問題 5　物性: X 線回折

5-1

$$
\begin{aligned}
I &= C\left|\int_V \sum_{p=0}^{N-1} n_0\delta(x)\delta(y)\delta(z-ap)e^{iq\cdot r}dr\right|^2 \\
&= C\left|\sum_{p=0}^{N-1} n_0 e^{iq_z ap}\right|^2 = C\left|n_0\frac{1-e^{iq_z aN}}{1-e^{iq_z a}}\right|^2 \\
&= Cn_0^2\frac{1-e^{iq_z aN}}{1-e^{iq_z a}}\frac{1-e^{-iq_z aN}}{1-e^{-iq_z a}} = Cn_0^2\frac{1-\cos(q_z aN)}{1-\cos(q_z a)}
\end{aligned} \tag{5-1.1}
$$

5-2

前問と同様にやると

$$
\begin{aligned}
I &= C\left|\int_V \sum_{p_x,p_y,p_z} n_0\delta(x-ap_x)\delta(y-ap_y)\delta(z-ap_z)e^{iq\cdot r}dr\right|^2 \\
&= C\left|\sum_{p_x,p_y,p_z}^{N-1} n_0 e^{iq_x ap_x}e^{iq_y ap_y}e^{iq_z ap_z}\right|^2 = C\left|n_0\frac{1-e^{iq_x aN}}{1-e^{iq_x a}}\frac{1-e^{iq_y aN}}{1-e^{iq_y a}}\frac{1-e^{iq_z aN}}{1-e^{iq_z a}}\right|^2 \\
&= Cn_0^2\frac{1-\cos(q_x aN)}{1-\cos(q_x a)}\frac{1-\cos(q_y aN)}{1-\cos(q_y a)}\frac{1-\cos(q_z aN)}{1-\cos(q_z a)}
\end{aligned} \tag{5-2.1}
$$

5-3

$q = \boldsymbol{e}_z\frac{4\pi}{\lambda}\sin\theta$ より

$$
I = Cn_0^2\frac{1-\cos(q_z aN)}{1-\cos(q_z a)} \tag{5-3.1}
$$

散乱強度が大きくなるのはこれの分母が 0 になるようなとき、つまり $\cos q_z a = 1$ のときなので、

$$
\begin{aligned}
q_z a &= 2\pi n \\
\frac{4\pi}{\lambda}\sin\theta a &= 2\pi n \\
2a\sin\theta &= n\lambda
\end{aligned} \tag{5-3.2}
$$

5-4

$n = 1$ のピークが 13° にあるので、

$$
a = \frac{\lambda}{2\sin 13^\circ} = \frac{0.15\,\mathrm{nm}}{2\times 0.23} = 3.26\,\text{Å} \tag{5-4.1}
$$

5-5

散乱振幅は $\delta = a(1/2, 1/2, 1/2)$ とおいて、

$$
\int (n(r) + n(r-\delta))e^{iqr}dr = (1+e^{iq\delta})\int n(r)e^{iqr} \tag{5-5.1}
$$

と書けるので、散乱強度は

$$
\begin{aligned}
I &= C\left|(1+e^{iq\delta})\int n(r)e^{iqr}dr\right|^2 \\
&= C\left|n_0(1+e^{iq\delta})\frac{1-e^{iq_xaN}}{1-e^{iq_xa}}\frac{1-e^{iq_yaN}}{1-e^{iq_ya}}\frac{1-e^{iq_zaN}}{1-e^{iq_za}}\right|^2 \\
&= 2Cn_0^2(1+\cos(q\delta))\frac{1-\cos(q_zaN)}{1-\cos(q_za)} \qquad (5\text{-}5.2)
\end{aligned}
$$

となる。$1+\cos(q\delta)=0$ となる波数、つまり

$$
\begin{aligned}
q\delta &= (2n+1)\pi \\
\frac{4\pi}{\lambda}\sin\theta\frac{a}{2} &= (2n+1)\pi \\
2a\sin\theta &= (2n+1)\lambda \qquad (5\text{-}5.3)
\end{aligned}
$$

を満たすときには、ピークが消える。なので、アとウのピークは消える。

5-6

前問より原子 B の副格子によって消えないピークの強度は

$$
I = 4Cn_0^2\frac{1-\cos(q_zaN)}{1-\cos(q_za)} \qquad (5\text{-}6.1)
$$

そして、$\epsilon=0$ のときに消えるピークの強度は

$$
\begin{aligned}
I &= 2Cn_0^2(1+\cos(q(\delta+\epsilon)))\frac{1-\cos(q_zaN)}{1-\cos(q_za)} \\
&\simeq 2Cn_0^2\left(1+\cos(q\delta)-(q\epsilon)\sin(q\delta)-\frac{(q\epsilon)^2}{2}\cos(q\epsilon)\right)\frac{1-\cos(q_zaN)}{1-\cos(q_za)} \\
&= C(q\epsilon)^2\frac{1-\cos(q_zaN)}{1-\cos(q_za)} \qquad (5\text{-}6.2)
\end{aligned}
$$

となる。つまり、ピークの強さの比が $(q\epsilon)^2/4$ に対応するので、これから変位量を求められる。

感想

最後の設問の解答あってるのかわからん。