「結晶学と構造物性」6.3.2 節修正情報

(2017.2)

	修　正　前	修　正　後
p.106 式 (6.28)	$\mathrm{e}^{-2\pi i k\Delta\xi} = 1$	$\mathrm{e}^{2\pi i k\Delta\xi} = 1$
p.107 式 (6.30)	$I = I_{\mathrm{e}} \left\lvert \int \rho(\mathbf{r})\mathrm{e}^{2\pi i(\mathbf{k}_{\mathrm{i}}-\mathbf{k}_{\mathrm{f}})\cdot\mathbf{r}} dV \right\rvert^2$	$I = I_{\mathrm{e}} \left\lvert \int \rho(\mathbf{r})\mathrm{e}^{-2\pi i(\mathbf{k}_{\mathrm{i}}-\mathbf{k}_{\mathrm{f}})\cdot\mathbf{r}} dV \right\rvert^2$
〃 式 (6.31)	$F_{\mathrm{sample}}(\mathbf{Q}) = \int_{\mathrm{all}} \rho(\mathbf{r})\mathrm{e}^{-2\pi i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} dV$	$F_{\mathrm{sample}}(\mathbf{Q}) = \int_{\mathrm{all}} \rho(\mathbf{r})\mathrm{e}^{2\pi i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} dV$
p.108 式 (6.35)	$F_{\mathrm{sample}}(\mathbf{Q}) = \int_{\mathrm{o}} \rho(\mathbf{r}_{\mathrm{o}})\mathrm{e}^{-2\pi i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_{\mathrm{o}}} dV_{\mathrm{o}} \cdot \sum_{n_1 n_2 n_3}^{N_1 N_2 N_3} \mathrm{e}^{-2\pi i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{t}_n}$	$F_{\mathrm{sample}}(\mathbf{Q}) = \int_{\mathrm{o}} \rho(\mathbf{r}_{\mathrm{o}})\mathrm{e}^{2\pi i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_{\mathrm{o}}} dV_{\mathrm{o}} \cdot \sum_{n_1 n_2 n_3}^{N_1 N_2 N_3} \mathrm{e}^{2\pi i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{t}_n}$
〃 式 (6.37)	$F(\mathbf{Q}) = \int \rho(\mathbf{r})\mathrm{e}^{-2\pi i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} dV$	$F(\mathbf{Q}) = \int \rho(\mathbf{r})\mathrm{e}^{2\pi i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} dV$
〃 式 (6.38)	$L(h,k,l;N_1,N_2,N_3) = \left\lvert \sum_{n_1 n_2 n_3}^{N_1 N_2 N_3} \mathrm{e}^{-2\pi i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{t}_n} \right\rvert^2$	$L(h,k,l;N_1,N_2,N_3) = \left\lvert \sum_{n_1 n_2 n_3}^{N_1 N_2 N_3} \mathrm{e}^{2\pi i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{t}_n} \right\rvert^2$
〃 式 (6.39)	$\lvert F(\mathbf{Q})\rvert^2 = F(\mathbf{Q})F^*(\mathbf{Q}) = \iint \rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')\mathrm{e}^{-2\pi i\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} dV dV'$	$\lvert F(\mathbf{Q})\rvert^2 = F(\mathbf{Q})F^*(\mathbf{Q}) = \iint \rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')\mathrm{e}^{2\pi i\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} dV dV'$

	修　正　前	修　正　後
p.106 下から9行目より	次に，たくさんある原子あるいはそれに付随した電子から散乱した平面波の重ね合わせを考えましょう．$+\mathbf{k}$ 方向に進む波は $\exp(2\pi i(\nu t-\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}))$ と書かれます．**図 6.5** に示したように，まず，入射 X 線 $\exp(2\pi i(\nu t-\mathbf{k}_{\mathrm{i}}\cdot\mathbf{r}))$ が原点 O で散乱されて $\exp(2\pi i(\nu t-\mathbf{k}_{\mathrm{f}}\cdot\mathbf{r}))$ の平面波として R に到達したとします．これは原点にある 1 個 $\cdots$	次に，たくさんある原子あるいはそれに付随した電子から散乱した平面波の重ね合わせを考えましょう．$+\mathbf{k}$ 方向に進む波は $\exp(2\pi i(\nu t-\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}))$ と書かれます．なぜそのように書かれるかを**図 6.5** の上に示します． 簡単のためにサイン波で説明します．$t=0$ で実線で表した波は $t=t_1$ では点線で表した波になります．原点での振幅は $\sin(2\pi i(\nu t_1))$ と増加します．一方，$t=0$ で $x=0$ の点は $t=t_1$ で $x=x_1$ に移動します．これを位相空間で表したのが左の図で，原点の $t=0$ での位相は $t=t_1$ で反時計方向に進みます．$x=x_1$ での位相は $t=t_1$ になって初めて原点での $t=0$ での位相と同じになります．つまり，$x=x_1$ で $t=0$ の位相は $-kx_1$ だけ遅れていることになります．x が大きくなるほど位相は遅れていることになり，同じ位相になるのには進行波がやってくる時間がかかると言うことです． それでは，散乱した平面波の重ね合わせを考えましょう．図 6.5 の下に示したように，まず，入射 X 線 $\exp(2\pi i(\nu t-\mathbf{k}_{\mathrm{i}}\cdot\mathbf{r}))$ が原点 O で散乱されて $\exp(2\pi i(\nu t-\mathbf{k}_{\mathrm{f}}\cdot\mathbf{r}))$ の平面波として R に到達したとします．これは原点にある 1 個 $\cdots$

	修　正　前	修　正　後
p.107 上から 1 行目より	そこで，この 2 箇所からの波の位相差を計算しましょう．図 6.5 から分かるように，ベクトル $\mathbf{r}$ の $\mathbf{k}_{\mathrm{i}}$ と $\mathbf{k}_{\mathrm{f}}$ への射影を考えればよいことになり，点 $\mathbf{r}$ からの散乱波は原点 O からの散乱波を基準にして $-\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}$ の項は $\exp(2\pi i(\mathbf{k}_{\mathrm{i}}-\mathbf{k}_{\mathrm{f}})\cdot\mathbf{r})$ のように位相が遅れていることになります．ここで，図の関係では $\mathbf{k}_{\mathrm{i}}\cdot\mathbf{r}\geq 0$ であり，$\mathbf{k}_{\mathrm{f}}\cdot\mathbf{r}\leq 0$ です．固体物理で $\mathbf{k}$ の中に 2π を含ませるのは，このような計算を何度も行うので，exp の中の 2π を書かなくてすむようにしています．$\cdots$	そこで，この 2 箇所からの波の位相差を計算しましょう．図 6.5 の下から分かるように，ベクトル $\mathbf{r}$ の $\mathbf{k}_{\mathrm{i}}$ と $\mathbf{k}_{\mathrm{f}}$ への射影を考えればよいことになります．図 6.5 の下の左で，原点を通る波と $\mathbf{r}$ を通る波は点 A_0 で位相が同じですが，点 A_1 で散乱される波は点 A_2 を通って回り道をします．ここで，図の関係では $\mathbf{k}_{\mathrm{i}}\cdot\mathbf{r}\geq 0$ であり，$\mathbf{k}_{\mathrm{f}}\cdot\mathbf{r}\leq 0$ です．位相差としては $\mathbf{k}_{\mathrm{i}}\cdot\mathbf{r}-\mathbf{k}_{\mathrm{f}}\cdot\mathbf{r}\geq 0$ です．図 6.5 の下の右には観測点である $\mathbf{R}$ での波を示しています．原点を通ってきた基準となる波は点 B_1 の $\mathbf{r}=\mathbf{R}, t=t_1$ で $\exp(2\pi i(\nu t_1-\mathbf{k}_{\mathrm{f}}\cdot\mathbf{R}))$ と書き表されます．点 $\mathbf{r}$ を通ってきた散乱波でこの位相と同じなのは点 B_2 であり，干渉を考えている点 B_3 の $\mathbf{R}$ では $(\mathbf{k}_{\mathrm{i}}-\mathbf{k}_{\mathrm{f}})\cdot\mathbf{r}$ だけ位相が遅れていることになります．式で書くと，$\exp(2\pi i(\nu t_1-\mathbf{k}_{\mathrm{f}}\cdot\mathbf{R}-(\mathbf{k}_{\mathrm{i}}-\mathbf{k}_{\mathrm{f}})\cdot\mathbf{r}))$ となります．したがって，二つの波の位相差は $\exp(-2\pi i(\mathbf{k}_{\mathrm{i}}-\mathbf{k}_{\mathrm{f}})\cdot\mathbf{r})$ となります． 固体物理で $\mathbf{k}$ の中に 2π を含ませるのは，このような計算を何度も行うので，exp の中の 2π を書かなくてすむようにしています．$\cdots$

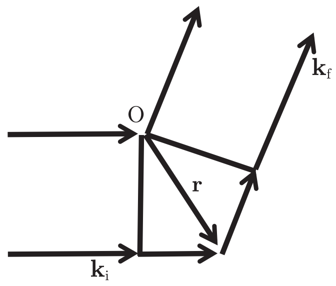
<table>
<tr><th></th><th>修　正　前</th><th>修　正　後</th></tr>
<tr>
<td>p1.7 図 6.5</td>
<td>


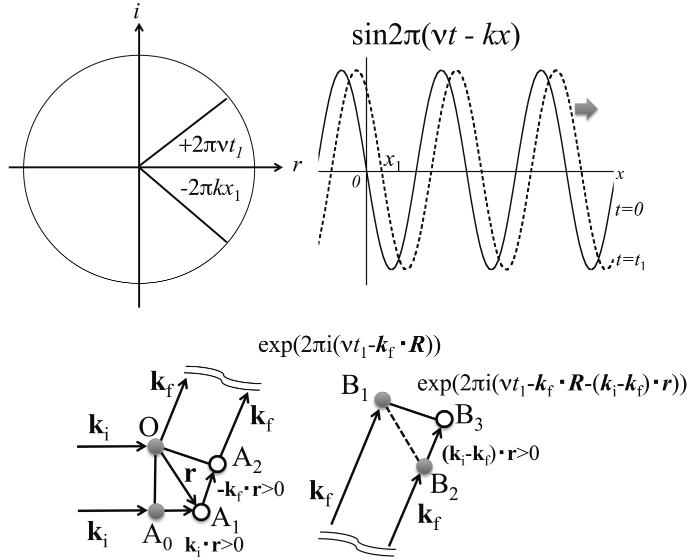
図 6.5　r からの散乱の位相差.
</td>
<td>


図 6.5　進行波の位相と振幅 (上) と r からの散乱の位相差 (下)
</td>
</tr>
</table>

【修正に関する説明】

式 (6.31) や式 (6.35) の exp の項は，教科書により $\exp(-2\pi i\mathbf{Qr})$ であったり $\exp(+2\pi i\mathbf{Qr})$ であったりします．この修正版では，$\exp(-2\pi i\mathbf{Qr})$ を $\exp(+2\pi i\mathbf{Qr})$ と変更しますが，式の最終結果には影響しません．一カ所影響を受ける所として，図 8.16 の f” の符号が $\exp(-2\pi i\mathbf{Qr})$ のままでは逆で間違っていて，$\exp(+2\pi i\mathbf{Qr})$ に対応する図となっています．論理的には，図 6.5 下 と補足説明した図 6.5 上 から $\exp(+2\pi i\mathbf{Qr})$ の方が適切です．この節以降，$\exp(-2\pi i\mathbf{Qr})$ は $\exp(+2\pi i\mathbf{Qr})$ に変更して下さい．それに伴い，式 (9.1) 以降の秩序変数の波の表し方も $\exp(+2\pi i\mathbf{qr})$ から進行波の形の $\exp(-2\pi i\mathbf{qr})$ に修正します．

形式的ですが，これらの変更に伴い影響を受ける符号は次の式です (虚数 i を $-i$ に変更)．式 (6.30)，(6.31)，(6.35)，(6.37)，(6.38)，(6.39)，(6.43)，(6.53)，(6.54)，(6.56)，(6.58)，(6.59)，(6.61)，(6.62)，(6.63)，(6.64)，(6.66)，(6.68)，(6.71)，(6.74)，(6.87)，(6.88)，(6.90)，(6.91)，(6.92)，(6.93)，(6.94)，(6.95)，(6.96)，(6.110)，(6.111)，(6.112)，(7.6)，(7.8)，(7.9)，(7.12)，(7.13)，(7.15)，(7.16)，(8.50)，(8.51)，(8.52)，(8.53)，(8.54)，(8.55)，(8.56)，(8.65)，(8.67)，(9.1)，(9.2)，(9.5)，(9.6)，(9.8)，(9.9)，(9.10)，(9.11)，(9.14)，(9.15)，(9.16)，(9.17)，(9.18)，(9.19)，(9.20)，(9.21)，(9.54)，(9.56)，(9.57)，(9.59)，(9.76)．