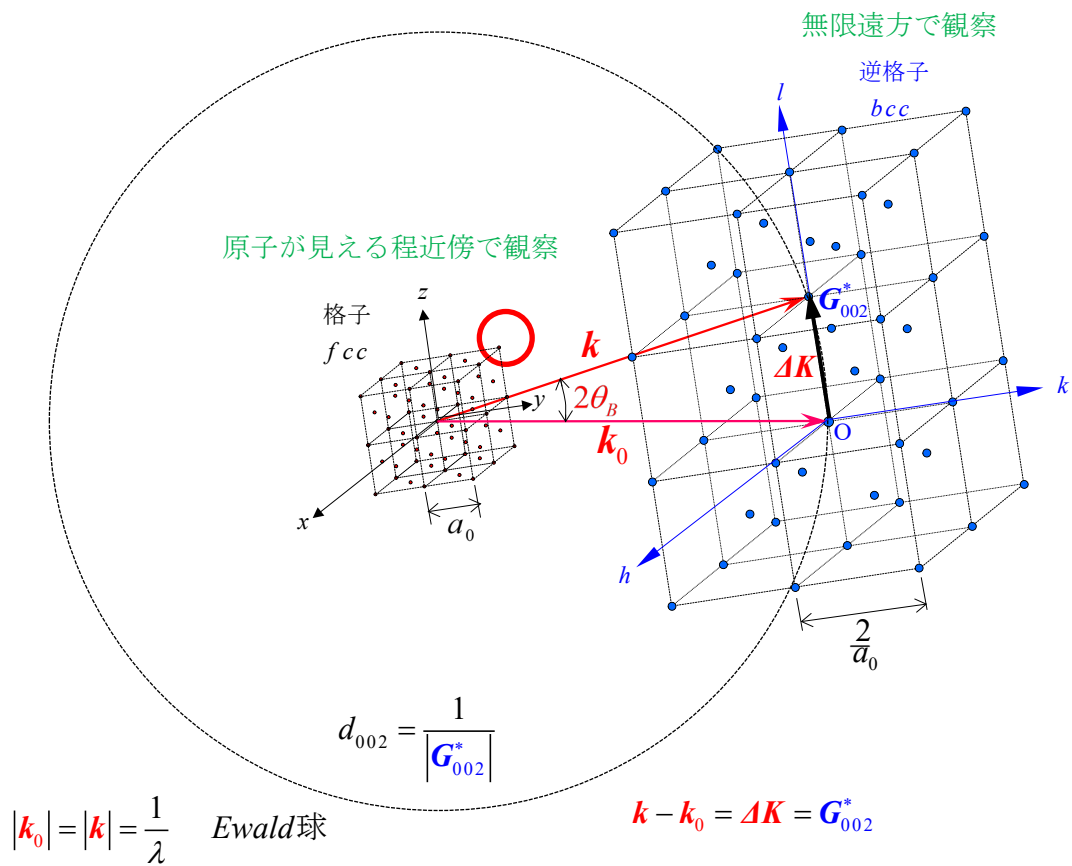


原子散乱因子 : 原子からの散乱波

Fraunhofer 回折 : 無限遠方で観察する波



電子線回折では入射電子と物質との間にクーロン力による相互作用が生じる
 本講義の以下の話では、**X 線回折の場合に話を限定する！**

§ Thomson 散乱 1 個の電子からの散乱波

1 個の自由な電子が真空中にある

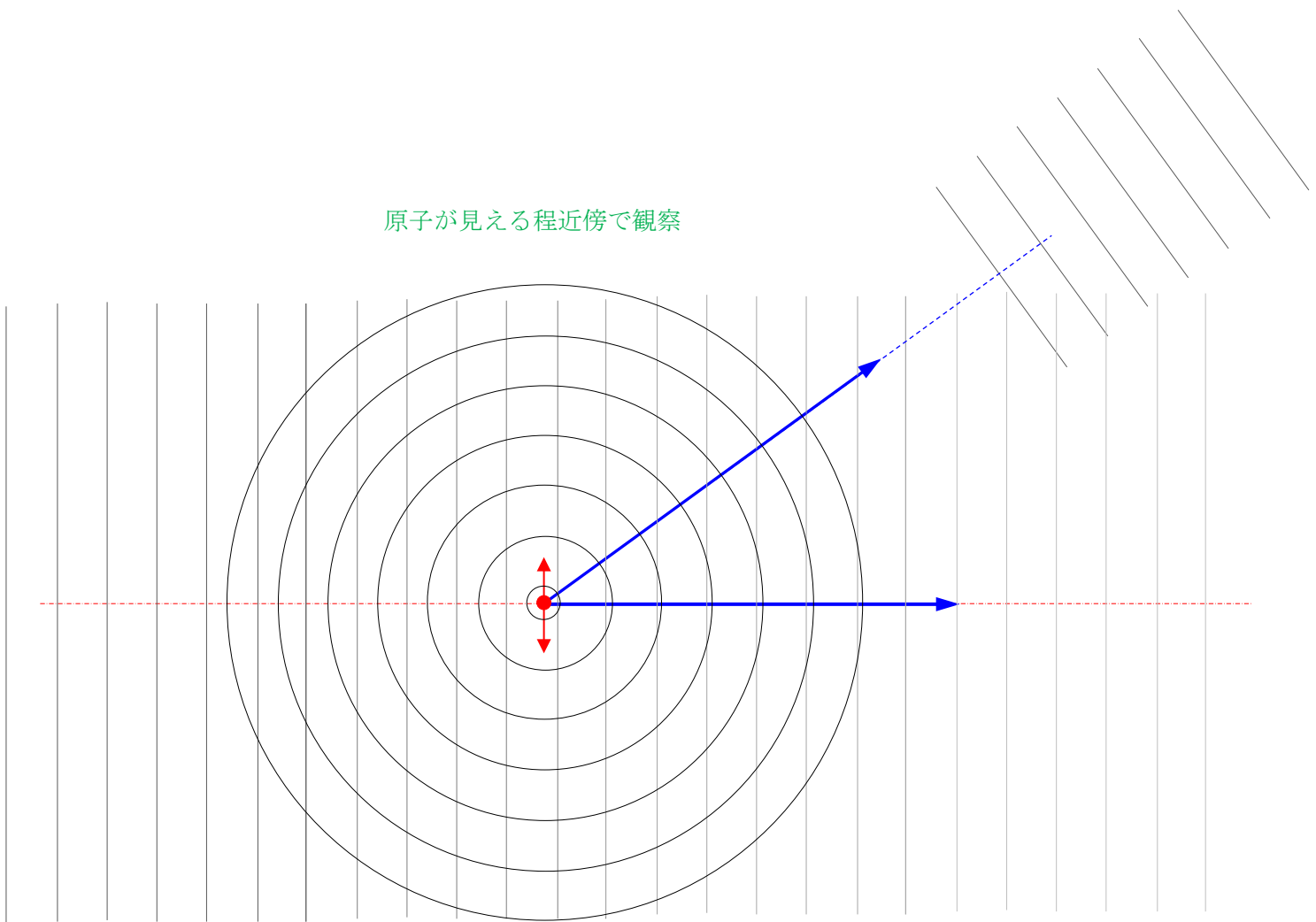
→ これに X 線が入射する

→ 電子は X 線の電界により強制振動させられる

→ 入射波と同じ振動数の波が発生する。

無限遠方で観察

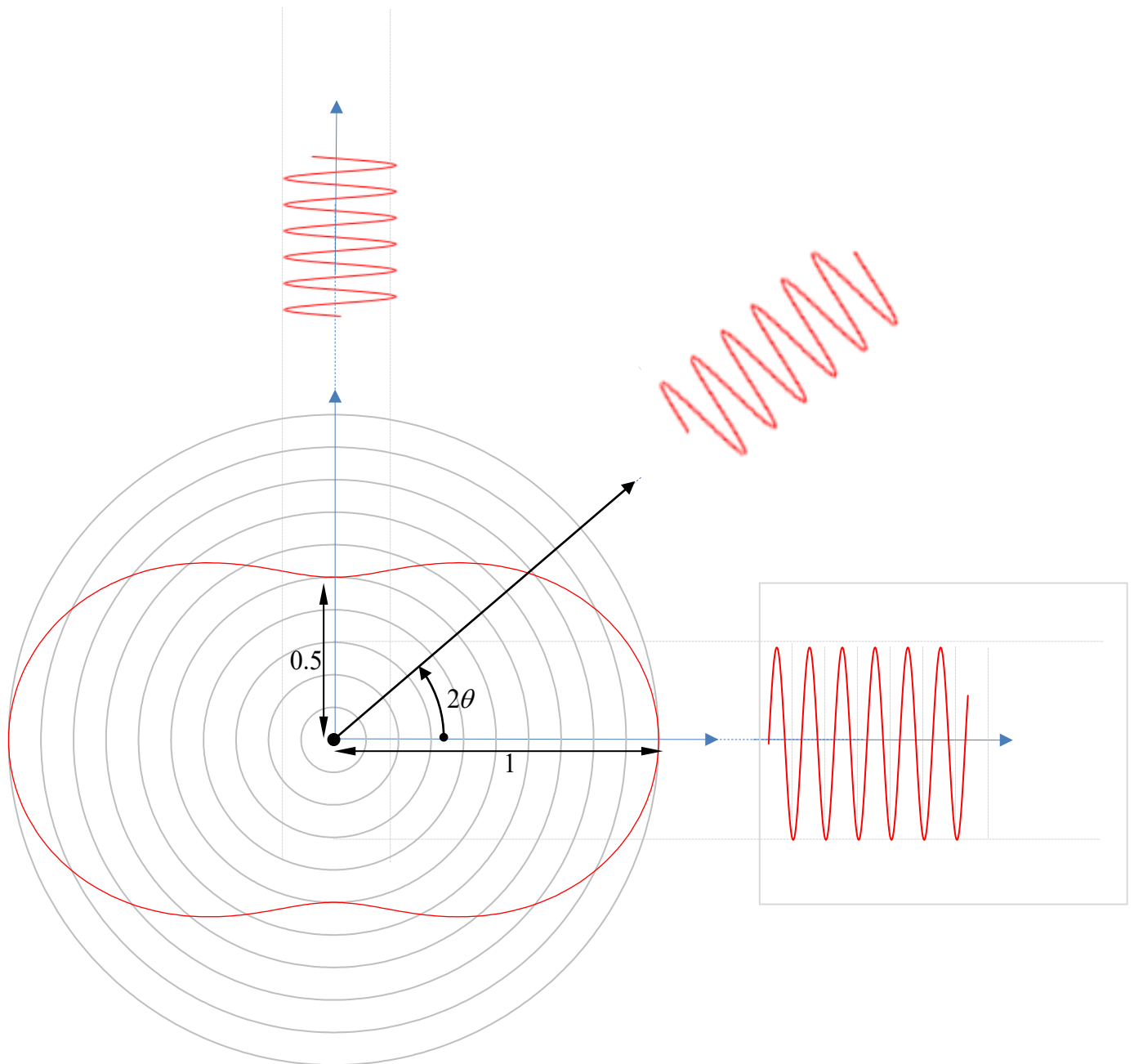
原子が見える程近傍で観察



1 個の電子から発生した X 線散乱波の強度は

$$I_e(2\theta) = \frac{I_0}{R^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2} \right)^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2} \quad \text{Thomson 散乱} \quad (1)$$

ここで, 2θ 回折角
 R 電子からの観測点までの距離
 e 電子の素電荷
 ϵ_0 真空の誘電率
 m 電子の質量
 c 光速



§ 原子散乱因子 1 個の原子からの散乱波

電子は数密度 $\rho(\mathbf{r})$ で原子核 O の周りに分布している。 \mathbf{r} の原点は原子核

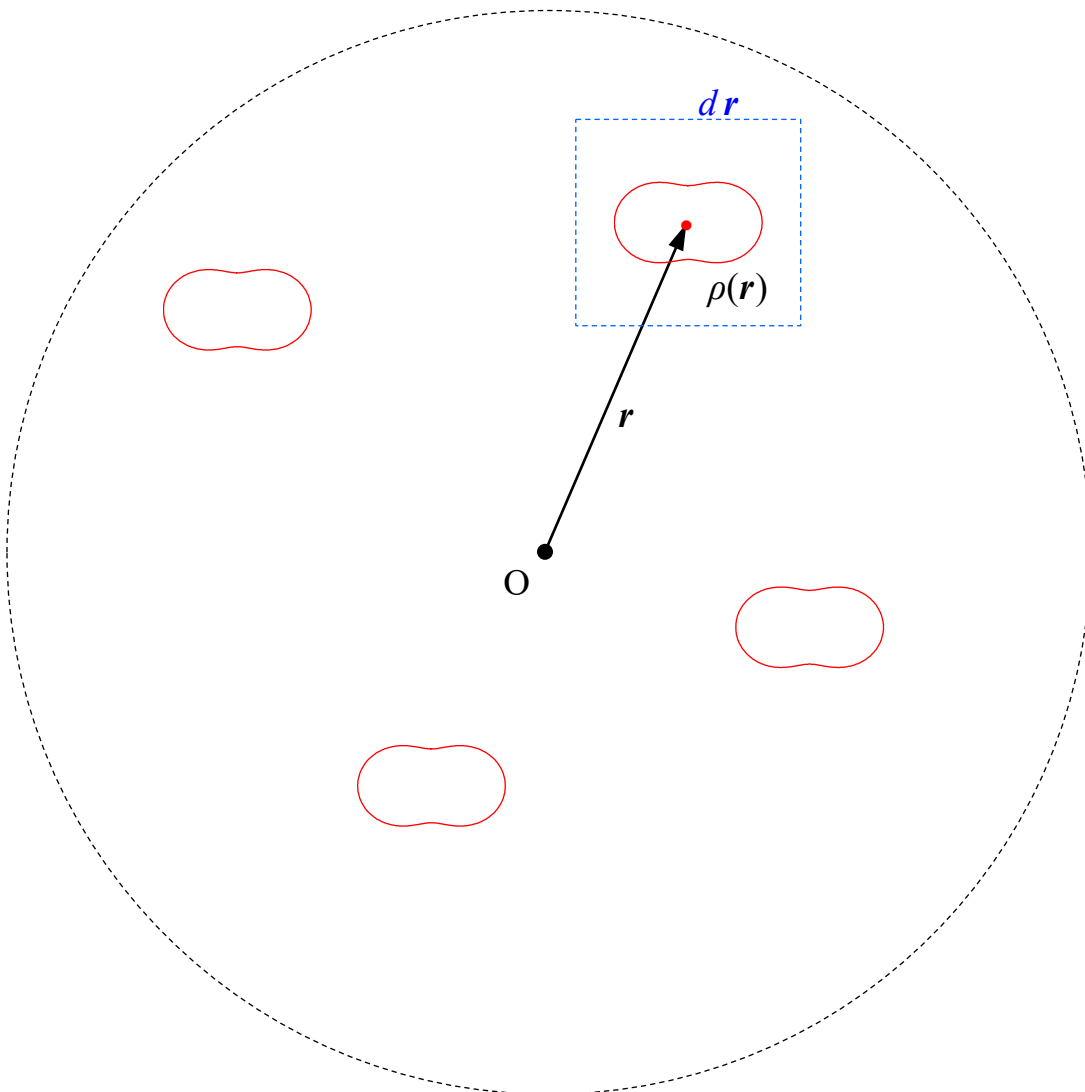
微小空間 $d\mathbf{r}$ の電子数 = $\rho(\mathbf{r})d\mathbf{r}$

1 個の電子の散乱強度は式(1)より $I_e(2\theta)$

$$\therefore \rho(\mathbf{r})d\mathbf{r} \text{ からの散乱 X 線強度は } I_e(2\theta)\rho(\mathbf{r})d\mathbf{r} \quad (2)$$

1 個の原子からの散乱 X 線は、原子内に分布する

原子内の個々の電子からの散乱 X 線を 位相差を考慮して、重ね合わせたものとなる。



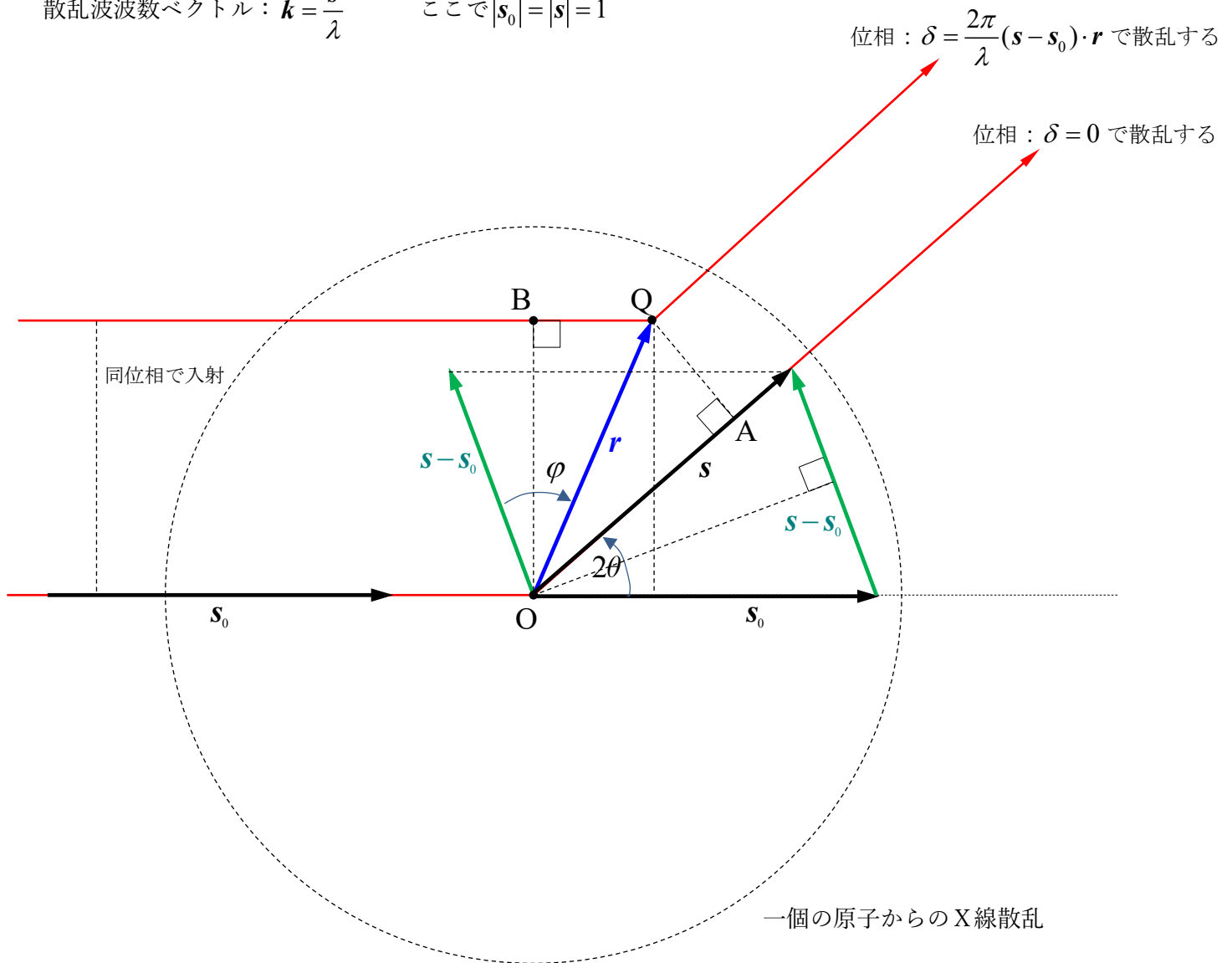
原子一個の電子数密度分布

O に原子核がある。電子の数密度分布関数は $\rho(\mathbf{r})$ である。

\mathbf{r} にある体積素片 $d\mathbf{r}$ 中には $\rho(\mathbf{r})d\mathbf{r}$ の電子が存在している。

入射波数ベクトル： $\mathbf{k}_0 = \frac{\mathbf{s}_0}{\lambda}$ ここで λ は波長

散乱波数ベクトル： $\mathbf{k} = \frac{\mathbf{s}}{\lambda}$ ここで $|\mathbf{s}_0| = |\mathbf{s}| = 1$



O の電子と Q の電子それぞれの散乱波の行路差： Δ は

$$\Delta = \overline{OA} - \overline{QB} = \mathbf{r} \cdot \mathbf{s} - \mathbf{r} \cdot \mathbf{s}_0$$

$$= (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) \cdot \mathbf{r}$$

$$\downarrow \leftarrow \quad |\mathbf{s} - \mathbf{s}_0| = 2|\mathbf{s}_0| \sin \theta, \quad \text{更に } \mathbf{r} \text{ と } \mathbf{s} - \mathbf{s}_0 \text{ の成す角は } \varphi$$

$$= 2|\mathbf{s}_0| \sin \theta |\mathbf{r}| \cos \varphi$$

$$\downarrow \leftarrow \quad |\mathbf{s}_0| = 1, \quad |\mathbf{r}| \equiv r$$

$$\Delta = 2r \sin \theta \cos \varphi \quad (3)$$

よって、O の電子と Q の電子それぞれの散乱波の位相差： δ は

$$\delta = 2\pi \frac{\Delta}{\lambda} = 2\pi \frac{2r \sin \theta \cos \varphi}{\lambda} = \frac{2\pi}{\lambda} 2 \sin \theta \times r \times \cos \varphi = \frac{2\pi}{\lambda} (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) \cdot \mathbf{r} \quad (4)$$

続いて、原点 \mathbf{O} の電子からの散乱波を位相の基準として、 \mathbf{r} に存在する電子からの散乱波を重ね合わせる。

原子番号： Z の原子は原子核の周りに Z 個の電子分布している。この電子に $1, 2, \dots, n, \dots, Z$ と番号を付ける。

n 番目の電子の空間電子数密度分布関数を $\rho_n(\mathbf{r})$ とする。 (5)

n 番目の電子は 1 個なので、 $\int_{\text{原子}} \rho_n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 1$ である。

n 番目の電子による散乱振幅： q_n は次式で与えられる。この電子は \mathbf{O} に対して \mathbf{r} の位置に存在している。

$$q_n = \int_{\text{原子}} e^{i\delta} \rho_n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (6)$$

$$\downarrow \leftarrow \quad \delta = \frac{2\pi}{\lambda} (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) \cdot \mathbf{r} \quad \leftarrow (4) \text{より位相差を代入}$$

$$= \int_{\text{原子全体}} \rho_n(\mathbf{r}) e^{\frac{2\pi i}{\lambda} (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

$\downarrow \leftarrow$

\downarrow

$$\mathbf{K} \equiv \frac{\mathbf{s} - \mathbf{s}_0}{\lambda} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0 \quad : \text{散乱ベクトル を定義して} \quad (7)$$

$$|\mathbf{K}| = \frac{2 \sin \theta}{\lambda} \quad (7)'$$

$$q_n(\mathbf{K}) = \int_{\text{原子}} \rho_n(\mathbf{r}) e^{2\pi i \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad \leftarrow n \text{ 番目の 1 個の電子による散乱振幅} \quad (8)$$

$$1 \text{ 原子に電子は } Z \text{ 個含まれるので、1 個の原子の電子数密度分布関数は } \rho(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^Z \rho_n(\mathbf{r}) \quad (9)$$

よって、1 個の原子からの散乱波の振幅：散乱振幅 f は

$$f = \sum_{n=1}^Z q_n \quad \text{原子散乱因子 (atomic scattering factor) と呼ぶ} \quad (10)$$

$$\downarrow \leftarrow \quad q_n(\mathbf{K}) = \int_{\text{原子}} \rho_n(\mathbf{r}) e^{2\pi i \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad \leftarrow (8) \text{より}$$

$$f(\mathbf{K}) = \sum_{n=1}^Z \left(\int_{\text{原子}} \rho_n(\mathbf{r}) e^{2\pi i \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \right) \quad \downarrow \leftarrow \quad \rho_n(\mathbf{r}) \equiv \rho_n(r) \quad \leftarrow \text{電子の球対称分布を仮定する} \quad (11)$$

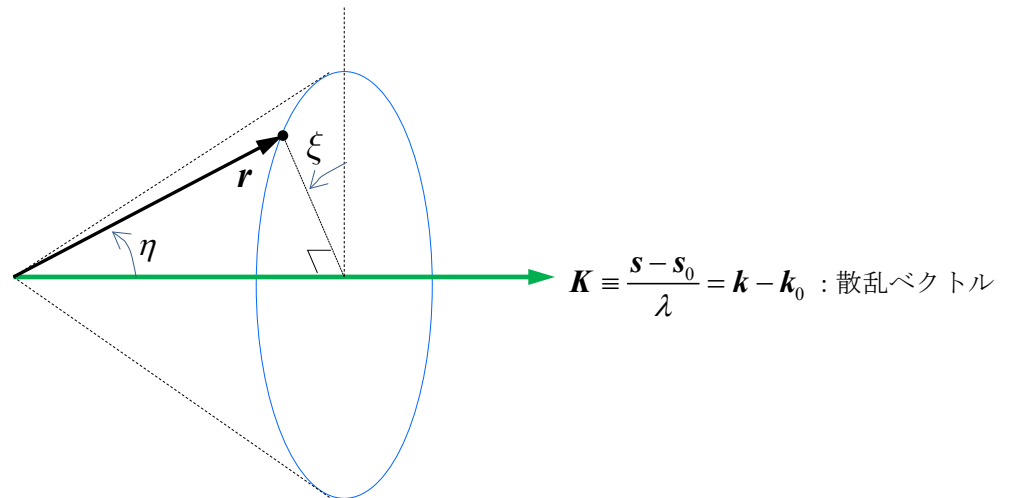
$$f(\mathbf{K}) = \sum_{n=1}^Z \left(\int_{\text{原子}} \rho_n(r) e^{2\pi i \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \right) \quad \downarrow \leftarrow \quad \text{球座標}(r, \eta, \xi) \text{で積分する。変数範囲は } 0 \leq r \leq \infty, 0 \leq \eta < \pi, 0 \leq \xi \leq 2\pi$$

$$f\left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right) = \sum_{n=1}^Z \left(\int_0^\infty dr \int_0^\pi d\eta \int_0^{2\pi} d\xi \left(\rho_n(r) e^{\frac{4\pi i \sin \theta}{\lambda} r \cos \eta} r^2 \sin \eta \right) \right) \quad (12)$$

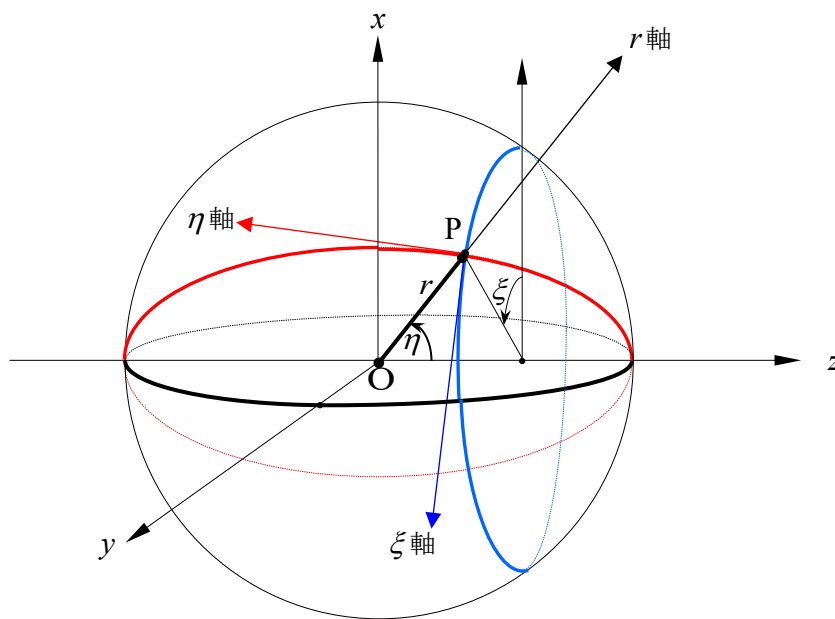
$$\times (7)' \text{より } \frac{\sin \theta}{\lambda} = \frac{|\mathbf{K}|}{2}$$

$$f\left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right) = \sum_{n=1}^Z \left(\int_0^{\infty} dr \int_0^{\pi} d\eta \int_0^{2\pi} d\xi \left(\rho_n(r) e^{\frac{4\pi i \sin \theta}{\lambda} r \cos \eta} r^2 \sin \eta \right) \right)$$

(12)再掲



球座標とその積分



$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \sin \eta \cos \xi \\ r \sin \eta \sin \xi \\ r \cos \eta \end{pmatrix}$$

変数範囲は $0 \leq \eta \leq \pi$ 、 $0 \leq \xi < 2\pi$ 、 $r \geq 0$ 問 半径 R の球の体積 $V_{\text{球}}$

$$V_{\text{球}} = \int_{r=0}^R \int_{\eta=0}^{\pi} \int_{\xi=0}^{2\pi} r \sin \eta d\xi r d\eta dr$$

→ 演習で

$$f\left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right) = \sum_{n=1}^Z \left(\int_0^{\infty} dr \int_0^{\pi} d\eta \int_0^{2\pi} d\xi \left(\rho_n(r) e^{\frac{4\pi i \sin \theta}{\lambda} r \cos \eta} r^2 \sin \eta \right) \right) \quad (12) \text{再掲}$$

↓ ← $\cos \eta \equiv x$ と置くと、 $dx = -\sin \eta d\eta$ 、積分の下限・上限も変換して

↓ ← $\int_0^{2\pi} d\xi = 2\pi$ も実行して

$$= \sum_{n=1}^Z \left(\int_0^{\infty} dr \int_{x=1}^{-1} \left(-\rho_n(r) 2\pi r^2 e^{\frac{4\pi i \sin \theta}{\lambda} r x} dx \right) \right)$$

↓ ← $\frac{4\pi \sin \theta}{\lambda} \equiv q$ と置く (13)

$$= \sum_{n=1}^Z \left(\left(\int_0^{\infty} \rho_n(r) 2\pi r^2 dr \right) \left(\int_{-1}^1 e^{i q r x} dx \right) \right)$$

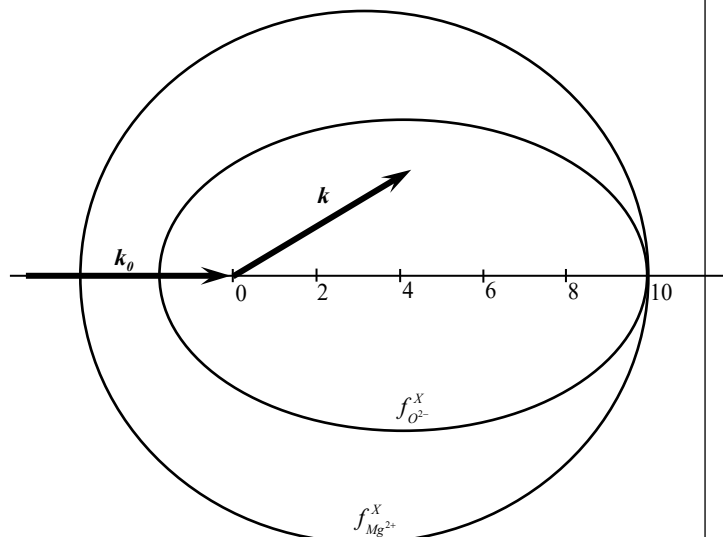
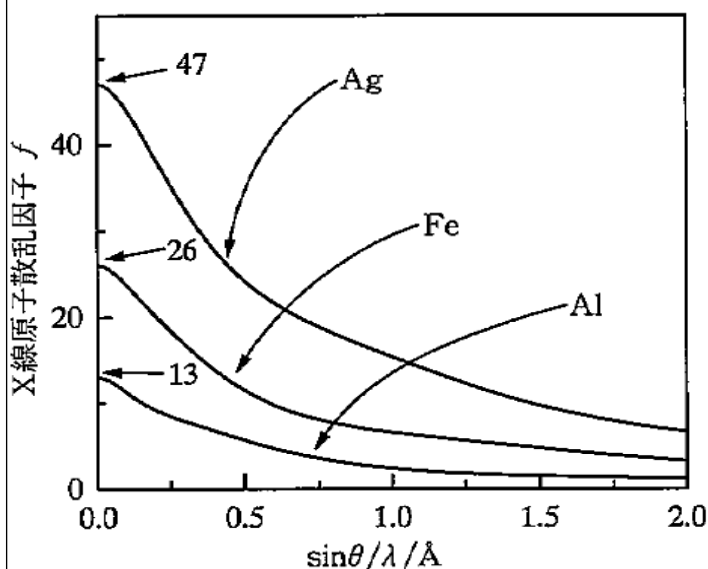
↓ ← $\int_{-1}^1 e^{i q r x} dx = \left[\frac{e^{i q r x}}{i q r} \right]_{x=-1}^1 = \frac{e^{i q r} - e^{-i q r}}{i q r} = \frac{2}{q r} \frac{e^{i q r} - e^{-i q r}}{2i} = 2 \frac{\sin(q r)}{q r}$

$$f(q) = \sum_{n=1}^Z \left(\int_0^{\infty} \rho_n(r) 4\pi r^2 \frac{\sin(q r)}{q r} dr \right) \quad : \text{原子散乱因子} \quad (14)$$

※ $\rho_n(r)$ は量子力学の Shrödinger 方程式より計算できる。

ここで、前方散乱 ($\theta \rightarrow 0$ 即ち $4\pi \frac{\sin \theta}{\lambda} = q \rightarrow 0$) の極限を考えると、 $\lim_{q \rightarrow 0} \frac{\sin(q r)}{q r} = 1$ 長波長極限

よって、 $f(0) = \sum_{n=1}^Z \left(\int_0^{\infty} 4\pi r^2 \rho_n(r) dr \right) = Z$ 一種の総和則 (sum rule) となる (15)



問 $f_{Mg^{2+}}(0) = f_{O^{2-}}(0)$ であるのはなぜか？

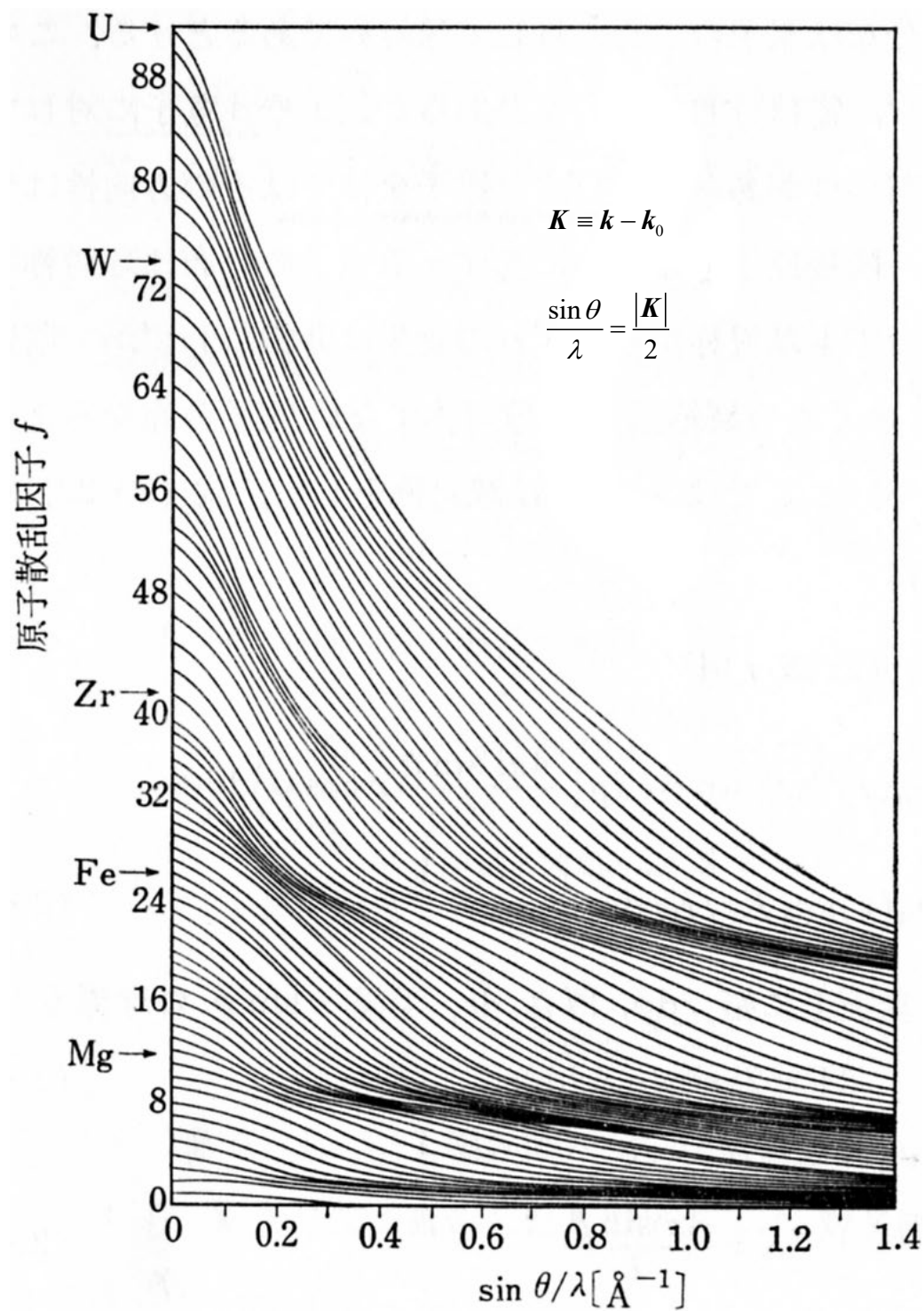


表3 原元素の結晶構造

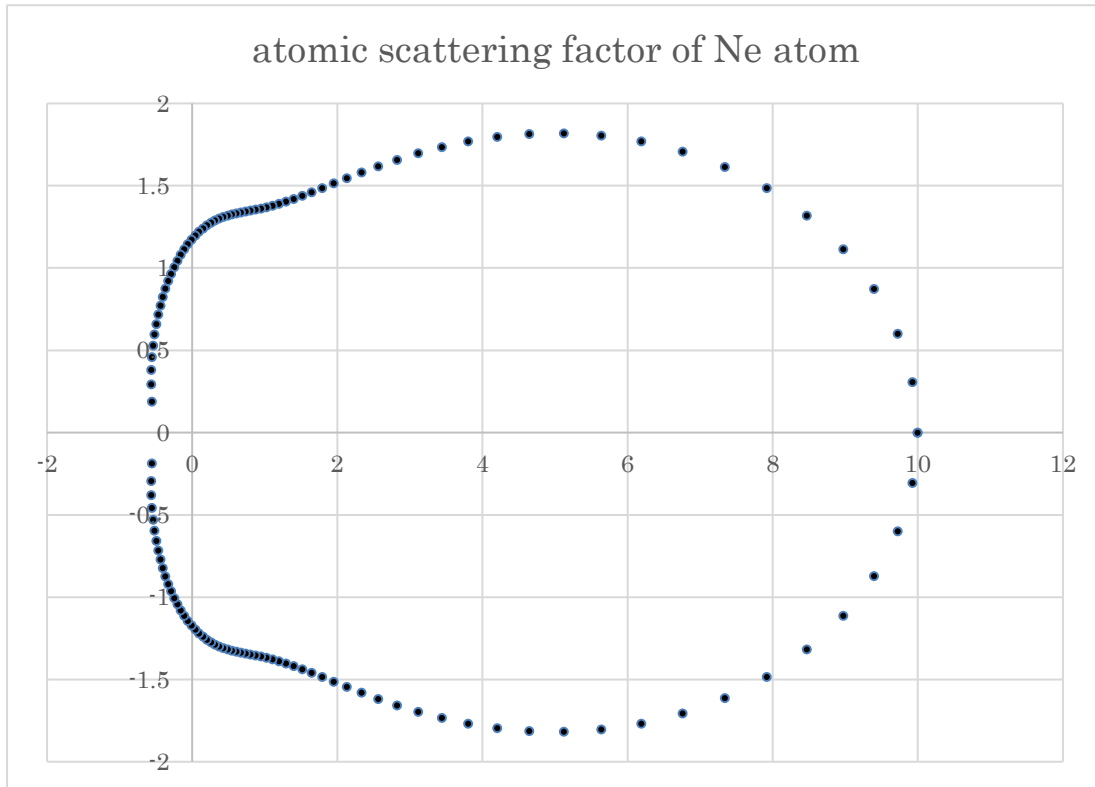
元 素	構 造	温 度 (°C)	格 子 定 数 (Å)		
			a	b	c または 軸 角
Ac Actinium	FCC, A1		5.311		
Al Aluminum	FCC, A1	25	4.0497		
Am Americium, α*	Hex., La type	20	3.4681		11.240
Sb Antimony	Rhomb., A7	25	4.5069		α = 57° 6' 27"
As Arsenic	Rhomb., A7	22.5	4.1319		α = 54° 8'
Ba Barium	BCC, A2	25	5.013		
Be Beryllium, α*	HCP, A3	R.T.	2.286		3.584
Bi Bismuth	Rhomb., A7	25	4.736		α = 57° 14'
B Boron*	Tetrag.	R.T.	8.80		5.05
Cd Cadmium	HCP, A3	21	2.9789		5.6169
Ca Calcium, α*	FCC, A1	26	5.5886		
C Carbon, diamond	Cubic, A4	20	3.5671		
Carbon, graphite*	Hex., A9	20	2.4613		6.7080
Ce Cerium*	FCC, A1	23	5.1603		
Cs Cesium	BCC, A2	173°K	6.0797		
Cr Chromium	BCC, A2	20	2.8847		
Co Cobalt, α*	HCP, A3	R.T.	2.507		4.070
Cobalt, β	FCC, A1	R.T.	3.544		
Cu Copper	FCC, A1	20	3.6148		
Dy Dysprosium, α*	HCP, A3	R.T.	3.5904		5.6477
Er Erbium, α*	HCP, A3	R.T.	3.5589		5.5876
Eu Europium	BCC, A2	25	4.5822		
Gd Gadolinium, α*	HCP, A3	20	3.6361		5.7828
Ga Gallium	Orthorh.	R.T.	4.523	7.661	4.524
Ge Germanium	Cubic, A4	25	5.6577		
Au Gold	FCC, A1	25	4.0786		
Hf Hafnium, α*	HCP, A3	24	3.1947		5.0513
Ho Holmium, α*	HCP, A3	R.T.	3.5774		5.6160
In Indium	Tetrag., A6	R.T.	4.5981		9.4969
I Iodine	Orthorh.	26	4.79	7.25	9.78
Ir Iridium	FCC, A1	R.T.	3.8390		
Fe Iron, α*	BCC, A2	20	2.8665		
Iron, γ	FCC, A1	916	3.6469		
Iron, δ	BCC, A2	1394	2.9323		
La Lanthanum, α*	Hex.	R.T.	3.770		12.159
Pb Lead	FCC, A1	25	4.9504		
Li Lithium*	BCC, A2	25	3.5101		
Lu Lutetium*	HCP, A3	R.T.	3.5032		5.5511
Mg Magnesium	HCP, A3	25	3.2095		5.2107
Mn Manganese, α*	Cubic, A12	R.T.	8.9142		
Hg Mercury	Rhomb. A10	227°K	3.005		α = 70° 32'
Mo Molybdenum	BCC, A2	20	3.1469		
Nd Neodymium, α*	Hex., La type	R.T.	3.6580		11.7996
Np Neptunium, α*	Orthorh.	20	6.663	4.723	4.887
Ni Nickel	FCC, A1	23	3.5239		
Nb Niobium	BCC, A2	25	3.3067		
Os Osmium	HCP, A3	20	2.7354		4.3193
Pd Palladium	FCC, A1	22	3.8908		
P Phosphorous, black*	Orthorh.	22	3.3137	10.478	4.3765
Pt Platinum	FCC, A1	20	3.9240		
Pu Plutonium, α*	Monocl.	21	6.183	4.822	10.963 β = 101.79°
Po Polonium, α*	Cubic	~ 10	3.345		
K Potassium	BCC, A2	78°K	5.247		
Pr Praseodymium, α*	Hex., La type	R.T.	3.6726		11.8358
Pa Protactinium	Tetrag.		3.925		3.238
Rh Rhenium	HCP, A3	R.T.	2.760		4.458
Rc Rhodium	FCC, A1	20	3.8045		
Rb Rubidium	BCC, A2	20	5.70		
Ru Ruthenium	HCP, A3	25	2.7059		4.2818
Sm Samarium	Rhomb.		8.996		α = 23° 13'
Sc Scandium, α*	HCP, A3	R.T.	3.3091		5.2735
Se Selenium*	Hex., A8	25	4.3658		4.9592
Si Silicon	Cubic, A4	25	5.4309		
Ag Silver	FCC, A1	25	4.0863		
Na Sodium	BCC, A2	20	4.2908		
Sr Strontium, α*	FCC, A1	25	6.0851		
S Sulphur*	Orthorh.	24.8	10.4650	12.8665	24.4869
Ta Tantalum	BCC, A2	R.T.	3.298		
Tc Technetium	HCP, A3	R.T.	2.735		4.388
Te Tellurium	Hex., A8	25	4.4568		5.9270
Tb Terbium, α*	HCP, A3	R.T.	3.6011		5.6938
Th Thallium, α*	HCP, A3	18	3.4567		5.5250
Th Thorium, α*	FCC, A1	R.T.	5.0847		
Tm Thulium, α*	HCP, A3	R.T.	3.5376		5.5548
Sn Tin (white), β*	Tetrag., A5	25	5.8317		3.1815
Tin (grey), α	Cubic, A4	20	6.4894		
Ti Titanium, α*	HCP, A3	25	2.9512		4.6845
Titanium, β	BCC, A2	900	3.3066		
W Tungsten	BCC, A2	25	3.1653		
U Uranium, α*	Orthorh., A20	25	2.8538	5.8697	4.9550
Uranium, β	Tetrag.	720	10.759		5.656
Uranium, γ	BCC, A2	805	3.524		
V Vanadium	BCC, A2	R.T.	3.0232		
Yb Ytterbium*	FCC, A1	R.T.	5.4864		
Y Yttrium*	HCP, A3	R.T.	3.6475		5.7308
Zn Zinc	HCP, A3	25	2.6650		4.9470
Zr Zirconium, α*	HCP, A3	25	3.2313		5.1479
Zirconium, β	BCC, A2	862	3.6091		

表4 X線原子散乱因子近似式のパラメータ

Element	a ₁	b ₁	a ₂	b ₂	a ₃	b ₃	a ₄	b ₄	c
1 H	0.493	10.5109	0.322912	26.1257	0.140191	3.14236	0.64081	57.7997	0.003038
2 He	0.8734	9.1037	0.6309	3.3568	0.3112	22.9276	0.178	0.9821	0.0064
3 Li	1.1282	3.9546	0.7508	1.0524	0.6175	85.3905	0.4653	168.261	0.0377
4 Be	1.5919	43.6427	1.1278	1.8623	0.5391	103.483	0.7029	0.542	0.0385
5 B	2.0545	23.2185	1.3326	1.021	1.0979	60.3498	0.7068	0.1403	-0.1932
6 C	2.31	20.8439	1.02	10.2075	1.5886	0.5687	0.865	51.6512	0.2156
7 N	12.2126	0.0057	3.1322	8.9933	2.0125	28.9975	1.1663	0.5826	-11.529
8 O	3.0485	13.2771	2.2868	5.7011	1.5463	0.3239	0.867	32.9089	0.2508
9 F	3.5392	10.2825	2.6412	4.2944	1.517	0.2615	1.0243	26.1476	0.2776
10 Ne	3.9553	8.4042	3.1125	3.4262	1.4546	0.2306	1.1251	21.7184	0.3515
11 Na	4.7626	3.285	3.1736	8.8422	1.2674	0.3136	1.1128	129.424	0.676
12 Mg	5.4204	2.8275	2.1735	79.2611	1.2269	0.3808	2.3073	7.1937	0.8584
13 Al	6.4202	3.0387	1.9002	0.7426	1.5936	31.5472	1.9646	85.0886	1.1151
14 Si	6.2915	2.4386	3.0353	32.3337	1.9891	0.6785	1.541	81.6937	1.1407
15 P	6.4345	1.9067	4.1791	27.157	1.78	0.526	1.4908	68.1645	1.1149
16 S	6.9053	1.4679	5.2034	22.2151	1.4379	0.2536	1.5863	56.172	0.8669
17 Cl	11.4604	0.0104	7.1964	1.1662	6.2556	18.5194	1.6455	47.7784	-9.5574
18 Ar	7.4845	0.9072	6.7723	14.8407	0.6539	43.8983	1.6442	33.3929	1.4445
19 K	8.2186	12.7949	7.4398	0.7748	1.0519	213.187	0.8659	41.6841	1.4228
20 Ca	8.6266	10.4421	7.3873	0.6599	1.5899	85.7484	1.0211	178.437	1.3751
21 Sc	9.189	9.0213	7.3679	0.5729	1.6409	136.108	1.468	51.3531	1.3329
22 Ti	9.7595	7.8508	7.3558	0.5	1.6991	35.6338	1.9021	116.105	1.2807
23 V	10.2971	6.8657	7.3511	0.4385	2.0703	26.8938	2.0571	102.478	1.2199
24 Cr	10.6406	6.1038	7.3537	0.392	3.324	20.2626	1.4922	98.7399	1.1832
25 Mn	11.2819	5.3409	7.3573	0.3432	3.0193	17.8674	2.2441	83.7543	1.0896
26 Fe	11.7695	4.7611	7.3573	0.3072	3.5222	15.3535	2.3045	76.8805	1.0369
27 Co	12.2841	4.2791	7.3409	0.2784	4.0034	13.5359	2.3488	71.1692	1.0118
28 Ni	12.8376	3.8785	7.292	0.2565	4.4438	12.1763	2.38	66.3421	1.0341
29 Cu	13.338	3.5828	7.1676	0.247	5.6158	11.3966	1.6735	64.8126	1.191
30 Zn	14.0743	3.2655	7.0318	0.2333	5.1652	10.3163	2.41	58.7097	1.3041
31 Ga	15.2354	3.0669	6.7006	0.2412	4.3591	10.7805	2.9623	61.4135	1.7189
32 Ge	16.0816	2.8509	6.3747	0.2516	3.7068	11.4468	3.683	54.7625	2.1313
33 As	16.6723	2.6345	6.0701	0.2647	3.4313	12.9479	4.2779	47.7972	2.531
34 Se	17.0006	2.4098	5.8196	0.2726	3.9731	15.2372	4.3543	43.8163	2.8409
35 Br	17.1789	2.1723	5.2358	0.2576	5.6377	0.2609	3.9851	41.4328	2.9557
36 Kr	17.3555	1.9384	6.7286	0.16523	5.5493	0.2261	3.5375	39.3972	2.825
37 Rb	17.1784	1.7888	9.6435	0.17315	5.1399	0.2748	1.5292	164.934	3.4873
38 Sr	17.5663	1.5564	9.8184	0.10988	5.422	0.1664	2.6694	132.376	2.5064
39 Y	17.776	1.4029	10.2946	0.12806	5.72629	0.1256	3.26588	104.354	1.91213
40 Zr	17.8765	1.27618	10.948	0.11916	5.41732	0.11762	3.45721	87.6627	2.06929
41 Nb	17.6142	1.18865	12.0144	0.11766	4.04183	0.20479	3.33346	69.7957	3.75591
42 Mo	3.7025	0.2772	17.2356	1.0958	12.8876	11.0048	3.7429	61.6584	4.3875
43 Tc	19.1301	0.86413	11.0948	8.14487	4.64901	21.5707	2.1263	86.8472	5.40428
44 Ru	19.2674	0.80852	12.9182	8.43467	4.86337	24.7997	1.56756	94.2928	5.37874
45 Rh	19.2957	0.75154	14.3501	8.21758	4.73425	25.8749	1.28918	98.6062	5.328
46 Pd	19.3319	0.69866	15.5017	7.98929	5.29537	25.2052	0.685844	76.8986	5.26593
47 Ag	19.2808	0.6446	16.6885	7.4726	4.8045	24.6605	1.0463	99.8156	5.179
48 Cd	19.2214	0.5946	17.6444	6.9089	4.461	24.7008	1.6029	87.4825	5.0694
49 In	19.1624	0.5476	18.5596	6.3776	4.2948	25.8499	2.0396	92.8029	4.9391
50 Sn	19.1889	5.8303	19.1005	0.5031	4.4585	26.8909	2.4663	83.9571	4.7821
51 Sb	19.6418	5.3034	19.0455	0.4607	5.0371	27.9074	2.6827	75.2825	4.5909
52 Te	19.9644	4.81742	19.0138	0.42089	6.14487	28.5284	2.5239	70.8403	4.352
53 I	20.1472	4.347	18.9949	0.3814	7.5138	27.766	2.2735	66.8776	4.0712
54 Xe	20.2933	3.9282	19.0298	0.344	8.9767	26.4659	1.99	64.2658	3.7118
55 Cs	20.3892	3.569	19.1062	0.3107	10.662	24.3879	1.4953	213.904	3.3352
56 Ba	20.3361	3.216	19.297	0.2756	10.888	20.2073	2.6959	167.202	2.7731
57 La	20.578	2.94817	19.599	0.24448	11.3727	18.7726	3.8719	133.124	2.14678
58 Ce	21.1671	2.81219	19.7695	0.22684	11.8513	17.6083	3.3049	127.113	1.86264
59 Pr	22.044	2.77393	19.6697	0.22209	12.3856	16.7669	2.82428	143.644	2.0583
60 Nd	22.6845	2.66248	19.6847	0.21063	12.774	15.885	2.85137	137.903	1.98486
61 Pm	23.3405	2.5627	19.6095	0.20209	13.1235	15.1009	2.87516	132.721	2.02876
62 Sm	24.0042	2.47274	19.4258	0.19645	13.4396	14.3996	2.89604	128.007	2.20963
63 Eu	24.6274	2.3879	19.0886	0.1942	13.7603	13.7546	2.9227	123.174	2.5745
64 Gd	25.0709	2.25341	19.0798	0.18195	13.8518	12.9331	3.5445	101.398	2.4196
65 Tb	25.8976	2.24256	18.2185	0.19614	14.3167	12.6648	2.9534	115.362	3.58324
66 Dy	26.507	2.1802	17.6383	0.20217	14.5596	12.1899	2.96577	111.874	4.29728
67 Ho	26.9049	2.07051	17.294	0.19794	14.5583	11.4407	3.63837	92.6564	4.56796
68 Er	27.6563	2.07356	16.4285	0.22355	14.9779	11.3604	2.98233	105.703	5.92046
69 Tm	28.1819	2.02859	15.8851	0.23885	15.1542	10.9975	2.98706	102.961	6.75621
70 Yb	28.6641	1.9889	15.4345	0.25712	15.3087	10.6647	2.98963	100.417	7.56672
71 Lu	28.9476	1.90182	15.2208	0.98519	15.1	0.26103	3.71601	84.3298	7.97628
72 Hf	29.144	1.83262	15.1726	9.5996	14.7586	0.27512	4.30017	72.029	8.58154
73 Ta	29.2024	1.77333	15.2293	9.37044	14.5135	0.29598	4.76492	63.3644	9.24354
74 W	29.0818	1.72029	15.43	9.2259	14.4327	0.3211	5.11982	57.056	9.8875
75 Re	28.7621	1.67191	15.7189	9.09227	14.5564	0.3505	5.44174	52.0861	10.472
76 Os	28.894	1.62903	16.155	8.97948	14.9305	0.38266	5.57589	48.1647	11.0005
77 Ir	27.3049	1.59279	16.7296	8.86553	15.6111	0.41792	5.83377	45.0011	11.4722
78 Pt	27.0059	1.51293	17.7639	8.81174	15.7131	0.42459	5.7837	38.6103	11.6883
79 Au	16.8819	0.4611	18.5913	8.6216	25.5582	1.4826	5.86	36.3956	12.0658
80 Hg	20.6809	0.545	19.0417	8.4848	21.6575	1.5729	5.9676	38.3246	12.6089
81 Tl	27.5446	0.65515	19.1584	8.70751	15.538	1.96347	5.52593	45.8149	13.1746
82 Pb	31.0617	0.6902	13.0637	2.3576	18.442	8.618	5.9696	47.2579	13.4118
83 Bi	33.3689	0.704	12.951	2.9238	16.5877	8.7937	6.4692	48.0093	13.5782
84 Po	34.6726	0.701	15.4735	3.5078	13.1138	9.55642	7.02588	47.0045	13.677
85 At	35.3163	0.68587	19.0211	3.97458	9.49887	11.3824	7.42518	45.4715	13.7108
86 Rn	35.5631	0.6631	21.2816	4.0691	8.0037	14.0422	7.4433	44.2473	13.6905
87 Fr	35.9299	0.64645	23.0547	4.17619	12.1439	23.1052	2.11253	150.645	13.7247
88 Ra	35.763	0.61634	22.9064	3.87135	12.4739	19.9887	3.21097	142.325	13.6211
89 Ac	35.6597	0.58909	23.1032	3.65155	12.5977	18.599	4.08655	117.02	13.5266
90 Th	35.5645	0.56336	23.4219	3.46204	12.7473	17.8309	4.80703	99.1722	13.4314
91 Pa	35.8847	0.54775	23.2948	3.41519	14.1891	16.9235	4.17287	105.251	13.4287
92 U	36.0228	0.5293	23.4128	3.3253	14.9491	16.0927	4.188	100.613	13.3966

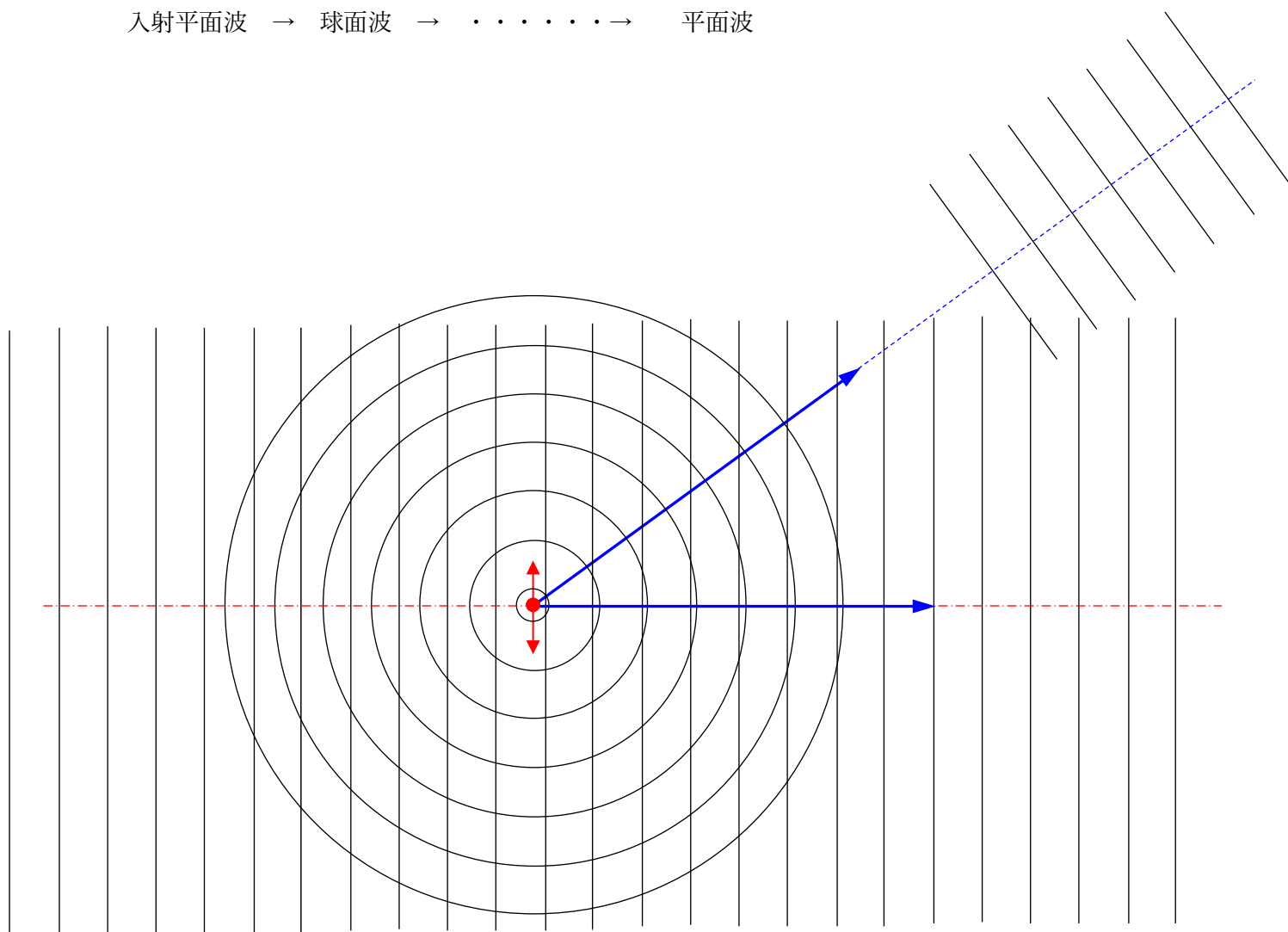
Ne 原子散乱因子

$$f_x\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right) = \sum_{j=1}^4 \left\{ a_j e^{-b_j\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)^2} \right\} + c = a_1 e^{-b_1\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)^2} + a_2 e^{-b_2\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)^2} + a_3 e^{-b_3\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)^2} + a_4 e^{-b_4\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)^2} + c$$

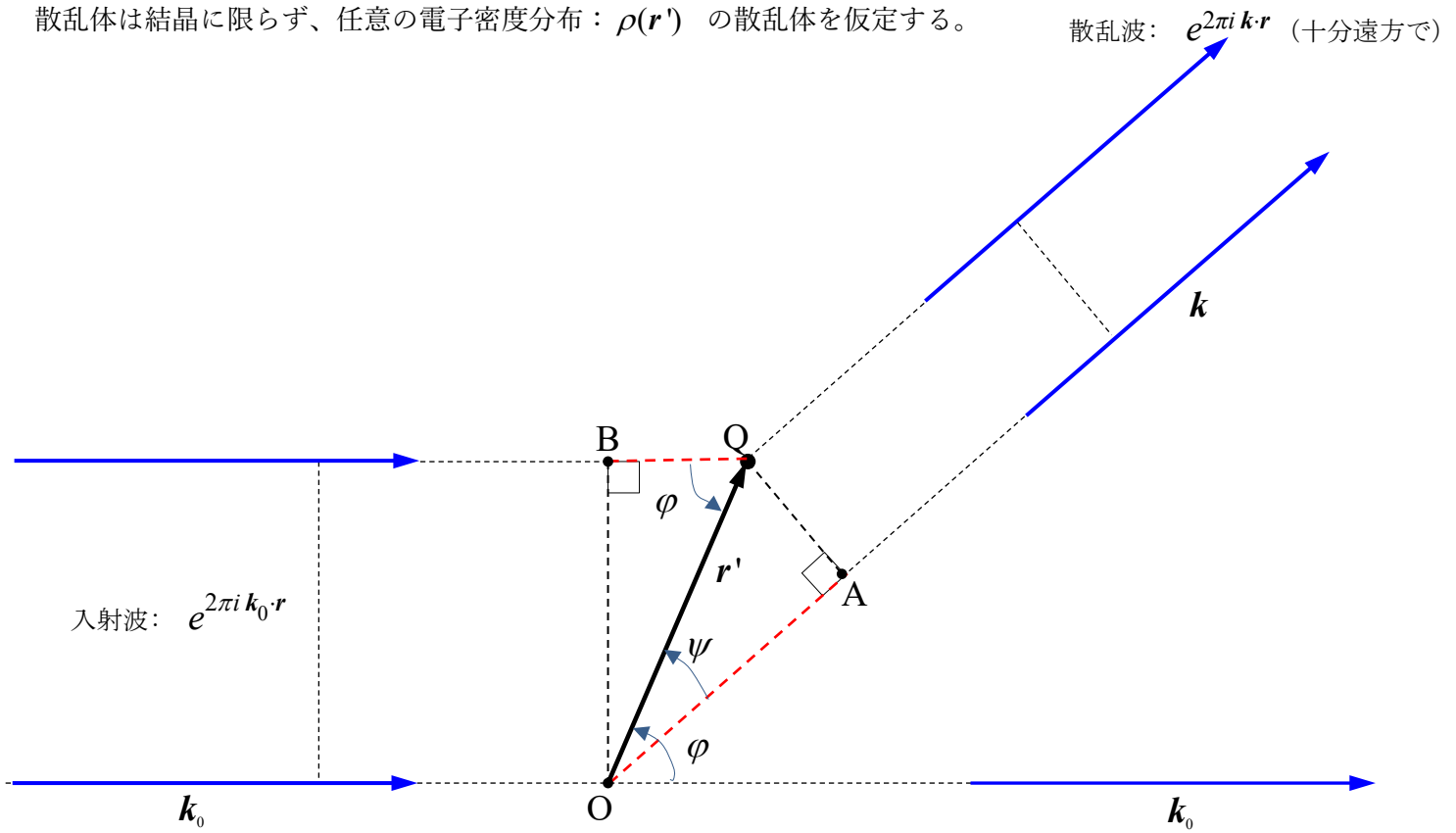


§ § 散乱波強度の一般式

入射平面波 → 球面波 → → 平面波



散乱体は結晶に限らず、任意の電子密度分布： $\rho(\mathbf{r}')$ の散乱体を仮定する。



O 点で散乱される波に対し、Q 点で散乱される波は

$$\text{行路差: } \Delta = \overline{OA} - \overline{OB} = |\mathbf{r}'|(\cos \psi - \cos \varphi) \quad (16)$$

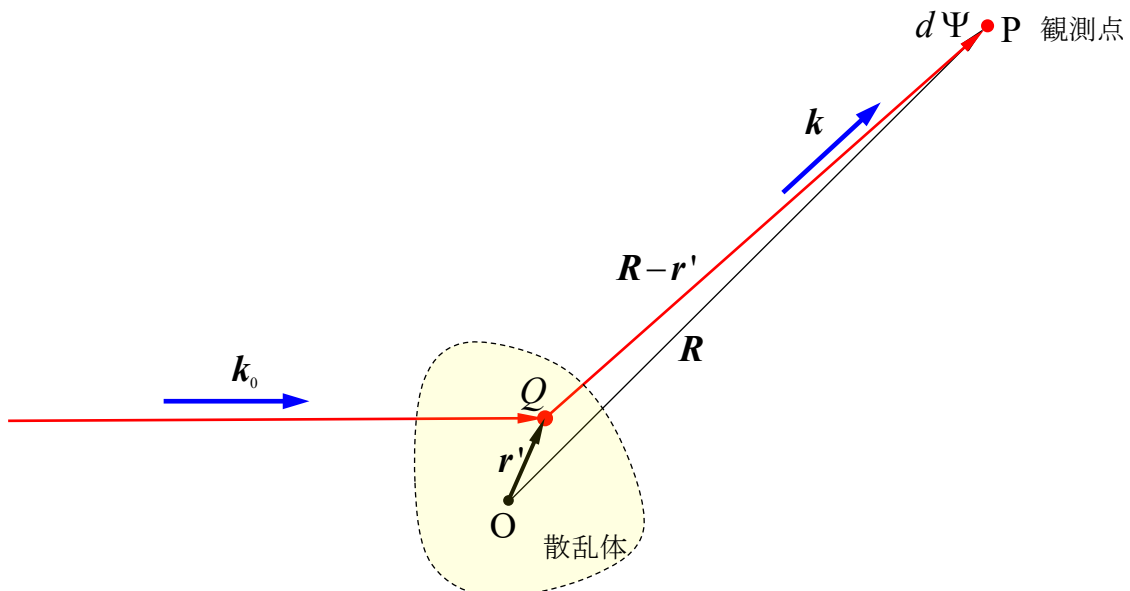
$$\therefore \text{位相差: } \delta = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta = \frac{2\pi}{\lambda} |\mathbf{r}'|(\cos \psi - \cos \varphi)$$

$$\downarrow \leftarrow \quad \text{図より} \quad \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}' = \frac{1}{\lambda} |\mathbf{r}'| \cos \varphi, \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}' = \frac{1}{\lambda} |\mathbf{r}'| \cos \psi$$

$$\text{よって } \delta(\mathbf{r}') = 2\pi(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{r}' \quad (17)$$

Q 点における微小体積素片 $d\mathbf{r}'$ で散乱される波 $d\Psi$ は、観測点 P (座標ベクトル = \mathbf{R}) において

$$d\Psi = \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \frac{e^{2\pi i |\mathbf{k}| |\mathbf{R}| + i\delta(\mathbf{r}')}}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}'|} \quad \text{に比例する散乱振幅となる。} \quad (18)$$



散乱体全体からの散乱波: Ψ は(18)の $d\Psi$ を積分して

$$\begin{aligned}\Psi &= \int_{\text{散乱体全体}} d\Psi \\ &= \int_{\text{散乱体全体}} \rho(\mathbf{r}') \frac{e^{2\pi i \|\mathbf{k}\|\mathbf{R} + i\delta(\mathbf{r}')}}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \\ \downarrow \leftarrow & \quad \delta(\mathbf{r}') = 2\pi(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{r}' \quad \leftarrow (17)\end{aligned}$$

$$= e^{2\pi i \|\mathbf{k}\|\mathbf{R}} \int_{\text{散乱体全体}} \rho(\mathbf{r}') \frac{e^{2\pi i (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{r}'}}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'$$

↓

↓ ←

散乱体の存在領域 \mathbf{r}' に比べて、観測点までの距離 $|\mathbf{R}|$ が十分遠方の場合、

$$\frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}'|} \approx \frac{1}{|\mathbf{R}|} \text{ として積分の外に出せる。}$$

フラウンホッフ回折 Fraunhofer diffraction

$$\therefore \Psi = \frac{e^{2\pi i \|\mathbf{k}\|\mathbf{R}}}{|\mathbf{R}|} \int_{\text{散乱体全体}} \rho(\mathbf{r}') e^{2\pi i (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{r}'} d\mathbf{r}' \quad (19)$$

つまり散乱波は球面波として P 点に到達し、回折角依存性は散乱体密度 $\rho(\mathbf{r}')$ のフーリエ変換で与えられる。

散乱波の強度: I は

$$I = |\Psi|^2 = I_0 C \frac{1}{|\mathbf{R}|^2} \left| \int_{\text{散乱体全体}} \rho(\mathbf{r}') e^{2\pi i (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{r}'} d\mathbf{r}' \right|^2 \quad (20)$$

ここで、 I_0 は入射波強度、 C は散乱断面積に比例する定数

$$\downarrow \leftarrow \quad \mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \mathbf{K} : \text{散乱ベクトル} \quad (21)$$

$$= I_0 C \frac{1}{|\mathbf{R}|^2} \left| \int_{\text{散乱体全体}} \rho(\mathbf{r}') e^{2\pi i \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'} d\mathbf{r}' \right|^2$$

↓ ←

$$\int_{\text{散乱体全体}} \rho(\mathbf{r}') e^{2\pi i \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'} d\mathbf{r}' \equiv G(\mathbf{K}) \quad \leftarrow \rho(\mathbf{r}') \text{ の Fourier 変換} \quad (22)$$

ここで、 $\rho(\mathbf{r}')$ は結晶でも気体でも液体でも可能である。

特に X 線の場合は、 $\rho(\mathbf{r}')$ は電子数密度分布関数

$$I(\mathbf{K}) = I_0 C \frac{|G(\mathbf{K})|^2}{R^2} \quad \text{散乱波強度の一般式} \quad (23)$$