

演 題	無機結晶のラウエパターンシミュレーションプログラムの開発	
発 表 者 (所 属)	内堀 可奈子, 奥 清高, 藤井 秀彦, 野口 文雄, 小林 秀彦 (埼玉大学工学部)	
連 絡 先	〒338-8570 埼玉県さいたま市下大久保 255 埼玉大学工学部応用化学科 TEL / FAX 048-858-3536 e-mail noguchi@apc.saitama-u.ac.jp	
キ ー ワ ー ド	Transmission Laue method , Back-reflection Laue method	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど	ラウエ法は, 最も古い X 線回折法であり, 結晶の方向の決定や特性の判断には欠かせない分析法である. 本研究は, その手助けとなるラウエ法のシミュレーションソフトウェアの開発を行った.	
環 境	適 応 機 種 名	DOS / V
	O S 名	WindowsNT / 2000
	ソ ー ス 言 語	C , C++(コンパイラ : Borland 社 Borland C++ Builder6)
	周 辺 機 器	特になし
流 通 形 態 (右 の い ず れ か に を つ け て く だ さ い)	・日本コンピュータ化学会の無償利用 ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他 未定	具 体 的 方 法

1. 目的

種々の X 線回折法は無機結晶の構造を知るには欠かせない手法である. これまで本研究室では無機結晶の同定などに用いられる粉末法 X 線回折シミュレーションを行うソフトウェアの開発を行ってきた. 一方, ラウエ法は単結晶の配向を測定するのに用いられる方法であり, 簡便な方法として多用されている. そこで今回は, ラウエ法に注目した. ラウエ法では, 対称性の低い結晶や X 線が試料に垂直に入射していない場合などでは, 得られる回折図形は複雑であり, グノモン投影法やステレオ投影法などで行われる解析も容易ではない. そこで本研究では, その解決策として任意の X 線入射方向についての, 透過ラウエ法, 背面ラウエ法の両法をサポートしたラウエ法のシミュレーションソフトウェアを開発した. なお, 本ソフトウェアでは CIF(Crystallographic Information File)を読み込む仕様であるため, 無機結晶データベース ICSD(Inorganic Crystal Structure Database)に収録されている固溶体を含む 60,000 件以上の無機結晶のデータについての計算が可能である.

2. ソフトウェアの概要

2.1 ラウエ斑点位置算出方法

ラウエ法では様々な波長の X 線を含む白色 X 線が用いられるため、反射球の半径は連続的に変化してしまい考え方が複雑になってしまう。そこで、今回は逆格子点を反射球の原点に向かう一定の長さの線分とすることで反射球の半径を固定することを考えた。逆格子の線分が反射球と交わるとき、Bragg の法則を満たすので回折線を生じる。本ソフトウェアは、管電圧、カメラ長および X 線入射方向をユーザー入力できる仕様とした。X 線入射方向の入力はミラー指数、方向指数および極座標による指定が可能である。

2.2 反射強度算出方法

ロレンツ因子を $(2\sin^2 \theta)^{-1}$ として強度 I を以下の式より算出した。

$$I = \lambda^4 \times |F|^2 \times LP \quad : \text{入射 X 線波長, } F: \text{構造因子, } LP: \text{ロレンツ偏り因子}$$

$$F = \sum f_j \exp(2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)) \quad LP = \frac{1 + \cos^2 2\theta}{4 \sin^2 \theta}$$

f_j : j 番目のイオンの原子散乱因子

: Bragg 角

(hkl) : 反射指数, (x_j, y_j, z_j) : j 番目のイオンの原子座標

3. 出力例

ラウエ法では、様々な波長の X 線を一度に回折させていることから整数倍の波長の X 線で回折したラウエ斑点は、同時に回折を起こし重なってしまう。そこで、各ラウエ斑点が何個の反射指数を含むかを、色分けして多色表示する機能を付けた。(111)面に垂直な方向から X 線を入射させた場合の透過ラウエ法、背面ラウエ法による回折パターンを示す(Fig.1)。透過ラウエパターンでは同一晶帯に属する面によるラウエ斑点の並びは楕円を成し、背面ラウエパターンでは双曲線を成しており、ともに 3 回対称の図が観察できた。また本ソフトウェアでは極座標指定により連続的な描画もできる仕様とした。極座標で X 線入射方向を指定した鉄の連続回折パターンを示す(Fig.2)。この機能によって連続的に変化する回折パターンを観察できた。なお、これらの回折パターンはビットマップ画像として保存可能である。

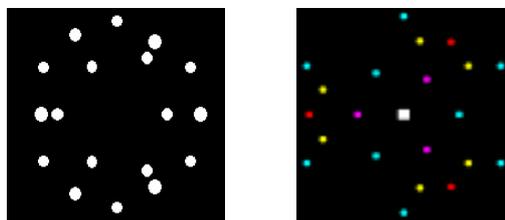


Fig.1 Al の透過ラウエパターン(左)と背面ラウエパターン(右)
(単色表示) (多色表示)
(管電圧: 20kv, カメラ長: 30mm)

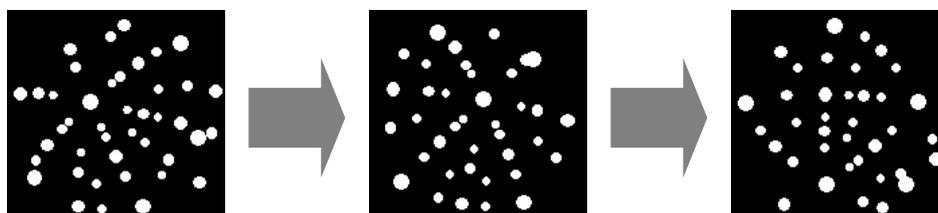


Fig.2 鉄の連続透過ラウエパターン(管電圧: 12kv, カメラ長: 30mm)
入射 X 線方向 ($\theta = 15^\circ$, $\phi = 30^\circ$) ($\theta = 15^\circ$, $\phi = 50^\circ$) ($\theta = 15^\circ$, $\phi = 80^\circ$)

4. 今後の展望

連続描画機能に合わせて、結晶を回転させる機能をつけたい。

【参考文献】カリティ, 「X 線回折要論」, アグネ(1980)

内堀可奈子, 梅下友則, 野口文雄, 小林秀彦, 化学ソフトウェア学会年会 2001 研究討論会