X 線 (陽極材料固有の特定波長の X 線)」の部分を利用する。

入門 具体的な結晶の原子面を考えなさい。



初級 上に示した「ブラッグの条件」を求める過程で、原子面の第一層、第二層の反射であるコース①、②のみを考慮しているが、原子面の第三層以上での反射を考慮しなかった理由を述べなさい。

ブラッグ反射と結晶構造解析 (解説)

() 組 () 番 氏名 ()

分子の構造解析

化学における分子構造はどのようにして調べたのだろうか。現在でも X 線を利用した構造解析は分子構造の研究手段として重要な位置を保っている。特に、X 線構造解析においては、強い X 線源が必須のものであり、兵庫県西播磨の SPRING8 (放射光施設) は国際的にも注目の施設である。

結晶の構造を見る → 物質に X 線を当ててその反射 X 線の強度を調べる (X 線構造解析法) 「ラウエ斑点」

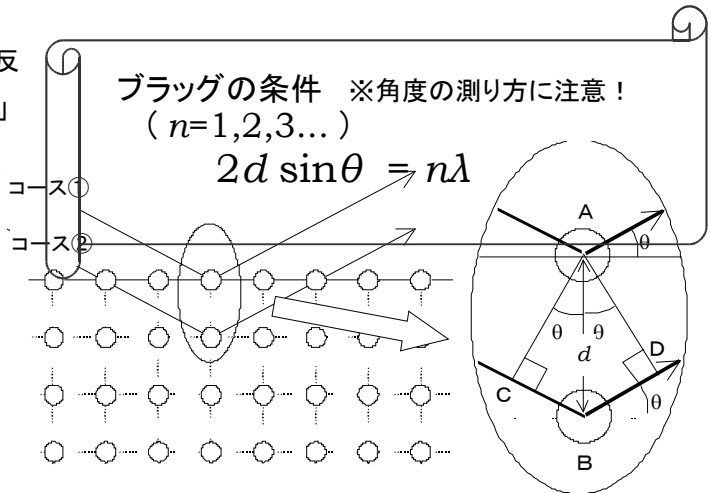
ブラッグ父子の研究功績 (結晶で反射される X 線の条件を発見) ブラッグの条件 $2d \sin \theta = n\lambda$ として有名な「ブラッグの条件」を求める

結晶面に対して θ の角度で入ってきた X 線が結晶の原子面で反射された二つのコース①、②についての干渉を調べてみる。

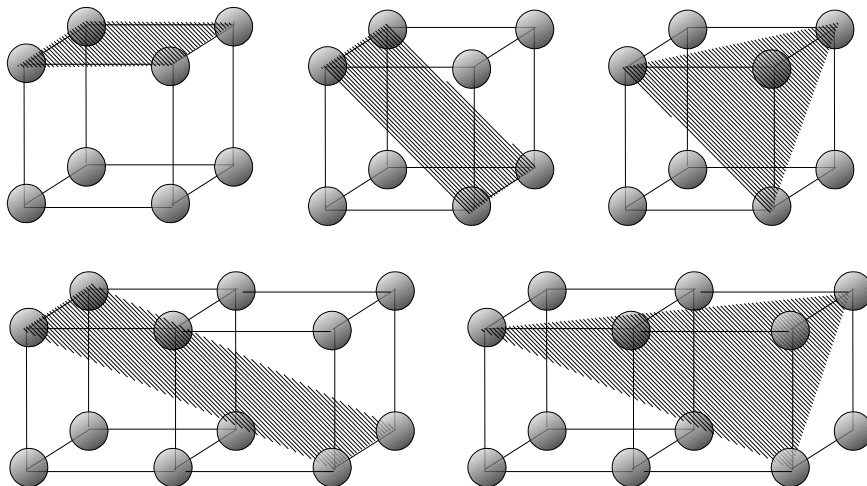
二つのコースの距離の差は CBD であるので、

原子面間距離 d より、 $2d \sin \theta$ である。二つのコースを進む X 線が強め合う条件 (強く反射するための条件) は $2d \sin \theta = n\lambda$ ($n=1,2,3,\dots$) である。これが、ブラッグ父子が発見した「ブラッグの条件」である。

また、通常実験で使われる X 線での実験では $n=1$ の条件がほとんどである。また、X 線構造解析実験では非常に強く放射される「固有 X 線 (陽極材料固有の特定波長の X 線)」を利用する。



入門 単純立方格子結晶の原子面を図示してみました。1 格子分で考えた原子面が 1 列目です。



初級 上に示した「ブラッグの条件」を求める過程で、原子面の第一層、第二層の反射であるコース①、②のみを考慮しているが、原子面の第三層以上での反射を考慮しなかった理由を述べなさい。

同じ条件になるから考えないだけ。具体的に示すと、第 1 層目と第 3 層目の距離の差は、 $2 \times 2d \sin \theta$ となるので、距離の差は波長の整数倍 (整数の整数倍は整数) になっている。

