

## 問題 5 物性: X 線回折

5-1

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

5-2

前問と同様にやると

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

5-3

$q = e_z \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta$  より

$$I = C n_0^2 \frac{1 - \cos(q_z aN)}{1 - \cos(q_z a)} \tag{5-3.1}$$

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  $13^\circ$  にあるので、

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

5-5

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

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

と書けるので、散乱強度は

$$\begin{aligned}
I &= C \left| (1 + e^{iq\delta}) \int n(r) e^{iqr} dr \right|^2 \\
&= C \left| n_0 (1 + e^{iq\delta}) \frac{1 - e^{iq_x a N}}{1 - e^{iq_x a}} \frac{1 - e^{iq_y a N}}{1 - e^{iq_y a}} \frac{1 - e^{iq_z a N}}{1 - e^{iq_z a}} \right|^2 \\
&= 2Cn_0^2 (1 + \cos(q\delta)) \frac{1 - \cos(q_z a N)}{1 - \cos(q_z a)}
\end{aligned} \tag{5-5.2}$$

となる。 $1 + \cos(q\delta) = 0$  となる波数、つまり

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

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

全問より原子 B の副格子によって消えないピークの強度は

$$I = 4Cn_0^2 \frac{1 - \cos(q_z a N)}{1 - \cos(q_z a)} \tag{5-6.1}$$

そして、 $\epsilon = 0$  のときに消えるピークの強度は

$$\begin{aligned}
I &= 2Cn_0^2 (1 + \cos(q(\delta + \epsilon))) \frac{1 - \cos(q_z a N)}{1 - \cos(q_z a)} \\
&\simeq 2Cn_0^2 \left( 1 + \cos(q\delta) - (q\epsilon) \sin(q\delta) - \frac{(q\epsilon)^2}{2} \cos(q\delta) \right) \frac{1 - \cos(q_z a N)}{1 - \cos(q_z a)} \\
&= C(q\epsilon)^2 \frac{1 - \cos(q_z a N)}{1 - \cos(q_z a)}
\end{aligned} \tag{5-6.2}$$

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。