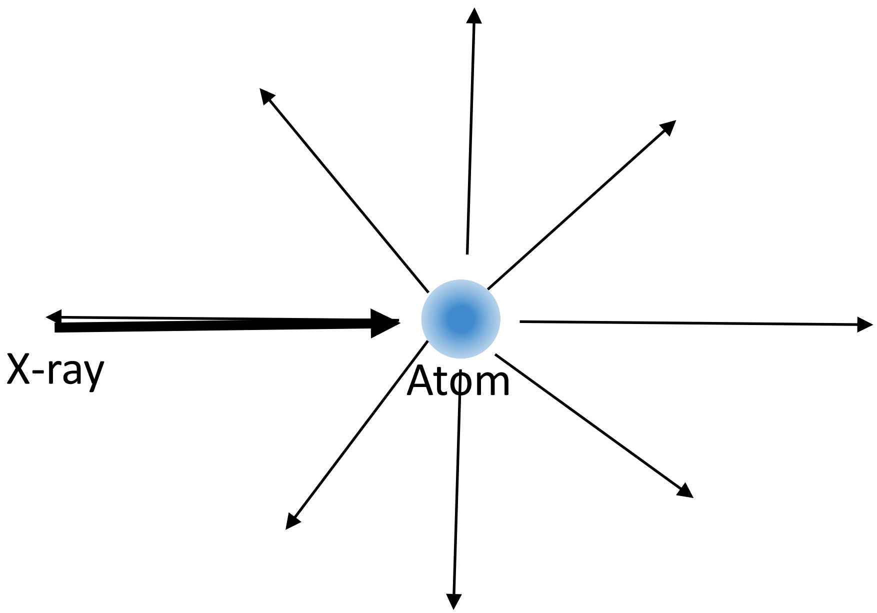
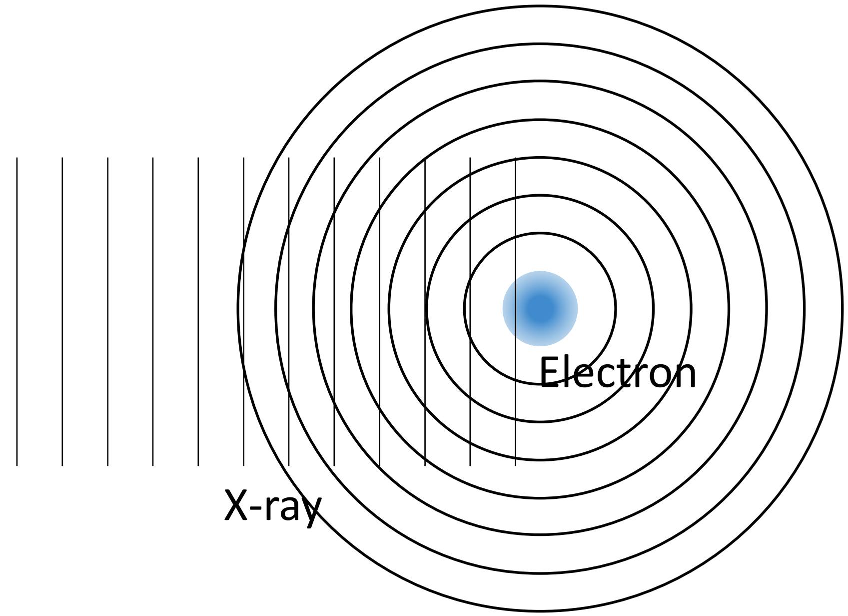
放射光X線回折

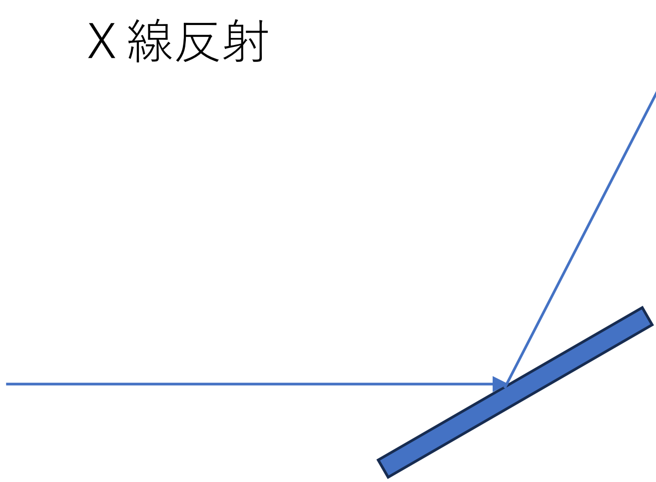
X 線散乱



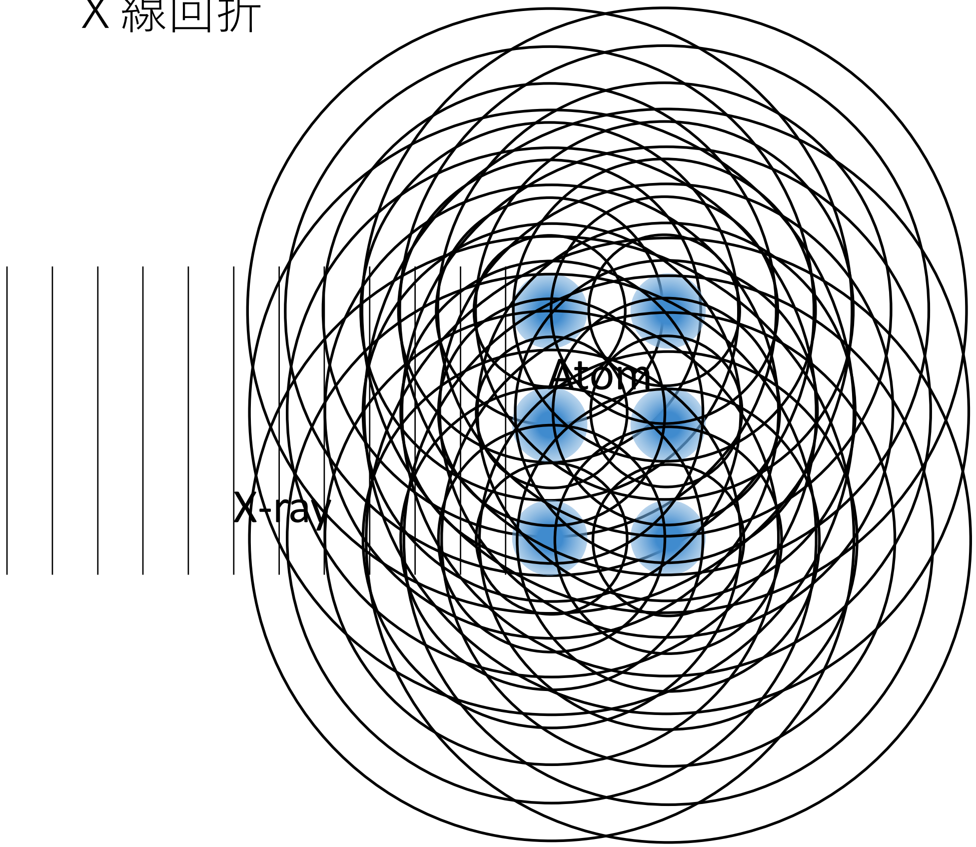
X 線回折



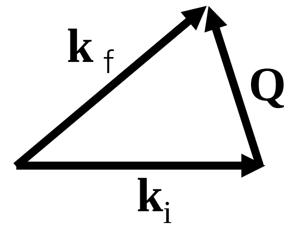
X 線反射



X 線回折



干渉条件　Bragg’s law



$\mathbf{k}_\mathrm{i}$:入射波数ベクトル
$\mathbf{k}_f$:散乱波数ベクトル
$\mathbf{Q}$:逆格子ベクトル

$$\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i = \mathbf{Q} \qquad 2k_i \sin\theta = Q$$

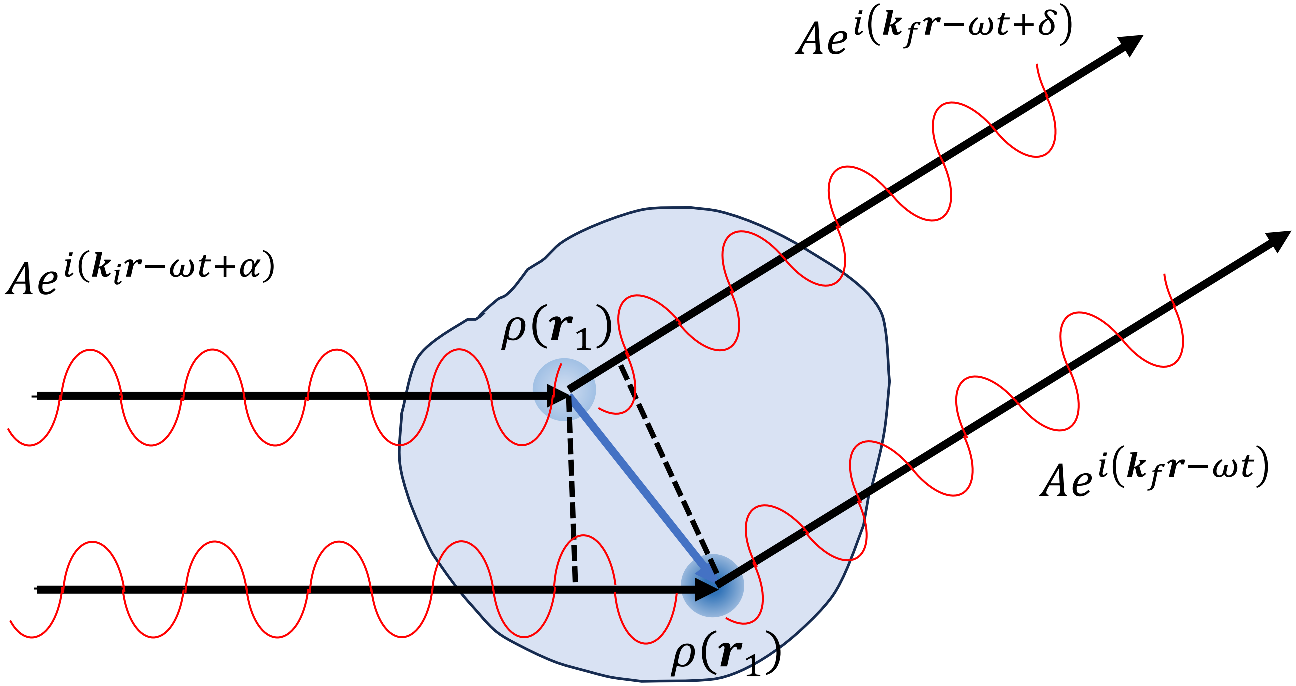
X 線回折強度

$$I(Q) \propto \left|F(Q)\right|^2$$

$$F(\mathbf{Q}) = \sum_j f_j(\mathbf{Q}) \exp(2\pi i \mathbf{r}_\mathbf{i} \cdot \mathbf{Q})$$

$$f_i = f_i^{charge}(Q) + f_i^{mag}(Q) + f_i^{resnance}(E)$$

$\mathbf{r}_\mathrm{j}$: j番目の原子の位置ベクトル
$\mathbf{Q}$: 散乱ベクトル
f_j $(\mathbf{Q})$: j番目の原子の散乱因子

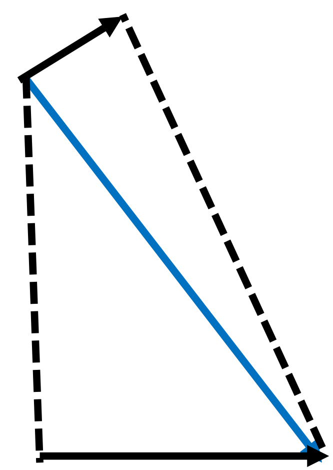


$\rho(\boldsymbol{r})$: 電子密度

光路差$\delta = l_1 + l_2 = (\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_f)(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1)$

位置$\boldsymbol{r}_1$からの散乱X線は　$\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{k}_f - \boldsymbol{k}_i$

$$Ae^{i(\boldsymbol{k}_f\boldsymbol{r}-\omega t+\delta)} = Ae^{i(\boldsymbol{k}_f\boldsymbol{r}-\omega t-\boldsymbol{Q}\boldsymbol{r}_1)}$$



物質内の電子を考えると、

$$Ae^{i(\boldsymbol{k}_f\boldsymbol{r}-\omega t-\boldsymbol{Q}\boldsymbol{r})}\rho(\boldsymbol{r})dV$$

位置の微小体積dVからの散乱は

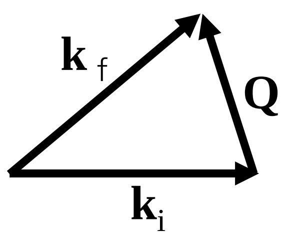
$$Ae^{i(\boldsymbol{k}_f\boldsymbol{r}-\omega t-\boldsymbol{Q}\boldsymbol{r})}\rho(\boldsymbol{r})dr$$

物質内すべての電子を考えて積算すると、

$$\int Ae^{i(\boldsymbol{k}_f\boldsymbol{r}-\omega t-\boldsymbol{Q}\boldsymbol{r})}\rho(\boldsymbol{r})dV = Ae^{i(\boldsymbol{k}_f\boldsymbol{r}-\omega t)}\underbrace{\int e^{i\boldsymbol{Q}\boldsymbol{r}}\rho(\boldsymbol{r})dr}_{F_{all}(\boldsymbol{Q})}$$

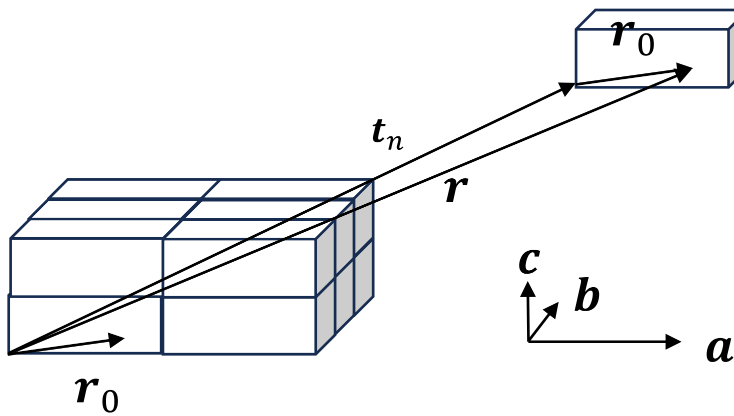
観測量は、振幅の二乗であるから、

$$I(\boldsymbol{Q}) = A^2|F_{all}(\boldsymbol{Q})|^2$$



$\mathbf{k}_i$:入射波数ベクトル
$\mathbf{k}_f$:散乱波数ベクトル
$\mathbf{Q}$:逆格子ベクトル

注意！！　教科書によって定義が逆　！！
理論家と実験屋の違い！！



$$\boldsymbol{r}_n = \boldsymbol{r}_0 + \boldsymbol{t}_n$$
$$\boldsymbol{t}_n = n_1\boldsymbol{a} + n_2\boldsymbol{b} + n_3\boldsymbol{c}$$

n_1, n_2, n_3は整数

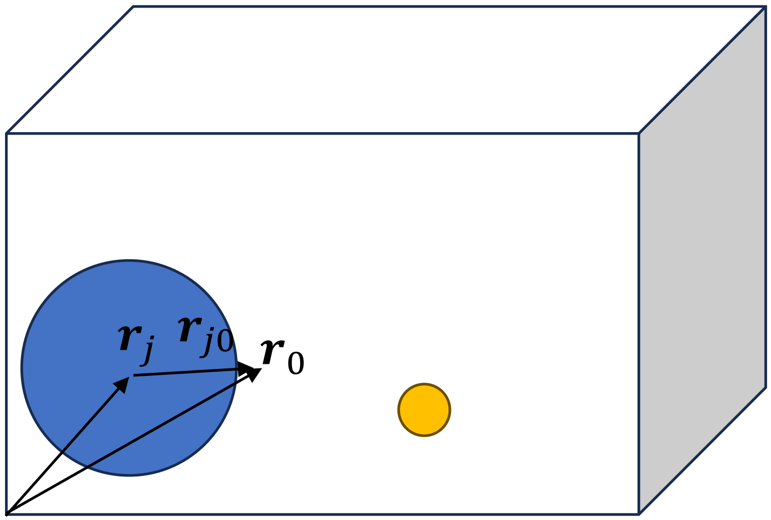
結晶の周期性を考えると、電子密度は

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \sum_{n1,n2,n3} \rho^{cell}\big(\boldsymbol{r} - (n_1\boldsymbol{a} + n_2\boldsymbol{b} + n_3\boldsymbol{c})\big)$$

$$F_{all}(\boldsymbol{Q}) = \int \sum_{n1,n2,n3} \rho^{cell}(\boldsymbol{r} - n_1\boldsymbol{a} + n_2\boldsymbol{b} + n_3\boldsymbol{c})\, e^{i\boldsymbol{Q}\boldsymbol{r}} dr$$

$$= \underbrace{\sum_{n1,n2,n3} e^{-i\boldsymbol{Q}(n_1\boldsymbol{a}+n_2\boldsymbol{b}+n_3\boldsymbol{c})}}_{L(\boldsymbol{Q}, n_1, n_2, n_3)} \underbrace{\int \rho^{cell}(\boldsymbol{r}_0) e^{i\boldsymbol{Q}\boldsymbol{r}} dr}_{F(\boldsymbol{Q})}$$

$$F(\boldsymbol{Q}) = \int \rho^{cell}(\boldsymbol{r}_0) e^{i\boldsymbol{Q}\boldsymbol{r}_0} dr$$



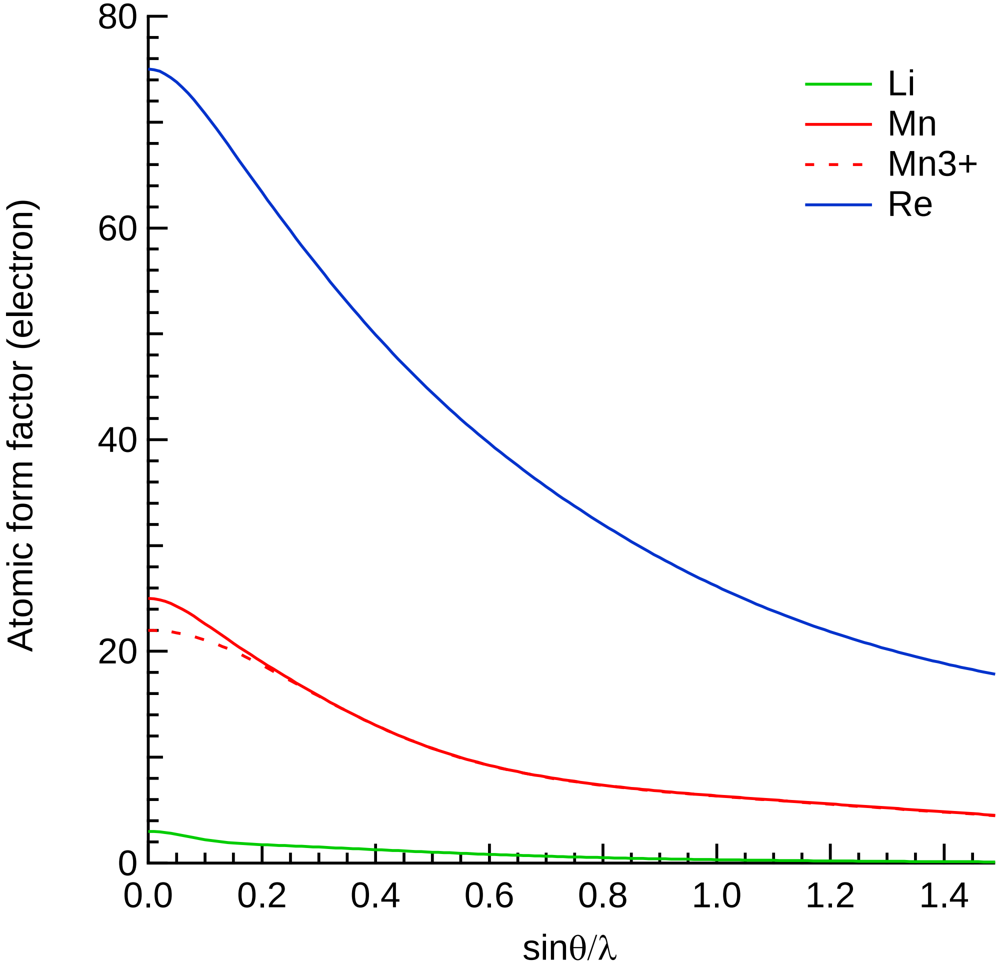
$$\rho^{cell}(\boldsymbol{r}_0) = \sum_j \rho_j^{atom}(\boldsymbol{r}_{j0})$$

$\boldsymbol{r}_j$にいる原子jの電子密度の足し合わせ

$$F(\boldsymbol{Q}) = \int \sum_j \rho_j^{atom}(\boldsymbol{r}_{j0}) e^{i\boldsymbol{Q}\boldsymbol{r}_0} dr = \sum_j^{cell} \left[\int \rho_j^{atom}(\boldsymbol{r}_{j0}) e^{i\boldsymbol{Q}\boldsymbol{r}_{j0}} dr \right] e^{i\boldsymbol{Q}\boldsymbol{r}_j} = \sum_j^{cell} f_i(\boldsymbol{Q}) e^{i\boldsymbol{Q}\boldsymbol{r}_j}$$

$$f_i(\boldsymbol{Q}) = \int \rho_j^{atom}(\boldsymbol{r}_{j0}) e^{i\boldsymbol{Q}\boldsymbol{r}_{j0}} dr$$ 原子散乱因子

原子散乱因子：電子密度のフーリエ変換
電子による散乱（トムソン散乱）の振幅

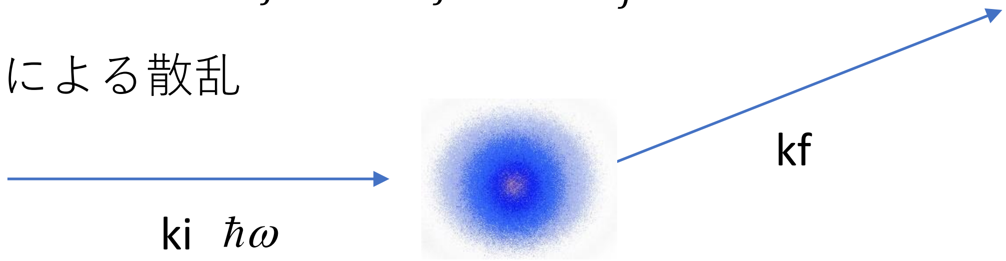


通常の構造解析に使われるのは
- 孤立原子を前提としてた理論計算
- 球対称を仮定
- Q依存性（原子が有限の大きさ）

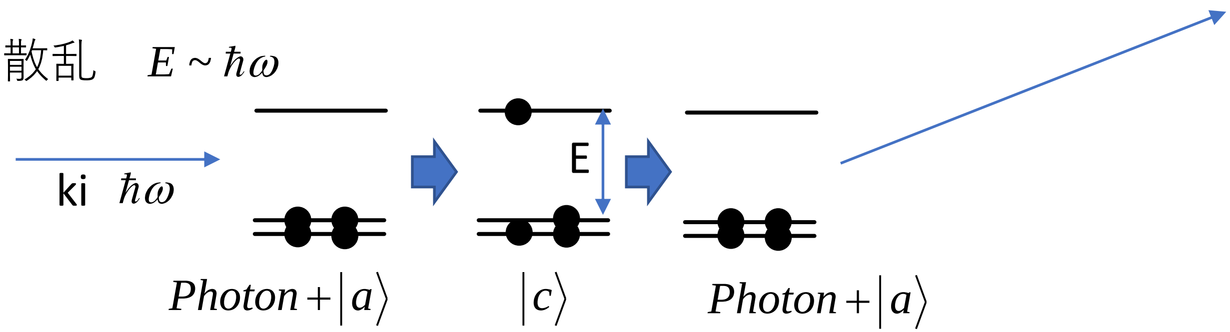
物質によるX線の散乱

$$f_j = f_j^{charge}(Q) + f_j'(E) + f_j''(E) + f_j^{Mag}(\mathrm{Q})$$

電荷による散乱



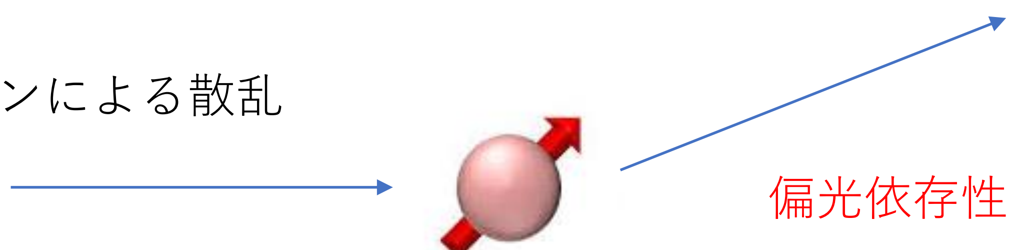
共鳴散乱　$E \sim \hbar\omega$



最外殻電子の状態についての情報

→ スピン偏極、電荷、軌道占有

スピンによる散乱



偏光依存性がそれぞれ異なる！

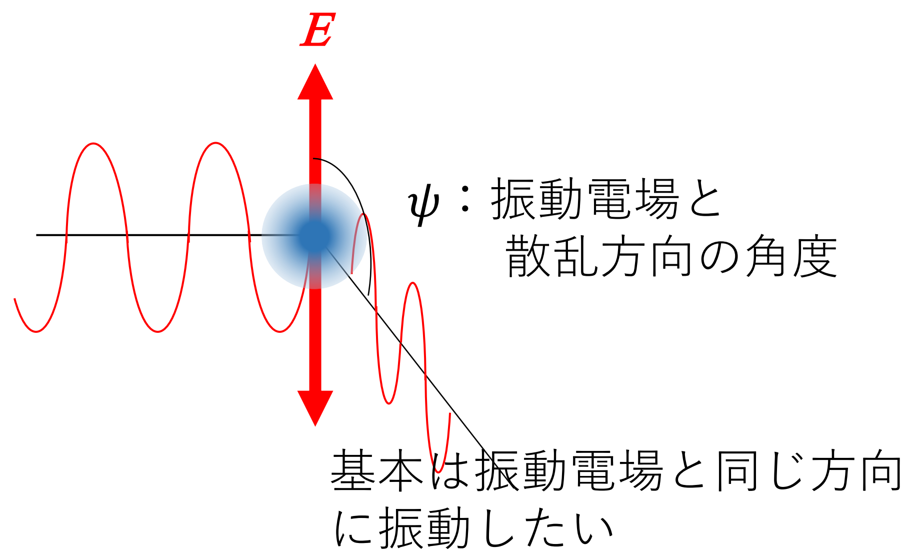
電子による散乱の偏光依存性

光の電場がある振動数ωで電子を振動させたときの加速度

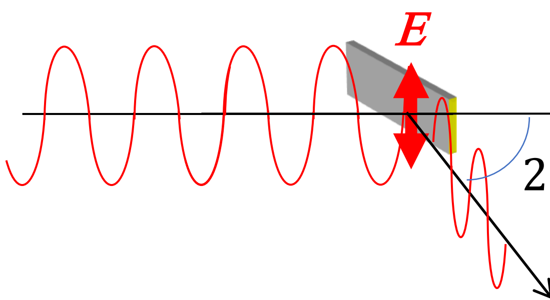
$$\ddot{Z} = -\frac{eE_0}{m_e} sin\omega t$$

放出される電磁場のE, Hは

$$\mathrm{E} = \mathrm{H} = \ddot{Z}\frac{e}{c^2 R} sin\psi$$



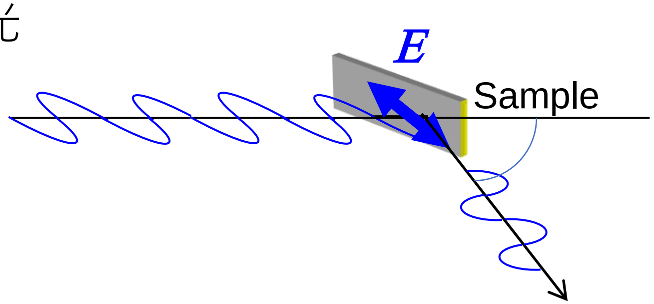
垂直偏光



$$2\theta = \frac{\pi}{2} - \psi$$

$$I(\boldsymbol{Q}) = A^2|F(\boldsymbol{Q})|^2$$

水平偏光



$$I(\boldsymbol{Q}) = A^2|F(\boldsymbol{Q})|^2 \cdot cos^2 2\theta$$

$$L(\boldsymbol{Q}, n_1\boldsymbol{a}, n_2\boldsymbol{b}, n_3\boldsymbol{c}) =$$

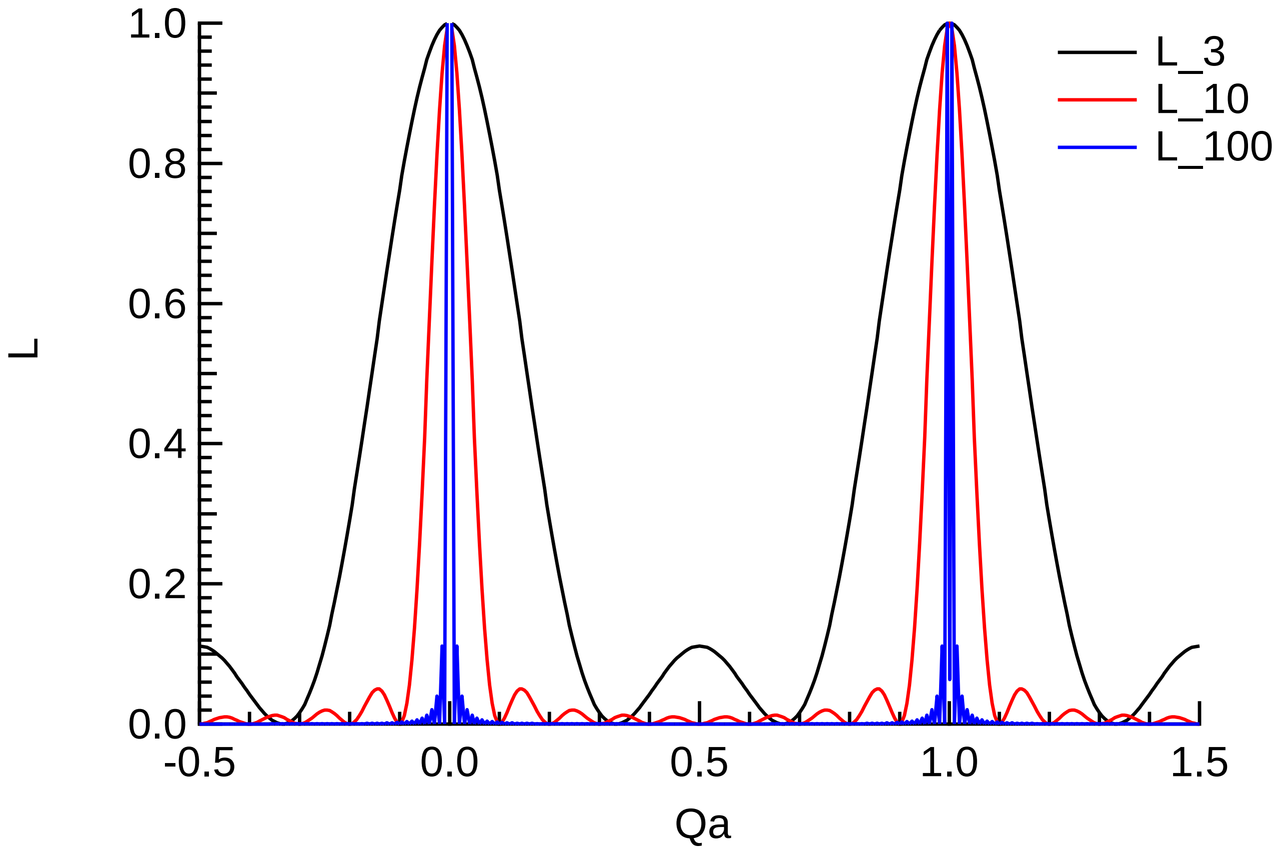
$$\sum_{n_1,n_2,n_3} e^{i\boldsymbol{Q}(n_1\boldsymbol{a}+n_2\boldsymbol{b}+n_3\boldsymbol{c})} = \sum_{n_1} e^{i\boldsymbol{Q}(n_1\boldsymbol{a})} \sum_{n_2} e^{i\boldsymbol{Q}(n_2\boldsymbol{b})} \sum_{n_3} e^{i\boldsymbol{Q}(n_3\boldsymbol{c})}$$

$$= \frac{e^{iN_1\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{a}} - 1}{e^{i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{a}} - 1} \cdot \frac{e^{iN_2\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{b}} - 1}{e^{i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{b}} - 1} \cdot \frac{e^{iN_3\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{c}} - 1}{e^{i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{c}} - 1}$$

$$\frac{e^{iN_1\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{a}} - 1}{e^{i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{a}} - 1} = \frac{\left(e^{i\frac{N_1}{2}\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{a}} - e^{-i\frac{N_1}{2}\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{a}}\right)e^{i\frac{N_1}{2}\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{a}}}{\left(e^{i\frac{1}{2}\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{a}} - e^{-i\frac{1}{2}\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{a}}\right)e^{i\frac{1}{2}\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{a}}} = \frac{\sin\left(\frac{N_1\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{a}}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{a}}{2}\right)} e^{i\frac{(N_1-1)}{2}\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{a}}$$

$$L(\boldsymbol{Q}, n_1\boldsymbol{a}, n_2\boldsymbol{b}, n_3\boldsymbol{c}) = \left(\frac{\sin\left(\frac{N_1\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{a}}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{a}}{2}\right)}\right)^{\mathbf{2}} \left(\frac{\sin\left(\frac{N_2\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{b}}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{b}}{2}\right)}\right)^{\mathbf{2}} \left(\frac{\sin\left(\frac{N_3\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{c}}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{c}}{2}\right)}\right)^{\mathbf{2}}$$ ラウエ関数

ラウエ関数



Nが大きくなるとピークが鋭くなる。

単結晶：N ~∞ (アボガドロ数)

薄膜：N 1 ~ 10

ピーク位置は$\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{a}, \boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{b}, \boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{c}$ 全てが2πの整数倍　　回折条件

逆格子ベクトル

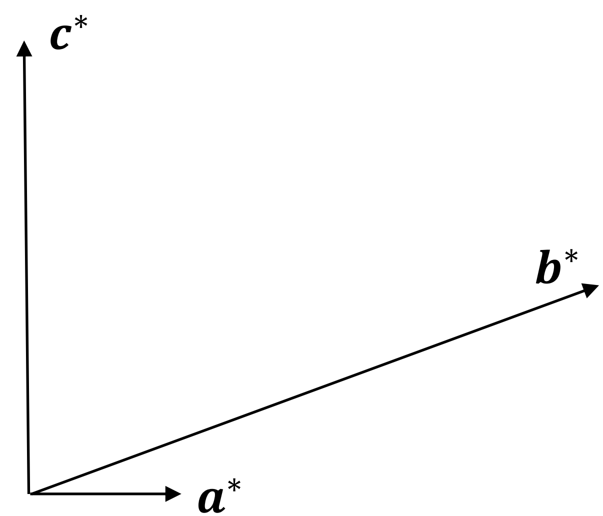
$\boldsymbol{Q}$が作る空間（逆格子空間）を逆格子ベクトルで定義する

$$\boldsymbol{a}^* = \frac{2\pi(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})}$$

$$\boldsymbol{b}^* = \frac{2\pi(\boldsymbol{c}\times\boldsymbol{a})}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})}$$

$$\boldsymbol{c}^* = \frac{2\pi(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})}{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})}$$

長さの逆数　単位 Å^{-1}



直方晶の場合、

$|\boldsymbol{a}^*| = 2\pi/a$, $|\boldsymbol{b}^*| = 2\pi/b$, $|\boldsymbol{c}^*| = 2\pi/c$

$\boldsymbol{a}^* \,//\, \boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}^* \,//\, \boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{c}^* \,//\, \boldsymbol{c}$　(右手系)

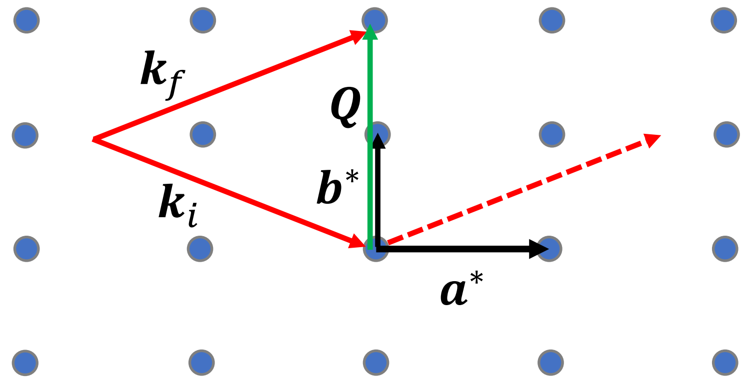
六方晶の逆格子？

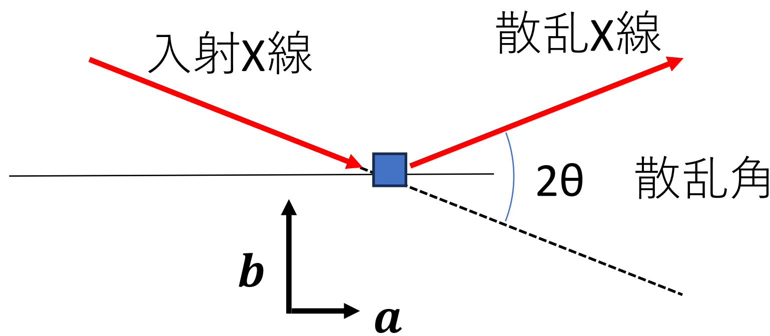
a = a(1 0 0), b = a(-√3/2 ½ 0), c = c(0 0 1), α = β= 90, γ=120

逆格子空間 $\boldsymbol{\tau} = h\boldsymbol{a}^* + k\boldsymbol{b}^* + l\boldsymbol{c}^*$

ラウエ関数が有限の値を持つのは、h, k, l が整数

$\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{\tau}$ 回折強度$\neq$ 0 のための条件





逆格子空間における回折ピーク位置は$\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{a}, \boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{b}, \boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{c}$全てが2πの整数倍
逆格子点、Bragg点

$$2k\sin\theta = |\boldsymbol{Q}| \quad |\boldsymbol{Q}| = \sqrt{h^2\boldsymbol{a}^{*2} + k^2\boldsymbol{b}^{*2} + l^2\boldsymbol{c}^{*2}} = 2\pi\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}$$

$2d\sin\theta = \lambda$ Braggの反射条件

原子変位

$$F(\boldsymbol{Q}) = \sum_{j}^{cell} f_i(\boldsymbol{Q}) exp\left(i\boldsymbol{Q}\boldsymbol{r}_j\right)$$

$$= \sum_{j}^{cell} f_i(\boldsymbol{Q}) exp\left(i\boldsymbol{Q}\left(\boldsymbol{R}_j + \boldsymbol{u}_j\right)\right) = \sum_{j}^{cell} f_i(\boldsymbol{Q}) exp\left(i\boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}_j\right) exp\left(i\boldsymbol{Q}\boldsymbol{u}_j\right)$$

空間時間平均

$$\langle F(\boldsymbol{Q})\rangle = \sum_{j}^{cell} f_i(\boldsymbol{Q}) exp\left(i\boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}_j\right)\left\langle exp\left(iQu_j\right)\right\rangle$$

$$\left\langle exp\left(i\boldsymbol{Q}\boldsymbol{u}_j\right)\right\rangle = \int exp\left(iQu_j\right)\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} exp\left(-\frac{{u_j}^2}{2\pi\sigma^2}\right) du = exp\left(-\frac{Q^2\left\langle {u_j}^2\right\rangle}{2}\right)$$

$$\langle F(\boldsymbol{Q})\rangle = \sum_{j}^{cell} f_i(\boldsymbol{Q}) exp\left(-\frac{Q^2\left\langle {u_j}^2\right\rangle}{2}\right) exp\left(i\boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}_j\right)$$

デバイ・ワラー因子

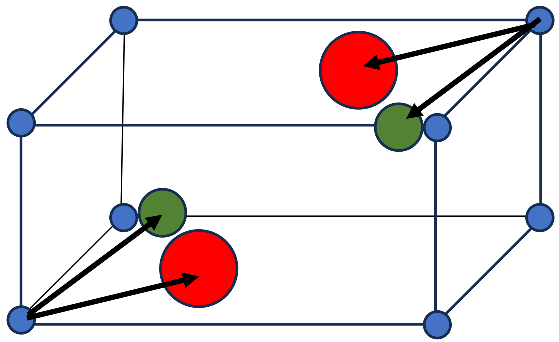
温度因子

$f_i(\boldsymbol{Q})$を高角で減衰させるように働く

$\left\langle {u_j}^2\right\rangle$は負の値は物理的にあり得ない

構造因子$F(\boldsymbol{Q})$の計算

例　原子単位胞（反転心有）

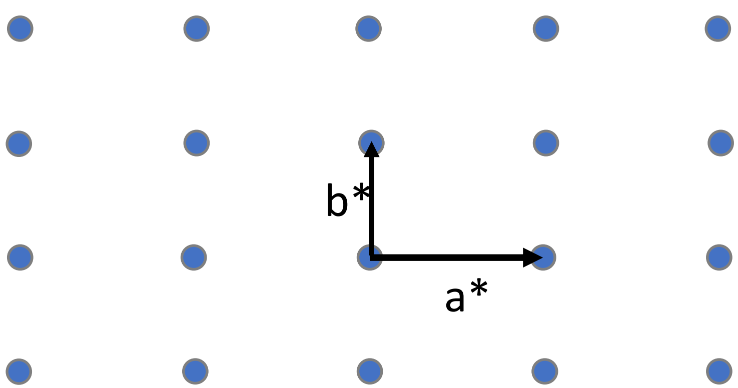


$$F(\boldsymbol{Q}) = \sum_{j}^{cell} f_i(\boldsymbol{Q}) e^{i\boldsymbol{Q}\boldsymbol{r}_j}$$

$$= f_1(hkl)e^{2\pi i(hx_1+ky_1+lz_1)} + f_1(hkl)e^{-2\pi i(hx_1+ky_1+lz_1)}$$
$$+f_2(hkl)e^{2\pi i(hx_2+ky_2+lz_2)} + f_2(hkl)e^{-2\pi i(hx_2+ky_2+lz_2)}$$

$$= 2f_1(hkl)\cos 2\pi(hx_1 + ky_1 + lz_1)$$
$$+ 2f_2(hkl)\cos 2\pi(hx_2 + ky_2 + lz_2)$$

消滅測無し



バイフットペア
の反射強度が等しい
I(hkl) = I(-h-k-l)

反転心があるときは必ず成立する。

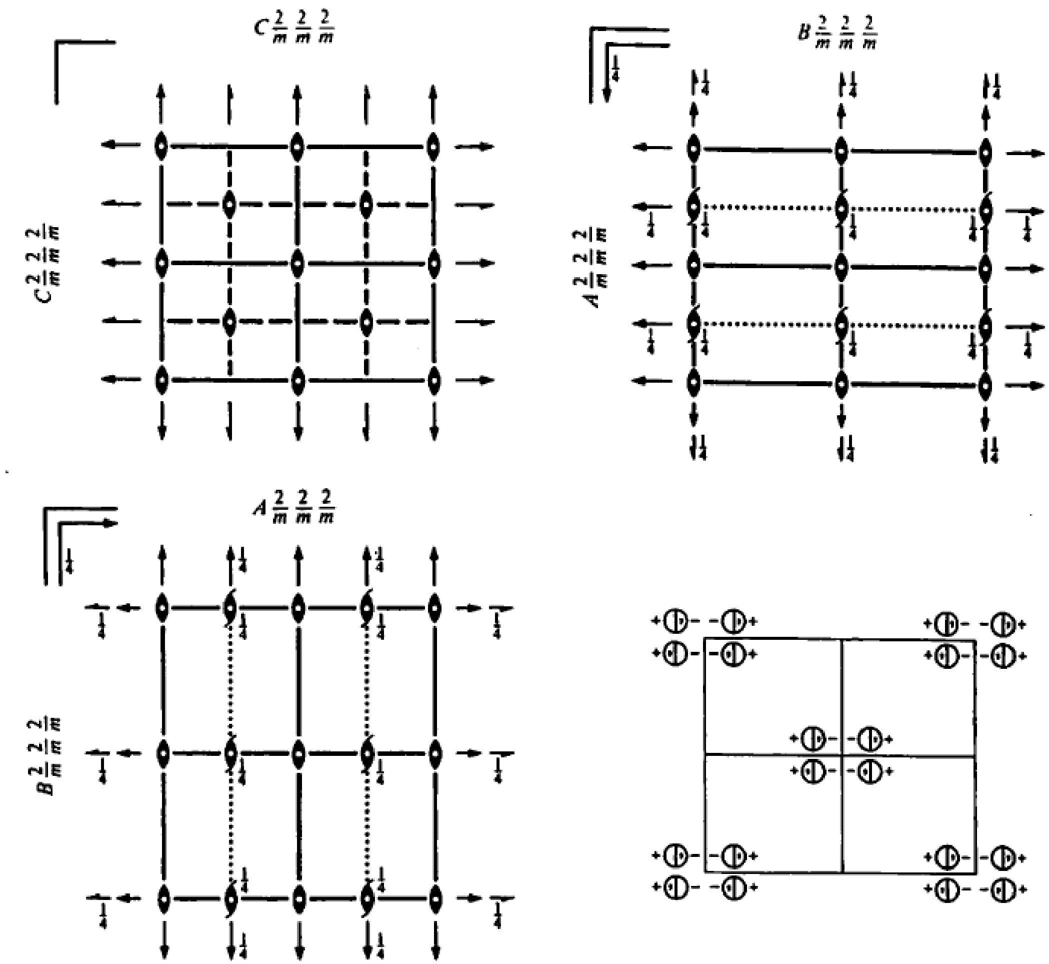
フリーデル則

反転心が無いとき

フリーデル則が破れる

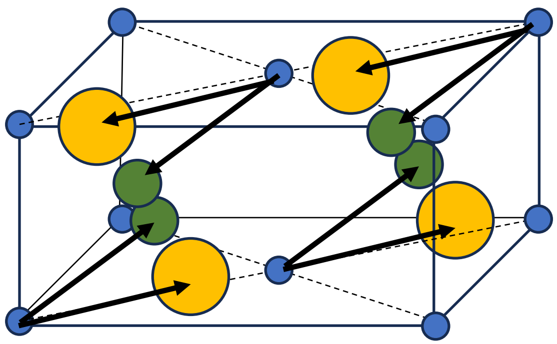
例　c底心の場合　Cmmm　（No. 65）

Cmmm	D_{2h}^{19}	*mmm*	Orthorhombic
No. 65	$C\ 2/m\ 2/m\ 2/m$		Patterson symmetry *Cmmm*



Origin at centre (*mmm*)

例　c底心の場合（反転心有）



$$= f_1(hkl)e^{2\pi i(hx_1+ky_1+lz_1)} + f_1(hkl)e^{-2\pi i(hx_1+ky_1+lz_1)}$$
$$+ f_1(hkl)e^{2\pi i(h(x_1+1/2)+k(y_1+1/2)+lz_1)}$$
$$+ f_1(hkl)e^{-2\pi i(h(x_1+1/2)+k(y_1+1/2)+lz_1)}$$
$$+f_2(hkl)e^{2\pi i(hx_2+ky_2+lz_2)} + f_2(hkl)e^{-2\pi i(hx_2+ky_2+lz_2)}$$
$$+ f_2(hkl)e^{2\pi i(h(x_2+1/2)+k(y_2+1/2)+lz_2)}$$
$$+ f_2(hkl)e^{-2\pi i(h(x_2+1/2)+k(y_2+1/2)+lz_2)}$$

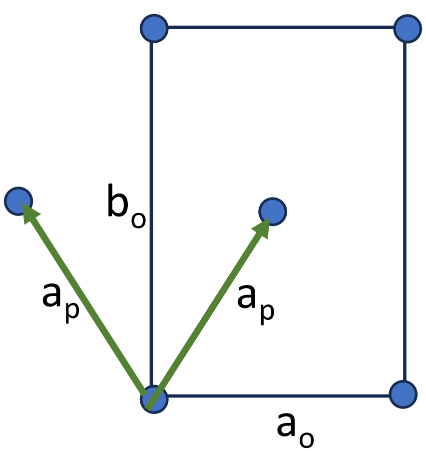
h: even, k: even　　h: odd, k: odd

$$= 4f_1(hkl)\cos 2\pi i(hx_1 + ky_1 + lz_1)$$
$$+ 4f_2(hkl)\cos 2\pi i(hx_2 + ky_2 + lz_2)$$

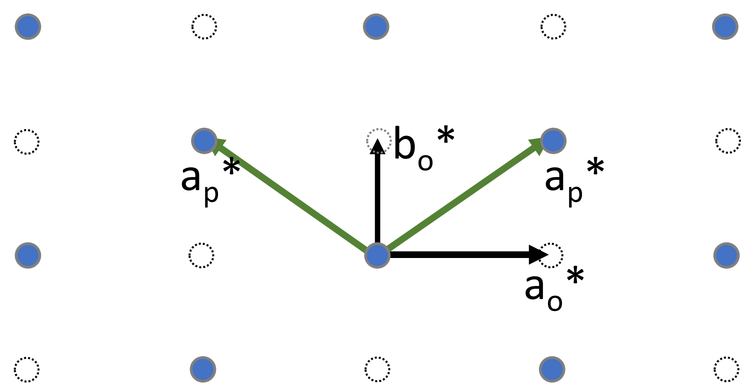
h: even, k:odd　　h: even, k: odd

$$= 0$$

単位胞(実空間)



逆空間

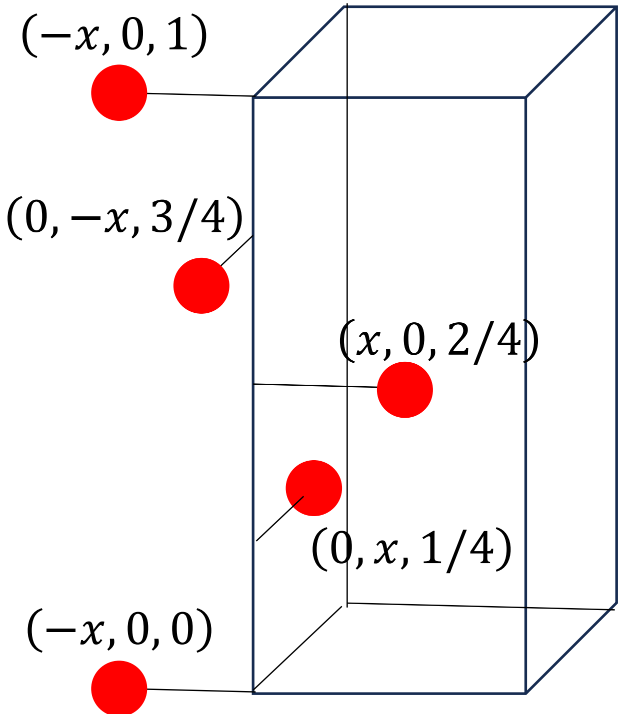


ゾーンセンター

複合格子の由来する消滅測は本質的
ブリュリアンゾーンが異なる

例　4_1螺旋の場合

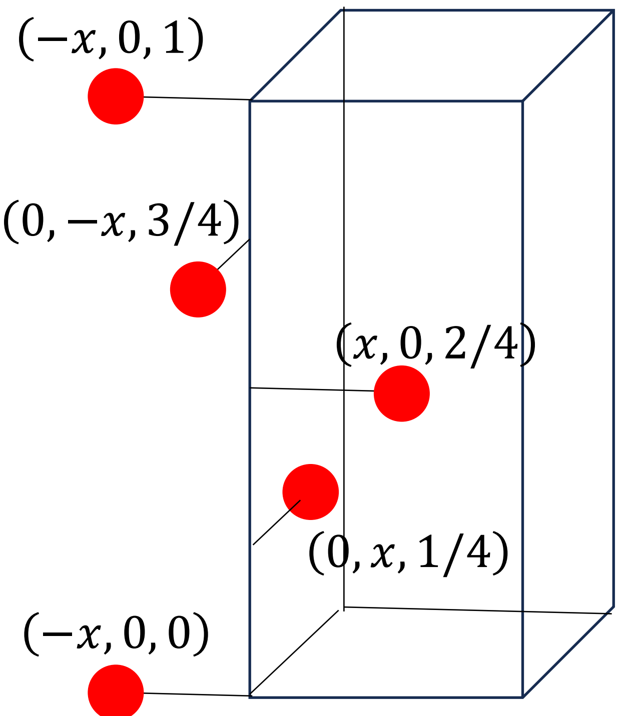
$$F(\boldsymbol{Q}) = \sum_{j}^{cell} f_i(\boldsymbol{Q}) e^{i\boldsymbol{Q}\boldsymbol{r}_j}$$



$a = b$

$\alpha = \beta = \gamma = 90$

例　4_1螺旋の場合



$$F(\boldsymbol{Q})=\sum_{j}^{cell} f_i(\boldsymbol{Q})e^{i\boldsymbol{Q}\boldsymbol{r}_j}$$
$$=f_1(hkl)e^{2\pi i(-hx)}+f_1(hkl)e^{2\pi i(kx+l/4)}$$
$$+f_1(hkl)e^{2\pi i(hx+l/2)}+f_1(hkl)e^{2\pi i(-kx+lz_2)}$$

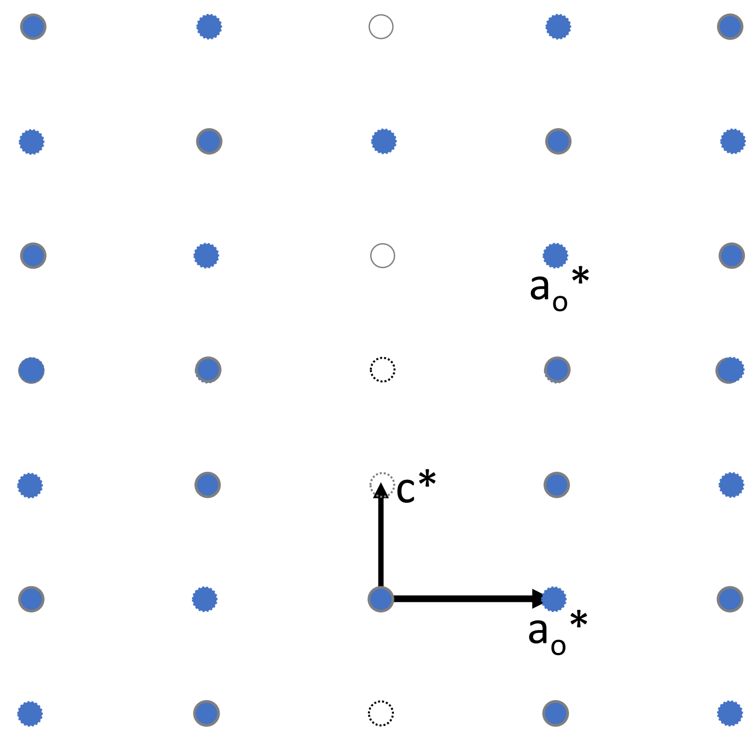
$(00l)$で$l=4n$

$$F(\boldsymbol{Q})=4f_1$$

$(00l)$で$l\neq 4n$

$$F(\boldsymbol{Q})=0$$

$a=b$
$\alpha=\beta=\gamma=90$

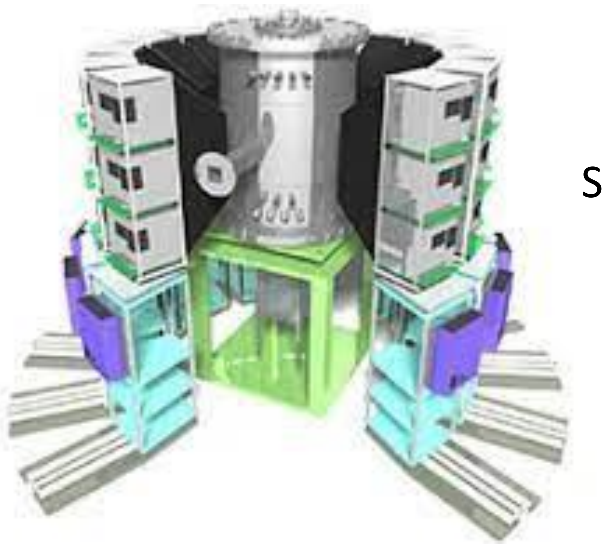


$(00l)$で$l\neq 4n$

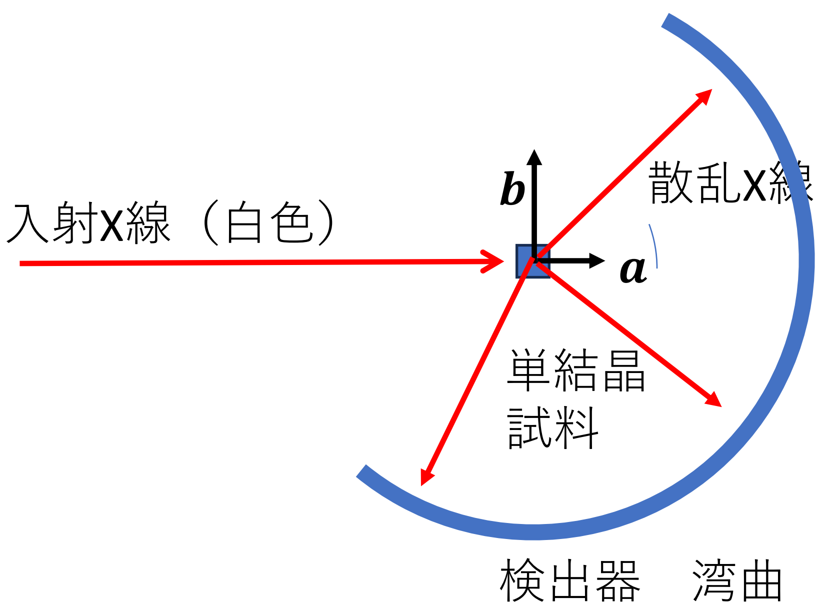
並進を含む対称の由来する消滅測
ブリュリアンゾーンはPと同じ

サイトの局所対称性を散乱因子に入れ込むと、消滅測が破れる。

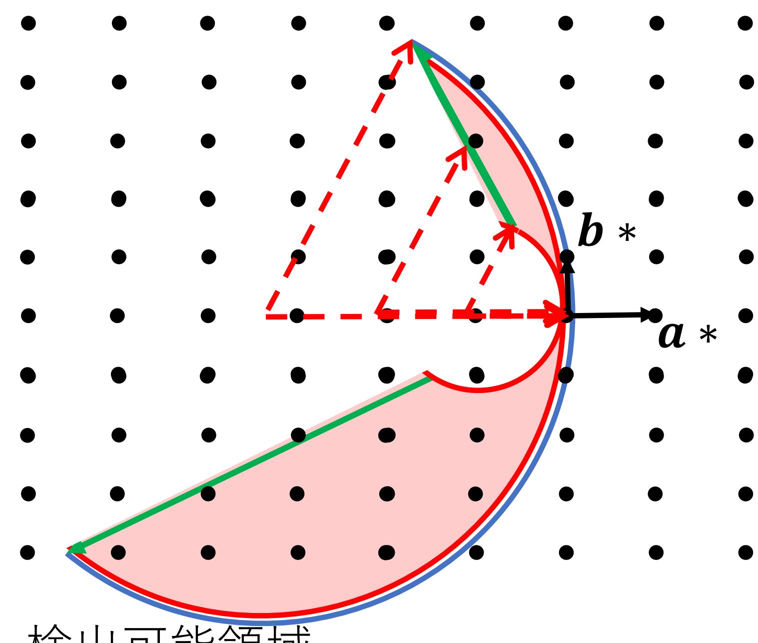
ラウエ法



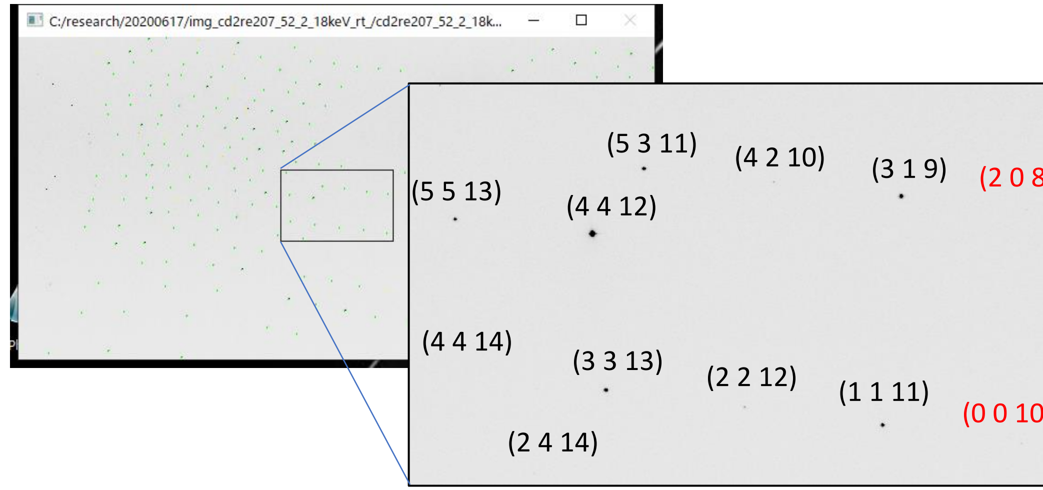
SENJU @MLF J-PARC

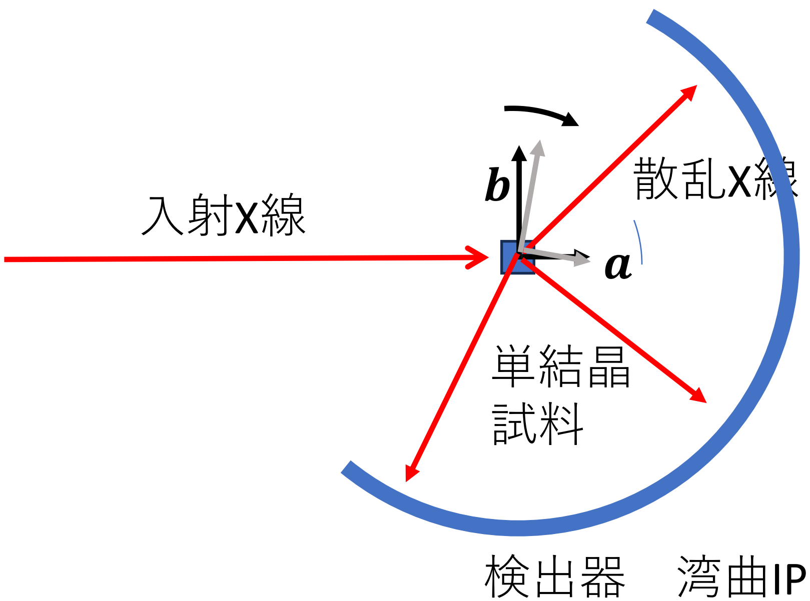


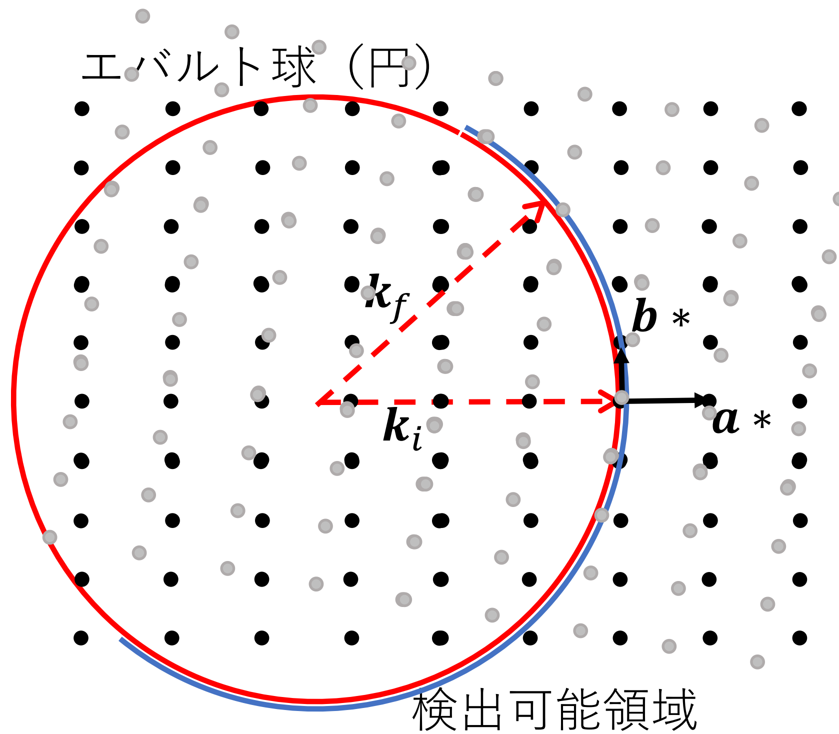
エバルト球（円）



振動写真法

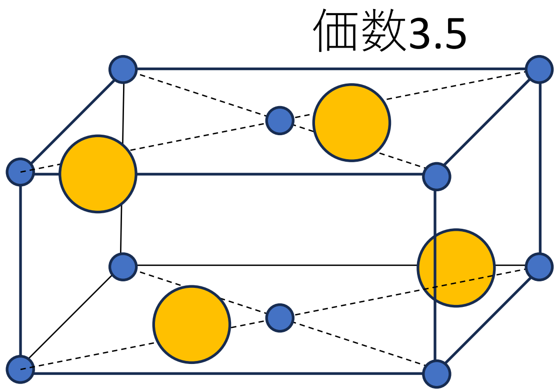

C:/research/20200617/img_cd2re207_52_2_18keV_rt_/cd2re207_52_2_18k...
(5 3 11)
(4 2 10)
(3 1 9)
(2 0 8)
(5 5 13)
(4 4 12)
(4 4 14)
(3 3 13)
(2 2 12)
(1 1 11)
(0 0 10)
(2 4 14)


入射X線
散乱X線
b
a
単結晶
試料
検出器　湾曲IP

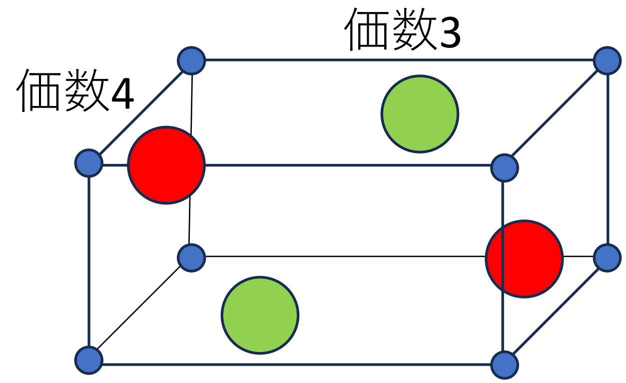

エバルト球（円）
k_f
k_i
$b*$
$a*$
検出可能領域

構造相転移による反射パターンの変化

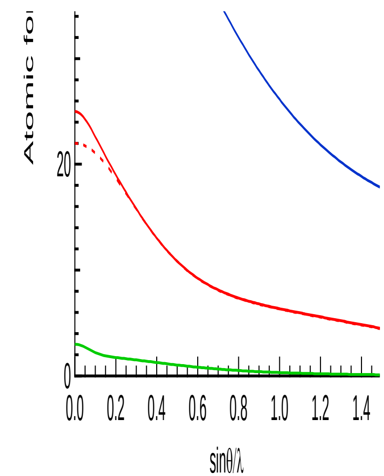
価数秩序による消滅測の破れ



C



P



$$\boldsymbol{F(Q)}$$
$$= f_1(hkl)e^{2\pi i(hx_1+ky_1+lz_1)} + f_1(hkl)e^{-2\pi i(hx_1+ky_1+lz_1)}$$
$$+ f'_1(hkl)e^{2\pi i(h(x_1+1/2)+k(y_1+1/2)+lz_1)}$$
$$+ f'_1(hkl)e^{-2\pi i(h(x_1+1/2)+k(y_1+1/2)+lz_1)}$$

h: even, k: even　　h: odd, k: odd

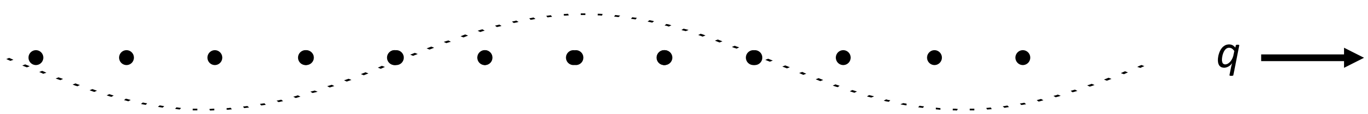
$$= 2(f_1(hkl) + f'_1(hkl))f_1 \cos 2\pi i(hx_1 + ky_1 + lz_1)$$

h: even, k:odd　　h: even, k: odd

$$= 2(f_1(hkl) - f'_1(hkl))f_1 \cos 2\pi i(hx_1 + ky_1 + lz_1)$$

構造相転移による反射パターンの変化

長周期格子変調



$\boldsymbol{u}_i sin(\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}_i)$

$$F(\mathbf{K}) = \sum_{\xi\eta\zeta} f_i exp[i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i] \qquad \boldsymbol{r}_i = \xi\boldsymbol{a} + \eta\boldsymbol{b} + \zeta\boldsymbol{c} + \langle\boldsymbol{r}_{0i}\rangle + \delta\boldsymbol{r}_i$$

$$F(\mathbf{K}) = \sum_{\xi\eta\zeta} exp[i\boldsymbol{Q}\cdot(\xi\boldsymbol{a} + \eta\boldsymbol{b} + \zeta\boldsymbol{c})] \sum_i f_i exp[i\boldsymbol{Q}\cdot(\langle\boldsymbol{r}_{\mathbf{0}i}\rangle + \delta\boldsymbol{r}_i)]$$

$$= \sum_{\xi\eta\zeta} exp[i\boldsymbol{Q}\cdot(\xi\boldsymbol{a} + \eta\boldsymbol{b} + \zeta\boldsymbol{c})] \sum_i f_i exp[i\boldsymbol{Q}\cdot\langle\boldsymbol{r}_{0i}\rangle] exp[i\boldsymbol{Q}\cdot\delta\boldsymbol{r}_i]$$

$$= \sum_{\xi\eta\zeta} exp[i\boldsymbol{Q}\cdot(\xi\boldsymbol{a} + \eta\boldsymbol{b} + \zeta\boldsymbol{c})] \sum_i f_i exp[i\boldsymbol{Q}\cdot\langle\boldsymbol{r}_{0i}\rangle](1 + i\boldsymbol{Q}\cdot\delta\boldsymbol{r}_i)$$

$$\delta\boldsymbol{r}_i = \boldsymbol{u}_i sin(\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}_i) = -i\frac{\boldsymbol{u}_i}{2}\begin{bmatrix} exp\big(i\boldsymbol{q}(\xi\boldsymbol{a} + \eta\boldsymbol{b} + \zeta\boldsymbol{c} + \langle\boldsymbol{r}_{0i}\rangle)\big) \\ -exp\big(-i\boldsymbol{q}(\xi\boldsymbol{a} + \eta\boldsymbol{b} + \zeta\boldsymbol{c} + \langle\boldsymbol{r}_{0i}\rangle)\big) \end{bmatrix}$$

$$= \sum_{\xi\eta\zeta} exp[i\boldsymbol{Q}\cdot(\xi a + \eta b + \zeta c)] \sum_i f_i exp[i\boldsymbol{Q}\cdot\langle\boldsymbol{r}_{0i}\rangle]\left(1 + \boldsymbol{Q}\cdot\frac{\boldsymbol{u}_i}{2}\begin{bmatrix} exp\big(i\boldsymbol{q}(\xi\boldsymbol{a} + \eta\boldsymbol{b} + \zeta\boldsymbol{c} + \langle\boldsymbol{r}_{0i}\rangle)\big) \\ -exp\big(-i\boldsymbol{q}(\xi\boldsymbol{a} + \eta\boldsymbol{b} + \zeta\boldsymbol{c} + \langle\boldsymbol{r}_{0i}\rangle)\big) \end{bmatrix}\right)$$

$$= \sum_{\xi\eta\zeta} exp[i\boldsymbol{Q}\cdot(\xi\boldsymbol{a}+\eta\boldsymbol{b}+\zeta\boldsymbol{c})] \sum_i f_i exp[i\boldsymbol{Q}\cdot\langle\boldsymbol{r}_{0i}\rangle]\left(1+\boldsymbol{Q}\cdot\frac{\boldsymbol{u}_i}{2}\begin{bmatrix} exp\left(i\boldsymbol{q}(\xi\boldsymbol{a}+\eta\boldsymbol{b}+\zeta\boldsymbol{c}+\langle\boldsymbol{r}_{0i}\rangle)\right) \\ -exp\left(-i\boldsymbol{q}(\xi\boldsymbol{a}+\eta\boldsymbol{b}+\zeta\boldsymbol{c}+\langle\boldsymbol{r}_{0i}\rangle)\right) \end{bmatrix}\right)$$

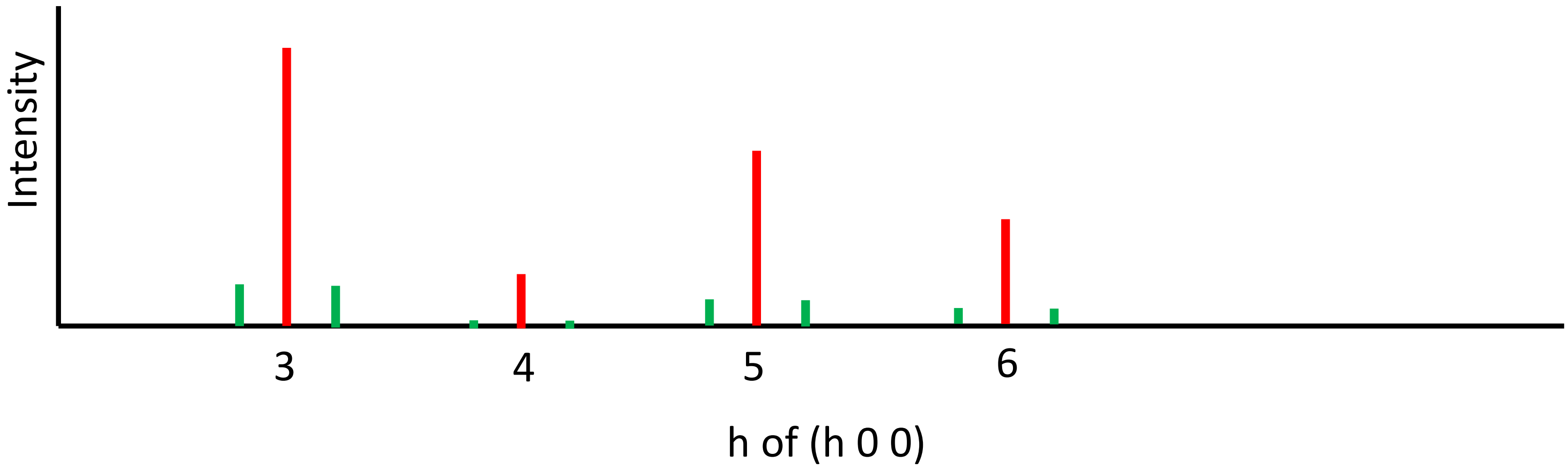
$$= \sum_{\xi\eta\zeta} exp[i\boldsymbol{Q}\cdot(\xi\boldsymbol{a}+\eta\boldsymbol{b}+\zeta\boldsymbol{c})] \sum_i f_i exp[i\boldsymbol{Q}\cdot\langle\boldsymbol{r}_{oi}\rangle]$$

$$+ \sum_{\xi\eta\zeta} exp[i(\boldsymbol{Q}+\boldsymbol{q})\cdot(\xi\boldsymbol{a}+\eta\boldsymbol{b}+\zeta\boldsymbol{c})] \sum_i f_i exp[i(\boldsymbol{Q}+\boldsymbol{q})\cdot\langle\boldsymbol{r}_{0i}\rangle]\,\boldsymbol{Q}\cdot\frac{\boldsymbol{u}_i}{2}$$

$$- \sum_{\xi\eta\zeta} exp[i(\boldsymbol{Q}-\boldsymbol{q})\cdot(\xi\boldsymbol{a}+\eta\boldsymbol{b}+\zeta\boldsymbol{c})] \sum_i f_i exp[i(\boldsymbol{Q}-\boldsymbol{q})\cdot\langle\boldsymbol{r}_{0i}\rangle]\,\boldsymbol{Q}\cdot\frac{\boldsymbol{u}_i}{2}$$

	回折条件	反射強度
主反射	$\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{\tau}$	$\lvert F(\boldsymbol{\tau})\rvert^2$
衛星反射	$\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{q}$	$\lvert F(\boldsymbol{\tau})\rvert^2\left\lvert\boldsymbol{Q}\cdot\frac{\boldsymbol{u}_i}{2}\right\rvert^2$
	$\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{\tau}+\boldsymbol{q}$	$\lvert F(\boldsymbol{\tau})\rvert^2\left\lvert\boldsymbol{Q}\cdot\frac{\boldsymbol{u}_i}{2}\right\rvert^2$

$$\boldsymbol{\tau}=h\boldsymbol{a}^*+k\boldsymbol{b}^*+l\boldsymbol{c}^*$$



格子変調の特徴

- 基本反射の位置+qと-qに衛星反射が観測される。
- 反射強度は基本反射強度、$\boldsymbol{Q} \cdot \boldsymbol{u}$の2乗に比例する。
- 強い主反射の衛星反射は強い。
- 変位方向を調べることが可能。

  例、(10 0 0)の衛星反射強、(0 0 10)の衛星反射無　すなわちu ~ //a

- 縦波と横波の区別が可能。例、$\boldsymbol{q}$ = (1/6 0 0)、u ~ //aは縦波
- 電荷秩序との区別が可能。

課題（8/1）

- 六方晶の逆格子ベクトルを計算してください。

  a = a(1 0 0), b = a(-√3/2 ½ 0), c = c(0 0 1), α = β= 90, γ=120

- 面心直方格子（例、F222 No.22）の消滅測を導出してください。

- 直方晶におけるa映進（空間群Pmma, No.51）の消滅測を導出し、該当する逆格子点がブリュリアンゾーンのセンターであるか否か、理由と共に回答してください。

Pmma D_{2h}^{5} *mmm* Orthorhombic

No. 51 $P\ 2_1/m\ 2/m\ 2/a$ Patterson symmetry *Pmmm*