

ブラッグ反射の学習について (高校理科における学習に立ち返って)

芝原寛泰¹⁾、福島いずみ²⁾

1) 京都教育大学 理学科 shiba@kyokyo-u.ac.jp

2) 京都教育大学大学院 理科教育専修 Izumifu@kyokyo-u.ac.jp

キーワード：ブラッグ反射、回折、高校理科

(受付け：1999年5月6日)

1. はじめに

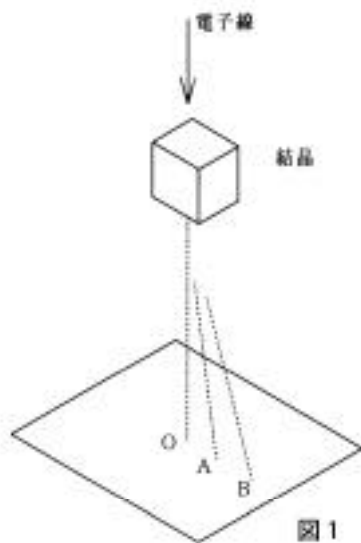
X線を結晶に照射したときに起こる現象を説明するのに、ブラッグ反射の考え方がよく登場する。後でも述べるがブラッグ反射は高校教科書の物理においても扱われている(高等学校 物理、1994)。われわれの研究室では、卒業研究で光回折実験装置をはじめとしてX線回折装置、電子顕微鏡を使った研究を行う場合、このブラッグ反射の学習は初期の段階において、非常に重要な役割を果たすことになる。研究室のゼミにおいて、電子回折像の解釈についての質問と討論をきっかけとして、ブラッグ反射の学習について考え直す機会を得た。ただし、以下の{ }書きの部分は補

足的な説明であり、読み飛ばしていただいても差し支えない。

質問と討論は、概略、以下のものであった。

図1に示すように、ある薄い結晶の表面に対して垂直に電子線が入射したときに、スクリーン上に回折斑点がいくつか観察される場合を考える。回折斑点の位置をA、B、透過波をOで表わす。{この場合、フランクホッフ回折に相当し回折像は無限遠で観察されるので、光回折実験などでは、実際には鮮明な像を得るために試料とスクリーンの間に凸レンズを入れることになる。}まず最初の質問は、

「格子面に平行に電子線が入射して、その格子面で反射が起こるのはなぜか」、さらに「図1の回折斑点Aが出ても、反射の様子を考えると回折斑点Bが出るのは納得できない」というものであった。ただし、図



1では電子線を想定しているが、X線を使った場合でも同じである。また、結晶の格子面を扱っているが、可視光線を使った光回折実験でも、その波長と同程度の回折格子を用いれば同じように考えられる。学生はすでにブラッグ反射の凡そについては学んでいる。これらの質問に対する納得のいく説明について考えてみた。また、ブラッグ反射の学習方法についてもいくつかの疑問点がでてきた。

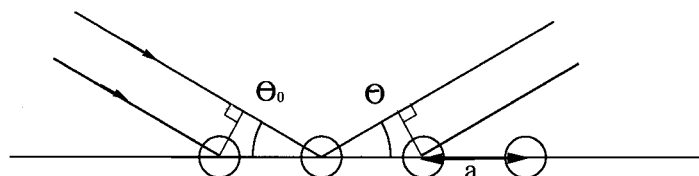


図2 Laue の条件

以下に、ブラッグ反射についてもう一度、原点に戻って概観し、高校理科における関連内容の学習方法について考えてみたい。

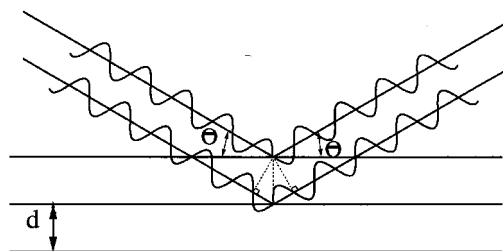
II.ブラッグ反射の科学史的背景

1912年にラウエ（M von Laue）はX線を使った実験で次のような提案をしている。図2のように、等間隔（周期a）で並んでいる原子列に、X線（波長λ）が点列に対してθ₀の角度で入射し、θの角度の方向で強い回折線が観測されたとする。散乱線が強められる条件は、行路差が波長の整数倍という条件が必要であるので、（1）式が成立する。

$$a (\cos \theta - \cos \theta_0) = n\lambda \quad (1)$$

ここでnは回折の次数であり整数となる。これを3次元の結晶に適用する。単純に格子点に同じ原子が並んでいるとして、3方向の周期をa, b, cとして、それらの軸方向と入射X線及び散乱線X線とのなす角度を、それぞれα₀, β₀, γ₀, α, β, γとすると、（1）式を拡張して（2）の3式が成立する。

$$\begin{aligned} a (\cos \alpha - \cos \alpha_0) &= h\lambda \\ b (\cos \beta - \cos \beta_0) &= k\lambda \\ c (\cos \gamma - \cos \gamma_0) &= l\lambda \end{aligned} \quad (2)$$



ここで、 h 、 k 、 l は回折の次数であり整数の値をとる。(2) 式は一般にラウエの条件とよばれている。ラウエが提案した(2) 式は回折現象を表す最も基本的な式である。{(2) 式では構造単位を原子を考えたが、一般的な3 次元的周期をも

つ連続ポテンシャルを考え

図3 ブラッグ反射

た場合も成立する。} この

ラウエの報告に刺激を受けたブラッグ親子 (W.H. Bragg と W.L.Bragg) は、ラウエの実験を解析し、(2) 式よりもっと簡単な式を幾何学的に導き回折条件を表した。さらに結晶構造解析に応用できることを証明した。彼等が導きたいわゆる「ブラッグ反射」の考えについて、図3により振り返ってみたい。図3に示すように等間隔に並んだ原子網面 (格子面) によって X 線が反射するとし、格子面の間隔を d 、格子面に対する X 線の入射角及び反射角を θ とする。散乱体 (この場合は原子) で生じた散乱波 (球面波) は互いに干渉し、行路差 ($2ds \sin \theta$) が波長 (λ) の整数倍 ($n\lambda$) に等しいとき、位相が揃い強い回折波が生じる。すなわち、

$$2ds \sin \theta = n\lambda \quad (3)$$

(3) 式は高校教科書にも登場する (高等学校 物理II、1994) ただし、電子線の場合、 θ の値は小さくミリラジアンオーダーである。ちなみに、ラウエは 1914 年に、ブラッグ親子は 1915 年に、それぞれ「結晶による X 線回折現象の発見」、「X 線による結晶構造解析に関する研究」の業績でノーベル物理学賞を受賞している。ラウエの導いた(2) 式とブラッグの提案した(3) 式は、回折条件を表すものとして全く同等のものである。{本質的に同等である証明は引用文献の4に詳しい。} ここに注目すべき点がある。ブラッグらが回折条件を簡単な反射のモデルを使って(3) 式を導いたのは大きな業績だが、同時に散乱現象に対する素朴な誤解を与える可能性もでてきた。

III. 散乱、回折と反射について

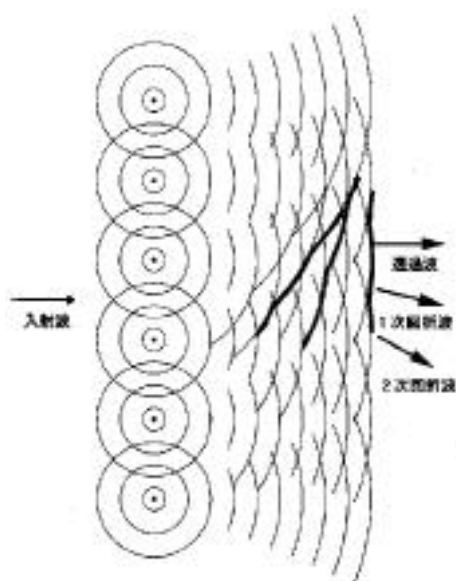
すでに述べたように(3) 式は、「ブラッグ反射の式」とも呼ばれるため、回折 X

線が「散乱 X 線」というよりはむしろ「反射 X 線」として捉えられてしまう場合があり、散乱と反射が混用されることになる。

X 線回折の教科書でよく知られているカリティの著書（カリティ、1961）でも述べられているように、ブラッグ反射の考えに従えば、結晶による X 線の回折と鏡による可視光線の反射とは非常によく似ていることになる。いずれも、入射角と反射角が等しく、また格子面を X 線を反射する鏡面と考えることになる。しかし、X 線の回折と可視光線の反射は次の点で異なる。イ）結晶による X 線の回折線は、入射線の経路にある結晶中のすべての原子によって散乱された結果であるが、可視光線の反射は薄い表面層の中においてのみおこる。ロ）可視光線の反射は、どんな入射角においてもおこる。ハ）可視光線の反射の効率、ほぼ 100%だが回折 X 線の強度は入射 X 線に比べて、極端に小さくなる。しかし、実際は、二つの場合の類似性から回折面と反射面、回折線と反射線はしばしば区別なく用いられる。

IV. 高校教科書での扱い

高校教科書での取り扱いでは、光の直進・反射は、光を粒子として扱うモデルで説明される場合（PSPC 物理、1967）が多く、屈折、回折の現象になって、波としての性質が登場する。{ニュートンは屈折の法則を粒子モデルで説明している。光の



になる。

図4 散乱、干渉の様子

粒子モデルによる説明では、光の粒子が相互作用しないこと、また弾性的な粒子を仮定していることに注意する必要がある。} 図2のような回折現象をブラッグの反射モデルだけで理解すると、光の反射と混同してしまうことになる。もちろんブラッグ反射の(3)式を考えると、位相差に注目しているから明らかに波としての性質に気付いているはずである。しかし、入射波を平面波として考えていないため、図3で扱う波が紙面に対しての奥行きをもたず、入射線、反射面の法線、反射線はすべて同一平面にあること

また、高校理科では X 線と物質との相

相互作用、すなわち何によって散乱されるかという点にあまり触れることができないため、散乱現象の大切な部分を抜きにしてブラッグ反射を紹介せざるを得ない事情がある。

V. 誤解の原因

散乱現象を「反射」として捉えると、図1のような、反射面（結晶では格子面）に平行に入射した時の回折の現象の理解が困難になる。図1の現象も結晶に平面波が入射すると考えれば、かなり誤解がなくなる。図4に周期的に配列する散乱体によって平面波が「散乱」され、さらに球面波が生じ互いに「干渉」していくつかの方向に回折波が形成される様子を示す。図4より、いくつかの方向に強い回折波が観測されることが容易にわかる。図4は、ラウエの提案した(2)式に対応する図2と本質的に同じで、波の干渉をわかりやすく説明したものである（早稲田嘉夫、1998）。最初の質問に戻って、図1の回折斑点Bについても、図4に示す2次波として考えればよい。すなわち、回折現象を理解するのにラウエの回折条件に立ち返れば不自然さはでてこない。ところが、ブラッグの反射式においては、例えば n 次の反射の場合、波長 λ が一定であれば(3)式から考えて、反射角 θ は1次の反射 ($n=1$) のときの θ より大きくなり、また反射モデルにこだわると θ は入射角に等しくなり、より高い角度から入射した状態に対応してくる。従って、入射線の方向が一定だとすると、図1の大きい反射角をもつ回折斑点 B の成因が、 θ の値が変わるため直感的にわからなくなる原因がここにある。{一般に面間隔 d' の面 (h, k, l) による n 次の反射は面間隔 $d=d'/n$ の面 (nh, nk, nl) による1次の反射と考える。例えば、図1のAを「100 の1次の回折斑点」とすれば、Bは「100 の2次の回折斑点」となるが、これを「200 の1次の回折斑点」という。} ブラッグ反射を単に鏡面による反射とみなした学習と、さらに波の伝播を定義する「ホイヘンスの原理」を、あまりにも当然の原理として、高校物理でほとんど取り上げられず学習経験をもたないことにも起因する。また、別の原因としてブラッグ反射の幾何学的関係だけが、大学で学ぶ物性論や、分光結晶の原理の説明などに便利な形で登場することもある。ブラッグ反射が本来的には回折現象であることを忘れてしまうことも挙げられる。学習のプロセスとして、ホイヘンスの原理について力学的波を基にした扱いで学び、また振幅—位相図をもとに波の進行を考察（ロッシ、1967）すれば、結晶に入射する波も具体性をもつことになる。高校理科においては、光の反射、屈折、回折だけでなく直進もホイヘンスの原理を用いて理解することが望まれる。{さらに、大学で波動光学を学べば、かなり波動現象の理科が深まることになる。}

VI.まとめ

以下に、ブラッグ反射の学習での注意点をまとめると、

- 1) 単に反射としてでなく、ラウエの条件にさかのぼり回折現象として扱う。
- 2) 可視光線による鏡面反射と混同しないこと。
- 3) X線あるいは電子線のもつ波としての性質を考え、入射波を平面波として捉え、さらに物質の中に侵入し、相互作用の結果として起こる球面波どうしの散乱、干渉、回折の一連の現象を想定すること。
- 4) 回折現象の捉え方、すなわち観測方向として、透過方向と反射方向を区別すること。{回折理論ではラウエケース及びブラッグケースとして扱う。回折格子(グレーティング)による可視光線を用いた回折実験は後者にあたる。}

本稿で多く取り上げた回折現象は日常的に見られる現象であり、また小、中、高校の理科においても、現象的説明から波の性質の扱いまで、一貫して取り上げられている。にもかかわらず、ブラッグ反射のような基本的な法則に素朴な誤解をもつとすれば、その原因として波及び関連の学習において、基礎的な概念による統一的な理解に欠けていることが考えられる。また、波及び粒子としての性質が混乱したまま導入されていることを懸念する。{一方、大学での学習では、回折像が逆空間の情報を持っていることに注目すれば、ブラッグ反射をエヴァルト反射球の考えを基に理解ができ、さらに回折について納得のいく説明を獲得することになる。また、物性論の学習でつまづきやすい逆格子の理解の助けともなる。}

できるだけ数式を用いた説明を避けたので、十分に内容が伝わらない部分は引用文献を参照していただきたい。中学校、高校理科における波の学習についてのご意見があれば、本稿に対する批判とともに提案していただければ幸いである。

文献

- B.ロッシ(福田国弥他訳)1967.「光学」上、pp326. 吉岡書店、京都
B.D.カリティ(松村源太郎訳)1961.「X線回折要論」,pp517.アグネ, 東京
PSPC 物理上(山内恭彦他訳)1967. pp286. 岩波書店、東京
藤本文範他10名1994.「高等学校 物理Ⅱ」125 pp. 第一学習社、東京
早稲田嘉夫、松原英一郎1998.「X線構造解析」 pp293,内田老鶴圃, 東京

その他の参考文献

- 長倉繁麿 1978.「物質の構造」 pp250. 朝倉書店、東京
仁田勇編 1959.「X線結晶学」上 pp766. 丸善, 東京

パークレー物理学コース3（高橋秀俊訳）1973.「波動」下 pp608.（丸善）、東京