27p ZB5
'92 春物理学会予稿

# X線3波の動力学理論と結晶構造解析における位相問題

富山大理　　沖津康平

X-Ray 3-Wave Dynamical Theory and the Phase Problem in Crystal Structure Analysis

*Dept. of Physics, Toyama Univ.*　　K.Okitsu

X線結晶構造解析において回折実験より求められるのは、結晶構造因子の絶対値のみであり、位相を測定することが出来ないという困難がある。このいわゆる位相問題は、統計的手法（直接法）により今日ほぼ克服されているが、位相を直接測定する決定的方法は依然として無い。1974年、Colella は、多重散乱(multiple diffraction)の条件下で回折実験を行うことにより、原理的には位相問題を解決できることを示した。

本講演の主題は、第1に、多重散乱を扱うための3波動力学理論を与えることであり、第2に、その理論の数値解を「3波セクショントポグラフィー」について求め、Colella の指摘を確認することである。

3波動力学理論は、高木理論(S.Takagi 1962,1969)に3波近似を適用することにより導かれたが、最終的な式に高い対称性を持たせるために、2つの工夫が施されている。第1に、高木の動力学理論基本方程式から非対称な項を除くために、透過及び回折波に位相変換を行った。第2に、ベクトル方程式をスカラー方程式に展開する際、偏光ベクトルの方向を、直交するのではなく斜交するように取った。導出された方程式は6連立偏微分方程式であるが，対称性がよいため，添字を6通りに組み合わせることを前提に1行の式で表現される。

導出された方程式を差分方程式の形にして数値解を得るわけであるが、プログラミングの際、式の対称性の高さは非常に有利な条件となる。数値シミュレーションにおける仮定は、ピンホールを通過した単色偏光X線が、2つのブラッグ条件を同時に満足するように平板結晶に入射し、結晶裏面の2方向へ反射されるという実験配置である。波動場は3角錐の領域に励起され、3角形の回折パターンの強度分布が構造因子の位相情報を含むことが確認された。導出された3波の方程式は結晶中の歪にも対応し得るが、構造因子の位相情報の確認が本研究の主眼であるため、仮定した結晶は完全結晶である。

Feb. 12, '92 (wed)

# 高木流による歪んだ結晶に対する3波動力学理論

## ● 沖津流 歪んだ結晶に対する動力学理論基本方程式

$$\boxed{(\mathbf{s}_h\cdot\mathrm{grad})\,\mathbf{D}_h = -i\pi K\sum_{h'\neq h}\chi_{h-h'}\exp\left[-2\pi i\{(\mathbf{h}'-\mathbf{h})\cdot\mathbf{u}\}\right]\left[\mathbf{D}_{h'}\right]_h}$$

上式は No.14「硝子のコリア」p.87 ㉓式　導出 0:58 a.m., Feb. 3rd, '92

$\mathbf{h}$ は逆格子ベクトル（逆格子原点のゼロベクトルも含む）

結晶中での透過波（屈折波）の波数ベクトルを $\mathbf{k}_0$ とすると、

$\mathbf{h}$ による反射波の波数ベクトルは $\mathbf{k}_0+\mathbf{h}$ となる。

$\mathbf{s}_h$ は、$\mathbf{k}_0+\mathbf{h}$ 方向の単位ベクトルで、

$$\mathbf{s}_h = s_h^{(x)}\mathbf{i} + s_h^{(y)}\mathbf{j} + s_h^{(z)}\mathbf{k}$$

$\mathbf{s}_h$ が上のように成分表示されるとすると、

演算子 $\mathbf{s}_h\cdot\mathrm{grad}$ は次式で与えられる。

$$\mathbf{s}_h\cdot\mathrm{grad} = s_h^{(x)}\frac{\partial}{\partial x} + s_h^{(y)}\frac{\partial}{\partial y} + s_h^{(z)}\frac{\partial}{\partial z}$$

$\mathbf{D}_h$ は $\mathbf{k}_0+\mathbf{h}$ 方向に進む反射波（又は屈折波）の電気変位ベクトルで、

振動項を含めた表示 $\mathcal{D}_h(\mathbf{r},t)$（$\mathbf{r}$ は結晶中の位置ベクトル、$t$ は時刻）

は次のように与えられるものとしている。

$$\mathcal{D}_h(\mathbf{r},t) = \mathbf{D}_h(\mathbf{r})\exp\left\{2\pi i\{\nu t-(\mathbf{k}_0+\mathbf{h})\cdot\mathbf{r}\}\right\}$$

高木の基本方程式においては、$\mathbf{k}_0$ はローレンツ点の近傍から

逆格子原点に向かうベクトルで

（次頁につづく）

$$|\mathbf{k}_0| = K\left(1+\frac{1}{2}\chi_0\right)$$ ，$\chi_0$は結晶の分極率の0次(非振動)の項
Kは真空中でのX線の波数

を満たしていればよいが，沖津流基本方程式においては，$\mathbf{k}_0$は上式を満たし，かつ，正確なブラッグ条件を満足していなければならない。すなわち，$\mathbf{k}_0$は，ローレンツ点から，逆格子原点へ向かうベクトルでなければならない。ブラッグ条件が複数の場合，すなわち，逆格子ベクトル$\mathbf{h}_1$のほかに逆格子ベクトル$\mathbf{h}_2$もブラッグ条件を満たす場合（3波ケース）は，ローレンツ点は，逆格子原点Oおよび$\mathbf{h}_1$，$\mathbf{h}_2$に対応した逆格子点$H_1$，$H_2$の3点から等距離$K(1+\frac{1}{2}\chi_0)$にあるとする。又，逆格子ベクトル$\mathbf{h}_1$，$\mathbf{h}_2$，$\mathbf{h}_3$の3つのブラッグ条件を同時に満たすとき（4波ケース）も，ローレンツ点は，逆格子原点Oおよび逆格子点$H_1$，$H_2$，$H_3$の4点から等距離$K(1+\frac{1}{2}\chi_0)$にあるとする。いずれの場合も，$\mathbf{k}_0$はローレンツ点から逆格子原点Oに向かうベクトルであるとする。沖津流基本方程式は，高木の基本方程式に比べて$\mathbf{k}_0$に強い拘束を与えることにより，方程式の形式に高い対称性を得ている。

Kは X線の真空中での波数

$\chi_{h-h'}$は分極率$\chi$の$(h-h')$次のフーリエ係数

$\mathbf{u}$は格子変位ベクトル

$[\mathbf{D}_{h'}]_h$は，$\underbrace{\mathbf{D}_{h'}}_{\mathbf{k}_0+\mathbf{h}'}$の$\underbrace{\mathbf{s}_h\text{方向}}_{\mathbf{k}_0+\mathbf{h}\text{の方向}}$に垂直な成分ベクトルを表わす。

$\sum_{h'\neq h}$は，h以外のh'についての和をとることを意味する。

以上

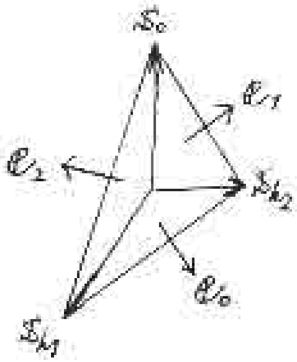
Feb.12,'92 (Wed)

# 歪んだ結晶に対する3波動力学理論 一般形

$$\boxed{\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial s_{h_i}} D_{h_i}^{(j)} = & -i\pi K \chi_{h_i-h_j} \exp\{2\pi i(\mathbf{h}_i-\mathbf{h}_j)\cdot\mathbf{u}\} C_i^{(j)} D_{h_j}^{(i)} \\ & -i\pi K \chi_{h_i-h_k} \exp\{2\pi i(\mathbf{h}_i-\mathbf{h}_k)\cdot\mathbf{u}\} \left(C_i^{(j)} D_{h_k}^{(i)} + D_{h_k}^{(j)}\right) \\ & i, j, k \in \{0, 1, 2\},\ i \neq j,\ j \neq k,\ k \neq i\end{aligned}}$$

No.14「獅子のマリア」p.95 の(56)式，導出 Feb.11,'92 (Tue), 5:30 a.m.

上式において $i$, $j$, $k$ は互いに異なり，$\{0, 1, 2\}$ のいずれかの値をとり得るので，その順列の数は6個である．すなわち上式は6連立偏微分方程式である．




3波ケースにおいては，波数ベクトル $\mathbf{k}_0$ の透過波に対して，波数ベクトルが $\mathbf{k}_0+\mathbf{h}_1$ 及び $\mathbf{k}_0+\mathbf{h}_2$ の2つの反射波が結晶中に強い波にて存在する．

左図において，$s_0$, $s_{h_1}$, $s_{h_2}$ はそれぞれ，$\mathbf{k}_0$, $\mathbf{k}_0+\mathbf{h}_1$, $\mathbf{k}_0+\mathbf{h}_2$ 方向の単位ベクトル，又 $\mathbf{e}_0$, $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$ は単位ベクトルで，

$\mathbf{e}_0$ は，$s_{h_1}$ と $s_{h_2}$ に垂直
$\mathbf{e}_1$ は，$s_{h_2}$ と $s_0$ に垂直
$\mathbf{e}_2$ は，$s_0$ と $s_{h_1}$ に垂直

である．

次頁につづく

4/5

Feb. 14, '92

高木－トウパンの式における偏光因子：C に相当する係数として、沖津流X線動力学理論においては、以下の式に示される $C_i^{(j)}$ という係数が導入されている。

$$\left.\begin{aligned} \mathbf{e}_0 &= C_0^{(1)}\mathbf{e}_1 + C_0^{(2)}\mathbf{e}_2 + Z_0\mathbf{s}_0, \\ \mathbf{e}_1 &= C_1^{(2)}\mathbf{e}_2 + C_1^{(0)}\mathbf{e}_0 + Z_1\mathbf{s}_{h_1}, \\ \mathbf{e}_2 &= C_2^{(0)}\mathbf{e}_0 + C_2^{(1)}\mathbf{e}_1 + Z_2\mathbf{s}_{h_2}. \end{aligned}\right\} \text{①}$$

上式①は、単位ベクトル $\mathbf{e}_0, \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ 及び $\mathbf{s}_0, \mathbf{s}_{h_1}, \mathbf{s}_{h_2}$ の関係を示しており、一般的には、$\mathbf{e}_i$ を、$\mathbf{e}_j, \mathbf{e}_k$ 及び $\mathbf{s}_{h_i}$ の一次結合として表現する際の係数として、$C_i^{(j)}, C_i^{(k)}$ 及び $Z_i$ を定義する。したがって①式を一般的に表現すると、以下のようになる。

$$\mathbf{e}_i = C_i^{(j)}\mathbf{e}_j + C_i^{(k)}\mathbf{e}_k + Z_i\mathbf{s}_{h_i}, \text{ — ②}$$

$$i, j, k \in \{0, 1, 2\},\ i \neq j,\ j \neq k,\ k \neq i.$$

透過波及び反射波のベクトル振幅は、$\mathbf{e}_0, \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ を用いて、次式のようにスカラーに展開されるものとする。

$$\left.\begin{aligned} \mathbf{D}_0 &= D_0^{(1)}\mathbf{e}_1 + D_0^{(2)}\mathbf{e}_2 \\ \mathbf{D}_{h_1} &= D_{h_1}^{(2)}\mathbf{e}_2 + D_{h_1}^{(0)}\mathbf{e}_0 \\ \mathbf{D}_{h_2} &= D_{h_2}^{(0)}\mathbf{e}_0 + D_{h_2}^{(1)}\mathbf{e}_1 \end{aligned}\right\} \text{ — ③}$$

（次頁につづく）

上式③は、一般的には次のように表現される。

$$\mathbf{D}_{h_i} = D^{(j)}_{h_i}\mathbf{e}_j + D^{(k)}_{h_i}\mathbf{e}_k, \qquad ④$$

$$i, j, k \in \{0, 1, 2\},\ i \neq j,\ j \neq k,\ k \neq i.$$

その他、notationは、以下のとおりである。

$\dfrac{\partial}{\partial s_{h_i}}$ : $\mathbf{k}_0 + \mathbf{h}_i$ の方向 すなわち、$s_{h_i}$ 方向の微分

$K$ : 入射X線の真空中での波数

$\chi_{h_i - h_j}$ : 逆格子ベクトル $\mathbf{h}_i - \mathbf{h}_j$ に対応した分極率のフーリエ係数

$\mathbf{u}$ : 格子変位ベクトル

以上

3波動力学理論（結晶中の歪に対応）の導出過程は、
No.14「硝子のマリア」p.90〜p.95 (Feb.11,'92)

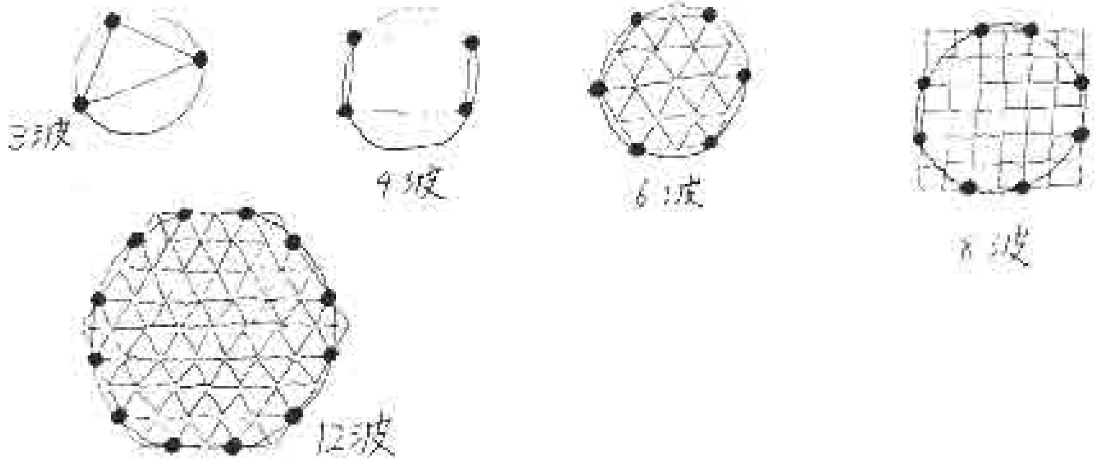
歪の項を含まない3波動力学理論の導出過程は、
No.13「愛される理由」p.47〜p.53

March 30, '93　n波動力学理論一般形(スカラー形式)の導出　No. 1/5

(導出は昨日3/29)

(本日3/30、体調はよくない、かなりひどい下痢)

n波 (n = 3, 4, 6, 8, 12) ケースの逆格子点とエバルト球




いずれのケースも"All Laue case"であり上図のようなネットワークを結晶の入射面から出射面まで層状に積み重ねることで数値的に計算することができる。

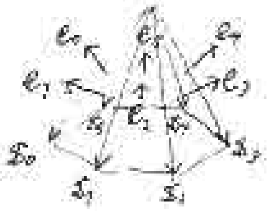
つづく

数ページ前の動力学理論基礎方程式(高木佐知夫流 波動場型式)再掲

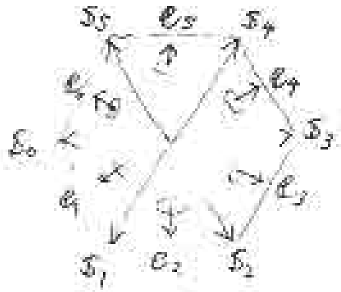
$$\boxed{(\mathbf{s}_i\cdot\mathrm{grad})\mathbf{D}_i = -i\pi K\sum_{j\neq i}\chi_{h_i-h_j}\exp\{-2\pi i\{(\mathbf{h}_j-\mathbf{h}_i)\cdot\mathbf{r}\}\}[\mathbf{D}_j]_i} \quad \text{①}$$

上式は No.14「結晶のマリア」p.87 (23)式 掌出 0:58 am Feb 3,'92

右図のように，$\mathbf{s}_n$ 及び $\mathbf{e}_n$ を定義する．
右図は6波の場合であるが他の場合 ($n=3, 4, (6), 8, 12$) でも同様．
$\mathbf{s}_n$ 及び $\mathbf{e}_n$ は単位ベクトル．




$\mathbf{e}_i$ を $\mathbf{s}_j$ と $\mathbf{e}_j$ と $\mathbf{e}_{j+1}$ の一次結合で表現する為に，
$Z^{(i,j)}$, $C_0^{(i,j)}$, $C_1^{(i,j)}$ を導入する．




特に $C_0^{(i,j)}$ と $C_1^{(i,j)}$ が偏光因子として効いてくる．

$$\boxed{\mathbf{e}_i = Z^{(i,j)}\mathbf{s}_j + C_0^{(i,j)}\mathbf{e}_j + C_1^{(i,j)}\mathbf{e}_{j+1}} \quad \text{②}$$

偏光因子の定義

この時，$j+1$ が $n$ (6波の場合は，6) になったとき，$j+1=0$ とする．

上式を例えば $i=2$, $j=4$ について適用すると，

$$\mathbf{e}_2 = Z^{(2,4)}\mathbf{s}_4 + C_0^{(2,4)}\mathbf{e}_4 + C_1^{(2,4)}\mathbf{e}_5 \quad \text{③}$$

つづく

波動場 $\mathbb{D}_i$ $(i=0,\ldots,n-1)$ は、$\mathbf{e}_i$ と $\mathbf{e}_{i+1}$ の斜交ベクトルに分解するものとする。ここで $\mathbb{D}_i$ は波数ベクトル $\mathbf{k}_i=\mathbf{k}_0+\mathbf{h}_i$ の波の複素振幅ベクトルである。

$$\boxed{\mathbb{D}_i = D_i^{(0)}\mathbf{e}_i + D_i^{(1)}\mathbf{e}_{i+1}} \quad \text{波動場のスカラー形式} \quad ④$$

前頁、基本方程式中の $[\mathbb{D}_i]_i$ は $\mathbb{D}_i$ の $\mathbf{k}_0+\mathbf{h}_i$ に垂直な成分ベクトルである。したがって $[\mathbb{D}_j]_i$ ($\mathbb{D}_j$ の $\mathbf{k}_0+\mathbf{h}_i$ に垂直な成分ベクトル)は、前頁で定義した偏光因子と $\mathbf{e}_i$ 及び $\mathbf{e}_{i+1}$ を用いて次のように表現される

$$[\mathbb{D}_j]_i = \left[D_j^{(0)}\mathbf{e}_j + D_j^{(1)}\mathbf{e}_{j+1}\right]_i \quad ⑤$$

$\mathbf{e}_j$ と $\mathbf{e}_{j+1}$ を前頁の偏光因子の定義式に従って、$\mathbf{s}_i, \mathbf{e}_i, \mathbf{e}_{i+1}$ の一次結合で表すと、

$$= \Big[D_j^{(0)}\left(Z^{(j,i)}\mathbf{s}_i + C_0^{(j,i)}\mathbf{e}_i + C_1^{(j,i)}\mathbf{e}_{i+1}\right)$$
$$+ D_j^{(1)}\left(Z^{(j+1,i)}\mathbf{s}_i + C_0^{(j+1,i)}\mathbf{e}_i + C_1^{(j+1,i)}\mathbf{e}_{i+1}\right)\Big]_i \quad ⑥$$

$\mathbf{s}_i$ は $\mathbf{k}_0+\mathbf{h}_i$ に平行、$\mathbf{e}_i$ と $\mathbf{e}_{i+1}$ は $\mathbf{k}_0+\mathbf{h}_i$ に垂直なベクトルであるから、

$$\boxed{\begin{aligned}[\mathbb{D}_j]_i &= \left\{C_0^{(j,i)}D_j^{(0)} + C_0^{(j+1,i)}D_j^{(1)}\right\}\mathbf{e}_i \\ &+ \left\{C_1^{(j,i)}D_j^{(0)} + C_1^{(j+1,i)}D_j^{(1)}\right\}\mathbf{e}_{i+1}\end{aligned}} \quad [\mathbb{D}_j]_i \text{ の表式} \quad ⑦$$

つづく

前々頁の基本方程式の左辺を $\boldsymbol{e}_i$ と $\boldsymbol{e}_{i+1}$ の成分に分解すると、

$$(\boldsymbol{s}_i \cdot \mathrm{grad})\boldsymbol{D}_i = (\boldsymbol{s}_i \cdot \mathrm{grad})\left\{D_i^{(0)}\boldsymbol{e}_i + D_i^{(1)}\boldsymbol{e}_{i+1}\right\} \quad \text{—— ⑧}$$

$$= \frac{\partial}{\partial s_i}D_i^{(0)}\boldsymbol{e}_i + \frac{\partial}{\partial s_i}D_i^{(1)}\boldsymbol{e}_{i+1} \quad \text{—— ⑨}$$

前頁の $[\boldsymbol{D}_j]_i$ の成分表示の式(⑦式)を前々頁の基本方程式(①式)の右辺に代入すると、

$$\text{①式右辺} = -i\pi K \sum_{j \neq i} \chi_{h_i - h_j} \exp\{-2\pi i(\boldsymbol{h}_j - \boldsymbol{h}_i)\cdot \boldsymbol{r}\}\Big\langle\Big\{C_0^{(j,i)}D_j^{(0)} + C_0^{(j+1,i)}D_j^{(1)}\Big\}\boldsymbol{e}_i + \Big\{C_1^{(j,i)}D_j^{(0)} + C_1^{(j+1,i)}D_j^{(1)}\Big\}\boldsymbol{e}_{i+1}\Big\rangle \quad \text{—— ⑩}$$

⑨式と⑩式を $\boldsymbol{e}_i$ と $\boldsymbol{e}_{i+1}$ の成分ごとに比較して次式を得る

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial s_i}D_i^{(0)} &= -i\pi K \sum_{j \neq i} \chi_{h_i - h_j} \exp\{-2\pi i(\boldsymbol{h}_j - \boldsymbol{h}_i)\cdot \boldsymbol{r}\}\left\{C_0^{(j,i)}D_j^{(0)} + C_0^{(j+1,i)}D_j^{(1)}\right\} \quad \text{—— ⑪} \\ \frac{\partial}{\partial s_i}D_i^{(1)} &= -i\pi K \sum_{j \neq i} \chi_{h_i - h_j} \exp\{-2\pi i(\boldsymbol{h}_j - \boldsymbol{h}_i)\cdot \boldsymbol{r}\}\left\{C_1^{(j,i)}D_j^{(0)} + C_1^{(j+1,i)}D_j^{(1)}\right\} \quad \text{—— ⑫} \end{aligned}}$$

スカラー型式 n波(n=3,4,6,8,12)動力学理論 2行型

つづく

前頁の⑪及び⑫式を1つにまとめると，

$$\boxed{\begin{gathered}\frac{\partial}{\partial s_i} D_i^{(k)} = -i\pi K \sum_{j \neq i} \chi_{h_i - h_j} \exp\left\{-2\pi i(\mathbf{h}_j - \mathbf{h}_i)\cdot \mathbf{u}\right\} \left\{ C_k^{(j,i)} D_j^{(0)} + C_k^{(j+1,i)} D_j^{(1)} \right\} \\ i, j \in \{0, 1, \cdots, n-1\},\ k \in \{0, 1\},\ n \in \{3, 4, 6, 8, 12\}\end{gathered}}$$

スカラー型式 $n$ 波動力学理論 1行型

以上

'93.3.29 (mon) 7:00起床，本日必ずしも調子はよくない，上式の導出 18:00 富大にて．
本日降雪あり．

'93.3.30 (tue) 12:00起床，本日あまり調子よくない，ひどい下痢，本日寒い
本頁執筆 18:30 富大にて

ジオトポグラフ シミュレーションプログラム リスト

output on Feb 13 '92 ①頁〜⑥頁

```
C     ----------------------------------------------------------------
C     ---------- SIMULATION OF 3 WAVE TOPOGRAPH
C     ----------------------------------------------------------------
C     ----------------------------------------------------------------
C     ----------    CODED ON NOV.20 , '90 (TUE)
C     ----------------------------------------------------------------
C
      INTEGER  M
      REAL  PI
      COMPLEX  II
      CHARACTER FNAME0*14
C
      PARAMETER ( M = 6 , PI = 3.141593 , II = ( 0.0 , 1.0 ) )
      PARAMETER ( FNAME0 = 'B:TRIPLE-6.DAT' )
C
      REAL   K  , DDX( 0:2 ) , CPOLAR( 0:2 , 0:2 )
      COMPLEX  AN , XN , PHI , BN( 1:6 , 1:6 )
      COMPLEX  FIPIK , XCONST( 0:2 , 0:2 )
      COMPLEX  CHIH( 0:2 , 0:2 ) , DSCAL( 1:6 , 0:10000 )
      COMPLEX  DENBA1( 0:2 , 0:2 , 0:2 )
      COMPLEX  DENS1( 1:6 , 1:200 ) , DENS2( 1:6 , 1:200 )
      COMPLEX  D1 , D2 , D3 , D4 , D5 , D6
      INTEGER  POINTR( 0:2 , 0:2 )
C
      COMMON /SEQ1/ AN( 1 : M , 1 : M + 1 ) , XN( 1 : M )
C
C     ----------------------------------------------------------------
C
      MSTEP = 100
C
      DDX( 0 ) = 2.0E-5
      DDX( 1 ) = 2.0E-5
      DDX( 2 ) = 2.0E-5
C
      K = 2.5E10
C
      POINTR( 0 , 1 ) = 1
      POINTR( 0 , 2 ) = 2
      POINTR( 1 , 2 ) = 3
      POINTR( 1 , 0 ) = 4
      POINTR( 2 , 0 ) = 5
      POINTR( 2 , 1 ) = 6
C
      CHIH( 0 , 1 ) = ( 3.54E-8 , 0.0 )
      CHIH( 0 , 2 ) = ( 2.09E-8 , 0.0 )
      CHIH( 1 , 0 ) = ( 3.54E-8 , 0.0 )
      CHIH( 1 , 2 ) = ( 4.00E-8 , 0.0 )
      CHIH( 2 , 0 ) = ( 2.09E-8 , 0.0 )
      CHIH( 2 , 1 ) = ( 4.00E-8 , 0.0 )
C
      PHI = 0.5 * PI
      CHIH( 2 , 1 ) = ( COS( PHI ) + II * SIN( PHI ) ) * CHIH( 2 , 1 )
      CHIH( 1 , 2 ) = ( COS( PHI ) - II * SIN( PHI ) ) * CHIH( 1 , 2 )
C
      XCOS1 = 0.59604
      XSIN1 = 0.802954
      XCOS2 = 0.59604
      XSIN2 = 0.802954
      XCOS3 = 0.59604
      XSIN3 = 0.802954
```

```
C
      DO 172 NT = 0 , 2
         DO 173 MT = 0 , 2
            CPOLAR( NT , MT ) = - 0.407407
 173     CONTINUE
 172  CONTINUE
C
      FIPIK = 0.5 * PI * II * K
C
      DO 601 LL = 1 , 6
         DO 602 MM = 1 , 6
            BN( LL , MM ) = ( 0.0 , 0.0 )
 602     CONTINUE
 601  CONTINUE
C
C     ---------- MATRIX : BN( 1:6 , 1:6 ) PREPARING
C
      DO 701 LL = 0 , 2
C
         DO 702 MM = 0 , 2
         IF  ( LL . EQ . MM ) GO TO 712
C
            DO 703 NN = 0 , 2
            IF  ( LL . EQ . NN ) GO TO 713
            IF  ( MM . EQ . NN ) GO TO 713
C
            KL1 = POINTR( LL , MM )
               KL2 = POINTR( LL , MM )
                  BN( KL1 , KL2 ) = 1.0 / DDX( LL )
               KL2 = POINTR( MM , LL )
                  BN( KL1 , KL2 ) = FIPIK * CHIH( LL , MM )
    C                                   * CPOLAR( LL , MM )
               KL2 = POINTR( NN , LL )
                  BN( KL1 , KL2 ) = FIPIK * CHIH( LL , NN )
    C                                   * CPOLAR( LL , MM )
               KL2 = POINTR( NN , MM )
                  BN( KL1 , KL2 ) = FIPIK * CHIH( LL , NN )
C
 713        CONTINUE
 703        CONTINUE
 712     CONTINUE
 702     CONTINUE
 701  CONTINUE

C
C     -----------------------------------------------------------------------
C
C     ----------   MAIN ROUTINE
C
      DSCAL( 1 , 3 ) = ( 1.0 , 0.0 )
      DSCAL( 2 , 3 ) = ( 1.0 , 0.0 )
C
      DO 77 MS = 1 , MSTEP
C
         K1 = 0
         K2 = 1
C
         DO 96 JG = 1 , 6
            DENS2( JG , 1 ) = ( 0.0 , 0.0 )
            DENS2( JG , 2 ) = ( 0.0 , 0.0 )
```

```
   96     CONTINUE
C
          MSA = MS + 1
          DO 88 N = 1 , MSA
C
             WRITE ( 6 , 555 ) MS , MSTEP , N , MSA
  555        FORMAT ( 1H ,'M = ',I4,' / ',I4,'   N = ',I4,' / ',I4 )
C
             N2 = N + 1
             J1 = K1
             J2 = K2
             K1 = -1 + N2 * ( N2 + 1 ) / 2
             K2 = -1 + N2 * ( N2 + 1 ) / 2 + N2
C
             IX = 1
             DO 99 J = J1 , J2
                DO 19 JJK = 1 , 6
                   DENS1( JJK , IX ) = DENS2( JJK , IX )
   19           CONTINUE
                IX = IX + 1
   99        CONTINUE
C
             IY = 1
             DO 93 KLJ = K1 , K2
                DO 18 JJK = 1 , 6
                   DENS2( JJK , IY ) = DSCAL( JJK , KLJ )
   18           CONTINUE
                IY = IY + 1
   93        CONTINUE
C
             DO 123 IPP = 1 , N
                JQ1 = IPP
                JQ2 = IPP + 1
C
                DO 124 LL = 0 , 2
                   DO 126 MM = 0 , 2
                   IF ( LL .EQ. MM ) GO TO 127
                      KOO = POINTR( LL , MM )
                      DENBA1( 0 , LL , MM ) = DENS2( KOO , JQ2 )
                      DENBA1( 1 , LL , MM ) = DENS1( KOO , JQ2 )
                      DENBA1( 2 , LL , MM ) = DENS1( KOO , JQ1 )
  127              CONTINUE
  126              CONTINUE
  124           CONTINUE
C
                DO 45 JH = 1 , 6
                   DO 22 JHH = 1 , 6
                      AN( JH , JHH ) = BN( JH , JHH )
   22              CONTINUE
   45           CONTINUE
C
                DO 731 LL = 0 , 2
C
                   DO 732 MM = 0 , 2
                   IF  ( LL .EQ. MM ) GO TO 742
C
                      DO 733 NN = 0 , 2
                      IF  ( LL .EQ. NN ) GO TO 743
                      IF  ( MM .EQ. NN ) GO TO 743
C
```

```
      KL1 = POINTR( LL , MM )
C
      AN( KL1 , 7 ) =      DENBA1( LL , LL , MM )
C                          / DDX( LL )
C           - FIPIK * (
C             CHIB( LL , MM ) * CPOLAR( LL , MM )
C                          * DENBA1( LL , MM , LL )
C           + CHIH( LL , NN ) * CPOLAR( LL , MM )
C                          * DENBA1( LL , NN , LL )
C           + CHIH( LL , NN )
C                          * DENBA1( LL , NN , MM ) )
C
  743           CONTINUE
  733           CONTINUE
  742         CONTINUE
  732         CONTINUE
  731       CONTINUE
C
            CALL SOLEQ6
C
            DO 612 JGB = 1 , 6
              JFA = K1 + IPP
              DSCAL( JGB , JFA ) = XN( JGB )
  612       CONTINUE
C
  123     CONTINUE
C
   88   CONTINUE
C
   77 CONTINUE
C
C     ------------------------------------------------------------------
C     ---------- FILE OPEN
C
      OPEN ( 1 , FILE = FNAMEO , STATUS = 'NEW' )
C
      DO 55 NNX = 1 , MSTEP + 1
        NX1 = ( NNX + 1 ) * ( NNX + 2 ) / 2
        NX2 = ( NNX + 1 ) * ( NNX + 2 ) / 2 + NNX - 1
        DO 245 NXN = NX1 , NX2
          D1 = DSCAL( 1 , NXN )
          D2 = DSCAL( 2 , NXN )
          D3 = DSCAL( 3 , NXN )
          D4 = DSCAL( 4 , NXN )
          D5 = DSCAL( 5 , NXN )
          D6 = DSCAL( 6 , NXN )
C
          DINT1 = CABS( ( D1 + D2 ) * XCOS1 ) ** 2 +
C                 CABS( ( D1 - D2 ) * XSIN1 ) ** 2
          WRITE ( 1 , 714 ) DINT1
  714     FORMAT ( 1H , E11.4 )
C
          DINT2 = CABS( ( D3 + D4 ) * XCOS1 ) ** 2 +
C                 CABS( ( D3 - D4 ) * XSIN1 ) ** 2
          WRITE ( 1 , 715 ) DINT2
  715     FORMAT ( 1H , E11.4 )
C
          DINT3 = CABS( ( D5 + D6 ) * XCOS3 ) ** 2 +
C                 CABS( ( D5 - D6 ) * XSIN3 ) ** 2
          WRITE ( 1 , 716 ) DINT3
```

```
716       FORMAT ( 1H , E11.4 )
245     CONTINUE
 55   CONTINUE

      ---------- FILE CLOSE

      CLOSE ( 1 )

      STOP
      END

      ------------------------------------------------------------------
      ---------- CODED ON NOV.20 ,'90 (TUE)
      ----------     SUBROUTINE : 1-ORDER EQUATIONS SOLVING
      ------------------------------------------------------------------

      SUBROUTINE SOLEQ6

      INTEGER  N
      PARAMETER ( N = 6 )

      COMPLEX  A , X , T

      COMMON /SEQ1/ A( 1 : N , 1 : N + 1 ) , X( 1 : N )

      ------------------------------------------------------------------

      DO 50  K = 1 , N-1
         MAX = K
         DO 10  I = K+1 , N
            IF  ( CABS(A( I , K )) . GT . CABS(A( MAX , K )) ) MAX = I
 10      CONTINUE

         IF ( MAX .NE . K )  THEN
             DO 20  J = K , N+1
                T = A( K , J )
                A( K , J ) = A( MAX , J )
                A( MAX , J ) = T
 20          CONTINUE
         END IF

         DO 40 I = K+1 , N
            T = A( I , K ) / A( K , K )
            DO 30 J = K+1 , N+1
               A( I , J ) = A( I , J ) - T * A( K , J )
 30         CONTINUE
 40      CONTINUE
 50   CONTINUE

      DO 70 K = N , 1 , -1
         A( K , N+1 ) = A( K , N+1 ) / A( K , K )
         DO 60 I = K-1 , 1 , -1
            A( I , N+1 ) = A( I , N+1 ) - A( K , N+1 ) * A( I , K )
 60      CONTINUE
 70   CONTINUE

      DO 80 I = 1 , N
         X( I ) = A( I , N+1 )
```

```
   80  CONTINUE
C
       RETURN
       END
```

6

$$D_i^{(k)}(\mathbf{r}) \exp\{2\pi i[\nu t - (\mathbf{k}_0 + \mathbf{h}_i)\cdot \mathbf{r}]\} \qquad (0)$$

$$= D_i'^{(k)}(\mathbf{r}) \exp\{2\pi i[\nu t - (\underbrace{\mathbf{k}_0 + \Delta\mathbf{k}_0 + \mathbf{h}_i}_{\to\ \mathbf{k}_0+\mathbf{h}_i})\cdot \mathbf{r}]\} \qquad (1)$$

$$= D_i'^{(k)}(\mathbf{r}) \exp\{-2\pi i(\Delta\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r})\} \times \exp\{2\pi i[\nu t - (\mathbf{k}_0 + \mathbf{h}_i)\cdot \mathbf{r}]\} \qquad (2)$$

(0)式と(2)式を比較して、

$$D_i^{(k)}(\mathbf{r}) = D_i'^{(k)}(\mathbf{r}) \exp\{-2\pi i(\Delta\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r})\} \qquad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial s_i} D_i^{(k)}(\mathbf{r}) = \frac{\partial}{\partial s_i}\left[D_i'^{(k)}(\mathbf{r}) \exp\{-2\pi i(\Delta\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r})\}\right] \qquad (4)$$

$$= \left\{\frac{\partial}{\partial s_i} D_i'^{(k)}(\mathbf{r})\right\} \exp\{-2\pi i(\Delta\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r})\} + D_i'^{(k)}(\mathbf{r})\left[\frac{\partial}{\partial s_i}\exp\{-2\pi i(\Delta\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r})\}\right] \qquad (5)$$

上の式(5)の第二項について考察する。
すなわち、次の項である

$$D_i'^{(k)}(\mathbf{r})\left\{\frac{\partial}{\partial s_i}\exp[-2\pi i(\Delta\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r})]\right\} \qquad (6)$$

つづく

#2/8

$\mathbb{r}$を次のように表示するとする

$$\mathbb{r} = S_i \mathbb{s}_i + E_i^{(0)} \mathbb{e}_i + E_i^{(1)} \mathbb{e}_{i+1} \qquad (7)$$

$\mathbb{s}_i$, $\mathbb{e}_i$, $\mathbb{e}_{i+1}$ は、Mar. 30 '93 の #3/5 ② 図のように、とった斜交するベクトルで、これらの一次結合によって、$S_i$, $E_i^{(0)}$, $E_i^{(1)}$ の座標で $\mathbb{r}$ を表わすとする。

このとき、式(6)の中の $\frac{\partial}{\partial S_i} \exp\left\{-2\pi i \left[\Delta \mathbb{k}_0 \cdot \mathbb{r}\right]\right\}$ は、次のようになる。

$$\frac{\partial}{\partial S_i} \exp\left\{-2\pi i \left(\Delta \mathbb{k}_0 \cdot \mathbb{r}\right)\right\} \qquad (8)$$

$$= \frac{\partial}{\partial S_i} \exp\left\{-2\pi i \left[\Delta \mathbb{k}_0 \cdot \left(S_i \mathbb{s}_i + E_i^{(0)} \mathbb{e}_i + E_i^{(1)} \mathbb{e}_{i+1}\right)\right]\right\}$$

ここで斜めに交わる、$\mathbb{s}_i$, $\mathbb{e}_i$, $\mathbb{e}_{i+1}$ ベクトル系、(9) に対して、逆ベクトル、$\mathbb{s}_i^*$, $\mathbb{e}_i^*$, $\mathbb{e}_{i+1}^*$ を次のように定義する

$$\mathbb{s}_i^* = \frac{\mathbb{e}_i \times \mathbb{e}_{i+1}}{\mathbb{s}_i \cdot (\mathbb{e}_i \times \mathbb{e}_{i+1})} \qquad (10)$$

$$\mathbb{e}_i^* = \frac{\mathbb{e}_{i+1} \times \mathbb{s}_i}{\mathbb{s}_i \cdot (\mathbb{e}_i \times \mathbb{e}_{i+1})} \qquad (11)$$

$$\mathbb{e}_{i+1}^* = \frac{\mathbb{s}_i \times \mathbb{e}_i}{\mathbb{s}_i \cdot (\mathbb{e}_i \times \mathbb{e}_{i+1})} \qquad (12)$$

$$\Delta k_0 = K_{s_i} s_i^* + K_{e_i} e_i^* + K_{e_{i+1}} e_{i+1}^* \quad (13)$$

$s_i, e_i, e_{i+1}$ と $s_i^*, e_i^*, e_{i+1}^*$ には次の関係がある。

$$s_i s_i^* = 1, \quad e_i e_i^* = 1, \quad e_{i+1} e_{i+1}^* = 1$$

$$s_i e_i^* = s_i e_{i+1}^* = 0$$

$$e_i s_i^* = e_i e_{i+1}^* = 0$$

$$e_{i+1} e_i^* = e_{i+1} s_i^* = 0$$

式(13)を式(8)-(9)に代入すると、

$$\frac{\partial}{\partial s_i} \exp\left\{-2\pi i(\Delta k_0 \cdot r)\right\} \quad (14)$$

$$= \frac{\partial}{\partial s_i} \exp\left\{-2\pi i\left[K_{s_i} s_i + K_{e_i} E_i^{(0)} + K_{e_{i+1}} E_i^{(1)}\right]\right\} \quad (15)$$

$$= \frac{\partial}{\partial s_i}\left\{\exp\left[-2\pi i(K_{s_i} s_i)\right]\exp\left[-2\pi i(K_{e_i} E_i^{(0)})\right]\exp\left[-2\pi i(K_{e_{i+1}} E_i^{(1)})\right]\right\} \quad (16)$$

$K_{s_i}$ は、ローレンツ点を通る平面(球)と、ラウエ点を通る平面(球)の距離であり、その値は $-\frac{1}{2}\chi_0 K$ である。したがって、

$$(16) = \left\{\frac{\partial}{\partial s_i} \cdot \exp\left[-2\pi i\left(-\frac{1}{2}\chi_0 K s_i\right)\right]\right\}\left\{\exp\left[-2\pi i(K_{e_i} E_i^{(0)})\right]\right\} \times \left\{\exp\left[-2\pi i(K_{e_{i+1}} E_i^{(1)})\right]\right\} \quad (17)$$

つづく

#4/8

$$(17) = \pi i \chi_0 K \left\{ \exp\left[-2\pi i\left(-\tfrac{1}{2}\chi_0 K s_i\right)\right]\right\} \left\{ \exp\left[-2\pi i\left(K_{e_i} E_i^{(0)}\right)\right]\right\}$$

$$\times \left\{ \exp\left[-2\pi i\left(K_{e_{i+1}} E_i^{(1)}\right)\right]\right\} \qquad (18)$$

$$= \pi i \chi_0 K \left\{ \exp\left[-2\pi i\left(\Delta \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}\right)\right]\right\} \qquad (19)$$

式(14)〜式(19)を、式(c)に代入すると、

$$\frac{\partial}{\partial s_i} D_i^{(k)}(\mathbf{r}) = \left\{\frac{\partial}{\partial s_i} D_i'^{(k)}(\mathbf{r})\right\} \exp\left\{-2\pi i\left[\Delta \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}\right]\right\}$$

$$+ i\pi \chi_0 K D_i'^{(k)}(\mathbf{r}) \exp\left\{-2\pi i\left(\Delta \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}\right)\right\} \qquad (20)$$

$$= \left\{\exp\left[-2\pi i\left(\Delta \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}\right)\right]\right\} \left\{\frac{\partial}{\partial s_i} D_i'^{(k)}(\mathbf{r}) + i\pi\chi_0 K D_i'^{(k)}(\mathbf{r})\right\}$$

(21)

Mar. 30, 1993 の #5/5 の式を以下に再掲する

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial s_i} D_i^{(k)} &= -i\pi K \sum_{j \neq i} \chi_{h_i - h_j} \exp\left\{-2\pi i\left(\mathbf{k}_j - \mathbf{k}_i\right)\cdot \mathbf{u}\right\} \\ &\qquad \times \left\{ C_k^{(j,i)} D_j^{(0)} + C_k^{(j+1,i)} D_j^{(1)} \right\} \\ & i,j \in \{0,1,\cdots,n-1\},\ k \in \{0,1\},\ n \in \{3,4,6,8,12\} \end{aligned}}$$

(22)

式(0) = 式(2) を再掲する

$$D_i^{(k)}(\mathbf{r}) = D_i'^{(k)}(\mathbf{r}) \exp\{-2\pi i(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\} \tag{23}$$

式(21) と 式(23) を、式(22)に代入すると

$$\{\exp[-2\pi i(\Delta\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r})]\}\left\{\frac{\partial}{\partial s_i}D_i'^{(k)}(\mathbf{r}) + i\pi\chi_0 K D_i'^{(k)}(\mathbf{r})\right\} \tag{24}$$

$$= -i\pi K \sum_{j\neq i} \chi_{h_i-h_j} \exp\{-2\pi i(\mathbf{h}_j-\mathbf{h}_i)\cdot\mathbf{r}\}$$
$$\times\left\{C_k^{(j,i)} D_j'^{(0)} + C_k^{(j+1,i)} D_j'^{(1)}\right\}$$
$$\times \exp\{-2\pi i(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\} \tag{25}$$

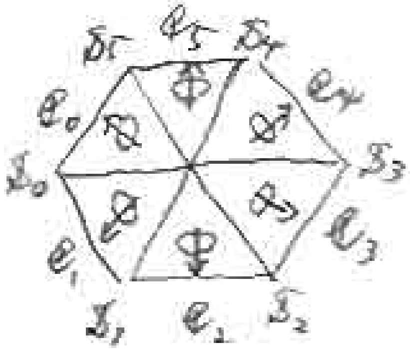
(24) = (25) を、$\exp[-2\pi i(\Delta\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r})]$ で割り算すると、

$$\frac{\partial}{\partial s_i}D_i'^{(k)} = -i\pi\chi_0 K D_i'^{(k)} - i\pi K\sum_{j\neq i}\chi_{h_i-h_j}\exp[-2\pi i(\mathbf{h}_j-\mathbf{h}_i)\cdot\mathbf{r}]$$
$$\times\left\{C_k^{(j,i)} D_j'^{(0)} + C_k^{(j+1,i)} D_j'^{(1)}\right\} \tag{26}$$

つづく

#6/8

ところで Mar 30 '93 の #2/5 の②式により
偏差因子の定義を再掲する。



$$e_i = Z^{(i,j)} s_j + C_0^{(i,j)} e_j + C_1^{(i,j)} e_{j+1} \qquad (27)$$

例えば $i=2,\ j=4$ について適用すると、

$$e_2 = Z^{(2,4)} s_4 + C_0^{(2,4)} e_4 + C_1^{(2,4)} e_5 \qquad (28)$$

ここで、$i=2,\ j=2$ のとき どうなるだろうか

$$e_2 = Z^{(2,2)} s_2 + C_0^{(2,2)} e_2 + C_1^{(2,2)} e_2 \qquad (29)$$

明らかに、

$$Z^{(2,2)} = 0,\ C_0^{(2,2)} = 1,\ C_1^{(2,2)} = 0 \qquad (30)$$

である

また、$i=2,\ j=1$ のとき

$$e_2 = Z^{(2,1)} s_1 + C_0^{(2,1)} e_1 + C_1^{(2,1)} e_2 \qquad (31)$$

明らかに

$$Z^{(2,1)} = 0,\ C_0^{(2,1)} = 0,\ C_1^{(2,1)} = 1 \qquad (32)$$

である。

つづく

一般に、

$$\left.\begin{array}{ll} C_0^{(i,i)} = 1, & C_1^{(i,i)} = 0 \\ C_0^{(i+1,i)} = 0, & C_1^{(i+1,i)} = 1 \end{array}\right\} \quad (33)$$

である。

$k=0$のとき、

$$\underbrace{C_k^{(i,i)}}_{\hookrightarrow 1} D_i^{\prime(0)} + \underbrace{C_k^{(i+1,i)}}_{\hookrightarrow 0} D_i^{\prime(1)} \quad (34)$$

$$= C_k^{(i,i)} D_i^{\prime(0)} \quad (35)$$

$k=1$のとき、

$$\underbrace{C_k^{(i,i)}}_{\hookrightarrow 0} D_i^{\prime(0)} + \underbrace{C_k^{(i+1,i)}}_{\hookrightarrow 1} D_i^{\prime(1)} \quad (36)$$

$$= C_k^{(i+1,i)} D_i^{\prime(1)} \quad (37)$$

したがって、$k=0$, $j=i$ のとき、

$$-i\pi X_0 K D_i^{\prime(k)} = -i\pi K X_0 \exp[0] \times \left\{ \underbrace{C_k^{(i,i)}}_{\hookrightarrow 1} D_i^{\prime(0)} + \underbrace{C_k^{(i+1,i)}}_{\hookrightarrow 0} D_i^{\prime(1)} \right\} \quad (38)$$

つづく

#8/8

同様にして、

$k=1$, $i=j$ のときもまた、

$$-i\pi\chi_0 K D_i'^{(k)} = -i\pi K\chi_0 \exp\{0\} \times \{\underbrace{C_k^{(i,i)}}_{\to 0} D_i^{(0)} + \underbrace{C_k^{(i+1,i)}}_{\to 1} D_i'^{(1)}\} \qquad (39)$$

したがって $-i\pi\chi_0 K D_i'^{(k)}$ の項は、サンメーション $\sum$ の中に繰り入れることができて、式(22)は、次のように書くことができる。

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial s_i} D_i^{(k)} &= -i\pi K \sum_{j=0}^{n-1} \chi_{h_i - h_j} \exp\{-2\pi i(h_j - h_i)\cdot u\} \\ &\quad \times \{C_k^{(j,i)} D_j^{(0)} + C_k^{(j+1,i)} D_j^{(1)}\} \\ & i, j \in \{0,1,\cdots,n-1\},\ k\in\{0,1\},\ n\in\{3,4,6,8,12\} \end{aligned}}$$

上の式では $D_i'$ を $D_i$ と書き改めている。 (40)

更に一般化した、n-波 実空間動力学理論

○ 3〜12 波 のn波に適用できる

○ $\chi_0$ を陽に含むことにより、

　○ ラウエ、ブラッグケース[illegible]に対応

　(結晶の形状と同定可)

　○ 干渉計などの曲った位相格子に対応

○ $u$ を含むことにより 任意のひずみに対応

○ 任意の完全偏光入射に対応

前頁の式を更に $k=0$ と $k=1$ の項をまとめて.

$$\boxed{\begin{gathered}\frac{\partial}{\partial s_i} D_i^{(k)} = -i\pi K \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{l=0}^{1} \chi_{(h_i-h_j)} \exp\left[-2\pi i (\mathbf{h}_j - \mathbf{h}_i)\cdot \mathbf{u}\right] C_k^{(j+l,\, i)} D_j^{(l)} \\ i, j \in \{0, 1, \cdots, n-1\},\ k, l \in \{0, 1\},\ n \in \{3, 4, 6, 8, 12\}\end{gathered}}$$

項を一つにした n-波動力学理論