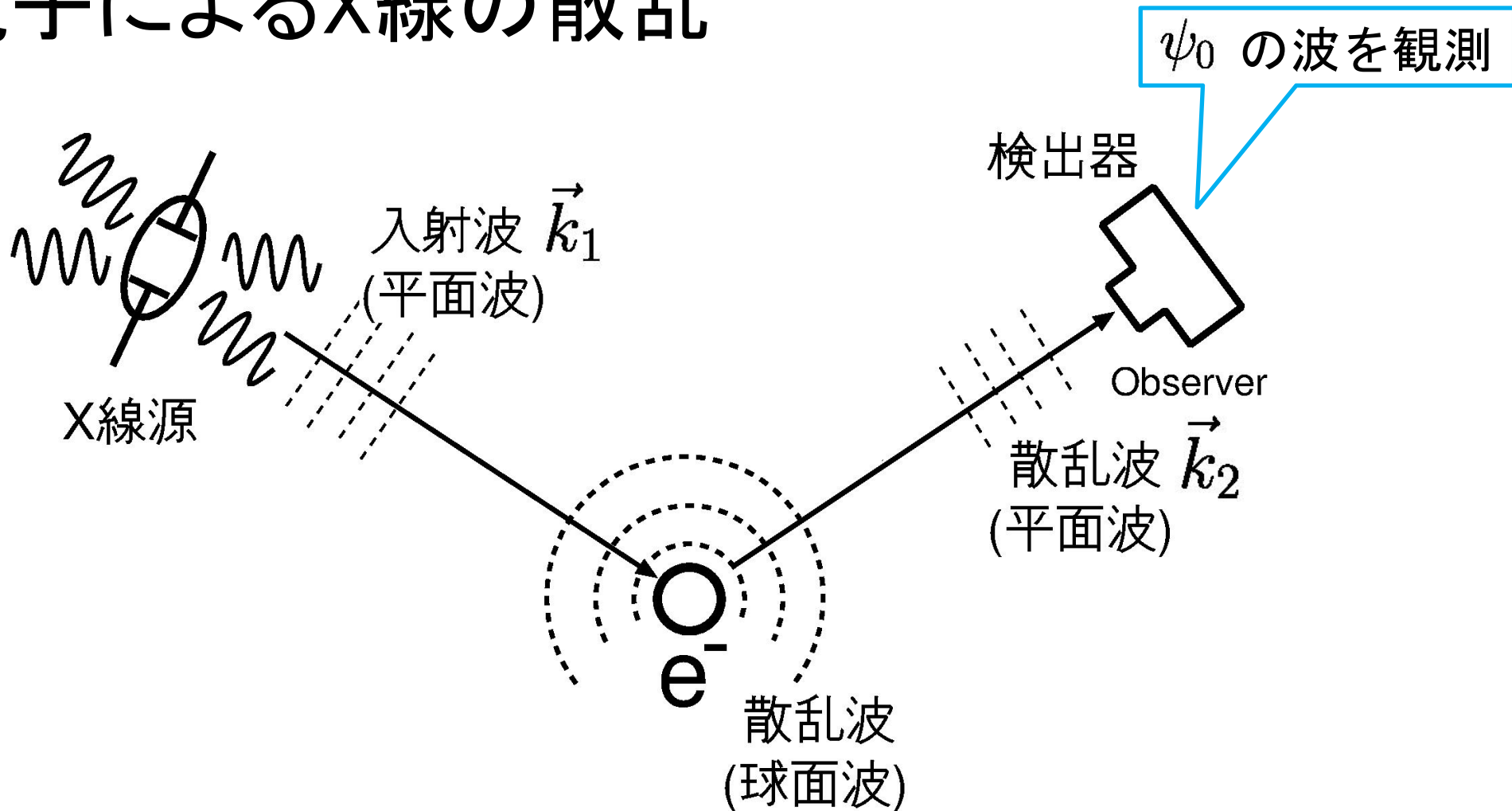


電子によるX線の散乱



入射X線は平面波とみなして良い。
散乱されたX線は、散乱した電子のすぐ近くでは球面波であるが、
距離が大きくなると、平面波とみなせる。



検出器に入る散乱X線も平面波と考えて○。

全て平面波

トムソン散乱とコンプトン散乱

pdf テキストの 7.4.2 参照

コンプトン散乱

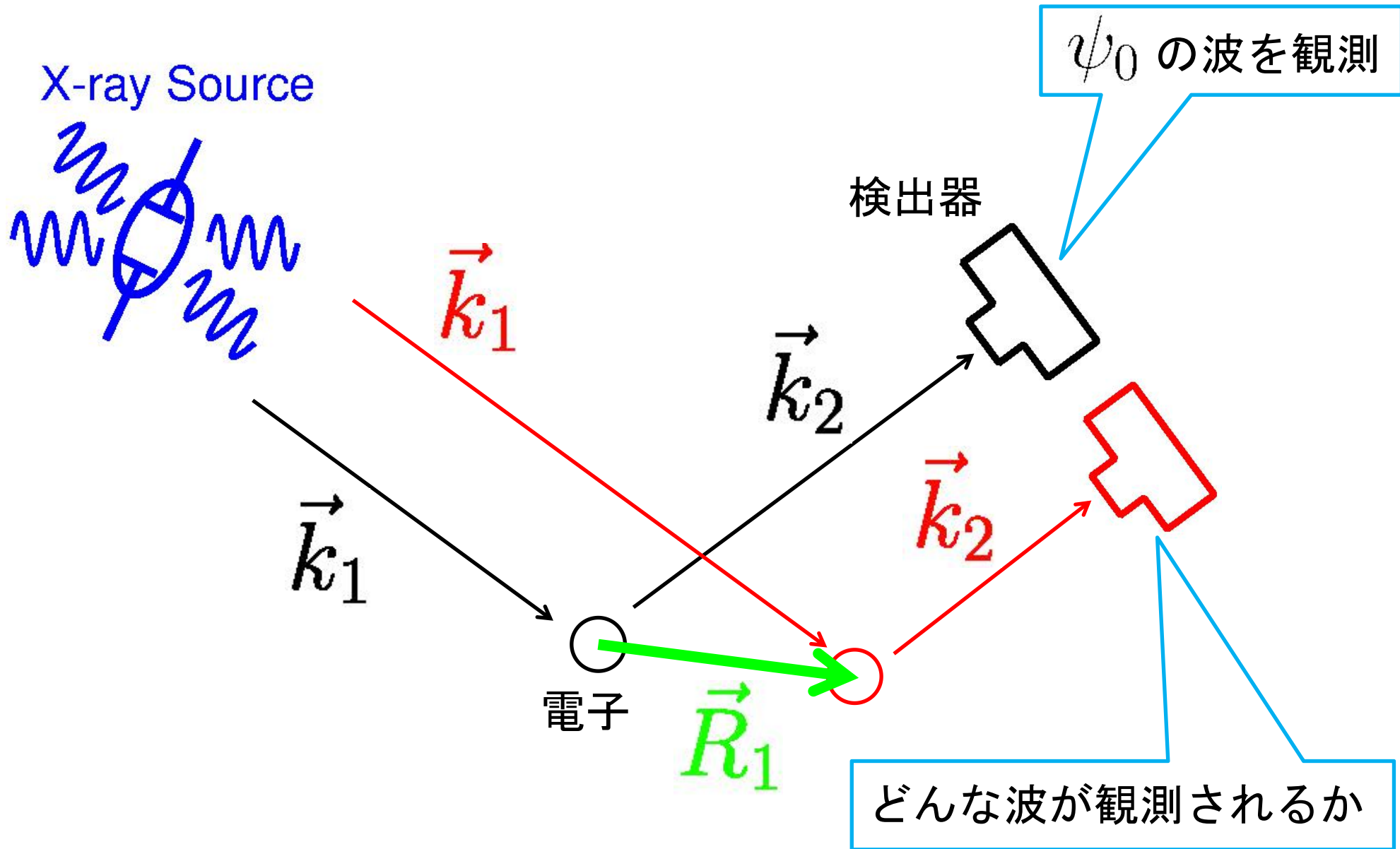
例えば自由電子にX線が当たった場合等では、電子が弾きとばされて、運動量と運動エネルギーを得る。電子とX線の運動量と運動エネルギーの和は保存されるので、**散乱X線の向きは変化し、波長は長くなる。**

トムソン散乱(X線回折ではこれが優勢)

例えば軌道に居る電子にX線が当たり、その電子が同じ軌道に留まる場合では、電子のエネルギーは変化しない。この場合も電子とX線の運動量と運動エネルギーの和は保存されるので、**散乱X線の向きは変化するが、波長は不変である。**

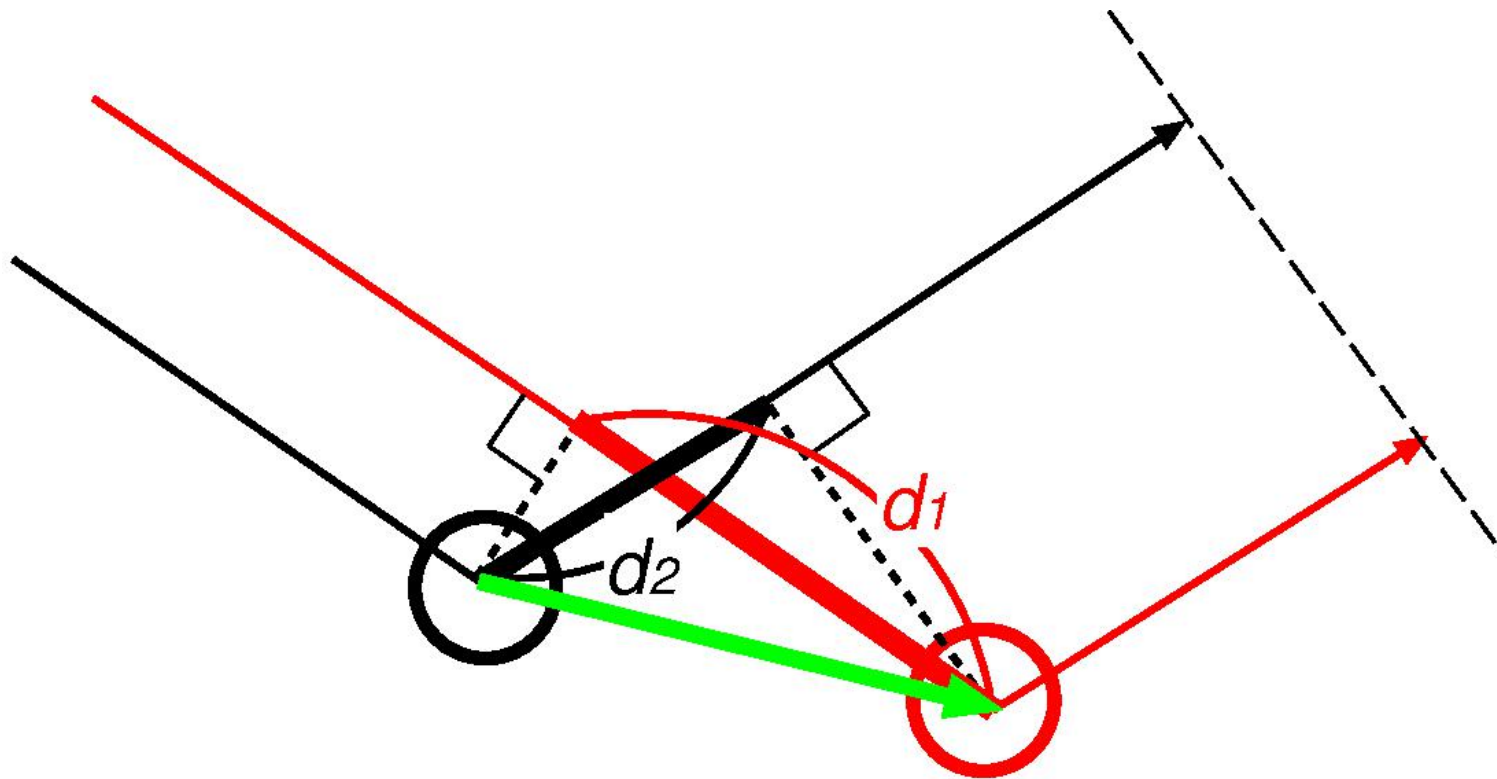
この場合、運動量の保存は、散乱されたX線と結晶全体の間でのやりとりによるものなので、見かけ上はX線の運動量だけが変化したように見える。

1個の電子からの散乱



散乱源を移動したときの行路差の変化

散乱源をずらす効果

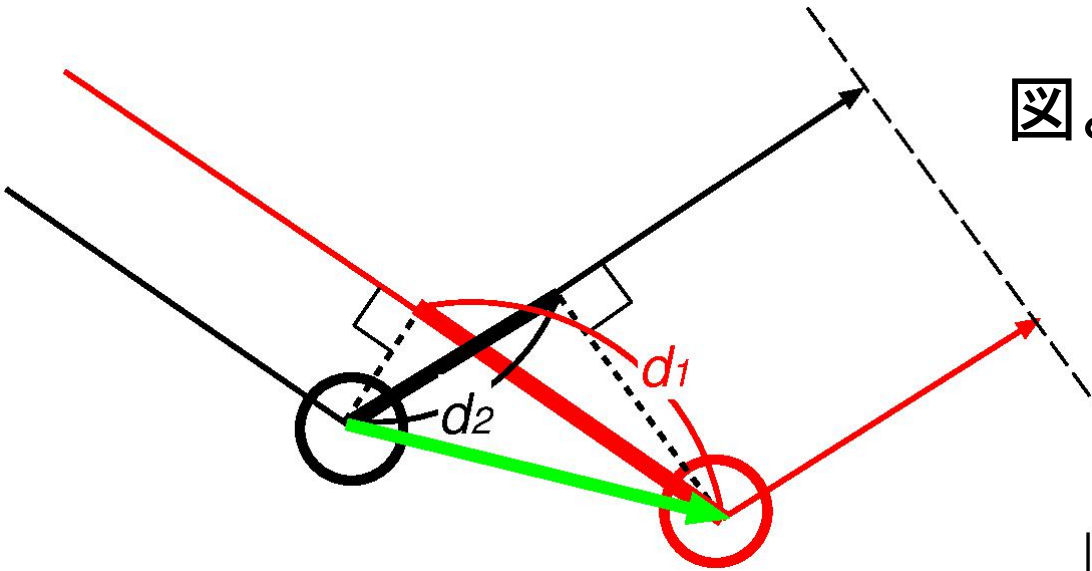


移動した後の行路は、もとの行路よりも $d_1 - d_2$ だけ長い

↳
$$\Delta t = \frac{d_1 - d_2}{c}$$
 だけ、余計に時間がかかる

← 光速

散乱源を移動したときの時間の遅れ



図より、

$$d_1 = \frac{\vec{k}_1}{|\vec{k}_1|} \cdot \vec{R}_1 \quad d_2 = \frac{\vec{k}_2}{|\vec{k}_2|} \cdot \vec{R}_1$$

トムソン散乱では、

$$|\vec{k}_1| = |\vec{k}_2| = \frac{2\pi}{\lambda} \text{ であるから、}$$

$$\Delta t = \frac{d_1 - d_2}{c} = \frac{(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{R}_1}{(2\pi/\lambda)c} = \frac{(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{R}_1}{\omega}$$

「散乱ベクトル」を $\vec{K} \equiv \vec{k}_2 - \vec{k}_1$ で定義すると

$$\Delta t = \frac{-\vec{K} \cdot \vec{R}_1}{\omega}$$

散乱源を移動したときの波の変化

簡単のため、散乱源が移動する前の観測波が

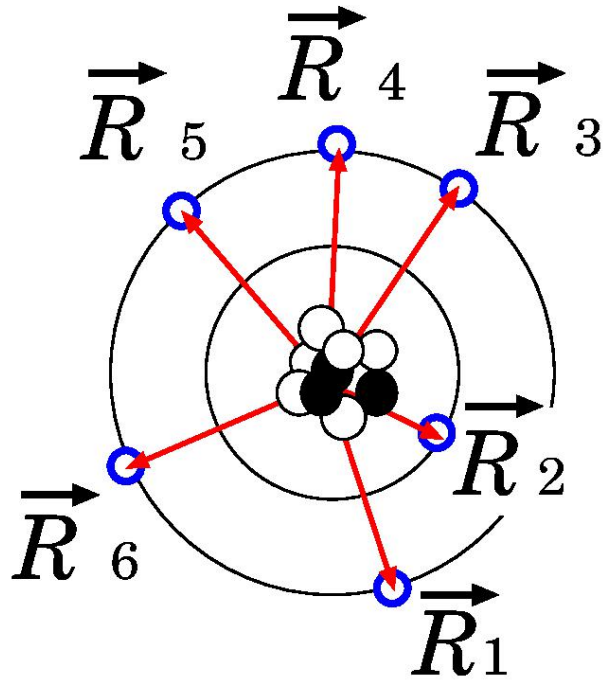
$$\psi_0 = e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \quad \text{であったとすると、}$$

$$t \rightarrow t - \Delta t \quad \text{および} \quad \Delta t = \frac{-\vec{K} \cdot \vec{R}_1}{\omega} \quad \text{を代入、}$$

これにより、散乱源が \vec{R}_1 だけ移動した時の波は、
移動前の観測波を用いて次のように表される。

$$\psi = \psi_0 \cdot e^{-i\vec{K} \cdot \vec{R}_1}$$

原子1個からの散乱波を合計する



$$\psi_0 \sum_{j=1}^n e^{-i\vec{K} \cdot \vec{R}_j}$$

原子1個からの散乱波の合計において

ψ_0 の係数(総和記号の部分)が重要

$\sum_{j=1}^n e^{-i\vec{K} \cdot \vec{R}_j}$ 原子散乱因子; f で表す

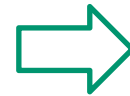
散乱ベクトル \vec{K} の関数である

原子1個からの散乱波を合計する

量子力学の基本的な大前提

原子の位置は「点」で与えられるものではなく
波動関数によって確率的に記述される。

$$f = \sum_{j=1}^n e^{-i\vec{K} \cdot \vec{R}_j}$$

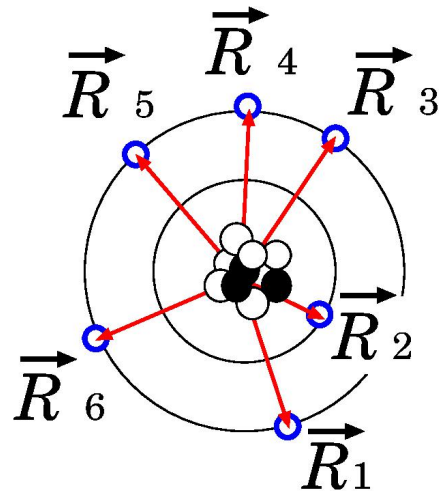


原子散乱因子 f

散乱ベクトル \vec{K} の関数であるが、

$$|\vec{K}| = \frac{\sin \theta}{\lambda} \text{ の関数として扱う方が便利。}$$

(つまり入射角 (=反射角) θ の関数となる)



ひとつの原子の中では電子同士による干渉はないのか？ → 答：これは考えなくてよい。

高速で動いているため、平均的な位置しか判らない。すなわち電子雲としてとらえることができるのみである。

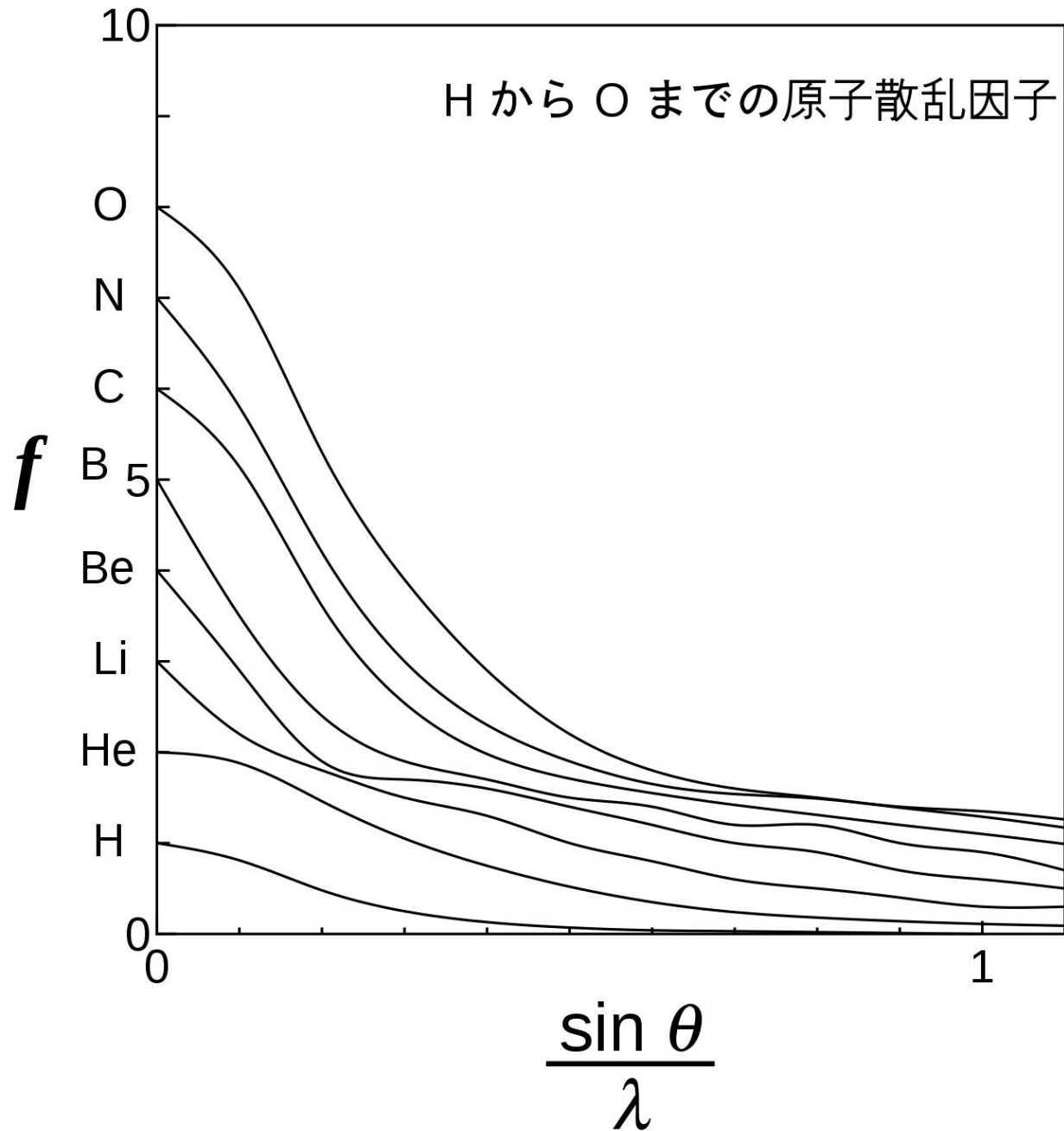
月の満ち欠けのように、 θ が大きくなると散乱強度(明るさ)は小さくなる

スライド12 の課題

散乱ベクトルがゼロ(つまり入射波と同じ方向に散乱される)の場合、原子散乱因子の振幅は原子番号に比例することを示せ。

pdf テキストの 7.4.5 参照

各種原子・イオンの原子散乱因子



カリティ著、松村源太郎訳
「X線回折要論」アグネ
付録12の数値を用いて計算

単位格子からの散乱波の合計 F

結晶構造因子(または単に「構造因子」)

「散乱振幅」とも言ふ

ひとつの原子の中の電子とは異なり、原子核の回りにある電子の位置は(大体ではあるが)決まっているので異なる原子からの散乱波は干渉する。

位置関係から生じる位相因子は、電子の位置のシフトで生じたものと全く同じ考え方で導出される。すなわち、

散乱源が \vec{R}_1 だけずれた時の波の式

$$\psi = \psi_0 \cdot e^{-i\vec{K} \cdot \vec{R}_1}$$

の考え方をそのまま使うことができる。

単位格子からの散乱波の合計 F_{cell}

単位格子中にある j 番目の原子の原子散乱因子を f_j 、
格子点から見た原子の位置ベクトルを r_j とすると、散乱波の合計は、

$$F_{\text{cell}} = \sum_{j=1}^N f_j e^{-i\vec{K} \cdot \vec{r}_j}$$

j 番目の原子の格子座標を (u_j, v_j, w_j) とすると
原子の実際の座標は $\vec{r}_j = u_j \vec{a} + v_j \vec{b} + w_j \vec{c}$

$\psi = e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})}$ の流儀で波を定義した場合は、
$$F_{\text{cell}} = \sum_{j=1}^N f_j e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_j}$$