散乱強度 I

$$I = |F|^2 \propto \left|\sum_j \exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j)\right|^2$$ すべての単位胞についての和

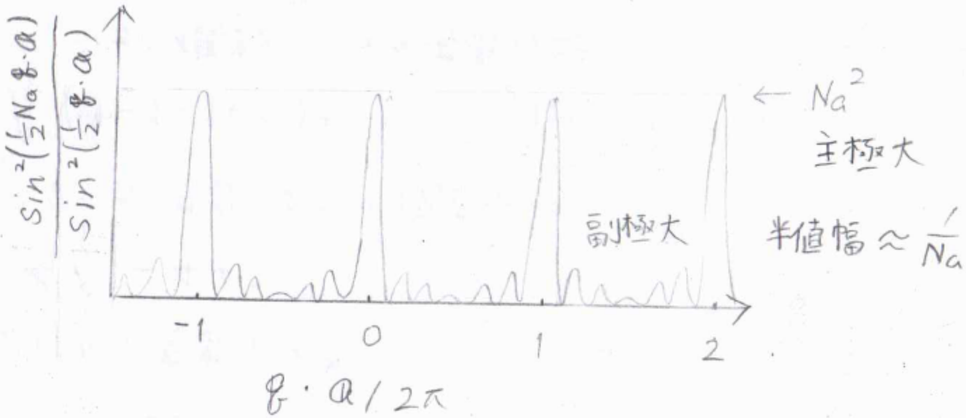
$\mathbf{r}_j = x_j\mathbf{a} + y_j\mathbf{b} + z_j\mathbf{c}$ として

$$I \propto \left|\sum_{x=0}^{N_a-1}\exp(ix\mathbf{q}\cdot\mathbf{a})\right|^2 \left|\sum_{y=0}^{N_b-1}\exp(iy\mathbf{q}\cdot\mathbf{b})\right|^2 \left|\sum_{z=0}^{N_c-1}\exp(iz\mathbf{q}\cdot\mathbf{c})\right|^2$$

$$\left|\sum_{x=0}^{N_a-1}\exp(ix\mathbf{q}\cdot\mathbf{a})\right|^2 = \frac{|1-\exp(iN_a\mathbf{q}\cdot\mathbf{a})|^2}{|1-\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a})|^2} = \frac{\sin^2(\frac{1}{2}N_a\mathbf{q}\cdot\mathbf{a})}{\sin^2(\frac{1}{2}\mathbf{q}\cdot\mathbf{a})}$$

ラウエ関数

$$\frac{\sin^2(\frac{1}{2}N_a\mathbf{q}\cdot\mathbf{a})}{\sin^2(\frac{1}{2}\mathbf{q}\cdot\mathbf{a})}\frac{\sin^2(\frac{1}{2}N_b\mathbf{q}\cdot\mathbf{b})}{\sin^2(\frac{1}{2}\mathbf{q}\cdot\mathbf{b})}\frac{\sin^2(\frac{1}{2}N_c\mathbf{q}\cdot\mathbf{c})}{\sin^2(\frac{1}{2}\mathbf{q}\cdot\mathbf{c})}$$



N_aがとても大きいとき、副極大は小さく、主極大は鋭く大きいピークになる

$$\begin{cases}\mathbf{q}\cdot\mathbf{a} = 2\pi h \\ \mathbf{q}\cdot\mathbf{b} = 2\pi k \\ \mathbf{q}\cdot\mathbf{c} = 2\pi l\end{cases}$$ (h, k, lは整数) ・ラウエ条件 $\mathbf{q} = \mathbf{G}$

ラウエ指数

逆格子ベクトル　　$\mathbf{a}_1 = \mathbf{a}, \mathbf{a}_2 = \mathbf{b}, \mathbf{a}_3 = \mathbf{c}$と再定義

$$\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3,\quad \mathbf{a}_i\mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

$\mathbf{b}_1$は、$\mathbf{a}_2$と$\mathbf{a}_3$に対して垂直となることから、$\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3$に平行となる

$\mathbf{b}_1 = \alpha\,\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3$とすると、$\mathbf{b}_1\cdot\mathbf{a}_1 = \alpha V = 2\pi$, $\alpha = \frac{2\pi}{V}$

$\mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$についても同様に考えると

$$\mathbf{G} = \frac{2\pi}{V}h\,\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3 + \frac{2\pi}{V}k\,\mathbf{a}_3\times\mathbf{a}_1 + \frac{2\pi}{V}l\,\mathbf{a}_1\times\mathbf{a}_2$$

(hkl)面上の任意の点の位置ベクトル $\mathbf{p}$

(hkl)面と平行なベクトル $\mathbf{p}_0$

$$\mathbf{G}\cdot\mathbf{p}_0 = x_0(2\pi-2\pi) + y_0(2\pi-2\pi)$$

$$\mathbf{G}\cdot\mathbf{p} = 2\pi + x(2\pi-2\pi) + y(2\pi-2\pi)$$

$\mathbf{G}$は、格子面に垂直、その大きさは $\frac{2\pi}{d_{hkl}}$

ラウエ指数とミラー指数は密接な関係