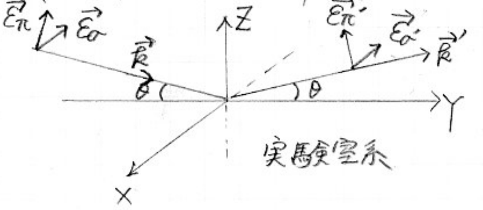
〈共鳴X線回折の計算での軸のとり方〉　　CeB6の場合.



$\vec{k} = (0, \cos\theta, -\sin\theta)$　　$\vec{\kappa} = \vec{k} - \vec{k}'$

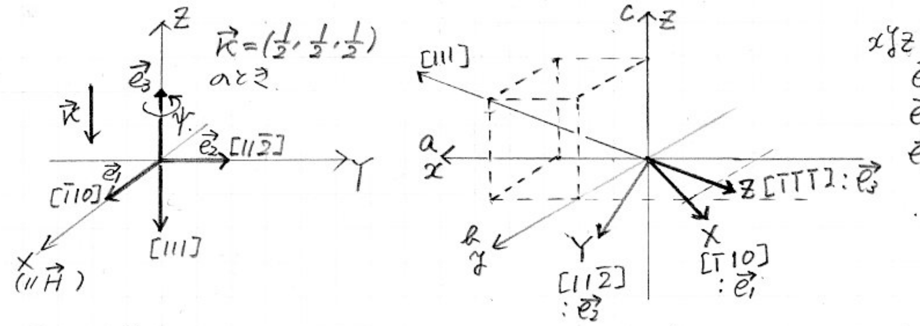
$\vec{k}' = (0, \cos\theta, \sin\theta)$

$\vec{\varepsilon}_\sigma = (-1, 0, 0)$　　$\vec{\varepsilon}_\sigma' = (-1, 0, 0)$

$\vec{\varepsilon}_\pi = (0, \sin\theta, \cos\theta)$　　$\vec{\varepsilon}_\pi' = (0, -\sin\theta, \cos\theta)$

↗ 異る副格子でも同じ.

◎ Ceイオンに固定されたxyz軸と結晶のabc軸は一致させる.

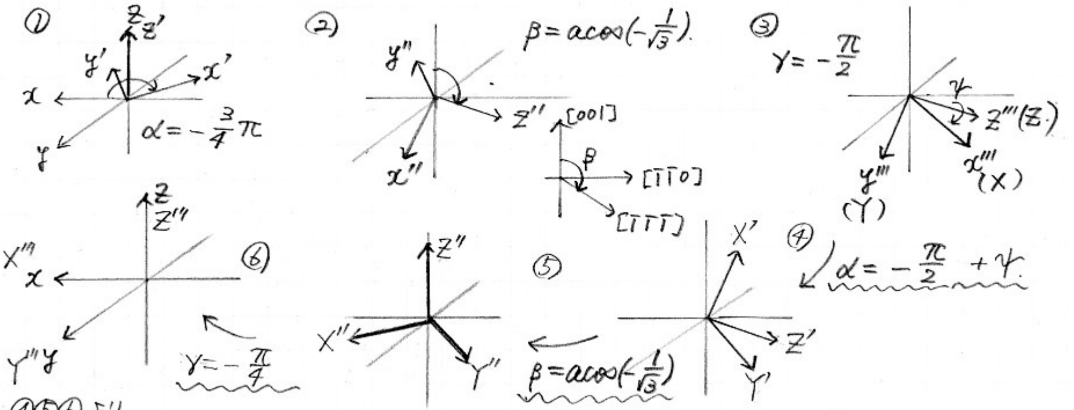


xyz系で表した $\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}$ ベクトル

$\vec{e}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1, 1, 0)$

$\vec{e}_2 = \frac{1}{\sqrt{6}}(1, 1, -2)$ ← azimuth reference vector.

$\vec{e}_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}(-1, -1, -1)$



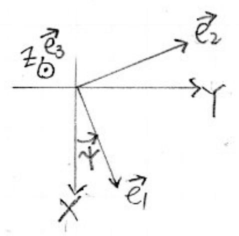
④⑤⑥より,

XYZ座標系で (k_x, k_y, k_z) と表されていたベクトル $\vec{k}$ は xyz座標系では $(k_x, k_y, k_z)R(\alpha, \beta, \gamma)$ で表される　　$R(\alpha, \beta, \gamma)$ は Euler Rotation

確認：

$$\begin{cases} (1,0,0)R(\alpha,\beta,\gamma) = \vec{e}_1\cos\psi - \vec{e}_2\sin\psi = \hat{X} \\ (0,1,0)R(\alpha,\beta,\gamma) = \vec{e}_1\sin\psi + \vec{e}_2\cos\psi = \hat{Y} \\ (0,0,1)R(\alpha,\beta,\gamma) = \vec{e}_3 \quad = \hat{Z} \end{cases}$$

が満たされるはず.



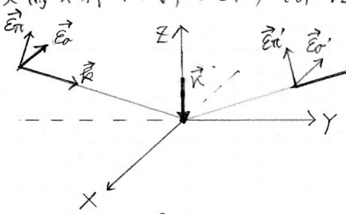
$\vec{\kappa} = (\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$ のときは

$\beta = a\cos(-\frac{1}{\sqrt{19}})$.

$$\begin{cases} \vec{e}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1, 1, 0) \\ \vec{e}_3 = \frac{1}{\sqrt{19}}(-3, -3, -1) \\ \vec{e}_2 = \frac{1}{\sqrt{38}}(1, 1, -6) = \vec{e}_3 \times \vec{e}_1 \end{cases}$$

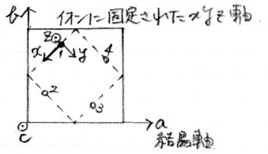
共鳴X線回折の計算での軸の取り方 (T. Matsumura, 2011.3.14)

〈共鳴X線回折の計算での軸のとり方〉



$\vec{\kappa} = \vec{k} - \vec{k}'$

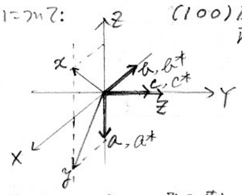
Euler angle.
(DyB4) の場合



Dy-1, 2, 3, 4 それぞれについて Euler angle (α, β, γ) を決める

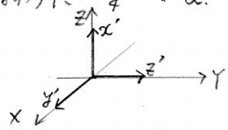
Dy-1について:

(100)反射 ($\psi=0$) の配置
$\vec{\kappa} \parallel \vec{a}^*$

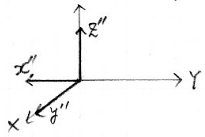


Euler rotation により xyz軸を XYZ に移す

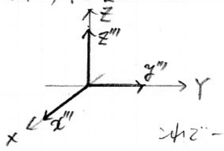
① z軸まわりに $-\frac{\pi}{4}$: α.



② y'軸まわりに $\frac{\pi}{2}$: β.



③ z''軸まわりに $\frac{\pi}{2}$: γ



これで一致した