

++++
 ここでは、読者から寄せられた質問に答えて、加筆した点を示します
 ++++

【Question】 結晶構造の空間群になぜ時間反転を導入する必要があるのかよく分かりません。また、磁気モーメントの対称操作による変換をもう少し詳しく説明して下さい。

【Answer】 図 4.2 を環電流として視覚的になるように書き直しました。さらに、5.2 章 磁気空間群の節の初めの所に時間反転を導入する意味の説明を加えました。また、4.3 章に具体的に磁気モーメントの変換例を示しました。

4.3 章の追加

それでは、4.2 章で示した「対称性により自発分極 \mathbf{P} がどのように生き残るか」という議論を磁気モーメントに適用してみましょう。例として、ある原子位置の局所対称性 (site symmetry) に $(2_x, 2_y, 2_z)$ 、あるいは (m_x, m_y, m_z) が有る場合です。立方晶の原点 $(0, 0, 0)$ の多くは $m3$ 。あるいは 23 。の局所対称性を持っていますし、正方晶や直方 (斜方) 晶でも同様な場合があります。ここでは、 $m3$ 。あるいは 23 。の立方晶を考えましょう。図 1 を使って、もし 2_z があれば磁気モーメントは $[0, 0, S_z]$ となりますが、 2_x あるいは 2_y により $S_z=0$ となります。時間反転が入る場合、もし $2'_z$ があれば磁気モーメントは $[S_x, S_y, 0]$ となりますが、 $2'_x$ で $S_x=0$ 、 $2'_y$ により $S_y=0$ となります。つまり、 $(2_x, 2_y, 2_z)$ 軸が通っている立方晶の特殊位置では磁気モーメントは存在できません。同様に、 m_z があれば磁気モーメントは $[0, 0, S_z]$ となります

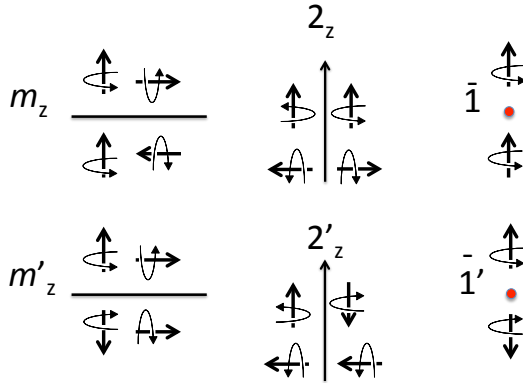


図 1: 図 4.2 軸性ベクトル (磁気モーメントを含む) の空間対称性と時間対称性

が, m_x あるいは m_y により $S_z=0$ となります. 時間反転が入る場合, もし m'_z があれば磁気モーメントは $[S_x, S_y, 0]$ となりますが, m'_x で $S_x=0$, m'_y により $S_y=0$ となります. つまり, $(2_x, 2_y, 2_z)$ 軸や (m_x, m_y, m_z) 面が通っている立方晶の特殊位置では磁気モーメントは存在できません.

次に直方 (斜方) 晶での例として, ある原子位置の局所対称性 (site symmetry) に $(m_x, m_y, 2_z)$ が有る場合を考えましょう. 上の議論と同様にして $(m_x, m_y, 2_z)$ で局所的な磁気モーメントはゼロとなります. ここで, 時間反転を入れて $(m'_x, m'_y, 2_z)$ でどうなるかを見てみましょう. 2_z で $S_x=0$ と $S_y=0$, m'_x で $S_x=0$, m'_y で $S_y=0$ となりますので, 磁気モーメントは $[0, 0, S_z]$ となり, 局所的な磁気モーメントとして z 軸方向の磁気モーメントが生き残ります.

もっと簡単な例は, ある原子位置の局所対称性 (site symmetry) が 2_z だけの場合です. つまり, 局所対称性が $..2$ と時間反転を入れた $..2'$ の場合です. 2_z の場合は $[0, 0, S_z]$ と z 軸方向の磁気モーメントが生き残り, $2'_z$ の場合は $[S_x, S_y, 0]$ と xy 面内の磁気モーメントが生き残ります.

5.2 章の追加

これまででは空間の対称操作として単純な回転 R と反転 $\bar{1}$ の対称操作のみの第一種空間群 (73 個) にらせん軸や映進面という新しい対称操作を導入して群を 230 個へと拡張してきました (第二種空間群). ここでは, 新しい対称操作としてさらに時間反転を付け加えます. 記号は $1'$ です.

空間群になぜ時間反転を導入するかここで説明をします. 分かりやすくするために, 今までの空間群を例として見てみましょう. 対称操作 $\{1, 2_x, 2_y, 2_z\}$ をもつ群に対称操作 $\{1, \bar{1}\}$ を加えると, $\{1, 2_x, 2_y, 2_z, \bar{1}, m_x, m_y, m_z\}$ の群が出来ます. 単位胞を基本単位格子に取るなら $P222$ が反転対称 $\bar{1}$ を導入して $P\frac{2}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$ に拡張されたわけです. 逆に見ると, $P\frac{2}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$ は $\{1, 2_x, 2_y, 2_z\} \times \{1, \bar{1}\}$ となります. つまり, $\{1, 2_x, 2_y, 2_z, \bar{1} = 1\bar{1}, m_x = 2_x\bar{1}, m_y = 2_y\bar{1}, m_z = 2_z\bar{1}\}$ と対称操作の中のいくつかの組に $\bar{1}$ を施した群と施していない群の部分群に分けられます. さらに, 一部分のみに $\bar{1}$ を施した部分群も作ることが出来ます.

格子点に対する対称操作でブラベ格子と呼ばれる単位胞を作り, 単位胞内の原子の位置に対する対称操作で空間群を作りました. 分子のもつ軸性ベクトルでも見かけは原子の対称操作による移動とは違って見えますが本質的には同じでした. 軸性ベクトルに対するこれまでの対称操作は何ら変更有りません. そこで, 次の段階として時間依存する対象物を対称操作で動かすことを考えます. 環電流がその一例です. 環電流は磁気モーメントという軸性ベクトルを作ります. ここで, 反転対称 $\bar{1}$ を導入したように時間反転 $1'$ を導入すると, 環電流の $I = dQ/dt$ の時間項のために磁気モーメントは反転します. つまり, $\{1, 2_x, 2_y, 2_z\} \times \{1, 1'\}$ と拡張するわけです. さらに, 一部分のみに $1'$ を施した部分群も作ることが出来ます.

式 (4.3) で述べたように, 時間反転により磁気モーメントは空間対称操作とは違った変換を受けます. そこで, 磁気モーメントの配置パターンを分類するために磁気空間群 (magnetic space group) というものが考えられました. 通常の 230 の空間群は International Table として国際結晶学連合 (IUCr) に

より既にまとめられています。三次元の磁気空間群は 1651 あり、IUCr により 2011 年の委員会でも正式に新しい International Table としてまとめられることが決定し、現在その作業が行われています。また、既に磁気空間群の本も IUCr から出版されています。この本は、e-book として IUCr のホームページ <http://www.iucr.org/publ/978-0-9553602-2-0> からダウンロードすることが出来ます (現時点では無料です)。

【Question】 5.2 章 磁気空間群の節のところで、「対称操作の積を作って群を作っていることをこの二つの磁気空間群で各自確かめて下さい」とありますが、不慣れなのでよく分かりません。

【Answer】 対称操作の積を実際に示して積表を作り群であることをテキストの中で示します。

これらの対称操作は全て原点を通っているので式 5.3 でやったように対称操作の積を作り、群を作っていることを確かめることが出来ます。具体的に NO26.3.170: $Pm'c_2'$ でやってみましょう。対称操作は 4 個有ります。

$$\begin{aligned}
 (1|000) &= \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right), (m_x|000)' = \left(\begin{array}{ccc|c} \bar{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right)', \\
 (m_y|00\frac{1}{2}) &= \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{2} \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right), (2_z|00\frac{1}{2})' = \left(\begin{array}{ccc|c} \bar{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{2} \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right). \quad (1)
 \end{aligned}$$

対称操作間の積として、 $(m_x|000)' \cdot (m_y|00\frac{1}{2})' = (2_z|00\frac{1}{2})'$ は

$$\left(\begin{array}{cccc|c} \bar{1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{array} \right)' \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{array} \right) = \left(\begin{array}{cccc|c} \bar{1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{array} \right)' \quad (2)$$

$(m_x|000)' \cdot (2_z|00\frac{1}{2})' = (m_y|00\frac{1}{2})'$ は

$$\left(\begin{array}{cccc|c} \bar{1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{array} \right)' \left(\begin{array}{cccc|c} \bar{1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{array} \right)' = \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{array} \right) \quad (3)$$

$(m_y|00\frac{1}{2})' \cdot (2_z|00\frac{1}{2})' = (m_x|000)'$ は

$$\left(\begin{array}{cccc|c} \bar{1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{array} \right)' \left(\begin{array}{cccc|c} \bar{1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{array} \right)' = \left(\begin{array}{cccc|c} \bar{1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{array} \right)' \quad (4)$$

となります。

これらから作られる積表は表1となります。この積表から群を作っていることが分かります。

表 1: NO26.3.170: $Pm'c2_1'$ の対称操作の積表

	1	$(m_x 000)'$	$(m_y 00\frac{1}{2})'$	$(2_z 00\frac{1}{2})'$
1	1	$(m_x 000)'$	$(m_y 00\frac{1}{2})'$	$(2_z 00\frac{1}{2})'$
$(m_x 000)'$	$(m_x 000)'$	1	$(2_z 00\frac{1}{2})'$	$(m_y 00\frac{1}{2})'$
$(m_y 00\frac{1}{2})'$	$(m_y 00\frac{1}{2})'$	$(2_z 00\frac{1}{2})'$	1	$(m_x 000)'$
$(2_z 00\frac{1}{2})'$	$(2_z 00\frac{1}{2})'$	$(m_y 00\frac{1}{2})'$	$(m_x 000)'$	1

【Question】 図 7.2 において、原子炉内での中性子の分布のピークが kT_0 でないのはなぜですか。

【Answer】 速度に関するボルツマン分布の基本的なところですが、式の導出をほとんどしていなかったので分かりずらかったようです。変数変換の問題ですが、7.2 節中性子の発生方法の図 7.2 を作る式を少し丁寧に説明して図 7.2 に別の図も追加しました。

中性子のエネルギー分布は熱平衡のボルツマン分布を計算するだけです。熱平衡温度が 310 K の時の中性子波長分布 $n(\lambda)d\lambda$ を図 2 に示します。当然ながら連続分布しています。分布の極大は 53.4 meV ($\lambda=1.24 \text{ \AA}$) にありますが、コールドソースを使うと低エネルギー(長波長)側に、ホットソースを使うと高エネルギー(短波長)側にその極大を動かすことができます。コールド

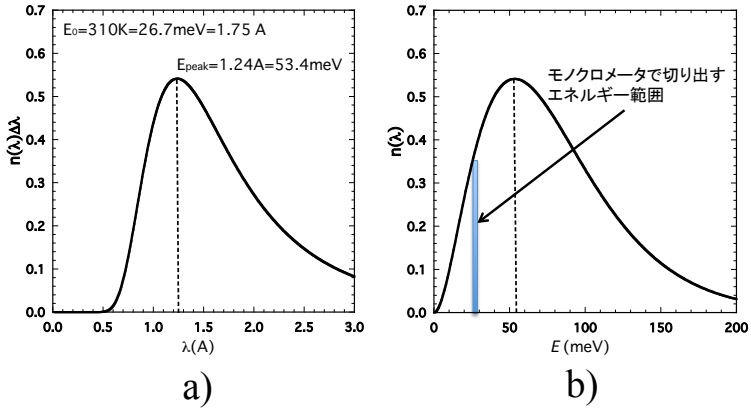


図 2: 原子炉内の中性子の波長・エネルギー分布

ドソースから取り出したエネルギーの低い中性子は冷中性子 (cold neutron) と呼ばれます。ガイドミラーと呼ばれる鏡による全反射を利用して外部に取り出し、原子炉に隣接したガイドホールで実験に使用されます。JRR3 では冷中性子のガイドが 3 本、熱中性子のガイドが 2 本設置されています。

図 2 の中性子の分布 $n(\lambda)d\lambda$ についてももう少し詳しく説明しておきます。原子炉内の中性子はモデレータと衝突して熱平衡状態になり、マックスウェル-ボルツマンの速度分布として、

$$n(v_x, v_y, v_z)dv_x dv_y dv_z = N \left(\frac{m}{2\pi k_B T_0} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2k_B T_0}\right) dv_x dv_y dv_z \quad (5)$$

となります。ここで、 N は全粒子数、 k_B はボルツマン定数、 T_0 は原子炉内の温度です。三次元速度空間の $dv_x dv_y dv_z$ にある粒子数密度 $n(v_x, v_y, v_z)$ の表式になっています。これを、速さ $v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$ に書き直すと、

$$n(v)dv = N \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{v}{v_0}\right)^2 \exp\left(-\left(\frac{v}{v_0}\right)^2\right) \frac{dv}{v_0} \quad (6)$$

となり、マックスウェル-ボルツマンの速さ分布で、一次元速さ空間の線分 dv にある粒子数密度 $n(v)$ の表式になります。ここで、

$$E_0 = k_B T_0 = \frac{1}{2} m v_0^2 \quad (7)$$

の関係を使っています。 $n(v)$ の v に対する分布のピークは v_0 になります。

次に、この分布をエネルギー E で $n(E)dE$ に直してみましょう。 $dE = mvdv$ から、

$$n(E)dE = N \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{E}{E_0}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{E}{E_0}\right) \frac{dE}{E_0} \quad (8)$$

となります。 $n(E)$ の E に対する分布のピークは $0.5E_0$ になります。中性子で良く用いられるのは波長 λ での分布 $n(\lambda)d\lambda$ です。

$$E_0 = \frac{p_0^2}{2m} = \frac{(h/\lambda_0)^2}{2m} \quad (9)$$

を式の変形に用います。 $dE = \frac{h^2}{m} / \lambda^3 d\lambda$ から、

$$n(\lambda)d\lambda = N \left(\frac{h^2}{m}\right) \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}E_0}\right) \left(\frac{E}{E_0}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{E}{E_0}\right) d\lambda / \lambda^3 \quad (10)$$

となります。これを λ の式に書き直すと、

$$n(\lambda)d\lambda = N \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{\lambda_0}{\lambda}\right)^4 \exp\left(-\left(\frac{\lambda_0}{\lambda}\right)^2\right) \frac{d\lambda}{\lambda_0} \quad (11)$$

となり、その分布を $n(\lambda)/N$ として図 2a) に示します。式 (11) は $\lambda_0/\sqrt{2}$ でピークを持ちます。しばしば見られるのが、 $n(\lambda)d\lambda$ をエネルギー E でプロットした図です。式 (10) を変形して、

$$n(\lambda)d\lambda = N \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{E}{E_0}\right)^2 \exp\left(-\frac{E}{E_0}\right) \frac{d\lambda}{\lambda_0} \quad (12)$$

が得られます。 $n(\lambda)$ をエネルギー E で表しているのが $\frac{E}{E_0}$ と λ_0 が混在して少し奇妙な式ですが、与えられた E に対応する λ と $\lambda + d\lambda$ の間にある中性

子数 $n(\lambda)d\lambda$ という意味です。式 (12) では $2E_0$ でピークを持ちます。図 2b) に、 $n(\lambda)/N$ の E 依存性を描いています。 $T_0 = 310$ K では $E_0 = 26.7$ meV で $\lambda_0 = 1.75$ Å なので、 $n(\lambda)d\lambda$ は 53.4 meV, 1.24 Å にピークを持ちます。ちなみに、中性子の場合のエネルギーと温度と波長の関係式は、式 (7) と式 (9) に物理定数を代入して

$$\begin{aligned} E(\text{meV}) &= T(\text{K})/11.6056, \\ \lambda(\text{\AA}) &= 9.044/\sqrt{E(\text{meV})} \end{aligned} \quad (13)$$

となります。以上のことより、もし $n(\lambda)d\lambda$ で $\lambda = 0.7$ Å にピークが欲しいのなら、 $T_0 = 968$ K のホットソースが必要になると計算できます。

【Question】 中性子に使われるフィルターに関して、文献では 5.5 meV あたりでも使えると出ています。もう少し説明して下さい。

【Answer】 7.3 章 中性子用フィルターの節の後半に表と少し説明を加えました。また、数値に間違いがあったので、図を描き直してテーブルを追加しました。

モノクロメータを使用してビームを単色化する時に注意することは $\lambda/2$ の混入です。ブラッグの式から分かるように、

$$\begin{aligned} 2k\sin\theta &= Q_{hkl} \\ 2(2k)\sin\theta &= 2Q_{hkl} \end{aligned} \quad (14)$$

で同じ 2θ でブラッグ反射が起こります。二つ目の式で $2\mathbf{Q}_{hkl}$ ということは、 $\mathbf{Q}_{2h,2k,2l}$ のことで、このブラッグ点から $2k = \frac{1}{\lambda/2}$ の $\frac{\lambda}{2}$ の中性子が回折条件を満たしていると言うことです。この $\frac{\lambda}{2}$ の中性子の除去は大変重要です。 $\frac{\lambda}{2}$ とは、波数ベクトルで言えば $2k$ であり、中性子のエネルギーで言えば $4E$ です。

一つの方法は、一部に穴の開いたドラムを回転して中性子の速さの差を利用して、 $\frac{\lambda}{2}$ の中性子を通さずに λ の中性子だけを通す速度弁別装置 (velocity selector) を用いる方法です。この装置は、エネルギーの低い冷中性子では使われていますが、熱中性子領域では費用や保守の問題、装置の難しさのせいで、まだそれ程使われていません。 $\frac{\lambda}{2}$ の回折がないモノクロメータとして Si(111) 反射や Ge(111) 反射があります。ダイヤモンド構造であり、空間群は $Fd\bar{3}m$ で d -glide があるために、(222) 反射は消滅します。ただし、(333) 反射は消滅しないので $\frac{\lambda}{3}$ の混入は防ぐことが出来ません。

次によく使われるのはフィルターです。フィルターとして使われるのはパイロリティックグラファイト (PG) です。この原理は X 線のフィルターとは違って、ブラッグ反射で特別の波長の中性子をとり除くことによります (Bragg-scattering filter)。PG 結晶は、面内はよくそろったグラファイト結晶ですが、面間が無秩序に成長していて、 c 軸のみがそろった結晶です。そこで、逆格子では c^* 軸をそろえて回転したような構造となり、(00 l) 以外の反射はリング状になっています。5 cm から 10 cm ぐらいの大きな PG 結晶に垂直に中性子を入射します。すると、特別の λ でブラッグ反射が起こります。炭素原子の吸収は少ないので、ブラッグ反射が起こった λ 以外の中性子はほとんど強度を減らさずに PG 結晶を通過します。そのために、白色の中性子を通過させると特別の λ の所だけ強度が非常に弱くなります。モノクロメータで単色化して、 λ と $\frac{\lambda}{2}$ のビームを通して、 $\frac{\lambda}{2}$ でブラッグ反射を起こして強度を弱めれば λ のみが透過しますので、フィルターとなります。ただし、この時にも $\frac{\lambda}{3}$ の混入は防ぐことが出来ません。PG フィルターは小さくて比較的安価なので手軽に使えるところが強みです。透過中性子に強度減少が現れるのは、TOF 法で見られる粉末物質を透過する場合の Bragg エッジ

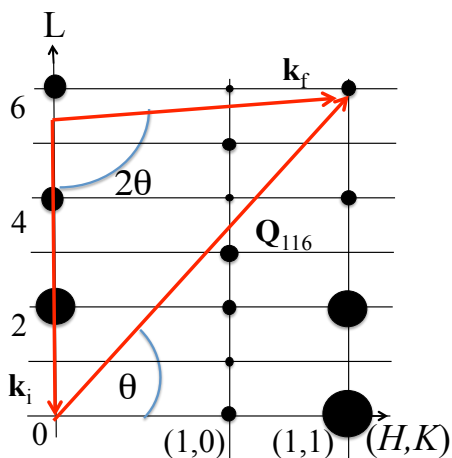


図 3: PG の逆格子とフィルターの原理

あるいは Bragg cutoff といわれるものと本質的には同じですが、一軸配向した PG 結晶の場合その効果は非常に顕著に表れます。

PG フィルターでよく使われるエネルギーは 13.7 meV と 14.7 meV と 30.5 meV です。現実にフィルターとして使えるエネルギーを計算してみましょう。グラファイト結晶は空間群 $P6_3mc$ で $a=2.46 \text{ \AA}$, $c=6.70 \text{ \AA}$ です。逆格子単位胞では $a^*=0.469 \text{ \AA}^{-1}$, $c^*=0.149 \text{ \AA}^{-1}$ です。炭素原子の位置は, $(0,0,0)$, $(0,0,\frac{1}{2})$, $(\frac{1}{3},\frac{2}{3},\delta)$, $(\frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{2}+\delta)$ で, δ は 0.05 以下の小さな値です。構造因子は, $(h h 2n)$ で強く, $(h h 2n+1)$ では消滅則で消えます。 $(h k 2n+1)$ では $h-k=3n\pm 1$ の時に δ により強度が出ます。一般に, $(1 0 l)$ 反射の構造因子は有限の値となります。PG 結晶の逆格子は図 3 となります。 c 軸のみそろっていて c 面の向きが無秩序なので, $(0 0 l)$ 反射以外はリング状に分布しています。図の $(1 0 l)$ や $(1 1 l)$ 反射はリングの赤道面での断面です。白色中性子を c^* 方向に入射すると, 例えば $(1 1 6)$ 反射でブラッグ反射が起こります。ここで注意することは, ブラッグ反射を起こさせるために結晶の方位

を特別に調整しなくても波長スキャンにより自動的に回折条件を満たすことです。ブラッグ反射角を 2θ とすると、 $Q_{hkl}\sin\theta=lc^*$ 、 $2k\sin\theta=Q_{hkl}$ の関係を満たす k が選ばれるので、 $k=Q_{hkl}^2/(2lc^*)$ となります。例えば (1 1 6) 反射の時、 $k_0=0.817 \text{ \AA}^{-1}$ で $E_0=54.6 \text{ meV}$ です。ブラッグ反射角は $2\theta=95.5^\circ$ となります。この 2θ 方向はブラッグ反射がリングになっているので円錐として散乱されています。この中性子が $\lambda/2$ となる λ の中性子は $k=k_0/2=0.408 \text{ \AA}^{-1}$ で $E_1=E_0/4=13.6 \text{ meV}$ です。可能な反射と Q 、それによる $E_0(\text{meV})$ およびその波数 $k_0(\text{\AA}^{-1})$ 、実験として使用できる $E_1(\text{meV})$ を表 2 に示します。実際に使用するときには、 $\lambda/2$ の強度減少と λ での強度減少の兼ね合い、さらに $\lambda/3$ の強度減少も考慮する必要があります。また、現実の PG 結晶では作成法により c 軸の値が少し違いますので、実測する必要があります。通常市販されている PG で、フィルターによく使われているのは E_1 として 13.7 meV, 14.7 meV, 24.0 meV, 30.5 meV です。13.7 meV や 14.7 meV での $\lambda/2$ の除去能力は非常に良く、 $\lambda/2$ を 3 桁から 4 桁ほど落とすので、現実的には $\lambda/2$ の混入はゼロと見なしても良いレベルです。

PG フィルターでは、4.5 meV や 5.6 meV にも $\lambda/2$ の窓があり使用可能と文献にはありますが、通常 13.7 meV より低いエネルギーでは使いません。そこで使われるのが 5.2 meV ($\lambda=3.97 \text{ \AA}$) に Bragg cutoff をもつ Be フィルターです。Be フィルターは $E_1=5 \text{ meV}$ のフィルターとして使用できますが、透過率を高めるために冷却して使用する必要があります。Be が使われるのは六方晶で、 $a=2.285$ 、 $c=3.58 \text{ \AA}$ の小さな単位胞であり、最小の Q ベクトルが $Q(002)=0.56 \text{ \AA}^{-1}$ と大きいからです。これより小さな k ベクトル ($k < Q_{min}/2$) の中性子は粉末回折により散乱されることはありません。なお、5 meV よりエネルギーの低い中性子は冷中性子 (cold neutron) と呼ばれています。高エネルギーの中性子を落とすために使われるのがサファイアフィルターです。70 meV 程度よりエネルギーの高い中性子に対してフォノン散乱のために吸収が大きくなります。これら、フィルターを使う時は、フィルターから大きなバックグラウンドが発生しているので、その防御が重要になってきます。

表 2: PG フィルターとして使える可能性のある指数とエネルギー

h	k	l	$E_1(\text{meV})$	$E_0(\text{meV})$	$Q(hkl)$	$k_0(\text{\AA}^{-1})$	2θ
1	0	3	4.5	18.1	0.649	0.470	87.3
1	0	4	4.8	19.1	0.759	0.483	103.6
1	0	2	5.5	22.0	0.556	0.518	64.9
1	0	5	5.5	22.0	0.882	0.521	115.7
1	1	6	13.6	54.6	1.210	0.817	95.5
1	0	10	13.8	55.0	1.565	0.820	145.1
1	1	4	14.8	59.4	1.009	0.852	72.6
1	1	12	23.9	95.4	1.967	1.080	131.2
1	0	14	24.6	98.5	2.142	1.097	154.7
0	0	16	29.2	116.6	2.388	1.194	180.0
1	1	14	29.6	118.4	2.242	1.203	137.5
1	0	16	31.5	125.8	2.434	1.240	157.8

ガイドミラーを利用した場合はミラーの全反射の臨界角に対応したエネルギーより高いエネルギーの中性子は反射しません。これをカットオフエネルギーといいます。そのために、ガイドホールで使用する中性子では、 $\frac{\lambda}{2}$ や $\frac{\lambda}{3}$ の中性子が元々非常に弱い完全に除去されています。そのような意味で、ガイドホールでの中性子実験は原子炉内での実験に比べて有利な部分があります。

【Question】 対称中心のある点群の表だけでなく、対称中心の無い点群の表や、カイラル結晶の可能性のある点群の表も載せて下さい。

【Answer】 以下のように表を追加しました。

なお、この中で対称中心のある 11 個の点群だけを表 3 に抜き出しておきます。英語では、centrosymmetric(セントロシンメトリック)な点群です。逆に、対称中心の無い点群は 21 個あり、表 4 に示します。英語では、noncentrosymmetric(ノンセントロシンメトリック)な点群です。対称中心が有るか無いかは、すぐ後で示すように物性を考える上でしばしば重要な役割を果たします。また、カイラル結晶構造を作る群は対称中心とともに回反軸もありません。表 4 から回反軸のある点群を除いた 11 個の点群を表 5 に示します。ここで、鏡映面 m は 2 回回反軸 $\bar{2}$ だったことを思い出して下さい。空間群としては、後で述べる第二種空間群も含めて 65 個作ることが出来ます(この群はソクケ群と呼ばれています)。カイラル空間群という言葉はこれとは違うことを意味していて、上記 65 個のうちの 22 個となるので注意して下さい。

表 3: 対称中心のある 11 の点群

$\bar{1}$	$2/m$	mmm	$4/m\bar{m}m$	$4/m$	
$6/m\bar{m}m$	$6/m$	$m\bar{3}m$	$m\bar{3}$	$\bar{3}m1(\bar{3}1m)$	$\bar{3}$

表 4: 対称中心の無い 21 の点群

1	2	m	$mm2$	222	
$4mm$	$\bar{4}2m(\bar{4}m2)$	422	$\bar{4}$	4	
$6mm$	$\bar{6}m2(\bar{6}2m)$	622	$\bar{6}$	6	
$\bar{4}3m$	432	23	$3m1(31m)$	$321(312)$	3

表 5: 対称中心と回反軸の無い 11 の点群. カイラル結晶構造の可能な空間群を作る.

1	2	222	422	4	622	6	432	23	$321(312)$	3
---	---	-----	-----	---	-----	---	-----	----	------------	---

【Question】 立方晶の回折の指数 (h, k, l) の表を載せて下さい.

【Answer】 実験結果をざっと解析するときにはしばしば必要になる表ですので, 8.7章 粉末回折法のところに立方晶の回折の指数 (h, k, l) の表を載せました.

表 6: 立方晶 (単純 (S)、面心 (F)、体心 (I)) での可能な指数 $N = h^2 + k^2 + l^2$

N	$S(h \ k \ l)$	$F(h \ k \ l)$	$I(h \ k \ l)$	N	$S(h \ k \ l)$	$F(h \ k \ l)$	$I(h \ k \ l)$
1	1 0 0			45	6 3 0		
2	1 1 0		1 1 0		5 4 2		
3	1 1 1	1 1 1		46	6 3 1		6 3 1
4	2 0 0	2 0 0	2 0 0	48	4 4 4	4 4 4	4 4 4
5	2 1 0			49	7 0 0		
6	2 1 1		2 1 1		6 3 2		
8	2 2 0	2 2 0	2 2 0	50	7 1 0		7 1 0
9	3 0 0				5 5 0		5 5 0
	2 1 1				5 4 3		5 4 3
10	3 1 0		3 1 0	51	7 1 1	7 1 1	
11	3 1 1	3 1 1			5 5 1	5 5 1	
12	2 2 2	2 2 2	2 2 2	52	6 4 0	6 4 0	6 4 0
13	3 2 0			53	7 2 0		
14	3 2 1		3 2 1	53	7 2 0		
16	4 0 0	4 0 0	4 0 0		6 4 1		
17	4 1 0			54	5 5 2		5 5 2
	3 2 2				6 3 3		6 3 3
18	3 3 0		3 3 0		7 2 1		7 2 1
	4 1 1		4 1 1	56	6 4 2	6 4 2	6 4 2
19	3 3 1	3 3 1		57	5 4 4		
20	4 2 0	4 2 0	4 2 0		7 2 2		
21	4 2 1			58	7 3 0		
22	3 3 2		3 3 2	59	5 5 3	5 5 3	
24	4 2 2	4 2 2	4 2 2		7 3 1	7 3 1	
25	5 0 0			61	6 5 0		
	4 3 0				6 4 3		
26	5 1 0		5 1 0	62	6 5 1		6 5 1
	4 3 1		4 3 1		7 3 2		7 3 2
27	5 1 1	5 1 1		64	8 0 0	8 0 0	8 0 0
	3 3 3	3 3 3		65	8 1 0		
29	5 2 0				7 4 0		
	4 3 2				6 5 2		
30	5 2 1		5 2 1	66	8 1 1		8 1 1
32	4 4 0	4 4 0	4 4 0		5 5 4		5 5 4
33	4 4 1				7 4 1		7 4 1
	5 2 2			67	7 3 3	7 3 3	
34	5 3 0		5 3 0	68	6 4 4	6 4 4	6 4 4
	4 3 3		4 3 3		8 2 0	8 2 0	8 2 0
35	5 3 1	5 3 1		69	8 2 1		
36	6 0 0	6 0 0	6 0 0		7 4 2		
	4 4 2	4 4 2	4 4 2	70	6 5 3		6 5 3
37	6 1 0			72	6 6 0	6 6 0	6 6 0
38	6 1 1		6 1 1		8 2 2	8 2 2	8 2 2
	5 3 2		5 3 2	73	6 6 1		
40	6 2 0	6 2 0	6 2 0		8 3 0		
41	5 4 0			74	7 5 0		7 5 0
	6 2 1				8 3 1		8 3 1
	4 4 3				7 4 3		7 4 3
42	5 4 1		5 4 1	75	5 5 5	5 5 5	
43	5 3 3	5 3 3			7 5 1	7 5 1	
44	6 2 2	6 2 2	6 2 2	76	6 6 2	6 6 2	6 6 2