

1. はじめに

ラウエ図形とは結晶の対称性を反映した対称性を有する斑点模様である^[1],これは背面反射ラウエ法や透過ラウエ法によって得られる。ラウエ法とは連続X線を単結晶試料に入射させることによって得られる回折斑点を観察する方法である。ラウエ法によって得られる斑点模様からは,未知構造の結晶については対称性の種類が判明し, 既知構造の結晶の場合にはその結晶の方位が判明する。ラウエ図形のシミュレーションでは,実際に単結晶に X線を入射させた時に見られるラウエ図形と相似な図形をPC 上に表わすものである。既存のシミュレーションでは回折強度(ラウエ斑点の濃さ)が正確に表現されるものがない。そこで,回折強度を忠実に再現できるシミュレーションの開発を試みた。

2. 開発環境

使用 OS MAC OSX version 10.8.2
総合開発環境 processing version 2.0b7
使用言語 processing version 2.0b7

3. ラウエ図形シミュレーション

3.1 現行のソフトウェアの問題点

現在既にラウエ図形シミュレーションソフトは幾つかあるが,ステレオ投影された各面に対する回折強度を忠実に再現することができない。回折強度を表現するシミュレーションソフトも考案されているが,回折強度の違いを色の違いや回折斑点の大きさの違い等で表している。回折強度の違いを色の違いで表すことで強度差が明確になる反面,実験においてフィルム上に現れる回折斑点との比較は容易ではない。シミュレーションソフトとしては,ラウエ図形の対称性を正確に表すとともに,回折強度をモノクロームの濃淡で表現する事によって,解説者がフィルム上の現れた濃淡模様と比較しやすくなる事が重要である。

3.2 今回開発したソフトウェアの構造

今回の開発では回折強度の表現に力点を置き,結晶系を単純立方晶系に絞り,逆格子^[1]を利用してフィルム上の直行座標(O-XY)を求める設計とした。

図 1 に,プログラム中における数値計算手順を示す。

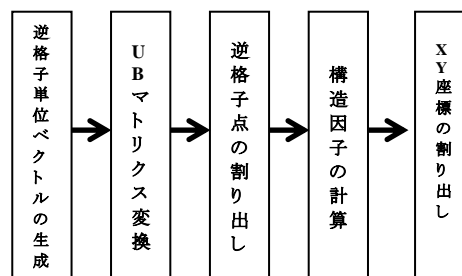


図 1 数値計算手順

3.3 実際のラウエ図形との比較

フィルム上のラウエ図形と今回開発したシミュレーションプログラムによる画像との比較した例を以下(図 2 と図 3)に示す。

図 2(フィルム上のラウエ斑点)と同様に図 3(シミュレーション)の回折斑点も濃淡で表現されている。



図 2(フィルム) 図 3 シミュレーション

4. まとめ・今後の予定

今後の展望としては単純立方以外の結晶系 14 種についてもラウエ図形の表示,Processing における本プログラムの WEB アプリケーション化,直感的なユーザーインターフェイスなどについて改良を加えていく。X線カメラによるラウエ法を行った時の結果との比較を容易にする機能が必要なので,今後はこれらの比較を行う機能の実装を進めていく予定である。

文献

[1] 松村源太郎:“新版 カリティ X 線回折要論”,株式会社アグネ, pp.28-144, Sept. 1980.