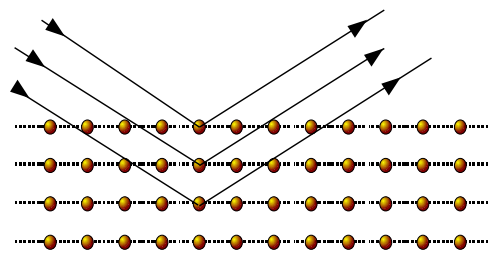


導出シリーズ 第58回 「ブラッグ反射の公式」

X線を結晶に照射すると、特定の角度に強く反射する。これを使って結晶構造を解析することができる。このときに使われるのが「ブラッグ反射の公式」である。

原子が規則的に配列している結晶では、原子の周りを回っている電子によって、X線(電磁波)が散乱される。このときの散乱されたX線が干渉することで、ブラッグ反射が起こるのだ。

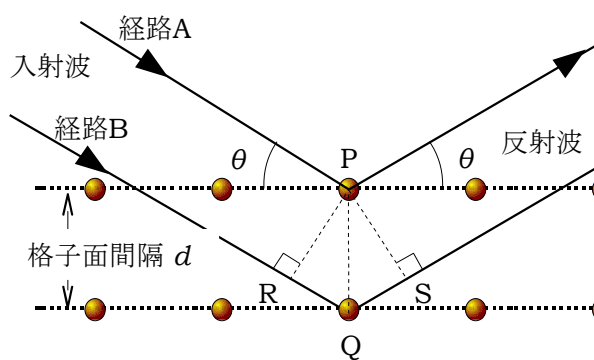


波の干渉

波の干渉は経路による位相のずれにより起こる。経路間での距離の差や反射面で起こる「位相のずれ」から、強めあう条件を求めることができる。ブラッグ反射で強く反射する条件をこの干渉の原理から求めてみよう。

経路A、Bにおいて、波面PR、PSにおいては両者の位相は一致している。この反射において、反射の条件は同一だから、反射による位相のずれは経路A、Bで起こらない。

位相のずれは、両経路の距離の差RQSにより起こる。この経路A、BのX線が互いに強め合って強く反射しているのなら、この距離の差が波長の整数倍でなくてはならない。



よって、強く反射するための条件「ブラッグ反射」の条件は $2d \sin \theta = m\lambda$ (m は整数) だ。

教科書のとおりの説明であればこれで終わりになるのだが...

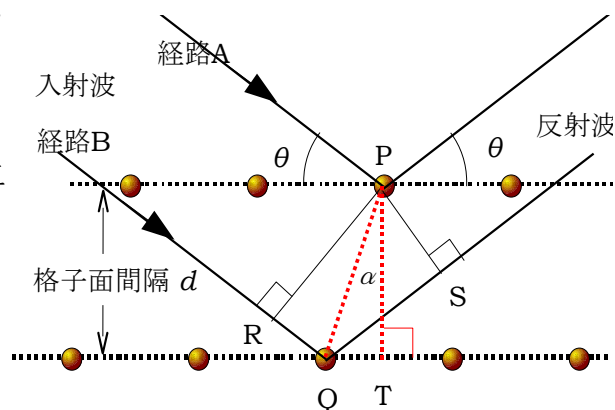
しかし、結晶構造は上の図のようになるとは限らない。次のような場合もあるのだ。この場合の「ブラッグ反射」のための条件はどうなるのだろうか？

距離の差はRQSであることは変わらないので、この距離を計算すればよい。ここで、 $\angle TPQ = \alpha$ とすると、次の関係式が成立する。

$$PQ \cos \alpha = d \quad \dots \textcircled{1}$$

$$QR = PQ \sin(\theta - \alpha) \quad \dots \textcircled{2}$$

$$QS = PQ \sin(\theta + \alpha) \quad \dots \textcircled{3}$$



以上の3つの関係式より、距離の差RQSを求めると $RQS = PQ \sin(\theta - \alpha) + PQ \sin(\theta + \alpha)$ である。ここで、 $\sin(\theta - \alpha) + \sin(\theta + \alpha) = 2 \sin \theta \cos \alpha$ (和積変換公式適用)より、2つの経路の距離の差は $RQS = 2 PQ \sin \theta \cos \alpha = 2d \sin \theta$ になることが分かる。よって、距離の差が波長の整数倍のとき強く反射するので、 $2d \sin \theta = m\lambda$ (m は整数) となり、この場合も結論は同じだ(当然!)。

※ 教科書の説明だけで納得してしまっていないのだ。自分でしっかりと確かめよう!