

## X線・電子線回折と逆格子

(名古屋工業大学) 川崎晋司

- ① 1次元結晶の回折パターン
- ② ブラッグ条件とラウエ条件
- ③ 3次元結晶の逆格子とエワルドの反射球
- ④ 2次元結晶の逆格子
- ⑤ 1次元結晶の逆格子
- ⑥ 逆格子点とはいったいななもの

## ① 1次元結晶の回折パターン

下記のような1次元結晶のX線・電子線回折について考えてみようというのが今回のテーマです。この問題を通して逆格子点とはいったいなにものかについて考えていきたいと思います。

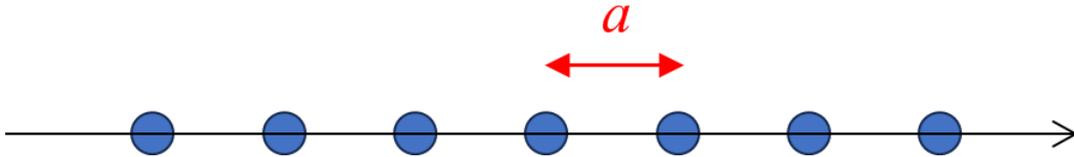


図1 原子間距離  $a$  の1次元結晶。

X線回折といえばブラッグの式を思い出すという人が多いのではないかと思います。

$$2d_{hkl} \sin \theta = \lambda$$

しかし、このブラッグの式は上の課題の回答を与えてくれるでしょうか。ブラッグの式の面間隔  $d$  のところに  $a$  を入れればよいのではなどと考えた人がいるかもしれませんがそれは落ち着いて考えれば間違っているなど気づくと思います。

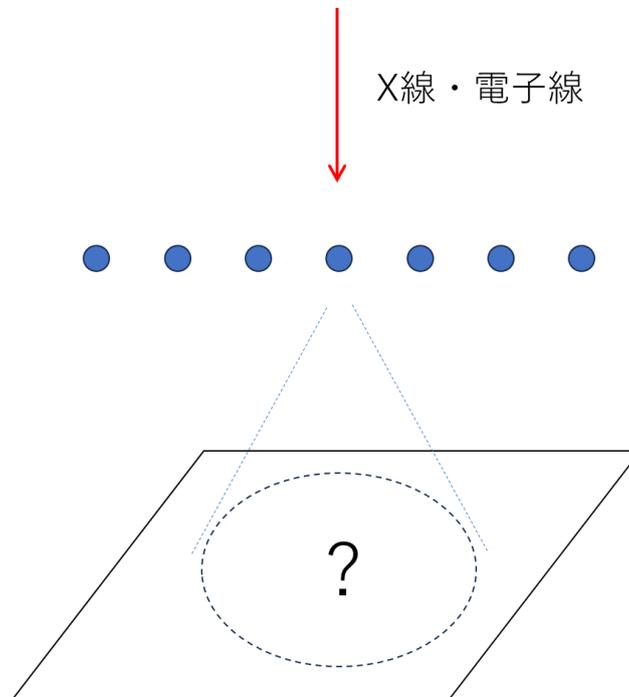


図2 1次元結晶の回折パターンはどうか？

そもそも1次元結晶などというものは存在しないのでそんなものは考えなくても良いと思われる方もいるかもしれません。図1に示したような正真正銘の1次元結晶は存在しないでしょうし、あったとしてもそれを図2のように回折実験の試料としてセットすることはできません。だから確かめようもない、というところではありません。

カーボンナノチューブは直径がサブナノから数ナノメートルの筒状の構造をしています。チューブ内側の中心軸には内表面からの表面ポテンシャルが360°あらゆる方向から効いてきます。それにより、中心軸に深い吸着ポテンシャルの溝が形成されます。これはチューブの中心に他の分子を引き寄せる力となって現れます。実際にいろいろな分子がチューブ内に取り込まれます。もっとも有名なものはフラーレンC<sub>60</sub>を内包したカーボンナノチューブです。遠目で眺めるとカーボンナノチューブの“さや”にC<sub>60</sub>という“えんどう豆”がおさまっているように見えるのでピーポッド（さやえんどう）と呼ばれます。

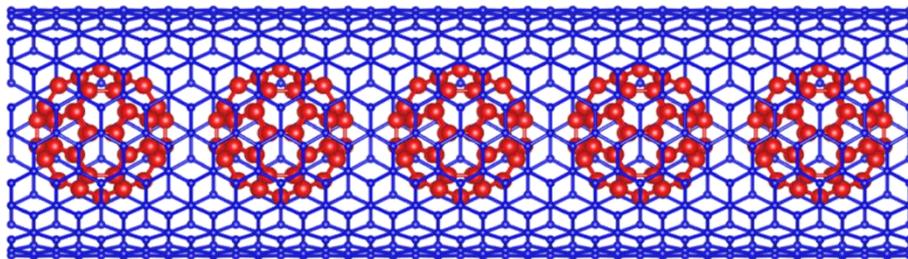


図3 C<sub>60</sub> ピーポッド。

このC<sub>60</sub>“分子”を一つの“原子”のように見立てると“原子”が一直線に並んでいるまさに図1の1次元結晶のようにとらえることができます。この“1次元結晶”にX線か電子線を入射して回折実験を行えば図2の答えが得られるのではないかと思います。

私の透過型電子顕微鏡 (TEM) の技術が低いためにはっきりとした像が見えていないのですが、図 4 (A) はピーポッドの束の TEM 像です。縦方向に  $C_{60}$  分子が並んでいることとなります。このような配置で紙面に垂直方向から電子線を入射し、制限視野回折という方法で回折パターンを撮影したのが図 4 (B) です。

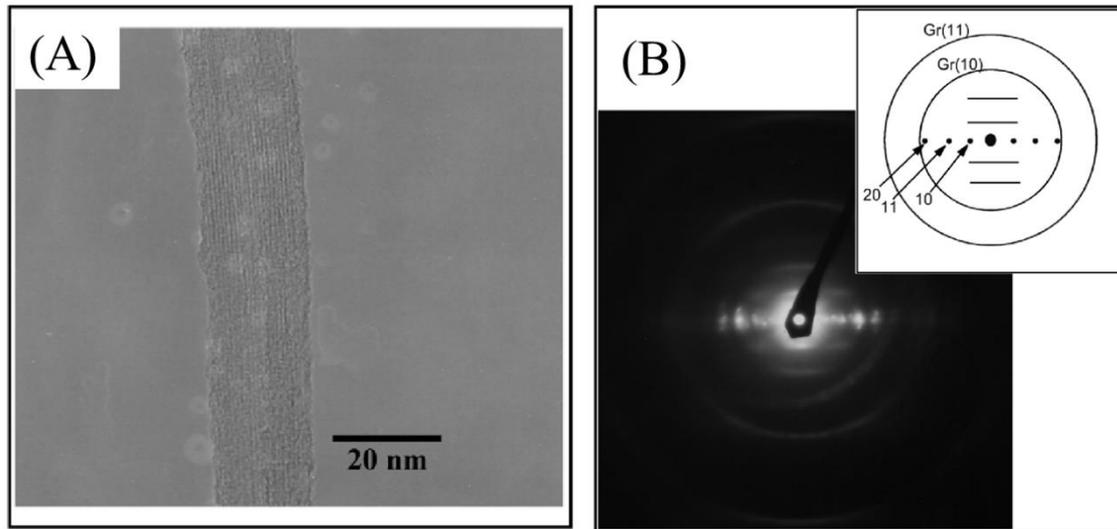


図 4  $C_{60}$  ピーポッドの (A) TEM 像と (B) 制限視野回折像。

制限視野回折像には中央の水平線沿いにドット状の回折スポットと水平線に平行に伸びた見慣れないライン上の回折線が観測されています。イラスト化すると図 5 のようになります。いかにも水平線沿いのドットが  $C_{60}$  の 1 次元結晶のように思えるかもしれませんがこれは違います。

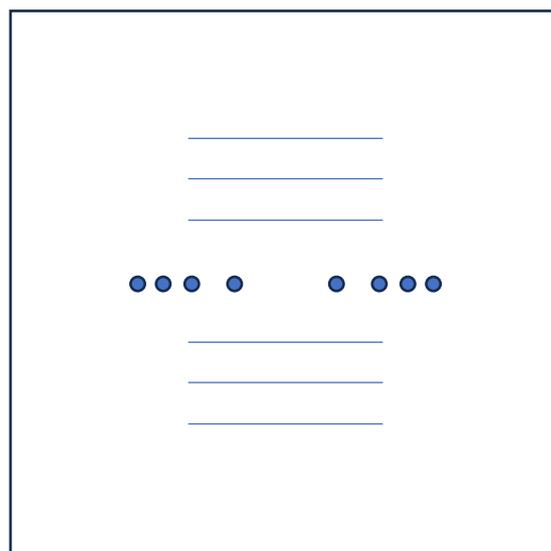


図 5 図 4 (B) の制限視野回折像をイラスト化したもの。

図4 (A) は図3のピーポッドが縦になったものが数10~100本集まって束をつくったものが撮影されています。この束がちょっと曲者でSAD像を複雑にしています。カーボンナノチューブの束はチューブ径がある程度そろっていると図6のように2次元六方晶のようになります。

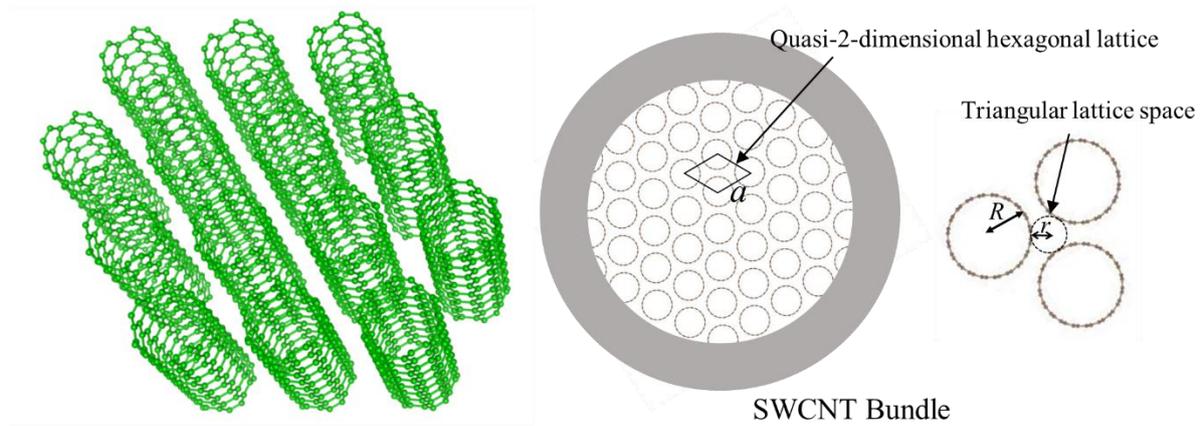


図6 カーボンナノチューブのバンドル。擬似的な2次元六方晶になる。

このバンドルの2次元六方晶からの回折が図5の水平線ライン上の回折ドットに対応します(図7)。この回折線はX線回折でもわりと強く観測されるのでいろいろな論文でみることができます。

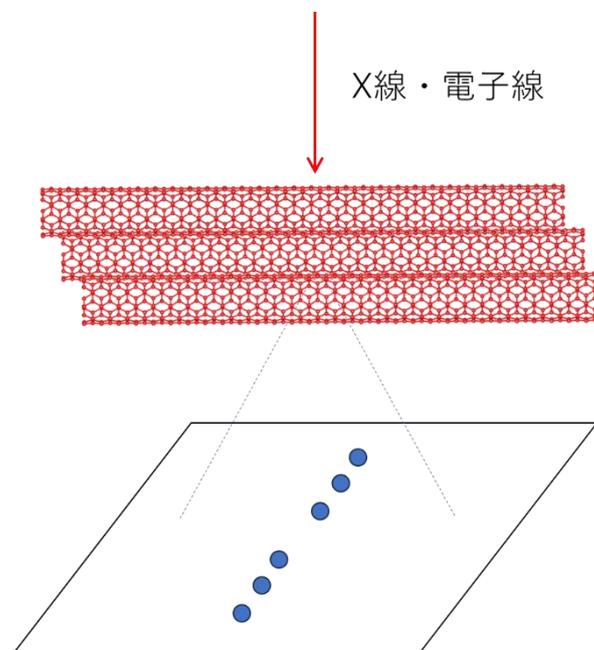


図7 カーボンナノチューブのバンドル2次元六方晶からの回折ドット。チューブの向きとドットの並びの向きに注意。

図5の回折ドットがナノチューブバンドルからということになると1次元結晶からの回折はそれ以外のところということになります。そうです、見慣れない水平ラインが1次元結晶からの回折線です。図4の1次元結晶の向きと回折ラインの位置関係に注意して図2の答え合わせをしましょう。ちょっと意外な感じではないでしょうか。本稿はなぜ1次元結晶の回折がこのような不思議なことになるのかのなぞ解きをおこなっていきます。ついでに最初に述べたように物理の教科書によく出てくる逆格子というものについても考えを深め（ちょっとえらそう！）、逆格子点とはいったい何なのかについて考えていきましょう。

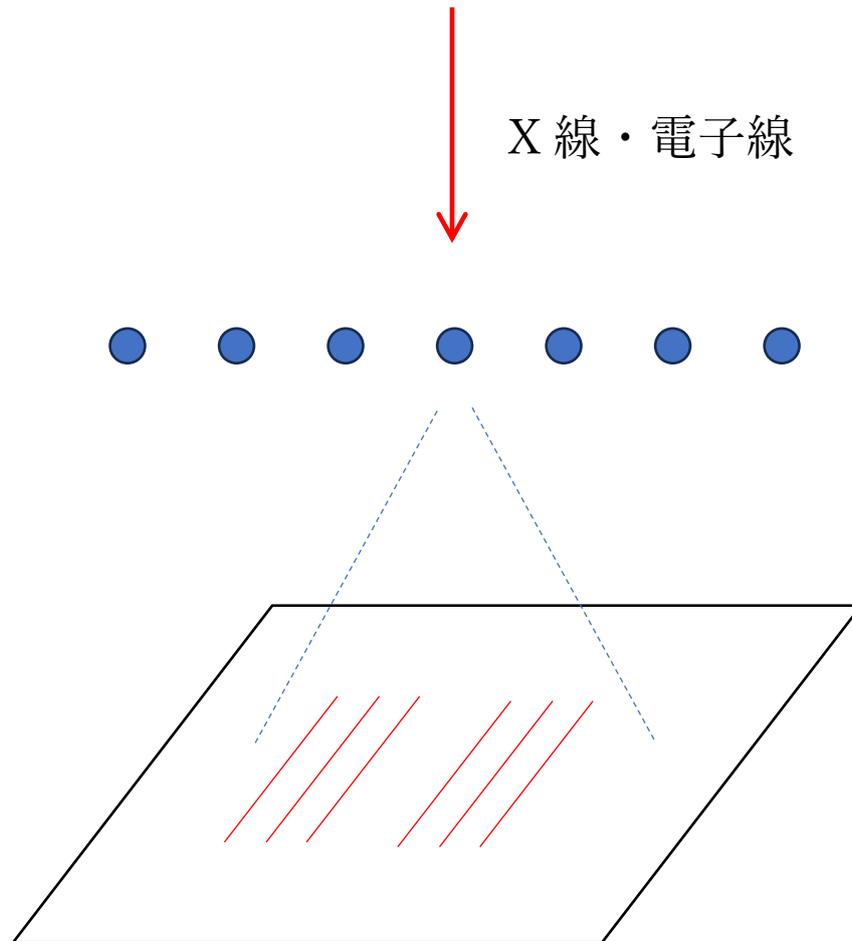


図8 一次元結晶からの（電子線）回折図形。

## ② ブラッグ条件とラウエ条件

前節で1次元結晶の回折を考えるときにブラッグの式は何の役にも立たないと書いてしまいましたが、多くの人にとって回折というとブラッグの式でしょう。ブラッグの式を満足するような関係の時に回折が生じるのだ（仮にこれをブラッグ条件ということにしましょう）と理解していてそんなに問題ではありません。

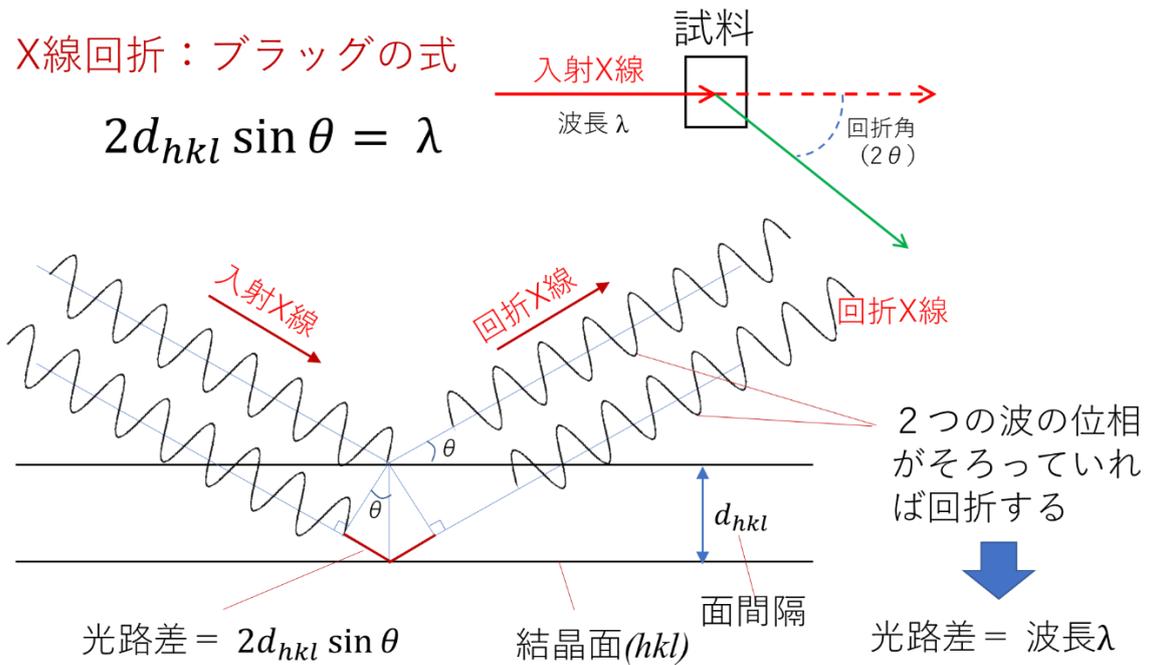
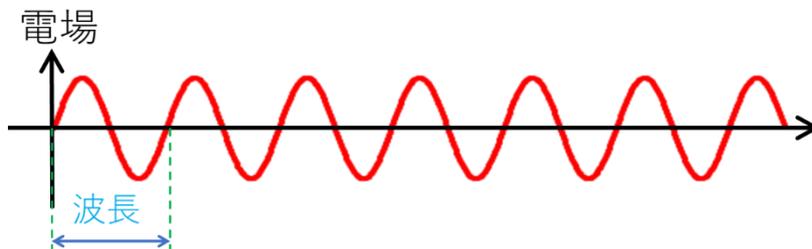


図1 ブラッグの式と回折が起こる条件の説明。

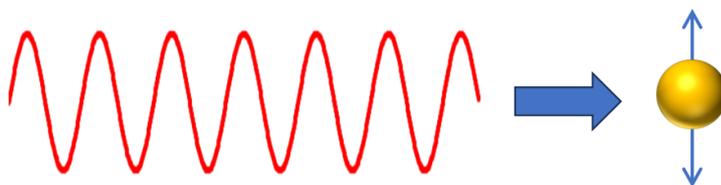
図1はとくに問題なさそうに見えます（実は私は無機化学の講義でこの図を使って回折する条件を説明していますので問題があつては困るのですが）。しかし、よく考えると、なぜ結晶面のところでX線が反射するのか、ということについては何も説明されていません。

なぜ結晶に X 線が入射すると回折が起こるのかということをやっと面倒くさいが順をおって見ていきます。ただし、厳密な数学的な取り扱いのほかの教科書にまかせて、というのはかえって理解を遅らせるかもしれませんが、できる限りイメージが持てるようにすすめていきたいと思います。



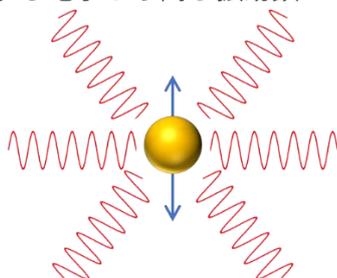
まず X 線が電磁波であるところまで意識を戻します。電磁波というくらいなので電場と磁場の波ですが、物質とのやり取りにおいて磁場の影響は小さいらしい（定量的でないのだから確認）ので電場だけを考えればよい、と一般的な回折の解説ではなっていると思います。

### (1) X線が電子に入射すると電子は単振動する



さて、これから考えるのは結晶に X 線が入射したら、という状況ですが、結晶を組み上げているのは原子ですので、原子に X 線が入射したらということをまず考えます。原子は原子核と電子から構成されていますが、X 線回折においては電子の振る舞いが重要です。電子は電荷をもっていますから電場に置かれると電場からの力をうけて動きます。X 線は電場の向きが高速で変化しています。実験室の X 線回折装置でよく利用される Cu K $\alpha$  線は波長 1.54 Å というのはよくみかけるとは思いますが、この X 線の振動数は  $1.96 \times 10^{18}$  Hz くらいです。電場の向きが高速で変化するのでその向きの変化に追従して電子が揺さぶられます。

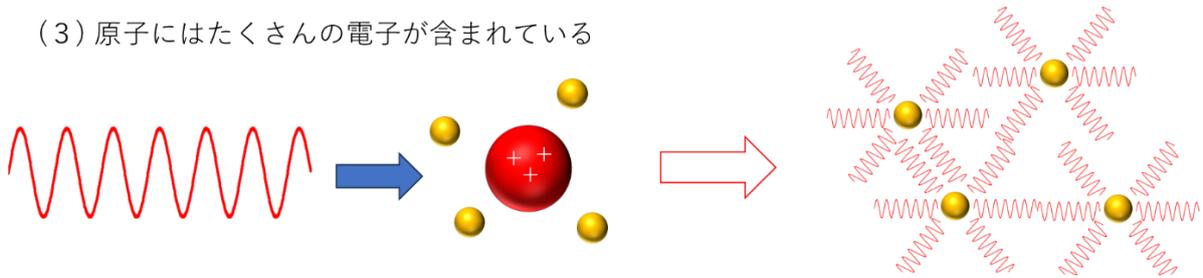
### (2) 単振動する電子から同じ振動数の電磁波がでる



電荷を持った電子が振動するとそれによりまわりの電場が動かされるので（という説明できると良いと思います）、振動した電子から電磁波がでてきます。電子の振動の周期は入射した

X線の振動数で決まるので、振動した電子から発生する電磁波の振動数は入射したX線の振動数と同じになります。遠くからこの様子を眺めると、入射したX線が電子のところで散乱したようにみえます。振動数変化がない、ということですから、散乱(?)したX線のエネルギーは入射したX線のエネルギーと同じです。エネルギー変化が起こらない散乱で弾性散乱と呼ばれます。

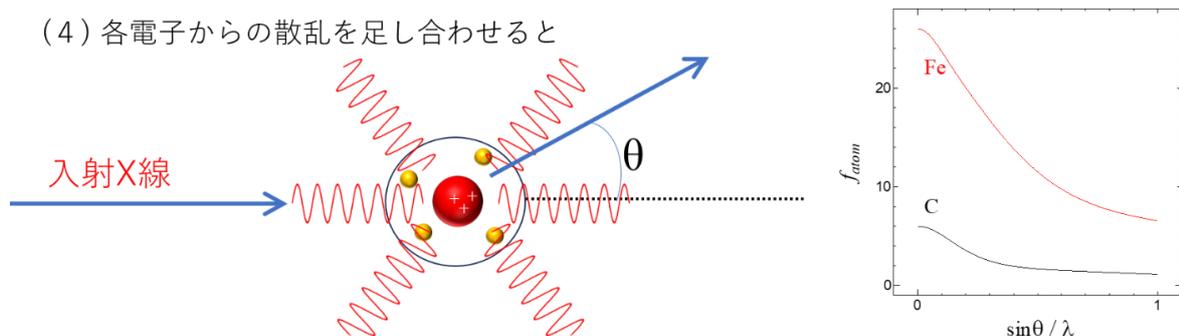
(3) 原子にはたくさんの電子が含まれている



1つの電子にX線が入射すると揺さぶられて同じ振動数のX線が散乱されることをみてきました。次に複数の電子を有する原子にX線が入射すると何が起こるのかをみていきましょう。原子には電子のほかに原子核も含まれていますが電子よりも1000倍以上重いのでX線の散乱への寄与は電子に比べると圧倒的に小さいことになっているはずですが、X線回折は電子を見るとしばしば言われるのはこのあたりの事情によるものです。

話を戻して原子にX線が入射すると電子が揺さぶられ、各電子が起点となって電磁波が発生すると考えます。遠くから眺めた人にはこれらの散乱波の重ね合わせが“原子”により散乱されたX線のようにみえます。

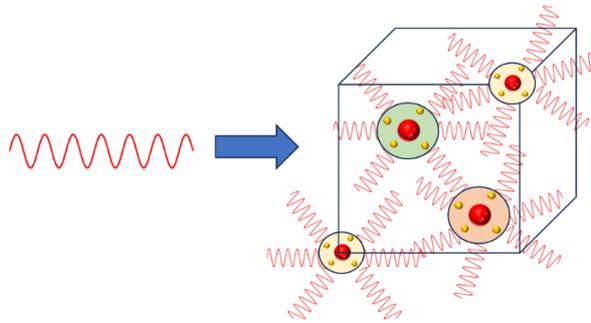
(4) 各電子からの散乱を足し合わせると



この“原子”による散乱は入射X線の進行方向に対してどのくらいの角度で出ていくかで散乱強度が変わってきます。また、散乱強度は電子の数によっても変わります。横軸に散乱角度をとって散乱強度を調べると炭素と鉄で大きく異なっていることがわかります。角度0のところの強度比はちょうどそれぞれの原子を構成する電子の数の比になっていることに気がつきます。X線回折は電子を見る、としばしば言われるということも先に述べましたが、加えて軽元素はみにくいということもよく言われます。これは軽元素の散乱強度が小さいために文字通り軽元素が見えにくいということもありますが、どちらかという上例のように重い元素と軽い元素が含まれているような場合に回折強度への軽元素の寄与が小さくなるた

め軽元素が見えにくくなるという場合が多いように思います。金属元素を含むような錯体分子のような場合には水素の位置を回折実験で求めるのはかなり難しい仕事になると思います。

(5) 結晶の単位格子中の原子からの散乱の重ね合わせ (= 構造因子)



構造因子

$$F(\vec{s}) = \sum f_j(\vec{s}) e^{-2\pi i(\vec{s} \cdot \vec{r}_j)}$$

一つの原子からの散乱強度は先の図のような形になりますが、これを原子散乱因子といいます。原子から少し視点を引いてくると結晶の単位格子がみえてきます。この単位格子には一般には複数の原子が含まれています。単位格子中の原子の電子が揺さぶられて X 線が散乱されます。単位格子一つの散乱の様子はどうなるかという、各原子からの散乱 X 線の重ね合わせということになります。このとき注意しないといけないのはあたりまえですが各原子が同じ位置にいるわけではないということです。その原子位置のずれが位相差となって散乱 X 線の強度に影響します。原子の位置が散乱強度に影響するからこそ、X 線回折実験から原子の位置を特定できる、すなわち構造解析できるということになります。

さて、ここまで数式を使わずに来ましたがあとで必要となるのでこの単位格子からの散乱強度については数式を確認しておきます。 $f_j(\mathbf{s})$ と書いた部分は原子散乱因子です。 $\mathbf{s}$ は散乱ベクトルと呼ばれるものです。原子の散乱が散乱角度によって異なるということ述べましたが、より一般的には角度というよりは散乱 X 線の“3 次元的な”方向といったほうがよく、このようなベクトルを使ってその方向を示します。この原子散乱因子のうしろに指数関数がかかっていますが  $\mathbf{r}_j$ は単位格子の原点から各原子までの位置を示すベクトルになります。各原子からの散乱強度を重ねるときに位相のずれがおこりますが、このずれを指数関数の部分で表しています。単位格子内の原子が散乱点になるのですが、散乱点の空間的なずれを指数関数で表し、単位格子内の全原子について足し算を行えば単位格子からの散乱強度を計算できるというわけです。この単位格子からの散乱強度のことを構造因子と言います。(この構造因子から特定の  $hkl$  の回折線だけ観測できるという消滅測の説明ができますが、脇道にそれてしまうのでこれは補遺にまわします。)

散乱点の空間的なずれを  $\mathbf{s}$  と  $\mathbf{r}_j$  の内積を指数関数に組み入れて、という形がのちのち重要になります。混乱を避けるために数学的に取り扱わなかった原子散乱因子についても実はこの指数関数の形がでてきます。原子散乱因子の場合は原子の中に含まれる電子が散乱点になりますが、電子の空間的なずれを指数関数であらわして足し算をすればよいということにな

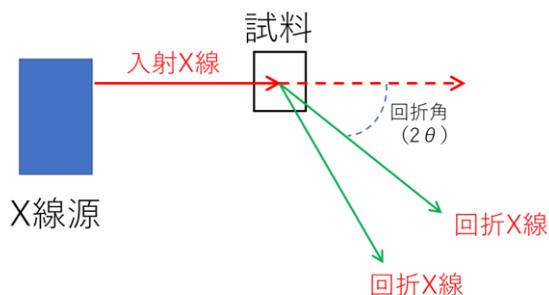
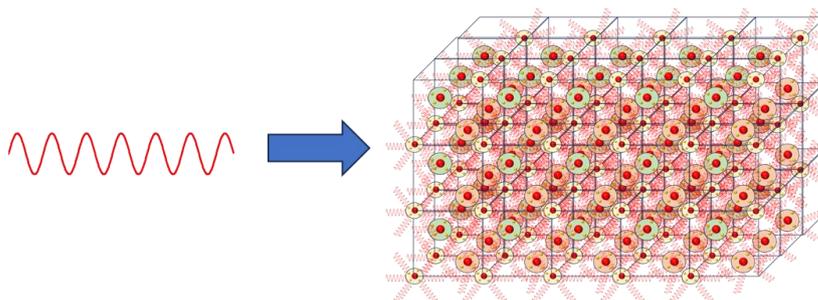
ります。ただし、単位格子内の原子の位置は  $\mathbf{r}_j$  という位置ベクトルで表せましたが、一つの電子の特定の位置を表すことは困難で代わりにその位置での電子密度  $\rho(\mathbf{r})$  をとるということを行います。原子内の複数の電子による散乱の足し算とこれまで書いてきたところは、厳密には電子密度  $\rho(\mathbf{r})$  に  $e^{2\pi i(\mathbf{r}\cdot\mathbf{s})}$  をかけて空間積分を行うということになります。(ずれの部分が  $e^{2\pi i(\mathbf{r}\cdot\mathbf{s})}$  になぜなるのか気になる方も多いと思いますが、どんどん脇道にそれてしまいますのでこれも補遺に回します。)

長くなってしまい、かつここで示したいものとずれていくのでどこかで止めたいのですが、ずっと先で必要になるのでもう少しだけ書いておきます。原子散乱因子を上のような電子密度の空間積分で表せると書きましたが、それを拡張する形で構造因子を書くこともできます。原子内の電子密度ではなくて単位格子内の電子密度と考えれば全く同じ形の積分で構造因子を表せる、ということです。また、この下で結晶全体の散乱強度を構造因子を用いて展開するというを行います、そんなことをせずとも、全結晶内の電子密度を使って全く同じ形で結晶からの散乱強度を表せるということもわかると思います。つまり、結晶全体の散乱強度（すなわち回折強度）は結晶内の電子密度  $\rho(\mathbf{r})$  に  $e^{2\pi i(\mathbf{r}\cdot\mathbf{s})}$  をかけて空間積分をとればよいということです。

$$\text{結晶全体の散乱振幅 } C(\mathbf{s}) = \int \rho(\mathbf{r}) e^{2\pi i(\mathbf{r}\cdot\mathbf{s})} d\mathbf{v}$$

これは数学的には大変重要な関係で、電子密度の“フーリエ変換”が回折強度（厳密には散乱振幅といったほうがよいのかもしれませんが細かいことはおいといてというのが基本姿勢なのでお許しください）になります。この“フーリエ変換”で結ばれる関係というのがのちのち重要になります。

## (6) 最後に結晶全体の散乱の重ね合わせ



ちょっと寄り道が長くなりすぎましたが元の路線に戻します。一つの電子の散乱からはじめてここまできましたが、いよいよ最後です。ここまでと同じように重ね合わせを行えばよいのですが、結晶の場合は単位格子を縦横にずらすと結晶全体を表せるということをつかいます。散乱される点が空間的にずれているということについては原子の中の電子の場合、単位格子の中の原子の場合と同じように考えればよいということになります。例の指数関数の部分がくっついてくると予想できると思います。単位格子を縦横へずらした分がこの指数関数のところに追加されるということになります。指数関数でずらして足し算ということなのですが、単位格子分ずらすので等比級数の形になり、その和をとるということになります。さらに、回折強度は散乱振幅の2乗になるのでということに注意すると下のように回折強度は単位格子の散乱に関するところと、単位格子をずらす分に分けることができます。

(7) 回折“強度”は振幅の2乗に比例することに注意すると下記が導かれる

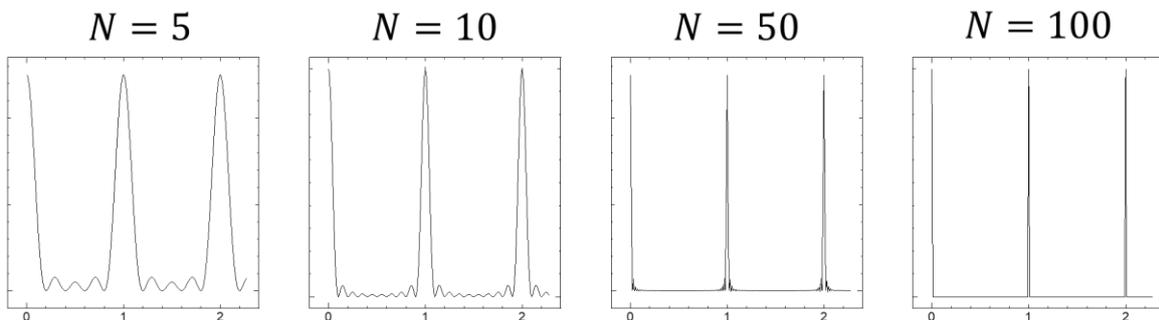
$$I \propto |F(\vec{s})|^2 |G(\vec{s})|^2$$

$$|G(\vec{s})|^2 = \frac{\sin^2(\pi N_a \vec{s} \cdot \vec{a})}{\sin^2(\pi \vec{s} \cdot \vec{a})} \frac{\sin^2(\pi N_b \vec{s} \cdot \vec{b})}{\sin^2(\pi \vec{s} \cdot \vec{b})} \frac{\sin^2(\pi N_c \vec{s} \cdot \vec{c})}{\sin^2(\pi \vec{s} \cdot \vec{c})}$$

構造因子  $F(\vec{s}) = \sum f_j(\vec{s}) e^{-2\pi i(\vec{s} \cdot \vec{r}_j)}$

この後ろ側の部分が単位格子をずらした分に相当し、等比級数の和の形になっています。 $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$  は単位格子ベクトルで  $N\mathbf{a}$  などは結晶全体で  $\mathbf{a}$  方向に単位格子を  $N\mathbf{a}$  個ずらすということを示しています。この部分のことをラウエ関数といいます。(ラウエ関数の部分の導出は数学的には簡単ですが補遺にまわします。) 先を急いでラウエ関数の特徴をみていきましょう。

ラウエ関数  $f(x) = \frac{\sin^2(\pi N x)}{\sin^2(\pi x)}$



数式だけをみてもピンとこないと思いますが、実際に  $N$  に数字を入れてグラフ化してみましょう。上のグラフに示すように  $N$  が大きくなっていくと  $x$  が整数のところ以外はゼロに

なることがみえてきます。この  $x$  は散乱ベクトルと単位格子ベクトルの内積だということを思い出してもらおうと結晶の向き（単位格子ベクトルの向き）と入射  $X$  線と回折  $X$  線の向き（散乱ベクトルの向き）が特定の条件の時だけラウエ関数は値を持つということがわかります。その条件というのは  $x$  が整数のところだけということでしたらから、下記のようにまとめられます。

$$\left. \begin{array}{l} \vec{s} \cdot \vec{a} = h \\ \vec{s} \cdot \vec{b} = k \\ \vec{s} \cdot \vec{c} = l \end{array} \right\} \text{これが回折条件（ラウエ条件）}$$

ただし、 $h, k, l$  は整数

この条件は次のようにも書くことができます。逆格子の並進ベクトル  $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$  を下記のよ  
うに定義します。そうするとラウエ条件は散乱ベクトルが  $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$  を使って下記のように  
かけることと同じということになります。逆格子の原点に散乱ベクトルの根元があるときに  
ベクトルの先端が逆格子点を指すこととなります。

$$\vec{s} = \vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

$$\vec{a}^* \cdot \vec{a} = 1 \quad \vec{a}^* \cdot \vec{b} = 0 \quad \vec{a}^* \cdot \vec{c} = 0$$

$$\vec{b}^* \cdot \vec{b} = 1 \quad \vec{b}^* \cdot \vec{a} = 0 \quad \vec{b}^* \cdot \vec{c} = 0$$

$$\vec{c}^* \cdot \vec{c} = 1 \quad \vec{c}^* \cdot \vec{a} = 0 \quad \vec{c}^* \cdot \vec{b} = 0$$

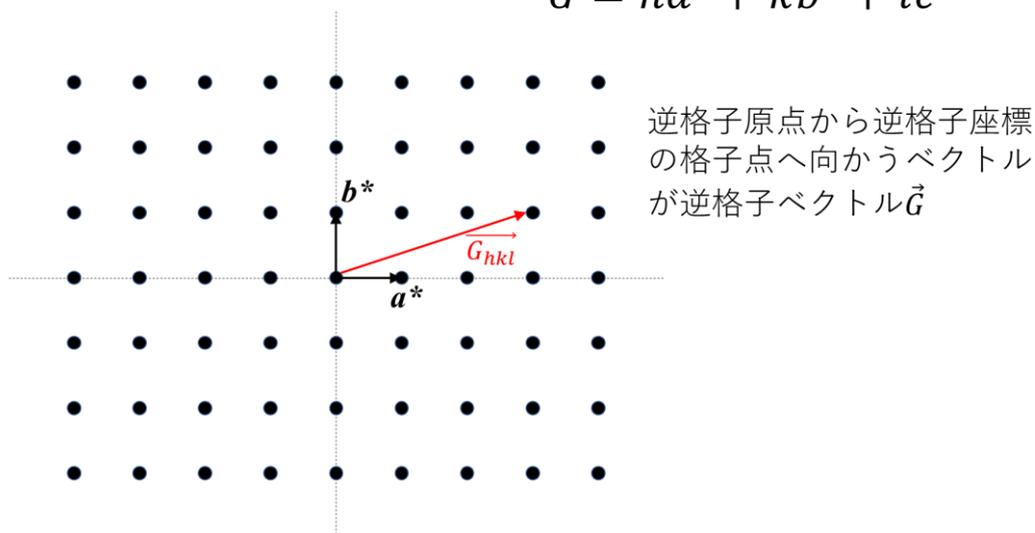
$$\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})} \quad \vec{b}^* = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{b} \cdot (\vec{c} \times \vec{a})} \quad \vec{c}^* = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{c} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})}$$

さらっと逆格子の並進ベクトル  $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$  を出しましたが、多くの教科書に登場するので定  
義自体に違和感を持つ方は少ないと思います。今回問題にしているのはこの  $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$  で張  
られる逆格子空間とは何なのか、とりわけ逆格子点とは何者なのかということです。この問  
題はずっと後で解決(?) することにしましょう。

さて、X 線の散乱について一つの電子の散乱から始めて結晶全体の散乱について確認した  
のは散乱ベクトルが逆格子ベクトルと一致するとき回折が起こる、ということでした。この  
回折条件と最初に示したブラッグの条件との関係をみていきましょう。

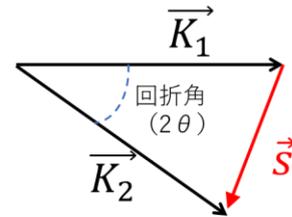
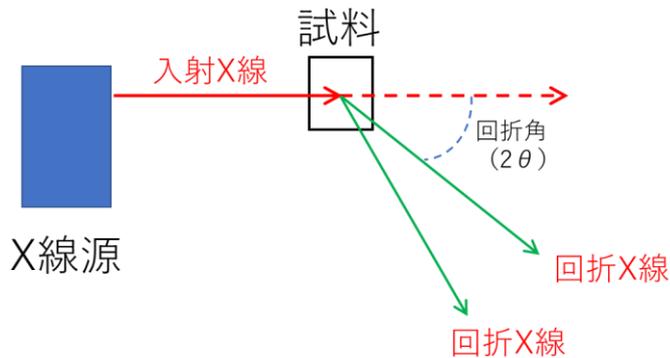
逆格子座標と逆格子ベクトル

$$\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$



散乱ベクトルは入射 X 線と回折 X 線の向きで決まるベクトルであり、大きさは下記のような大きさです。

入射、回折 X 線ベクトル ( $\vec{K}_1, \vec{K}_2$ ) と散乱ベクトル  $\vec{s}$



$$|\vec{K}_1| = \frac{1}{\lambda} \quad \vec{s} = \frac{2 \sin \theta}{\lambda}$$

一方、逆格子ベクトルの大きさ（導出は補遺にまわします）は下記のように面間隔の逆数になります。なぜ面間隔がこんなところででてくるのかというのが不思議な感じがします。まさに本稿で明らかにしようとしているのはこの点なのですが、それを説明するのはかなり後半になります。

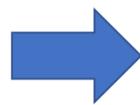
$$\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

$$|\vec{G}| = \frac{1}{d_{hkl}}$$

散乱ベクトルの大きさと逆格子ベクトルの大きさが等しいのですから、ラウエ条件からブラッグの式が導かれます。

ラウエ条件

$$\vec{s} = \vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$



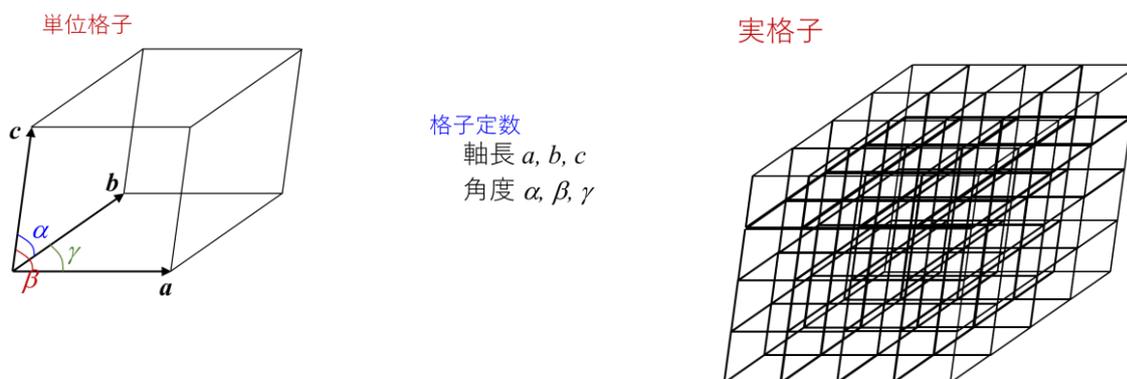
$$2d_{hkl} \sin \theta = \lambda$$

なあんだ、ラウエ条件とかいっていろいろと面倒なことをやったけれども結局ブラッグの式でした、ということではありません。ラウエ関数のところで確認したように単位格子がある程度の数にならないと今の条件になりません。別の言い方をすると、結晶粒子が小さくて単位格子数 10 個分くらいの大きさしかない場合はブロードな回折線になるか回折線が見えないくらいになるということはブラッグの式からはわかりません。また、本稿で目指している 1 次元結晶の回折パターンもブラッグの式からは見当もつきません。

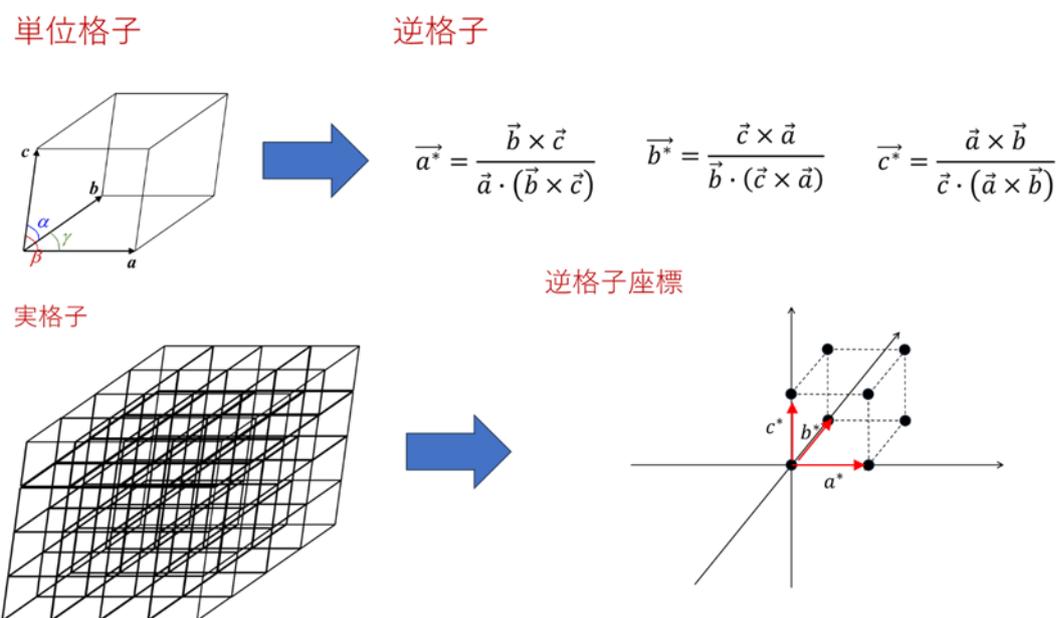
逆格子点とは何者なのかということもこれから順をおってなぞ解きしていきましょう。

### ③ 3次元結晶の逆格子とエワルドの反射球

前章でラウエの回折条件を説明する過程で逆格子という考え方ができました。逆格子は回折について学ぶとき以外にもバンド構造やフォノンの分散関係などを学ぶ時にも登場します。きっと便利なんだろうと思いつつも長さの逆数の空間に違和感を持つ方も多いと思います。また、回折の時とバンド構造の時で少し取り扱いが異なっていたりするので、うまく話が通じていないという方もいるかもしれません。それやこれやの問題をいっぺんに解消できればよいのですが、残念ながらそのような能力は私にはこれっぽっちもありません。1次元結晶の回折を理解するという教科書ではあまり扱わない角度から逆格子点を見ることで何かヒントを得られればよいなと思います。



結晶は単位格子を縦横にずらしたものと理解できます。一般的な結晶は3次元ですので物理の教科書には3次元結晶の逆格子が下記のように示されます。場合によっては面心立方格子の逆格子点は体心立方になるなどというような余計な(?)情報も示されます。

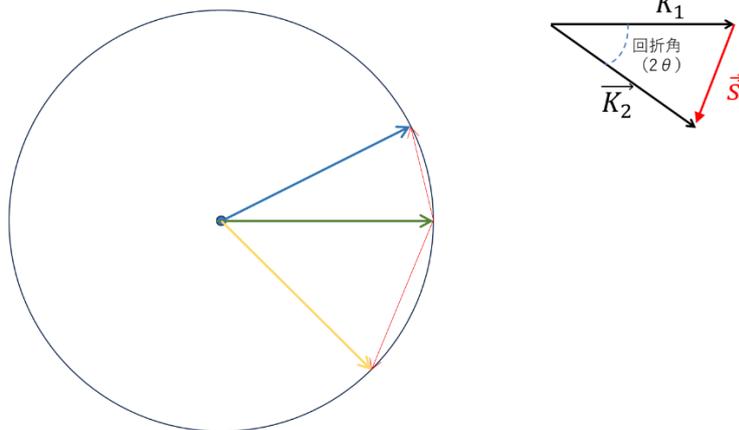


このあたりは見慣れた光景なのでこんな景色だったなということだけ確認しておきます。前章でラウエの回折条件を導く過程でこの逆格子が導入されました。せっかく導入した逆格子ですが最後のところでブラッグの式と同じではないかという疑問が残ったままの方がいるような気がします。何とかその疑問をごまかしたいので、エワルドの反射球というものを持ち出します。

## ラウエ条件

$$\vec{s} = \vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

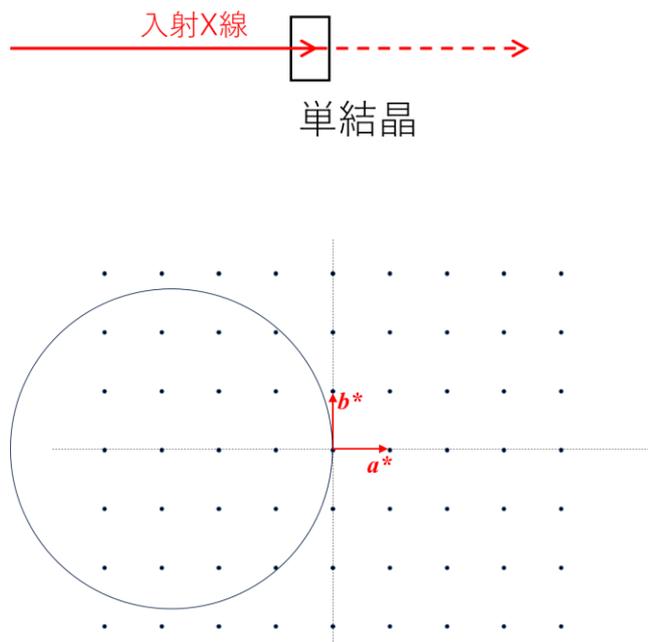
エワルドの反射球



エワルドの反射球はラウエの回折条件を逆格子座標をつかって幾何学的に表すもので、実践的にとても便利な考え方です。何度も繰り返しますが、ラウエの回折条件は「散乱ベクトル（入射ベクトルと回折ベクトルの差ベクトル）が逆格子ベクトル（逆格子原点からどこかの逆格子点へ伸びたベクトル）と一致するとき回折する」というものでした。入射ベクトルと反射ベクトルを波長の逆数の大きさにとります。2つのベクトルの大きさが等しいのは回折は弾性散乱で入射 X 線のエネルギーと回折 X 線のエネルギーが等しいことを示します。X 線のエネルギーは波長の逆数に比例しますから上のベクトルの大きさはエネルギーをあらわしていると考えてもよいですね。

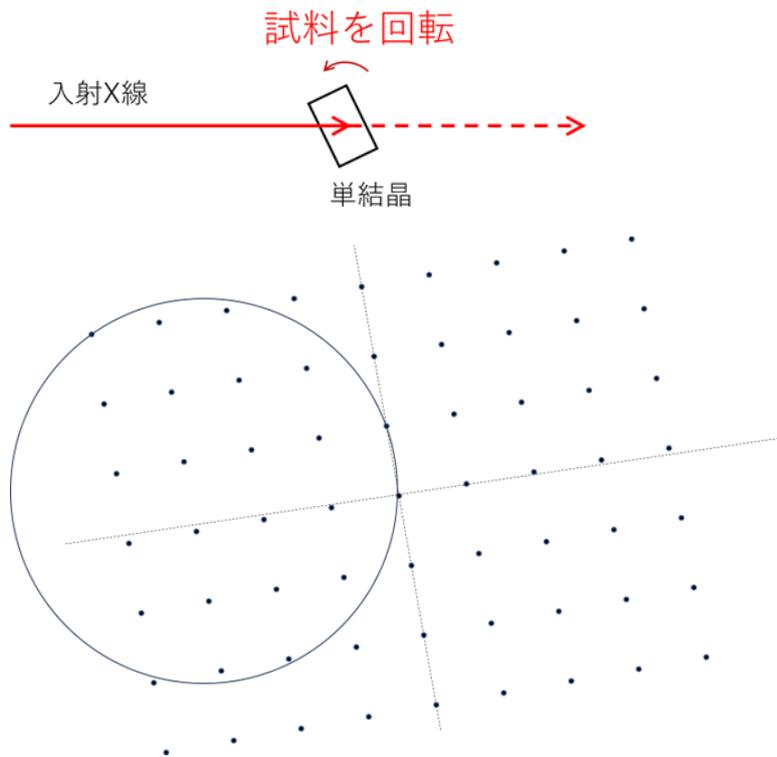
そういえば逆格子の並進ベクトルも長さの逆数の次元だったな、と思い出した人がいて、ならば逆空間はエネルギーの空間かと問われると一般的にはそのようには言われずに運動量空間と呼ばれます（そのほかに波数空間、 $k$  空間などと呼ばれます）。これは波の運動量が波数ベクトル  $\mathbf{k}$  を用いて  $\hbar\mathbf{k}$  と表せるためです。上の散乱ベクトルの図は  $|\mathbf{K}_1| = |\mathbf{K}_2|$  というエネルギー保存則と  $\mathbf{K}_2 = \mathbf{K}_1 + \mathbf{s}$  という運動量保存則をあらわしています。（この運動量保存は実体はどうなっているのかすぐに理解できない（私だけ？）ですが、ずっと後ろで議論します。）

ラウエの回折条件は「散乱ベクトルが逆格子原点からどこかの逆格子点へ伸びたベクトルと一致するとき回折する」ということを思い出しながらエワルドの反射球を見ていきましょう。ある結晶に X 線を入射したときを考えます。

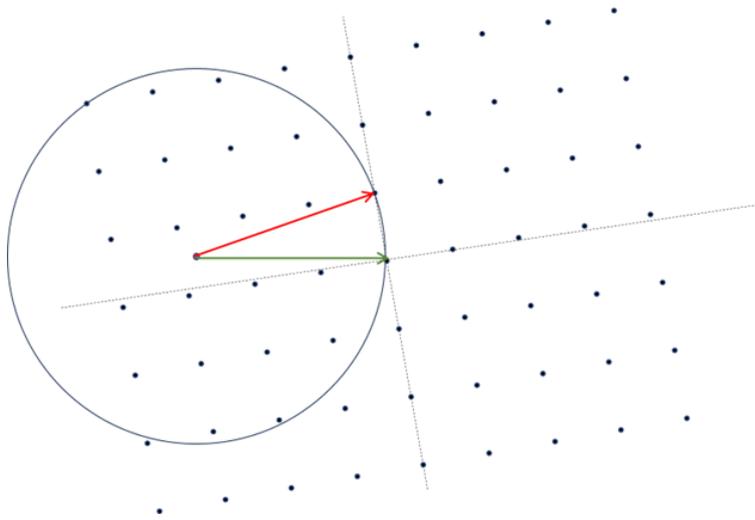


結晶の向きに応じて入射 X 線と逆格子座標の位置関係は決まります。上の図のようにたまたま  $a^*$  方向から X 線が入射した場合を考えます。 $a^*$  軸上で逆格子座標の原点から波長の逆数だけ下がったところを中心に波長の逆数の半径の球を描きます（上の図では円ですが、心の中で3次元化してください）。このとき逆格子点はこの球上にのっていません（かすっているのがありますがのっていません）。この場合、回折条件を満足しないので回折線はどこへも出ていきません。

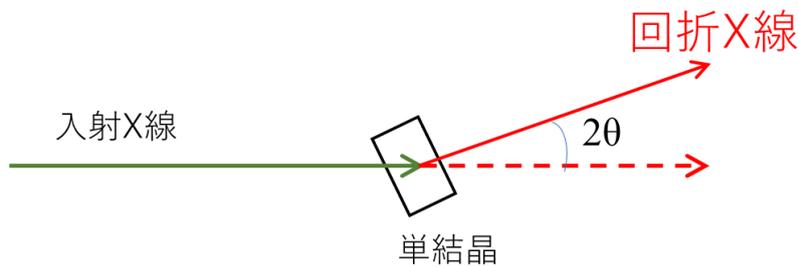
少しだけ結晶を回転します。



すると  $b^*$  軸上の逆格子点の一つがエワルドの反射球の上に乗っかります。このとき動かすのは逆格子座標だけです（入射 X 線は固定されていますので、反射球の中心は動かしません）。

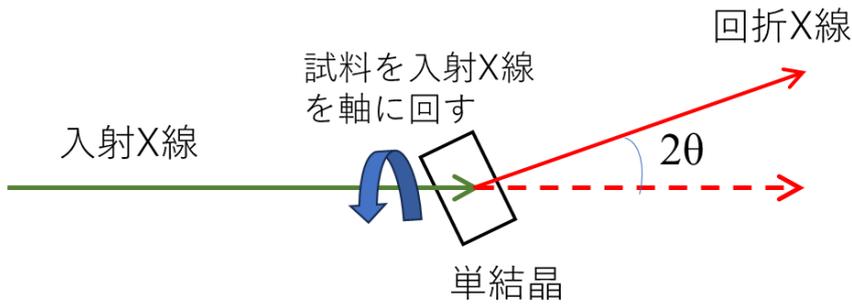


緑が入射 X 線ベクトルです。エワルドの反射球の上に逆格子点がつくと回折条件を満足しています。赤色のベクトルが回折 X 線ベクトルになります。赤と緑のベクトルの差ベクトルが散乱ベクトルですが、あたりまえなのですが散乱ベクトルが逆格子ベクトルになっていることが上の図で確認できると思います。このとき実空間では単結晶の中心から赤色のベクトルの向きに回折線が出ていきます。

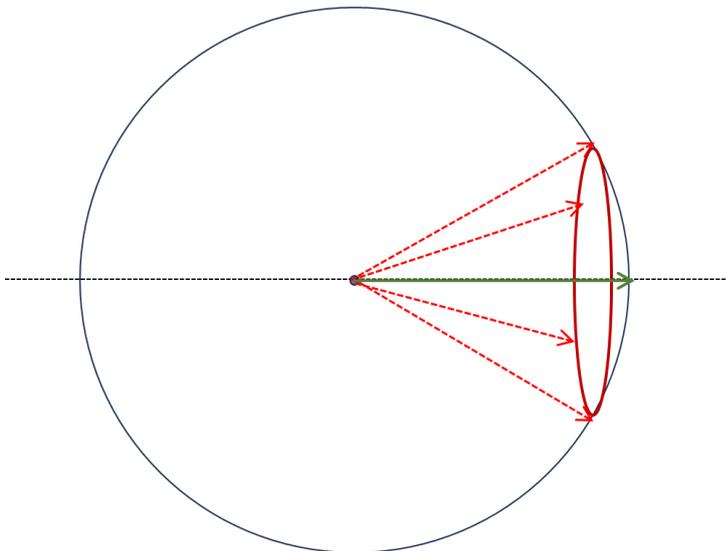


今、2次元の図で説明してきましたけれども、心の中で3次元に拡張するのはそう難しくありません。3次元のエワルドの反射球上に逆格子点がついたときにその方向に回折線が出ていく状況が心の中でできていると思います（決して3次元的な絵を描くことをさぼっているわけではありません）。

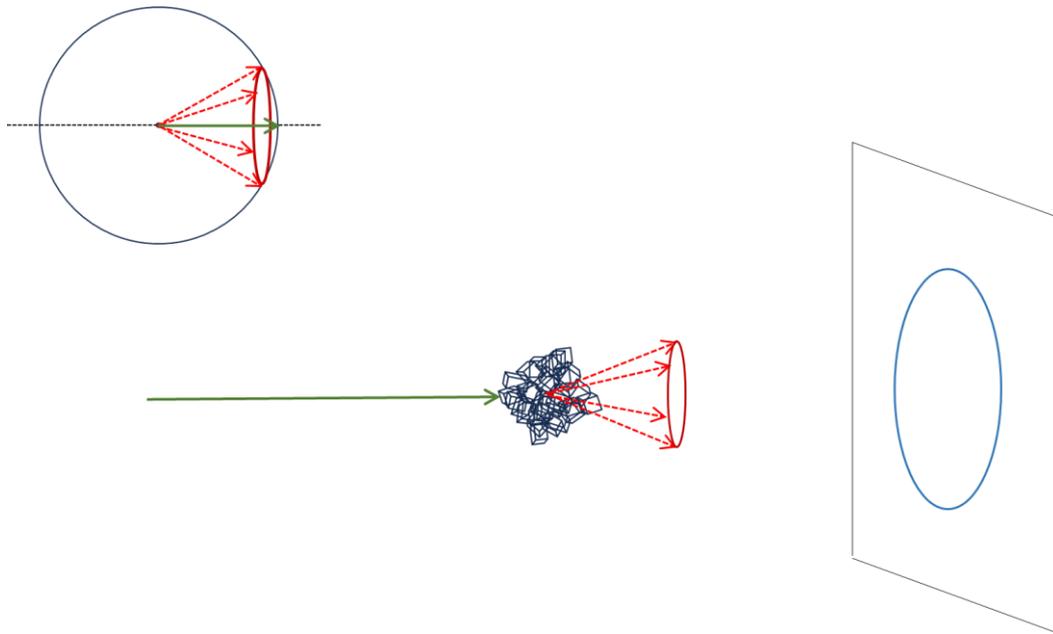
またまたさぼったまま話を続けています。先ほどは  $b^*$  軸を傾けて行って回折条件を満足させました。心の中で描いた  $c^*$  軸のまわりに結晶を回転したといってもよいかもしれません。ともかく  $b^*$  軸上の逆格子点（これは  $010$  に相当します）が回折条件を満足しました。この状態で入射 X 線を軸として結晶を回転することをを行うとどうなるのでしょうか。



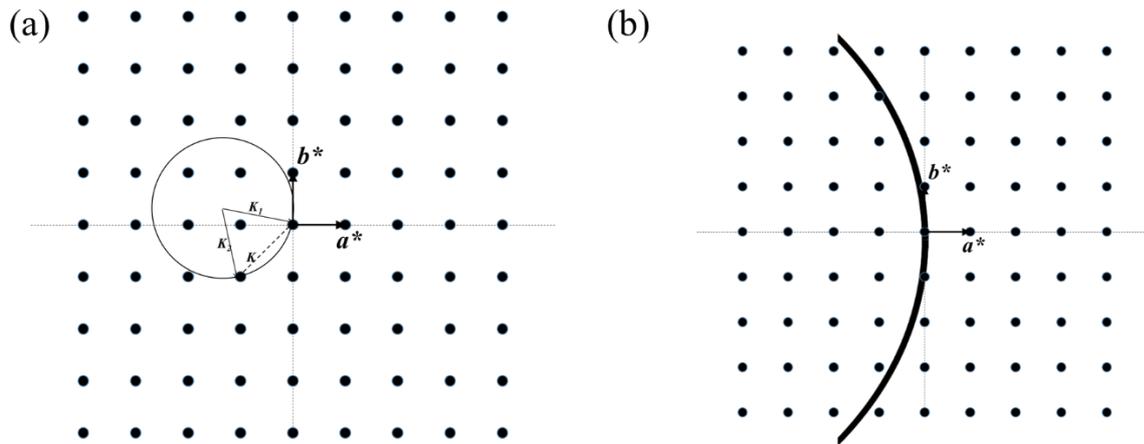
ずっと回折条件を満足したまま結晶が回転し、回折 X 線が出ていく方向が変わっていくという様子をきっと想像できていると思います。これを頑張って絵にすると下の図のようになります。さっきまで円のように見えていたかもしれませんが、ずっと球だと言い張ってきたエワルドの反射球の真骨頂です。球の断面を切り抜くように回折線が出ていく方向が変わっていく様子が下の絵でよくわかると思います（よくわからない人は心の中で頑張ってください）。



さて、回折条件を満足した単結晶を慎重に入射 X 線のまわりに回転させた場合を想像してきたのですが粉末 X 線回折実験の場合は普通にこの状態になっています。というのは粉末試料にはあちこち向いた小さな単結晶が多数含まれているからです。したがって、010 回折線といった時に粉末試料では下の図のような円形の回折図形になります（下ではひとつの円だけ描いていますが一般的には直径の異なる複数の円が観測されることとなります）。この円のことをデバイシェラーリングといいます。



入射X線の波長が変わったらどういふことがおこるでしょうか。波長が変わるとエワルドの回折球の半径が変化することになります。下の図には示していませんが、同じ逆格子点を球上に乗せる場合に半径が大きくなると入射X線と回折X線との角度が小さくなるのが容易に想像できると思います。半径が大きくなるというのはX線の波長が短くなることに対応しますので、波長が短いほど回折角度が小さくなるということです。波長が短いほど多数の逆格子点をカバーできそうなこともすぐわかると思います。



ここまでX線回折をベースに話を展開してきましたが、電子線回折の場合も同じような議論が可能です。X線と電子線でいくつか異なるところがありますが、波長について考えましょう。実験室でよく使われるCuK $\alpha$ 線の波長は約0.15 nmです。それに対して、これもよくつかわれる加速電圧200 kVのTEMでは電子線の波長は約0.0025 nmですから2桁小さいですね。上の図(b)の円の曲率をどんどん小さくしていくとやがて**b\***軸上の逆格子点が円上に乗ってきます。電子線回折はまさにこのような形で逆格子“面”を直接的に観測できる(複数の逆格子点を同時に観測できる)というのが大きなメリットです。X線では複数の逆格子点を結晶を固定したまま観測するというのは困難で、逆格子面を観測するにはプリセッションカメラというような特殊な装置を用いて複雑に結晶を動かさないといけません。

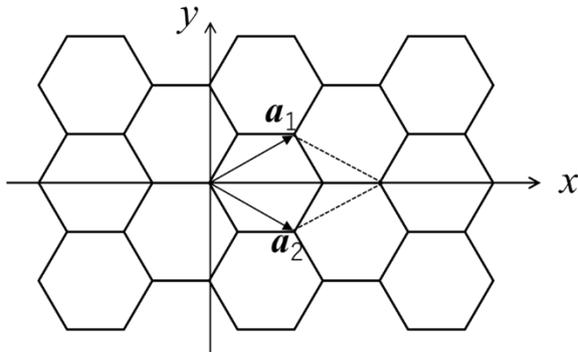
#### ④ 2次元結晶の逆格子

ここまで固体物理の教科書によくのっている普通の逆格子の説明をしてきました。普通のと書いたのは現実に存在する結晶のほとんどは3次元結晶なのでその3次元結晶の逆格子を一般の教科書では扱うのだと思います。

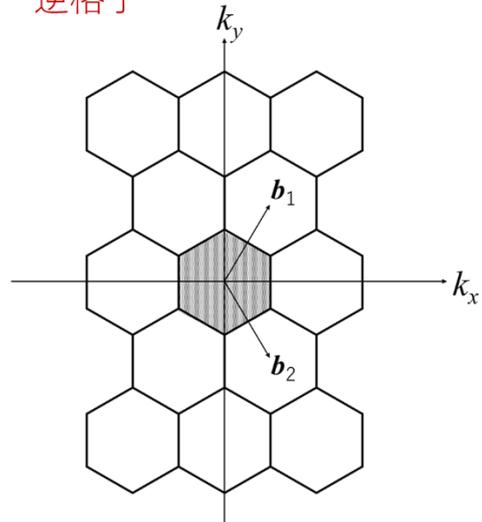
本章で扱う2次元結晶は厳密な意味ではかなり少ないはずですが、簡単のため2次元結晶として扱うというような場合も含めると多くの“2次元結晶”が存在します。グラフェンは代表的な2次元結晶であり多くの解説や教科書が出版されています。そこでは2次元結晶の逆格子についても説明されていることが多く、ご覧になられた方も多いのではないかと思います。だいたい下の図のようなものが描かれていて、炭素の六角網面を描いた実格子に対して逆格子の六角形が $90^\circ$ 回転していたなというようなことをご記憶されているのではないかと思います。この逆格子はここまでみてきた逆格子座標ではなくて、電子構造を議論するために必要なブリルアンゾーンを描いているな、ということは並進ベクトルをみればすぐにわかります。ここで問題にしたいのはちょっと違う点です。

下の図には2次元の実格子が描かれていて、2次元の逆格子が描かれています。一見これで何も問題ないようですがこれでよいのか、ということの問題にします。

実格子



逆格子



ここまで、できる限り数式を使わずに説明していこう、というスローガンでしたが突如方針変更します。2次元結晶の逆格子の並進ベクトルを数学的に導くということを行います。導出手順はとあるところの受け売りになります。参考文献としてクレジットすべきかとも思いましたが、私の理解不足でご迷惑をおかけしてはいけないかとも思い、ここではあるところからとだけ書いておきます。

$$\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})} \quad \vec{b}^* = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{b} \cdot (\vec{c} \times \vec{a})} \quad \vec{c}^* = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{c} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})}$$

3次元結晶のところでも示したように逆格子の並進ベクトルは上のよう書くことができます。これを2次元結晶にどうやってあてはめるかというのが問題です。 $c$ 軸はないのでどうするか困るのですが  $\vec{c}$  を下記のようにとり、 $\|\vec{c}\|$  を  $\infty$  にとると良いようです。

$$\vec{c} = \alpha \vec{a} + \beta \vec{b} + L \vec{n}$$

$$\vec{n} = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\|\vec{a} \times \vec{b}\|}$$

$\|\vec{x}\|$ はベクトルの大きさを表しノルムと呼ばれます。 $\|\vec{c}\|$  を  $\infty$  にとるには  $L$  を  $\infty$  にとってやればよいという方針のようです。この  $\vec{c}$  をつかって逆格子の並進ベクトルを計算すると次のものが得られます。

$$\vec{a}^* = \frac{\|\vec{b}\|^2 \vec{a} - (\vec{a} \cdot \vec{b}) \vec{b}}{\|\vec{a} \times \vec{b}\|^2} + \frac{\alpha}{L} \vec{n}$$

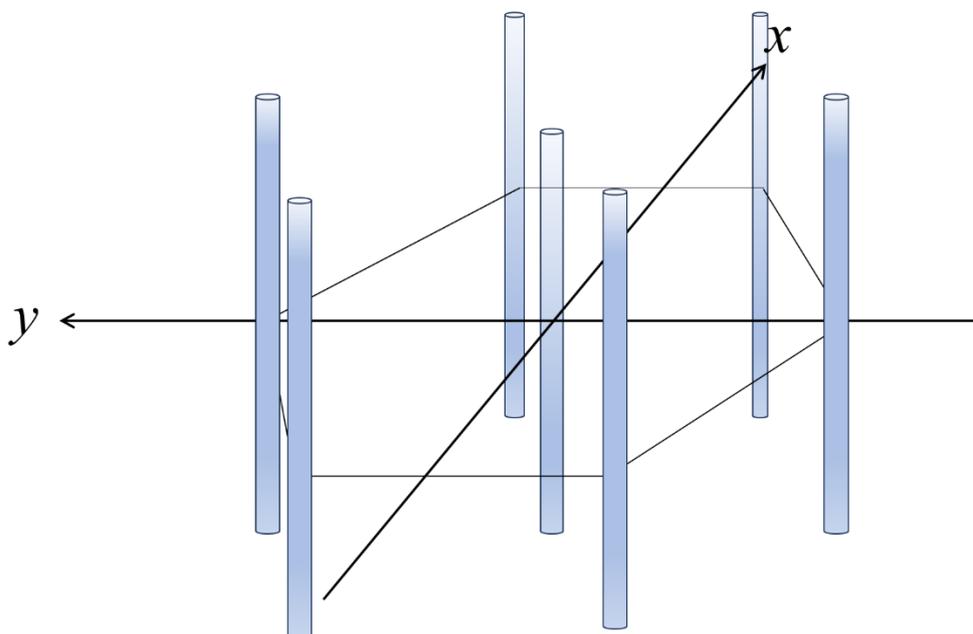
$$\vec{b}^* = \frac{\|\vec{a}\|^2 \vec{b} - (\vec{a} \cdot \vec{b}) \vec{a}}{\|\vec{a} \times \vec{b}\|^2} - \frac{\beta}{L} \vec{n}$$

$$\vec{c}^* = \frac{1}{L} \vec{n}$$

ここで  $L$  を  $\infty$  にとると下記のものがえられます。

$$\vec{a}^* = \frac{\|\vec{b}\|^2 \vec{a} - (\vec{a} \cdot \vec{b}) \vec{b}}{\|\vec{a} \times \vec{b}\|^2} \quad \vec{b}^* = \frac{\|\vec{a}\|^2 \vec{b} - (\vec{a} \cdot \vec{b}) \vec{a}}{\|\vec{a} \times \vec{b}\|^2}$$

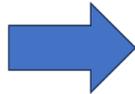
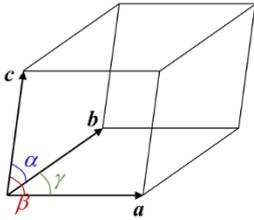
これが正しいかどうかは、本章冒頭のグラフェンの逆格子並進ベクトルがとれることで確認できます。 $\vec{c}^*$  をどう考えるのかというのが問題になりますが、 $\vec{n}$  を向いた (すなわち  $\vec{a}$  と  $\vec{b}$  が張る面に垂直方向を向いた) 無限に短いベクトルと理解できます。このことは2次元結晶の逆格子は点ではなくロッドになることを意味しています。



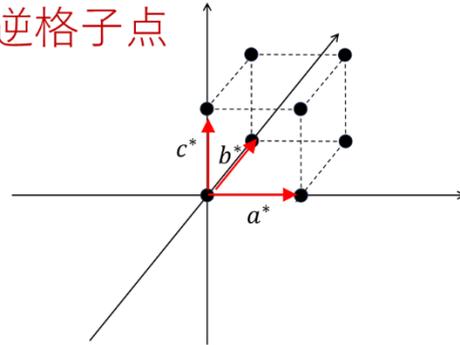
## ⑤ 1次元結晶の逆格子

ここまでみに3次元結晶の逆格子は $\vec{a}^*$ ,  $\vec{b}^*$ ,  $\vec{c}^*$ の3つの並進ベクトルで表せる3次元座標となったが、2次元結晶の逆格子はロッドになることをみてきました。1次元結晶についても前章と同じような作業を行うことにより下の図のような逆格子“面”が得られます。

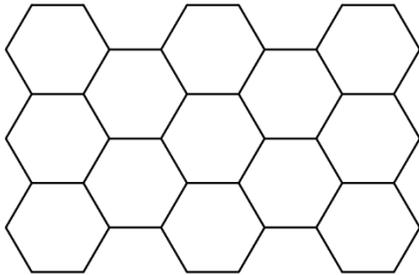
### 3次元格子



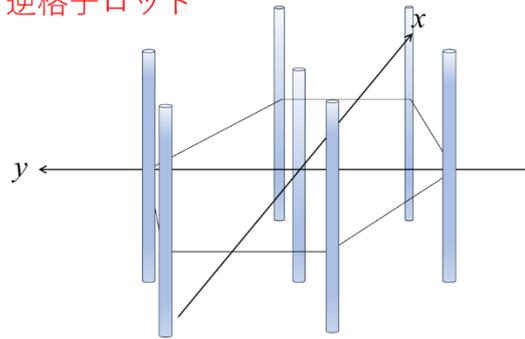
### 逆格子点



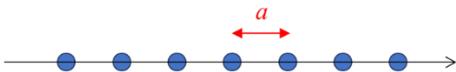
### 2次元結晶



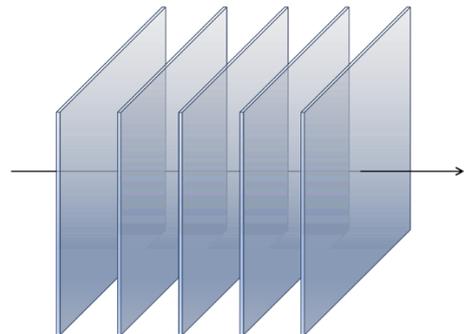
### 逆格子ロッド



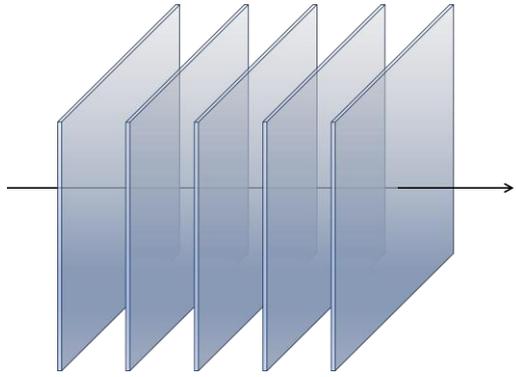
### 1次元結晶



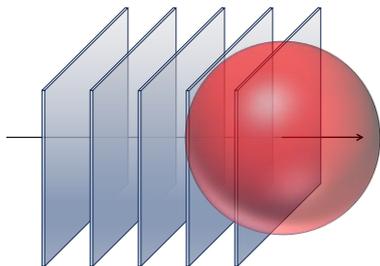
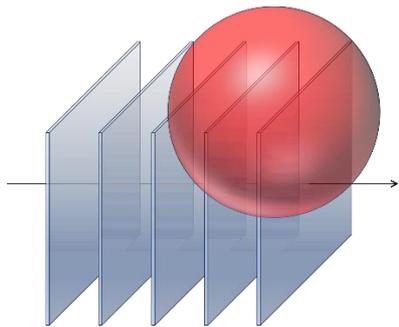
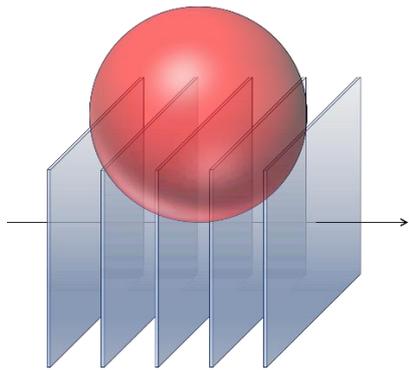
### 逆格子面



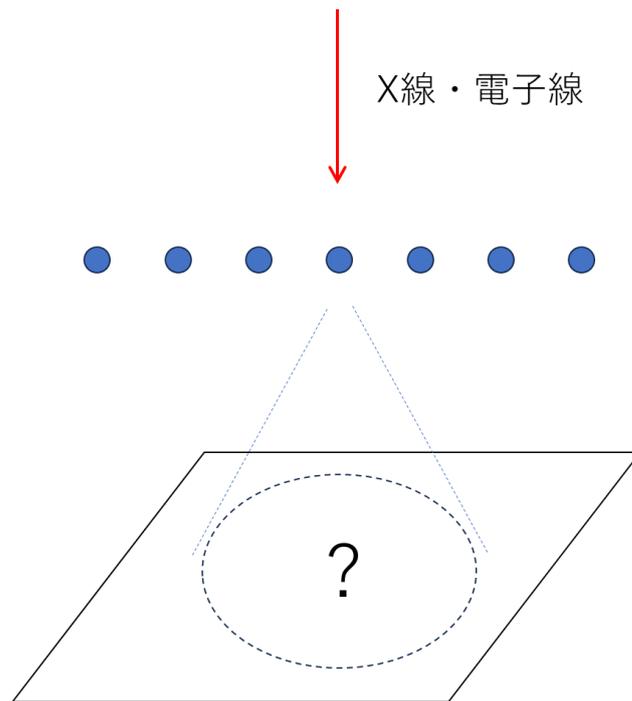
1次元結晶の逆格子が下記のようになるとわかれば、あとはここにエワルドの反射球をのせてあげれば回折パターンを予測できそうです。



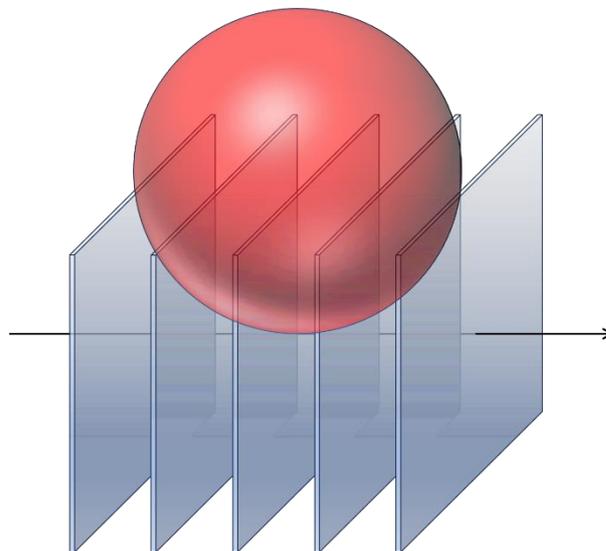
この逆格子“面”とエワルドの反射球が交わる部分が回折することになります。エワルドの反射球は逆格子原点を通過するように描くことに注意して作図すればよいのですが、反射球の中心から逆格子原点へ向かう方向が入射 X 線方向になるので反射球の位置はいろいろあり得ます。



最初に出題した「1次元結晶の回折図形はどうなる？」の図は下記のようなものでした。

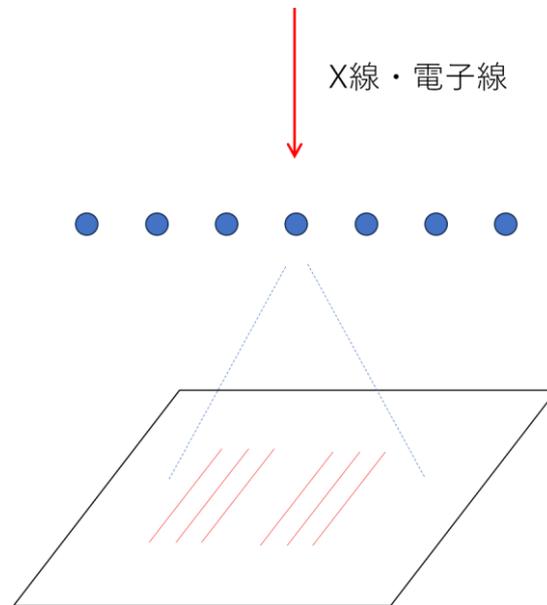


この配置だとエワルドの反射球と逆格子“面”の関係は下記のものとなります。



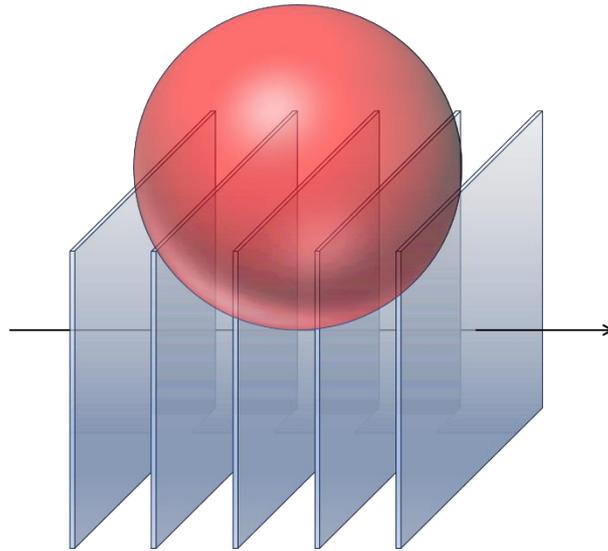
この感じだと回折図形はかなり複雑になりそうです。実際の測定はTEMを使った電子線回折でした。電子線の波長は原子間隔に比べて何桁も小さいので上の反射球はずっと巨大なものを想像しないといけないということになります。

そうすると答え合わせで使った下の図が(電子線の場合は)正しそうだと思われると思います。上の図の球を大きくしていくと逆格子点原点まわりの平らな(曲率がきわめて小さい曲面ですが)面を想像できますね。この面で逆格子“面”を切り取れば下のような平行直線が得られるでしょう(厳密にはちょっと曲がりそうです)。これが電子線回折像ということですね。

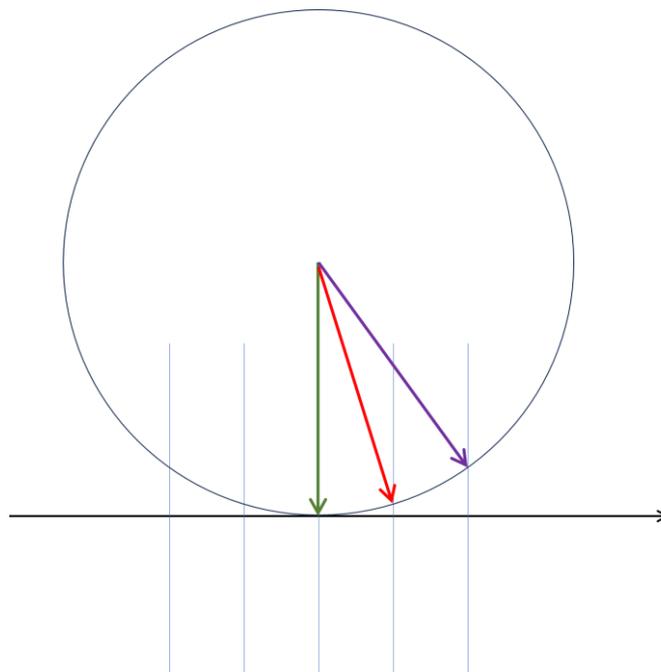


X線の場合は使用する波長にもよりますが、もう少し複雑な図になりそうです。平行な複数の面と反射球の交線を描いたうえで、球の中心から交線上の点へベクトルを描き検出面へ投影しないとイケないので相当な若さが必要です。年寄りにはこんなものは全く無理なので、問題をずっと簡単にします。

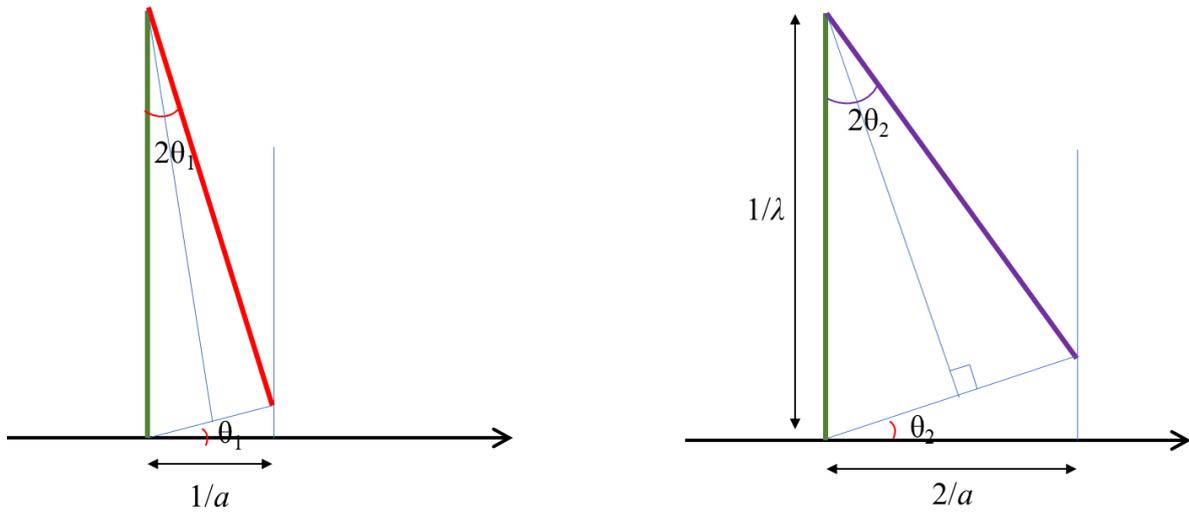
一つ目の簡単化は X 線の入射方向は電子線の時と同じだとします。



二つ目の簡単化は逆格子原点を含みこの面に垂直な断面だけを取り出して考えることにします。そうするとエワルドの反射球は“円”になり、逆格子“面”は“線”になります。入射 X 線ベクトルは緑、赤と紫は回折線ベクトルです。



ここまで簡単化すれば何とかかなりそうです。二等辺三角形の底辺の部分をもつた補助線にすると角度の関係がつかめます。



逆格子原点から一番近い“面”（上図の左）のところでは

$$2 \frac{1}{\lambda} \sin \theta_1 = \frac{1}{\cos \theta_1} \frac{1}{a}$$

だから、

$$2a \cos \theta_1 \sin \theta_1 = \lambda$$

同じように、逆格子原点から2番目に近い“面”（上図の右）のところでは

$$2 \frac{1}{\lambda} \sin \theta_2 = \frac{1}{\cos \theta_2} \frac{2}{a}$$

となるので

$$a \cos \theta_2 \sin \theta_2 = \lambda$$

となります。ブラッグの式と似ていますが  $\cos \theta$  が余分にかかってきます。回折角が小さいときはあまり影響しないでしょうが高次の回折では影響は大きくなりそうです。そもそも、問題をかなりかなり簡単化しているので実際はもっと面倒な解析になりますね。

## ⑥ 逆格子点とはいったいなにも

ここまでもかなり怪しい説明が多かったと思いますが、本章は私が勝手にこんな感じかなと思ったことを書いているので注意して読み進めてください。

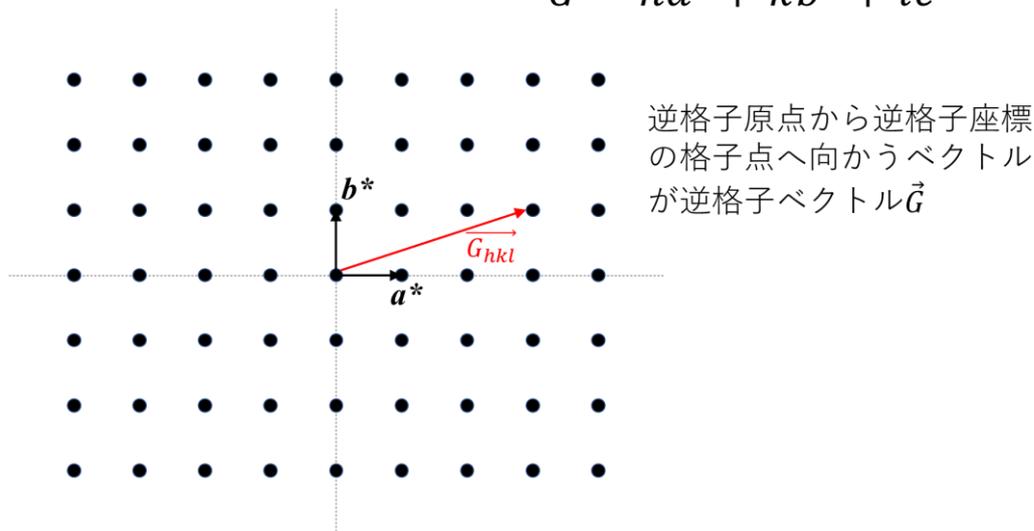
ここまでに学習してきたことをおさらいしておきましょう。

第2章ではラウエの回折条件を学んだ時に逆格子ベクトルの大きさが面間隔の逆数になることを学びました。この関係は数学的に導けるのでそれをみて納得という方も多いかもしれませんが一方でなぜそんな関係がでてくるのか疑問に感じる方もいるかもしれません。後者は私を含めて少数派かもしれませんが本章はこの疑問を少しでも解消したいとの思いで書いています。

$$\|\vec{G}_{hkl}\| = \frac{1}{d_{hkl}}$$

逆格子座標と逆格子ベクトル

$$\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$



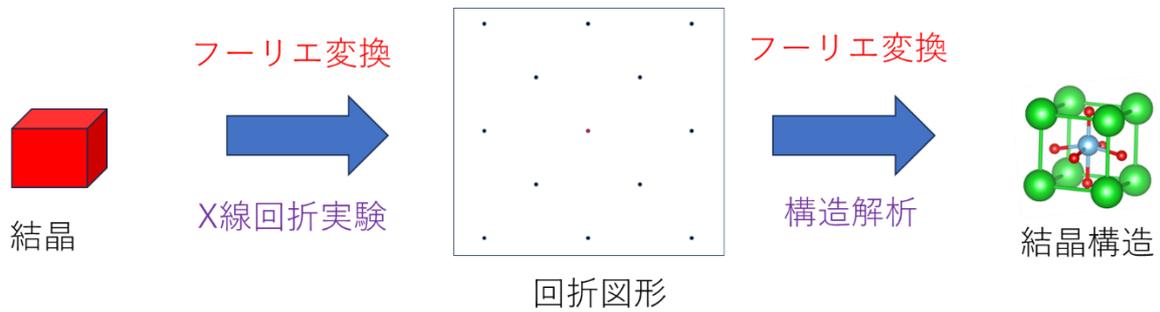
同じ第2章で本筋ではないところでしたが電子密度のフーリエ変換が散乱振幅になることを述べました。よく回折像は電子密度のフーリエ変換をみているということをいわれますが、それはこのことを指しています。

$$\text{結晶全体の散乱振幅 } C(\mathbf{s}) = \int \rho(\mathbf{r}) e^{2\pi i(\mathbf{r} \cdot \mathbf{s})} d\mathbf{v}$$

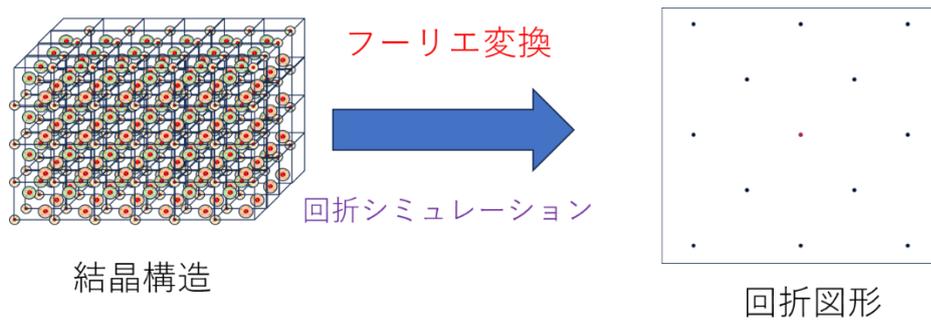
X線回折強度から構造解析を行います。これは散乱振幅から逆フーリエ変換を行えば電子密度が得られるということに近い作業です。「近い」と言ったのは上の散乱振幅は測定することができず、 $|C(\mathbf{s})|$  が測定されるためです。 $C(\mathbf{s})$  が測定されるのであれば測定範囲の問題はあるのですが下記の逆フーリエ変換で構造解析できます。

$$\rho(\mathbf{r}) = \int C(\mathbf{s}) e^{-2\pi i(\mathbf{r} \cdot \mathbf{s})} d\mathbf{v}$$

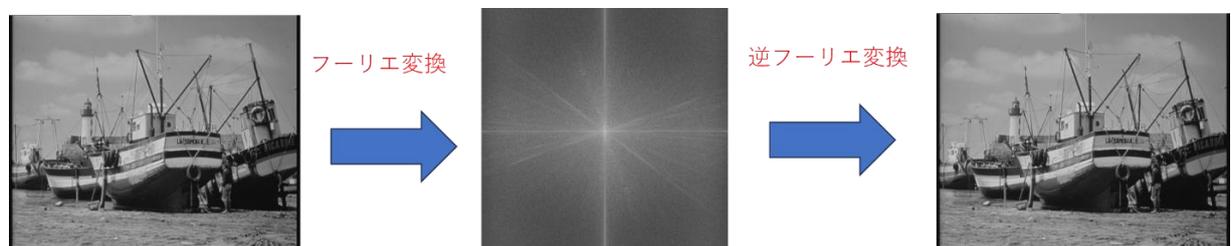
逆か逆でないかは単に順番だけの話なので、一回フーリエ変換してもう一回フーリエ変換したらもとに戻ると言うことが重要です。結晶をとってきてX線回折実験を行うと回折図形が得られますがこれが一回目のフーリエ変換です。回折図形を構造解析を行うと結晶構造が得られますが、これが2回目のフーリエ変換です。



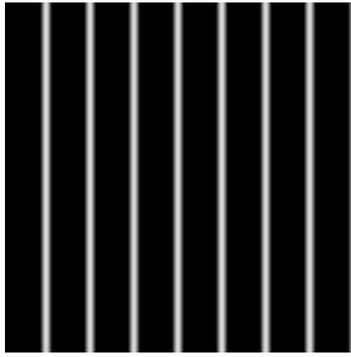
これが普通の構造解析の流れですが、後ろから戻すこともできます。



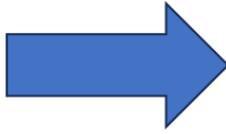
ずっと回折の話で進めてきましたがフーリエ変換してまたフーリエ変換するという手順は画像処理の分野で盛んに行われています。



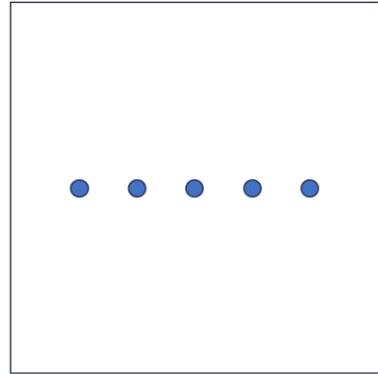
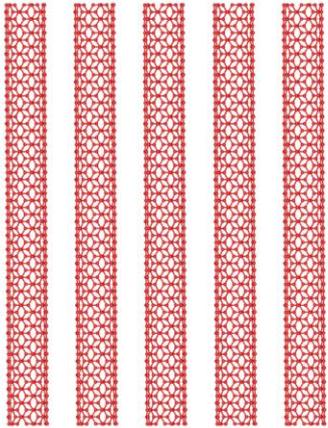
この過程で周波数フィルターなどをかけて画像処理するようです。上のフーリエ変換はImageJというフリーソフトを使ってサンプル画像を実際にフーリエ変換、逆フーリエ変換してみたものです。フィルター処理などを行っていませんのでもとの画像になります。このソフトを使ってもっと簡単な像をフーリエ変換してみます。



フーリエ変換



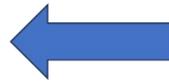
上のような縦じまの画像をつかってフーリエ変換すると一次元のドットの像が得られます。これはピーポッドの電子線回折写真でナノチューブの束から一次元の回折ドットが観測されたことを理解するのに活用できると思います。縦じまの間隔を短くするとフーリエ変換後のドットの間隔は大きくなります。



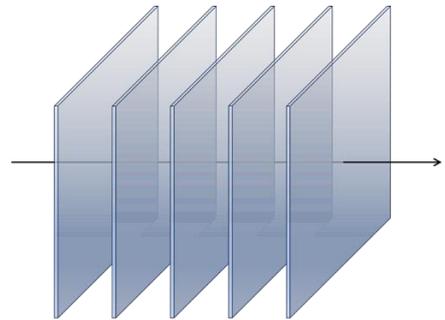
また、どちらからフーリエしてもよいことを思い出すと、一次元結晶の逆格子が面になったものを面の横側から覗き込んで縦じまがみえていると理解してもよさそうです。



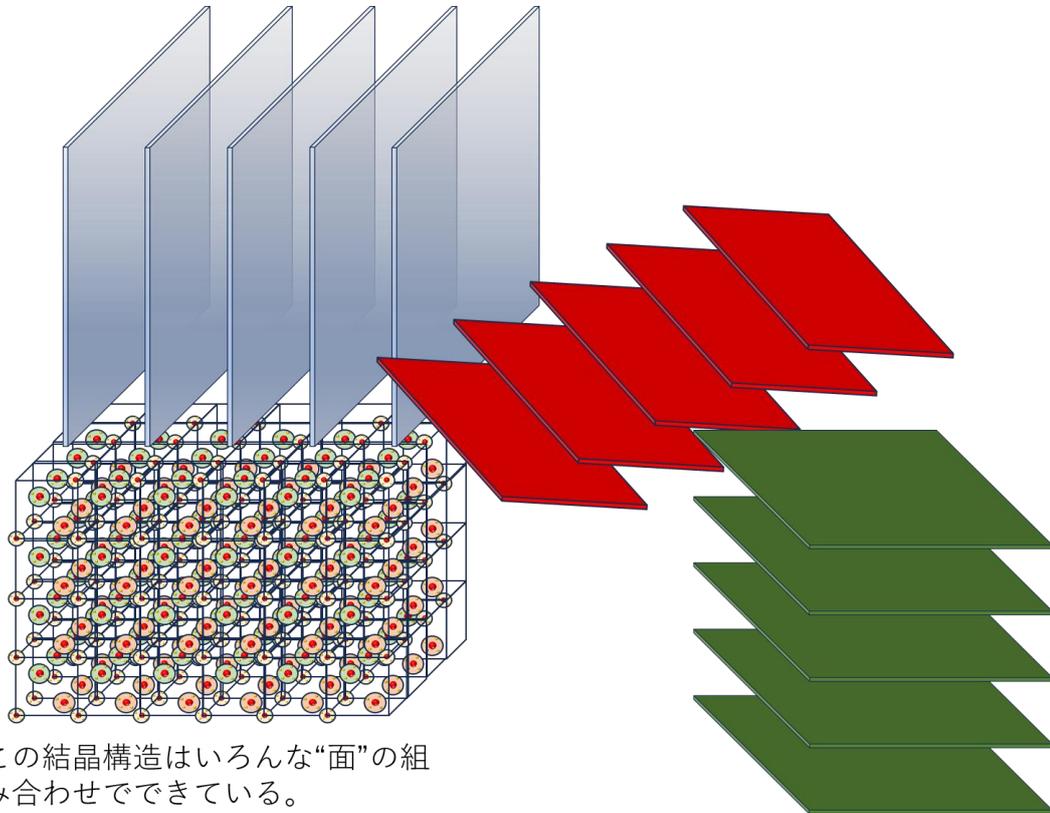
フーリエ変換



フーリエ変換

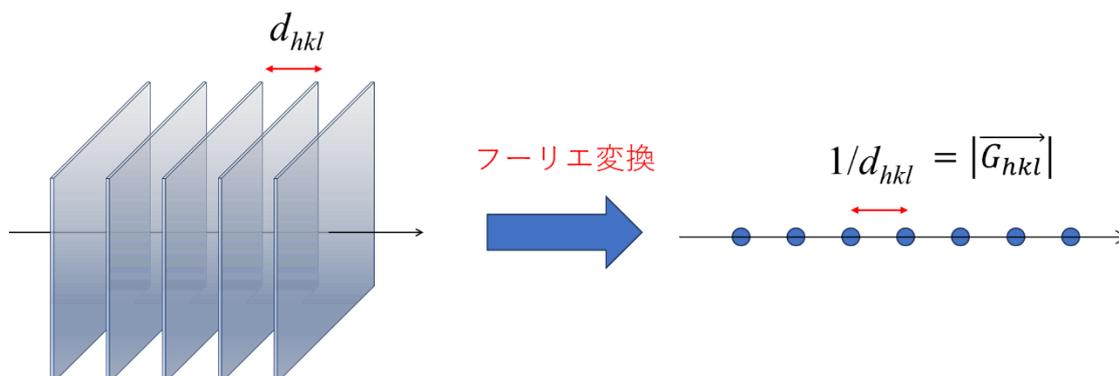


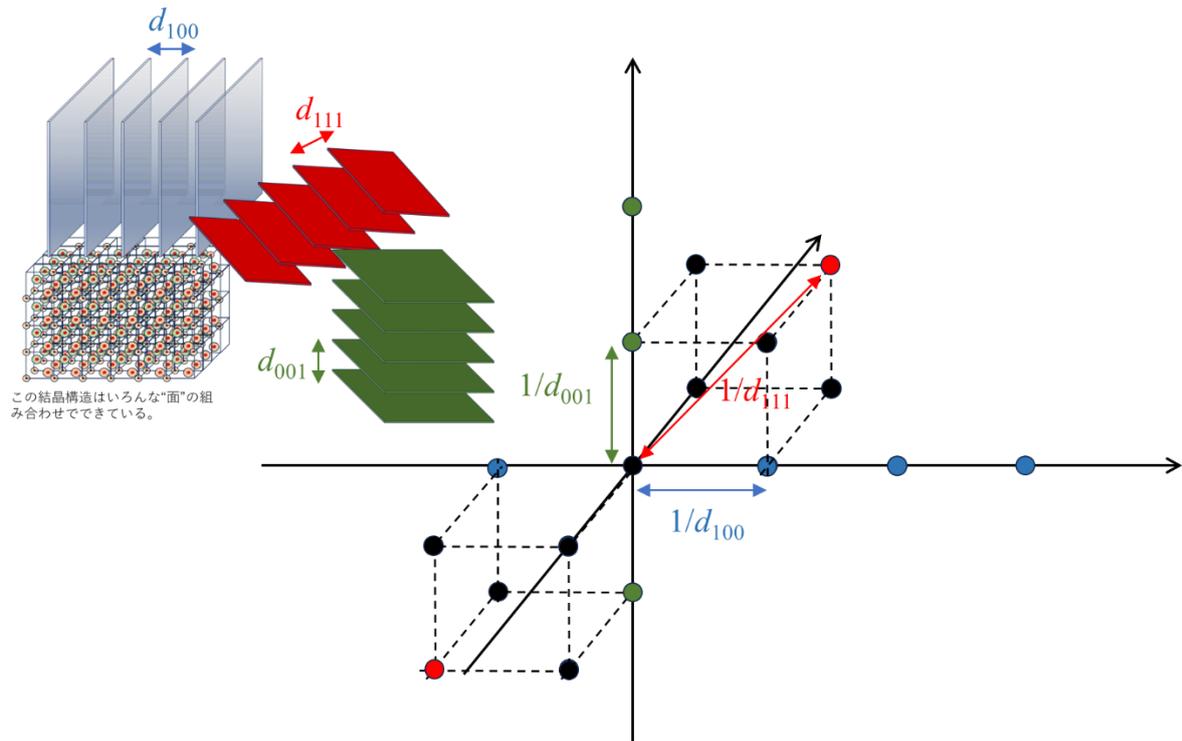
ここまで時間をかけて一次元結晶の逆格子が逆格子“面”になることを見てきたのですが、逆に“面”のフーリエ変換が点になりそうだということもわかってきました。結晶構造のフーリエ変換が逆格子像だということも確認してきました。ここで結晶構造がいろんな結晶“面”から構成されていると考えてみましょう。



面間隔の大きい面もあれば面間隔の小さい面もある。面の連なる方向もさまざまです。これらの面をフーリエ変換すると面間隔の大きい面は逆格子原点近くに点として現れ、逆に面間隔の小さい面は原点から遠いところに現れるはずです。面の方向に応じて点は3次的にちらばることになると思います。各点は逆格子点であり、原点からの距離は面間隔の逆数に対応することになります。それが本章の冒頭で掲げた問いに対する答えのつもりです。

$$\|\vec{G}_{hkl}\| = \frac{1}{d_{hkl}}$$

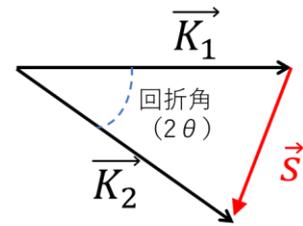
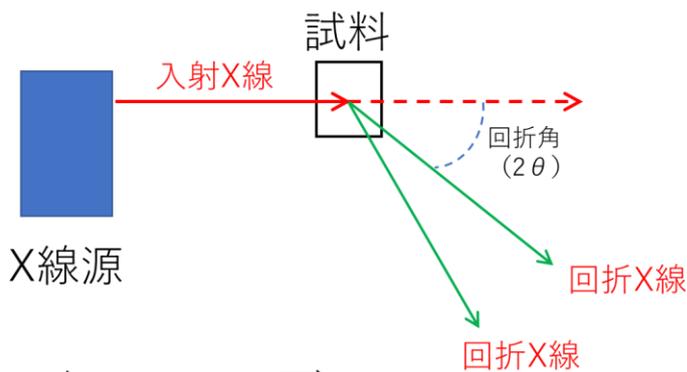




また、本稿の主題である「逆格子点はなにものか」との問いに対しては、「逆格子座標の逆格子点は実空間の結晶面（等価な結晶面の束といったほうがよいかもしれません）のフーリエ像ととらえてよいのではないか」、というのが私の回答です。そんな考えはおかしい、かもしれないので批判的に読んでいただければ幸いです。

さて、もうひとつ宿題が残っていました。ラウエの回折条件を説明するところで幾何学的な図を出して、散乱ベクトルの図は $|\mathbf{K}_1| = |\mathbf{K}_2|$ というエネルギー保存則と $\mathbf{K}_2 = \mathbf{K}_1 + \mathbf{s}$ という運動量保存則をあらわしています、と説明しました。エネルギー保存則はともかく、運動量保存は何が動いたんだ、と疑問を感じるのではないのでしょうか。私は疑問に感じるのですが、きっとこれかな、というのがありますのでそれは次ページで説明します。

入射、回折X線ベクトル $(\vec{K}_1, \vec{K}_2)$  と散乱ベクトル $\vec{s}$



$$\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

$$|\vec{G}| = \frac{1}{d_{hkl}}$$

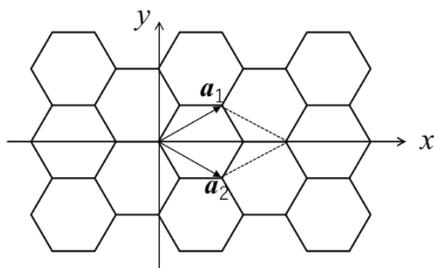
$$|\vec{K}_1| = \frac{1}{\lambda} \quad \vec{s} = \frac{2 \sin \theta}{\lambda}$$

$$\vec{s} = \vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

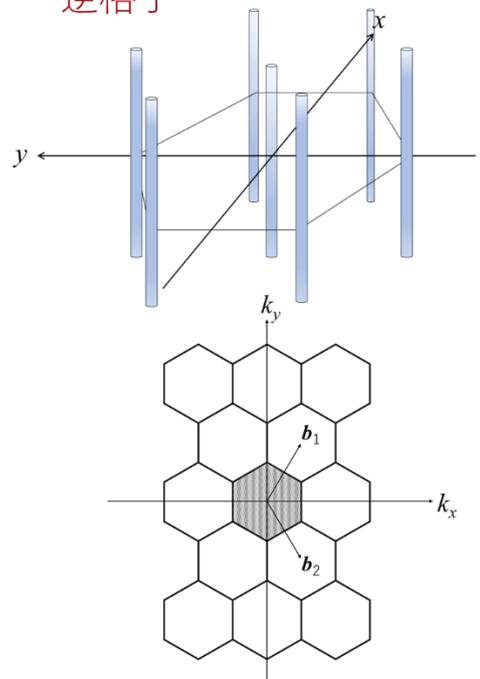
まるっきり見間違いかもしれませんが、初等物理で習うブロッホの定理がきっと関係しています。なぜそんなことを思うのかについてこれから書いていきますが私の思い込みでまるっきり間違っているかもしれませんのでご注意ください。それから、2次元結晶のところではグラフェンの教科書に出てくる逆格子は本書で取り上げたのとは異なっていたこともあまり触れずにきてしまったのでその辺も整理しておきたいのですが、この部分もまったく自信がないので老人の独り言くらいに聞き流したもらったほうがよいかもしれません。

本稿は逆格子について回折を理解する視点から眺めてきました。しかし、逆格子は回折を理解するためだけに利用されるものではありません。バンド構造など電子の振る舞いを理解するときにも逆格子は活躍します。第4章で2次元結晶の逆格子は逆格子ロッドになるはずなのにグラフェンの教科書にはそんなことは書かれていなくて2次元の逆格子が描かれています。2種類の逆格子は何が違うのでしょうか。

### 実格子

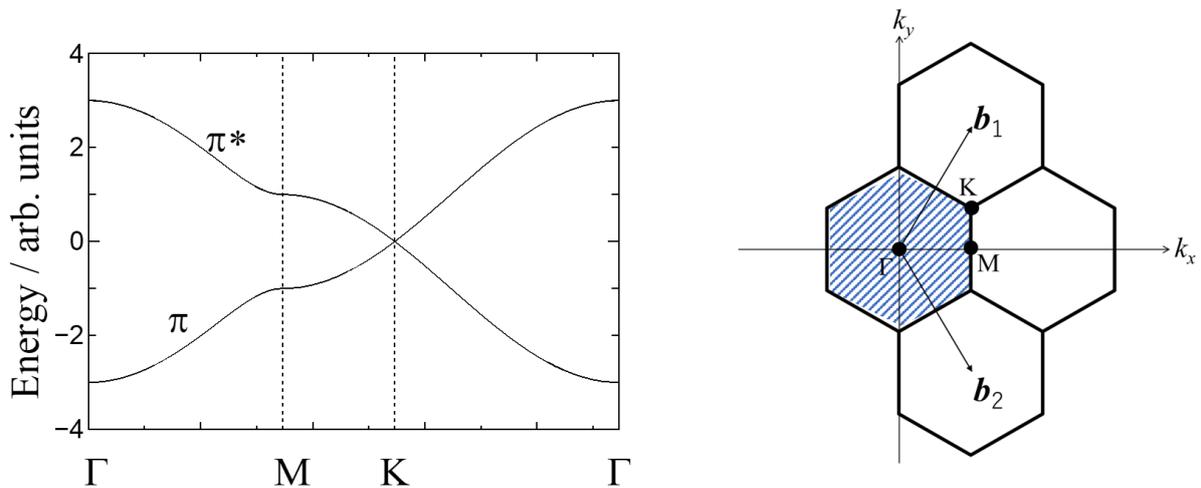


### 逆格子



2種類の逆格子の描像が存在する理由はすでにも書いているとおりで、逆格子を回折に利用するのか電子構造に利用するのかという目的の違いです。電子構造に利用する、という場合でもいろいろとあるとは思いますが、波動関数に使うというのがおそらくきつとたぶん多いのではないかなと想像します。波動関数は波の関数（本当？）ですが、波長の逆数の波数を使ってラベルすることがよく行われます。上のグラフェンの逆空間の座標にも使われていますが、波数は  $k$  を使ってあらわされることが多く、逆空間のことを波数空間とか  $k$  空間などと言います。また、波の運動量が  $\hbar k$  と表せることから逆空間のことを運動量空間とも言います。運動量という言葉が出てきましたが、ここでの問題は回折の時の運動量保存についてでした、何か関係していそうですね。散乱ベクトルが逆格子ベクトルと一致するときには回折するのですがこのとき何か動いているはずだが、それは何なのかという問題です。

問題が何かを確認したので先に進みましょう。波動関数は波数でラベルして書くことができ、バンド構造は例えば下の図のように描かれます。



バンド構造の横軸の  $\Gamma$ ,  $M$ ,  $K$  などは逆空間の代表的な座標です。こんな風にバンドを描くのはもちろん意味があって、斜線をつけたブリルアンゾーンの中の  $\mathbf{k}$  についてだけ書いておけばあとはよいのだという考えです。どうしてブリルアンゾーンの中だけでよいのかというのは、ブロッホの定理というのを使って説明すればよいのだと思います。

結晶のように原子が周期的に配列している中では電子はその周期的なポテンシャルの中にいます。周期的なポテンシャルの中にある電子の波動関数は以下の関係を満たすというのがブロッホの定理です。

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

ここで  $\mathbf{k}$  に逆格子ベクトル  $\mathbf{G}$  を加えることを考えます。

$$\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{R}}\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r})$$

指数関数の部分の  $\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}$  に注意すると

$$\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r})$$

が得られます。このことは  $\psi_{\mathbf{k}}$  と  $\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}$  を同じと考えてよいことを示しているらしいです。ここでああそうか、とならないでしょうか。X 線が入射してきたとき  $\hbar\mathbf{G}$  だけ運動量変化が起こって回折 X 線が出ていったという描像になります。一方、電子の波動関数において  $\mathbf{G}$  の変化が起こっても  $\psi_{\mathbf{k}}$  が  $\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}$  になるだけなので何もなかったかのように振る舞うはずで、運動量保存のために何か動かないといけないということはないのではないかということです。

さて、 $\psi_{\mathbf{k}}$  と  $\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}$  をもし同じと考えてよいのであれば  $\mathbf{k}$  の範囲として一番短い逆格子ベクトルまでをとってくればよいということになります。多くの場合は逆格子原点を中心として正負の方向を考えて逆格子ベクトルの正負半分ずつをとって（これでその方向にちょうど逆格子ベクトル分とっていることになる）この範囲をブリルアンゾーンとします。上の斜線の部分はそのような取り方をしています。この範囲をはみ出るとすぐに  $\mathbf{G}$  で引き戻されてしまう、というイメージです。

さて、第4章で2次元結晶の逆格子がロッドになることを示す過程で  $\vec{c}^*$  を  $\vec{n}$  を向いた（すなわち  $\vec{a}$  と  $\vec{b}$  が張る面に垂直方向を向いた）無限に短いベクトルと説明しました。そうすると  $\vec{c}^*$  方向へ少しでも行けば  $\mathbf{G}$  動いたことになり、すぐに戻されてしまいます。つまり、 $\vec{c}^*$  方向へ行くのは無意味であり、結果として電子構造を問題にするのなら、すなわちブリルアンゾーンを問題にするのなら2次元でよいということになり、わざわざ逆格子ロッドを描く必要がないということです。これがグラフェンの教科書に出てくる逆格子像が2次元平面になっている理由ではないか、というのが私の推察ですが、何度も言っているとおり大きく間違っていたら申し訳ありません。

(2024.01.06)