

1 電子による電磁波の散乱

原子に束縛された電子による X 線の散乱機構について、電子と電磁場との相互作用ハミルトニアンから考える。電荷による Thomson 散乱, X 線磁気散乱, そして共鳴 X 線散乱の 3 つの機構による散乱振幅が導かれる。

1.1 電子と電磁場との相互作用

X 線は電磁波であるから、電子が電磁場中に置かれた状況を考えよう [1, 2]。図 1.1 のように、1 個の原子に X 線が照射されている状況を想定する。原子に束縛されている電子が電磁場の作用を受けるとき、電磁場も含めた系全体のハミルトニアンは次のように表される ($e < 0$ とする)。

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_i \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p}_i - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i) \right)^2 - \sum_i \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i,j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \frac{e\hbar}{mc} \sum_i \mathbf{s}_i \cdot \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}_i) \\ & - \frac{e\hbar}{2m^2c^2} \sum_i \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_i) \times \left(\mathbf{p}_i - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i) \right) + \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2}) \end{aligned} \quad (1.1)$$

第 1 項は電磁場中における電子の運動エネルギー、第 2 項は原子核からのポテンシャル、第 3 項は電子間のクーロン相互作用、第 4 項は電子スピンと磁場との相互作用、第 5 項は相対論的效果によるスピン軌道相互作用、第 6 項は電磁場のエネルギーを表す^{*1)}。 m は電子の質量、 i, j は電子に付けた番号である。電荷とスピンを伴って運動している電子系に、振動する電場と磁場が作用するという構図になる。電場と磁場は、電磁場のポテンシャル ϕ と \mathbf{A} を用いて、Maxwell 方程式により次のように表される^{*2)}。

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (1.2)$$

$$\mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (1.3)$$

ベクトルポテンシャル \mathbf{A} は

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (1.4)$$

となるようにとる^{*3)}。(1.1) の第 1 項ででてくる $(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2$ は、演算子の順序に注意しながら展開すると、

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 &= \mathbf{p}^2 - \frac{e}{c} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}^2 \\ &= \mathbf{p}^2 - \frac{e}{c} \{ 2\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}) \} + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}^2 \\ &= \mathbf{p}^2 - 2\frac{e}{c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}^2 \end{aligned} \quad (1.5)$$

となる。第 1 式の $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$ では、 \mathbf{p} は \mathbf{A} だけでなく、その右側についてくる演算子や波動関数にまで作用が及ぶ。そのことまで考慮した結果が第 2 式であり、 $(\mathbf{p} \cdot \mathbf{A})$ は単に \mathbf{p} と \mathbf{A} の内積である。 $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ なので、(1.4) より $(\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}) = 0$ である。また、(1.1) の第 5 項を \mathcal{H}_{SO} と書き、これに (1.2) を代入すると、

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{SO} &= \frac{e\hbar}{2m^2c^2} \sum_i \mathbf{s}_i \cdot \left(\nabla\phi(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) \times \left(\mathbf{p}_i - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \\ &\approx -\frac{e\hbar}{2m^2c^2} \left\{ \sum_i \mathbf{s}_i \cdot (-\nabla\phi_i \times \mathbf{p}_i) + \frac{e}{c^2} \sum_i \mathbf{s}_i \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \times \mathbf{A} \right) \right\} \end{aligned} \quad (1.6)$$

*1) 電磁波の基本事項、電磁場の量子化と電子との相互作用については、§A, §B を参照。小出昭一郎の「量子力学 (II)」もよい [45]。

*2) $\phi(\mathbf{r})$ は原子内でのポテンシャルを表す。

*3) ベクトルポテンシャルの取り方には、ある任意性がある。

ここで $\phi(\mathbf{r}_i)$ を ϕ_i と略して書いた。また、 \mathbf{A} も $\mathbf{A}(\mathbf{r}_i)$ のことである。スピン軌道相互作用における \mathbf{A} について 1 次の項は、(1.1) の第 1 項における \mathbf{A} についての 1 次の項よりも $\hbar\omega/mc^2$ のオーダーだけ小さいので、無視する^{*4)}。すると、最終的に系のハミルトニアンは次のように表される。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_R + \mathcal{H}' \quad (1.7)$$

$$\mathcal{H}_0 = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - \sum_i \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i,j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_i \xi(\mathbf{r}_i) \hbar^2 \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{l}_i \quad (1.8)$$

$$\xi(\mathbf{r}) = \frac{e}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{d\phi(\mathbf{r})}{dr} \quad (1.9)$$

$$\mathcal{H}_R = \sum_{\mathbf{k},\lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left(a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) \quad (1.10)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}' &= \frac{e^2}{2mc^2} \sum_i \mathbf{A}(\mathbf{r}_i)^2 - \frac{e^2\hbar}{2m^2c^4} \sum_i \mathbf{s}_i \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \times \mathbf{A} \right) \\ &\quad - \frac{e}{mc} \sum_i \mathbf{A}(\mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{p}_i - \frac{e\hbar}{mc} \sum_i \mathbf{s}_i \cdot (\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}_i)) \end{aligned} \quad (1.11)$$

$$\equiv \mathcal{H}'_1 + \mathcal{H}'_2 + \mathcal{H}'_3 + \mathcal{H}'_4 \quad (1.12)$$

\mathcal{H}_0 は電子系のハミルトニアン、 \mathcal{H}_R は電磁場のハミルトニアン、そして \mathcal{H}' が電磁場と電子との相互作用である。ベクトルポテンシャル \mathbf{A} は光子 (photon) の生成消滅演算子を用いて

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k},\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega}} (\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda} a_{\mathbf{k}\lambda} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda}^* a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}) \quad (1.13)$$

と表される^{*5)}。 $a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger$ は波数ベクトル \mathbf{k} 、偏光状態 λ の光子を 1 個生成する演算子、 $a_{\mathbf{k}\lambda}$ は消滅させる演算子である。 $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda}$ はその光子の偏光ベクトル、 ω は角周波数、 V は規格化のための系全体の体積である。指数 λ は、たとえば散乱面に平行 (σ) または垂直 (π) な直線偏光のように、波数ベクトル \mathbf{k} と垂直な平面内で直交する 2 つの偏光成分を表すのに使う。また、電磁波は横波なので、

$$\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda} = 0$$

の関係が成り立つ。

1.2 散乱断面積

電磁場との相互作用によって系の状態が始状態 $|i\rangle$ から終状態 $|f\rangle$ へ遷移する単位時間あたりの確率は、Fermi の黄金律により

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \mathcal{H}' | i \rangle + \sum_n \frac{\langle f | \mathcal{H}' | n \rangle \langle n | \mathcal{H}' | i \rangle}{E_i - E_n} \right|^2 \delta(E_i - E_f) \quad (1.14)$$

と書ける^{*6)}。電子系の状態が $|a\rangle$ 、波数ベクトル \mathbf{k} で偏光状態 λ の光子がいくつかある状態を始状態とする。その光子が 1 個消滅し、波数ベクトル \mathbf{k}' で偏光状態 λ' の別の光子が 1 個新たにでき、電子系の状態が $|a'\rangle$ になった状態を終状態とすると、これは光子の散乱を表す。 \mathcal{H}'_3 と \mathcal{H}'_4 は \mathbf{A} について 1 次であり、光子を 1 個作るか消すかのどちらかであるから、(1.14) の第 1 項の 1 次摂動の行列要素は持たない。 \mathbf{A} について 2 次である \mathcal{H}'_1 と \mathcal{H}'_2 が 1 次摂動での散乱を起こす^{*7)}。 \mathcal{H}'_3 と \mathcal{H}'_4 が散乱に寄与するのは (1.14) の第 2 項の 2 次摂動を通してである。この

^{*4)} $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \propto e^{-i\omega t}$ より、 $\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \times \mathbf{p} = -i\omega \mathbf{A} \times \mathbf{p}$ となり、この項は (1.1) の第 1 項での \mathbf{A} についての 1 次の項よりも $\hbar\omega/mc^2$ のオーダーだけ小さい。また、原子内での摂動である $\nabla\phi \times \frac{e}{c} \mathbf{A}$ は $\nabla\phi \times \mathbf{p}$ よりずっと小さい。

^{*5)} この表記は電磁波の位相部分を $(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)$ とするか、 $(\omega t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ とするかによらない。位相をどう定義するかで円偏光の回転方向が逆転するなどの違いが生じるが、この表記は複素共役を足し合わせる形になっており、どちらの表記法にも共通である。

^{*6)} 文献 [45] の §13。

^{*7)} photon 数が保存される散乱過程 ($a_{\mathbf{k}\lambda}$ と $a_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger$ がペアになっている項) のみ残す。

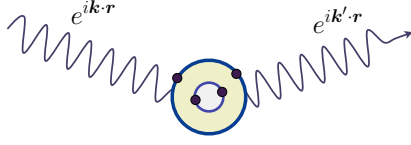


図 1.1: 1 個の原子に平面波 $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ で表される電磁波があたり、電子との相互作用を経て、平面波 $e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}$ へ遷移する（散乱される）様子。

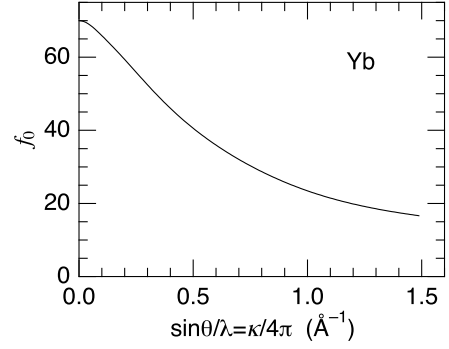


図 1.2: Yb 原子の原子散乱因子 [48]. $\kappa = 0$ のとき f_0 は全電子数に等しい。

とき中間状態 $|n\rangle$ を経て始状態から終状態へ遷移する．中間状態 $|n\rangle$ は光子が 1 個消滅し、電子系が中間状態 $|b\rangle$ になった状態である．いずれの摂動項においても初期状態から $|\mathbf{k}\lambda\rangle$ の光子が消滅し、終状態では $|\mathbf{k}'\lambda'\rangle$ の光子が生成される．

単位時間あたりの遷移確率 w が判れば散乱断面積を計算することができる．終状態の状態密度を $\rho(E_f)$ 、入射する電磁波の flux を $I_0 (= c/V)$ とすると、

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE}\right) = \frac{w\rho(E_f)}{I_0} \quad (1.15)$$

$$\rho(E_f) = \frac{V\omega^2}{(2\pi)^3\hbar c^3} \quad (1.16)$$

$|a, \mathbf{k}\lambda\rangle$ から $|a', \mathbf{k}'\lambda'\rangle$ への散乱断面積は、Appendix に示すような計算を経て、最終的に次のようになる^{*8)}．

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE}\right) &= \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \left| \langle a' | \sum_j e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} | a \rangle (\boldsymbol{\varepsilon}'^* \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) - i \frac{\hbar\omega}{mc^2} \langle a' | \sum_j \mathbf{s}_j e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} | a \rangle \cdot (\boldsymbol{\varepsilon}'^* \times \boldsymbol{\varepsilon}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{m} \sum_b \left\{ \frac{\langle a' | \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}'\lambda'}^* \cdot \mathbf{J}^\dagger(\mathbf{k}') | b \rangle \langle b | \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{k}) | a \rangle}{E_a - E_b + \hbar\omega + i\Gamma_b/2} + \frac{\langle a' | \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{k}) | b \rangle \langle b | \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}'\lambda'}^* \cdot \mathbf{J}^\dagger(\mathbf{k}') | a \rangle}{E_a - E_b - \hbar\omega - i\Gamma_b/2} \right\} \right|^2 \quad (1.17) \end{aligned}$$

ここで

$$\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$$

は、X 線の散乱ベクトルである^{*9)}．また、

$$\mathbf{J}(\mathbf{k}) = \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} (\mathbf{p}_j - i\hbar\mathbf{k} \times \mathbf{s}_j) \quad (1.18)$$

は電子の運動量密度を表す演算子である．ここでは、あえて始状態 $|a\rangle$ と終状態 $|a'\rangle$ を区別して書いたが、非弾性散乱のように特に終状態を区別して考えるのでない場合は、通常は弾性散乱であるとして、散乱の前後で電子状態は変わらないと考え、 $|a'\rangle = |a\rangle$ とする．次に、(1.17) の絶対値記号の中を順に説明しよう．

^{*8)} $\boldsymbol{\varepsilon}'^*$ についている共役記号は偏極ベクトルを複素数で表す場合 (π 成分と σ 成分のあいだに位相差が生じた円偏光のような場合) に必要．
^{*9)} $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ と定義する教科書も多くあるが、 $\mathbf{k} + \boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}'$ とみるほうが散乱の様子をよく表しているし、回折計を使った実験をするときも考えやすい．逆に、なぜ $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ と定義するのは筆者にはよくわからない．空間反転対称性がある結晶ではどちらの定義でも結果は同じだが、キラル結晶のように空間反転対称性がない場合、 $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ か $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ かで逆になるので注意が必要．

1.2.1 電荷による散乱 –Thomson 散乱–

第1項の $\epsilon'^* \cdot \epsilon$ に比例する部分が (1.12) の第1項 \mathcal{H}'_1 に起因する部分で、電磁場と電荷との相互作用によって生じる通常の X 線散乱^{*10)} であり、**Thomson 散乱**と呼ばれる。振動する電場によって電子が揺さぶられることで、加速度を受ける電子が電磁波を発する現象であると考えればよい。原子内の全電子を記述する波動関数が $|a\rangle$ であるとき、

$$f_0(\kappa) = \langle a | \sum_j e^{-i\kappa \cdot r_j} | a \rangle \quad (1.19)$$

は電子密度のフーリエ変換、すなわち**原子散乱因子**である。 $\kappa = 0$ のときに全電子数に等しく、 κ が大きくなるにつれて小さくなっていく^{*11)}。図 1.2 に Yb 原子の原子散乱因子を示す。

1.2.2 X 線磁気散乱

第2項の $\epsilon'^* \times \epsilon$ に比例する部分は \mathcal{H}'_2 に起因する部分で、電磁場と電子スピンとの相互作用によって生じる**X 線磁気散乱**である。ここで、

$$f_S(\kappa) = \langle a | \sum_j \mathbf{s}_j e^{-i\kappa \cdot r_j} | a \rangle \quad (1.20)$$

はスピン密度のフーリエ変換であり、磁気形状因子のスピン部分である。これも $\kappa = 0$ のときに最大で、 κ が大きくなるにつれて小さくなっていく。

X 線磁気散乱の強度は Thomson 散乱と比べると桁違いに弱い。まず $(\frac{\hbar\omega}{mc^2})^2$ の因子がかかる分だけ小さくなる^{*12)}。さらに Thomson 散乱に寄与するのは原子内の全部の電子であるのに対して、磁気散乱に寄与するのは磁性を担う電子軌道内のたかだか数個の磁性電子だけであるから、散乱に寄与する電子数の2乗も強度比に効いてくる^{*13)}。結局、X 線磁気散乱の強度は Thomson 散乱に比べて 10^{-6} 程度しかないことになる。この点が、格子からの散乱強度と同程度の磁気散乱強度をもつ中性子散乱と異なっている。それでも高強度の放射光 X 線を使えば十分に観測は可能である。X 線でも磁気散乱が観測できることを初めて示したのは^{*14)}、de Bergevin と Brunel である [5]。

1.2.3 共鳴散乱

第3項の中間状態 $|b\rangle$ を含む散乱項が**共鳴散乱**である。先の2項ほどの X 線エネルギーでも起こる非共鳴型の散乱であるのに対し、この項は $\hbar\omega = E_b - E_a$ の近傍で増強され、激しいエネルギー依存性を示すため、**異常散乱**とも呼ばれる。この項が表しているのは、X 線のエネルギーを原子の準位間エネルギーに一致させたときに内殻の電子が外殻の非占有軌道に励起され、電子が再びもとの内殻軌道に戻るときに同じエネルギーの X 線が放出されるという現象である。つまり中間状態 $|b\rangle$ とは、内殻にホールが1個できて外殻の非占有軌道に電子が1個付け加わった状態のことであると考えればよい^{*15)}。{ } 内の第1項がこの遷移過程を表しており、始状態のエネルギーは $E_i = E_a + \hbar\omega$ 、中間状態では入射光子が消滅して電子系のエネルギーが励起され $E_n = E_b$ 、終状態では光子が放出されて電子系がもとに戻り $E_f = E_a + \hbar\omega$ となる。また、中間状態の寿命に対応するエネルギー幅として、 Γ_b をここで導入した。{ } 内の第2項は少し変わった遷移過程であり、 $E_a > E_b$ の場合に相当している。中間状態では散乱光子が先に生成され、 $E_n = E_b + \hbar\omega + \hbar\omega$ となり、終状態では入射光子が消滅して電子系がもと

*10) 実験室の X 線源で粉末回折パターンや Laue 写真を撮るときの散乱。

*11) Kittel の教科書 [44] の第2章に、Thomson 散乱による X 線の散乱と回折の基本がすべて記述されている。散乱角が大きくなる (κ が大きくなる) につれて、原子の異なる場所から散乱された波のあいだでの位相差 (経路差) が大きくなり、互いに干渉して弱めあるようになるため。

*12) エネルギー 10keV (波長 1.2398Å) の X 線では、 $(\frac{10}{511})^2 = 3.8 \times 10^{-4}$ 。

*13) 例えば原子番号 64 の Gd^{3+} イオンには 61 個の電子があるが、このうち磁気散乱に寄与するのは 4f 軌道にある 7 個だけである。従って、強度比は $(\frac{7}{61})^2 = 1.3 \times 10^{-2}$ 。

*14) なんと、我々が Laue 写真を撮るような、実験室の管球からの X 線を使ってこれを観測したという、驚異的な実験である。

*15) 非占有軌道に励起された電子がそのままもとの内殻に戻ってくれば、散乱前後の電子状態は同じであり、 $|a'\rangle = |a\rangle$ 、 $\hbar\omega = \hbar\omega'$ 、すなわち弾性散乱である。中間状態で電子相関効果により内殻ホールや非占有軌道に加わった電子のスクリーニングが起こり、異なる電子状態から内殻ホールに戻る場合、 $|a'\rangle \neq |a\rangle$ 、 $\hbar\omega \neq \hbar\omega'$ であり、非弾性散乱となる。これを共鳴非弾性散乱と呼んでいる。

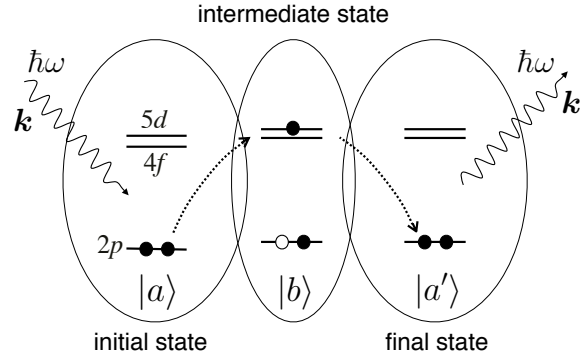


図 1.3: 共鳴 X 線散乱の過程における始状態, 中間状態, 終状態,

表 1.1: 希土類元素の L 吸収端のエネルギー (keV) [49]. 波長は λ (Å) = $12.398/E$ (keV) の関係式から容易に導出できる.

	Ce	Pr	Nd	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
L_{II}	6.164	6.440	6.722	7.312	7.617	7.930	8.252	8.581	8.918	9.264	9.617	9.978
L_{III}	5.723	5.964	6.208	6.716	6.977	7.243	7.514	7.790	8.071	8.358	8.648	8.944

に戻り, $E_f = E_{a'} + \hbar\omega$ となる. この違いがそれぞれ $\{ \}$ 内の第 1 項と第 2 項に現れている. 通常は $E_b > E_a$ の場合を考えるので, 共鳴条件に合わせるといのは $\hbar\omega = E_b - E_a$ に合わせるということである. すると, (1.17) の共鳴散乱項の分母が小さくなり, 散乱強度の増大が見込まれる. 図 1.3 に弾性散乱を想定した場合の共鳴散乱過程の始状態, 中間状態, 終状態の模式図を示した.

X 線のエネルギーが $E_b - E_a$ よりも高くなると, 内殻から非占有軌道への電子励起が起こるために X 線の吸収が突然大きくなることから, このエネルギーは**吸収端**と呼ばれており, 各元素に固有の値がある^{*16)}. 特に, 遷移金属の K 吸収端や希土類元素の L 吸収端のエネルギーは数 keV から十数 keV の領域にあり, ちょうど回折実験で用いられる X 線の波長領域と一致している^{*17)}. この共鳴エネルギーの X 線を使って回折実験を行い, (1.17) の共鳴散乱項による散乱強度を引き出すのが共鳴 X 線散乱という実験手法である. 表 1.1 に希土類元素でよく使われる L 吸収端のエネルギーを示した. L_{II} は $2p_{1/2} \leftrightarrow 5d$ 遷移, L_{III} は $2p_{3/2} \leftrightarrow 5d$ 遷移に対応している.

中間状態として電子が 1 個付け加えられる非占有軌道にもいろいろな種類の軌道があるが, 普通は軌道角運動量 l が内殻ホールと 1 だけ異なるような軌道への遷移, すなわち, 内殻が s 軌道 ($l = 0$) のときは p 軌道 ($l = 1$) へ, 内殻が p 軌道 ($l = 1$) のときは d 軌道 ($l = 2$) への遷移が最も強い. この吸収端はどの元素でも非常に明瞭に観測されるので, **main-edge** と呼ばれることが多い. それに対して, l が 2 だけ異なるような軌道への遷移は, 通常 main-edge よりも 10 eV から数十 eV 程度低いエネルギー位置に弱く観測されるので, **pre-edge** と呼ばれる. この遷移による共鳴散乱では, 遷移金属では $1s \leftrightarrow 3d$, 希土類では $2p \leftrightarrow 4f$ の遷移を経由するので, 中間状態がまさに磁性を担う軌道そのものの情報を含むことになって大変貴重であるが, 普通は強度が弱く, どの物質でも常に観測できるわけではない. l が 1 あるいは 2 だけ異なる軌道への遷移を, それぞれ双極子 (E1) 遷移および四極子 (E2) 遷移と呼ぶが, その意味は後で明らかになる,

*16) 例えば, Cu ターゲットを使った実験室の X 線装置では, Cu- K_α 線 (8.04 keV) を通し Cu- K_β 線 (8.90 keV) を除去するためのフィルターとして, K 吸収端 8.33 keV の Ni フィルムが使われる.

*17) 吸収端の名称はどの内殻軌道にホールができるかによって区別される. 主量子数 n の違いによって K 端 ($n = 1$), L 端 ($n = 2$), M 端 ($n = 3$) のように分類され, さらに軌道の違いによって $s_{1/2}$ のとき I, $p_{1/2}$ のとき II, $p_{3/2}$ のとき III, $d_{3/2}$ のとき IV, $d_{5/2}$ のとき V といった添え字が付けられる.

1.3 Thomson 散乱, 磁気散乱, 共鳴散乱の整理

(1.17) を表す散乱振幅 F は次のように書ける.

$$F = -\frac{e^2}{mc^2} \left[\langle a' | \sum_j e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} | a \rangle (\boldsymbol{\varepsilon}'^* \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) - i \frac{\hbar\omega}{mc^2} \langle a' | \sum_j s_j e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} | a \rangle \cdot (\boldsymbol{\varepsilon}'^* \times \boldsymbol{\varepsilon}) \right. \\ \left. + \frac{1}{m} \sum_b \left(\frac{\langle a' | \boldsymbol{\varepsilon}'^* \cdot \mathbf{J}^\dagger(\mathbf{k}') | b \rangle \langle b | \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{k}) | a \rangle}{E_a - E_b + \hbar\omega + i\Gamma_b/2} + \frac{\langle a' | \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{k}) | b \rangle \langle b | \boldsymbol{\varepsilon}'^* \cdot \mathbf{J}^\dagger(\mathbf{k}') | a \rangle}{E_a - E_b - \hbar\omega - i\Gamma_b/2} \right) \right] \quad (1.21)$$

$$= -\frac{e^2}{mc^2} \sum_{\alpha,\beta} \varepsilon'_\alpha \varepsilon_\beta \left[\langle a' | \sum_j e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} | a \rangle \delta_{\alpha\beta} - i \frac{\hbar\omega}{mc^2} \langle a' | \sum_j s_{j\gamma} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} | a \rangle \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \right. \\ \left. + \frac{1}{m} \sum_b \left(\frac{\langle a' | J_\alpha^\dagger(\mathbf{k}') | b \rangle \langle b | J_\beta(\mathbf{k}) | a \rangle}{E_a - E_b + \hbar\omega + i\Gamma_b/2} + \frac{\langle a' | J_\beta(\mathbf{k}) | b \rangle \langle b | J_\alpha^\dagger(\mathbf{k}') | a \rangle}{E_a - E_b - \hbar\omega - i\Gamma_b/2} \right) \right] \quad (1.22)$$

ここで, 添字が上についた $\varepsilon^{\alpha\beta\gamma}$ は 3 階反対称テンソルであり,

$$\varepsilon^{xyz} = \varepsilon^{yzx} = \varepsilon^{zxy} = 1 \\ \varepsilon^{xzy} = \varepsilon^{zyx} = \varepsilon^{yxz} = -1 \quad (1.23)$$

の値をとる. これ以外の要素はすべて 0 である.

非共鳴型の磁気散乱を表す (1.21) と (1.22) の [] 内第 2 項は, $\boldsymbol{\varepsilon}'^* \times \boldsymbol{\varepsilon}$ と平行な成分の電子スピンの寄与を表している. しかし, この中には軌道磁気モーメントによる非共鳴磁気散乱が入っていない, 実はこれは第 3 項の共鳴散乱項の中に隠れているのである. 詳しくみると, 第 3 項には $\hbar\omega \gg E_b - E_a$ としても 0 にならない成分があり, これを分離することで非共鳴の磁気散乱と共鳴散乱とが正しく記述される. それを次に示そう, $\hbar\omega$ が共鳴エネルギー $E_b - E_a$ から大きく外れたとき, すなわち $|\hbar\omega - E_b + E_a| \gg \Gamma_b$ のとき, 0 になる部分と 0 にならない部分とに分けるため, 次のような変形を行う.

$$\frac{1}{E_a - E_b + \hbar\omega + i\Gamma_b/2} = \frac{1}{E_a - E_b + \hbar\omega + i\Gamma_b/2} - \frac{1}{\hbar\omega} + \frac{1}{\hbar\omega} \\ \approx \left(\frac{E_b - E_a}{\hbar\omega} \right) \frac{1}{E_a - E_b + \hbar\omega + i\Gamma_b/2} + \frac{1}{\hbar\omega} \quad (1.24)$$

$$\frac{1}{E_a - E_b - \hbar\omega - i\Gamma_b/2} = \frac{1}{E_a - E_b - \hbar\omega - i\Gamma_b/2} + \frac{1}{\hbar\omega} - \frac{1}{\hbar\omega} \\ \approx -\left(\frac{E_b - E_a}{\hbar\omega} \right) \frac{1}{E_a - E_b - \hbar\omega - i\Gamma_b/2} - \frac{1}{\hbar\omega} \quad (1.25)$$

いずれも $E_b - E_a \gg \Gamma_b$ であるとして, $E_b - E_a$ に対して Γ_b を無視した. これらを用いて (1.22) を書き直すと, $1/\hbar\omega$ の部分から, 状態 $|b\rangle$ についての closure relation^{*18)} を適用することで, 新たな非共鳴項がでてくる. 結果は次のようになる.

$$F = -\frac{e^2}{mc^2} \sum_{\alpha,\beta} \varepsilon'_\alpha \varepsilon_\beta \left[\langle a' | \sum_j e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} | a \rangle \delta_{\alpha\beta} - i \frac{\hbar\omega}{mc^2} \langle a' | \sum_j s_{j\gamma} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} | a \rangle \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \right. \\ \left. + \frac{1}{m\hbar\omega} \langle a' | J_\alpha^\dagger(\mathbf{k}') J_\beta(\mathbf{k}) - J_\beta(\mathbf{k}) J_\alpha^\dagger(\mathbf{k}') | a \rangle \right. \\ \left. + \frac{1}{m} \sum_b \left(\frac{E_b - E_a}{\hbar\omega} \right) \left(\frac{\langle a' | J_\alpha^\dagger(\mathbf{k}') | b \rangle \langle b | J_\beta(\mathbf{k}) | a \rangle}{E_a - E_b + \hbar\omega + i\Gamma_b/2} - \frac{\langle a' | J_\beta(\mathbf{k}) | b \rangle \langle b | J_\alpha^\dagger(\mathbf{k}') | a \rangle}{E_a - E_b - \hbar\omega - i\Gamma_b/2} \right) \right] \quad (1.26)$$

[] 内第 3 項は交換演算子 $[J_\alpha^\dagger(\mathbf{k}'), J_\beta(\mathbf{k})]$ の行列要素となっており, これが一般に 0 ではないため, 非共鳴項となって現れるのである. [] 内第 4 項は共鳴項であり, これは $\hbar\omega$ が共鳴エネルギー $E_b - E_a$ から幅 Γ_b よりずっと大きく外れると, 無視できるようになる,

*18) $\sum_j \langle i | A | j \rangle \langle j | B | k \rangle = \langle i | AB | k \rangle$, という量子力学の公式.

交換演算子 $[J_\alpha^\dagger(\mathbf{k}'), J_\beta(\mathbf{k})]$ を (1.18) から計算すると、煩雑な計算の結果、散乱振幅 F は次のように書けることがわかる。

$$\begin{aligned}
F = & -\frac{e^2}{mc^2} \sum_{\alpha,\beta} \varepsilon'_\alpha{}^* \varepsilon_\beta \left[\langle a' | \sum_j e^{-i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}_j} | a \rangle \delta_{\alpha\beta} \right. \\
& - i \frac{\hbar\omega}{mc^2} \langle a' | \sum_j e^{-i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}_j} \left\{ i \frac{(\boldsymbol{\kappa} \times \mathbf{p}_j)_\gamma}{\hbar\kappa^2} A^{\alpha\beta\gamma} + s_{j\gamma} B^{\alpha\beta\gamma} \right\} | a \rangle \\
& \left. + \frac{1}{m} \sum_b \left(\frac{E_b - E_a}{\hbar\omega} \right) \left\{ \frac{\langle a' | J_\alpha^\dagger(\mathbf{k}') | b \rangle \langle b | J_\beta(\mathbf{k}) | a \rangle}{E_a - E_b + \hbar\omega + i\Gamma_b/2} - \frac{\langle a' | J_\beta(\mathbf{k}) | b \rangle \langle b | J_\alpha^\dagger(\mathbf{k}') | a \rangle}{E_a - E_b - \hbar\omega - i\Gamma_b/2} \right\} \right] \quad (1.27)
\end{aligned}$$

$$A^{\alpha\beta\gamma} = -2(1 - \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}') \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \quad (1.28)$$

$$\begin{aligned}
B^{\alpha\beta\gamma} = & \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} - \varepsilon^{\alpha\delta\gamma} \hat{k}'_\delta \hat{k}'_\beta + \varepsilon^{\beta\delta\gamma} \hat{k}_\delta \hat{k}_\alpha \\
& - \frac{1}{2} \varepsilon^{\alpha\beta\delta} (\hat{k}'_\delta \hat{k}'_\gamma + \hat{k}_\delta \hat{k}_\gamma) + \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{k}}')_\alpha \delta_{\beta\gamma} + \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{k}}')_\beta \delta_{\alpha\gamma} \quad (1.29)
\end{aligned}$$

[] 内の部分について、第1項は通常の Thomson 散乱である。第2項は、(1.22) から少し変わったが、磁気モーメントによる散乱であり、軌道磁気モーメントによる部分とスピン磁気モーメントによる部分とに分かれている。第3項は共鳴散乱に寄与する部分であり、 $|\hbar\omega - E_b + E_a| \gg \Gamma_b$ のとき0に近づく。(1.27) を3つの部分に分けて記述すると、

$$F = (F_c + F_{\text{mag}}) + F_{\text{reso}} = F_{\text{nonreso}} + F_{\text{reso}}$$

$$\begin{aligned}
F_c = & -\frac{e^2}{mc^2} \sum_{\alpha,\beta} \varepsilon'_\alpha{}^* \varepsilon_\beta \langle a' | \sum_j e^{-i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}_j} | a \rangle \delta_{\alpha\beta} \\
= & -\frac{e^2}{mc^2} \langle a' | \sum_j e^{-i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}_j} | a \rangle (\boldsymbol{\varepsilon}'^* \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) \quad (1.30)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_{\text{mag}} = & -\frac{e^2}{mc^2} \sum_{\alpha,\beta} \varepsilon'_\alpha{}^* \varepsilon_\beta \left(-i \frac{\hbar\omega}{mc^2} \right) \langle a' | \sum_j e^{-i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}_j} \left\{ i \frac{(\boldsymbol{\kappa} \times \mathbf{p}_j)_\gamma}{\hbar\kappa^2} A^{\alpha\beta\gamma} + s_{j\gamma} B^{\alpha\beta\gamma} \right\} | a \rangle \\
= & -\frac{e^2}{mc^2} \left(-i \frac{\hbar\omega}{mc^2} \right) \langle a' | \sum_j e^{-i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}_j} \left\{ \frac{i}{\hbar\kappa^2} (\boldsymbol{\kappa} \times \mathbf{p}_j) \cdot \mathbf{A} + s_j \cdot \mathbf{B} \right\} | a \rangle \quad (1.31)
\end{aligned}$$

$$F_{\text{reso}} = -\frac{e^2}{mc^2} \sum_{\alpha,\beta} \varepsilon'_\alpha{}^* \varepsilon_\beta \frac{1}{m} \sum_b \left(\frac{E_b - E_a}{\hbar\omega} \right) \left\{ \frac{\langle a' | J_\alpha^\dagger(\mathbf{k}') | b \rangle \langle b | J_\beta(\mathbf{k}) | a \rangle}{E_a - E_b + \hbar\omega + i\Gamma_b/2} - \frac{\langle a' | J_\beta(\mathbf{k}) | b \rangle \langle b | J_\alpha^\dagger(\mathbf{k}') | a \rangle}{E_a - E_b - \hbar\omega - i\Gamma_b/2} \right\} \quad (1.32)$$

となる^{*19)}。ここで、ベクトル \mathbf{A} と \mathbf{B} は次のように表される^{*20)}。

$$\mathbf{A} = -2(1 - \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}') (\boldsymbol{\varepsilon}'^* \times \boldsymbol{\varepsilon}) = -4 \sin^2 \theta (\boldsymbol{\varepsilon}'^* \times \boldsymbol{\varepsilon}) = -\frac{\kappa^2}{k^2} (\boldsymbol{\varepsilon}'^* \times \boldsymbol{\varepsilon}), \quad (1.33)$$

$$\mathbf{B} = \{ (\boldsymbol{\varepsilon}'^* \times \boldsymbol{\varepsilon}) - (\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{k}}') (\boldsymbol{\varepsilon}'^* \times \hat{\mathbf{k}}') + (\boldsymbol{\varepsilon}'^* \cdot \hat{\mathbf{k}}) (\boldsymbol{\varepsilon} \times \hat{\mathbf{k}}) - (\hat{\mathbf{k}}' \times \boldsymbol{\varepsilon}'^*) \times (\hat{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{\varepsilon}) \}. \quad (1.34)$$

^{*19)} F_c の c は charge を表す。

^{*20)} $\hat{\mathbf{k}}$ のように hat が付いているベクトルは、そのベクトル方向の単位ベクトルを表す。

1.4 X線回折

1.4.1 結晶構造因子と回折強度

$F = F_c + F_{\text{mag}} + F_{\text{reso}}$ で表される散乱振幅は、原子1個からの様々な起源の**散乱 (scattering)** を足し合わせたものである。実際の結晶では、原子が周期的に配列しており、各原子からの様々な起源の散乱が重ね合わされて全体の散乱振幅 F が決まる。この F のことを**結晶構造因子**と呼んでいる^{*21)}。結晶構造因子が0でないということは、多くの原子から散乱された波が重ね合わされたときに、互いに強め合うように干渉しあうということである。このような現象を**回折 (diffraction)**と呼ぶ。逆に、多くの原子からの散乱波が重ね合わされたとき、互いに弱めあう場合には、 $F = 0$ となる。

検出器で観測されるX線の回折強度は、結晶構造因子を F とするとき、 $|F|^2$ に比例する。結晶構造因子は単位格子に属する各原子からの散乱に位相因子をかけて重ね合わせることで計算できる。このとき、原子散乱因子はX線のエネルギー $\hbar\omega$ に依存するので、構造因子もエネルギーに依存し、 $F(\omega)$ と表される。着目する原子の吸収端近傍では、共鳴項と非共鳴項との和で表されるから、一般に、結晶構造因子は次のように表される。

$$\begin{aligned} F(\omega) &= F_{\text{nonreso}} + F_{\text{reso}}(\omega) \\ &= \sum_j \{F_{c,j} + F_{\text{mag},j} + F_{\text{reso},j}(\omega)\} e^{-i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}_j} . \end{aligned} \quad (1.35)$$

ここで、 $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ は散乱ベクトル、 \mathbf{r}_j は単位格子中の j 番目の原子の位置であり、和は単位格子内の原子すべてについてとる。

1.4.2 散乱と回折

図1.4に共鳴X線回折の模式図を示す。前節までは「散乱 (scattering)」という言葉を中心に使ってきたが、この節で「回折 (diffraction)」という言葉に変化した。回折と散乱という、一見よく似た印象をもつ2つの言葉の違いは何か、ここで説明しよう。

まず、X線が物質に当たり、物質中の電子によって「散乱」される。「散乱」は物質中のあちらこちらで起こっており、「散乱」されたX線は四方八方に飛び散る。あらゆる方向に飛び散るので「散乱」という。図1.4では、「共鳴」というプロセスを経て「散乱」が起こっている^{*22)}。図にはある特定の方向に「散乱」された波しか描かれていないが、本当はあらゆる方向に「散乱」は起こっている。

ここからが、波の性質に関わる話になる。あちらこちらで「散乱」された波どうし、もし位相がそろっているならば、それらは互いに強め合う。図1.4には、そのような条件を満たす波だけが描かれている。どんな場合に強め合うか。それがBragg条件「 $\lambda = 2d \sin \theta$ 」である。ここに、物質中に並んだ原子の周期性（面間隔 d ）が関わってくる。図1.4では、磁気秩序などの秩序化によって同種の原子にAとBの違いが発生し、AとBで異なる原子散乱因子を持つに至った状況が描かれている。すると、Aと次のAのあいだの距離が1周期をあらわす間隔 d となり、経路差の関係から、ちょうど $\lambda = 2d \sin \theta$ の関係を満たす散乱角 2θ の方向で、各原子から散乱された波が互いに干渉して強め合うようになる。あちらこちらで「散乱」された波が互いに干渉し合い、ある特定の方向に進む場合だけ強め合う現象が「回折」である。

つまり、結晶構造や磁気構造など、何かが周期的に配列した状況を明らかにしようとするために、「回折」現象が使われる。そして、観測している回折ピークの起源が何であるか、磁気なのか、軌道なのか、電荷なのか、あるいはこれらの重ね合わせか、それを明らかにするのが「散乱」機構の考察である。Thomson散乱、非共鳴磁気散乱、共鳴散乱といった散乱機構の話は、「散乱」という言葉で表されているとおり、ある一つの原子で起こる「散乱」現象についての話であり、「回折」が起こる前の段階での話である。

^{*21)} 結晶構造因子の基本的な考え方については Kittel の教科書 [44] 等を参照。波の位相因子 $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$ と $(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ の違いについては Appendix を参照。

^{*22)} 非共鳴 Thomson 散乱による散乱も、非共鳴磁気散乱による散乱も起こっている。ただ、図に描かれていないだけである。

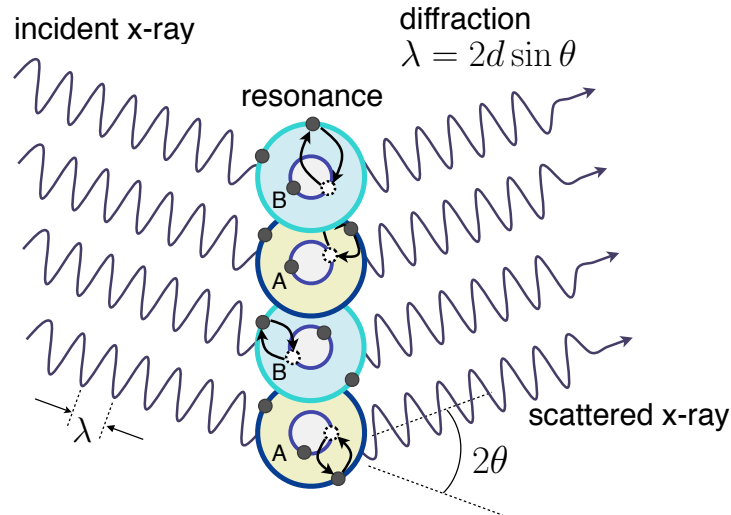


図 1.4: 共鳴 X 線回折の模式図. 波長 λ の X 線 (photon) が試料に入射する. 並んでいるのは同種の原子である. 各原子で共鳴が起こり, 内殻の電子が不完全殻に励起される. 電子が再び内殻に戻ってくると同じ波長の X 線 (photon) を放出する. このとき, (図には描かれていないが) X 線はあらゆる方向に放出される. これが散乱である. 次に, 今, 原子 A と B では, 電子軌道に生じた何らかの秩序によって, たとえ同種の原子であっても不完全殻の電子状態が異なっており, 放出される X 線 (photon) の位相が A と B で π だけ異なっている (原子散乱因子の符号が逆である) としよう. このとき, ある原子 A から次の A までの距離を d とすると, ちょうど $\lambda = 2d \sin \theta$ の関係を満たすような散乱角 2θ の方向では, 各原子から散乱された波が互いに干渉して強め合う. その結果, 散乱角 2θ の方向に強い回折線 (Bragg 反射) が現れる.

1.4.3 各散乱機構による回折の具体例

最後に, Thomson 散乱, 非共鳴磁気散乱, 共鳴散乱それぞれの機構による回折について, ごく簡単に具体例を紹介する. 詳しくは後の章で扱う.

原子変位による非共鳴 Thomson 散乱 まず, 図 1.5 は, 非共鳴 Thomson 散乱の例であり, 正方晶化合物 DyB_2C_2 での実験結果である [20]. DyB_2C_2 では, $T < 25 \text{ K}$ で反強四極子 (AntiFerroQuadrupole) 秩序が起こり, 同時に B と C の原子変位が生じる. その結果, 非共鳴 Thomson 散乱が現れ, それを逆格子点 $\kappa = (3, 0, 1.5)$ における回折ピークとして観測したものがこのデータである. 無秩序相である $T > 25 \text{ K}$ では, $\kappa = (3, 0, 1.5)$ での結晶構造因子 $F = \sum_j F_{c,j} e^{-i\kappa \cdot r_j}$ はゼロであるが, 秩序相では原子変位のためにこの逆格子点での結晶構造因子がゼロでなくなる. 非共鳴型なので, 低エネルギー領域をみればわかるように, 強度はエネルギーに依存せず一定である. しかし, 吸収端近傍では吸収が大きくなるために強度が大きく減少する. この図のデータでは, Dy の四極子秩序による共鳴散乱の信号も, 吸収端近傍で重なっている.

異方的電荷分布による非共鳴 Thomson 散乱 図 1.6 は, 立方晶化合物 CeB_6 の四極子秩序相で観測された非共鳴 Thomson 散乱である [25]. ただし, これは原子変位ではなく, Ce が四極子秩序したことによって f 電子の電荷分布が異方的になり^{*23)}, その異方的な電荷分布による非共鳴 Thomson 散乱が観測されたものである [14, 15, 16, 17, 18]. 低エネルギー領域に見られる強度一定の部分がこの Thomson 散乱による回折強度である. 1.7 K は磁気秩序相に入っているが, 逆格子点 $\kappa = (1.5, 1.5, 2.5)$ は磁気秩序の伝播ベクトルではないので, ここで観測しているのは AFQ のほうである.

^{*23)} 球対称な電荷分布ではなくなったということ. O_{xy} 型 AFQ なので, $[110]$ 方向に伸びた電荷分布と $[\bar{1}\bar{1}0]$ 方向に伸びた電荷分布の 2 種類が互い違いに配列している. これと等価な O_{yz} 型と O_{zx} 型のドメインもある.

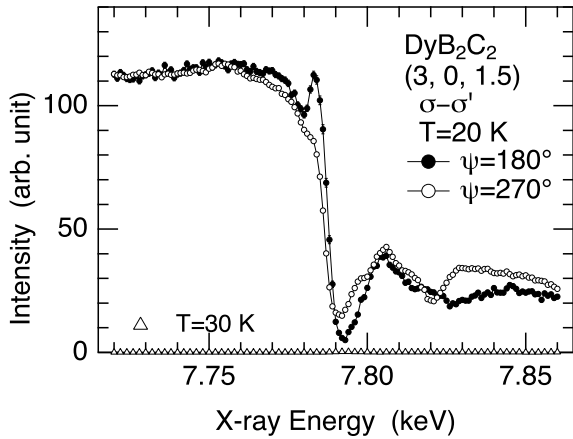


図 1.5: DyB_2C_2 の四極子秩序相における，原子変位による非共鳴 Thomson 散乱の例 [20].

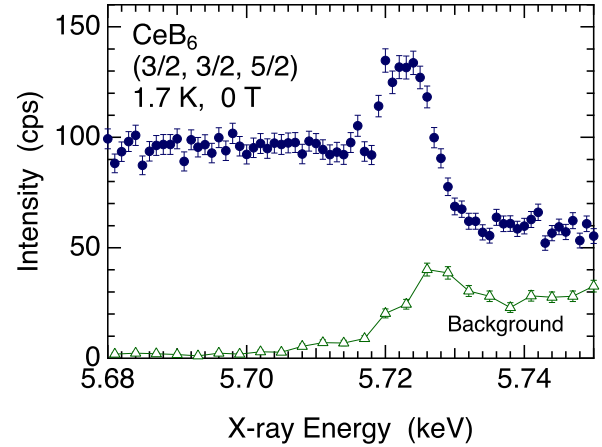


図 1.6: CeB_6 の四極子秩序相における，異方的電荷分布の秩序化による非共鳴 Thomson 散乱の例 [25].

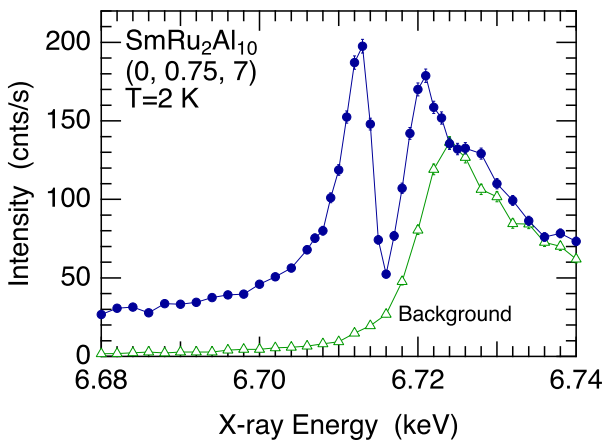


図 1.7: $\text{SmRu}_2\text{Al}_{10}$ の磁気秩序相における，非共鳴磁気散乱と E_2 および E_1 共鳴散乱の例 [30].

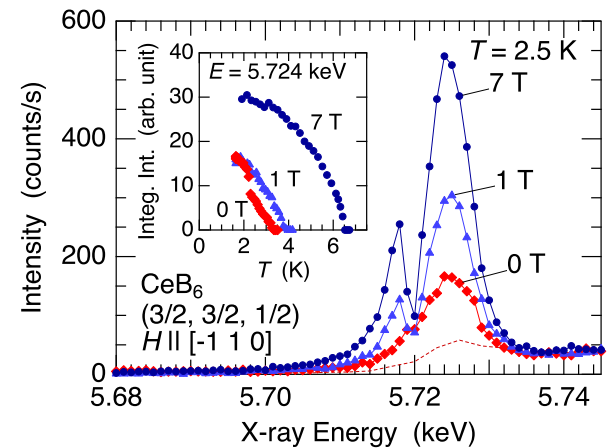


図 1.8: CeB_6 の反強四極子秩序相における， E_1 および E_2 共鳴散乱とそれらの干渉.

磁気秩序による非共鳴磁気散乱と共鳴散乱 図 1.7 は，磁気秩序による非共鳴磁気散乱と E_2 および E_1 共鳴散乱の例で，直方晶化合物 $\text{SmRu}_2\text{Al}_{10}$ の格子整合磁気秩序相 ($T < 5.6$ K) での結果である [30]. 回折ピークを観測した逆格子点は $\kappa = (0, 0.75, 7)$ であり， b 軸方向に 4 単位格子進むと元に戻る磁気構造であることを示している．低エネルギー領域で一定値になっているのが非共鳴磁気散乱による回折強度であり，6.712 keV と 6.721 keV にみられる共鳴ピークが，それぞれ E_2 および E_1 共鳴である^{*24}．低エネルギー側にただただと長く裾を引くのは，非共鳴磁気散乱と E_2 共鳴散乱とが重なり合い，干渉しているためである．

共鳴散乱どうしの干渉 図 1.8 は CeB_6 の AFQ 秩序相での，超格子反射点 $\kappa = (1.5, 1.5, 0.5)$ における回折強度のエネルギースペクトルである^{*25}． E_1 (5.724 keV) と E_2 (5.718 keV) での共鳴ピークがはっきりと分離し，さらに，中間の 5.720 keV では鋭く折れ曲がっている．これは単に 2 つのピークの足し合わせでは説明できず， E_1 共鳴と E_2 共鳴との干渉（重ね合わせ）が起こっていることを示している．磁場方向を反転させると，スペクトル形状も大きく変化する．この磁場反転効果から，四極子や八極子を分離して抽出することができる (§4)．

*24) E_1 および E_2 共鳴については §4 で説明する．

*25) 整数で表されない指数をもつ Bragg 反射のことを，結晶格子よりも大きな単位格子を持つ構造からの Bragg 反射という意味で，超格子反射と呼ぶ．