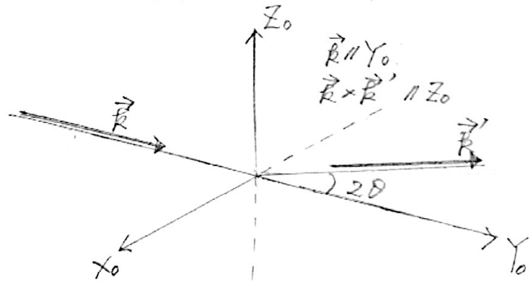
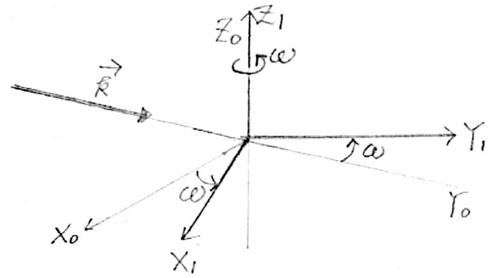
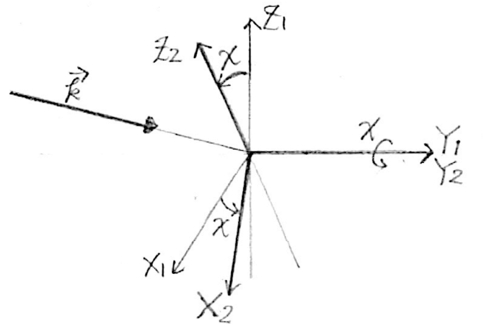
〈4軸回折計の角度計算と軸立て〉



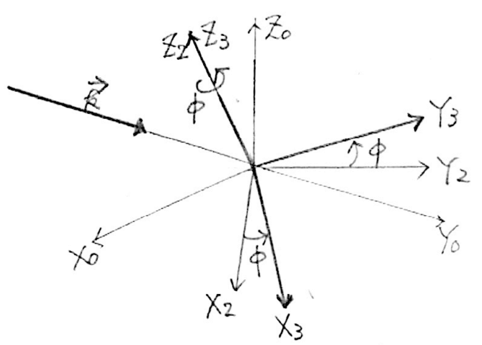

① $\omega = 0$, $\chi = 0$, $\phi = 0$ での初期座標軸




② $Z_0$軸まわりに $\omega$ だけ回転
$X_0 \to X_1$, $Y_0 \to Y_1$, $Z_0 \to Z_1$ に移動

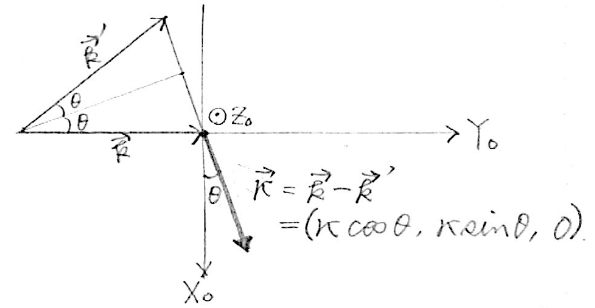



③ $Y_1$軸まわりに $\chi$ だけ回転
$X_1 \to X_2$, $Y_1 \to Y_2$, $Z_1 \to Z_2$ に移動




④ $Z_2$軸まわりに $\phi$ だけ回転
$X_2 \to X_3$, $Y_2 \to Y_3$, $Z_2 \to Z_3$ に移動

◎回折計に固定された試料の位置に XYZ軸がついていて、それが $\omega, \chi, \phi$ の回転といっしょに動く、と考える。
ただし、XYZ軸と試料の結晶軸との関係は この段階では 不明である。




初期座標軸で表した散乱ベクトル $\vec{K}$.

◎4軸回折計の $\omega$, $\chi$, $\phi$ 回転は ちょうど オイラー角 $\alpha = \omega$, $\beta = \chi$, $\gamma = \phi$ のオイラー回転に相当している。その公式は、次のとおり。
空間に固定された点 の旧座標系 $X_0Y_0Z_0$ での座標 $(x_0, y_0, z_0)$ と、回転後の座標系 $X_3Y_3Z_3$ での座標 $(x_3, y_3, z_3)$ とは、3行3列の行列

$$\hat{R} = \begin{bmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\beta & 0 & \sin\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\gamma & -\sin\gamma & 0 \\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

を使って、

$$[x_3, y_3, z_3] = [x_0, y_0, z_0]\hat{R}, \quad \begin{bmatrix} x_0 \\ y_0 \\ z_0 \end{bmatrix} = \hat{R} \begin{bmatrix} x_3 \\ y_3 \\ z_3 \end{bmatrix}$$

と表される。(応用群論§6.2)

◎ここで、空間に固定されているのは、$\vec{k}$, $\vec{k}'$, $\vec{K}$ である。
$\vec{k}$ は固定されており、$\vec{k}'$ は $2\theta$ で決まる。
回折計を動かして $\omega, \chi, \phi$ を回転させても、
$\vec{k}$, $\vec{k}'$, $\vec{K} = \vec{k}' - \vec{k}$ は動かない。

◎$X_0Y_0Z_0$系で表した $\vec{K} = (K\cos\theta, K\sin\theta, 0)$ は回折計の $(\omega, \chi, \phi)$ 回転後の座標系 $X_3Y_3Z_3$ で表すと、

$$[K_{X3}, K_{Y3}, K_{Z3}] = [K\cos\theta, K\sin\theta, 0]\,\hat{R}_{\omega,\chi,\phi}$$

$$K_{X3} = K\{\cos\chi\cos\phi\cos(\omega-\theta) - \sin\phi\sin(\omega-\theta)\}$$

$$K_{Y3} = K\{-\cos\chi\sin\phi\cos(\omega-\theta) - \cos\phi\sin(\omega-\theta)\}$$

$$K_{Z3} = K\sin\chi\cos(\omega-\theta)$$

◎初期座標系 $X_0Y_0Z_0$ において、試料の逆格子ベクトル $\vec{\tau}$ が $(\tau_x, \tau_y, \tau_z)$ という座標をもっているとする。このとき、回転後の座標系 $X_3Y_3Z_3$ においても、$\vec{\tau}$ の座標は $(\tau_x, \tau_y, \tau_z)$ である。
試料は回折計に固定されており、$\omega, \chi, \phi$ といっしょに動くから当然である。
従って Bragg条件を満たすとき、

$$\begin{cases} \tau_x = K\{\cos\chi\cos\phi\cos(\omega-\theta) - \sin\phi\sin(\omega-\phi)\} \\ \tau_y = -K\{\cos\chi\sin\phi\cos(\omega-\theta) + \cos\phi\sin(\omega-\phi)\} \\ \tau_z = K\sin\chi\cos(\omega-\theta) \end{cases}$$

## 軸立て

任意の逆格子ベクトル$\vec{\tau}$について、$\vec{\tau}$を散乱ベクトル$\vec{K}$に一致させるような$(\omega, \chi, \phi)$の組を計算で導けるよう、XYZ軸と試料の結晶軸abcとの関係を明らかにすること。

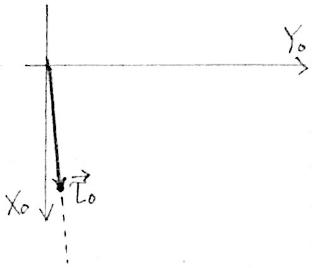
(1) 1個目の回折ピークを見つける。
その角度が$\omega_0$, $\chi_0$, $\phi_0$, $2\theta_0$だとする。
これで $\vec{\tau_0} = (\tau_{0x}, \tau_{0y}, \tau_{0z})$

$$\begin{cases} \tau_{0x} = K_0 \{ \cos\chi_0 \cos\phi_0 \cos(\omega_0 - \theta_0) - \sin\phi_0 \sin(\omega_0 - \phi_0) \} \\ \tau_{0y} = -K_0 \{ \cos\chi_0 \sin\phi_0 \cos(\omega_0 - \theta_0) + \cos\phi_0 \sin(\omega_0 - \phi_0) \} \\ \tau_{0z} = K_0 \sin\chi_0 \cos(\omega_0 - \theta_0) \end{cases}$$

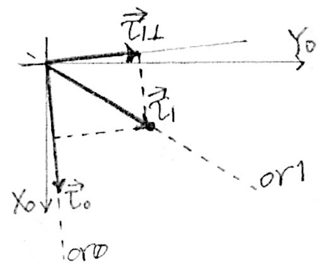
ただし $K_0^2 = \tau_{x0}^2 + \tau_{y0}^2 + \tau_{z0}^2$

☆ $K_0$は反射指数$h_0 k_0 l_0$と格子定数a, b, cとから決まっている。従って、$2\theta_0$も決まっている。

が決まる。
これで結晶方位を定める一つの方向$\vec{\tau_0}$が決まった。
$\vec{\tau_0}$が決まると、$\vec{\tau_0}$の軸上にある任意の逆格子ベクトルについて$\vec{\tau} = \vec{K}$となるような$(\omega, \chi, \phi, \theta)$を導出することができる。




(2) $\vec{\tau_0}$の軸上にはない、別の回折ピークを見つける。
これで、(1)と同様にして、
$\vec{\tau_1} = (\tau_{1x}, \tau_{1y}, \tau_{1z})$
が決まる。
これで、$\vec{\tau_0}$と$\vec{\tau_1}$を含む面内の任意の逆格子点について、$(\omega, \chi, \phi, \theta)$を導出することができる。




さらに、$\vec{\tau_0}$と$\vec{\tau_1}$の面内にない逆格子点についても、結晶構造から、残り1つの方向を決めるベクトルが決まるので、計算で角度を出すことができる。

(注) SPECでは、$\vec{\tau_0}$の方向をor0（オアールゼロ）と呼び、$\vec{\tau_1}$の方向をor1（オーアールワン）と呼ぶ。
しかし、上図でor1はor0の成分を含んでおり重複している。
このときSPECでor1の情報として使われるのは$\vec{\tau_0}$と垂直な$\vec{\tau_{1\perp}}$の成分だけである。$\vec{\tau_1}$のうち$\vec{\tau_0}$方向の成分は使われず、or0はあくまで$\vec{\tau_0}$の情報に基いて決められる。