

1. エネルギーと波長の換算

例題 1 波長 $\lambda = 400 \text{ nm}$ の光のエネルギーを eV と kJ/mol の 2 種類で記せ。

プランク定数	h :	$6.62608 \times 10^{-34} \text{ Js}$
真空中での光速	c :	$2.99792 \times 10^8 \text{ m/s}$
電気素量	e :	$1.60218 \times 10^{-19} \text{ C}$
アボガドロ定数	N_A :	$6.02214 \times 10^{23} / \text{mol}$

解答 光子 (フォトン) 1 個のもつエネルギーは $h\nu$ 。ここで ν は振動数、 $\nu = c/\lambda$ 。

光子 1 個のエネルギーは

$$\begin{aligned} h \frac{c}{\lambda} &= \frac{6.626 \times 10^{-34} \times 2.998 \times 10^8}{400 \times 10^{-9}} \\ &= 4.966 \times 10^{-19} \text{ J} \\ &= 3.119 \text{ eV} \end{aligned}$$

(光子 1 個の場合は eV (エレクトロンボルト) で表わす習慣。1 eV = $1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$)

光子 1 mol に換算すると

$$4.966 \times 10^{-19} \times 6.022 \times 10^{23} = 300.9 \text{ kJ/mol}$$

(答) 3.119 eV 300.9 kJ/mol

練習 1 5415 eV の X 線の波長を求めよ。

(0.2290 nm または 2.290 Å)

練習 2 波長 228.7 Å (22.87nm) の X 線のエネルギー (eV) を求めよ。

(54.2 eV)

練習 3 波長を λ (Å)、エネルギーを E (eV) とするとき、両者の関係式を求めよ。

($E\lambda = 1.240 \times 10^4$)

2. 分光結晶の d 値、角度 θ と波長 λ の関係

例題 2 $2d = 4.0267 \text{ \AA}$ と記載のある分光結晶 LiF を使用した場合、 5415 eV の蛍光 X 線が観測される 2θ を求めよ。

$$2d \sin \theta = \lambda$$

解答 Bragg の式 $2d \sin \theta = n\lambda$ を使用する。 $n=1$ としてよい ($n=2, 3, \dots$ が問題となることもあるが、とりあえず 1 で計算する)。 d の単位が \AA なら、 λ も \AA で、 nm なら nm で計算する。

例題 1 で $\lambda = 2.290 \text{ \AA}$ と計算してあるので

$$4.0267 \times \sin \theta = 2.290$$

$$\sin \theta = 0.5687$$

$$\theta = 34.66^\circ$$

$$2\theta = 69.32^\circ$$

(答) 69.32°

練習 3 $2d = 160.00 \text{ \AA}$ の分光結晶 SX58N を $2\theta = 5 \sim 148^\circ$ に走査する場合、検出できる X 線の波長範囲とエネルギー範囲を計算せよ。

($7.00 \text{ \AA} \sim 153.80 \text{ \AA}$, $80.6 \text{ eV} \sim 1771 \text{ eV}$)

練習 4 Li の $K\alpha$ 線は 54.3 eV である。これを検出するのに必要な分光結晶の d はいくらか。 $2\theta = 5 \sim 148^\circ$ に走査するものとする。

(119.0 \AA)