付録

A.1　回折散乱の原理

ここでは，特に電子線回折について詳しく述べる．また，ここで用いるテキストは，基礎工学群3年次に開講されている計測工学Iで，私がTeaching Assistant（T.A.）として作成し，講義で用いたものである．

電子線回折散乱の原理

（1）電子線の波長

電子は粒子のみならず波の性質も併せ持つ。このときの波長λはド・ブロイの下式によって関係づけられている。

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}. \tag{A.1.1}$$

例えばE≈100eVの時、波長λ=0.122nmであり、これは結晶格子の間隔dとほぼ同じである。（光の場合と同様にλ≒dの時のみ回折は起こる。）

（2）回折条件

一般の固体物理の教科書には回折条件としてΔK=Gと書いてあるだけで、「なぜこの式が導かれたか？」については、ほとんどふれられていない。

この授業では「なぜこの式が導かれたか」について考える。(参考文献　Kittel第3版)

（3）回折散乱原理

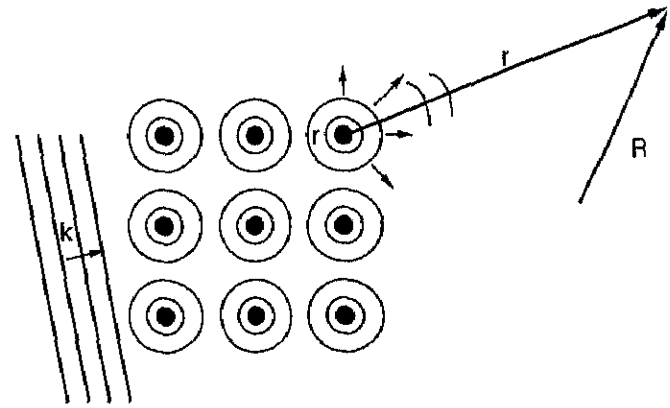
まず図A.1のような仮定をする。

1）入射波は平面波

2）3次元の格子ベクトルa、b、cの結晶

3）入射波は結晶による屈折、散乱によって変化しない（多重散乱、非弾性散乱はしない)

4）散乱波は球面波



図A.1　散乱仮定図

x点における入射平面波の振幅を

$$F(x) = F_0 \exp\left[i\left(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega t\right)\right]. \tag{A.1.2}$$

とおく。

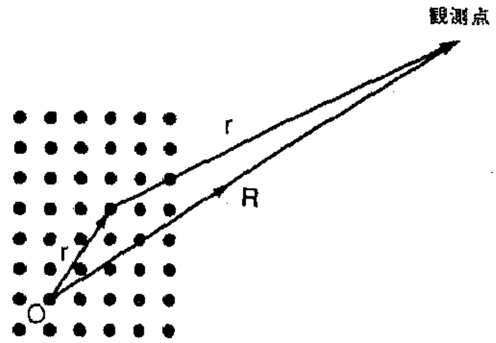
結晶中の点ρにおける振幅は

$$F(\rho)=F_0\exp\left(i\vec{k}\cdot\vec{\rho}\right). \tag{A.1.3}$$

となる。ここでt=0とした。（これによって位相情報が欠落する。）
また点ρでは、入射波によって球面波の散乱波を生じるとする。
球面波を

$$\left(F_0 e^{i\vec{k}\cdot\vec{\rho}}\right)\left(\frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{\rho}}}{r}\right). \quad \text{(A.1.4)}$$

とおく。
ここで図A.2のようなベクトルをとる。
まず観測点Rでの振幅は

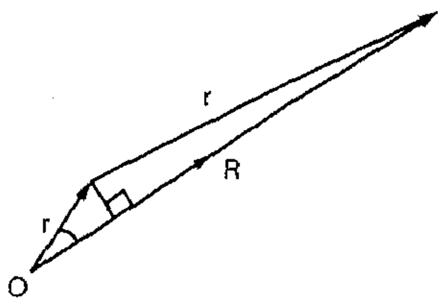


図A.2　散乱ベクトル図

$$\frac{F_0}{r}\exp\left(i\vec{k}\cdot\vec{\rho}\right)\exp(ikr)=\frac{F_0}{r}\exp\left(i\vec{k}\cdot\vec{\rho}+ikr\right).$$

(A.1.5)

である。（exp(ikr)はr方向のためベクトルではなくなる。）
ここで図A.2の長さをわかりやすく図A.3に示す。
rを求めるために余弦定理を用いる。



図A.3　散乱ベクトル詳細図

$$\vec{r}^2=\left(\vec{R}-\vec{\rho}\right)^2=R^2+\rho^2-2\rho R\cos\left(\vec{\rho};\vec{R}\right). \tag{A.1.6}$$

Rは十分に遠い（R点は観測点である）ので
ρ/R<<1とおく。

$$\vec{r}^2=R^2\left(1-2\frac{\rho}{R}\cos\left(\vec{\rho};\vec{R}\right)\right). \tag{A.1.7}$$

ここで$(1-x)^\alpha\cong 1-\alpha x$の関係を使うと

$$r=R-\rho\cos\left(\vec{\rho};\vec{R}\right). \tag{A.1.8}$$

になり、よって振幅は

$$\frac{F_0}{r}\exp\left[i\vec{k}\cdot\vec{\rho}+ikR-ik\rho\cos\left(\vec{\rho};\vec{R}\right)\right]. \tag{A.1.9}$$

になる。

R点での振幅は散乱点すべてにおいて足し合わせなければならない。ここで次のような仮定をする。格子からの散乱波の振幅は格子体積内の電子密度n(ρ)に比例する。
R点での振幅は

$$\sum n(\rho)\frac{F_0}{r}\exp\left[i\vec{k}\cdot\vec{\rho}-ik\rho\cos\left(\vec{\rho};\vec{R}\right)\right]\exp(ikR). \tag{A.1.10}$$

となる
ここでexp(ikR)は体積外では一定値をとるので省略する。また1/r、1/Rの違いも無視する。
$i\vec{k}\cdot\vec{\rho}-ik\rho\cos\left(\vec{\rho};\vec{R}\right)$をよりやさしくするためにR方向に散乱した波数を$\vec{k'}$とすると

$$i\vec{k}\cdot\vec{\rho}-ik\rho\cos\left(\vec{\rho};\vec{R}\right)\equiv i\vec{\rho}\cdot\left(\vec{k}-\vec{k}'\right)\equiv -i\vec{\rho}\cdot\Delta\vec{K}. \tag{A.1.11}$$

となり、最終的には、

$$\sum n(\rho)\frac{F_0}{R}\exp\left[-i\vec{\rho}\cdot\Delta\vec{K}\right]. \tag{A.1.12}$$

となる。
弾性散乱では入射、散乱の波数ベクトルの大きさは同じである。

次に格子点からの散乱を考える。
まず次のような仮定をする。有限の結晶においてどの格子点に点状の散乱中心が並んでいるとする。n(ρ)は一定値とする。ここで ρ 点の位置ベクトルを次のようにとる。

$$\vec{\rho}=m\vec{a}+n\vec{b}+p\vec{c}. \tag{A.1.13}$$

離散的な格子点でのR点における散乱振幅は

$$\begin{aligned} A &\equiv \sum_{\vec{\rho}}\exp\left(-i\vec{\rho}\cdot\Delta\vec{K}\right)=\sum_{mnp}\exp\left[-i\left(m\vec{a}+n\vec{b}+p\vec{c}\right)\cdot\Delta\vec{K}\right] \\ &=\left(\sum_m\exp\left[-im\left(\vec{a}\cdot\Delta\vec{K}\right)\right]\right)\left(\sum_n\exp\left[-in\left(\vec{b}\cdot\Delta\vec{K}\right)\right]\right)\left(\sum_p\exp\left[-ip\left(\vec{c}\cdot\Delta\vec{K}\right)\right]\right). \end{aligned} \tag{A.1.14}$$

であり、強度は振幅の2乗であるから

$$|A|^2=\left|\left(\sum_m\exp\left[-im\left(\vec{a}\cdot\Delta\vec{K}\right)\right]\right)\right|^2\left|\left(\sum_n\exp\left[-in\left(\vec{b}\cdot\Delta\vec{K}\right)\right]\right)\right|^2\left|\left(\sum_p\exp\left[-ip\left(\vec{c}\cdot\Delta\vec{K}\right)\right]\right)\right|^2.$$

(A.1.15)
である。今後1つの成分のみ考える。

$\vec{a}$の方向に格子点がM個あると考えると上式は

$$\sum_{m=0}^{M-1}\exp\left[-im\left(\vec{a}\cdot\Delta\vec{K}\right)\right]=\frac{1-\exp\left[-iM\left(\vec{a}\cdot\Delta\vec{K}\right)\right]}{1-\exp\left[-i\left(\vec{a}\cdot\Delta\vec{K}\right)\right]}. \tag{A.1.16}$$

の等比級数になる。ここで

$$\begin{aligned}&\sum_{m=0}^{M-1}x^m=\sum_{m=0}^{\infty}x^m-\sum_{m=M}^{\infty}x^m=\frac{1}{1-x}-\frac{x^M}{1-x}\\&x\equiv\exp\left[-i\left(\vec{a}\cdot\Delta\vec{K}\right)\right]\end{aligned} \tag{A.1.17}$$

の関係を用い

$$y\equiv\left[-i\left(\vec{a}\cdot\Delta\vec{K}\right)\right].\ \text{とおくと} \tag{A.1.18}$$

$$\sum_{m=0}^{M-1}\exp\left[-im\left(\vec{a}\cdot\Delta\vec{K}\right)\right]=\frac{1-e^{My}}{1-e^{y}}=\frac{e^{-\frac{1}{2}y}\left(e^{-\frac{M}{2}y}-e^{\frac{M}{2}y}\right)}{e^{-\frac{M}{2}y}\left(e^{-\frac{1}{2}y}-e^{\frac{1}{2}y}\right)}. \tag{A.1.19}$$

そして

$$\sin\theta=\frac{1}{2i}\left(e^{i\theta}-e^{-i\theta}\right). \tag{A.1.20}$$

を用いれば，散乱強度は

$$\left|\left(\sum_m\exp\left[-im\left(\vec{a}\cdot\Delta\vec{K}\right)\right]\right)\right|^2=\frac{\sin^2\frac{1}{2}M\left(\vec{a}\cdot\Delta\vec{K}\right)}{\sin^2\frac{1}{2}\left(\vec{a}\cdot\Delta\vec{K}\right)}. \tag{A.1.21}$$

になる．また，

$$\frac{1}{2}\left(\vec{a}\cdot\Delta\vec{K}\right)=x. \tag{A.1.22}$$

M=20としてグラフを書くと図A.4のようになる。

ここで

$$\frac{1}{2}\left(\vec{a}\cdot\Delta\vec{K}\right)=\pi q. \quad \text{(A.1.23)}$$

の時，散乱強度は極大値をとる。

（qは整数）又この式を書き換えれば

$$\Delta\vec{K}=\frac{2\pi}{\vec{a}}q=\vec{G}. \quad \text{(A.1.24)}$$

の回折条件が導かれる。

つぎに強度の最大値は式A.1.21より

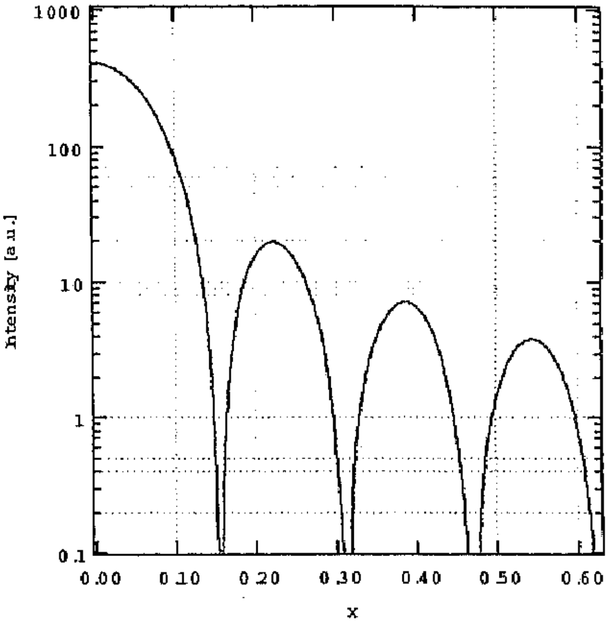
Mの2乗になる。

次に分布の幅について以下のように

考える。

わずかに

$$\vec{a}\cdot\Delta\vec{K}. \quad \text{(A.1.25)}$$



図A.4　式A.1.21のPlot

の値を変え、

$$\vec{a}\cdot\Delta\vec{K}=2\pi q+\varepsilon. \quad \text{(εは微少量)} \qquad \text{(A.1.26)}$$

とすると

$$\sin\frac{1}{2}M(2\pi q+\varepsilon)=\sin\frac{1}{2}M\varepsilon=0. \qquad \text{(A.1.27)}$$

よって

$$\varepsilon=\frac{2\pi}{M}. \qquad \text{(A.1.28)}$$

となり幅は1/Mに比例していることがわかる。即ち理想的な結晶ではとてもシャープになる。

まとめ

振幅の大きさはMの2乗に比例し、幅は1/Mに比例する。よって面積はMになる。（1次元、3次元ではMの3乗になる）

Mが大きい場合（欠陥がないなど）スペクトルは理想的な線スペクトルになる。（Mが無限大のときδ関数になる。）しかしながら電子線には可干渉距離（Coherence Length）と呼ばれるものがあり、実際干渉に預かる領域は数百nm以下であり、あいまいさが生じる。

A.2　M系列の配列

ここでは，相互相関チョッパーを作成するときに用いたM系列を示す．発生させたM系列の長さは255と511であり，それぞれの係数f_iは{01110001}，および{000100001}である．

表A.2.1　スリット総数255のスリット配列

配列番号	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N=255	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0
配列番号	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
N=255	1	0	0	0	0	1	0	1	0	0
配列番号	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
N=255	1	1	1	1	1	0	1	0	1	0
配列番号	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40
N=255	1	0	1	1	1	0	0	0	0	0
配列番号	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50
N=255	1	1	0	0	0	1	0	1	0	1
配列番号	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60
N=255	1	0	0	1	1	0	0	1	0	1
配列番号	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70
N=255	1	1	1	1	1	0	1	1	1	1
配列番号	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80
N=255	0	0	1	1	0	1	1	1	0	1
配列番号	81	82	83	84	85	86	87	88	89	90
N=255	1	1	0	0	1	0	1	0	1	0
配列番号	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100
N=255	0	1	0	1	0	0	0	1	0	0
配列番号	101	102	103	104	105	106	107	108	109	110
N=255	1	0	1	1	0	1	0	0	0	1
配列番号	111	112	113	114	115	116	117	118	119	120
N=255	1	0	0	1	1	1	0	0	1	1
配列番号	121	122	123	124	125	126	127	128	129	130
N=255	1	1	0	0	0	1	1	0	1	1
配列番号	131	132	133	134	135	136	137	138	139	140
N=255	0	0	0	0	1	0	0	0	1	0

配列番号	141	142	143	144	145	146	147	148	149	150
N=255	1	1	1	0	1	0	1	1	1	1

配列番号	151	152	153	154	155	156	157	158	159	160
N=255	0	1	1	0	1	1	1	1	1	0

配列番号	161	162	163	164	165	166	167	168	169	170
N=255	0	0	0	1	1	0	1	0	0	1

配列番号	171	172	173	174	175	176	177	178	179	180
N=255	1	0	1	0	1	1	0	1	1	0

配列番号	181	182	183	184	185	186	187	188	189	190
N=255	1	0	1	0	0	0	0	0	1	0

配列番号	191	192	193	194	195	196	197	198	199	200
N=255	0	1	1	1	0	1	1	0	0	1

配列番号	201	202	203	204	205	206	207	208	209	210
N=255	0	0	1	0	0	1	1	0	0	0

配列番号	211	212	213	214	215	216	217	218	219	220
N=255	0	0	0	1	1	1	0	1	0	0

配列番号	221	222	223	224	225	226	227	228	229	230
N=255	1	0	0	0	1	1	1	0	0	0

配列番号	231	232	233	234	235	236	237	238	239	240
N=255	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0

配列番号	241	242	243	244	245	246	247	248	249	250
N=255	1	1	0	0	0	1	1	1	1	0

配列番号	251	252	253	254	255
N=255	1	0	0	0	0

表A.2.2　スリット総数511のスリット配列

配列番号	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N=511	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
配列番号	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
N=511	0	0	0	1	1	1	1	0	1	1
配列番号	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
N=511	1	0	0	0	0	1	0	1	1	0
配列番号	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40
N=511	0	1	1	0	1	1	0	1	1	1
配列番号	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50
N=511	1	0	1	0	0	0	0	1	1	1
配列番号	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60
N=511	0	0	1	1	0	0	0	0	1	0
配列番号	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70
N=511	0	1	0	0	0	1	0	1	0	1
配列番号	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80
N=511	1	1	0	1	0	1	1	1	1	0
配列番号	81	82	83	84	85	86	87	88	89	90
N=511	0	1	0	0	1	0	1	1	1	0
配列番号	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100
N=511	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0
配列番号	101	102	103	104	105	106	107	108	109	110
N=511	1	1	1	0	1	1	1	0	1	0
配列番号	111	112	113	114	115	116	117	118	119	120
N=511	0	1	1	1	1	0	1	0	1	0
配列番号	121	122	123	124	125	126	127	128	129	130
N=511	0	1	0	1	0	0	0	0	0	0
配列番号	131	132	133	134	135	136	137	138	139	140
N=511	1	0	1	0	1	0	1	0	1	1
配列番号	141	142	143	144	145	146	147	148	149	150
N=511	1	1	1	0	1	0	1	1	0	1
配列番号	151	152	153	154	155	156	157	158	159	160
N=511	0	0	0	0	0	1	1	0	1	1

配列番号	161	162	163	164	165	166	167	168	169	170
N=511	1	0	1	1	0	1	1	0	1	0

配列番号	171	172	173	174	175	176	177	178	179	180
N=511	1	1	0	0	0	0	0	1	0	1

配列番号	181	182	183	184	185	186	187	188	189	190
N=511	1	1	0	1	1	1	1	1	0	0

配列番号	191	192	193	194	195	196	197	198	199	200
N=511	0	1	1	1	1	0	0	1	1	0

配列番号	201	202	203	204	205	206	207	208	209	210
N=511	1	0	0	1	1	0	1	0	1	1

配列番号	211	212	213	214	215	216	217	218	219	220
N=511	1	0	0	0	1	1	0	1	0	0

配列番号	221	222	223	224	225	226	227	228	229	230
N=511	0	1	0	1	1	1	1	1	1	1

配列番号	231	232	233	234	235	236	237	238	239	240
N=511	0	1	0	0	1	0	1	1	0	0

配列番号	241	242	243	244	245	246	247	248	249	250
N=511	0	1	0	1	0	0	1	1	0	0

配列番号	251	252	253	254	255	256	257	258	259	260
N=511	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0

配列番号	261	262	263	264	265	266	267	268	269	270
N=511	1	1	0	0	1	1	0	0	1	0

配列番号	271	272	273	274	275	276	277	278	279	280
N=511	1	0	1	1	0	0	1	0	0	1

配列番号	281	282	283	284	285	286	287	288	289	290
N=511	1	1	1	1	1	0	1	1	0	1

配列番号	291	292	293	294	295	296	297	298	299	300
N=511	0	0	1	0	0	1	0	0	1	1

配列番号	301	302	303	304	305	306	307	308	309	310
N=511	0	1	1	1	1	1	1	0	0	1

配列番号	311	312	313	314	315	316	317	318	319	320
N=511	0	1	1	0	1	0	1	0	0	0

配列番号	321	322	323	324	325	326	327	328	329	330
N=511	0	1	0	1	0	0	0	1	0	0

配列番号	331	332	333	334	335	336	337	338	339	340
N=511	1	1	1	0	1	1	0	0	1	0

配列番号	341	342	343	344	345	346	347	348	349	350
N=511	1	1	1	1	0	1	1	0	0	0

配列番号	351	352	353	354	355	356	357	358	359	360
N=511	0	1	1	0	1	0	1	0	1	0

配列番号	361	362	363	364	365	366	367	368	369	370
N=511	0	1	1	1	0	0	1	0	0	0

配列番号	371	372	373	374	375	376	377	378	379	380
N=511	0	1	1	0	0	0	1	0	0	0

配列番号	381	382	383	384	385	386	387	388	389	390
N=511	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0

配列番号	391	392	393	394	395	396	397	398	399	400
N=511	1	0	0	0	1	0	0	0	1	1

配列番号	401	402	403	404	405	406	407	408	409	410
N=511	0	0	1	0	0	0	1	1	1	0

配列番号	411	412	413	414	415	416	417	418	419	420
N=511	1	0	1	0	1	1	0	1	1	0

配列番号	421	422	423	424	425	426	427	428	429	430
N=511	0	0	1	1	1	0	0	0	1	0

配列番号	431	432	433	434	435	436	437	438	439	440
N=511	0	1	0	1	0	1	0	0	0	1

配列番号	441	442	443	444	445	446	447	448	449	450
N=511	1	0	1	1	0	0	1	1	1	1

配列番号	451	452	453	454	455	456	457	458	459	460
N=511	1	0	0	1	1	1	1	0	0	0

配列番号	461	462	463	464	465	466	467	468	469	470
N=511	1	0	1	1	0	1	1	1	0	0

配列番号	471	472	473	474	475	476	477	478	479	480
N=511	1	0	1	0	0	1	0	0	0	0

配列番号	481	482	483	484	485	486	487	488	489	490
N=511	0	1	0	0	1	1	0	0	1	1

配列番号	491	492	493	494	495	496	497	498	499	500
N=511	1	0	1	0	0	0	1	1	1	1

配列番号	501	502	503	504	505	506	507	508	509	510
N=511	1	0	1	1	1	1	0	0	0	0

配列番号	511
N=511	0