

大きく歪んだ結晶に対するX線の動力的回折理論

II. グリーン関数法の応用

石田 秀信^{*1}

A Dynamical Diffraction Theory of X-rays for a Largely Distorted Crystal

II. Application of the Green's Function Method

Hidenobu ISHIDA^{*1}

^{*1} Department of Management and Information Science

The solution of the fundamental equation of the wave field for a largely distorted crystal is expressed, using the Green's function method. A Green's function is introduced in a tensor form for the Maxwell's equation for the electric field vector. Using Stratton's theorem, the wave field inside the crystal is expressed as an integral using the Green's function on the crystal surface. Furthermore, the Green's function is expressed as a sum of two functions referred as a forward transfer function and a backward one, the former of which mainly contributes the above surface integral. From this result, in the case that all significant wave components of the transmitted and other diffracted waves emerge from the exit crystal surface as in the Laue case diffraction, the wave field inside the crystal for an arbitrary incident wave is decided directly as an integral over the entrance crystal surface with the forward transfer Green's function.

Key Words : X-rays, Dynamical Diffraction, Distorted Crystal, Maxwell's equation, Green's function

1. はじめに

先の報告では大きく歪んだ結晶に対するX線の動力的回折に関する新しい理論を与えた⁽¹⁾。この理論では結晶内の波動場を振幅変調されたブロッホ波で表わし、その波動場の満足すべき基本方程式を電場に関するMaxwellの方程式から導いた。そこで、本論文では、その基本方程式の解を求めるため、グリーン関数法をつかった解法について報告する。グリーン関数を使ったX線の動力的理論は、古くは1960年代の量子力学的取扱の中で展開され、これを利用して電子線回折やX線回折における完全結晶内での波動場を求めたり⁽²⁾⁽³⁾、あるいは完全結晶や歪んだ結晶に対する散乱理論の展開にも利用された⁽⁴⁾⁽⁵⁾。その後、1970年代に入り、石田ら⁽⁶⁾は、古典的なマクスウェルの波動方程式に対するグリーン関数の主要解を完全結晶の場合で計算し、それがラウエケースの場合に結晶内に励起される波動場とよく一致することを示した。特に結晶面での境界条件を特に考慮せずに得られるグリーン関数の主要解で、ラウエの回折理論などで境界条件を考慮して決められるX線の波動場を直接導き出していることは特筆すべきことである。こうしたグリーン関数法の利用は、Maxwellの波動方程式をヘルムホルツ型方程式に帰着することで有用な結果が導かれたが、その一方で、Maxwellの波動方程式それ自体は非ヘルムホルツ型であって、直接に、かつ正確な方法でグリーン関数法を利用できるかどうかについては知られていない。そこで、本論文では、歪んだ結晶に対するX線動力的回折において、電場で記述したMaxwellの波動方程式に対して直接的にグリーン関数を定義し、そこから、先の報告で与えた基本方程式の解を構成する方法を示していくことにする。

* 原稿受付 2014 年 2 月 13 日

^{*1} 経営情報学科

E-mail: ishidah@fukui-ut.ac.jp

2. 基本方程式

結晶格子の歪みのない完全結晶あるいは結晶格子が歪んだ結晶内での動力学的な X 線回折において、X 線の波動場はその結晶格子に関して周期的あるいは準周期的な誘電率を用いた Maxwell 方程式で記述される。角周波数 ω の単色な X 線が結晶に入射し、それによって同じ角周波数をもつ X 線の波動場が励起されるとき、その波動場を電場 $\mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)$ で表すならば、その電場は次のような Maxwell 方程式の解である。

$$-\text{rot rot } \mathbf{E}(\mathbf{r}) + k^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) + k^2 \chi(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0 \quad (1)$$

ここで、 k は波数の 2π 倍で、 $k = \omega/c$ 、 c は光速、 χ は結晶の分極率で結晶内の場所の関数である。一般に結晶が歪んでいる場合には、その結晶内での任意の点 \mathbf{r} における格子の変位を $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ とすれば、歪んだ結晶に対する X 線の分極率は、

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} \chi_{\mathbf{g}} \exp\{i\mathbf{g} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{u}(\mathbf{r}))\} \quad (2)$$

で表される。ここで \mathbf{g} は逆格子ベクトルである。

先の報告⁽¹⁾では、歪んだ結晶の場合に対して波動場の透過波や回折波を振幅変調波として表した。

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} \mathbf{E}_{\mathbf{g}}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{E}_{\mathbf{g}}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{g}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}_{\mathbf{g}} \cdot \mathbf{r}), \quad \mathbf{k}_{\mathbf{g}} = \mathbf{k}_0 + \mathbf{g} \quad (3)$$

\mathbf{k}_0 は透過波の波動ベクトルである。そして、振幅関数 $\varphi_{\mathbf{g}}(\mathbf{r})$ や分極率の逆格子成分 $\chi_{\mathbf{g}} \exp\{-i\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})\}$ は緩やかに変化すると仮定して、一定レベル以上の高調波成分はカットした。すなわち、

$$\varphi_{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\kappa}) = 0, \quad \chi_{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\kappa}) = 0, \quad |\boldsymbol{\kappa}| > \kappa_0 \quad (4)$$

ここで、 $\kappa_0 = 2\pi/3a_{\max}$ で、 a_{\max} は完全結晶の単位胞を構成する三辺のうちもっとも長い辺の長さ、 $\varphi_{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\kappa})$ は $\varphi_{\mathbf{g}}(\mathbf{r})$ のフーリエ係数、そして、 $\chi_{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\kappa})$ は逆格子成分のフーリエ係数

$$\chi_{\mathbf{g}} \exp\{-i\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})\} = \int \chi_{\mathbf{g}}(\boldsymbol{\kappa}) \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}) \frac{d\boldsymbol{\kappa}}{(2\pi)^3} \quad (5)$$

である。式 (4) を仮定すれば、Maxwell 方程式 (1) から、透過波や回折波に対する次のような基本的な方程式が導かれる⁽¹⁾。

$$(-\text{rot rot} + k^2) \mathbf{E}_{\mathbf{g}}(\mathbf{r}) + k^2 \sum_{\mathbf{g}'} \chi_{\mathbf{g}-\mathbf{g}'} \exp\{i(\mathbf{g}-\mathbf{g}') \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{u}(\mathbf{r}))\} \mathbf{E}_{\mathbf{g}'}(\mathbf{r}) = 0 \quad (6)$$

3. Maxwell 方程式に対するグリーン関数

3.1 グリーン関数の定義

ここでのグリーン関数は、Maxwell の波動方程式 (1) に対して定義される。この方程式は一般の場合、ヘルムホルツ型でもなく、またスカラー場ではなくベクトル場に対する方程式である。もし、変数である電場が横波成分のみで縦波成分を含まなければ、方程式 (1) はヘルムホルツ型方程式となり、固定した空間座標系で考えれば電場ベクトルの x, y, z 成分別に独立したスカラー場の方程式に分離することができる。その結果、そのスカラー場に対するヘルムホルツ型方程式に対してグリーン関数を定義し、そのスカラー場に対するグリーン関数を使って、ベクトル場である結晶内の電場を表わす方法を考えることが出来る。しかし、結晶内の電場は微弱ではあるが縦波成分を含んでいるので純粋な横波ではなく、よく知られているスカラー場を扱ったヘルムホルツ型方程式に対するグリーン関数法は使えない。そこで、スカラー場を扱うグリーン関数の定理をベクトル場に拡張した Stratton の定理⁽⁷⁾を応用したグリーン関数法を考案した。

この方法では、グリーン関数はベクトル場を扱う波動方程式 (1) に対して直接的に定義され、それを使えば波動方程式の解の表示が可能となる。ところで、このグリーン関数はテンソルの形で定義されなければならない。なぜなら、波動方程式の微分演算子 rot rot はテンソル型の微分演算子だからである。以下に、その手順を示す。

まず、結晶空間に固定した 3 次元の直交座標系を任意に選び、その基底ベクトルの組を列ベクトルで

$$|e_1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |e_2\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |e_3\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (7)$$

で表す。ここで、列ベクトルの表記に、便宜上、ケットベクトルの表記法を使った。この座標系における電場 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ の座標成分を $E_i(\mathbf{r})$ ($i = 1, 2, 3$) とし、 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ を列ベクトルで表記すれば、

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} E_1(\mathbf{r}) \\ E_2(\mathbf{r}) \\ E_3(\mathbf{r}) \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^3 E_i(\mathbf{r}) |e_i\rangle \quad (8)$$

ところで、Maxwell 方程式 (1) は先に触れたように 3 次元ベクトル量に対する方程式で、しかも微分演算子はテンソル型であるので、グリーン関数は 3×3 の行列を使ったテンソルの形で表わすことにする。すなわち、

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \begin{bmatrix} G_{11}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') & G_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') & G_{13}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ G_{21}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') & G_{22}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') & G_{23}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ G_{31}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') & G_{32}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') & G_{33}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \end{bmatrix} = \sum_{i,j=1}^3 G_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |e_i\rangle \langle e_j| \quad (9)$$

ここで、 $|e_i\rangle \langle e_j|$ は単位ベクトル $|e_i\rangle$ と $|e_j\rangle$ のテンソル積で、 (i, j) 成分が 1、それ以外は 0、の 3 行 3 列の行列である。そして、 $\langle e_j|$ は $|e_j\rangle$ の転置ベクトル、すなわち、 $\langle e_j| = |e_j\rangle^T$ であって、ブラベクトル表記を使っている。このテンソルにおいて、第 1 列から 3 列までの各列に対して、列ベクトルをそれぞれ、

$$\mathbf{G}_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \begin{bmatrix} G_{11}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ G_{21}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ G_{31}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G}_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \begin{bmatrix} G_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ G_{22}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ G_{32}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G}_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \begin{bmatrix} G_{13}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ G_{23}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ G_{33}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \end{bmatrix} \quad (10)$$

として定義する。すなわち、式 (7)、式 (9) を使えば、 $\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij}$ であるから

$$\mathbf{G}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{k=1}^3 G_{ki}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |e_k\rangle = \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |e_i\rangle, \quad i = 1, 2, 3 \quad (11)$$

と表わすこともできる。この式 (11) で表わされた各列のグリーン関数ベクトルは、 $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$ では、Maxwell 方程式 (1) を満足するものとして、次のような方程式を満足する関数ベクトルであると定義する。

$$-\text{rot rot } \mathbf{G}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + k^2 \mathbf{G}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + k^2 \chi(\mathbf{r}) \mathbf{G}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |e_i\rangle, \quad i = 1, 2, 3 \quad (12)$$

この式の右辺の関数 $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ はよく知られた δ 関数である。このように、グリーン関数ベクトルを定義すると、式 (9) で表わしたグリーン関数テンソル自身は

$$-\text{rot rot } \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + k^2 \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + k^2 \chi(\mathbf{r}) \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{I}^{(3)} \quad (13)$$

を満足しなければならない。ここで、左辺の微分演算子はグリーン関数テンソルの列ベクトルに作用するものとする。そして、 $\mathbf{I}^{(3)}$ は 3 次元の単位行列で、

$$\mathbf{I}^{(3)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^3 |e_i\rangle \langle e_i| \quad (14)$$

である。この式の最後の等式は、基底ベクトルの完全性から一般的に成り立つ関係式である。

このグリーン関数テンソルには, 付録 A.1 に示すように, 次のような相反性

$$G_{ij}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = G_{ji}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad \text{or} \quad \mathbf{G}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = \mathbf{G}^T(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (15)$$

が成り立っている. ここで, \mathbf{G}^T は \mathbf{G} の転置行列である. これは, グリーン関数テンソルに対し, その変数 \mathbf{r} と \mathbf{r}' を交換すると, 自分自身の転置行列に等しくなることを意味する. この相反性を利用すれば, 付録 A.1 に示すように, グリーン関数と結晶内の波動場との間に, 次のような関係が成り立つことを示すことが出来る.

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \int_S \left\{ \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial n'} \mathbf{E}(\mathbf{r}') - \left(\frac{\partial}{\partial n'} \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right) \mathbf{E}(\mathbf{r}') + (\mathbf{E}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{n}') \operatorname{div} \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right. \\ \left. - (\operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{r}')) \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{n}' \right\} dS' \end{aligned} \quad (16)$$

ここで, S は結晶の表面, \mathbf{n}' は表面 S に対して外側に垂直な単位ベクトルである. また, $\operatorname{div} \mathbf{G}$ は列ベクトルでその i 番目 ($i=1,2,3$) の成分は \mathbf{G} の第 i 行の行ベクトルに関する発散である. 後の章でグリーン関数を使った解の表示について詳細な議論をするときにこの式 (16) を利用する.

3.2 結晶波動場内でのグリーン関数の展開の一般形

式 (13) で定義されるグリーン関数テンソルは主変数 \mathbf{r} と補助変数 \mathbf{r}' の二つの空間変数を持つ. そのテンソルの各成分 $G_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ に関してフーリエ展開したとき, 結晶空間を無限大と仮定のもと, 一般にはこれら二つの変数に関する二重のフーリエ展開で表わされる.

$$G_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int \int G_{ij}(\mathbf{K}, \mathbf{K}') \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{K}' \cdot \mathbf{r}') \frac{d\mathbf{K}}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{K}'}{(2\pi)^3} \quad (17)$$

さらに, \mathbf{K}, \mathbf{K}' を入射波の波動ベクトル \mathbf{k}_0 と逆格子ベクトルおよび残りのベクトルに分解して, $\mathbf{K} = (\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}) + \boldsymbol{\kappa}$, $\mathbf{K}' = (\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}') + \boldsymbol{\kappa}'$ とおき, 積分空間を逆格子に関する和と, 逆格子の単位胞の積分領域とに分けて考えれば, 式 (17) は次のように書き換えられる.

$$G_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{g}, \mathbf{g}'} \iint_{V_c^*} G_{ij}(\mathbf{K}_g, \mathbf{K}_{g'}) \exp\{i\mathbf{K}_g \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{K}_{g'} \cdot \mathbf{r}'\} \frac{d\boldsymbol{\kappa}}{(2\pi)^3} \frac{d\boldsymbol{\kappa}'}{(2\pi)^3} \quad (18)$$

ここで,

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_g = (\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}) + \boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}_g + \boldsymbol{\kappa}, \quad \mathbf{K}' = \mathbf{K}_{g'} = (\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}') + \boldsymbol{\kappa}' = \mathbf{k}_{g'} + \boldsymbol{\kappa}' \quad (19)$$

と置いた. そこで, このフーリエ係数についても, テンソルで取り扱い

$$\mathbf{G}(\mathbf{K}_g, \mathbf{K}_{g'}) = \begin{bmatrix} G_{11}(\mathbf{K}_g, \mathbf{K}_{g'}) & G_{12}(\mathbf{K}_g, \mathbf{K}_{g'}) & G_{13}(\mathbf{K}_g, \mathbf{K}_{g'}) \\ G_{21}(\mathbf{K}_g, \mathbf{K}_{g'}) & G_{22}(\mathbf{K}_g, \mathbf{K}_{g'}) & G_{23}(\mathbf{K}_g, \mathbf{K}_{g'}) \\ G_{31}(\mathbf{K}_g, \mathbf{K}_{g'}) & G_{32}(\mathbf{K}_g, \mathbf{K}_{g'}) & G_{33}(\mathbf{K}_g, \mathbf{K}_{g'}) \end{bmatrix} \quad (20)$$

を導入すれば, 式 (13) で定義した $\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ は, 式 (18) を使い次のようなフーリエ展開で表わすことができる.

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{g}, \mathbf{g}'} \iint_{V_c^*} \mathbf{G}(\mathbf{K}_g, \mathbf{K}_{g'}) \exp\{i\mathbf{K}_g \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{K}_{g'} \cdot \mathbf{r}'\} \frac{d\boldsymbol{\kappa}}{(2\pi)^3} \frac{d\boldsymbol{\kappa}'}{(2\pi)^3} \quad (21)$$

ここまでは, 結晶空間は任意に与えた 1 つの直交座標系に固定した基底ベクトルで考えたが, ここで, 平面波ごとに直交座標系の基底ベクトルを与えることを考える. すなわち, 平面波ごとに互いに独立な 3 つの偏極ベクトルを新たな直交座標系の基底ベクトルとして選ぶ. 具体的には, 平面波 $\mathbf{E}_g(\boldsymbol{\kappa}) \exp\{i\mathbf{K}_g \cdot \mathbf{r}\}$ に対し, その波の互いに独立な偏極ベクトルを $|e_g^1(\boldsymbol{\kappa})\rangle$, $|e_g^2(\boldsymbol{\kappa})\rangle$, $|e_g^3(\boldsymbol{\kappa})\rangle$ とし, 最初の二つの偏極ベクトル $|e_g^1(\boldsymbol{\kappa})\rangle$, $|e_g^2(\boldsymbol{\kappa})\rangle$ は横波偏光を表わす単位ベクトルで, 波の進行方向 \mathbf{K}_g に垂直, そして, 残る三番目 $|e_g^3(\boldsymbol{\kappa})\rangle$ は縦波偏光を表わし \mathbf{K}_g

に平行とする. この三つの偏極ベクトル $|e_g^1(\kappa)\rangle$, $|e_g^2(\kappa)\rangle$, $|e_g^3(\kappa)\rangle$ の組は, 直交空間の基底ベクトルとして直交性・完全性を備えており, 式 (14) で与えられる関係, すなわち,

$$I^{(3)} = \sum_{\mu=1}^3 |e_g^\mu(\kappa)\rangle \langle e_g^\mu(\kappa)| \quad (22)$$

を満たす. さらに, 式 (22) をつかって, 式 (20) で与えたフーリエ係数のテンソルを各平面波で定義した基底ベクトルを基準としたテンソルへと改めるために, 次のように変換する.

$$G(K_g, K_{g'}) = I^{(3)} G(K_g, K_{g'}) I^{(3)} = \sum_{\mu=1}^3 |e_g^\mu(\kappa)\rangle \langle e_g^\mu(\kappa)| G(K_g, K_{g'}) \sum_{\nu=1}^3 |e_{g'}^\nu(\kappa')\rangle \langle e_{g'}^\nu(\kappa')|$$

上式の右辺を整理すれば,

$$G(K_g, K_{g'}) = \sum_{\mu=1}^3 \sum_{\nu=1}^3 G_{gg'}^{\mu\nu}(\kappa, \kappa') |e_g^\mu(\kappa)\rangle \langle e_{g'}^\nu(\kappa')| \quad (23)$$

ここで,

$$G_{gg'}^{\mu\nu}(\kappa, \kappa') = \langle e_g^\mu(\kappa) | G(K_g, K_{g'}) | e_{g'}^\nu(\kappa') \rangle \quad (24)$$

式 (23) を式 (21) に代入すれば,

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{g, g'} \sum_{\mu, \nu=1}^3 \iint_{V_c^*} G_{gg'}^{\mu\nu}(\kappa, \kappa') \exp\{iK_g \cdot \mathbf{r} - iK_{g'} \cdot \mathbf{r}'\} |e_g^\mu(\kappa)\rangle \langle e_{g'}^\nu(\kappa')| \frac{d\kappa}{(2\pi)^3} \frac{d\kappa'}{(2\pi)^3} \quad (25)$$

これが, グリーン関数を平面波の和としてフーリエ展開したときの一般的な形である. この展開式 (25) を使えば, 直接それを定義式 (13) に代入し, グリーン関数のフーリエ成分が満たすべき方程式を導くことができる. しかし, すでに, Maxwell の波動方程式から, 透過波や回折波の満たすべき基本方程式 (6) が導かれることが前の報告⁽¹⁾で示されているので, グリーン関数についても Maxwell 方程式の代わりに基本方程式を使って議論を進めていくことにする.

4. 基本方程式に対するグリーン関数

電場に対しては, 透過波や回折波の振幅, および格子歪みに対して式 (4) の仮定を行えば, 波動方程式 (1) より, 基本方程式 (6) が導かれる⁽¹⁾. グリーン関数に対しても, その列ベクトルは, 式 (12) の定義式よりわかるように点 $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ 以外では電場とまったく同じ方程式を満たす. それゆえ, 電場と同様にグリーン関数に対しても, その列ベクトルの波動を “緩やかに変化する” 振幅変調波と見なせば, 点 $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ 以外では電場とまったく同じ基本方程式を満たす. このことを, 数式を使って具体的な形で定式化すると以下ようになる.

すなわち, 展開式 (25) で示されるグリーン関数に対して, その波動を振幅変調波の形で次のように表す.

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{g, g'} G_{gg'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad G_{gg'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \psi_{gg'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \exp\{i\mathbf{k}_g \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{k}_{g'} \cdot \mathbf{r}'\} \quad (26)$$

ここで,

$$\psi_{gg'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\mu=1}^3 \sum_{\nu=1}^3 \iint_{V_c^*} G_{gg'}^{\mu\nu}(\kappa, \kappa') \exp\{i\kappa \cdot \mathbf{r} - i\kappa' \cdot \mathbf{r}'\} |e_g^\mu(\kappa)\rangle \langle e_{g'}^\nu(\kappa')| \frac{d\kappa}{(2\pi)^3} \frac{d\kappa'}{(2\pi)^3} \quad (27)$$

式 (27) がグリーン関数を式 (26) のように逆格子ベクトルで二重に級数展開したときの (g, g') 成分の回折波の振幅を表わす. この振幅に対して, 電場に対する行った仮定式 (4) と同様の仮定を行う. すなわち,

$$\mathbf{G}_{gg'}^{\mu\nu}(\mathbf{\kappa}, \mathbf{\kappa}') = 0, \quad |\mathbf{\kappa}| > \kappa_0 \text{ or } |\mathbf{\kappa}'| > \kappa_0, \quad (28)$$

なる仮定を設定する. この式において, 第二変数 $\mathbf{\kappa}'$ について第一変数 $\mathbf{\kappa}$ と同じ仮定をするのは, 式 (15) に示すグリーン関数の相反性によっている. このような仮定を置くと, Maxwell の方程式 (1) から基本方程式 (6) を導いたのと同様にして, 式 (13) から基本方程式に対応した方程式を導くことができる. すなわち, ここであらかじめ式 (13) の右辺の δ 関数項を, グリーン関数に対して式 (25) の展開表現を得たのと同様の方法で,

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{I}^{(3)} = \sum_{g, g'} \Delta_{gg'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad \Delta_{gg'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \xi_{gg'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \exp\{i\mathbf{k}_g \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{k}_{g'} \cdot \mathbf{r}'\} \quad (29)$$

と変形しておく. ここで,

$$\xi_{gg'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \sum_{\mu, \nu=1}^3 \iint_{V_c^*} \delta_{\mu\nu} \delta_{gg'} \delta(\mathbf{\kappa} - \mathbf{\kappa}') \exp\{i\mathbf{\kappa} \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{\kappa}' \cdot \mathbf{r}'\} |e_g^\mu(\mathbf{\kappa}) \langle e_{g'}^\nu(\mathbf{\kappa}') | \mathbf{d}\mathbf{\kappa} \frac{d\mathbf{\kappa}'}{(2\pi)^3} \quad (30)$$

そして, 式 (13) に式 (26), 式 (29) および式 (2) を代入すれば,

$$\begin{aligned} & \sum_g \sum_{g'} \left\{ (-\text{rot rot} + k^2) \mathbf{G}_{gg'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + k^2 \sum_{g''} \chi_{g-g''} \exp\{i(\mathbf{g} - \mathbf{g}'') \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{u}(\mathbf{r}))\} \mathbf{G}_{g''g'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right\} \\ & = - \sum_g \sum_{g'} \Delta_{gg'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \end{aligned} \quad (31)$$

を得る. 式 (31) に対して, 式 (28) の仮定をおよび, 格子ひずみに関する式 (4) の第二式の仮定を行えば, 先の報告⁽¹⁾で電場に対して導いたのと同様にして, 両辺の和の中の各項に対し, それぞれ右辺と左辺が等しいことが導かれる. このとき,

$$(-\text{rot rot} + k^2) \mathbf{G}_{gg'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + k^2 \sum_{g''} \chi_{g-g''} \exp\{i(\mathbf{g} - \mathbf{g}'') \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{u}(\mathbf{r}))\} \mathbf{G}_{g''g'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\Delta_{gg'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (32)$$

これがグリーン関数が先に与えた電場に基本方程式に対応する形で満たすべき方程式である. この方程式についても, 電場に対して行ったのと同様に, 電気分極項に現れるグリーン関数をその横波成分に置き換えることができる. なぜなら, 点 $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ 以外では電場と同様に, $\text{div}\{(1 + \chi)\mathbf{G}\} = 0$ が成り立ち, グリーン関数 \mathbf{G} を

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathbf{G}^{(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \mathbf{G}^{(l)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (33)$$

で横波成分 $\mathbf{G}^{(t)}$ と縦波成分 $\mathbf{G}^{(l)}$ とに分けるならば, その横波成分と縦波成分について, $\text{div } \mathbf{G}^{(t)} = 0, \text{rot } \mathbf{G}^{(l)} = 0$ が満足されることから, $\text{div}\{(1 + \chi)\mathbf{G}\} = 0$ より $\text{div}\{\mathbf{G}^{(t)} + \chi\mathbf{G}\} = 0$ が導かれる. その結果, グリーン関数の縦波成分 $\mathbf{G}^{(l)}$ の大きさは, 全体の \mathbf{G} の大きさの χ 程度, すなわち, 10^{-5} 程度であって無視できるくらいのものであることがわかる. それゆえ, 基本方程式 (32) 式において, 左辺第二項の和の中にあるグリーン関数をその横波成分で近似し, $\text{rot rot} = -\nabla^2 + \text{grad div}$ を利用して左辺第一項を改めれば, 次のような形に表すことが出来る.

$$\nabla^2 \mathbf{G}_{gg'}^{(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + k^2 \mathbf{G}_{gg'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + k^2 \sum_{g''} \chi_{g-g''} \exp\{i(\mathbf{g} - \mathbf{g}'') \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{u}(\mathbf{r}))\} \mathbf{G}_{g''g'}^{(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\Delta_{gg'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (34)$$

ここで, $\mathbf{G}_{gg'}^{(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ は, グリーン関数の (g, g') 番目の回折波成分 $\mathbf{G}_{gg'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ の横波成分で, $\text{div } \mathbf{G}_{gg'}^{(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0$ を満足する. その横波成分を具体的に表すと, それは, グリーン関数フーリエ展開式 (25) の偏光成分に関する和において, 第 3 行($\mu = 3$)の成分を 0 として得られる関数テンソルが横波成分で, それは次のように表される.

$$G_{gg'}^{(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\mu=1}^2 \sum_{\nu=1}^3 \iint G_{gg'}^{\mu\nu}(\mathbf{\kappa}, \mathbf{\kappa}') \exp\{i\mathbf{K}_g \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{K}_{g'} \cdot \mathbf{r}'\} |e_g^\mu(\mathbf{\kappa})\rangle \langle e_{g'}^\nu(\mathbf{\kappa}')| \frac{d\mathbf{\kappa}}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{\kappa}'}{(2\pi)^3} \quad (35)$$

式 (26), (27), (29), (30), (5) を式 (34) に代入すれば, 式 (28) および式 (4) の第二式の仮定のもとで, グリーン関数のフーリエ成分に関する方程式を得ることができる. その結果を示すと以下のようになる.

$$\begin{aligned} & -K_g^2 G_{gg'}^{(t)\nu}(\mathbf{\kappa}, \mathbf{\kappa}') + k^2 G_{gg'}^\nu(\mathbf{\kappa}, \mathbf{\kappa}') + k^2 \sum_h \int \chi_{g-h}(\mathbf{\kappa}'') G_{hg'}^{(t)\nu}(\mathbf{\kappa} - \mathbf{\kappa}'', \mathbf{\kappa}') \frac{d\mathbf{\kappa}''}{(2\pi)^3} \\ & = -(2\pi)^3 \delta_{gg'} \delta(\mathbf{\kappa} - \mathbf{\kappa}') |e_g^\nu(\mathbf{\kappa})\rangle, \quad \nu = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (36)$$

ここで,

$$G_{gg'}^\nu(\mathbf{\kappa}, \mathbf{\kappa}') = \sum_{\mu=1}^2 G_{gg'}^{\mu\nu}(\mathbf{\kappa}, \mathbf{\kappa}') |e_g^\mu(\mathbf{\kappa})\rangle, \quad G_{gg'}^{(t)\nu}(\mathbf{\kappa}, \mathbf{\kappa}') = \sum_{\mu=1}^2 G_{gg'}^{\mu\nu}(\mathbf{\kappa}, \mathbf{\kappa}') |e_g^\mu(\mathbf{\kappa})\rangle \quad (37)$$

である. この方程式 (36) の左辺第二項には, グリーン関数の縦波成分が含まれる. そこで, 式 (36) の両辺に, 偏極ベクトル $\langle e_g^\mu(\mathbf{\kappa})|$ ($\mu=1, 2$) を左から掛け, 偏極ベクトルどうしの内積をとることで, 縦波成分 ($\mu=3$) を除くことが出来る. その結果, 横波成分に関する基本式

$$\begin{aligned} & \{k^2(1 + \chi_0) - K_g^2\} G_{gg'}^{\mu\nu}(\mathbf{\kappa}, \mathbf{\kappa}') + k^2 \sum_{h \neq g} \sum_{\mu'=1}^2 \int \chi_{g-h}(\mathbf{\kappa}'') G_{hg'}^{\mu'\nu}(\mathbf{\kappa} - \mathbf{\kappa}'', \mathbf{\kappa}') \langle e_g^\mu(\mathbf{\kappa})| e_h^{\mu'}(\mathbf{\kappa} - \mathbf{\kappa}'') \rangle \frac{d\mathbf{\kappa}''}{(2\pi)^3} \\ & = -(2\pi)^3 \delta_{gg'} \delta_{\mu\nu} \delta(\mathbf{\kappa} - \mathbf{\kappa}'), \quad \mu = 1, 2, \nu = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (38)$$

が得られる. 横波成分だけを決定するのであれば, この決定式だけで十分である. なお, 式 (36) の両辺に, 偏極ベクトル $\langle e_g^3(\mathbf{\kappa})|$ を掛ければ, グリーン関数の縦波成分に関する基本式が得られるが, 以後の議論では使用しないので明示しない. また, 後の章で触れるが, 式 (38) において, $\nu = 3$ の場合は特に考える必要はない.

5. 前方伝達グリーン関数と後方伝達グリーン関数

グリーン関数 $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ を波動方程式を満たす波動とみるならば, そこでは, 点 \mathbf{r}' から外側へ向かって広がっていく波動が点 \mathbf{r} での波動場に影響を与えているはずである. いま, 式 (21) で示すグリーン関数の $(\mathbf{K}_g, \mathbf{K}_{g'})$ 成分の平面波の位相項を見てみると, それは, 次のような形になっていることがわかる.

$$i\mathbf{K}_g \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{K}_{g'} \cdot \mathbf{r}' = \frac{i}{2} (\mathbf{K}_g + \mathbf{K}_{g'}) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \frac{i}{2} (\mathbf{K}_g - \mathbf{K}_{g'}) \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{r}')$$

もし, この平面波が点 \mathbf{r}' からのその周囲への波の伝搬の役割を担うとすれば, この式から示唆されるように, 点 \mathbf{r}' から点 \mathbf{r} への波動の影響は, $(\mathbf{K}_g + \mathbf{K}_{g'})/2$ の方向への波面の進みの形で影響を受けていると解釈できる.

そこで, 位相因子 $(\mathbf{K}_g + \mathbf{K}_{g'}) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ の符号でもって, 式 (21) に示すグリーン関数のフーリエ積分の積分領域を二分し, 分割したそれぞれの積分領域の積分で得られる関数を定義する. すなわち, グリーン関数 $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ の主変数を \mathbf{r} , そして \mathbf{r}' を補助変数としたとき,

$$\eta = (\mathbf{K}_g + \mathbf{K}_{g'}) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (39)$$

を定義して, η の符号で積分領域を二分し, グリーン関数を二つの関数の和で表わす.

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G^F(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + G^B(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (40)$$

ここで,

$$G^F(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \sum_{\mathbf{g}, \mathbf{g}'} \iint_{V_c^*(\eta > 0)} G(\mathbf{K}_g, \mathbf{K}'_{g'}) \exp\{i\mathbf{K}_g \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{K}'_{g'} \cdot \mathbf{r}'\} \frac{d\mathbf{\kappa}}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{\kappa}'}{(2\pi)^3} \quad (41)$$

$$G^B(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \sum_{\mathbf{g}, \mathbf{g}'} \iint_{V_c^*(\eta < 0)} G(\mathbf{K}_g, \mathbf{K}'_{g'}) \exp\{i\mathbf{K}_g \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{K}'_{g'} \cdot \mathbf{r}'\} \frac{d\mathbf{\kappa}}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{\kappa}'}{(2\pi)^3} \quad (42)$$

この式 (41) および式 (42) で定義した二つの関数は、点 \mathbf{r}' から発する波動の影響を受ける領域が異なる。前者は $(\mathbf{K} + \mathbf{K}') \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ が正の領域で影響を受け、後者は反対に負の領域で影響を受ける。そこで、これら二つの関数について、 $G^F(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ を前方伝達グリーン関数、そして、 $G^B(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ を後方伝達グリーン関数と呼ぶことにする。これら二つの関数の間には、式 (15) のグリーン関数の相反性から次のような関係が成り立つことが示される。

$$G^F(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = [G^B(\mathbf{r}, \mathbf{r}')]^T \quad (43)$$

グリーン関数を式 (26) で示すように振幅変調波の重ね合わせとして表示するならば、これに対応して前方伝達グリーン関数 $G^F(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ もまた、同様に、次のように振幅変調波の重ね合わせとして表わすことができる。

$$G^F(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \exp\{i\mathbf{k}_0 \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')\} \sum_{\mathbf{g}, \mathbf{g}'} \psi_{gg'}^F(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \exp\{i\mathbf{g} \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{g}' \cdot \mathbf{r}'\} \quad (44)$$

ここで、

$$\psi_{gg'}^F(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\mu, \nu=1}^3 \iint_{V_c^*(\eta > 0)} G_{gg'}^{\mu\nu}(\mathbf{\kappa}, \mathbf{\kappa}') \exp\{i\mathbf{\kappa} \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{\kappa}' \cdot \mathbf{r}'\} |e_g^\mu(\mathbf{\kappa})\rangle \langle e_{g'}^\nu(\mathbf{\kappa}')| \frac{d\mathbf{\kappa}}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{\kappa}'}{(2\pi)^3} \quad (45)$$

である。一方、後方伝達グリーン関数について、振幅変調波の重ね合わせとして表すならば、それは式(43) に示す交換関係を利用すれば、次のように表すことができる。

$$G^B(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \exp\{-i\mathbf{k}_0 \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')\} \sum_{\mathbf{g}, \mathbf{g}'} [\psi_{g'g}^F(\mathbf{r}', \mathbf{r})]^T \exp\{-i\mathbf{g} \cdot \mathbf{r} + i\mathbf{g}' \cdot \mathbf{r}'\} \quad (46)$$

6. 解の表示

6.1 境界条件

結晶内の波動場を決めるには、入射波を含む、結晶の外の波動場との境界条件を考える必要がある。結晶内の X 線の波動場は、その結晶に入射する入射波によって励起され、そして、励起された透過波や複数の回折波は結晶の外に出ていくが、結晶外の波動場はすべて横波である。こうした入射波や回折によって出射した波も合わせて一つの波動場 $\mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r})$ で表す。この $\mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r})$ もまた、結晶内の波動場と同様に振幅変調波で表わすことにすれば、結晶外の波は横波であることを考慮して、次のように表す。

$$\mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} \mathbf{E}_g^{(e)}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{E}_g^{(e)}(\mathbf{r}) = \Phi_g^{(e)}(\mathbf{r}) \exp\{i\mathbf{k}_g \cdot \mathbf{r}\}, \quad \text{div} \mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r}) = 0 \quad (47)$$

次に、結晶境界面を S とし、結晶内の波動場 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ との境界条件を与える。全反射などが無視できる場合を考え、波の連続性および法線方向 \mathbf{n} の微分の連続性がよく成り立つと仮定し、次のようにその境界条件を与える。

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_s) = \mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r}_s), \quad \frac{\partial}{\partial n} \mathbf{E}(\mathbf{r}_s) = \frac{\partial}{\partial n} \mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r}_s), \quad \mathbf{r}_s \in S \quad (48)$$

このとき、 $\text{div} \mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r})=0$ と式 (48) の境界条件とから、境界面上で $\text{div} \mathbf{E}(\mathbf{r})=0$ が導かれるから、式 (16) より

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \int_S \left\{ \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial n'} \mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r}') - \left(\frac{\partial}{\partial n'} \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right) \mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r}') + (\mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{n}') \operatorname{div} \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right\} dS' \quad (49)$$

式 (49) について, さらに詳しい議論をするために, 電場やグリーン関数を横波成分と縦波成分とに分けて考える. 電場 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ については, 電場を横波成分 $\mathbf{E}^{(t)}(\mathbf{r})$ と縦波成分 $\mathbf{E}^{(l)}(\mathbf{r})$ との和で表わす.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{(t)}(\mathbf{r}) + \mathbf{E}^{(l)}(\mathbf{r}), \quad \operatorname{div} \mathbf{E}^{(t)}(\mathbf{r}) = 0, \operatorname{rot} \mathbf{E}^{(l)}(\mathbf{r}) = 0 \quad (50)$$

そして, グリーン関数 $\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ についても式 (33) に示すように横波成分 $\mathbf{G}^{(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ と縦波成分 $\mathbf{G}^{(l)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ とに分ける. グリーン関数の横波, 縦波条件は下記のとおりである.

$$\operatorname{div} \mathbf{G}_i^{(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0, \operatorname{rot} \mathbf{G}_i^{(l)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0, \quad i=1,2,3 \quad \text{or} \quad \operatorname{div} \mathbf{G}^{(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0, \operatorname{rot} \mathbf{G}^{(l)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0 \quad (51)$$

このように区別すると, $\mathbf{E}^{(t)}(\mathbf{r})$ と $\mathbf{E}^{(l)}(\mathbf{r})$ について, 式(49)より, それぞれの成分別の表示式が得られる.

$$\mathbf{E}^{(t)}(\mathbf{r}) = \int_S \left\{ \mathbf{G}^{(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial n'} \mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r}') - \left(\frac{\partial}{\partial n'} \mathbf{G}^{(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right) \mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r}') \right\} dS' \quad (52)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^{(l)}(\mathbf{r}) = \int_S \left\{ \mathbf{G}^{(l)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial n'} \mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r}') - \left(\frac{\partial}{\partial n'} \mathbf{G}^{(l)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right) \mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r}') \right. \\ \left. + (\mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{n}') \operatorname{div} \mathbf{G}^{(l)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right\} dS' \end{aligned} \quad (53)$$

前章ですでに述べたように, 縦波成分 $\mathbf{G}^{(l)}$ の大きさは, \mathbf{G} 全体の大きさ, すなわち, $\mathbf{G}^{(t)}$ の大きさに比べて非常に小さな値である. それゆえ, 式 (53) より電場の縦波成分 $\mathbf{E}^{(l)}$ も非常に小さな値をとるので, 以後無視する.

その結果として, 結晶内の波動場は, 式 (52) で表わされる電場の横波成分で実質決まってくる. ところで, 式 (52) において, 結晶の外の波 $\mathbf{E}^{(e)}$ は横波であるということから, 式 (35) を用いて, 式 (52) の積分項の因子どうしの積を実行する場合, 式 (38) に示す $v = 3$ の偏光成分項は計算に不要な項である. これは, 結晶外の波動場 $\mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r})$ は横波であることから, 一般的に次のような形で表わすことができるからである.

$$\mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r}) = \sum_g \sum_{\mu=1}^2 \int_{V_c^*} E_g^{(e)\mu}(\mathbf{\kappa}) \exp\{i\mathbf{K}_g \cdot \mathbf{r}\} |e_g^\mu(\mathbf{\kappa})\rangle \frac{d\mathbf{\kappa}}{(2\pi)^3} = \sum_g \int_{V_c^*} \mathbf{E}_g^{(e)}(\mathbf{\kappa}) \exp\{i\mathbf{K}_g \cdot \mathbf{r}\} \frac{d\mathbf{\kappa}}{(2\pi)^3} \quad (54)$$

したがって, 式 (52) の右辺の積分項に式 (35), (54) を代入したときグリーン関数と電場の係数間の演算は,

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & 0 \\ A_{21} & A_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (55)$$

で示す左辺のタイプの計算となるが, これを右辺のように行列 \mathbf{A} の第 3 列を 0 と置いてしまっても結果にはなら影響を及ぼさない. このことは, グリーン関数の横波成分 $\mathbf{G}^{(t)}$ のフーリエ係数のテンソルは, 式 (55) の右辺の行列 \mathbf{A} が示すように, 実質 2 行 2 列の行列に還元される. すなわち, $\mathbf{G}^{(t)}$ のフーリエ展開として

$$\mathbf{G}^{(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{g, g'} \sum_{\mu=1}^2 \sum_{v=1}^2 \iint_{V_c^*} G_{gg'}^{\mu\nu}(\mathbf{\kappa}, \mathbf{\kappa}') \exp\{i\mathbf{K}_g \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{K}_{g'} \cdot \mathbf{r}'\} |e_g^\mu(\mathbf{\kappa})\rangle \langle e_{g'}^\nu(\mathbf{\kappa}')| \frac{d\mathbf{\kappa}}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{\kappa}'}{(2\pi)^3} \quad (56)$$

を式 (35) の代わりに用いてもよいことを意味する. このことから, $G_{gg'}^{\mu\nu}(\mathbf{\kappa}, \mathbf{\kappa}')$ を決定する方程式 (38) で $v = 3$ の場合の方程式は特に必要ないことが示唆される.

結晶が無限大に広がる二つの曲面 Γ_1 と Γ_2 に挟まれる領域にある場合, 式 (52) は,

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \int_{\Gamma_1 + \Gamma_2} \left\{ \mathbf{G}^{(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial n'} \mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r}') - \left(\frac{\partial}{\partial n'} \mathbf{G}^{(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right) \mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r}') \right\} dS' \quad (57)$$

と表すことができる. ここで左辺は, $\mathbf{E}(\mathbf{r}) \cong \mathbf{E}^{(t)}(\mathbf{r})$ ゆえ, $\mathbf{E}^{(t)}(\mathbf{r})$ を $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ で置き換えた. 前章に述べたように, この式の右辺の積分に現れているグリーン関数は式 (40) に示すように前方伝達関数と後方伝達関数の和で表わされる. そして, 前方伝達関数は, 式 (41) が示すように波動ベクトルが \mathbf{k}_0 や $(\mathbf{k}_0 + \mathbf{g})$ で表される振幅変調された透過波や複数の回折波からなっているが, 後方伝達関数は式 (42) が示すように波動ベクトルが $-\mathbf{k}_0$ や $-(\mathbf{k}_0 + \mathbf{g})$ で表される振幅変調された透過波や複数の回折波からなっている. その一方で電場 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ は式 (3) で示すように, 波動ベクトルが \mathbf{k}_0 や $(\mathbf{k}_0 + \mathbf{g})$ で表される透過波や複数の回折波からなる. したがって, 後方伝達グリーン関数とこの電場の積を式 (57) に従って結晶表面で積分しても, 後方伝達関数と電場の位相が合わないため, 積分への寄与は小さい. そこで後方伝達グリーン関数を式 (57) の積分項から省略する. このとき, 式 (57) は次のようになる.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \int_{\Gamma_1 + \Gamma_2} \left\{ \mathbf{G}^{F(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial n'} \mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r}') - \left(\frac{\partial}{\partial n'} \mathbf{G}^{F(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right) \mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r}') \right\} dS' \quad (58)$$

ここで, $\mathbf{G}^{F(t)}$ は, 前方伝達関数 \mathbf{G}^F の横波成分で, 式 (56) でフーリエ積分の領域を式 (39) で示される η の符号が正の領域に制限したもので与えられる. すなわち

$$\mathbf{G}^{F(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{g}, \mathbf{g}'} \sum_{\mu, \nu=1}^2 \iint_{V_c^*(\eta>0)} G_{gg'}^{\mu\nu}(\mathbf{\kappa}, \mathbf{\kappa}') \exp\{i\mathbf{K}_g \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{K}_{g'}' \cdot \mathbf{r}'\} |e_g^\mu(\mathbf{\kappa})\rangle \langle e_{g'}^\nu(\mathbf{\kappa}')| \frac{d\mathbf{\kappa}}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{\kappa}'}{(2\pi)^3} \quad (59)$$

で表される. 式 (58) の右辺に式 (47) および式 (59) を代入し, 左辺に式 (3) を代入して, 結晶内の波動場を電場の透過波や回折波について個別に書き直せば,

$$\mathbf{E}_g(\mathbf{r}) = \sum_{g'} \int_{\Gamma_1 + \Gamma_2} \left\{ \mathbf{G}_{gg'}^{F(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \mathbf{E}_{g'}^{(e)}(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial \mathbf{G}_{gg'}^{F(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \mathbf{E}_{g'}^{(e)}(\mathbf{r}') \right\} dS' \quad (60)$$

ここで,

$$\mathbf{G}_{gg'}^{F(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\mu, \nu=1}^2 \iint_{V_c^*(\eta>0)} G_{gg'}^{\mu\nu}(\mathbf{\kappa}, \mathbf{\kappa}') \exp\{i\mathbf{K}_g \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{K}_{g'}' \cdot \mathbf{r}'\} |e_g^\mu(\mathbf{\kappa})\rangle \langle e_{g'}^\nu(\mathbf{\kappa}')| \frac{d\mathbf{\kappa}}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{\kappa}'}{(2\pi)^3} \quad (61)$$

式 (60) の右辺の積分項に現れる結晶外の波 $\mathbf{E}_g^{(e)}$ は, 入射波 ($\mathbf{g} = \mathbf{0}$) 以外はすべて未知の量であるので, 一般に式 (60) は積分方程式となっている. しかし, 次に述べる場合は, 式 (60) が直接, 結晶内の波動場を示す.

6.2 ラウエケースなど, すべての透過波, 回折波が結晶裏面より出射する場合

ここでは, 入射 X 線によって結晶内に励起される透過波や複数の回折波の主なものは, すべて, 入射波の入射する結晶表面とは反対側の結晶裏面から透過波とともに出射していくような回折の場合を取り上げる. 透過波と 1 つの回折波のみが有意な強度をもつ二波近似では, このような回折の場合をラウエケースと呼んでいる. 今の場合, 多波の回折の場合を含め, 上に述べた回折の場合が成立する条件は, 式 (39) の η の符号との関連で, 結晶内の任意の点 \mathbf{r} に対して, X 線が入射する側の結晶表面を Γ_1 とし, 反対側の結晶裏面を Γ_2 としたとき,

$$(\mathbf{K}_g + \mathbf{K}_{g'}') \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}'[P]) > 0, \quad (\mathbf{K}_g + \mathbf{K}_{g'}') \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}'[Q]) < 0, \quad \forall P \in \Gamma_1, \quad \forall Q \in \Gamma_2 \quad (62)$$

が成立していることである. この条件式が透過波や有意に起こっている回折波のすべてに対して成り立っていることが必要である. \mathbf{K}_g や $\mathbf{K}_{g'}'$ の値は, 式 (19) で示すように $\mathbf{K}_g = \mathbf{k}_0 + \mathbf{g} + \mathbf{\kappa}$, $\mathbf{K}_{g'}' = \mathbf{k}_0 + \mathbf{g}' + \mathbf{\kappa}'$ と表わされ, $\mathbf{\kappa}$ や $\mathbf{\kappa}'$ は波の伝搬方向 $\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}$, $\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}'$ を中心とした波動ベクトルの広がりに対応する分度, ゆっくりと変化する変調波の振幅の高周波成分に相当する程度の広がりではない. このような波の広がりを考慮しても, 幾何学的に波はすべて結晶裏面から出ていく状況であることが確認できれば, 式 (62) の条件は成立する. そのとき, 結晶裏面 Γ_2 上では, $\eta < 0$ のために前方グリーン関数の値が定義式 (41) より 0 となるので, 式 (60) の右辺の結晶裏面 Γ_2 での積分は 0 となる.

また, X 線の入射側表面では, 入射 X 線の波 $\mathbf{E}_0^{(e)}(\mathbf{r})$ 以外は存在せず, 既知のものとして

$$\mathbf{E}^{(e)}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0^{(e)}(\mathbf{r}) = \Phi_0^{(e)}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}) \quad (63)$$

与えれば, 入射側表面では回折波の振幅は 0 であるから, 結局, 式 (60) の積分は入射側表面だけの積分

$$\mathbf{E}_g(\mathbf{r}) = \int_{\Gamma_1} \left\{ \mathbf{G}_{g0}^{F(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \mathbf{E}_0^{(e)}(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial \mathbf{G}_{g0}^{F(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \mathbf{E}_0^{(e)}(\mathbf{r}') \right\} dS' \quad (64)$$

に帰着する. よって, すべての透過波, 回折波が結晶裏面より出射する場合は, 前方伝達グリーン関数さえ求められれば, 式 (64) を使って, 結晶内の波動場を求めることができる.

また, 式 (44) のように, 前方伝達グリーン関数に振幅変調波の表示を使い, その (g, g') 成分の横波部分を式 (60) に代入し, そして, 結晶面 Γ_2 での積分を 0 とすれば, 式 (3) で表される電場の透過波や回折波の振幅関数を次のような積分の形でグリーン関数と入射波の振幅関数を使って表わすことが出来る.

$$\varphi_g(\mathbf{r}) = \int_{\Gamma_1} \left[\psi_{g0}^{F(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial n'} \Phi_0^{(e)}(\mathbf{r}') - \left\{ \frac{\partial}{\partial n'} \psi_{g0}^{F(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right\} \Phi_0^{(e)}(\mathbf{r}') - 2ik_{0n} \Phi_0^{(e)}(\mathbf{r}') \right] dS' \quad (65)$$

ここで, k_{0n} は入射波の波動ベクトル \mathbf{k}_0 の結晶面内側に垂直な方向の成分で正の量である. そして

$$\psi_{gg'}^{F(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\mu, \nu=1}^2 \sum_{V_c^*(\eta>0)} \iint G_{gg'}^{\mu\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \exp\{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'\} |e_g^\mu(\mathbf{k})\rangle \langle e_{g'}^\nu(\mathbf{k}')| \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \quad (66)$$

である. $\psi_{gg'}^{F(t)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ は式 (45) で定義される振幅関数 $\psi_{gg'}^F(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ から, 横波成分だけを取り出した関数である.

7. まとめ

大きく歪んだ結晶に対する X 線の動力学的回折現象を解明していく上で, 式 (6) に示すような波動場の基本方程式の解を求める必要があるが, 方程式自体が 2 回の偏微分方程式であるため, コンピュータで数値的に直接計算しようとしても, 計算機が発達した現在でもそう簡単には計算できない. なぜなら X 線の場合は波長が 0.1nm 程度と極めて短く, 計算刻み幅をその十分の一に選んだとしても 0.01nm 程度であり, これでも mm オーダーの結晶領域内の波動場を計算するとなると, 計算ステップ数が極めて膨大になってしまうからである. その意味で基本方程式の解析的な解法を探ることは大変意味がある. また, 解のもつ物理的な性質も明らかにできる.

本論文では, その基本方程式の解を解析的に求める手段として, グリーン関数法が利用できることを示した. これまで, Maxwell の波動方程式のような非ヘルムホルツ型でベクトル量を扱った方程式には, グリーン関数が利用できるかどうか知られていなかった. そこで本論文では, その波動方程式に対しグリーン関数をテンソルの形で定義すれば, スカラー量に対するグリーンの定理をベクトル量に拡張する形で利用でき, それをもとに基本方程式の解をグリーン関数を使って構成することが可能になることを明らかにした. ただし, 本論文で扱ったグリーン関数は方程式の主要解であって, 結晶表面での境界条件を考慮してはいないので, グリーンの定理を使ったとしても一般的にはただちに解が構成できるわけではない. しかし, 透過波や有意な回折波が X 線の入射側とは反対の結晶面から出射する場合は, 前方に伝搬するグリーン関数の部分を使って, 結晶表面積分の形で基本方程式の解が構成でき, それにより任意の波形の入射波に対する結晶内の波動場が求められることを示した.

付 録

A. 1 グリーン関数と電場との一般的な関係

任意のベクトル場 \mathbf{P}, \mathbf{Q} に対して, 一般的に次のような関係が成り立つことが知られている⁽⁷⁾.

$$\int_V (\mathbf{Q} \cdot \text{rot rot } \mathbf{P} - \mathbf{P} \cdot \text{rot rot } \mathbf{Q}) dV = \int_S (\mathbf{P} \times \text{rot } \mathbf{Q} - \mathbf{Q} \times \text{rot } \mathbf{P}) \cdot \mathbf{n} dS \quad (\text{A.1})$$

式 (A.1) において, V は任意の 3 次元領域で, S はその境界面, \mathbf{n} は曲面 S に対して外側に垂直な単位ベクトルである. この式はスカラー場に対するグリーンの定理をベクトル場へ拡張したもので Stratton の定理と呼ばれる. この式の右辺の積分項には, ガウスの定理から $\text{div } \mathbf{R} = 0$ を満足する任意のベクトル場を追加できる.

$$\int_V (\mathbf{Q} \cdot \text{rot rot } \mathbf{P} - \mathbf{P} \cdot \text{rot rot } \mathbf{Q}) dV = \int_S (\mathbf{P} \times \text{rot } \mathbf{Q} - \mathbf{Q} \times \text{rot } \mathbf{P} - \mathbf{R}) \cdot \mathbf{n} dS, \quad \text{div } \mathbf{R} = 0 \quad (\text{A.2})$$

ここで, \mathbf{R} を適当に選んで,

$$\mathbf{R} = \text{rot}(\mathbf{P} \times \mathbf{Q}) \quad (\text{A.3})$$

とする. $\text{div rot} = 0$ であるのでこのような選択は可能である. 式 (A.2) に式 (A.3) を代入し, 変形すれば,

$$\int_V (\mathbf{Q} \cdot \text{rot rot } \mathbf{P} - \mathbf{P} \cdot \text{rot rot } \mathbf{Q}) dV = \int_S \left(\mathbf{P} \cdot \frac{\partial}{\partial n} \mathbf{Q} - \mathbf{Q} \cdot \frac{\partial}{\partial n} \mathbf{P} + (\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \text{div } \mathbf{P} - (\mathbf{P} \cdot \mathbf{n}) \text{div } \mathbf{Q} \right) dS \quad (\text{A.4})$$

が得られる. この式 (A.4) において, $\mathbf{P} = \mathbf{G}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, $\mathbf{Q} = \mathbf{E}(\mathbf{r})$ と置き, 式 (1), 式 (12) を用いれば, 式 (A.4) の左辺の被積分項は δ 関数を含む項だけが残る, 体積積分が容易に実行できて, 結局

$$E_i(\mathbf{r}') = \int_S \left\{ \mathbf{G}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \frac{\partial}{\partial n} \mathbf{E}(\mathbf{r}) - \mathbf{E}(\mathbf{r}) \cdot \frac{\partial}{\partial n} \mathbf{G}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + (\mathbf{E}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}) \text{div } \mathbf{G}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - (\mathbf{G}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{n}) \text{div } \mathbf{E}(\mathbf{r}) \right\} dS \quad (\text{A.5})$$

が得られる. 式 (A.5) において, ベクトルの内積に関して, $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{A}^T \mathbf{B}$ に注意しながら, 式 (11) を用いて式 (A.5) の被積分項を変形していくと,

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}') = \int_S \left\{ \mathbf{G}^T(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial n} \mathbf{E}(\mathbf{r}) - \left(\frac{\partial}{\partial n} \mathbf{G}^T(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right) \mathbf{E}(\mathbf{r}) + (\mathbf{E}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}) \text{div } \mathbf{G}^T(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - (\text{div } \mathbf{E}(\mathbf{r})) \mathbf{G}^T(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{n} \right\} dS \quad (\text{A.6})$$

が得られる. ここで, \mathbf{G}^T は \mathbf{G} の転置行列, そして, $[\text{div } \mathbf{G}^T(\mathbf{r}, \mathbf{r}')]_i = \text{div } \mathbf{G}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ とした. さらに, 式 (A.4) において, $\mathbf{P} = \mathbf{G}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, $\mathbf{Q} = \mathbf{G}_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ と置き, 積分領域を無限大までに拡大する. このとき式 (A.4) の右辺は 0 になり, 左辺は式 (12) を用いて変形すれば, 結局, グリーン関数の相反性を示す式 (15) が導かれる. この相反性を利用し, 式 (A.6) においてグリーン関数の変数 \mathbf{r} と \mathbf{r}' を交換すれば, 最終的に式 (16) が得られる.

文 献

- (1) 石田秀信, “大きく歪んだ結晶に対する X 線の動力学的回折理論 I . 基本方程式”, 福井工業大学紀要 44 号 (2014), 掲載予定.
- (2) Y.H.Ohtsuki and S.Yanagawa, “Dynamical Theory of Diffraction. I. Electron Diffraction”, *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol 21, No.2 (1966), pp326-335.
- (3) Y.H.Ohtsuki and S.Yanagawa, “Dynamical Theory of Diffraction. II. X-ray Diffraction”, *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol 21, No.3 (1966), pp502-506.
- (4) M.Ashkin and M.Kuriyama, “Quantum Theory of X-ray Diffraction by a Crystal”, *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol 21, No.8 (1966), pp1549-1558.
- (5) M.Kuriyama, “Theory of X-ray Diffraction by a Distorted Crystal”, *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol 23, No.6 (1967), pp1369-1379.
- (6) 石田秀信, 橋爪弘雄, 高良和武, “グリーン関数法の X 線動力学的回折への応用”, 日本物理学会, 秋の分科会 (1973).
- (7) J. A. Stratton, *Electromagnetic Theory*, (1941) p250, MacGraw-Hill.

(平成 26 年 3 月 31 日受理)