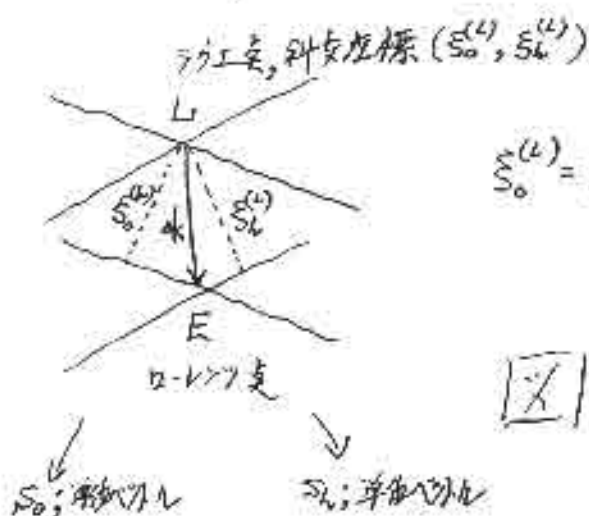


加藤型下丁方程式を別の形の式を導く. NO

加藤型下丁方程式

$$\frac{\partial D_h}{\partial s_0} = -i\pi K C \chi_h \exp(-2\pi i k \cdot v) D_h \quad (1)$$

$$\frac{\partial D_h}{\partial s_h} = -i\pi K C \chi_h \exp(+2\pi i k \cdot v) D_h \quad (2)$$



$$s_0^{(L)} = s_h^{(L)} = -\frac{1}{2} \chi_0 K \quad (3)$$

ローレンツ点を起点とする波数ベクトル k_0, k_h の波の変調 D_0, D_h に対して,
 ラウエ点 " " K_0, K_h " " D_0', D_h' を考えれば,

$$D_0' \exp(-2\pi i K_0 \cdot \Pi) = D_0 \exp(-2\pi i k_0 \cdot \Pi) \quad (4)$$

$$= D_0 \exp\{-2\pi i (K_0 - \Delta k) \cdot \Pi\} \quad (5)$$

$$= D_0 \exp(+2\pi i \Delta k \cdot \Pi) \exp(-2\pi i K_0 \cdot \Pi) \quad (6)$$

同様にして,

$$D_h' \exp(-2\pi i K_h t) = D_h \exp(+2\pi i \Delta k \cdot \Pi) \exp(-2\pi i K_h \cdot \Pi). \quad (7)$$

(6)式を(7)式に代入すれば,

$$D_0 = D_0' \exp(-2\pi i \Delta k \cdot \Pi), \quad (8)$$

$$D_h = D_h' \exp(-2\pi i \Delta k \cdot \Pi). \quad (9)$$



図 2.

図 2 の参考より,

$$\Delta k \cdot \Pi = S_0 \Delta k \cdot \delta_0 + S_h \Delta k \cdot \delta_h \quad (10)$$

$$= S_0 \xi_0^{(L)} + S_h \xi_h^{(L)} \quad (11)$$

(3)式より,

$$= -\frac{1}{2} \chi_0 K S_0 - \frac{1}{2} \chi_0 K S_h. \quad (12)$$

従って, (8), (9)式は次のように表わされる。

$$D_0 = D_0' \exp(+\pi i \chi_0 K S_0 + \pi i \chi_0 K S_h), \quad (13)$$

$$D_h = D_h' \exp(+\pi i \chi_0 K S_0 + \pi i \chi_0 K S_h). \quad (14)$$

(13)式を(1)式の左辺に代入して,

$$\frac{\partial D_0}{\partial S_0} = \frac{\partial}{\partial S_0} \left\{ D_0' \exp(+\pi i \chi_0 K S_0 + \pi i \chi_0 K S_h) \right\} \quad (15)$$

$$= \frac{\partial}{\partial S_0} D_0' \exp(+\pi i \chi_0 K S_0 + \pi i \chi_0 K S_h)$$

$$+ \pi i \chi_0 K D_0' \exp(+\pi i \chi_0 K S_0 + \pi i \chi_0 K S_h). \quad (16)$$

同様に(14)式を(2)式の左辺に代入して,

$$\frac{\partial D_h}{\partial S_h} = \frac{\partial}{\partial S_h} \left\{ D_h' \exp(+\pi i \chi_0 K S_0 + \pi i \chi_0 K S_h) \right\} \quad (17)$$

$$= \frac{\partial}{\partial S_h} D_h' \exp(+\pi i \chi_0 K S_0 + \pi i \chi_0 K S_h)$$

$$+ \pi i \chi_0 K D_h' \exp(+\pi i \chi_0 K S_0 + \pi i \chi_0 K S_h). \quad (18)$$

(1)式の左辺に(16)式,

(2)式の左辺に(18)式を代入して,

$$\frac{\partial}{\partial S_0} D_0' \exp\{+\pi i \chi_0 K (S_0 + S_h)\} + \pi i \chi_0 K D_0' \exp\{+\pi i \chi_0 K (S_0 + S_h)\}$$

$$= -i \pi K C \chi_h \exp(-2\pi i h \cdot \chi_0) D_h' \exp\{+\pi i \chi_0 K (S_0 + S_h)\}.$$

(19)

(2)式の左辺に(16)式, (17)式の右辺に, (17)式を代入して,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} D'_\mu \exp\{+\pi i \chi_0 K (S_0 + S_\mu)\} + \pi i \chi_0 K D'_\mu \exp\{+\pi i \chi_0 K (S_0 + S_\mu)\} \\ = -i\pi K C \chi_{+\mu} \exp(+2\pi i k \cdot v_\mu) D'_0 \exp\{+\pi i \chi_0 K (S_0 + S_\mu)\} \end{aligned} \quad (20)$$

(17)式, (20)式の夫々左辺第2項を右辺に移し 両辺を $\exp\{+\pi i \chi_0 K (S_0 + S_\mu)\}$ で割ると, 次式を得る.

$$\frac{\partial}{\partial S_0} D'_0 = -i\pi K C \chi_{-\mu} \exp(-2\pi i k \cdot v_\mu) D'_\mu - i\pi K \chi_0 D'_0, \quad (21)$$

$$\frac{\partial}{\partial S_\mu} D'_\mu = -i\pi K C \chi_{+\mu} \exp(+2\pi i k \cdot v_\mu) D'_0 - i\pi K \chi_0 D'_\mu. \quad (22)$$

下二方程式, 真空の波動方程式の変換形

上式は俺が8810月に導いた.

Clear File 'X線力学的回折理論と高次元の波動'

p.13 の式と一致する.

真空波数変調型下丁方程式の数値解法

NO

左頁 (21) 式, (22) 式を次のように表わす

$$\frac{\partial}{\partial x_0} D_0 = \alpha_1 D_h + \gamma_1 D_0, \quad (23)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_h} D_h = \alpha_2 D_0 + \gamma_2 D_h. \quad (24)$$

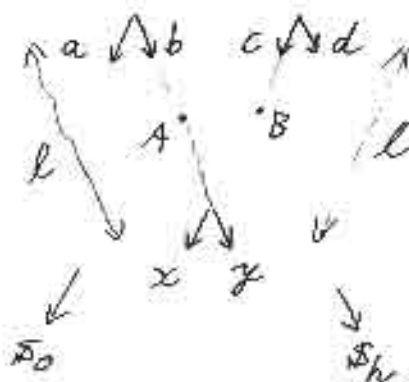


図3

(23) 式の差分形が B 点で成り立つとして

$$\frac{x-c}{l} = \alpha_1 \left(\frac{y+d}{2} \right) + \gamma_1 \left(\frac{x+c}{2} \right). \quad (25)$$

(24) 式の差分形が A 点で成り立つとして

$$\frac{y-b}{l} = \alpha_2 \left(\frac{x+a}{2} \right) + \gamma_2 \left(\frac{y+b}{2} \right). \quad (26)$$

(25) 式に $2l$ をかけ

$$2x - 2c = l\alpha_1 y + l\alpha_1 d + l\gamma_1 x + l\gamma_1 c, \quad (27)$$

$$\therefore (2 - l\gamma_1)x - l\alpha_1 y = (2 + l\gamma_1)c + l\alpha_1 d. \quad (28)$$

95.10.12 Thu

#6/8

NO

(26) 式に $2l$ をかけると,

$$2y - 2b = l\alpha_2 x + l\alpha_2 a + l\gamma_2 y + l\gamma_2 b, \quad (29)$$

$$\therefore -l\alpha_2 x + (2 - l\gamma_2)y = l\alpha_2 a + (2 + l\gamma_2)b. \quad (30)$$

(28) 式に $(2 - l\gamma_2)$ をかけると,

$$\begin{aligned} (2 - l\gamma_1)(2 - l\gamma_2)x - l\alpha_1(2 - l\gamma_2)y \\ = (2 + l\gamma_1)(2 - l\gamma_2)c + l\alpha_1(2 - l\gamma_2)d. \end{aligned} \quad (31)$$

(30) 式に $l\alpha_1$ をかけると,

$$\begin{aligned} -l^2\alpha_1\alpha_2 x + l\alpha_1(2 - l\gamma_2)y \\ = l^2\alpha_1\alpha_2 a + l\alpha_1(2 + l\gamma_2)b. \end{aligned} \quad (32)$$

(31), (32) 式を辺々差し合わせると,

$$\begin{aligned} \{(2 - l\gamma_1)(2 - l\gamma_2) - l^2\alpha_1\alpha_2\}x \\ = l^2\alpha_1\alpha_2 a + l\alpha_1(2 + l\gamma_2)b \\ + (2 + l\gamma_1)(2 - l\gamma_2)c + l\alpha_1(2 - l\gamma_2)d. \end{aligned} \quad (33)$$

(33) 式より、

$$x = \frac{l^2 d_1 d_2 a + l d_1 (2 + l \sigma_2) b + (2 + l \sigma_1) (2 - l \sigma_2) c + l d_1 (2 - l \sigma_2) d}{(2 - l \sigma_1) (2 - l \sigma_2) - l^2 d_1 d_2}$$

(34)

次に y を求める。(28) 式に $l d_2$ をかけ

$$\begin{aligned} (2 - l \sigma_1) l d_2 x - l^2 d_1 d_2 y \\ = (2 + l \sigma_1) l d_2 c + l^2 d_1 d_2 d. \end{aligned} \quad (35)$$

(30) 式に $(2 - l \sigma_1)$ をかけて、

$$\begin{aligned} -(2 - l \sigma_1) l d_2 x + (2 - l \sigma_1) (2 - l \sigma_2) y \\ = (2 - l \sigma_1) l d_2 a + (2 - l \sigma_1) (2 + l \sigma_2) b. \end{aligned} \quad (36)$$

(35), (36) 式を辺々足し合わせると、

$$\begin{aligned} \{(2 - l \sigma_1) (2 - l \sigma_2) - l^2 d_1 d_2\} y \\ = (2 - l \sigma_1) l d_2 a + (2 - l \sigma_1) (2 + l \sigma_2) b \\ + (2 + l \sigma_1) l d_2 c + l^2 d_1 d_2 d, \end{aligned} \quad (37)$$

(37) 式より,

$$y = \frac{(2-l\gamma_1)l\alpha_2 a + (2-l\gamma_1)(2+l\gamma_2)b + (2+l\gamma_1)l\alpha_2 c + l^2\alpha_1\alpha_2 d}{(2-l\gamma_1)(2-l\gamma_2) - l^2\alpha_1\alpha_2} \quad (38)$$

ここで $\alpha_1, \alpha_2, \gamma_1, \gamma_2$ は次のとおり,

$$\alpha_1 = -i\pi K C \chi_h \exp(-2\pi i h \cdot u_B), \quad (39)$$

 u_B は 図3の B 点における格子変位,

$$\alpha_2 = -i\pi K C \chi_{+h} \exp(+2\pi i h \cdot u_A), \quad (40)$$

 u_A は 図3の A 点における格子変位,

$$\gamma_1 = -i\pi K \chi_{0B}, \quad (41)$$

 χ_{0B} は 図3の B 点における χ_0 (平均分極率),

$$\gamma_2 = -i\pi K \chi_{0A}, \quad (42)$$

 χ_{0A} は 図3の A 点における χ_0 (平均分極率).

高木方程式に与えられた球面波境界条件に関する考察

俺(神津)の修論 p. 457 の (3-12) 式の考察を更に厳密に行う。

(3-12) 式 再掲

$$D_0^v(r_e) = \int_{-\delta_{MAX}}^{+\delta_{MAX}} \exp(-2\pi i \cos \theta_B K r_e \delta) d\delta \quad (1)$$

加藤「回折と散乱」 p. 216 (10.12 a) 式, p. 217 (10.17) 式 (座標のとり方は p. 218 図 10.5 参照) などとちがいで、加藤の解析解は、逆空間における電束密度を、直交座標 K_x, K_y, K_z の微小体積内の電束密度 E_e を基準に考へておいた。

これに対し、式 (1) は、単位ブラッグ角内の電束密度分布を、 δ として導かれている。

加藤のやりかた(ちがいは)は、式 (1) は次のように書かれています。

$$D_0^v(r_e) = \iiint_{k_x, k_y, k_z} E_e \exp(-2\pi i \cos \theta_B K r_e \delta) dK_x dK_y dK_z \quad (2)$$

E_e を一定の定数とみれば、

$$= \iint_{k_x, k_y} E_e dK_x dK_z \int_{\delta} \exp(-2\pi i \cos \theta_B K r_e \delta) K d\delta \quad (3)$$

$$\therefore dK_x = K d\delta \quad (4)$$

したが、式(1)は、次のように表わされる。

$$D_0'(r_e) = E_0 K \int_{-S_{MAX}}^{+S_{MAX}} \exp(-2\pi i \cos \theta_B K r_e \delta) d\delta \quad (5)$$

(E_0 は下の(9)式で与えられた)

よて、沖津修論 p.466 (4-04)式を再び記述すれば

$$D_0(r_e) = \frac{1}{K \cos \theta_B} \lim_{S_c \rightarrow \infty} \left[\frac{\sin(S_c r_e)}{\pi r_e} \right] \quad (6)$$

加藤の境界条件

(5)式の表式の $D_0'(r_e)$ は次のようになる。

$$D_0'(r_e) = \frac{E_0}{\cos \theta_B} \lim_{S_c \rightarrow \infty} \left[\frac{\sin(S_c r_e)}{\pi r_e} \right] \quad (7)$$

したが、加藤の解析解とシズル-ゾウの結果と一致したことが、

沖津修論 p.466 (4-06)式は次のように表わす

$$D(0) = \frac{E_0}{d \cos \theta_B} \quad (8)$$

ここで

$$E_0 = \int_{k_2} \int_{k_1} E_c dk_1 dk_2 \quad (9)$$

以上