吸収補正のための結晶形状決定プログラム

堀内弘之(阪大産研)・B. J. Wuensch (M.I.T. 材料科学)

結晶構造解析の精度を上げるための要件の一つとして、回折強度に対して適切な吸収補正をしなければならないことは言うまでもない。この目的を達するためにすでに種々の電子計算機プログラムが開発されているが、いずれのプログラムに対しても入力として結晶試料外形についての情報を入れなければならない。結晶試料を球形にすることが出来れば、それに優るものはないが、いろいろな理由によって球形に出来ない場合も多い。著者らは結晶試料が多面体である場合に、各面の平面方程式 $Ax + By + Cz + D = 0$ を容易に求める簡単なフォートラン語プログラムを開発したので紹介する。

結晶外形を表わすための座標系として、X線の入射方向をX軸、結晶の回転軸をZ軸(例えばワイセンベルクカメラではスピンドル軸方向)、そしてY軸をX, Zに対して右手系になるようにとる。結晶試料をZ軸のまわりと水平面内で回転出来るような二軸測角器の上に載せ、各面についてその面の法線がZ軸となす角 θ 、及び法線のZ軸に沿ってXY面へ投影されたベクトルとX軸とのつくる角 ϕ 、更に各稜の長さを測定する。これら θ , ϕ 及び稜の長さがプログラムへの主な入力情報である。各面の平面方程式の係数A, B, Cは θ , ϕ より決定される。今仮に図に於いて頂点aを原点に選ぶと、この原点を通る稜の他端b, c等の座標はab, ac等の長さが分っているので容易に決定され、更に次の仮の原点としてbを選ばるとbと共通の稜線上にある頂点e, f等の座標が決定され、これらを繰り返すことによって全頂点の座標が決定される。この時点では測定の誤差等により同一平面上にあるべき諸点(例えばb, e, f, g, h)が必ずしも同一平面上にはないので、平面方程式 $Ax + By + Cz + D = 0$ 中の定数項Dは諸点のこの平面からのずれの和が最小になるように決定される。こうして求められた各面の平面方程式を用いて再度各頂点の座標を求め、各稜の長さを計算し得るので、実測の稜の長さと比較することによって測定の信頼度を知ることが出来る。また θ , ϕ 角の原点を変えて上記計算を実行し頂点座標をプロットしてみると、いろいろな方向から見た試料外形図が得られるので顕微鏡下の実際の外形と比較すると測定及び計算結果が満足できるものかどうかを確認することが出来る。この結果はACACAプログラム等の入力となる。