

## 化学実験 B 3 レポートシート (粉末 X 線回折)

番号 \_\_\_\_\_ 氏名 \_\_\_\_\_

番号 \_\_\_\_\_ 氏名 \_\_\_\_\_

### IV. 粉末 X 線回折パターンの測定と解析

A-1. 次の級数の公式が成立することを、オイラーの公式 ( $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$ ) にも注意して教員 (YY) にも分かるように示せ。

$$f(x) = \sum_{n=0}^N \sin(x + na) = \begin{cases} [\sin[(N+1)a/2] / \sin(a/2)] \sin\left(x + \frac{N}{2}a\right) & a \neq 2m\pi \\ (N+1)\sin x & a = 2m\pi \end{cases}$$

A-2. Igor を用いて  $f(x)$  の振幅  $A$  の大きさがどう変化するかを、 $N=5$  と  $N=11$  の場合について、 $a$  に対して  $A^2/(N+1)^2$  を  $-3\pi < a < 3\pi$  の範囲で図示せよ。

B. 【余裕があれば】高校の時に習った厚さ  $d$  のシャボン玉薄膜の光の干渉の話では、光の強め合う条件はシャボン玉の薄膜の屈折率を  $n$  として

$$2nd \cos \theta = \left(m + \frac{1}{2}\right)\lambda$$

だった。Bragg の式 ( $2d \sin \theta = n\lambda$  ここで  $n$  は整数) との違いがなぜ生まれるのかを、教員 (YY) にも分かるように説明せよ。

C. 添付の CsCl についての X 線回折パターン (他の物質でもよい) の高角側 ( $2\theta > 50^\circ$ ) の回折線について、分裂したピーク位置について  $\sin\theta_1/\sin\theta_2$  を計算し、 $K_{\alpha 1}$  線 (154.06 pm) と  $K_{\alpha 2}$  線 (154.44 pm) の波長の比と比較せよ。

## 化学実験 B 3 準備実験 (IV 粉末 X 線回折)

D. 添付のアルカリ塩化物等の結晶の粉末 X 線回折パターンから、それぞれの回折ピークを読み取り、添付の excel のシートの表を完成させ、すべて立方晶として、格子定数を定め、回折ピークの指数付けを行え。アルカリ塩化物としては、塩化ナトリウム  $\text{NaCl}$  と塩化セシウム  $\text{CsCl}$  は必ず解析し、残りの塩化銅(I) も含む中から、最低 1 つは解析して見ること。 $\text{NaCl}$  と  $\text{CsCl}$  で表れる回折ピークのちがいについて、教員 (YY) にも分かるように述べよ。

E. 測定した塩化銀あるいは金属銀の粉末 X 線回折パターンから、それぞれの回折ピークを読み取り、添付の excel のシートの表を完成させ、立方晶として格子定数を定め、回折ピークの指数付けを行え。

F. テキスト(IV-1)式にしたがって、測定した金属銀 (あるいは塩化銀) の粉末 X 線回折パターンから、結晶粒径を推定せよ。

### ☆図・表の添付

(イ) 設問 A-2 で作成した図と (ロ) 測定した塩化銀あるいは金属銀の粉末 X 線回折パターンに指数付けした図を印刷して添付すること