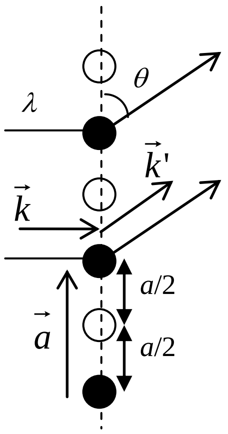
固体物理学Ⅰ　演習問題 2012.5.14　　　　　主専攻　学籍番号　　　　　　　　氏名

１．下図のような一次元格子に垂直にＸ線が入射するとき、回折条件は n を自然数として $a\cdot\cos\theta=n\lambda$ となることを散乱ベクトルと逆格子ベクトルの関係から示せ。また、○及び●で表わされる原子の原子散乱因子が f_A、及び f_B と異なるとき、行路差が波長λの奇数及び偶数倍となるときで散乱強度が異なる事を示せ。

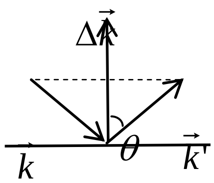


左図の一次元格子に対する基本並進ベクトルを $\vec{a}$ とすると、その逆格子の基本並進ベクトルは $\frac{2\pi}{a}\frac{\vec{a}}{a}$ である。任意の逆格子ベクトルは n を自然数として $\vec{G}=\frac{2\pi}{a}\frac{\vec{a}}{a}n$。左図において散乱ベクトル $\Delta\vec{k}=\vec{k}'-\vec{k}$ と逆格子ベクトルの幾何学的関係を考えると $\vec{k}\perp\vec{G}$（原子列を通過したあとでしか位相差は生じない）で、$\Delta\vec{k}$ と $\vec{G}$ の方向が異なり $\Delta\vec{k}=\vec{G}$ の条件式をそのまま使えない。

考え方 1．原子面より右側の領域のみで位相差を考える。$\vec{k}'$ の $\vec{G}$ 方向成分は $\vec{k}'.\frac{\vec{a}}{a}=\frac{2\pi}{\lambda}\cos\theta$ と書けるから、これが $|\vec{G}|$ に等しくなればよい。すなわち、$\frac{2\pi}{\lambda}\cos\theta=|\vec{G}|=\frac{2\pi}{a}n$。これより回折が生じる条件として $a\cdot\cos\theta=n\lambda$ が導かれる。

$\Delta\vec{k}=\vec{G}$ の条件式の両辺において $\vec{G}$ との内積と考えることも、実は散乱ベクトルの $\vec{G}$ 方向成分のみについて考えることになる。左辺は $\Delta\vec{k}\cdot\vec{G}=(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{G}=\vec{k}'\cdot\vec{G}=|\vec{k}'|\cdot|\vec{G}|\cos\theta=\frac{2\pi}{\lambda}\cos\theta|\vec{G}|$、右辺は $|\vec{G}|^2$ となる。すなわち、$\frac{2\pi}{\lambda}\cos\theta=|\vec{G}|$ の関係から $a\cdot\cos\theta=n\lambda$ が導かれる。

考え方 2．$\vec{k}'-\vec{k}=\vec{G}$ を $\vec{k}'-\vec{G}=\vec{k}$ と変形して両辺二乗すると、$|\vec{k}'|^2-2\vec{k}'\cdot\vec{G}+|\vec{G}|^2=|\vec{k}|^2$。これより



$$\frac{1}{2}|\Delta\vec{k}|=|\vec{k}'|\cos\theta$$

$\Delta\vec{k}=\vec{G}$ の別の表し方として $2\vec{k}'\cdot\vec{G}=|\vec{G}|^2$ が求まる（注：$\vec{k}\perp\vec{G}$ ゆえ、Kittel の教科書にもある $\vec{k}\cdot\vec{G}$ の形で残してしまうと困ってしまう）。ここで、左辺の因数 2 は、実はブラッグ反射の幾何条件において原子面による散乱前後で同じ量の位相差が生じることを反映している（左図参照）。今の場合では $\vec{k}\perp\vec{G}$ であるので、$\vec{k}'\cdot\vec{G}=|\vec{G}|^2$ としなければいけない。後は上と同様。

散乱強度を求めるために構造因子の計算を行う。黒丸原子を原点として白丸原子の位置は $a/2$ 離れている。散乱ベクトルの大きさが $|\vec{G}|=\frac{2\pi}{a}n$ に等しくなり回折が生じるときの構造因子を計算すると、$S_G=f_B\exp\left(-i(0\cdot\frac{2\pi}{a}n)\right)+f_A\exp\left(-i(a/2\cdot\frac{2\pi}{a}n)\right)=f_B+f_A\exp(-i\pi n)$。

従って、n が偶数の場合には $S_G=f_A+f_B$、n が奇数の場合には $S_G=f_B-f_A$ となって、散乱強度はそれぞれの場合で $|f_A+f_B|^2$ 及び $|f_A-f_B|^2$ に比例するので、異なってくる。

ちなみに実空間で幾何学的に隣接する同種原子間（距離 a）での光路差について考えると、n を自然数として $a\cdot\cos\theta=n\lambda$ となる θ 方向において散乱波が同位相となる、すなわち回折が生じる。

このとき、隣接する異種原子（距離 $a/2$）による散乱波は、n が偶数の場合には λ の自然数倍で同位相、n が奇数の場合には λ の自然数＋1/2 倍となり逆位相になるので、白丸原子を基準にすると構造因子は n が偶数の場合には f_A+f_B、n が奇数の場合には f_A-f_B となって、散乱強度はそれぞれ $|f_A+f_B|^2$ 及び $|f_A-f_B|^2$ に比例する。