

　上図にあるような、任意の形状をした電子密度分布ρ(**r**)を考える。

波数ベクトル**kin**の2本の入射X線が点**r**と**r**’で***k***dif方向に散乱されると考えると、それぞれの光路差Δ(**s**)は|**k**in| = |**k**dif| = 1/λを使って、

 Δ(**s**) = *l*dif – *l*in = **k**dif・**s /** |**k**dif|– **k**in・**s** **/** |**k**in| = λΔ**k**・**s**

、位相差δ(**s**)は、

 δ(**s**)= 2πΔ**k**・**s**

となる。

散乱X線の強度は電子密度に比例するからこの物体ρ(**r**)によって散乱・干渉したX線の電場は

 

に比例する。ここで、

 

は「構造因子」と呼ばれる。

　単位格子中の電子密度ρlat(**r**)は、構成原子iの電子密度ρi(r)を使って

 

で表されるので、構造因子は





となる。ここで、*fj*(*k*)は構成原子iの原子散乱因子。

ブラッグの回折条件***k*** = **G**hklを考慮すると、

 

となる。

 **G***hkl* = h***a***\*1 + k***a***\*2 + l***a***\*3

 **r**i = *x*i***a***1 + *y*i***a***2 + *z*i***a***3

と実格子、逆格子の基本ベクトルの関係 ***a***i・***a***\*j=δijを思い出すと、

 **G**hkl・**r**i = h*x*i + k*y*i + l*z*i

 

となる。

　ここで、単位格子が散乱ベクトル方向に*N*個並んだときの散乱の式を求めよう。



に戻る。このn個の単位格子中の電子密度ρcrystalは、単位格子の電子密度ρlatを使って

 

と表される（**t**iはi番目単位格子の原点の座標）ので、構造因子は

 



となる。ここで**t**は単位格子の並進ベクトルである。

散乱強度は|F|2に比例するので、



 Δ**k =** 2|**k**in|sinθ = 2sinθ/λ

は「Laue関数」と呼ばれる。

Laue関数は、2*N*Δ***k****･****t***が奇数の時（2*Nt*sinQ/λ= (n+1/2)）に極大を取り、特に分母がゼロになるΔ***k****･****t***が整数の時（2*t*sinQ/λ= *n*）に最大になり（主極大）、強度はN2に比例する。*N*が大きくなると、Δ***k****･****t***が整数になる近傍で非常に鋭いピークを持つ関数になる（Bragg条件）。

Nを変えてLaue関数をプロットした図を下に示す。

