1　中性子の反射率式

図 1 のように、平滑な平面に横幅 $2L_y$ でスリット幅 δ の中性子線が非常に小さな入射角 θ で入射し、それが平滑面で反射（鏡面反射）して x 方向に散乱されたとする。平滑面に当たっている中性子線の幅は $2L_x = \delta/\sin\theta$ である。今、薄膜の散乱長密度 (SLD）β 変化は

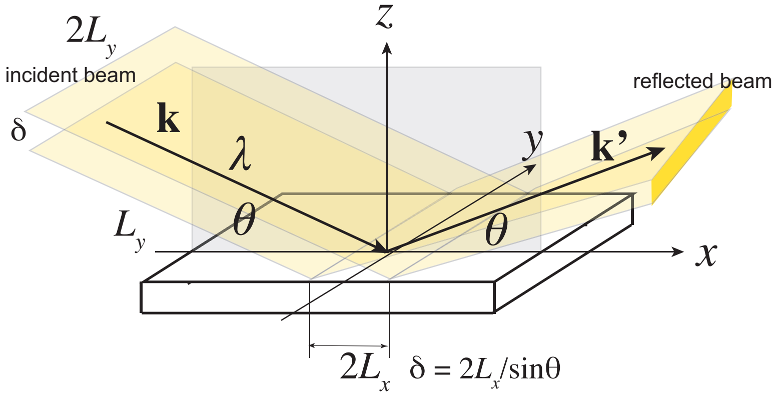

Figure 1: 鏡面反射の光学系

膜厚方向 ($-z$ 方向) のみだから、散乱長密度 β を以下の式のように定義する。

$$\beta(\mathbf{r}) = \begin{cases} \beta(z) & (|x| < L_x, |y| < L_y) \\ 0 & (\text{other}) \end{cases} \tag{1}$$

この薄膜からの微分散乱断面積を求める。一般に、微分散乱断面積は立体角 $d\Omega$ あたりの散乱断面積 $d\sigma$ だから、散乱長密度 (SLD）$\beta(\mathrm{r})$ をもつ散乱要素の体積積分として求められる。すなわち、

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) \propto \left| \iiint_V \beta(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{r} \right|^2 \tag{2}$$

ここで、

$$d^3\mathbf{r} = dxdydy, \quad \mathbf{Q}\cdot\mathbf{r} = xQ_x + yQ_y + zQ_z$$

である。式 (2) において x 方向、y に関する積分は、

$$\int_{-L_x}^{L_y} e^{ixQ_x} dx = 2L_x \frac{\sin(L_xQ_x)}{(L_xQ_x)} \tag{3}$$

となる（y についても同様）から、式 (2) は、

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) &\propto 16L_x^2L_y^2 \frac{\sin^2(L_xQ_x)}{(L_xQ_x)^2} \frac{\sin^2(L_yQ_y)}{(L_yQ_y)^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \beta(z) e^{izQ_z} dz \right|^2 & (4) \\ &\approx 16L_x^2L_y^2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} \beta(z) e^{-izQ} dz \right|^2 & (5) \end{aligned}$$

となる。ここで、$(\sin x/x) \to 1 (x \to 0)$、また、図 1 より、反射中性子線は入射中性子線とは逆方向なので $Q = -Q_z$ とした。

反射率 $R(Q)$ は、反射強度を入射強度で割って得られる。つまり、

$$R(Q) = \frac{\text{反射強度}}{\text{入射強度}} \tag{6}$$

である。一方、微分散乱断面積は、散乱角 2θ、方位角 ϕ の微小立体角 $d\Omega$ に散乱された中性子数を入射中性子数で規格したものと定義されるから、

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) = \frac{(2\theta,\phi)\ \text{方向に散乱する単位立体角当たりの中性子数}}{\text{単位面積あたりの入射中性子数}} \tag{7}$$

である。これら 2 つの式を比較する。図 1 より、入射中性子の照射面積は $4L_xL_y\sin\theta$ であるから、反射率は

$$R(Q) = \frac{1}{4L_xL_y\sin\theta}\iint_{\Delta\Omega}\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\mathrm{el}} d\Omega \tag{8}$$

となる。ここで、微分散乱断面積は非常に小さな領域 $\Delta\Omega$ なので、式 (7) の分子を $\Delta\Omega$ 内で積分して、

$$\iint_{\Delta\Omega}\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\mathrm{el}} d\Omega \approx \frac{\Delta\Omega}{4} \times \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\mathrm{el}}\Bigg|_{Q_x=0,Q_y=0,Q_z=-Q} \tag{9}$$

となる。一方、鏡面反射近傍での弾性散乱の運動学的考察（付録）により、微小立体角 $\Delta\Omega$ は

$$\Delta\Omega \approx \frac{16\pi^2\sin\theta}{L_xL_yQ^2} \tag{10}$$

と導かれる。式 (5)、(8)、(9)、(10) より、反射率は、

$$\begin{aligned} R(Q) &= \frac{1}{4L_xL_y\sin\theta}\iint_{\Delta\Omega}\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) d\Omega \\ &\approx \frac{16\pi^2}{Q^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty}\beta(z)e^{-izQ}dz\right|^2 \end{aligned} \tag{11}$$

を得る。

%%%%%%% 反射率式 %%%%%%%

$$R(Q) \approx \frac{16\pi^2}{Q^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty}\beta(z)e^{-izQ}dz\right|^2 \tag{12}$$

%%%%%%% 反射率式 %%%%%%%

2　付録：鏡面反射における角度の発散と微分断面積

鏡面反射における角度の発散を評価することで反射率測定における微分断面積を求める。入射ベクトルを $\mathbf{k}_i = (k_x, 0, k_z)$ とすると、反射ベクトルは $\mathbf{k}_f = (k_x + \epsilon, \delta, \xi - k_z)$ のように表すことができる。ここで、ϵ, δ, $-\xi$ はそれぞれ x、y、z 軸方向への発散を表すパラメーターである。$-k_z$ にある負号は、$z = 0$ 面での反射であることを示している。
この時、散乱ベクトルは

$$\mathbf{Q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f = (-\epsilon, -\delta, 2k_z - \xi) \tag{13}$$

となる。一方、弾性散乱だから $|\mathbf{k}_i|^2 = |\mathbf{k}_f|^2$ なので、

$$k_x^2 + k_z^2 = (k_x + \epsilon)^2 + \delta^2 + (\xi - k_z)^2 \tag{14}$$

である。右辺を展開し、微小発散（$\epsilon^2 \ll 2\epsilon k_x$ など）を仮定して 2 乗の項を無視すると、

$$\xi \approx \epsilon \frac{k_x}{k_z} \tag{15}$$

となる。よって、散乱（反射）ビームに沿った単位ベクトル $\hat{\mathbf{k}}_f$ は、x、y 軸方向への発散を表すパラメーター ϵ, δ の関数となり、

$$\hat{\mathbf{k}}_\mathbf{f}(\epsilon, \delta) \equiv \frac{\left(k_x + \epsilon, \delta, \frac{k_x}{k_z}\epsilon - k_z\right)}{\sqrt{k_x^2 + k_z^2}} \tag{16}$$

と表すことができる。ここで、鏡面反射からのずれ（発散）を散乱ベクトルの次元（逆空間）で表すと、$\epsilon = \pm\frac{\pi}{L_x}$、$\delta = \pm\frac{\pi}{L_y}$ 程度である。

反射（散乱）における微小散乱領域 $\Delta\Omega$ は、図 2 に示す、単位ベクトル $\hat{\mathbf{k}}_\mathbf{f}(\epsilon, \delta)$ （$\epsilon = \pm\frac{\pi}{L_x}$、$\delta = \pm\frac{\pi}{L_y}$）で作られる微小平行四辺形の面積に相当する。この平行四辺形の 2 辺を $\mathbf{a}$、$\mathbf{b}$ とすると、その平行四辺形の面積は、外積を使って $S = |\mathbf{a} \times \mathbf{b}| = |a||b| \sin\theta$ となる (θ は 2 つのベクトルのなす角)。すなわち、

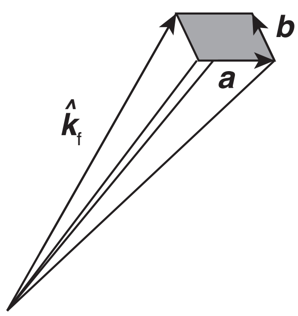

Figure 2: 単位ベクトル $\hat{\mathbf{k}}_\mathbf{f}(\epsilon, \delta)$ （$\epsilon = \pm\frac{\pi}{L_x}$、$\delta = \pm\frac{\pi}{L_y}$）で作られる微小平行四辺形

$$\begin{aligned} \Delta\Omega &= \left[\hat{\mathbf{k}}_{\mathbf{f}}(\frac{\pi}{L_x},0) - \hat{\mathbf{k}}_{\mathbf{f}}(-\frac{\pi}{L_x},0)\right] \times \left[\hat{\mathbf{k}}_{\mathbf{f}}(0,\frac{\pi}{L_y}) - \hat{\mathbf{k}}_{\mathbf{f}}(0,-\frac{\pi}{L_y})\right] && (17) \\ &= \frac{1}{k_x^2+k_z^2}\Big[\left(\frac{2\pi}{L_x},0,\frac{k_x}{k_z}\frac{2\pi}{L_z}\right) \times \left(0,\frac{2\pi}{L_y},0\right)\Big] && (18) \end{aligned}$$

これを計算すると、

$$\Delta\Omega = \frac{1}{k_x^2+k_z^2}\begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \frac{2\pi}{L_x} & 0 & \frac{k_x}{k_z}\frac{2\pi}{L_z} \\ 0 & \frac{2\pi}{L_y} & 0 \end{vmatrix} \tag{19}$$

さらに、

$$\begin{aligned} \Delta\Omega &= \frac{1}{k_x^2+k_z^2}\left|\frac{4\pi^2}{L_xL_y}\left(-\frac{k_x}{k_z},0,1\right)\right| && (20) \\ &= \frac{1}{k_x^2+k_z^2}\frac{4\pi^2}{L_xL_y}\sin\theta && (21) \end{aligned}$$

となる。
ここで、$k_z/\sqrt{k_x^2+k_z^2}$ は鏡面反射で $\sin\theta$、また図 3 より、$Q_x = 0$、$Q_z = 2k_z = -Q$ で、

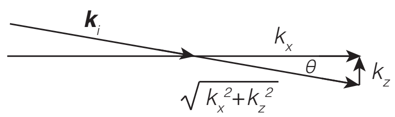

Figure 3: 入射ベクトルと散乱角の関係

$$\Delta\Omega = \frac{16\pi^2}{L_xL_yQ^2}\sin\theta \tag{22}$$

となり、式 (10) が得られる。そして、これを式 (9) に代入すれば、反射率式（式 (11)）が得られる。