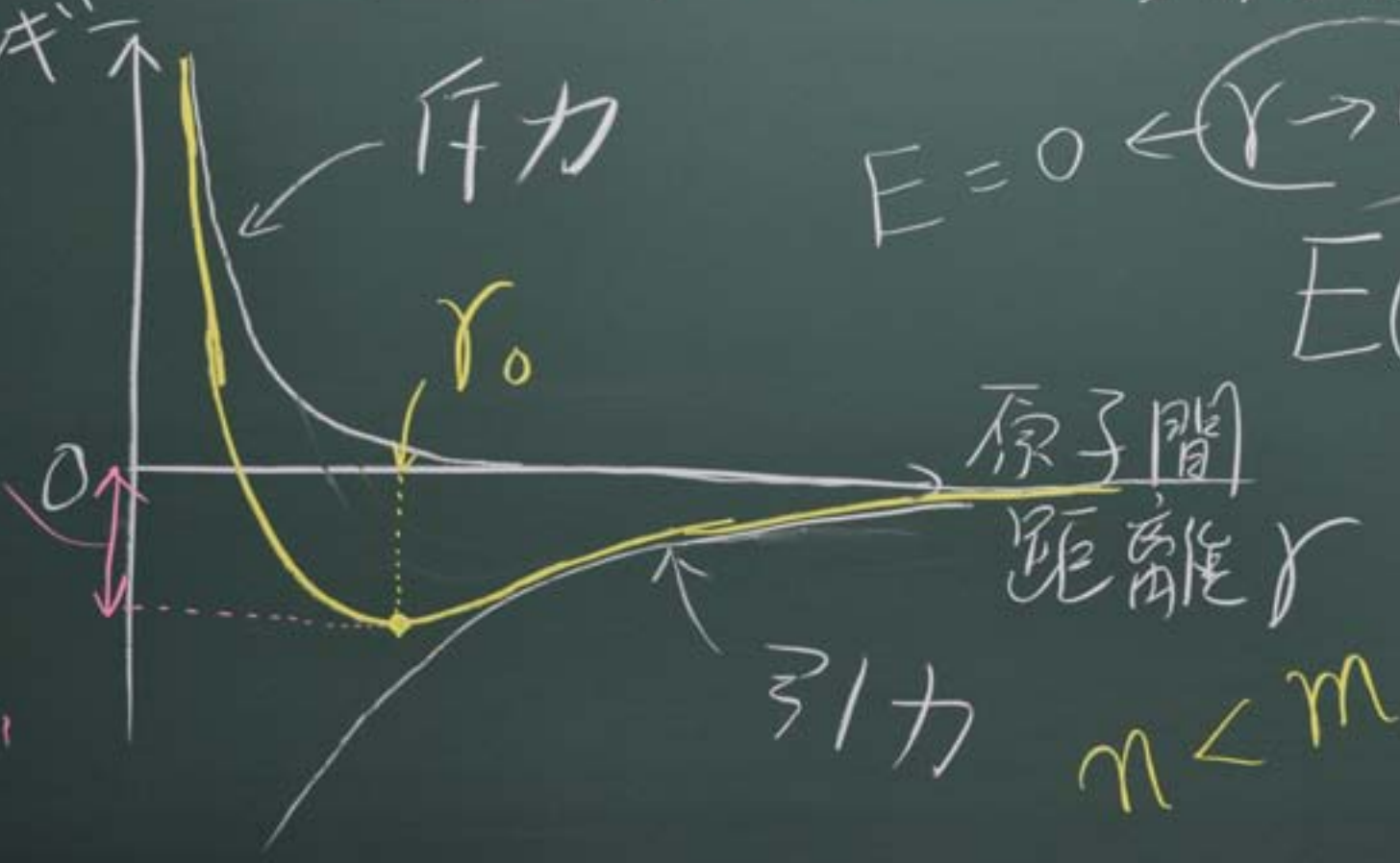


3.3 原子間力と化学結合

エネルギー

結合エネルギー



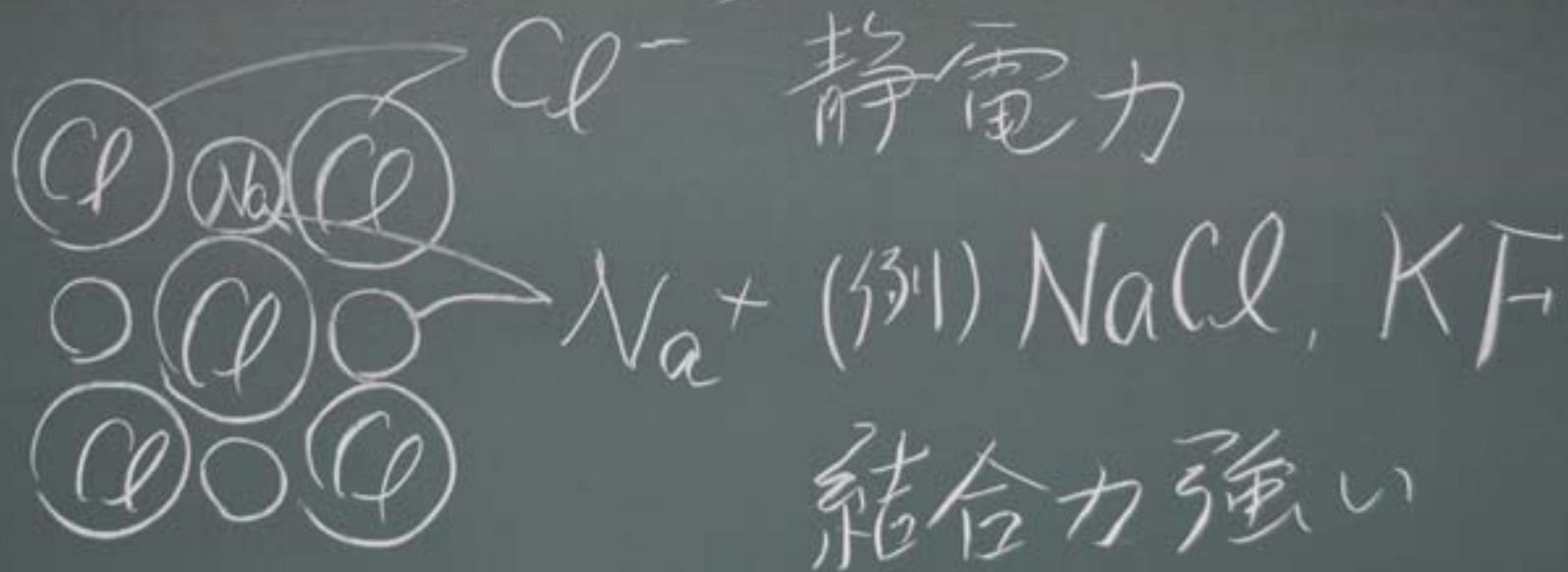
$E=0 \leftarrow r \rightarrow \infty$

$$E(r) = -\frac{\alpha}{r^m} + \frac{\beta}{r^n}$$

引力 $m < n$ 斥力

化学結合の種類

(1) イオン結合 ... 正負のイオン間に働く



(2) 共有結合

$(3s)^2(3p)^2 \rightarrow sp^3$ 混成軌道



スピンは反平行
交換エネルギー



(例) Si, ダイアモンド

結合力 極めて強い

(2) イオン性を持つ共有結合

イオン性
④ ↓

III-V族	GaAs, InP, GaN
II-VI族	ZnS, ZnO, ...

へき開

(3) 金属結合



... 価電子を全ての原子で共有

Al, Au, Ag, Cu, Fe...

結合が弱い。

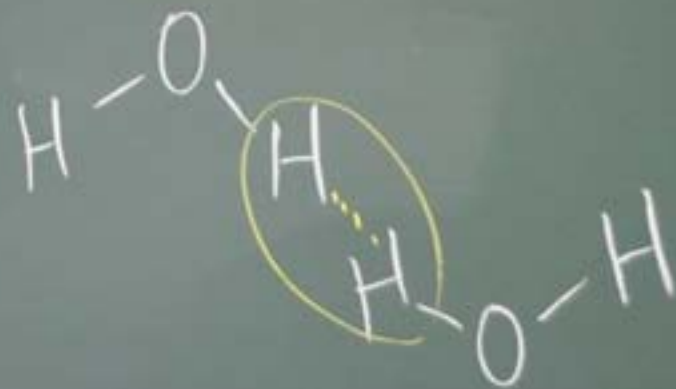
(4) van der Waals 結合

双極子による相互作用

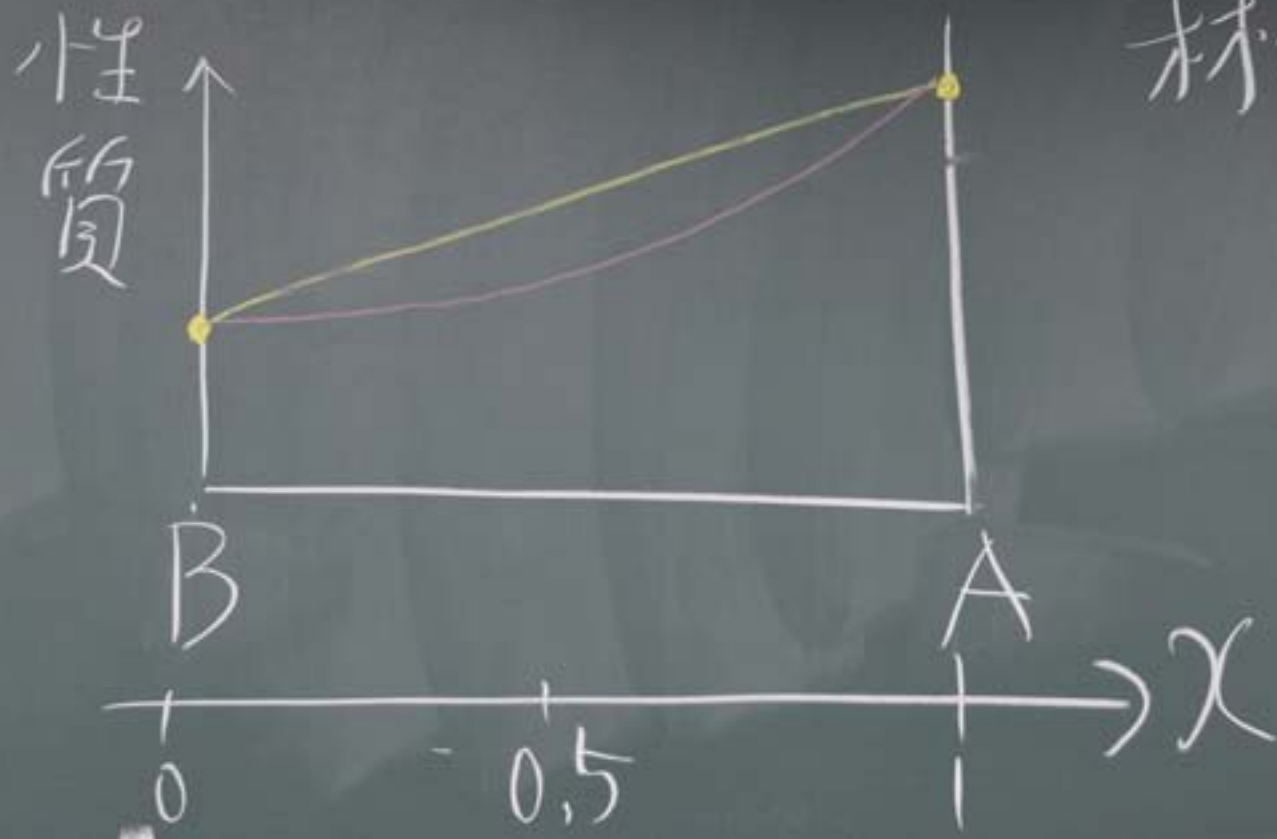
分極

希ガスの結晶 (Ar)

(5) 水素結合



ベガード則. 合金, 混晶の性質



材料 A + B

↓

$A_x B_{1-x}$

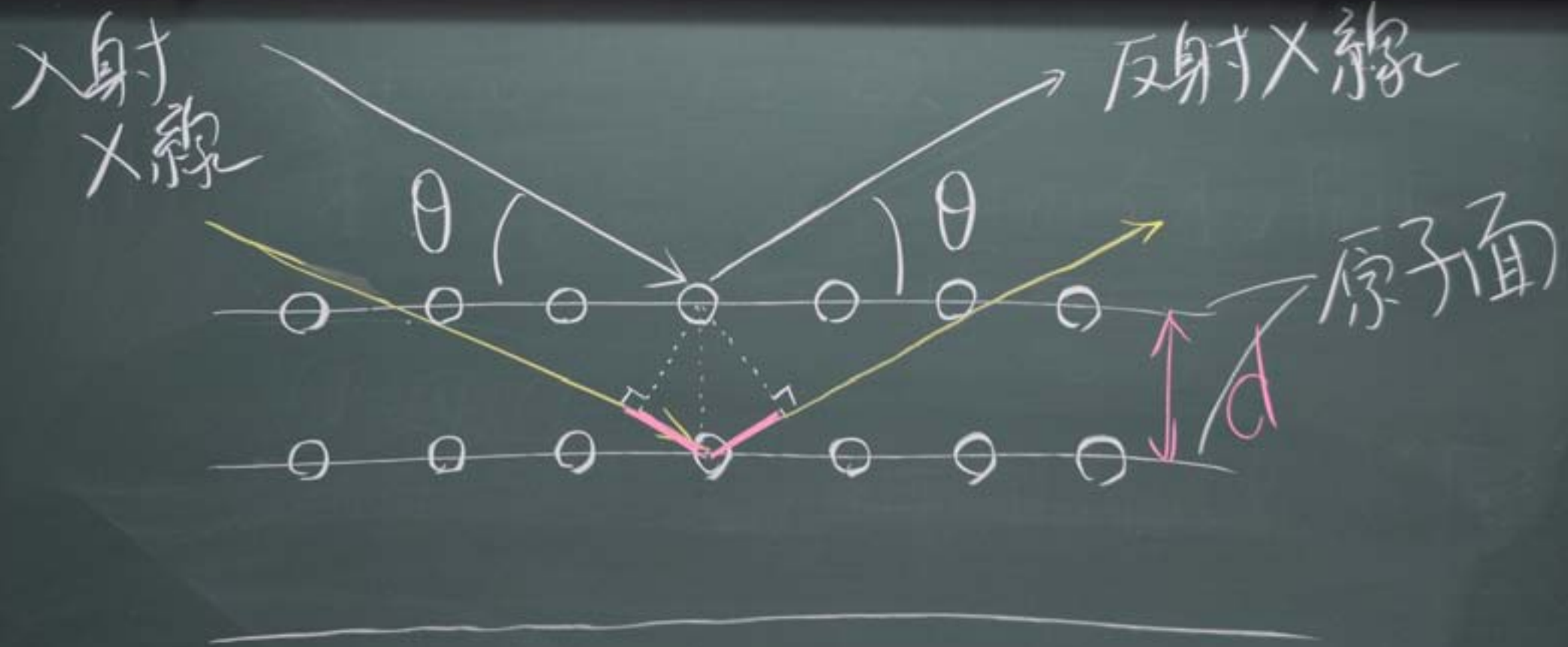
3.4 X線回折

原子(電子)により散乱

固体によるX線の散乱、回折

↓
原子面からの反射で考える





入射 X 射线

反射 X 射线

原子面

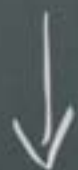
d

$$2d \sin \theta = n \lambda \quad (n=1, 2, \dots)$$

X線の波長

ブラッグの回折条件

~ 原子間隔
(1 Å)



材料の評価

(1) 材料の決定

回折X線強度



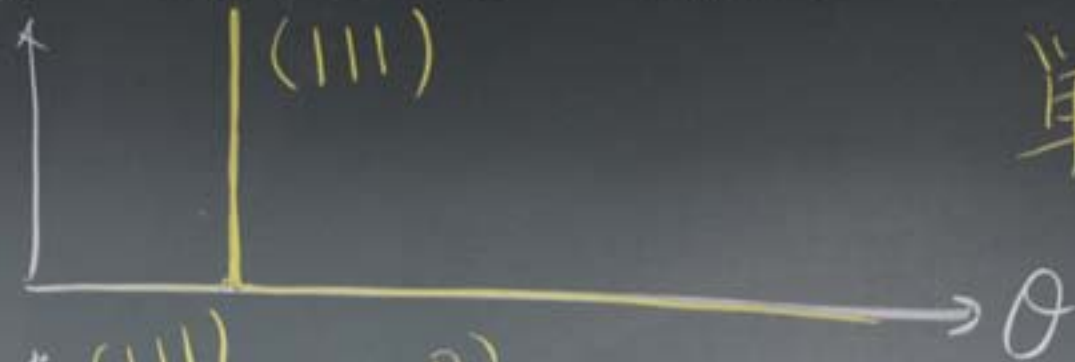
$\theta \rightarrow d$

$$d = 1.432615 \text{ \AA}$$

面間隔の決定 + 結晶構造
の情報

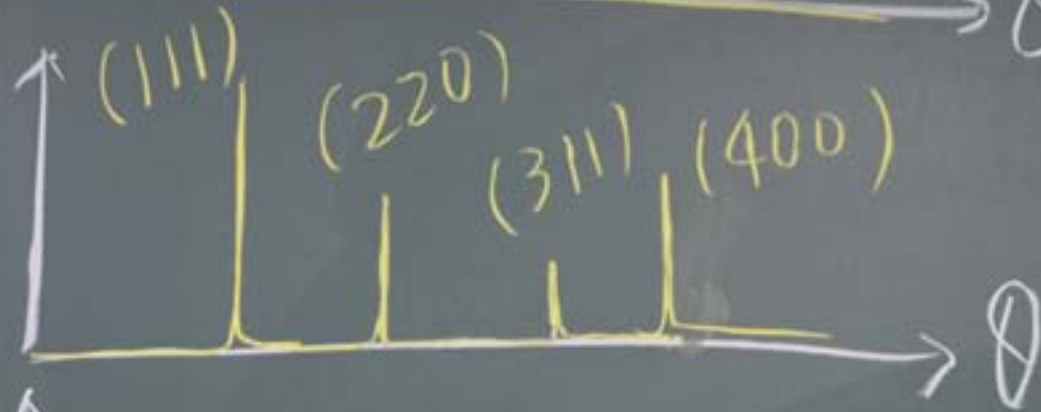
(2) 結晶の配向性の評価

試料 A

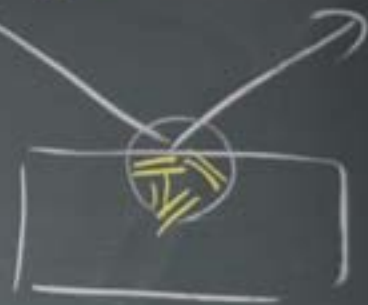


単結晶, (配向した) 多結晶

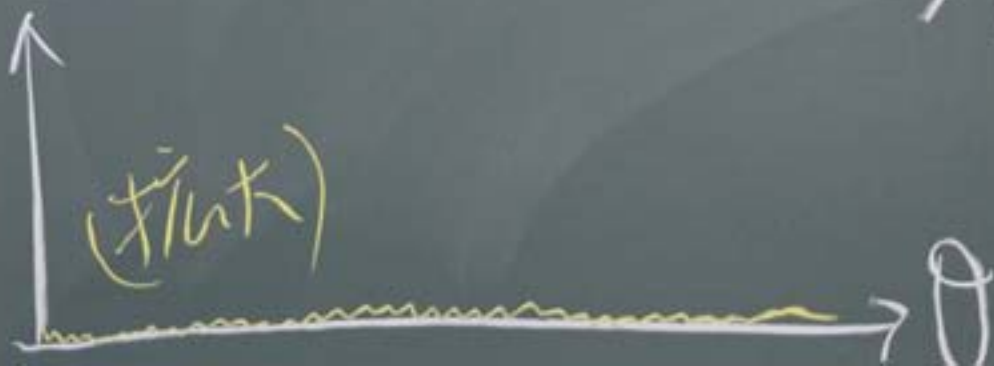
B



多結晶

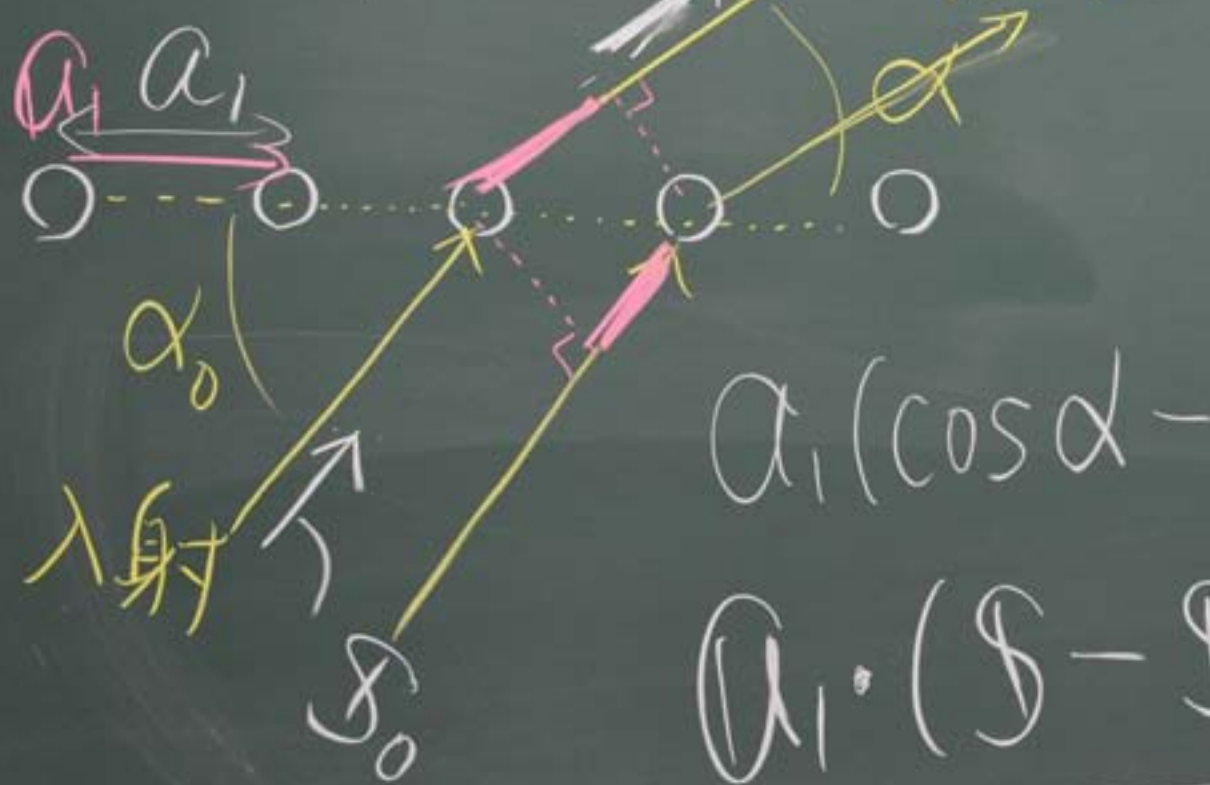


C



非晶質

(一次元)



$$a_1(\cos\alpha - \cos\alpha_0)$$

$$a_1 \cdot (S - S_0) = h_1 \lambda$$

回折条件

x, y, z 軸と、X線 (入射, 散乱) のなす角
 $(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0), (\alpha, \beta, \gamma)$ とする

3次元結晶に対する回折条件

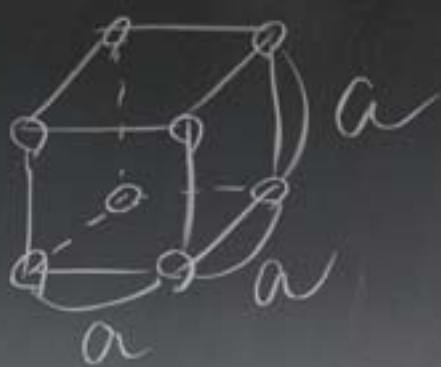
$$\begin{cases} a_1(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = h_1 \lambda \\ a_2(\cos \beta - \cos \beta_0) = h_2 \lambda \\ a_3(\cos \gamma - \cos \gamma_0) = h_3 \lambda \end{cases}$$

h_1, h_2, h_3

は整数

von Laueの
基本式

單純立方格子



$$a_1 = a_2 = a_3 = a$$

兩邊 2 乘して和

$$a^2 (\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma - 2 \cos \alpha \cos \alpha_0 - 2 \cos \beta \cos \beta_0 - 2 \cos \gamma \cos \gamma_0 + \cos^2 \alpha_0 + \cos^2 \beta_0 + \cos^2 \gamma_0)$$

$$= 2a^2 (1 - \cos \alpha \cos \alpha_0 - \cos \beta \cos \beta_0 - \cos \gamma \cos \gamma_0)$$

S と S₀ の対角は ϕ

$$\cos \phi = \mathbf{S} \cdot \mathbf{S}_0 = \cos \alpha \cos \alpha_0 + \cos \beta \cos \beta_0 + \cos \gamma \cos \gamma_0$$

$$\rightarrow = 2a^2(1 - \cos \phi) = 4a^2 \sin^2 \frac{\phi}{2}$$

$$4a^2 \sin^2 \frac{\phi}{2} = \lambda^2 (h_1^2 + h_2^2 + h_3^2)$$

$$2d \sin \theta = n \lambda \quad (n=1, 2, \dots)$$

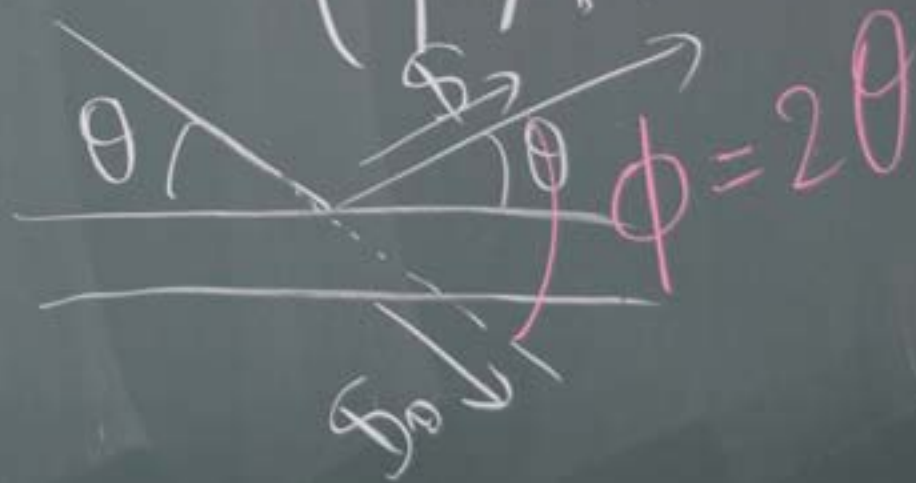
X線の波長

ブラッグの回折条件

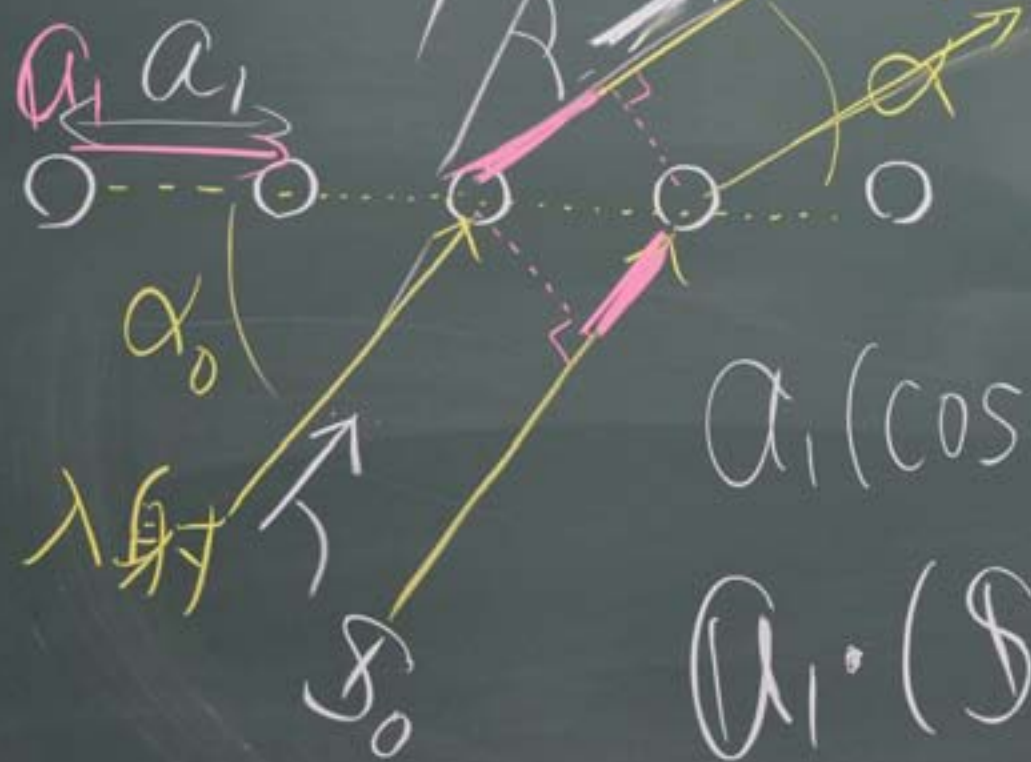
~ 原子間距離

(1 Å)

↓
材料の表面



(一次元) ϕ δ 散乱



$$a_1 (\cos \alpha - \cos \alpha_0)$$

$$a_1 \cdot (\delta - \delta_0) = \hbar v \lambda$$

回折条件

$$2a \sin \theta = \lambda \sqrt{h_1^2 + h_2^2 + h_3^2}$$

$$2 \cdot \frac{a}{\sqrt{h_1^2 + h_2^2 + h_3^2}} \sin \theta = \lambda$$

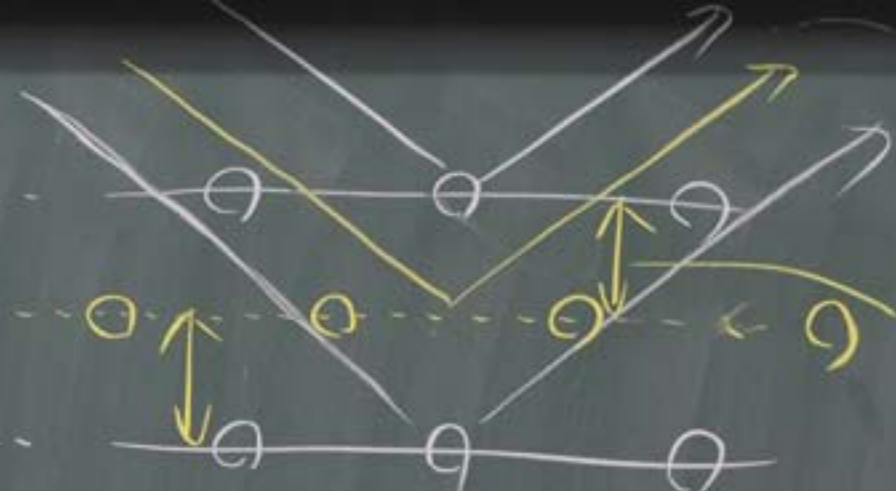
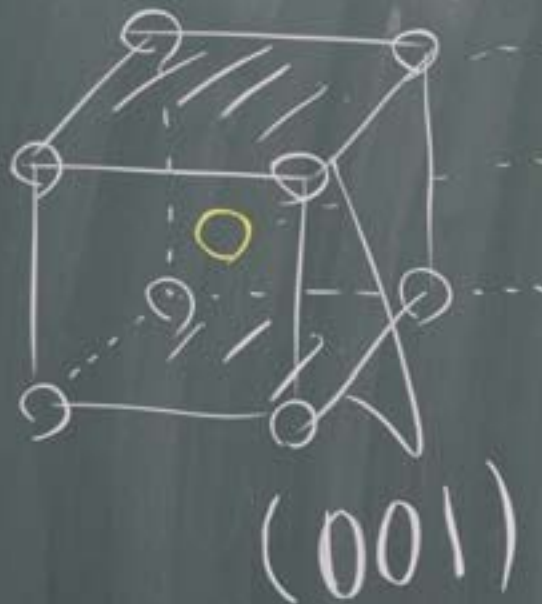
$$\left. \begin{array}{l} h_1 \leftrightarrow nh \\ h_2 \leftrightarrow nk \\ h_3 \leftrightarrow nl \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{a's } \lambda \\ 2d \sin \theta = n\lambda \end{array}$$

3.6. 回折X線の強度

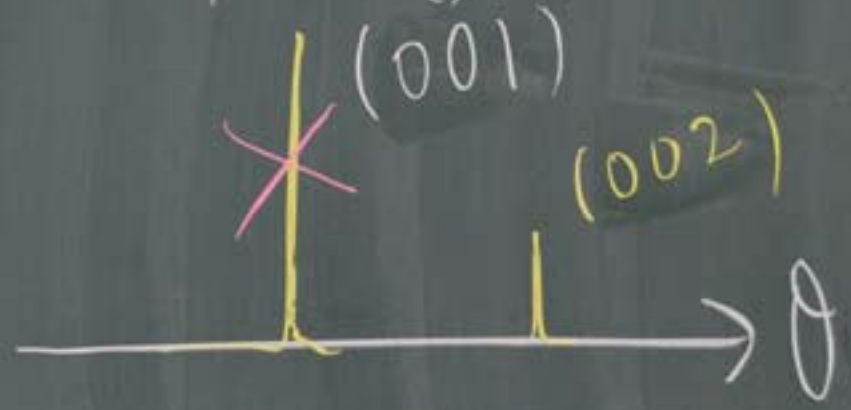
$$\text{原子散乱因子} = \frac{\text{原子による散乱強度}}{\text{電子による散乱}}$$

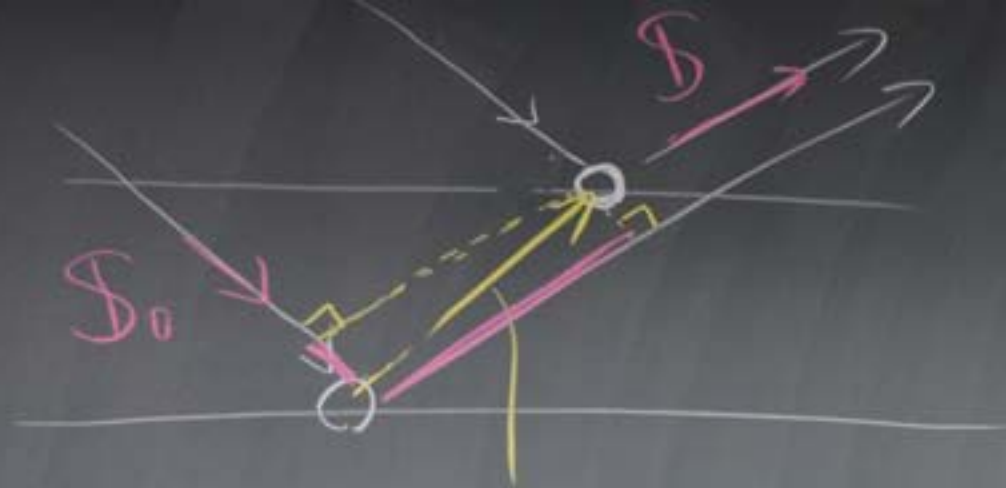
~ Z (原子番号)

$$\text{構造因子} = \frac{\text{単位セル中の全原子による散乱}}{\text{電子による散乱}}$$



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





行路差

$$r_h \cdot (S - S_0)$$

$$r_h = U_h a_1 + U_h a_2 + W_h a_3$$

位相差 $\frac{2\pi}{\lambda} r_h \cdot (S - S_0)$

Φ_h

$$\Phi_k = 2\pi(U_k h_1 + V_k h_2 + W_k h_3)$$

$$\therefore \text{構造因子 } F = \sum_k f_{sk} e^{i\Phi_k}$$

散亂X線強度 $|F|^2$

原子散亂因子