

弾性ひずみを持つ結晶
におけるX線回折現象

名古屋大学工学部
応用物理学科

安藤義則

名古屋大学図書
和 533907

報告番号※甲第 535 号

目 次

序 論	1
<u>理論の部</u>	
第一章 完全結晶におけるX線回折の動力学理論	12
1.1 基本方程式の導出	12
1.2 二波近似	16
第二章 わずかに乱れた結晶におけるX線回折の動力学理論	21
2.1 X線波の満たす基本方程式	21
2.2 modified Bloch 波	25
2.3 X線回折強度	33
第三章 一様なひずみ勾配を持つ結晶におけるX線回折現象	40
3.1 一様なひずみ勾配の意味	40
3.2 軌道の方程式	43
3.3 modified Bloch 波の位相	49
3.4 Section 図形の強度	55
3.5 Traverse 図形の強度	63
第四章 種々の乱れを含む結晶におけるX線回折現象	69

4.1	z方向にひずみ勾配が変化している 結晶	69
(a)	軌道の方程式	69
(b)	位相の計算	77
(c)	回折強度	80
4.2	x方向にひずみ勾配が変化している 結晶	86
4.3	任意の方向にひずみ勾配が変化して いる結晶	95

実験の部

第五章	結晶内のひずみ分布の計算	98
5.1	動径圧縮を加えた円板のひずみ分布	98
5.2	動径圧縮を加えた正方形板のひずみ 分布	104
5.3	単結晶の弾性定数	107
5.4	異方性を考慮にした弾性論	114
第六章	実験装置および実験方法	118
6.1	実験装置	118
6.2	試料の作成法	120
6.3	実験方法	122
第七章	実験結果	127
7.1	黒および白のコントラスト	127
(a)	吸収の大きい場合	130
(b)	吸収の小さい場合	132

(c)	強度測定	134
(d)	Section トポグラフ	136
7.2	結晶の対称性と Traverse トポグラフの対称性の間の関係	140
7.3	結晶方位の違いと Traverse および Section トポグラフの間の関係	143
(a)	葉形が五つにわかれる場合	145
(b)	葉形が三つにわかれる場合	148
(c)	葉形の領域がはっきりしない場合	151
7.4	円板結晶の種々の綫平面による回折トポグラフ	152
(a)	$[01\bar{1}]$ 方向に圧縮した場合	152
(b)	$[\bar{2}11]$ 方向に圧縮した場合	153
第八章	実験結果の考察	161
8.1	黒および白のコントラストと Friedel 則背反現象	161
8.2	乱れた結晶における Pendellösung 縞	166
8.3	Section トポグラフによる ひずみ勾配の変化方向の識別	170
8.4	結晶異方性と回折現象	175
8.5	乱れた結晶における回折現象として興味のある二つの現象	182
(a)	乱れが非常に激しい場所における回折トポグラフ	182
(b)	二重に重なった Pendellösung 縞	185
(c)	surface damage による回折像	188
(d)	対称 Laue case からはずれた場合の回折現象	195

結	論	199		
謝	辭	204		
參	考	文	獻	205

序 論

最近、種々の物質で比較的大きな単結晶が得られるようになり、それらの結晶の完全性や格子欠陥などを調べるのに透過型のX線回折トポグラフ法^{1) 2)}が、しばしば用いられるようになった。その結果、複雑な欠陥の像を含む種々の回折トポグラフが得られている。それらの回折トポグラフから結晶中に存在する格子不整に関する正しい情報を得るには、乱れた結晶によってX線がどのような散乱を受け、いかなる回折現象を生ずるかを熟知していなければならぬ。しかしながら、現在まだ乱れた結晶におけるX線回折現象は十分明らかにされているとは言えない。そのため、回折トポグラフも理解できない場合が少なくない。

回折トポグラフ法で調べられるような大きい結晶の場合には、X線は結晶中で何回も散乱されると考えられる。したがって、そのような現象を取り扱う理論としては、結晶中での一回散乱の仮定に基づいたいわゆる運動学理論では不十分である。結晶中での多重回散乱を考慮した、いわゆる動力学理論が必要となる。従来、X線回折の動力学理論はおもに完全結晶に対して展開されてきた^{3) 4) 5)}。それが、

加藤と Lang⁶⁾による *Pendellösung* 縞の観測以後急速に発展させられた。今では完全結晶に關する限り、理論⁷⁾⁸⁾と実験^{9)~13)}の間には十分良い一致が見られている。これに対して、乱れた結晶に対する X 線回折の動力学理論は、まだその発展途上にあると言える。最近、多くの入々によって種々の理論が提案された。これらの理論は、結晶の乱れを二次元的なものに制限する理論と、三次元的な乱れを取り扱う理論に大別される。

二次元的な乱れを取り扱う理論は、"lamellar crystal theory" と略称される。これらの理論では、いわゆる Darwin 流の動力学理論³⁾のように、結晶を表面に平行な薄い層状結晶に切って考える。個々の層の中では乱れはなく完全結晶と考え、相隣る層の格子面が表面に平行な方向にずれていると仮定する。こうして、結晶表面に垂直な方向の乱れが考慮される。各々の層における X 線波の振舞いを入射面から順次求めていくわけであるが、その基本式はそれぞれの方法によって異なる。たとえば、各々の層による散乱行列を計算してそれらの積として結晶出射面における波動関数を求める方法¹⁴⁾、あるいは入射波と Bragg 反射波の満足する微分方程式を求めてそれを数値積分する

方法¹⁵⁾ などがある。また、これらの理論を横方向に乱れた結晶に対しても適用するために "diaphragm approximation"¹⁶⁾ "あるいは" column approximation"¹⁵⁾ "と呼ばれる近似が行われる。後者は、結晶波の振がりの範囲内では横方向の乱れはないと仮定する理論¹⁷⁾ である。したがって、結晶波の振がりの小さい電子回折の場合に有用でありしばしば適用される。

これに対して、三次元的なひずみを取り扱う理論は、いわゆる Bethe-Lane 流の完全結晶に対する動力学理論¹⁸⁾ を拡張したものと云える。このタイプの最も一般的な理論は高木の理論¹⁹⁾ であると思われる。そこでは、Bragg 反射をとともなう場合の入射波および Bragg 反射波の振巾が一階の連立微分方程式と満足する形に表わされる。一般には、それを解析的に解くことは困難であり、数値計算法で解かれることが多い。したがって、その物理的意味がはっきりしないという欠点がある。ごく最近、高木は前述の微分方程式を入射波あるいは Bragg 反射波の振巾に関する二階の微分方程式に書きなおして、Riemann の方法を用いて解いた²⁰⁾。類似の取り扱いは、Jaupin²¹⁾ および Schlangenotto²²⁾ によってもなされている。

結晶光学における重要な発展は、PenningとPolder²³⁾によつてなされた。彼等は屈折率が一様でない媒質中での光の屈折現象の類推から、乱れた結晶中でのX線波の振舞いを明らかにした。結晶の乱れに対応する局所的な逆格子ベクトルを定義し、その逆格子ベクトルが最も大きく変化する方向に結晶内のX線波の波動ベクトルが変化すると仮定した。局所的には完全結晶に対する理論が適用できるとして、乱れにともなう分散率の変化量を求めて結晶内の軌道を明らかにした。しかしながら、その軌道に沿った位相に関する議論はなされていない。したがって、彼等の理論は幾何光学的な理論と言えらる。幾何光学的な理論としては、他にBonse²⁴⁾がBragg caseにも適用できる理論を報告している。

加藤は、光学におけるEikonalの理論を乱れた結晶に適用して、Fermatの原理からエネルギー流の軌道を求めた²⁵⁾。その際に、PenningとPolderによつてなされた基本的な仮定が、X線波に対する基礎方程式であるところのMaxwellの方程式から必然的に導かれ、その物理的意味づけがなされることを明らかにした。さらに、結晶の乱れに依存する逆格子率の移動も考慮して、軌道に沿った

波の振巾および位相を計算する方法を提案した²⁶⁾。この方法を一樣な曲げを加えた結晶の場合に適用して、完全結晶の場合と同様、Pendellösung 縞が生じることを明らかにした²⁷⁾。しかし、その縞の間隔は完全結晶の場合のように一定¹²⁾ではなく、ひずみ勾配の増大とともに狭くなることが示された。この一連の理論によれば、波の振巾と位相の両方が得られるから、幾何光学をさらに発展させた波動光学的な理論と言える。類似の理論は、Kambe²⁸⁾によっても報告されている。また、加藤と安藤²⁹⁾は格子の変位が場所に関する2次形式で表わされるときはひずみ勾配が一樣になり、一樣な曲げを加えた場合²⁷⁾と同様のX線回折現象が期待されることを示した。

以上述べた三次元的なひずみを取り扱う理論のうちで、PenningとPolderの理論およびそれを発展させた理論の場合には、結晶内の軌道の概念が失われない程度に丸めはゆるやかでなければならぬ。また、結晶内に励起される二種類の波の間のエネルギーの授受、すなわち分散面の分枝の間のとびは考慮されていない。高木の理論の場合には、このような制限はなく、むしろ何回も分枝の間のとびを生じたものも含めて、入射波およびBragg反射波の振巾が

定義されていると考えられる。その意味でより一般的な理論と言えらる。しかしながら、逆に分枝のとびを生じていない波の寄与がどれだけであるかを区別することはできない。物理的意味がはっきりしない所以である。

これに対して、乱れた結晶によるX線回折現象を実験的に明らかにしようとする試みも多くの人々によってなされている。この目的には、完全結晶を人為的に変形させて、それによる回折現象が調べられる。これらの実験は、Pendellösung 縞を問題にするものと、いわゆる Friedel 則背反の現象も含めた乱れによる回折強度の変化を問題にするものの二つに大別される。

乱れた結晶における Pendellösung 縞に関する典型的な実験が Hart⁽¹⁾⁽²⁾ によってなされた。くさび形の Si 単結晶に温度差を与えて変形させ、その Section トポグラフから乱れの増大とともに Pendellösung 縞の間隔が小さくなることを示した。荻藤と加藤⁽³⁾ は、平行板結晶に外力を加えて変形させ、Section および Traverse トポグラフによる観察を行った。Section トポグラフでは、完全結晶の場合に期待されるような margin に平行な Pendellösung 縞のみならず、乱れの大きいところではかぎ形や

楕円形の *Pendellösung* 縞を見出した。また, *Traverse* トポグラフの中には, 等ひずみ勾配の縞と呼ぶにかさわしい *Pendellösung* 縞を見出した。これらの実験結果は, 前述の加藤の理論²⁷⁾ から予測されるものと一致し, 理論の正当性を実証している。

温度勾配あるいは機械的な曲げモーメントを与えて結晶を变形させ, その回折強度を強度測定法によって調べる実験が, *Hildebrandt*³³⁾, *Hunter*³⁴⁾ および *Okkerse* と *Penning*³⁵⁾ によってそれぞれ独立に行われた。その結果, *Bragg* 反射波の強度が格子面の曲りの方向によって異なることが見い出された。すなわち, 符号も含めたひずみ勾配の大きさに対して回折強度をプロットすると, ひずみ勾配が零の場合に關して非対称になることが明らかにされた。理論的に解析すると, この現象は *Friedel* 則背反の現象とまったく同等であることがわかる。なお, これらの実験³³⁾³⁴⁾³⁵⁾ はすべて, 吸収の十分大きい ($\mu_0 t \approx 10$) 条件のもとに行われた。

人為的に变形させた結晶を, 回折トポグラフ法で調べる実験は, 福島ら³⁶⁾³⁷⁾ によって最初に行われた。彼等の得た回折トポグラフは, 通常の方法によるものとは少し異

なるが、本質的には Lang の Traverse トポグラフ¹⁾ と同じである。彼等は反射ベクトルの向きを変えてトポグラフを撮り、同じ場所の回折コントラストが黑白逆転する、いわゆる Friedel 則背反の現象を見出した。なお、この実験は吸収のあまり大きくない場合に対して行われた(μ₀ ≃ 2.5)。これと類似の黑白の回折コントラストは、ある種の格子欠陥を含んだ結晶による初期のトポグラフ法の実験^{38) 39) 40)} の中にも見い出される[†]。福島らと類似の実験を行った安藤と加藤^{32) 41)} も、同様のコントラストの逆転を見出した。より複雑なひずみを含む結晶、たとえば Si の一部を電子ビームで溶融した結晶⁴²⁾ や、Si の基盤上に部分的に酸化膜をつけた結晶^{43) 44)} の場合にも類似の黑白の回折コントラストが報告されている。水溶液から成長させた NaCl 結晶では比較的広い範囲にわたって、黑白のコントラストの逆転の現象が認められる⁴⁵⁾。

[†] 加藤によれば、この種の黑白のコントラストの反転は、Lang と加藤の Si 単結晶を用いた初期のトポグラフ法による実験(1959年)の中にすでに見い出されていたとのことである。しかし、その結果は報告されてはいない。ただし、この現象の存在には留意して、後述のようにその理論的説明が加藤によってなされている^{14) 27)}。

加藤は、これらの乱れた結晶における Friedel 則背反の現象は、中程度の Borrmann 吸収^{46) 47)} ($\mu_0 t \approx 1$) の効果として説明できることを指摘した^{14) 27)}。一方、福島らは簡単なひずみ分布の考察から、Borrmann 効果ではその現象を説明することはできないと考えた。しかしながら、最近の傾向としては、乱れた結晶における Borrmann 吸収を取り扱った Penning と Polder の理論でそのコントラストは説明できるという考え方が支配的である。それゆえ、福島らと同じタイプの実験をもう一度研究する必要があると思われる。さらに、X線回折の実験には吸収の大きさ、結晶の厚さ、ひずみ勾配の大きさや反射ベクトルの向きに対するその符号などの多くの要因が含まれる。したがって、これらの因子を十分考慮した系統的な回折トポグラフの研究を行うことが望まれる。ちなみに、Penning と Polder の論文²³⁾では、吸収の十分大きい場合 ($\mu_0 t \geq 10$) だけが取り扱われている。これに対して、大部分の回折トポグラフの実験は、中程度あるいはそれ以下の吸収の条件で行われている。

以上のような観点から、本研究では乱れた結晶における X線回折現象を理論および実験の両面から明らかにすること

とを目的とした。理論の基礎は、前述の加藤の理論^{25) 26)}
27) に置き、それをさらに実際の問題に適用しやすいよう
に発展させた。その結果、上述の吸収やひずみ勾配の大き
さ、あるいはその符号などの要因によって、どのような回
折効果が得られるかが明らかにされた。実験としては、 S_2
単結晶に動径圧縮を加えて変形させ、吸収の大きさや反射
ベクトルの方向などを変える実験を行った。結果として、
種々の因子の及ぼす影響が系統的に明らかにされた。さら
に、従来この種の実験ではあまり問題にされていなかった
回折トポグラフと結晶方位に依存する変形^{48) 49)}の間の
関係が調べられ、異方性の考慮が不可欠であることが示さ
れた。

ここで注意すべきことは、本研究では弾性ひずみを持つ
結晶だけを問題にしたことである。したがって、その結果
は、比較的広い領域にわたって結晶の乱れの影響が及んで
いる実際の結晶に応用される。たとえば、結晶軸位に関し
て言えば、その芯の部分を除いた領域に対しては、本研究
の結果が適用できる。しかしながら、軸位芯のような極端
に大きな乱れに対しては、さらに異った取り扱いが必要で
ある。また、積層欠陥のような特殊な乱れによる回折現象

は、まったく異なった方法で明らかにされている⁽⁴⁾が、本研究ではそれには触れなかった。

本論文は、理論の部と実験の部に大別して記述される。

理論の部では、最初に完全結晶におけるX線回折の動力学理論を要約する(第一章)。第二章で、加藤の理論に基づいて乱れた結晶に対する動力学理論の基礎を述べる。第三章では、第二章で得られた基礎式をひずみ勾配が一樣な結晶の場合に適用して回折現象を調べる。第四章で、ひずみ勾配が一樣でない結晶における理論的取り扱いについて述べる。

実験の部では、最初に、動径圧縮を加えた薄板内部のひずみ分布を弾性論を用いて計算しておく(第五章)。第六章で、実験装置、試料作成法および実験方法について述べる。第七章で、回折トポグラフ法によって得られた実験結果を記述する。最後の章(第八章)で理論結果を考慮して実験結果に対する考察を加える。

理論の部

第一章 完全結晶におけるX線回折 の動力学理論

この章では, Bethe-Lane 流の完全結晶におけるX線回折の動力学理論^{(5) (8)}を要約して述べる。とくに, 二波近似の場合を取り扱う。ただし, 第二章以下において, 乱れた結晶に対する理論を展開するのに必要な表式を求めることに重点を置く。詳細な記述は, 完全結晶による回折現象に関する参考書^{(5) (1)}ならどこにも見られる。

1.1 基本方程式の導出

X線は電磁波であるから, その伝播の様子は Maxwell の方程式で記述される。結晶中のX線波の振舞いは, 結晶を周期的な誘電率を持った媒質とみなし, 与えられた境界条件のもとに Maxwell の方程式を解くことにより明らかになる。

結晶中での Maxwell の方程式から電気変位ベクトル D の満足する方程式を求めると,

$$\text{rot rot } (1-\kappa)D + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 D}{\partial t^2} = 0 \quad (1-1)$$

となる。ここで電気分極率を 4π 倍した値 κ (以後この κ を電気分極率と呼ぶ) は, 1 より十分小さいとした。

電気分極率は電子密度 $\rho(r)$ と次のような関係がある⁽⁵⁾。

$$\chi = - \frac{e^2 \lambda_0^2}{\pi m c^2} \rho(r) \quad (1-2)$$

ここで π は円周率, e および m はそれぞれ電子の電荷および質量であり, c は光速度, λ_0 は真空中での入射 X 線の波長を表わす。電子密度は結晶格子と同じ周期で分布していると考えられるから, 完全結晶の逆格子ベクトル g を用いて, Fourier 級数に展開できる。

$$\begin{aligned} \rho(r) &= \sum_g \rho_g \exp 2\pi i (g \cdot r) \\ &= \frac{1}{v} \sum_g F_g \exp 2\pi i (g \cdot r) \end{aligned} \quad (1-3)$$

ρ_g は電子密度の g 次の Fourier 係数であり, v は単位胞の体積を表わす。 F_g は構造因子と呼ばれ, 電子密度の Fourier 変換によって次のように定義される。

$$F_g = \int_{\text{unit cell}} \rho(r) \exp -2\pi i (g \cdot r) dr \quad (1-4)$$

(1-2) および (1-3) 式より, 電気分極率も Fourier 級数で表わされる。

$$\chi = \sum_g \chi_g \exp 2\pi i (g \cdot r) \quad (1-5)$$

ここで

$$\chi_g = - \frac{e^2 \lambda_0^2}{\pi m c^2} \frac{F_g}{v} \quad (1-6)$$

で表わされる電気分極率の g 次の Fourier 係数は, 10^{-5} ~ 10^{-6} の値になり, 1 に比べれば十分小さいことがわかる。

したがって、(1-1)式を求める際に行った近似が妥当であることがわかる。

ここでは、X線の干渉性散乱だけを問題にし、弾性散乱だけを考える。このとき、真空中でのX線波の角振動数を ω とすれば、電気変位ベクトル \mathcal{D} の時間依存性は $\exp(-i\omega t)$ で与えられる。この関係を用いると(1-1)式は、

$$\text{rot rot } (1-\kappa)\mathcal{D} - (\omega^2/c^2)\mathcal{D} = 0 \quad (1-7)$$

となる。ベクトル関係式を用いて(1-7)式の第一項を展開し、 $\text{div } \mathcal{D} = 0$ という関係に注意すると、(1-7)式は

$$\Delta \mathcal{D} + k^2 \mathcal{D} + \text{rot rot } \kappa \mathcal{D} = 0 \quad (1-8)$$

と変形される。ここで $k \equiv \omega/c$ は、入射X線の真空中での波動ベクトルの大きさを表わす。

以上の議論は一般的なものであり、乱れた結晶に対しても適用できる。 κ として乱れた結晶における電気分極率を用いれば、(1-8)式はその乱れた結晶の中に存在するX線波の電気変位ベクトルが満す方程式を表わす。

完全結晶に対する電気分極率は、(1-5)式によって、周期的に変動する関数として与えられる。周期的に変動する媒質の中に存在する波動場は、一般にBlock波で表わされる。それは、平面波の一次結合の形に書くことができる。

いま、 N 個の平面波が結晶中に励起されたと仮定すると、

$$D = \sum_{g=0}^{N-1} D_g \exp i k_g \cdot r \quad (1-9)$$

と表わされる。ここで D_g は平面波の振幅であり、 k_g はその波動ベクトルである。この (1-9) 式が Bloch 波を表わすためにはその波動ベクトルの間に

$$k_g = k_0 + 2\pi g \quad (1-10)$$

という関係が成り立たねばならない。

(1-5) および (1-9) 式を (1-8) 式に代入して、 D_g および k_g の満たす関係式を求めると、

$$\sum_{g=0}^{N-1} \left[(K^2 - k_g^2) D_g - \sum_{g'=0}^{N-1} \alpha_{g-g'} k_g \times (k_g \times D_{g'}) \right] \exp(i k_g \cdot r) = 0 \quad (1-11)$$

となる。たがいに独立な平面波に対してこの式が成り立つためには、

$$(K^2 - k_g^2) D_g - \sum_{g'=0}^{N-1} \alpha_{g-g'} k_g \times (k_g \times D_{g'}) = 0 \quad (1-12)$$

でなければならぬ。(1-12) 式の左辺と k_g とのスカラ積をとると、 $D_g \cdot k_g = 0$ という関係式が得られる。これは結晶内に存在する \times 線波が横波であることを意味する。

このことに注意して、 $D_{g'}$ の k_g に垂直な面内の成分ベクトルを $D_{g'}(g)$ と書くことにすると、(1-12) 式は

$$\{K^2 - k_g^2 (1 - \alpha_0)\} D_g + \sum_{g' \neq g} \alpha_{g-g'} k_g^2 D_{g'}(g) = 0 \quad (1-13)$$

となる。この式が、 N 個の平面波が結晶中に励起されるときの波の振幅と波動ベクトルの満たす基本方程式である。波動ベクトル k_g に垂直な波の振幅 D_g としては、二つの独立な成分が考えられる。したがって、(1-13) 式は $2N$ 個の連立方程式になる。それらの係数の作る行列式が零になるという条件が、物理的に意味のある解を与える。

1.2 ニ波近似

X 線回折では、二種類以上の網平面による Bragg 反射が同時に生じるいわゆる同時反射は、極めてまれにしか起らない。したがって、以下においては結晶の中で入射波とそれ以外の k の一つの回折波だけが励起される場合を考える。回折理論ではこのような条件を課することをニ波近似という。ニ波近似のもとでは、(1-13) 式は、

$$\left. \begin{aligned} \{K^2(1+x_0) - k_0^2\} D_0 + K^2 x_g C D_g &= 0 \\ K^2 x_g C D_0 + \{K^2(1+x_0) - k_g^2\} D_g &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (1-14)$$

となる。ここで、 C は偏光因子であり、X 線波の振動方向が k_0 と k_g の作る面に垂直であるか平行であるかによって、それぞれ 1 あるいは $\cos 2\theta_0$ という値をとる。ここに θ_0 は Bragg 角である。 D_0 および D_g が物理的に意味のある値を持つためには、(1-14) 式の係数の間に、

$$\begin{vmatrix} K^2(1+\alpha_0) - k_0^2 & K^2\alpha_g C \\ K^2\alpha_g C & K^2(1+\alpha_0) - k_g^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (1-15)$$

という関係が成り立たねばならない。この式が、二波近似の場合の分散関係を与える式で分散式と呼ばれる。

分散式(1-15)は次のように変形できる。

$$(K_0^2 - k_0^2)(K_g^2 - k_g^2) = K^4\alpha_g\alpha_g C^2 \quad (1-15a)$$

ただし、 K_0 および K_g はその大きさが、

$$|K_0| = |K_g| = K(1+\alpha_0)^{1/2} \quad (1-16)$$

であるベクトルを表わす。一方、(1-6)式で見たように、電気分極率 α の Fourier 係数は 1 に比して十分小さい量である。それゆえ、 K_0^2 あるいは K_g^2 に比して $K^2\alpha_g C$ あるいは $K^2\alpha_g C$ は十分小さい。したがって、(1-15a) 式の右辺は近似的に零とおくことができる。その結果、波動ベクトル k_0 および k_g は、

$$k_0 \simeq k_0, \quad k_g \simeq k_g \quad (1-17)$$

という関係を満すことがわかる。

波動ベクトル k_0 および k_g の始点が満足する分散面を逆空間で描いてやることは直観的で有用である。その際、(1-10) および (1-17) の関係をあわせて考えると、分散面は逆格子点 0 および G を中心とする半径 $K(1+\alpha_0)^{1/2}$ の球

面の交線附近に存在することがわかる。分散面の球面からのはずれの大きさは Kx_g の程度であり、球面の半径に比して十分小さい。したがって、近似的に球面を平面とみなすことができる。O および G を含む面と分散面の切り口が、図 1.1 に示されている[†]。

分散面上の点と、O および G を中心とする円（今の場合は直線で近似）との垂直距離を h_0 および h_g とすると、

$$K_0 \cdot (k_0 - K_0) \simeq K h_0 \quad (1-18a)$$

$$K_g \cdot (k_g - K_g) \simeq K h_g \quad (1-18b)$$

という関係が成り立つ。このとき、分散式 (1-15) は、

$$h_0 h_g \simeq \frac{1}{4} K^2 x_g x_{-g} C^2 \quad (1-19)$$

となる。(1-19) 式によれば球面の切り口が直線とみなせる近似のもとでは、分散面はその直線と漸近線とする双曲線になることがわかる。実際の分散面は図 1.1 において、OG を軸として回転して得られる双曲面である。なお、双曲線の二つの分枝に対して図に示すように (1) および (2) の名前をつける。

分散面上のどの点に対応する波が結晶中で励起されるか

[†] 実際のベクトル K_0 および K_g の長さは分散面の中に比して約 $1/x$ 程度大きいことに注意する必要がある。

は、入射面における境界条件で決められる。図 1.2 に示すように、入射方向を指定することによって真空中の入射波に対応する励起波 (A_0) が定まる。 A_0 と通る結晶の入射面の法線 (πe) に平行な線と分散面との交点と始点とする波動ベクトルは、接線成分連続の条件を満たしている。こうして波動ベクトル $k_0^{(i)}$ および $k_g^{(i)}$ が求められる。

波動ベクトルが求められたとき、Bloch 波の二つの成分波の振巾の比 $C_g^{(i)}$ は、(1-14) 式から

$$C_g^{(i)} \equiv \frac{|D_g^{(i)}|}{|D_0^{(i)}|} = -\frac{2k_0 \cdot (k_0 - k_g^{(i)})}{k^2 x_g c} = \frac{-k^2 x_g c}{2k_g \cdot (k_g - k_g^{(i)})} \quad (1-20)$$

で与えられる。Bloch 波の振巾の絶対値は、入射面における振巾連続の条件と (1-20) 式をあわせて考えることによって求められる (51)。

実際に、実験で観測されるのは Bloch 波そのものではなく、出射面からかたたび真空中へ出て来た波である。その波の振巾は、入射面における振巾の求め方と類似して、出射面における Bloch 波との連続の条件から求められる。しかしここではその具体的な表式を書くことは省略する。参考文献 (51) に掲げた教科書によればその詳しい表式が得られる。

これまでの議論では、入射X線波に対する条件は全く考
えなかった。暗黙のうちに、分散面上の一頁だけが励起さ
れる場合を考へたのだから、平面波理論と言へる。しかし
ながら、加藤⁷⁾は、入射X線を平面波と考へたのでは
Section 図形に見られる *Pendellösung* 縞の形および
その間隔が説明できないことを明らかにした。実際の入射
X線は、むしろ、 k が i に一定の位相の関係を持っており
ゆる方向へ進む波、すなわち球面波と考へるべきであると
した。このように入射X線を球面波と考へて、X線回折現
象を取り扱う理論と球面波理論と言う。第二章以降におけ
る乱れた結晶に対する議論も球面波理論に従って行ふ。 k
は球面波は平面波の重ねあわせと考へることができる。
したがって、分散面上の各頁に対応する結果を求めておい
て、その後で分散面上のすべての頁が同時に一定の位相関
係を持って励起されると考へて計算を進めることができる。

一方、相反定理⁽⁵²⁾によれば、*Traverse* 図形の強度は
Section 図形の強度式と空間積分することによって得られ
る。すなわち、考へている結晶と射頁に仮想的にX線源を
置いたとき、結晶の入射面にできる *Section* 図形の強度と
積分したものが *Traverse* 図形の強度である。

第二章 わずかに乱れた結晶における

X線回折の動力学理論

結晶の乱れがそれほど大きくないときには、局所的にはその結晶を完全結晶とみなすことができるから、第一章で述べた動力学理論を結晶の各部分に対して適用することができる。加藤は、この考え方で乱れた結晶に対する動力学理論を展開した^{24) 26) 27)}。この章では、加藤の理論に従って乱れた結晶に対する回折理論の基本式を求める。

2.1 X線波の満たす基本方程式

結晶の乱れを、完全結晶の位置ベクトル \bar{r} を基準にとり、それからのずれを表わす変位ベクトル u で特徴づける。厳密には、変位ベクトル u は変形前の完全結晶の位置ベクトル \bar{r} の関数である。しかしながら、乱れが極端に大きくないときには、 u は変形後の位置ベクトル r の関数とみなせる。そのとき、 \bar{r} は次のように書くことができる。

$$\bar{r} \simeq r - u(r) \quad (2-1)$$

この近似が許されるとき、電気分極率は

$$\chi(r) = \sum_j \chi_j \exp 2\pi i G(r) \quad (2-2)$$

$$G(r) \equiv (\bar{g} \cdot r - u) = (\bar{g} \cdot \bar{r}) \quad (2-2a)$$

と完全結晶に対する展周係数を用いて表わすことができる。ここで \bar{g} は完全結晶の逆格子ベクトルである[†]。(2-2a)式で表わされる量の 勾配 とすることによって、乱れた結晶における逆格子ベクトル $g(r)$ が定義される²⁾。すなわち、

$$g(r) \equiv \text{grad } G(r) = \bar{g} + \Delta g \quad (2-3)$$

である。一般に、場所の関数の 勾配 で定義されるベクトル量の 回転 は零になる。したがって、逆格子ベクトル $g(r)$ は

$$\text{rot } g(r) = 0 \quad (2-3a)$$

という関係を満している。

(2-2)式は、完全結晶の場合とは異なり、厳密な意味では周期関数ではない。このような電気分極率を持った結晶の中に存在する波動場は、もはや(1-9)式で表わされるような Bloch 波ではありえない。加藤は、このような場合振巾および波動ベクトルがともに場所の関数で表わされる modified Bloch 波が生ずると仮定して理論を展開した。すなわち、modified Bloch 波は、

$$D(r) = \sum_{g=0}^{N-1} D_g(r) \exp iKS_g(r) \quad (2-4)$$

$$KS_g(r) = KS_0(r) + 2\pi G(r) \quad (2-5)$$

[†] 以後、第一章とは異なり、完全結晶の逆格子ベクトルを \bar{g} で表わす。上の横線で完全結晶を表わす。

と表わされる。ここで $S_g(r)$ は光学において Eikonal 関数と呼ばれる量である。このとき modified Bloch 波の波動ベクトルは、Eikonal 関数の勾配に比例する量、

$$k_g \equiv K \text{grad } S_g = k_0 + 2\pi g \quad (2-6)$$

で定義される。

(2-2) および (2-4) 式を、Maxwell の方程式から導かれた基礎方程式 (1-8) に代入する。その結果、modified Bloch 波の振巾および Eikonal 関数の満たす関係式、

$$K_1 + K_2 + K_3 = 0 \quad (2-7)$$

が得られる。ここで

$$K_1 \equiv \sum_{g=0}^{N-1} \left\{ (k^2 - k_g^2) D_g - \sum_{g'=0}^{N-1} x_{g-g'} k_g \times (k_g \times D_{g'}) \right\} \exp i K S_g \quad (2-8a)$$

$$K_2 \equiv i \sum_{g=0}^{N-1} \left[2k_g \nabla D_g + \nabla \cdot k_g D_g + \sum_{g'=0}^{N-1} \left\{ 2x_{g-g'} k_g \times (\nabla \times D_{g'}) + x_{g-g'} \nabla \times (k_g \times D_{g'}) \right\} \right] \exp i K S_g \quad (2-8b)$$

$$K_3 \equiv \sum_{g=0}^{N-1} \left\{ \Delta D_g + \sum_{g'=0}^{N-1} x_{g-g'} \nabla \times (\nabla \times D_{g'}) \right\} \exp i K S_g \quad (2-8c)$$

である。(2-8b) 式の最後の項の矢印は微分がなされる変数と表わす。

K_1 には振巾 D_g および波動ベクトル k_g の微分は含ま

れないが、 K_2 および K_3 にはそれぞれそれらの 1 次および 2 次の微分が含まれている。したがって、 S_g および D_g が場所に関してそれほど急激に変化しない場合には、 K_2 および K_3 はそれぞれ K_1 に対する 1 次および 2 次の微少量と考えられる。このとき (2-7) 式の代りに、

$$K_1 = 0 \quad (2-9)$$

としても十分よい近似である。(2-9) 式は、(2-8a) 式と代入したとき各変数が場所の関数であることを除けば、完全結晶の場合の (1-12) 式と全く同じであることがわかる。乱れが小さくないときには局所的には完全結晶とみなせるのであるから、これは当然の結果であると言える。

乱れた結晶の場合にも二波近似と適用することができ、基本方程式として (1-14) 式と類似の

$$\left. \begin{aligned} \{K^2(1+\alpha_0) - k_0^2\} D_0 + K^2 \alpha_g C D_g &= 0 \\ K^2 \alpha_g C D_0 + \{K^2(1+\alpha_0) - k_g^2\} D_g &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (2-10)$$

が得られる。したがって、この場合の分散式は、

$$\begin{vmatrix} K^2(1+\alpha_0) - k_0^2 & K^2 \alpha_g C \\ K^2 \alpha_g C & K^2(1+\alpha_0) - k_g^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (2-11)$$

となる。

1 次の微少量 K_2 に対しても (2-9) 式と類似の条件が

成り立つと仮定すると,

$$K_2 = 0 \quad (2-12)$$

となる。(2-12) 式に D^* を乗じた式は, エネルギー保存の式と同じである²⁵⁾。また, 2次の微小量 K_3 に対しては, $K_3 = 0$ が必然的に満たされているようなゆるやかな仮定を考へることとする。この近似は, 分散面の漸近線の曲率が無視できることと同程度の近似である。

2.2 modified Bloch 波

与えられた境界条件のもとに微分方程式 (2-11) を解いて, 結晶中での Eikonal の場 S_0 を求めることは原理的には可能である[†]。さらに S_0 が求まれば, (2-10) 式と振巾連続の条件から modified Bloch 波の振巾も計算できる。しかし今の場合, (2-11) 式は非線形の微分方程式であり, S_0 を求めることは容易ではない。加藤²⁵⁾ は, Eikonal 関数が存在するものと仮定し, 位相積分に関する変分原理を適用してこの問題を解決した。

幾何光学における Fermat の原理と同様に, 始点 A と

[†] 完全結晶の場合には, K_x および K_y は場所には無関係な量である。したがって, 分散式 (1-15) は通常の代数方程式となり, 容易に解くことができる。

終点 B を固定したとき, modified Bloch 波のエネルギーは次の変分原理を満足する軌道⁺に沿って進む。

$$\delta \int_A^B (k_0 \cdot dR) = 0 \quad (2-13)$$

したがって, この式の Euler の方程式が求める軌道の方程式を与える⁺⁺。

ここで, 乱れた結晶中での波動ベクトル k_0 および k_g が完全結晶の場合とどのように異なるかを逆空間で考えてみる。その際, 従来の方法では逆格子の原点を固定し, 他の格子点 G および分散面を動かして取り扱われてきた²³⁾。しかしながらここでは, O -波および G -波の対称性を保つため Lorentz 変を固定して考える。そのとき, 波動ベクトル k_0 および k_g は, 図 2.1 から明らかのように

$$k_0 = \Delta k + \bar{k}_0 + 2\pi \Delta g^0 \quad (2-14a)$$

$$k_g = \Delta k + \bar{k}_g + 2\pi \Delta g^g \quad (2-14b)$$

† 波のエネルギー流の軌跡を軌道と呼ぶべきであるが, 本論文では簡単のため“波の軌道”という呼び方をとする。

++ modified Bloch 波は O -波および G -波から成っているから, G -波に対しても (2-13) 式と類似の変分式が得られるはずである。しかしそれから得られる軌道は, 当然 O -波に対するものと同じである。

と表わされる。ここで Δk は分散面から Lorentz 面に向うベクトルであり、 \bar{k}_0 および \bar{k}_g は図 2.1 に示されている完全結晶に対する平均の波動ベクトルである。また、 $2\pi \Delta q^0$ および $2\pi \Delta q^g$ は逆格子長 0 および G の完全結晶のそれからのはずれのベクトル、 $\vec{0}$ および \vec{G} を表わす。ここでは Lorentz 面を固定して考えているから、 0 および G は Lorentz 面を中心とし半径が $k(1+\alpha_0)^{1/2}$ の円上を動く。一方、逆格子長が変化すれば分散面も Lorentz 面のまわりで回転あるいは変形を生じるはずである。しかしながら、その効果による Δk の変化は $|\Delta k|/|k_0|$ の程度である。したがって、十分よい精度で分散面の回転および変形は無視することができる。

(2-14a) 式を用いて (2-13) 式を書きなおす。その際、(2-13) 式は二点 A および B を通る任意の道に沿った位相の積分が極値をとるという条件である。したがって、任意の光路上の各点における接線ベクトル ν と線素 dl を用いて $dR = \nu dl$ と書きなおすことができる。この光路が実際の軌道と一致しているときには ν は伝播ベクトルと呼ばれる。伝播ベクトルが分散面の法線ベクトルと一致することはよく知られている^{(a)(b)(c)}。この ν を用いて (2-13) 式

を書きなおすと,

$$\delta \int_A^B (\Delta k \cdot \nu) dl + \delta \int_A^B (\bar{k}_0 \cdot \nu) dl + 2\pi\delta \int_A^B (\Delta g^0 \cdot \nu) dl = 0 \quad (2-15)$$

となる。 \bar{k}_0 は結晶全体にわたって一定の量であるから、第二項の積分は定数になり、その変分をとると零になる。

ここで図 2.1 に示すような直角座標を導入する。すなわち、 x 軸を \vec{OG} に平行に、 y 軸を $L_0\vec{OG}$ 面に垂直に、 z 軸を網平面に沿った方向に選ぶ。さらに、伝播ベクトル ν の方向を表わすのに次のようなパラメータ p を導入する[†]。

$$p \equiv \tan \theta / \tan \theta_B \quad (2-16)$$

ここで θ は z 軸と ν のなす角である。この p を用いて、(2-15) 式の第一項の被積分関数 $(\Delta k \cdot \nu)$ を書きなおすと、

$$(\Delta k \cdot \nu) = \pm m_0 \left[\frac{1 - p^2}{1 + p^2 \tan^2 \theta_B} \right]^{1/2} \tan \theta_B \quad (2-17)$$

となる。ここで複号は上が分枝(1)、下が分枝(2)の波に対応する。また、 m_0 は次のような量である。

$$m_0 \equiv KC \sqrt{\chi_g \chi_{-g}} / (2 \sin \theta_B) \quad (2-18)$$

(2-17) 式を実空間における軌道に沿って積分した値は、

[†] 入射波の方向は $p = -1$, Bragg 反射波の方向は $p = 1$ で表わされる。網平面に沿う方向は $p = 0$ で表わされる。

modified Bloch 波の位相項の一部であり,

$$T \equiv \int_A^B (\Delta k \cdot v) dl = \pm m_0 c \int_{z_e}^z \sqrt{1 - (v/c)^2} dz \quad (2-19)$$

となる。ここで z_e は入射点の z 座標を表わす。 v と c は,

$$v \equiv dx/dz = \tan \theta \quad (2-20a)$$

$$c \equiv \tan \theta_B \quad (2-20b)$$

で定義される。したがって、 $p \equiv v/c$ は Borrmann fan の両端で ± 1 になるように規格化された軌道傾線の傾きを表わす。

また、(2-15) 式の第三項に対応する位相項は、逆格子点が移動することによって生ずるものである。その符号と変化した量を実空間の座標を用いて表わすと、

$$\begin{aligned} N_0 &\equiv - \int_A^B (\Delta g^0 \cdot v) dl \\ &= - \frac{2\pi}{\sin 2\theta_B} \int_A^B \left\{ \sin \theta_B \frac{\partial(\Phi \cdot U)}{\partial x} + \cos \theta_B \frac{\partial(\Phi \cdot U)}{\partial z} \right\} (\cos \theta_B dx + \sin \theta_B dz) \end{aligned} \quad (2-21a)$$

$$\begin{aligned} N_g &\equiv - \int_A^B (\Delta g^g \cdot v) dl \\ &= \frac{2\pi}{\sin 2\theta_B} \int_A^B \left\{ \sin \theta_B \frac{\partial(\Phi \cdot U)}{\partial x} - \cos \theta_B \frac{\partial(\Phi \cdot U)}{\partial z} \right\} (\cos \theta_B dx - \sin \theta_B dz) \end{aligned} \quad (2-21b)$$

となる ²⁶⁾。

(2-19) および (2-21a) 式を (2-15) 式に代入すれば、微分式の具体的な場所依存性が得られる。したがって、

の Euler 方程式を求めると次のようになる。

$$\pm m_0 \frac{d}{dz} \left\{ \frac{v/c}{\sqrt{1-(v/c)^2}} \right\} = -2\pi \frac{\partial}{\partial x} (\Delta g^0 \cdot \frac{dV}{dz}) + 2\pi \frac{d}{dz} (\Delta g_x^0) \quad (2-22)$$

Δg の具体的な表式を (2-2a) および (2-3) 式から求めて (2-22) 式に代入すれば、軌道の方程式として

$$\pm m_0 \frac{d}{dz} \left\{ \frac{v/c}{\sqrt{1-(v/c)^2}} \right\} = f(x, z) \quad (2-23)$$

が得られる。複号は上が分枝(1)の波、下が分枝(2)の波を表す。また、 $f(x, z)$ は変位ベクトル u の場所に関する二階微分に比例する量であり、

$$f(x, z) \equiv \frac{2\pi}{\sin 2\theta_0} \left(\cos^2 \theta_0 \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \sin^2 \theta_0 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) (g \cdot u) \quad (2-24)$$

と表わされる。変位の二階微分がひずみを表わすから、 $f(x, z)$ はひずみ勾配に比例する量であると言える。

軌道の方程式 (2-23) は、相対論的な運動方程式によく似ている[†]。すなわち、 z を時間 t に読みかえ、 v および c とそれぞれ粒子および光の速度とみれば、(2-24) 式は質量 m_0 の粒子が時間的に変動する外場 $f(x, z)$ の中で運動するときに従う相対論的な運動方程式と同じである。以後、

† (2-23) 式の両辺に c を乗じた式が、通常、相対論的な運動方程式として知られている。

この類推から $f(x, z)$ を“力の項”と呼ぶことにする。なお、(2-23) 式において注意すべきことは、分枝(1)の波と(2)の波で力の項の符号が逆になることである。このため、たとえ同じ初期値を与えても分枝(1)の波と(2)の波とでは異った軌道が得られることがわかる。

結晶中の変位の分布が知られているときには、(2-24) 式から力の項 $f(x, z)$ が計算され、(2-23) 式から軌道が求められる。その軌道に沿った波の位相変化は、(2-19) および(2-21a および b) 式で表わされる積分を遂行すれば求められる。結晶中での位相変化は、分枝(i)の入射波および Bragg 反射波に対して、それぞれ、

$$L_0^{(i)} \equiv T^{(i)} - N_0^{(i)} \quad (2-25a)$$

$$L_g^{(i)} \equiv T^{(i)} - N_g^{(i)} \quad (i=1, 2) \quad (2-25b)$$

となる。これらの式では、(2-15) 式の第二項に対応する分枝(1)および(2)の波に共通の位相項は省略されている。以後、 T を kinetic term, N_0 および N_g を potential term と呼ぶことにする。このようにすれば、 L_0 および L_g は質点の運動を論ずる際の Lagrangian と解釈することができる。ただし通常の Lagrangian 関数は kinetic エネルギーと potential エネルギーの差で定義され、時

商積分は含まれていない。

結晶中での波の吸収は、現象論的には位相の虚数部で与えられると考えればよい。このことは、たとえば(2-4)式において位相 $K S_g(\omega)$ が複素数であるとしたとき、その虚数部 $\{K S_g(\omega)\}^i$ は波の振幅を減少させる因子になっていることから明らかである。したがって、吸収による強度減少の因子は(2-4)式にその複素共役な量を乗じるときに得られ、 $\exp -2\{K S_g(\omega)\}^i$ で与えられる。このような位相の虚数部は、係数に含まれる電気分極率の虚数部から導かれる。

modified Bloch 波の各成分波に対する位相は、おのおのの分枝に共通の平均の位相と(2-25a および b) 式で与えられる Lagrangian との和である。そのうち、平均の位相の虚数部からは、通常の線吸収係数 μ_0 を用いて表わされる吸収の強度因子、 $\exp -\mu_0 t$ 、が得られる。ここで

$$\mu_0 \equiv -K \alpha_0^i \quad (2-26)$$

$$t \equiv (\bar{\epsilon} - \epsilon_e) / \cos \theta_B \quad (2-27)$$

である。 α_0^i は平均の電気分極率 α_0 の虚数部を表わす。一方、Lagrangian 関数のうち、potential term は実数であるから吸収には寄与しない。kinetic term の虚数部 T^i は、

$$T^2 = \pm m_0^2 c \int_{z_c}^z \sqrt{1 - (v/c)^2} dz \quad (2-28)$$

で与えられる。ここで m_0^i は m_0 の虚数部を意味し、

$$m_0^i = \frac{1}{2} m_0 \frac{(\pi_q \pi - q)^i}{(\pi_q \pi - q)^r} \quad (2-29)^{\dagger}$$

という量である。したがって、(2-28)式から得られる吸収の強度因子は、分枝(1)および(2)の波に対して、

$$\left. \begin{array}{l} \alpha \\ \beta \end{array} \right\} = \exp \pm \left\{ \mu_q t \int_{z_c}^z \sqrt{1 - (v/c)^2} dz / (z - z_c) \right\} \quad (2-30)$$

となる。ここで μ_q は異常吸収係数と呼ばれる量で、

$$\mu_q = -kC \{ (\pi_q \pi - q)^{1/2} \}^i \quad (2-31)$$

という値をとる。(2-30)式が乱れた結晶に対する、いわゆる Brillouin 吸収の強度因子である。通常の低次反射では、(2-31)式で表わされる μ_q は正の量であるから、

$$\alpha > \beta \quad (2-32)$$

という関係が成り立つ。以下の議論も μ_q が正の場合に限って行うことにする。

2.3 X線回折強度

乱れた結晶の場合、適当な境界条件のもとに基礎方程式

[†] 今後、 m_0 は(2-18)式で定義された m_0 の実数部を表わすものとする。

を解いて X 線波の振巾を求めることは必ずしも容易ではない¹⁹⁾²⁰⁾。ここでは、波動場のエネルギーの連続条件を基礎にした理論²⁶⁾に従って回折強度を求める。その際、吸収の効果は前節の終りに求めた通常の吸収による強度因子と Borrmann 吸収の強度因子とを、吸収を考慮しないときの強度因子に乗ずることによって計算できる。したがって、最初吸収の効果は無視して結晶の乱れに依存する強度因子だけを求める。

入射 X 線の単位立体角あたりのエネルギー流は、

$$S_i = K |D_i|^2 \quad (2-33)$$

で与えられる。 D_i は真空中の入射 X 線の振巾を表わす。真空中の波から modified Bloch 波へのエネルギーの透過能 P_e は、(2-16) 式で定義された p の入射面における値、 p_e を用いて次のように表わされる²⁶⁾。

$$P_e = \frac{b(1-p_e)}{(1+p_e) + b(1-p_e)} \quad (2-34)$$

ここで、 b は入射面の法線ベクトル m_e を用いて、

$$b \equiv \frac{(k_0 \cdot m_e)}{(k_g \cdot m_e)} \approx \frac{(\bar{k}_0 \cdot m_e)}{(K_g \cdot m_e)} \quad (2-35)$$

で定義される。入射表面と問題にしようとする結平面が垂直である、いわゆる対称 Lane case では、 $b=1$ であり、

$$P_e = (1 - p_e) / 2 \quad (2-36)$$

となる。この透過能 P_e は、真空中の入射波に対応する分散系に近い分散面上の某ほどより強く励起されるということと表わしている。

入射面におけるパラメータ p_e は、真空中の入射波の持つ入射角 θ_i の Bragg 角からのはずれの大きさに依存して決められる。すなわち、通常、Bragg 条件からのはずれの大きさを表わすパラメータ、 y および x ,

$$y \equiv \left\{ \frac{1-b}{2\sqrt{|b|}} x_0 + \sqrt{|b|} (\theta_0 - \theta_i) \sin 2\theta_0 \right\} / |x_g| C \quad (2-37)$$

$$x \equiv y / \sqrt{1+y^2} \quad (2-38)$$

と p_e とは次のような関係がある。

$$p_e = \frac{b(1 \mp x) - (1 \pm x)}{b(1 \mp x) + (1 \pm x)} \quad (2-39)$$

ここで、複号は上および下がそれぞれ分枝(1) および(2)の波に対応する。したがって、同じ y の値に対するパラメータ p_e の値が分枝(1)の波と(2)の波で異なる。対称 Lorentz case では $p_e = \mp x$ となるから、同じ入射角に対応するそれぞれの分枝のパラメータ p_e はちょうど反対符号の値をとることがわかる。分枝(1)の波と(2)の波で同じ p_e とするのは、その分散系が Lorentz 系に関して k がいに反変

なときである。そのときの透過率 P_e はたがいに等しい。

2.1 節で述べたように、結晶の乱れが極端に大きくないかぎり、modified Bloch 波のエネルギーは保存される。しかしながら、その場合 Borrmann fan 全体にビームが振がるから、単位長あたりの強度は結晶が厚くなるほど減少する。開き角 $\delta\theta_i$ の中に入射したエネルギーが、出射面で軌道に垂直な δa_a という中の中に分布したとすれば、ビームの振がりによる強度減少の因子は $\delta\theta_i/\delta a_a$ で与えられる。この因子を求めるために、(2-37), (2-38) および (2-39) 式から、 θ_i の変化を P_e の変化に読みかえる。

$$\frac{\delta\theta_i}{\delta P_e} = \frac{1xg|C}{2b \sin 2\theta_B} \frac{\{(1+P_e) + b(1-P_e)\}}{(1-P_e^2)^{3/2}} \quad (2-40)$$

入射面で δP_e だけ異なった傾きで入射したビームが出射面で δa_a だけ離れた点へ到達すると考える。その大きさは、軌道の方程式が、 P_e をパラメータとして

$$F(x, z; P_e) = 0 \quad (2-41)$$

と与えられているとすれば、次のように計算できる。

$$\left| \frac{\delta a_a}{\delta P_e} \right| = \left| \frac{\partial F}{\partial P_e} \right| / \left\{ \left(\frac{\partial F}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial F}{\partial z} \right)^2 \right\}^{1/2} \quad (2-42)$$

(2-40) 式と (2-42) 式から、強度減少の因子 $\delta\theta_i/\delta a_a$ が計算される。

出射面へ到達した modified Bloch 波から真空中の Bragg 反射波へのエネルギーの授受は、出射面における軌道の接線の傾き、 p_a 、に依存する透過能 P_a^g で表わされる。

$$P_a^g = \frac{1 + p_a}{(1 + p_a) + b'(1 - p_a)} \quad (2-43)$$

ただし、 b' は (2-35) 式の b に対応する量であり、出射面の法線ベクトル π_a と次のような関係がある。

$$b' \equiv \frac{(k_o \cdot \pi_a)}{(k_g \cdot \pi_a)} \approx \frac{(\bar{k}_o \cdot \pi_a)}{(\bar{k}_g \cdot \pi_a)} \quad (2-44)$$

面平面が出射面と垂直である場合には、透過能 P_a^g は、

$$P_a^g = (1 + p_a) / 2 \quad (2-45)$$

となる。また、出射面ではビームの拡がり δa_a があるため、それが Bragg 反射波の方向へつながつたときの断面積の変化を考へなくてはならない。その断面積の比は、Bragg 反射波の中を $\delta \xi_g$ とするとき、

$$\frac{\delta a_a}{\delta \xi_g} = \frac{(v \cdot \pi_a)}{(s_g \cdot \pi_a)} = \frac{\cos \theta_a}{2 \cos \theta_B} \{ (1 + p_a) + b'(1 - p_a) \} \quad (2-46)$$

で与えられる。ここで s_g は真空中の Bragg 反射波の進行方向を表す単位ベクトルであり、 θ_a は出射面で modified Bloch 波の軌道の接線と出射面法線とのなす角を表す。

以上求めた入射面および出射面における透過能と、結晶

中での modified Bloch 波の振がりの因子と乗ずることによつて, Bragg 反射波の強度が求められる。すなわち,

$$|D_g|^2 = P_a^2 \left(\frac{\delta a_a}{\delta \epsilon_g} \right) \cdot P_e \cdot \left| \frac{\delta \theta_i}{\delta p_e} \right| \left| \frac{\delta p_e}{\delta a_a} \right| \cdot \frac{S_i}{K} \quad (2-47)$$

である。しかつて, 平行板結晶でしかも対称 Laue の条件と満足している場合の, 吸収と含まない回折強度因子は,

$$\left| \frac{D_g}{D_i} \right|^2 = \frac{|x_g| C}{2 \sin 2\theta_B} \frac{\cos \theta_a}{2 \cos \theta_B} \frac{(1-p_e)(1+p_a)}{(1-p_e^2)^{1/2}} \left| \frac{\delta p_e}{\delta a_a} \right| \quad (2-48)$$

で与えられる。この表式は分枝(1)および(2)の波に共通である。

分枝(1)の波と(2)の波が空間的に重なったとき, 両者の間には一定の位相関係があるから干渉が生じる。干渉波の位相項は, (2-25b)式で求めた回折波成分に対する分枝(1)および(2)の波の Lagrangian の差で与えられる。また, その振巾は分枝(1)の波と(2)の波の振巾の相乗平均で表わされる。このとき Borrmann 吸収は α と β の種で打ち消しあい, 平均の吸収だけが残る。なお, この干渉項が, いわゆる Pendellösung 橋を生ずる項であることはよく知られている。

Section 図形で実際に観測される強度は, 吸収の強度因子まで考慮した分枝(1)および(2)の波の強度の和に, 上

述の干渉項の強度を加えたものであり、

$$I = \{ |D_g^{(1)}|^2 \alpha + |D_g^{(2)}|^2 \beta + 2\sqrt{|D_g^{(1)}|^2 |D_g^{(2)}|^2} \times \cos(L_g^{(1)} - L_g^{(2)} - \phi) \} I_0 \cdot \exp(-\mu_0 z)$$

(2-49)

と表わされる。上の添字 (1) および (2) はそれぞれ分枝 (1) および (2) の波を表わす。 I_0 は入射 X 線の強度を意味する。また干渉項に含まれる ϕ は、分枝 (1) および (2) の波が入射面で励起されたときに生じる位相差を表わす⁽²⁾。

Traverse 図形の強度 J は、入射面上の位置座標を σ とし、(2-49) 式を σ の関数 $I(\sigma)$ と読みなおして、空間積分、

$$J = \int_{\sigma} I(\sigma) d\sigma \quad (2-50)$$

と実行することによって求められる。ここで、 σ は入射面の法線と入射 X 線のなす角の方向余弦を表わす。

第三章 一様なひずみ勾配を持つ 結晶における X 線回折現象

第二章で、わずかに乱れた結晶における X 線回折現象と記述する基本式を求めた。この章では、その結果を一様なひずみ勾配を持つ結晶に適用する。その一例である一様な曲がりのある場合は加藤によって明らかにされた²⁷⁾。ここでは、一様なひずみ勾配の意味を明らかにし、より一般的な問題にも適用できるように理論を展開する。とくに、加藤の理論に加えて Borrmann 吸収の効果と詳しく調べる。

3.1 一様なひずみ勾配の意味

結晶の中に特異点を持たない変位の場が存在するとき、逆格子ベクトルに平行な変位成分は、一般に次のように表わされる²⁹⁾。

$$\begin{aligned} (\bar{g} \cdot u) &= (\bar{g} \cdot u)_0 + \alpha_1 x + \beta_1 z + \frac{1}{2} (\alpha_2 x^2 + 2\gamma_{11} x z + \beta_2 z^2) \\ &+ \frac{1}{3!} (\alpha_3 x^3 + 3\gamma_{21} x^2 z + 3\delta_{12} x z^2 + \beta_3 z^3) + \dots \end{aligned} \quad (3-1)$$

ここで $(\bar{g} \cdot u)_0$ は原点における $(\bar{g} \cdot u)$ の値であり、その原点は結晶中の任意の位置にとることができる。係数 α_1 ,

$\beta_1 \dots$ 等は，場所 x および z に依存しない定数である。ただし，(2-23) および (2-24) 式から明らかのように，回折効果に影響を及ぼすのは逆格子ベクトルに平行な変位成分だけである。その x 方向および z 方向依存性が問題になるのであるから，変位成分の y 依存性は定数係数に含ませて考えればよい。

(3-1) 式の 2 次以上の項が無視できるような変形を持つ結晶は一樣なひずみの結晶と言える。その場合，(2-24) 式の力の項は零になる。このように力の項が存在しないとき，軌道の方程式 (2-23) は容易に積分できて，

$$v \equiv dx/dz = \text{const.} \quad (3-2)$$

となる。この結果は，軌道の接線の傾き v が一定であるから直線軌道になる。それは完全結晶の場合と同じである。言いかえれば，一樣なひずみの結晶はそのひずみに相当するだけ格子定数の異なった完全結晶とみなされる。結晶中にいかなるひずみが存在しても，問題にしている反射ベクトルに平行な変位成分が場所に関する 2 次以上の項を含まない限り，完全結晶と同じ回折現象が期待される。

結晶の乱れがそれほど大きくなく，その局所的な部分だけを問題にするときは，(3-1) 式の $(\vec{g} \cdot \vec{u})$ の展開を 2 次

の項で打ち切っても十分よい近似と言える。このように、
2次形式で表わされる変位が存在するとき力の項は、

$$f(x, z) = \frac{2\pi}{r \sin 2\theta_B} (\beta_2 \cos^2 \theta_B - \alpha_2 \sin^2 \theta_B) \\ \equiv f_0 \quad (3-3)$$

となる²⁹⁾。この f_0 は場所によらない定数である。しか
がって、変位成分が場所の2次形式で表わされる場合を一
様なひずみ勾配の場合と呼ぶことができる。ここで係数 β_2
は網平面の曲りの大きさを表わす量であり、 α_2 は格子間
隔が逆格子ベクトルの方向に変化していることを表わす量
である。 α_2 と β_2 のどちらか一方だけが零でないと仮定
したとき、変形の状態と f_0 の符号との関係は図3.1に示
したようになる。ただし、図3.1において結晶の変形状態
はそのままにして z 軸の向きを逆にする(反射ベクトルを
逆転したことに相当する)と、 f_0 の符号も逆になる。

f_0 の正負が回折現象に重大な影響を与えることは(2-
23)の軌道の方程式から予想される。すなわち、 f_0 の符
号を変えることは分枝(1)の波と(2)の波の役割を入れか
えることに相当する。実際、 f_0 の符号の逆転は逆格子ベ
クトルの符号を変えるかあるいは変位ベクトルの符号を変
えることによって実現される。実験的には、前者は網平面

の裏表を変えて反射ベクトルが逆転した実験を行えばよい。後者は結晶内部の変位の様子がz軸に関して対称な変形状態を実現できれば行える。

一般には、 α_2 と β_2 の両方がともに零でないはずみの場が存在する。それらの一次結合として f_0 の値が得られる。その場合でもxy平面の裏表を変えれば f_0 の符号は逆になる。以下の理論は α_2 および β_2 の具体的な値は問題にしないで、 f_0 が零でない定数値をとるといふことだけと仮定して進める。

3.2 軌道の方程式

$f(x, z)$ が一定値 f_0 をとるとき、軌道の方程式(2-23)は容易に積分され、

$$\frac{f_0}{m_0 c} (x - x_e + x_0) = \pm \left\{ \left(\frac{f_0}{m_0} \right)^2 (z - z_e + z_0)^2 + 1 \right\}^{1/2} \quad (3-4)$$

となる。ここで積分定数 x_0 および z_0 の間には、

$$\frac{f_0}{m_0 c} x_0 = \pm \left\{ \left(\frac{f_0}{m_0} \right)^2 z_0^2 + 1 \right\}^{1/2} \quad (3-5)$$

という附加条件が成り立つ。また、 x_0 および z_0 は入射点 (x_e, z_e) における規格化された軌道接線の傾き p_e と、

$$\frac{f_0}{m_0 c} x_0 = \pm \frac{1}{\sqrt{1 - p_e^2}} \quad (3-6a)$$

$$\frac{f_0}{m_0} z_0 = \pm \frac{p_e}{\sqrt{1-p_e^2}} \quad (3-6b)$$

という関係がある。(3-4), (3-5)および(3-6aおよびb)式における複号はすべて上が分枝(1)の波, 下が分枝(2)の波を表わす。以下の表式においても特に断わらない限り, 複号は上が分枝(1)の波, 下が分枝(2)の波を表わすものとする。

第四章で展開する理論と対応をつけるため, (3-4)式の軌道の方程式を分枝(1)の波と(2)の波に分けて表わす。その際, *Borrmann fan*の両端で $X = \pm Z$ になるように規格化された無次元の座標,

$$X = \frac{f_0}{m_0 c} (x - x_e) \quad (3-7a)$$

$$Z = \frac{f_0}{m_0} (z - z_e) \quad (3-7b)$$

を導入する。さらに, (3-6aおよびb)式に対応して,

$$X_0 = 1/\sqrt{1-p_e^2} \quad (3-8a)$$

$$Z_0 = p_e/\sqrt{1-p_e^2} \quad (3-8b)$$

を定義する。このとき X_0 はつねに正の値をとり, Z_0 は入射線の傾き p_e と同符号の値をとる。これらの規格化座標を用いると, 軌道の方程式(3-4)は,

$$X = \{(Z+Z_0)^2+1\}^{1/2} - X_0 \quad ; \text{分枝(1)の波} \quad (3-9a)$$

$X = -\{(z - z_0)^2 + 1\}^{1/2} + x_0$; 分枝(2)の波 (3-9b) と書きなおすことができる。ここで x_0 と z_0 の間には,

$$x_0 = \{z_0^2 + 1\}^{1/2} \quad (3-10)$$

という関係がある。

(3-9a および b) 式は直角双曲線の方程式にほかならない。したがって、このような規格化座標を用いたとき、軌道は直角双曲線群になることがわかる。 $p_e = 0, \pm 1/3$ および $\pm 2/3$ のときの軌道の例を図3.2に示す。その結果は完全結晶の場合のように直線軌道ではなく、等間隔に与えた p_e に対して出射角の位置座標は非常にかたよってしまふことは興味がある。

図3.2(a)と3.2(b)は z 軸に関して対称な図であり、その物理的意味は全く同じである。しかしながら、 X の符号は $x - x_e$ および f_0 の積で決まるから、 X のたがいに反平行な場合を考える意味がある。図において実線が分枝(1)、破線が分枝(2)の波の軌道を表わす。それぞれの双曲線の中心は - 真鎖線を示した双曲線上にある。また、絶対値が同じで符号が反対の入射角を持った分枝(1)の波と(2)の波の軌道は z 軸に関して対称である。この軌道の対称性が以下の議論において重要な役割を果たす。

図 3.2 を実空間の軌道で書きなおすと， f_0 の正負および反射ベクトルの向きに対応して，図 3.3 (a), (b), (e) および (f) に示した四つの場合が考えられる。結晶の乱れとしては (a) と (b) および (e) と (f) でそれぞれ同じものを考えているが， z 軸の向きが異なるため f_0 の符号は逆になっている。それらのうち，(a) と (f) および (b) と (e) はそれぞれ z 軸に関して対称であり，その物理的意味は全く同じである。したがって， f_0 の符号が異なる場合には物理的意味の異なる結果が得られると言える。なおそれらの図では簡単のため，出射面上で z 軸の上へ到達する波の軌道だけが示されている。出射面から真空中へ出る波に対しては出射面における透過能の大きい方の成分波だけが示されている⁺。どの成分波がより大きい透過能を持つかは，軌道の曲率の符号 (f_0 の符号に依存する) だけで決まる。その符号は同じ分枝に属する双曲線群すべてに共通である。したがって，図に示さなかった出射面に到達する波の場合も，より大きい透過能を持つ分枝は不変である。

X 線波のエネルギーは分散面に垂直な方向へ流れる⁽⁴³⁾

⁺ Bragg 反射波 (B) に対する透過能は (2-43) 式で定義された。入射波 (D) に対する透過能は，単位の値から Bragg 反射波に対する透過能を減じたものである。

54) 55) から、実空間における曲線軌道は分散莫が分散面上を動くと考えることによって説明される。図 3.3 (a), (b), (e) および (f) の双曲線軌道は、それぞれ図 3.3 (c), (d), (g) および (h) に矢印で示したような分散莫の動きで説明される。結晶の乱れは前述のように (a) と (b) および (e) と (f) で同じであるから、分散莫の動く方向は反射ベクトルには関係なく結晶の乱れに固有のものであることがわかる。

図 3.1 に示されるような乱れが存在する場合、分散莫は同じ図の中に矢印で示されている方向へ動く。この結果は次のようにして得られる。たとえば、図 3.1 (a) のような曲りのある結晶に対して x 軸に平行な反射ベクトルを持つ入射線が入射したと仮定する。そのとき、結晶の入射面であろうと Bragg 条件を満足する角度で入射した波は、結晶の中へ進むにつれて網平面に対する角度が大きくなり、Bragg 条件を満足できなくなる。一方、小さい入射角の波は、結晶の中へ進むにつれて Bragg 条件を満足するようになる。このことを逆空間で見ると、Bragg 角より小さい入射角の波で励起された分散莫が波の進行とともに、Bragg 条件を満す位置に達し、さらにそこを通りすぎて

Bragg 角より大きい角度に対応する分散角になる。したがって、分散角は矢印で示した方向へ動くと考えればよい。同じ結晶で反射ベクトルを逆にしたときには、大きい入射角の波が結晶の中へ進むにつれて Bragg 条件を満たすようになる。このときも分散角の動く方向としては変りない。面間隔が変化している図 3.1 (c) および (d) の場合も、その間隔の変化と Bragg 角の変化に読みかえることができるから、曲面の曲りがある場合と同じように考えられる。

ここで、(3-7a および b) 式にもどって、 X および Z の物理的意味を明らかにしておく。それらは実空間における位置座標 x および z を規格化したものであるから、位置の座標を表わすことにはかわりはない。たとえば、Section 図形の射出面上の真は X 座標で表わされ、結晶の深さ方向は Z 座標で表わされる。さらに、結晶の厚さを固定したとき、 Z は "ひずみ勾配の大きさを表わすパラメータ" と読みなおすことができる。そのとき、結晶の厚さ $z_0 - z_1$ は正の量であるから、 Z は f_0 と同じ符号をとることがわかる。したがって、反射ベクトルを逆転したときには Z の符号も逆になる。

パラメータ Z の反射の次数依存性は次のようにして調べ

られる。 f_0 は Bragg 角に依存するから、その値は反射の次数によって変化する。(3-3)式のかゝりの中の第二項だけが存在する場合には、高次の反射になるほど f_0 の値は大きくなる。また、 $1/m_0$ も高次の反射になるほど大きくなる。したがって、それらの積として表わされる Z は、一般に高次反射になるほど大きくなる。このことは、高次反射ほどひずみ勾配に敏感であることを意味する。

3.3 modified Bloch 波の位相

規格化座標で表わされた双曲線軌道上の任意の点における接線の傾きは、

$$p \equiv v/c = dx/dZ = \frac{Z \pm Z_0}{X \pm X_0} \quad (3-11)$$

となる。この値を(2-19)式に代入して、入射角から出射角まで積分すると位相の kinetic term が得られ、

$$T = \pm \frac{m_0^2 c}{f_0} \left[\log \left\{ Z \pm Z_0 + \sqrt{1 + (Z \pm Z_0)^2} \right\} - \log \left(\pm Z_0 + \sqrt{1 + Z_0^2} \right) \right] \quad (3-12)$$

となる。この値を、軌道の方程式(3-9 a および b)を用いて、出射面における座標 (X, Z) で表わすと、

$$T = \pm \frac{2m_0^2 c}{|f_0|} \sinh^{-1} \frac{1}{2} \sqrt{Z^2 - X^2} \quad (3-13)$$

となる。この *kinetic term* の符号は f_0 の符号とは関係なく、分枝(1)の波に対しては正であり、分枝(2)の波に対しては負である。その値は、Section 図形の両端 ($x = \pm Z$) で零になり、Section 図形の中心 ($x = 0$) で極大値をとる。また、(3-13)式は x^2 の関数であるから、 Z 軸に関して対称である。 $Z=2$ の場合の分枝(1)の波の *kinetic term* が次章の図 4.2 に実線で示されている。

次に回折波の *potential term* を計算する。この計算を遂行するためには f_0 の値だけでなく、ひずみ分布も知る必要がある。ここでは、簡単のため、(2-1)式の変位成分の二次の項までのすべてが存在すると仮定する。そのとき、ひずみ成分に対して、

$$\frac{\partial(\bar{q} \cdot u)}{\partial x} = \alpha_1 + \alpha_2 x + \gamma_{11} z \quad (3-14a)$$

$$\frac{\partial(\bar{q} \cdot u)}{\partial z} = \beta_1 + \gamma_{11} x + \beta_2 z \quad (3-14b)$$

という関係が得られる。これらの関係式を(2-21b)式に代入して積分を遂行すれば、Bragg 反射波に対する *potential term* が計算できる。そのとき、 $d(xz) = x dz + z dx$ という恒等式を用いて積分変数を変換して、 z に関する積分だけで表わすと、

$$\begin{aligned}
N_g = \frac{2\pi}{\sin 2\theta_B} & \left[(\alpha_1 \sin \theta_B - \beta_1 \cos \theta_B) (x \cos \theta_B - z \sin \theta_B) \right. \\
& + \frac{1}{2} \cos \theta_B (\alpha_2 \sin \theta_B - \gamma_{11} \cos \theta_B) x^2 \\
& + \frac{1}{2} \sin \theta_B (\beta_2 \cos \theta_B - \delta_{11} \sin \theta_B) z^2 \\
& \left. + \cos \theta_B (\gamma_{11} \sin \theta_B - \beta_2 \cos \theta_B) xz \right] \\
& + f_0 \int_{z_e}^z x dz + K_g \quad (3-15)
\end{aligned}$$

となる。ここで K_g は入射点 (x_e, z_e) で N_g が零になるという条件から決められる積分定数である。 $f_0 \int x dz$ を軌道に沿って積分すると、

$$\begin{aligned}
f_0 \int_{z_e}^z x dz = \pm \frac{m_0^2 c}{2f_0} & \left[(Z \pm Z_0) \sqrt{(Z \pm Z_0)^2 + 1} \mp Z_0 \sqrt{Z^2 + 1} \right. \\
& \left. + \log \left\{ Z \pm Z_0 + \sqrt{(Z \pm Z_0)^2 + 1} \right\} - \log \left\{ \pm Z_0 + \sqrt{Z_0^2 + 1} \right\} \right] \\
& \mp m_0 c X_0 (z - z_e) + f_0 x_e (z - z_e) \quad (3-16)
\end{aligned}$$

となる。出射点における座標 (X, Z) で表わすと、

$$\begin{aligned}
f_0 \int_{z_e}^z x dz = \frac{m_0^2 c}{2f_0} XZ + m_0 x_e Z \\
\pm \frac{m_0^2 c}{|f_0|} \left[\sinh^{-1} \frac{1}{2} \sqrt{Z^2 - X^2} - \frac{1}{4} \sqrt{(Z^2 - X^2)(Z^2 - X^2 + 4)} \right] \\
(3-17)
\end{aligned}$$

と書ける。この値を (3-15) 式に代入して potential term を書きなおすと、

$$\begin{aligned}
N_g = C_g(x, z) - C_g(x_e, z_e) + \frac{1}{2} f_0 (z x_e - x z_e) \\
\pm \frac{m_0^2 c}{|f_0|} \left[\sinh^{-1} \frac{1}{2} \sqrt{Z^2 - X^2} - \frac{1}{4} \sqrt{(Z^2 - X^2)(Z^2 - X^2 + 4)} \right] \\
(3-18)
\end{aligned}$$

となる。ここで、 $C_g(x, z)$ は場所だけの関数で、

$$\begin{aligned}
 C_g(x, z) = & \frac{2\pi}{\sin 2\theta_B} [(\alpha_1 \sin \theta_B - \beta_1 \cos \theta_B)(x \cos \theta_B - z \sin \theta_B) \\
 & + \frac{1}{2} \{ \cos \theta_B (\alpha_2 \sin \theta_B - \gamma_{11} \cos \theta_B) x^2 \\
 & + \sin \theta_B (\beta_2 \cos \theta_B - \gamma_{11} \sin \theta_B) z^2 \\
 & - (\alpha_2 \sin^2 \theta_B - 2\gamma_{11} \cos \theta_B \sin \theta_B + \beta_2 \cos^2 \theta_B) xz \}] \\
 & (3-19)
 \end{aligned}$$

と書ける。(3-18)式の第一項および第二項は分枝(1)および(2)の波に共通であるから、(2-49)式の干渉項の位相、 $L_g^{(1)} - L_g^{(2)}$ 、 \hbar の寄与はない。また、第三項も一枚の結晶板を考えるかぎりには、分枝(1)の波と(2)の波で差はない。したがって、干渉に寄与する potential term は(3-18)式の角かっこでくくった項だけである。kinetic term の場合と同様、potential term も Section 四形の両端で零になり中心で極値をとる。

(3-13) および (3-18) 式から、(2-25b) 式で定義された Lagrangian が計算される。すなわち、

$$\begin{aligned}
 L_g^{(i)} = & \pm \frac{m_0^2 c}{\hbar^2} \left[\sinh^{-1} \frac{1}{2} \sqrt{Z^2 - X^2} + \frac{1}{4} \sqrt{(Z^2 - X^2)(Z^2 - X^2 + 4)} \right] \\
 & - C_g(x, z) + C_g(x_e, z_e) \quad (3-20)
 \end{aligned}$$

である。干渉項の位相差は、二つの分枝の波に対応する Lagrangian の差として表わされ、

$$\begin{aligned}\Phi &= L_g^{(1)} - L_g^{(2)} - \phi \\ &= \frac{2m_0^2 c}{|f_0|} \left[\sinh^{-1} \frac{1}{2} \sqrt{Z^2 - X^2} + \frac{1}{4} \sqrt{(Z^2 - X^2)(Z^2 - X^2 + 4)} \right] - \phi\end{aligned}\quad (3-21)$$

となる。ここで、 ϕ は (2-49) 式で用いたものと同じ意味の定数である。この位相差 Φ の符号は f_0 の正負に依存しない。この結果は以下の議論において重要な意味を持つ。

位相差 Φ が、

$$\Phi = 2\pi n \quad n: \text{整数} \quad (3-22)$$

という条件を満足するとき、干渉項の強度は極大値をとる。それが *Pendellösung* 縞のピークに対応する。 Φ は $Z^2 - X^2$ の関数であるから、(3-22) 式が成り立つのは、

$$Z^2 - X^2 = \text{const.} \quad (3-23)$$

という条件が満たされるときである。したがって、 Φ が一定値をとる点の軌跡、すなわち *Pendellösung* 縞の形は入射点を通る入射線と Bragg 反射線を漸近線とする双曲線になる。この結果は完全結晶の場合と同じである²¹⁾。しかしながら、その間隔は以下に示すように $|Z|$ の増大とともにつまってくるのが予想される。

任意の方向に選んだ直線、 l 、に沿った局所的な縞間隔 Λ は次式で定義される。

$$2\pi/\Lambda = \partial\Phi/\partial z \quad (3-24)$$

いま簡単のため，綫平面に沿った縞間隔の変化を調べてみる。綫平面上での重の値は，

$$\Phi_{x=0} = \frac{2m_0^2 c}{|f_0|} \left[\sinh^{-1} \frac{1}{2} |z| + \frac{|z|}{4} \sqrt{z^2 + 4} \right] - \phi \quad (3-25)$$

と書ける。この式を(3-24)式に代入して z で偏微分し，綫平面に沿った縞間隔 $\Lambda_{x=0}$ を求めると，

$$\Lambda_{x=0} = \frac{2\pi}{m_0 c \sqrt{z^2 + 4}} \quad (3-26)$$

となる。この式を完全結晶の場合の縞間隔， $\Lambda_0 = \pi/m_0 c$ ，を用いて書きなおすと，

$$\Lambda_{x=0} = \Lambda_0 \cdot \frac{2}{\sqrt{z^2 + 4}} \quad (3-27)$$

となる。この結果，図3.4に示すように $|z|$ の増大とともに *Pendellösung* 縞の間隔は減少することがわかる。綫平面に沿った方向でこのような傾向が見られ，そのうえ縞の形は双曲線に保たれているのであるから，任意の方向に対して $|z|$ の増大とともに縞間隔はつまってくる結論される。次の節で，強度因子まで含めた干渉項の計算結果を図示するが，そこに見られる $|z|$ の増大にともなう縞間隔の減少はここで得られた結果に対応する。

3.4 Section 圓形の強度

最初に吸収がない場合の強度因子を求める。双曲線軌道に沿ったビームの抗がりの因子 $\delta p_e / \delta a_a$ は、

$$\left| \frac{\delta p_e}{\delta a_a} \right| = \left| \frac{f_0}{m_0} \right| \frac{(1 - p_e^2)^{3/2}}{\cos \theta_a \tan \theta_B |p_e - p_a|} \quad (3-28)$$

となる。この値を (2-48) 式に代入すれば、結晶の乱れに依存する強度因子として、

$$\left| \frac{D_g}{D_i} \right|^2 = \frac{|x_g/C|}{4 \sin 2\theta_B} \cdot \frac{1}{\sin \theta_B} \cdot \left| \frac{f_0}{m_0} \right| \cdot \frac{(1 - p_e)(1 + p_a)}{|p_e - p_a|} \quad (3-29)$$

が得られる。この表式は分枝 (1) および (2) の波に共通である。しかしながら、両方の波で軌道の式が異なるから、出射面上の座標を用いて (3-29) 式を書きなおすと、分枝に依存して異なった表式が得られる。その結果は、 Z の正負と密接な関係がある。

分枝 (1) および (2) の波の強度因子をそれぞれ $I^{(1)}$ および $I^{(2)}$ と書くとそれらは次のようになる。

$$I^{(1)} = I_p \cdot I(\pm) \quad (3-30a)$$

$$I^{(2)} = I_p \cdot I(\mp) \quad (3-30b)$$

ここで複号は、 Z が正のとき上の符号をとり、 Z が負のとき下の符号をとる。したがって、 Z の正負で分枝 (1) の波と (2) の波の強度因子が入れかわることがわかる。ここで

I_p および $I(\pm)$ は,

$$I_p \equiv \frac{|x_g|C}{4A \sin 2\theta_B} \cdot \frac{1}{\sin \theta_B} \cdot \frac{1}{z} \cdot I_0 \quad (3-31)$$

および

$$I(\pm) = \frac{2}{\sqrt{1-(x/z)^2} \sqrt{z^2-x^2+4}} \left[1 + \frac{1}{2} (z^2-x^2) \pm \frac{1}{2} \sqrt{(z^2-x^2)(z^2-x^2+4)} \right] \quad (3-32)$$

で表わされる。 $I(\pm)$ の複号は角かっこの中の第三項の複号と同順である。(3-31) 式を (3-32) 式の分母に含まれる因子, $\sqrt{1-(x/z)^2}$, で除した量が通常完全結晶の Section 図形の強度として知られている。margin ($x = \pm z$) における強度の増大はこの因子で表わされる⁵⁶⁾。後で, Traverse 図形の強度を Section 図形のその積分として表わす都合上, 変数 x を含む因子はすべて $I(\pm)$ に含めた。

ここで, 新しい変数

$$\cos \theta \equiv \sqrt{1-(x/z)^2} = \sqrt{1-(x/cz)^2} \quad (3-33)$$

を導入する。これを用いれば,

$$z^2 - x^2 = z^2 \cos^2 \theta \quad (3-34)$$

と書ける。これらの関係を用いて, (3-32) 式を z と θ で表わすと,

$$I(\pm) = \frac{2}{\cos\theta \sqrt{Z^2 \cos^2\theta + 4}} \left[1 + \frac{1}{2} Z^2 \cos^2\theta \pm \frac{1}{2} \sqrt{Z^2 \cos^2\theta (Z^2 \cos^2\theta + 4)} \right] \quad (3-35)$$

となる。 $I(\pm) \cdot \cos\theta$ の値を $|Z| \cdot \cos\theta$ に対してプロットした曲線を図3.5に示す。その結果、 $I(+)$ の値は $|Z|$ の増大とともに単調に増加する関数であり、 $I(-)$ の値は単調減少関数であることがわかる。なお、 $x=0$ の $I(\pm)$ の値は $\cos\theta = 1$ とおいて得られる。

以上の結果から、吸収を含まない強度因子に対して次のような結論が得られる。 Z が正のときには分枝(1)の波の強度が Z の増加とともに単調に増大し、分枝(2)の波の強度は単調に減少する。 Z が負のときには、分枝(1)の波の強度と(2)の波の強度が入れかわる。したがって、両者の和は Z の正負に無関係に $|Z|$ の増大とともに単調に増加する。その様子が図3.5に一点鎖線で示されている。

次に、吸収の強度因子を求める。平均の吸収、 $\exp -\mu_0 t$ は完全結晶の場合と同様考慮しなければならない。(2-30)式で定義された Bornmann 吸収の強度因子は、(3-13)式の虚数部から導かれ、

$$\alpha \} = \exp \pm \left[M \sinh^{-1} \frac{1}{2} \sqrt{Z^2 - x^2} / |Z/2| \right] \quad (3-36)$$

と表わされる。αおよびβは分枝(1)および(2)の波の強度因子であり、複号と同順である。ここでMは異常吸収の大きさを表わすパラメータであり、

$$M \equiv \mu_g t \quad (2-37)$$

で定義される。これは、ひずみ勾配の大きさを表わすパラメータZが、ひずみ勾配の大きさと結晶の厚さの積として定義されたのと類似の意味を持つ。

αおよびβの数値例として、 $M=10$ の場合の値を図3.6に示す。ただし、簡単のためXは零として綫平面上の値を計算した。また、(2-31)式の μ_g の定義からわかるようにMの値は入射X線の偏光因子Cに依存する。ここではCuK α_1 線によるSiの220反射を仮定し、垂直な偏光成分($C=1$)に対するMの値を10とした。平行成分に対しては偏光因子に相当するだけ小さいMを与えて、αおよびβの値を計算した。この場合には、偏光因子の影響が大きく、 α_{\parallel} 、 β_{\parallel} および β_{\perp} の強度因子は α_{\perp} に比して十分無視できる程度の寄与しかしないことがわかる。Mが大きいときには、一般に、このような傾向が認められる。これに対してMが小さいときには、偏光因子による差はほとんど認められない。またβをαに比して無視することもでき

なくなる。しかしその場合でも図3.6に認められるいくつかの特徴的な傾向は成り立っている。すなわち、 M が正であるかぎり(2-32)式に示される関係は成り立っている。また、その強度因子は Z の符号には依存しなく、 $|Z|$ の増大とともに平均の吸収に近づく。すなわち、乱れが大きくなるにつれて *Bornmann* 効果は減少する。

(3-30 a および b) 式の強度因子に吸収による強度因子を乗ずることによって *Section* 図形の強度が得られる。その結果は次のように表わされる。

$$I(Z, X, M) = I_p \cdot \exp(-\mu_0 t) \times \\ \{ I(\pm)\alpha + I(\mp)\beta + 2\sqrt{I(+)\cdot I(-)} \cos \Phi \} \quad (3-38)$$

複号は Z が正のとき上の符号をとり、 Z が負のとき下の符号をとる。この強度式は、*Section* 図形の位置座標 X の関数である。また(3-38)式の具体的な表式は X^2 の関数であるから、*Section* 図形の強度はその中心($X=0$)に関して対称である。これは必ずみ勾配が一様な場合に特徴的な現象であり、実験で得られた *Section* 図形と比較して議論する際に重要である。また上述の $I(\pm)$ および α , β の関数形の特徴から、その強度の様子は Z および M の値

に依存して大きく異なることが予想される。

Section 四形の強度の様子と定数係数は除いて，干渉項と非干渉項に分けて考える。分枝(1)および(2)の波の強度を加えた非干渉項の強度は次のようにまとめて表わすことができる。すなわち，

$$I(+)\cdot\alpha + I(-)\cdot\beta = \frac{4}{\cos\theta\sqrt{Z^2\cos^2\theta + 4}} \times$$

$$\cosh\left\{ \left(2 + \frac{2M}{Z}\right) \operatorname{sinh}^{-1} \frac{|Z|\cos\theta}{2} \right\}$$

(3-39)

と書ける。右辺における Z の符号依存性は， $2 + 2M/Z$ という因子にのみ含まれる。 $M=0.6$ ， 1.2 および 11.7 の場合に適当に Z を与えて(3-39)式の右辺を計算した。その結果を出射面上の規格化された場所， X/Z ，の関数としてプロットしたものを図3.7に示す。ただし，その値はそれぞれの吸収の大きさに対応する完全結晶のSection四形の中心における強度で規格化されている。前述のようにその強度分布は中心に関して対称であるから，半分だけが示されている。なお，ここで用いた M の値は入射 X 線として Ag ， Mo および $Cu K\alpha_1$ 線を用い， 0.8mm 厚の Si 単結晶の 220 反射を得たときの値である。したがって，図3.7の強度曲線は，Pendellösung 縞の強度を別にすい

は実験の部で述べる結果とそのまま対比できる†。

図3.7の強度曲線には、関数 $I(\pm)$ および α , β に見られた特徴が反映されている。とくに、 γ の正負でかなり異った強度曲線が得られることに注意する必要がある。吸収のパラメータ M が大きいとき(図3.7(e)および(f))は、いわゆる Borrmann 吸収に特有の強度特性が見られる。すなわち、 γ 平面に沿った方向の強度は強いが、 γ 平面からはずれた方向のビームは大きな吸収を受ける。とくに、*margin* ではその強度が零になる。 $|\gamma|$ の大小に依りし強度変化に対しては、 $I(\pm)$ に比して Borrmann 吸収の因子 α の効果が支配的である。これに対して M の小さい場合には(図3.7(a)から(d)まで)、Borrmann 吸収の効果よりも $I(\pm)$ の強度変化の特徴がより強く認められる。しかしながら、その場合でも γ の正負で強度の差はある。 $M=0$ ならば γ の正負による強度の差はない。

Section 図形の中心における強度を γ を変えて計算す

† 加藤の論文²⁷⁾に示されている Fig. 3は、吸収の因子を含まない場合の *Section* 図形の強度曲線である。その Bragg 反射波の強度を示した図においても、 f_0 の正負を指定しないかぎり、いずれの曲線が分枝(1)に対応し、他方が分枝(2)に対応するかを限定することはできない。

ると、以上述べた結果がより明瞭になる。Section 四形の中心の値が十分意味のある値であることは図3.7から明らかである。それぞれのMに対応する完全結晶のSection 四形の中心における強度で規格化された計算値が図3.8に破線で示されている。Zの正負でSection 四形の強度が異なることに対応して、その曲線はZ=0に関して非対称である。|Z|が大きいときの強度特性は、Mの大小に依存して大きく異なることが確かめられる。

最後に、Section 四形の強度式のうち Pendellösung 縞を生ずる干渉項の様子を調べる。この項には吸収のパラメータMは含まれず、平均の吸収だけが関与する。しかしながら、吸収の大きいときは前述のように分枝(1)の波の強度が大部分で、分枝(2)の波はほとんど無視できる。その場合、両方の波の干渉によって生じるこの項のコントラストは非常に小さくなる。したがって、干渉項が十分意味を持つのは吸収の小さいときであることがわかる。

この干渉項の強度分布も Section 四形の中心に関して対称である。図3.8の場合と同じように、Section 四形の中心でZの変化とともにその強度が変化する様子を計算した。その結果を図3.9に破線を示す。その強度は、コントラスト

トの大きさを非干渉項と比較するため、図3.8と同じ値で規格化されている。ここで用いたMの値に対しては、干渉項と非干渉項は同程度のコントラストを与えることがわかる。なお、位相の計算を行うときの定数としては、Siの220反射の場合の値 $m_0 = 4665.0 \text{ cm}^{-1}$ を使用し、Bragg角としては $\text{Ag K}\alpha_1$ 線および $\text{Mo K}\alpha_1$ 線に対するSiの220反射の値を用いた。また、結晶の厚さは 0.8 mm として計算した。

$\text{Ag K}\alpha_1$ 線の場合(図3.9(a))と $\text{Mo K}\alpha_1$ 線の場合(図3.9(b))と比較すると、 $\text{Ag K}\alpha_1$ 線の場合の方が縞のコントラストが大きいことがわかる。これは吸収の大きさの違いから一般的に言えることである。一方、 $\text{Mo K}\alpha_1$ 線の場合の方がひずみ勾配に対して敏感である。このことは、 ϵ の小さい変化で次数 n の大きい Pendellösung 縞が生じることに対応する。また、その強度が f_0 の正負に依存しないことは波長には無関係に言える。

3.5 Traverse 図形の強度

Traverse 図形の強度は(2-50)式に示されているように、Section 図形の強度を積分して得られる。簡単のため、平行平板結晶でしかも対称 Lane の条件を満たして

いる場合を考える。このとき、Traverse 図形の強度 J は (3-38) 式を積分して、

$$J(Z, M) = J_p \cdot \{E(Z, M) + F(Z)\} \cdot \exp(-\mu_0 t) \quad (3-40)$$

と書くことができる。ここで、 J_p は吸収がない場合の完全結晶の積分反射強度であり、

$$J_p = \frac{\pi |X_g| C}{2 \sin 2\theta_B} \quad (3-41)$$

と表わされる。関数 $E(Z, M)$ および $F(Z)$ は、それぞれ非干渉項および干渉項の積分反射強度に比例する量で、次式で定義される。

$$E(Z, M) = \frac{1}{\pi} \int_{-Z}^Z \{ \alpha \cdot I(+)+ \beta \cdot I(-) \} dx \quad (3-42)$$

$$F(Z) = \frac{2}{\pi} \int_{-Z}^Z \{ I(+)\cdot I(-) \}^{1/2} dx \quad (3-43)$$

(3-42) 式の複号は、これまでの強度の表式と同様、 Z が正のとき上の符号を、 Z が負のとき下の符号をとることを意味する。 $M \neq 0$ のときにはその被積分関数は Z の正負に依存して異なる値をとるから、それを積分した値、 $E(Z, M)$ 、も Z の正負で異なる値をとる。実際に $E(Z, M)$ の積分を遂行するときは、積分変数 X の代りに (3-33) 式で定義された変数 θ を用いた方が数値計算が容易である。

結果の数値例を表3.1に示す[†]。

表3.1に見られるように $E(Z, M)$ も *Section* 図形の非干渉項の場合と同様、 Z および M の値によってかなり異なった強度が得られる。例として、 $M=0.6, 1.2$ および 11.7 の場合の $E(Z, M)$ を $E(0, M)$ ^{††} で除した値を図3.8に実線を示す。 $M=0.6$ および 1.2 はいわゆる吸収の小さい場合であり、その強度曲線は比較的よく似ている。その強度変化の様子は、前述の *Section* 図形の中心の強度変化と類似である。このような強度曲線の得られる物理的意味も *Section* 図形の場合と同じと考えられる。吸収の大きい場合 ($M=11.7$) にも全く同じ傾向が認められる。

† この結果を適用するときには偏光因子に注意する必要がある。すなわち、入射ビームは一般に二種類の偏光成分から成っている。それぞれの偏光成分に対して Z, M および J_p の値が異なるから、厳密な強度計算を行うにはいつも両方の波の強度を別々に計算して、その和を用いなければならない。しかしながら、本研究では実験と比較する際の計算はそれほど精度を必要としないことから、簡単のため偏光因子はいつも1として計算した。

†† $E(0, M)$ は、零次の *modified Bessel* 関数 $I_0(M)$ に等しい⁽⁵⁷⁾。

Section 図形の中心の強度と Traverse 図形の強度が類似の強度変化を示すというこの結果は、重要な意味を持つ。すなわち、ひずみ勾配が一樣でなく Traverse 図形の強度がこの節で述べたように具体的には計算できない場合でも、Section 図形の中心の強度を何らかの方法で求めれば、それに応じて Traverse 図形の強度変化が予想されることを意味する。

ここで、黒および白のコントラストを次のように定義する。すなわち、

$$E(Z, M) > E(0, M) \quad ; \text{黒} \quad (\text{3-44a})$$

$$E(Z, M) < E(0, M) \quad ; \text{白} \quad (\text{3-44b})$$

とする。 $J_p \cdot E(0, M)$ は吸収のパラメータが M である完全結晶の積分反射強度を表わすから、(3-44 a および b) 式の物理的意味は次のようになる。同じ吸収のパラメータを持つ完全結晶の強度より大きい強度を黒のコントラスト、逆に小さい強度を白のコントラストと名付けたわけである。なお、表 3. 1 には、 $E(Z, M)/E(0, M)$ の値が示されているから、数値が 1 より大きい場合は黒のコントラスト、1 より小さい場合は白のコントラストである。

(3-44 a および b) 式の定義を用い、さらに Z が正の

ときと負のときのコントラストをその順に“対”にして呼ぶことにする。その結果吸収が小さいときには $|Z|$ の小さいところで黒-白のコントラスト, $|Z|$ の大きいところでは黒-黒のコントラストが得られることがわかる。また, 吸収が大きいときには, $|Z|$ が大きいところで白-白のコントラスト, $|Z|$ の小さいところでは吸収の小さい場合と同様黒-白のコントラストが得られる。 $|Z|$ および M のどのような値に対して, 黒-黒, 黒-白あるいは白-白のコントラストが得られるかを示したのが図3.10である⁴¹⁾。

図3.10は Friedel 則背反の現象と密接な関係がある。いわゆる Friedel 則というのとは, 積分反射強度が θ -反射とその裏の $\bar{\theta}$ -反射で同じ値をとるという法則である。しかるに, θ の符号を変えることは反射ベクトルの向きを変えることと同等であることはこの章の第二節で述べた。一方, 表3.1あるいは(3-42)式から, 非干渉項の積分反射強度 (Traverse 図形の強度と同じもの) の間には,

$$E(|Z|, M) > E(-|Z|, M) \quad (3-45)$$

という関係が成り立つことがわかる。前述の黒-黒あるいは白-白のコントラストの場合でも, (3-45)式はいつも満足されている。これに対して, 後述のように干渉項の強

度は χ の絶対値のみに依存しその符号にはよらない。したがって、(3-45)式は乱れた結晶における Friedel 則相反の式にはかならないことが結論される。

干渉項の積分反射強度, $F(\chi)$, の計算結果の例を図3.9に示す。図3.8の場合と同じ値, $E(0, M)$, で規格化された強度が実線で示されている。Section 図形の場合と同様、この場合も χ の正負による値の違いはない。一方、そのコントラストは非干渉項のそれの約 $1/10$ 程度の小さい値をとる。非干渉項が黒のコントラストをとる領域ではさらにそのコントラストは小さくなる。したがって、Traverse 図形の場合には白のコントラストの領域で Pendellösung 縞がよりよく観測できることが期待される。また、 $A_0K\alpha_1$ 線と $M_0K\alpha_1$ 線の場合の比較では、 M が大きい $M_0K\alpha_1$ 線の場合の方が χ のわずかな増加で Pendellösung 縞が生じる。しかしそのコントラストは弱くなる。この特徴は Section 図形の場合に得られたものと同じである。また、Section 図形の強度のピーク位置と Traverse 図形のそれでは縞間隔の約 $1/8$ ずれていることがわかる。この結果はすれの方角も含めて完全結晶の場合に得られた値¹²⁾と一致している。

第四章 種々の乱れを含む結晶 における X 線回折現象

この章では、ひずみ勾配が一樣でないとき、第三章の結果とどのように異なった X 線回折現象が得られるかを調べる。第二章に述べた一般論を基にして理論を展開する。

最初にひずみ勾配が z だけの関数、あるいは x だけの関数である場合の計算を行う。そのあとで、ひずみ勾配が x および z の関数として表わされる一般的な場合の理論的取り扱いについて述べる。

4.1 z 方向にひずみ勾配が変化している結晶

(a) 軌道の方程式

変位成分が場所に関する二次形式で表わされる場合には、力の項は一定になることは 3.1 節で述べた。しかしながら、一般には (3-1) 式における三次以上の項も存在するから、力の項 $f(x, z)$ は場所の関数になる。ここでは、変位が具体的にどのような関数形で表わされるかは問題にしないで、力の項が z の関数として

$$f(x, z) \equiv f_0 + \omega_1 f_1(z) \quad (4-1)$$

と表わされることだけを仮定する。ここで、 f_0 は場所

依らない定数であり，(3-3)式で求めたものと同じ意味を持つ。また， $f_1(z)$ は定数項を含まない z だけの関数であり， $\tilde{\omega}_1$ は任意の定数係数である。

(4-1)式を，軌道の方程式(2-23)に代入すると，

$$\pm m_0 \frac{d}{dz} \left\{ \frac{v/c}{\sqrt{1-(v/c)^2}} \right\} = f_0 + \tilde{\omega}_1 f_1(z) \quad (4-2)$$

となる。この式は変数分離形の微分方程式であるから，容易に積分できる。入射面($z=z_e$)から深さ z のところまで積分して，それを v/c について解くと，

$$v/c = \frac{h(z)}{\sqrt{1+|h(z)|^2}} \quad (4-3)$$

となる。ここで， $h(z)$ は z だけの関数であり，次のように表わされる。

$$h(z) \equiv \pm \frac{1}{m_0} \int_{z_e}^z \{f_0 + \tilde{\omega}_1 f_1(z)\} dz + \frac{p_e}{\sqrt{1-p_e^2}} \quad (4-4)$$

複号は，上が分枝(1)の波，下が分枝(2)の波を表わす。

(4-3)式をもう一度積分すると，軌道を表わす積分方程式，

$$x = c \int_{z_e}^z \frac{h(z) dz}{\sqrt{1+|h(z)|^2}} + x_e \quad (4-5)$$

が得られる。

(4-5)式の積分が実際に遂行されたとき，軌道の方程式が解析的に求められたと言える。力の項の関数形によって， $h(z)$ の関数形が定まり，軌道の方程式が得られる。

一般に、 $h(z)$ がこの多項式で表わされるときには、(4-5) 式は楕円積分になる。しかしながら、楕円積分で表わされる軌道に沿った X 線波の振幅の因子、 $\delta P_e / \delta a_0$ 、や位相などを解析的に求めることは容易ではない。したがって、実用的には、何らかの方法で近似的にでも軌道の方程式を解析的に求め、その軌道に沿って諸量を計算することが望ましい。

ひずみ勾配の場所による変化が十分小さいときには、その変化する部分を一樣なひずみ勾配に対する微少量と考虑して、以下のような近似計算を行うことができる。その際、(4-1) 式の係数 ω_1 は微少量を表わすパラメータと考える。さらに、より一般性を欠くけれども、計算を簡単にするために入射角を座標の原点とする。このとき、(4-4) 式は次のように書ける。

$$h(z) = \pm \frac{f_0}{m_0} z + \frac{P_e}{\sqrt{1-P_e^2}} \pm \frac{\omega_1}{m_0} \int_0^z f_1(z) dz \quad (4-6)$$

ここで、式を簡潔にするために次のようなおきかえを行う。

$$b_1 \equiv f_0 / m_0 \quad (4-7a)$$

$$c_1 \equiv P_e / \sqrt{1-P_e^2} \quad (4-7b)$$

$$h_1(z) \equiv \frac{1}{m_0} \int_0^z f_1(z) dz \quad (4-7c)$$

これらの表式を用いて、(4-6) 式を書きなおすと

$$h(z) = b_1 z + c_1 + \tilde{\omega}_1 h_1(z) \quad ; \text{分枝(1)の波} \quad (4-8a)$$

$$h(z) = -\{(b_1 z - c_1) + \tilde{\omega}_1 h_1(z)\} \quad ; \text{分枝(2)の波} \quad (4-8b)$$

となる。分枝(2)の波の表式は、分枝(1)の波の表式において、 c_1 の符号を変えさらに右辺全体の符号を変えることによって得られる。この規則は、以下に求める規道の方程式あるいは位相項の表式などすべてにおいて成り立つ。したがって、以下においては、必要がない限り分枝(1)の波に対する表式だけを書く。

(4-8a) 式を(4-5) 式に代入して、 $\tilde{\omega}_1$ の2次以上の項を無視すると、軌道の方程式は

$$x = c \int_0^z \frac{(b_1 z + c_1) dz}{\sqrt{(b_1 z + c_1)^2 + 1}} + c \tilde{\omega}_1 \int_0^z \frac{h_1(z) dz}{\{(b_1 z + c_1)^2 + 1\}^{3/2}} \quad (4-9)$$

と変形される。さらに第一項の積分を遂行すると

$$\begin{aligned} x/c = & \frac{1}{b_1} \sqrt{(b_1 z + c_1)^2 + 1} - \frac{1}{b_1} \sqrt{c_1^2 + 1} \\ & + \tilde{\omega}_1 \int_0^z \frac{h_1(z) dz}{\{(b_1 z + c_1)^2 + 1\}^{3/2}} \end{aligned} \quad (4-10)$$

となる。この式は、 $h_1(z)$ が z の多項式の時初等的に積分できる。さらに、 $(z-a)^{-2}$ に比例するひずみ勾配が存在する(軌道の殻の部分を除く)ときにも、積分は解析的に行われる。しかしながら、ここでは最も単純な例として z に比例するひずみ勾配が存在する場合の計算だけを行う。

ε に比例する ひずみ勾配が,

$$f_1(z) = a_0 z \quad (4-11)$$

と表わされると仮定する。このとき, (4-7c) 式から

$$h_1(z) = (a_0/2m_0) z^2 \quad (4-12)$$

となる。ここで, 新しく定数 a_1 を定義する。

$$a_1 \equiv a_0/2m_0 \quad (4-13)$$

これらの値を, 軌道の式 (4-10) に代入して積分すると

$$\begin{aligned} b_1 x/c &= \sqrt{(b_1 z + c_1)^2 + 1} - \sqrt{c_1^2 + 1} \\ &+ \frac{a_1}{b_1^2} \hat{\omega}_1 \left[\frac{b_1 z (c_1^2 - 1) + c_1 (c_1^2 + 1)}{\sqrt{(b_1 z + c_1)^2 + 1}} - c_1 \sqrt{c_1^2 + 1} \right. \\ &\left. + \log \{ b_1 z + c_1 + \sqrt{(b_1 z + c_1)^2 + 1} \} - \log (c_1 + \sqrt{c_1^2 + 1}) \right] \end{aligned} \quad (4-14)$$

となる。これが, ε に比例する ひずみ勾配が存在する場合の近似的な軌道の方程式を与える。

一様なひずみ勾配からのゆすかなはずれを問題にするこの節の近似の範囲では, 第三章で定義したのと同じパラメータ x および z を定義する意味がある。(4-7a) 式の b_1 は, x および z の係数にはかならない。また, c_1 は第三章で定義された z_0 に等しい。これらのパラメータを用いて (4-14) 式を書きなおすと, 分枝 (1) の波の軌道の方程式は,

$$\begin{aligned}
X &= \sqrt{(Z+Z_0)^2+1} - \sqrt{Z_0^2+1} \\
&+ A_1 \left[\frac{Z(Z_0^2-1)+Z_0(Z_0^2+1)}{\sqrt{(Z+Z_0)^2+1}} - Z_0\sqrt{Z_0^2+1} \right. \\
&\quad \left. + \log \{ Z+Z_0+\sqrt{(Z+Z_0)^2+1} \} - \log (Z_0+\sqrt{Z_0^2+1}) \right]
\end{aligned}
\tag{4-15a}$$

となる。分枝(2)の波の軌道の式は、前述の規則により

$$\begin{aligned}
X &= -\sqrt{(Z-Z_0)^2+1} + \sqrt{Z_0^2+1} \\
&- A_1 \left[\frac{Z(Z_0^2-1)-Z_0(Z_0^2+1)}{\sqrt{(Z-Z_0)^2+1}} + Z_0\sqrt{Z_0^2+1} \right. \\
&\quad \left. + \log \{ Z-Z_0+\sqrt{(Z-Z_0)^2+1} \} - \log (-Z_0+\sqrt{Z_0^2+1}) \right]
\end{aligned}
\tag{4-15b}$$

となる。(4-15aおよびb)式の A_1 は、

$$A_1 \equiv (a_1/b_1^2) \tilde{\omega}_1 \tag{4-16}$$

という量であり、摂動係数と言える。

摂動項のないとき($A_1=0$)は、(4-15aおよびb)式は第三章で求めた軌道の式(3-9aおよびb)と一致する。

A_1 に適当な値を与えて、双曲線軌道からどのように変わるかを調べることができる。そのとき、実際の問題と対応がつけやすいように A_1 の表式を変形しておく。すなわち、

$$A_1 = \frac{1}{2} (R/Z) \tag{4-17}$$

と書ける。ここで、 Z は結晶の厚さ D を指定したときのひずみ勾配に比例するパラメータであると考える。また、 R

はカの項の変化率であり、出射面における f_0 の変化量 Δf と次のように関係づけられる。

$$R \equiv \Delta f / f_0 \quad (4-18)$$

$R > 0$ のときには、結晶の深さとともに $|f(z)|$ は増加し、 $R < 0$ なら減少することがわかる。また、 Z の符号は f_0 の符号と一致する (3.2 節参照) から、 R の正負と A_1 の正負は同じではない。

適当な入射角のときの軌道を図 4.1 に示す。簡単のため、分枝 (1) の波の軌道だけを示した。 $Z > 0$ の場合だけと考えているから、 A_1 と R は同符号である。 $R > 0$ のときには双曲線軌道よりも曲率が大きくなり、 $R < 0$ のときには逆に小さくなる。 $R > 0$ のときには、結晶の中へ進むほどカの項の絶対値が大きくなるから、軌道は双曲線軌道より大きく曲げられると解釈される。また、水平面に平行な接線を持つとき最も大きく曲げられることがわかる。

分枝 (2) の波の軌道は、図 4.1 の Z 軸に関して対称な曲線として得られる。これらの結果から、 Z および A_1 の符号と実空間の分枝 (1) および (2) の波の軌道の関係は、次のように表わすことができる。

(1) $Z > 0$ でかつ $A_1 > 0$ の場合の分枝 (1) の波の軌道は、

$Z < 0$ であつ $A_1 < 0$ の場合の分枝(2)の波の軌道と同じ。

(2) $Z > 0$ であつ $A_1 < 0$ の場合の分枝(1)の波の軌道は、

$Z < 0$ であつ $A_1 > 0$ の場合の分枝(2)の波の軌道と同じ。

(3) 上記二つの場合に述べなかつた分枝の波の軌道もたがい一致することは、分枝(1)の波と(2)の波の軌道の対称性から明らかである。

$Z > 0$ であつ $A_1 > 0$ の場合と、 $Z < 0$ であつ $A_1 < 0$ の場合は、前述の $R > 0$ の場合に相当し、 κ の項の変化の様子は両者で同じであり、その符号だけが異なる。一方、同じ反射ベクトルるときに f_0 の符号だけを変えると分枝(1)および(2)の波の軌道が入れかわる(図3.3(a)および(c))。したがつて、上述の規則は当然の結果と言える。

軌道の接線の傾きは、軌道の方程式を微分するか、あるいは(4-8a)および(b)式と(4-3)式に代入して ω_1^2 以上の項を無視することによつて得られる。分枝(1)の波に対する規格化された接線の傾き p は、

$$p = \frac{Z + Z_0}{\sqrt{(Z + Z_0)^2 + 1}} + A_1 \frac{Z^2}{\{(Z + Z_0)^2 + 1\}^{3/2}} \quad (4-19)$$

となる。分枝(2)の波に対する値も容易に得られる。

(b) 位相の計算

ここでは、軌道に沿った modified Bloch 波の位相を計算する。kinetic term は、(4-19) 式を (2-19) 式に代入し、被積分関数の $\tilde{\omega}_i^2$ 以上を無視する近似を行い、積分を遂行して得られる。その結果、分枝(1)の波に対し、

$$\begin{aligned} T^{(1)} = \frac{m_0^2 c}{|f_0|} & \left[\log \{ Z + Z_0 + \sqrt{(Z + Z_0)^2 + 1} \} - \log (Z_0 + \sqrt{Z_0^2 + 1}) \right. \\ & - A_1 \left\{ \frac{Z^2 + 4Z_0Z + 2(Z_0^2 + 1)}{\sqrt{(Z + Z_0)^2 + 1}} - 2\sqrt{Z_0^2 + 1} \right. \\ & \quad \left. - 2Z_0 \log | Z + Z_0 + \sqrt{(Z + Z_0)^2 + 1} | \right. \\ & \quad \left. + 2Z_0 \log (Z_0 + \sqrt{Z_0^2 + 1}) \right\} \left. \right] \quad (4-20) \end{aligned}$$

となる。

kinetic term の $Z=2$ のときの数値例を図 4.2 に示す。AgK α_1 線による S_2 の 220 反射を仮定し、結晶の厚さを 1 mm としたときの定数値を用いて計算した。実線は擾動がないときの値であり、中心 ($X/Z=0$) に関して対称である (3.3 節参照)。一点鎖線および破線はそれぞれ $R=0.1$ および $R=-0.1$ の場合の値を示す。なお、図には分枝(1)の波の値だけが示されているが、分枝(2)の波の値は、中心に関して対称な曲線と求めその符号を変えることによつて得られる。この kinetic term は、 ω 平面に沿った方向からはずれるほど小さくなることがわかる。その結果、軌

道の曲率が大きくなる $R > 0$ の場合に, $R = 0$ の場合の値より小さくなる。

次に, (2-21b) 式に定義された Bragg 反射波の potential term を計算する。この計算には, ひずみそのものの値も必要である。ここでは, (3-1) 式の三次の項までのすべてが存在し, それ以上の項は存在しないと仮定して計算する。このとき, カの項は

$$f(x, z) = \frac{2\pi}{\sin 2\theta_B} \left\{ (\beta_2 \cos^2 \theta_B - \alpha_2 \sin^2 \theta_B) \right. \\ \left. + (\gamma_{12} \cos^2 \theta_B - \alpha_3 \sin^2 \theta_B) x + (\beta_3 \cos^2 \theta_B - \gamma_{21} \sin^2 \theta_B) z \right\} \quad (4-21)$$

となる。この節では, カの項は (4-1) 式のように書けると仮定したのだから, (4-21) 式の係数の間には次のような関係があると考えればよい。すなわち,

$$f_0 = \frac{2\pi}{\sin 2\theta_B} (\beta_2 \cos^2 \theta_B - \alpha_2 \sin^2 \theta_B) \quad (4-22a)$$

$$\tilde{\omega}_1 a_0 = \frac{2\pi}{\sin 2\theta_B} (\beta_3 \cos^2 \theta_B - \gamma_{21} \sin^2 \theta_B) \quad (4-22b)$$

$$\gamma_{12} \cos^2 \theta_B - \alpha_3 \sin^2 \theta_B = 0 \quad (4-22c)$$

である。この関係に注意して, (3-1) 式を (2-21b) 式に代入して potential term を計算する。全域分の関係式

$$d(xz) = z dx + x dz \quad (4-23a)$$

$$d(x^2 z) = 2xz dx + x^2 dz \quad (4-23b)$$

$$d(xz^2) = z^2 dx + 2xz dz \quad (4-23c)$$

を用いると，それは z に関する積分だけで表わされ，

$$N_g = C_g^1(x, z) + f_0 \int_0^z x dz + 2m_0 a_1 \tilde{\omega}_1 \int_0^z x z dz \quad (4-24)$$

となる。ここで， $C_g^1(x, z)$ は分枝(1)および(2)の波に共通の値であり，場所だけの関数として

$$\begin{aligned} C_g^1(x, z) = & \frac{2\pi}{\sin 2\theta_B} \left[(\alpha_1 \sin \theta_B - \beta_1 \cos \theta_B) (\cos \theta_B x - \sin \theta_B z) \right. \\ & + \frac{1}{2} \{ (\alpha_2 \sin \theta_B - \gamma_{11} \cos \theta_B) \cos \theta_B x^2 - (\gamma_{11} \sin \theta_B - \beta_2 \cos \theta_B) \sin \theta_B z^2 \} \\ & + \frac{1}{6} \{ (\alpha_3 \sin \theta_B - \gamma_{21} \cos \theta_B) \cos \theta_B x^3 - (\gamma_{12} \sin \theta_B - \beta_3 \cos \theta_B) \sin \theta_B z^3 \} \\ & + (\gamma_{11} \sin \theta_B - \beta_2 \cos \theta_B) \cos \theta_B x z \\ & \left. + \frac{1}{2} \{ (\gamma_{21} \sin \theta_B - \gamma_{12} \cos \theta_B) \cos \theta_B x^2 z + (\gamma_{12} \sin \theta_B - \beta_3 \cos \theta_B) \cos \theta_B x z^2 \} \right] \end{aligned} \quad (4-25)$$

と表わされる。

(4-24)式の被積分関数 x に軌道の式を代入して積分と遂行すると potential term が求められる。そのとき，第三項には摂動係数がついているから，軌道の式としては非摂動項だけを代入する。積分と遂行した結果，

$$\begin{aligned} N_g^{(1)} = & C_g^1(x, z) + \frac{m_0 c}{|f_0|} \left[\frac{1}{2} \{ (Z+Z_0) \sqrt{(Z+Z_0)^2+1} - (2Z+Z_0) \sqrt{Z_0^2+1} \right. \\ & \left. + \log |Z+Z_0+\sqrt{(Z+Z_0)^2+1}| - \log |Z_0+\sqrt{Z_0^2+1}| \right] \\ & + A_1 \left\{ \frac{2Z^2+Z_0Z+2(Z_0^2-2)}{3} \sqrt{(Z+Z_0)^2+1} - \frac{3Z(Z+Z_0)+2(Z_0^2-2)}{3} \sqrt{Z_0^2+1} \right. \\ & \left. - (Z+2Z_0) \log |Z+Z_0+\sqrt{(Z+Z_0)^2+1}| + (Z+2Z_0) \log |Z_0+\sqrt{Z_0^2+1}| \right\} \end{aligned} \quad (4-26)$$

となる。分枝(2)の波に対する表式は、(4-26)式の第一項はそのまゝにして、第二項以降を前述の規則で読みかえれば得られる。この結果は、(3-18)式と類似している。すなわち、ひずみの大きさに依存する項は、分枝(1)および(2)の波共通で第一項に含まれ、Pendellösung 縮への寄与はない。第二項以降のひずみ勾配の大きさに依存する項だけが Pendellösung 縮に寄与する。しかしながら、本研究では、具体的な数値計算は行わなかった。

(c) 回折強度

最初に、吸収がない場合の干渉項を除いた Section 図形の強度を求める。ビームの振がりの因子、 $|\delta p_e / \delta a_a|$ は軌道の式から計算され、

$$\left| \frac{\delta p_e}{\delta a_a} \right| = \frac{|f_0|}{m_0 c} \frac{1}{\cos \theta_a} \frac{(1 - p_e^2)^{3/2}}{|\partial F / \partial Z_0|} \quad (4-27)$$

となる。ここで、 $|\partial F / \partial Z_0|$ は分枝(1)の波に対しては、

$$\left| \frac{\partial F}{\partial Z_0} \right| = \left| \frac{Z + Z_0}{\sqrt{(Z + Z_0)^2 + 1}} - \frac{Z_0}{\sqrt{Z_0^2 + 1}} + A_1 \left[\frac{2Z_0(Z + Z_0)^3 + 3(Z + Z_0)^2 Z_0^2 + 2}{\{(Z + Z_0)^2 + 1\}^{3/2}} - 2\sqrt{Z_0^2 + 1} \right] \right| \quad (4-28)$$

となる。(4-19)および(4-27)式を(2-48)式に代入して、吸収のない場合の Section 図形の強度を求めると、

$$\left| \frac{D_2}{D_1} \right|^2 = \frac{|x_2|C}{4 \sin 2\theta_0} \frac{1}{\sin \theta_0} \frac{1}{z} \frac{Z(1-p_2)(1+p_1)}{|\partial F / \partial Z_0|} \quad (4-29)$$

となる。この表式は、分枝(1)および(2)の波に共通である。

定数係数を除いた強度の数値例 ($|Z|=2$ の場合) を図 4.3 に示す。 f_0 が正のときは、分枝(1)の波が強い強度(図で上の強度)をとり、分枝(2)の波が弱い強度をとる。 R が正のとき、分枝(1)の波の強度は振動のないときより強くなり、逆に分枝(2)の波の強度は弱くなる。 R が負のときはこの逆である。また、振動がないときの強度曲線は中心対称であるからそれと比較することにより、分枝(1)の波の強度は入射波の側 ($X/Z < 0$) で振動の影響が強く、分枝(2)の波は回折波の側 ($X/Z > 0$) で振動の影響が強いことがわかる。 f_0 が負のときは、強度の大きい方が分枝(2)の波の強度を表わし、小さい方が分枝(1)の波を表わす。この図では、入射波の側と回折波の側を固定 (X 方向を固定したのではない) して強度が示されているから、 R の正負による強度の変化は f_0 が正の場合と同じである。

上述の結果を、振動係数 A_1 になおして考えると、軌道に対して成り立ったのと類似の関係が成り立つことがわかる。吸収を含まない強度因子は、軌道の接線の傾きとヒ-

の抗がりの因子だけで決まるから、同じ軌道に対して同じ強度が得られるのは当然であると言える。

次に、吸収を考慮した Section 図形の強度を求める。平均の吸収, $e\mu_0 t$, は分枝(1)および(2)の波に共通に含まれる。一方, Borrmann 吸収の強度因子は, kinetic term の虚数部から得られる。それを乗じた Section 図形の強度の数値例として, $Z = \pm 2$ の場合の強度曲線を図 4.4 (a) および (b) に示す[†]。 $Z = 2$ の場合には, 強度の強い方が分枝(1)の波の強度を表わし, 弱い方が分枝(2)の波の強度を表わす。 $Z = -2$ の場合には逆になる。 M の値としては, 1mm 厚の Si 単結晶の $A_g K\alpha_1$ 線による $Z20$ 反射の値, $M = 0.73$, を使用した。また, 図に示された強度は, 同じ M を持つ完全結晶の Section 図形の中心の強度 (分枝(1)および(2)の波の強度の和) で規格化されたものである。

図 4.4 の強度曲線は, 吸収のないときの強度曲線 (図 4.3) に見られた特徴に加えて, Borrmann 吸収の強度因

[†] この図は第三章で示した強度曲線, 図 3.7 (a) および (b) に対応する。しかし, 図 3.7 では分枝(1)および(2)の波の強度の和が示されており, M の値としては, 0.8mm 厚の Si 結晶に対する値が使用された。

子の特徴を考慮すれば説明できる。また、振動のないときの中心対称の強度曲線(実線)を基準にすると、 Z の正負によらず、振動の影響は入射波の側により強いことがわかる。別の見方をすると、 $R > 0$ のときには入射波の側の強度の方が回折波の側の強度より強い。逆に、 $R < 0$ のときには、回折波の側の強度の方が強い。

この *Section* 四角の強度の中心に関する非対称性から、結晶の深さ方向のひずみ勾配の様子が明らかにされる。すなわち、入射面と回折面をとりかえた *reciprocal* な実験を行えば、 R の符号は逆になり、それにともなって強度の強くなる側が逆になることが予想される。この予想の正しいことは、 $|Z| = 2.2$ かつ $R = -0.09$ の場合の強度、および $|Z| = 1.8$ かつ $R = 0.1$ の場合の強度を計算することによって確かめられた。その結果は、図 4.4 (a) および (b) に黒丸および白丸で示されている[†]。これらの Z および R を与えたときの結晶内のひずみ勾配の分布は、 $|Z| = 2$ か

[†] 図に示されているのは、入射角 θ_e を正弦的に Z と等分して与えたときの強度であり、ビームの偏りがよくわかる。強度が弱い方の分枝の波は、*standard* な場合とほとんど同じ強度になり、繁雑になるのを避けて省略した。

つ $R = \pm 0.1$ の場合の分布を *reciprocal* にしたものと同じ
うど一致する。

以上の結果から、*Section* 図形の強度に関する次のよ
うな結論が導かれる。

(1) 結晶の厚さの増大とともにひずみ勾配の絶対値が増大
しているときは、入射波の側の強度が強い。

(2) (1) の現象は、反射ベクトルの向きを変えても変らな
い。

(3) (1) と同じ結晶を用いて、*reciprocal* な条件で実験
を行った場合には、回折波の側の強度が強い。

(4) (3) の結果は、(1) の対偶に相当する結論と同等であ
る。

最後に、*Traverse* 図形の強度を調べる。それは、吸収
を考慮した *Section* 図形の強度を積分して得られる（
2-50）式参照）。しかしながら、摂動項のある場合には、
Section 図形の強度を出射面の場所の関数として解析的に
表わすことは容易ではない。したがって、ここでは別の方
法で *Traverse* 図形の強度を求める。種々の入射角のビー
ムに対する入射面と出射面における透過能を計算して、そ
の和をとればそれが求める強度になる。いま、入射角 θ_e と、

$\sin\left(\frac{\pi}{2N}n\right)$; $n = -N, -N+1, \dots, 0, 1, \dots, N-1, N$ と正強的に等間隔にとると, *Traverse* 図形の強度は次のように表わされる。すなわち,

$$J = \frac{J_p}{\pi} \frac{1}{2N} \sum_{n=-N}^N \frac{1+p_a}{1+p_e} \cdot \left. \begin{matrix} \alpha \\ \beta \end{matrix} \right\} \quad (4-30)$$

となる。分枝(1)および(2)の波に対する *Bormann* 吸収の強度因子 α および β は, (3-30) 式に擾動項を加えた量であり, 分枝(1)の波に対しては (4-20) 式の虚数部から導かれる。なお, (4-30) 式で強度を計算するときは, 分割数 $2N$ を多くするほど精度がよくなる。

Traverse 図形の強度例と図 4.5 に示す。 M の値としては, *Section* 図形の場合と同様, $M=0.73$ を使用した。図 4.5 には, *Section* 図形の時(図 4.4)に認められた特徴がそのまま認められる。また, 分枝(1)の波の強度と(2)の波の強度の和は, 一樣なひずみ勾配の場合(たとえば図 3.8(a))と類似である。さらに, 注意すべきことは, *Traverse* 図形の強度は *reciprocal* な場合でも差がないということである。 *Section* 図形に見られた, 中心に関する非対称性の *standard* な場合と *reciprocal* な場合の差は, 出射面全体についての和(*Traverse* 図形の強度)をとったときにはなくなると解釈される。

4.2 x方向にひずみ勾配が変化している結晶

力の項 $f(x, z)$ が,

$$f(x, z) \equiv f_0 + \tilde{\omega}_2 f_2(x) \quad (4-31)$$

という形でxだけの関数として表わされる場合のX線回折現象を調べる。ここで、 $f_2(x)$ は定数項を含まないxだけの関数である。(4-31)式を(2-23)式に代入すると、

$$\pm m_0 \frac{d}{dz} \left\{ \frac{v/c}{\sqrt{1-(v/c)^2}} \right\} = f_0 + \tilde{\omega}_2 f_2(x) \quad (4-32)$$

となる。左辺を変形すると、

$$\frac{1}{\{1-(v/c)^2\}^{3/2}} \frac{dv}{dz} = \pm \frac{c}{m_0} \{f_0 + \tilde{\omega}_2 f_2(x)\} \quad (4-33)$$

となる。また、 $v = dx/dz$ という関係があるから、

$$\frac{v dv}{\{1-(v/c)^2\}^{3/2}} = \pm \frac{c}{m_0} \{f_0 + \tilde{\omega}_2 f_2(x)\} dx \quad (4-34)$$

と変形される。この式を、結晶の入射角から老えている角まで積分すると、

$$1/\sqrt{1-(v/c)^2} = g(x) \quad (4-35)$$

となる。ここで $g(x)$ はxだけの関数であり、

$$g(x) \equiv \pm \frac{1}{m_0 c} \int_{x_2}^x \{f_0 + \tilde{\omega}_2 f_2(x)\} dx + \frac{1}{\sqrt{1-p^2}} \quad (4-36)$$

と表わされる。複号は上が分枝(1)の波を表わし、下が分枝(2)の波を表わす。(4-35)式から、

$$p = \frac{1}{c} \frac{dx}{dz} = \pm \frac{\sqrt{\{g(x)\}^2 - 1}}{g(x)} \quad (4-37)$$

となる。この式の複号は分枝とは関係なく、考えている質における軌道の接線の傾きの符号と一致する。さらに、(4-37)式は次のような積分方程式におきかえられる。

$$z = \pm \frac{1}{c} \int_{x_0}^x \frac{g(x) dx}{\sqrt{\{g(x)\}^2 - 1}} + z_0 \quad (4-38)$$

一般に、 $g(x)$ が x の多項式で表わされる場合には、(4-38)式の積分は楕円積分で表わされる。

最も単純な x 方向の場所変化の例として、 $f_2(x)$ が x の1次式で表わされる場合を考える。このとき、(4-36)式で定義された $g(x)$ は2次の多項式になり、

$$g(x) = a_2 x^2 + b_2 x + c_2 \quad (4-39)$$

と表わせる。このとき、(4-38)式の積分 $G(x)$ は、

$$G(x) \equiv \int \frac{(a_2 x^2 + b_2 x + c_2) dx}{\sqrt{(a_2 x^2 + b_2 x + c_2)^2 - 1}} \quad (4-40)$$

と書ける。この積分は次のように遂行される。

$a_2 > 0$ のときは、

$$2a_2 x + b_2 = \zeta \sqrt{b_2^2 - 4a_2(c_2 + 1)} \quad (4-41)$$

という変数変換を行うと、 $G(x)$ は次のようになる。

$$G(x) = \frac{-(b_2^2 - 4a_2 c_2)}{2a_2 \sqrt{b_2^2 - 4a_2(c_2 + 1)}} \int \frac{d\zeta}{\sqrt{(1 - \zeta^2)(1 - k^2 \zeta^2)}} + \frac{b_2^2 - 4a_2(c_2 + 1)}{2a_2 \sqrt{b_2^2 - 4a_2(c_2 + 1)}} \int \frac{\zeta^2 d\zeta}{\sqrt{(1 - \zeta^2)(1 - k^2 \zeta^2)}} \quad (4-42)$$

ここで,

$$k^2 = \frac{b_2^2 - 4a_2(c_2 + 1)}{b_2^2 - 4a_2(c_2 - 1)} \quad (4-43)$$

である。G(x) は次のように書きなおすこともできる。

$$G(x) = \frac{2}{\sqrt{b_2^2 - 4a_2(c_2 - 1)}} F(\varphi, k) - \frac{\sqrt{b_2^2 - 4a_2(c_2 - 1)}}{2a_2} E(\varphi, k) \quad (4-44)$$

ただし, ここで

$$F(\varphi, k) = \int_0^x \frac{d\zeta}{\sqrt{(1-\zeta^2)(1-k^2\zeta^2)}} = \int_0^\varphi \frac{d\theta}{\sqrt{1-k^2\sin^2\theta}} \quad (4-45a)$$

; 第一種楕円積分

$$E(\varphi, k) = \int_0^x \sqrt{\frac{1-k^2\zeta^2}{1-\zeta^2}} d\zeta = \int_0^\varphi \sqrt{1-k^2\sin^2\theta} d\theta \quad (4-45b)$$

; 第二種楕円積分

である。

$a_2 < 0$ のときは,

$$2a_2x + b_2 = -\zeta \sqrt{b_2^2 - 4a_2(c_2 - 1)} \quad (4-46)$$

という変換を行うことによつて,

$$G(x) = \frac{2}{\sqrt{b_2^2 - 4a_2(c_2 + 1)}} F(\varphi, k) + \frac{\sqrt{b_2^2 - 4a_2(c_2 + 1)}}{2a_2} E(\varphi, k) \quad (4-47)$$

となる。ただし, この場合は

$$k^2 = \frac{b_2^2 - 4a_2(c_2 - 1)}{b_2^2 - 4a_2(c_2 + 1)} \quad (4-48)$$

である。こうして, カの項がxの1次式で表わされる場合

には、軌道の方程式は楕円積分になることが知られる。しかしながら、実用的には、前述のような摂動計算の方が有効である。

以下、前節と類似の摂動計算を行う。簡単のため、入射角を原点にして(4-36)式を書きなおすと、

$$q(x) = \pm \frac{f_0}{m_0 c} x + \frac{1}{\sqrt{1-\beta_e^2}} \pm \frac{\tilde{\omega}_2}{m_0 c} \int_0^x f_2(x) dx \quad (4-49)$$

となる。ここで、前節と類似のおきかえを行う。

$$b_2 \equiv \frac{f_0}{m_0 c} \quad (4-50a)$$

$$c_2 \equiv 1/\sqrt{1-\beta_e^2} \quad (4-50b)$$

$$g_2(x) \equiv \frac{1}{m_0 c} \int_0^x f_2(x) dx \quad (4-50c)$$

このとき、(4-49)式は次のように書ける。

$$q(x) = b_2 x + c_2 + \tilde{\omega}_2 g_2(x) ; \text{分枝(1)の波} \quad (4-51a)$$

$$q(x) = -\{(b_2 x - c_2) + \tilde{\omega}_2 g_2(x)\} ; \text{分枝(2)の波} \quad (4-51b)$$

分枝(2)の波に対する表式は、分枝(1)の波の表式において c_2 の符号を変え、その後で式全体の符号を変えることにより得られる。この関係は、(4-8aおよびb)式に見られた関係と類似である。以下においては、とくに必要のないかぎり、分枝(1)の波に対する表式だけを書く。

(4-51a)式を軌道の方程式(4-38)に代入して $\tilde{\omega}_2$ の2次以上の項を無視すると、軌道の方程式として、

$$z = \pm \frac{1}{c} \left[\frac{1}{b_2} \sqrt{(b_2 x + c_2)^2 - 1} - \frac{1}{b_2} \sqrt{c_2^2 - 1} - \tilde{\omega}_2 \int_0^x \frac{g_2(x) dx}{\{(b_2 x + c_2)^2 - 1\}^{3/2}} \right] \quad (4-52)$$

が得られる。

最も単純なひずみ勾配の変化として、

$$f_2(x) = a_0 x \quad (4-53)$$

を仮定する。このとき、 $g_2(x)$ は

$$g_2(x) = \frac{a_0}{2m_0 c} x^2 \quad (4-54)$$

となる。ここで、定数 a_2 を定義する。

$$a_2 \equiv a_0 / 2m_0 c \quad (4-55)$$

(4-54) 式と (4-52) 式に代入して、積分を遂行すると、

$$\begin{aligned} \pm b_2 c z = & \sqrt{(b_2 x + c_2)^2 - 1} - \sqrt{c_2^2 - 1} \\ & + \tilde{\omega}_2 \frac{a_2}{b_2^2} \left[\frac{(c_2^2 + 1) b_2 x + c_2 (c_2^2 - 1)}{\sqrt{(b_2 x + c_2)^2 - 1}} - c_2 \sqrt{c_2^2 - 1} \right. \\ & \left. - \log |b_2 x + c_2 + \sqrt{(b_2 x + c_2)^2 - 1}| + \log |c_2 + \sqrt{c_2^2 - 1}| \right] \end{aligned} \quad (4-56)$$

となる。前節と同様、パラメータ X および Z を導入する。

また、 c_2 は第三章で用いた X_0 にほかならない。これらの値を用いると、軌道の式は分枝 (1) の波に対し、

$$\pm Z = \sqrt{(X + X_0)^2 - 1} - \sqrt{X_0^2 - 1} + A_2 F_2(X, X_0) \quad (4-57)$$

となる。ここで、摂動係数 A_2 は

$$A_2 \equiv \tilde{\omega}_2 a_2 / b_2^2 \quad (4-58)$$

で与えられる。また、摂動項 $F_2(x, x_0)$ は

$$F_2(x, x_0) = \frac{(x_0^2 + 1)x + x_0(x_0^2 - 1)}{\sqrt{(x + x_0)^2 - 1}} - x_0 \sqrt{x_0^2 - 1} \\ - \log |x + x_0 + \sqrt{(x + x_0)^2 - 1}| + \log |x_0 + \sqrt{x_0^2 - 1}| \quad (4-59)$$

という関数である。分枝(2)の波の軌道は、

$$\mp Z = \sqrt{(x - x_0)^2 - 1} - \sqrt{x_0^2 - 1} + A_2 F_2(x, -x_0) \quad (4-60)$$

で与えられる。

適当な x を与えて、(4-57)あるいは(4-60)式から Z を求めるのは容易であるが、軌道の接線方向が面平面に平行かあるいはそれに近いとき、 x の値をかなり細かくとらないと精度のよい軌道が得られない。この方法は、適当な結晶の深さを決めた (Z を指定) ときの位相 \times Section 図形の強度の計算にも適さない。計算は複雑になるが、任意に Z を与えてそれに対する x を求める方が実用的である。

摂動項は十分小さいと仮定して、次のような変形を行って iteration 法により数値計算で x を求める。分枝(1)の波の軌道の式として、

$$x = \sqrt{\{Z \pm \sqrt{x_0^2 - 1} \mp A_2 F_2(x, x_0)\}^2 + 1} - x_0 \quad (4-61a)$$

を用い、分枝(2)の波の軌道の式として

$$x = -\sqrt{\{Z \mp \sqrt{x_0^2 - 1} \pm A_2 F_2(x, -x_0)\}^2 + 1} + x_0 \quad (4-61b)$$

を用いて計算する。根号の中の複号は、入射角における接

線の傾き p_c が正のときは上の符号をとり、負のときは下の符号をとるものとする。Xの初期値としては、(4-61a および b) 式における振動のないとき ($A_2=0$) の値を使用する。

この結果得られる双曲線軌道からのはずれの様子は、前節の結果とはかなり異なる。たとえば、図4.1で用いた振動係数 A_1 と同じ値を A_2 に与えたとき、双曲線軌道からのはずれは図4.1の場合に比して非常に小さい。x方向に比例する力の場の中では、軌道の接線の方が逆になると、それまで受けていた力と逆の変化を持つ力の場の中を進むことになる。したがって、それまでの効果を打ち消すような効果が作用する。このように、振動のない場合とほとんど差がない軌道が得られるときは、位相あるいは強度などの回折効果も一様なひずみ勾配の場合から大きくは変わらないことが予想される。

位相項はその計算結果だけを書く。kinetic term は、(2-19) 式の積分変数を x に変換し、軌道接線の傾き

$$p = \pm \left\{ \frac{\sqrt{(x+x_0)^2 - 1}}{x+x_0} + A_2 \frac{x^2}{(x+x_0)^2 \sqrt{(x+x_0)^2 - 1}} \right\} \quad (4-62)$$

を代入して積分すれば求められる。その結果、分枝(1)の波に対して、

$$\begin{aligned}
T &= \frac{m_0^2 c}{2f_0} \left| \log |x+x_0 + \sqrt{(x+x_0)^2 - 1}| - \log |x_0 + \sqrt{x_0^2 - 1}| \right. \\
&\quad - A \left\{ \frac{x^2 + 4x_0x + 2(x_0^2 - 1)}{\sqrt{(x+x_0)^2 - 1}} - 2\sqrt{x_0^2 - 1} \right. \\
&\quad \left. \left. - 2x_0 \log |x+x_0 + \sqrt{(x+x_0)^2 - 1}| + 2x_0 \log |x_0 + \sqrt{x_0^2 - 1}| \right\} \right| \\
&\hspace{15em} (4-63)
\end{aligned}$$

が得られる。分枝(2)の波に対しても、前述の規則で読みかえて、つねに負の値をとる位相が得られる。

potential term の計算は、前節とまったく同じように遂行される。Bragg 反射波に対するそれは、

$$N_g = C_g^2(x, z) - f_0 \int_0^x z dx - \tilde{\omega}_2 a_0 \int_0^x x z dx \quad (4-64)$$

となり、軌道の方程式を代入して積分を遂行した結果は、分枝(1)の波に対して、

$$\begin{aligned}
N_g &= C_g^2(x, z) + \frac{m_0^2 c}{2f_0} \left[(x+x_0) \sqrt{(x+x_0)^2 - 1} - (2x+x_0) \sqrt{x_0^2 - 1} \right. \\
&\quad \left. - \log |x+x_0 + \sqrt{(x+x_0)^2 - 1}| + \log |x_0 + \sqrt{x_0^2 - 1}| \right] \\
&\quad + \frac{m_0^2 c}{2f_0} A_2 \left[\frac{2}{3} \{(x+x_0)^2 - 1\}^{3/2} - (x x_0 - 2) \sqrt{(x+x_0)^2 - 1} \right. \\
&\quad \left. - (x+2x_0) \{ \log |x+x_0 + \sqrt{(x+x_0)^2 - 1}| - \log |x_0 + \sqrt{x_0^2 - 1}| \} \right. \\
&\quad \left. - \frac{2}{3} (x_0^2 - 1)^{3/2} - (x^2 + x x_0 + 2) \sqrt{x_0^2 - 1} \right] \quad (4-65)
\end{aligned}$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned}
C_g^2(x, z) &= \frac{2\pi}{\mu \sin 2\theta_B} \left[(\alpha_1 \mu \sin \theta_B - \beta_1 \cos \theta_B) (\cos \theta_B x - \mu \sin \theta_B z) \right. \\
&\quad + \frac{1}{2} \{ (\alpha_2 \mu \sin \theta_B - \gamma_{11} \cos \theta_B) \cos \theta_B x^2 - (\gamma_{11} \mu \sin \theta_B - \beta_2 \cos \theta_B) \mu \sin \theta_B z^2 \} \\
&\quad + \frac{1}{6} \{ (\alpha_3 \mu \sin \theta_B - \gamma_{21} \cos \theta_B) \cos \theta_B x^3 - (\gamma_{12} \mu \sin \theta_B - \beta_3 \cos \theta_B) \mu \sin \theta_B z^3 \} \\
&\hspace{15em} (\text{次頁へ続く})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (\gamma_{11} \cos \theta_B - \alpha_2 \sin \theta_B) \sin \theta_B x z \\
& + \frac{1}{2} \{ (\gamma_{21} \cos \theta_B - \alpha_3 \sin \theta_B) \sin \theta_B x^2 z + (\gamma_{12} \cos \theta_B - \gamma_{21} \sin \theta_B) \sin \theta_B x z^2 \}
\end{aligned}
\tag{4-66}$$

である。

吸収を考慮しないときの Section 図形の強度は、

$$\left| \frac{D_3}{D_2} \right|^2 = \frac{|\alpha_2| C}{4 \sin 2\theta_B} \frac{1}{\sin \theta_B} \frac{1}{z} \frac{Z(1-\rho_e)(1+\rho_a)}{|\rho_e \rho_a|} \frac{1}{|\partial F / \partial X_0|}
\tag{4-67}$$

で与えられる。 $|\partial F / \partial X_0|$ は分枝(1)の波に対しては、

$$\begin{aligned}
\left| \frac{\partial F}{\partial X_0} \right| = & \left| \frac{X + X_0}{\sqrt{(X + X_0)^2 - 1}} - \frac{X_0}{\sqrt{X_0^2 - 1}} \right. \\
& \left. + A_2 \left[\frac{2X_0(X + X_0)^3 - 3(X + X_0)^2 X_0^2 + 2}{\{(X + X_0)^2 - 1\}^{3/2}} - 2\sqrt{X_0^2 - 1} \right] \right|
\end{aligned}
\tag{4-68}$$

となる。分枝(2)の波に対する表式は X_0 の符号を変えれば得られる。

Borrmann 吸収の強度因子は、(4-63)式で与えられる kinetic term の虚数部から得られる。それを、(4-67)式に乗ずれば、吸収のある場合の Section 図形の強度が計算できる。また、Traverse 図形の強度は、入射波の接線の傾きを $\sin \frac{n\pi}{2N}$ と正弦的に等間隔に置けば、前節と同じように、(4-30)式を用いて計算できる。しかし、ここでは具体的な数値計算は行われなかった。

4.3 任意の方向にひずみ勾配が変化している結晶

一般に、力の項 $f(x, z)$ が x および z の関数である場合には、軌道の方程式を積分することは容易ではない。しかし、仮想的に結晶を薄板に切って考えるとき、その中では $f(x, z)$ の変化は少くそれを定数と考えることができる。その場合には、第三章で得られた結果を適用して X 線回折現象を知ることができる。結晶を十分薄く切りさ之すれば、 $f(x, z)$ の z 方向の変化は無視できるが、*lamellar crystal*¹⁴⁾ を考えているわけではないから、 $f(x, z)$ が x のどの場所でも同じになるとは限らない。むしろ、 $f(x, z)$ は薄板の中では x だけの関数と考えるのがより一般的であり、ここでもそう考えて議論を進める。

ひずみ勾配は x および z の関数ではあるが、極端に大きな乱れはなく、第二章および第三章で展開された理論は適用できると仮定する。また、厚さとともに増大する軌道の拡がりの因子を考慮しても、その範囲内では力の項の変化を無視できる程度に薄い板に切るものとする。この場合には、第三章で展開された議論がそのまま適用できる。

具体的には、まず一枚目の結晶に対して次のような計算を行う。傾き P_{e1} の波が一枚目の結晶の中央 ($z = \Delta z_1/2$)

まで直線的に進んだと仮定してその座標 x_{m1} を求め、
 ここの力の項 $f(x_{m1}, \Delta z_1/2)$ を計算して一枚目の結晶の力
 の項 f_{01} とする。力の項が求まれば軌道の式が書ける。そ
 れから $z = \Delta z_1/2$ における座標をおめ、 x_{m1} と比較してそ
 の差が適当に定めた値より小さいとき軌道が求められたと
 する。差が大ききときは、新しくおめた x に対応する f の
 値を改めて一枚目の結晶の力の項とする。 x の値が収束す
 るまでこの計算を繰り返す。収束したとき、そのまゝ結晶
 の出射角まで進むものとして、出射面での座標 x_{a1} およ
 び接線の傾き p_{a1} を求める。この計算は分枝(1) および(2)
 の波に対して別々に行う必要がある。

一般に、 i 番目の結晶板において、入射角の座標および
 接線の傾きとしては $i-1$ 番目の結晶板の出射角におけるそ
 れらの値を使用する。力の項としては、 $i-1$ 番目の軌道が
 そのまゝ i 番目の結晶の中央まで延長されると仮定して、
 ここの値 $f(x_{mi}, z_{ai-1} + \Delta z_i/2)$ を用いる。収束するまで
 軌道計算を繰り返す。収束したときには、(3-13) および(3-
 18) 式により i 番目の結晶中での位相の変化量も求めて
 おく。個々の結晶板に対して求められた位相の和をとって、
 結晶全体での位相を求めることができる。ただし、各結晶板

でそれぞれ入射角が異なるから、(3-18)式の第三項が意味を持つ。

Section 図形の強度は、透過能とビームの振がりの因子が知られれば求められる。ビームの振がりの因子を各結晶板に対して順次求めた結果、入射面および出射面上の接線の傾きだけで表わされることが確かめられた。したがって、(3-29)式によって吸収を含まない Section 図形の強度が得られる。また、Bormann 吸収の因子は、kinetic term の虚数部から得られる。Traverse 図形の強度は、入射角を正弦的に等分割すれば、(4-30)式で計算される。

この方法によれば、いかなるひずみが存在する場合にも、 $f(x, z)$ の具体的な表式が得られさえすれば、その X 線回折現象は明らかにされる。4.1 および 4.2 節に述べた場合も、擾動を使わずに、この方法で計算することもできる。結晶の分割を十分細かくすれば、計算に時間がかかるが、計算精度はあげることができる。最近、加藤⁵⁸⁾はこの方法で位相を数値計算して、Si 基板につけた酸化膜境界に見られる Pendellösung 縞の間隔の減少を説明した。

実験の部

第五章 結晶内のひずみ分布の計算

この章では、実際の実験条件に対応して、動径圧縮を加えた薄板内部のひずみ分布を弾性論を用いて計算する。結晶の外形に比してその厚さは十分薄いと仮定して、いわゆる二次元応力問題として取り扱う。外形が円および正方形の場合の計算を行う。その際、最初は結晶異方性を考慮しないで等方的な物質と仮定して計算を進める。5.3節で弾性定数の異方性について考察し、5.4節で異方性を考慮した弾性論について論じる。

5.1 動径圧縮を加えた円板のひずみ分布

動径圧縮を加えた薄い円板のひずみ分布を平面応力問題として求める方法は、Timoshenko と Goodier (59) の弾性論の教科書に示されている。以下、その取り扱いに基づいて円板のひずみ分布を計算する。

半無限平面板に集中応力、 $P \delta/cm$ 、を加えた場合の応力分布は、*simple radial distribution* と呼ばれ、動径方向の垂直応力だけが存在し、それに垂直な方向の垂直応力やせん断応力は存在しない。この場合の応力関数は、

$$\phi = -(E/\pi) r \theta \sin \theta \quad (5-1)$$

で与えられる。ここで r および θ は、圧縮点を座標の原点とする極座標である。その定義を図 5.1(a) に示す。円板の動径圧縮に対する応力関数は、(5-1) 式の形の応力関数の和から静水圧に対応するものを引いたものであり、

$$\phi = -(P/\pi)(r_1 \theta_1 \sin \theta_1 + r_2 \theta_2 \sin \theta_2 - r^2/2a) \quad (5-2)$$

と書ける。ここで、座標 r_1, θ_1 などは図 5.1(b) に示すようにとるものとする。また、 a は円の半径を表わす。

一方、応力成分は応力関数の二階微分として次のように定義される。

$$\sigma_x = \partial^2 \phi / \partial y^2 \quad (5-3a)$$

$$\sigma_y = \partial^2 \phi / \partial x^2 \quad (5-3b)$$

$$\tau_{xy} = -\partial^2 \phi / \partial x \partial y \quad (5-3c)$$

なお、ここで用いた座標 x および y は、図 5.1(b) のように選んだ座標であり、理論の部で用いた反射ベクトルに基づいて定義された x, y 座標とは異なる。対称 Lane case では、 x 座標の向きを別にすればこの場合と一致する。また、図 5.1(b) から明らかなように、極座標と直角座標の間には次のような関係がある。

$$\begin{cases} r_1 \cos \theta_1 = a + x, & r_1 \sin \theta_1 = y \\ r_2 \cos \theta_2 = a - x, & r_2 \sin \theta_2 = y \end{cases}$$

これらの座標変換の関係に注意して応力成分を計算すると、

$$\sigma_x = -(2P/\pi) (\cos^3 \theta_1 / r_1 + \cos^3 \theta_2 / r_2 - 1/2a) \quad (5-4a)$$

$$\sigma_y = -(2P/\pi) (\sin^2 \theta_1 \cos \theta_1 / r_1 + \sin^2 \theta_2 \cos \theta_2 / r_2 - 1/2a) \quad (5-4b)$$

$$\tau_{xy} = -(2P/\pi) (\sin \theta_1 \cos^2 \theta_1 / r_1 - \sin \theta_2 \cos^2 \theta_2 / r_2) \quad (5-4c)$$

となる。

応力とひずみの関係は、二次元応力問題の場合、物質に固有のヤング率とポアッソン比 ν を用いて[†]、次のように表わされる。

$$\epsilon_x = (\sigma_x - \nu \sigma_y) / E \quad (5-5a)$$

$$\epsilon_y = (\sigma_y - \nu \sigma_x) / E \quad (5-5b)$$

$$\sigma_{xy} = 2(1+\nu) \tau_{xy} / E \quad (5-5c)$$

さらに、 z 方向のひずみは、

$$\epsilon_z = -(\nu/1-\nu) (\epsilon_x + \epsilon_y) = -(\sigma_x + \sigma_y) \nu / E \quad (5-5d)$$

となる。(5-4a, b および c) 式と (5-5a, b, c および d) 式に代入すれば、それぞれのひずみ成分が求められる。

次の章でも明らかにされることであるが、本研究の実験条件では、反射ベクトルは図5.1(b)の x 軸に平行か反平

[†] 等方的な物質を考えているのであるから、 E および ν は方向依存性を持たない。

行かのいずれかである。対称 Lane case からはずれた場合でも、反射ベクトルは x - z 面内に存在する。したがって、回折の問題に寄与するひずみ成分は ϵ_x だけであることが力の項の定義式 (2-24) から予想される。ただし、福島らの実験²⁶⁾²⁷⁾では、 ϵ_y の y 方向の変化も問題になる。それゆえ、ここではひずみ成分 ϵ_x および ϵ_y の x および y に対する関数関係を調べる。それぞれのひずみ成分は、

$$\begin{aligned} \epsilon_x = & -(2P/\pi E) \left\{ \cos\theta_1 (\cos^2\theta_1 - \nu \sin^2\theta_1) / r_1 \right. \\ & \left. + \cos\theta_2 (\cos^2\theta_2 - \nu \sin^2\theta_2) / r_2 - (1-\nu) / 2a \right\} \end{aligned} \quad (5-6a)$$

$$\begin{aligned} \epsilon_y = & -(2P/\pi E) \left\{ \cos\theta_1 (\sin^2\theta_1 - \nu \cos^2\theta_1) / r_1 \right. \\ & \left. + \cos\theta_2 (\sin^2\theta_2 - \nu \cos^2\theta_2) / r_2 - (1-\nu) / 2a \right\} \end{aligned} \quad (5-6b)$$

となる。この式をもう一度微分して、

$$\begin{aligned} \partial\epsilon_x/\partial x = & (2P/\pi E) \left[\left\{ \cos^4\theta_1 - 3(1+\nu)\cos^2\theta_1\sin^2\theta_1 + \nu\sin^4\theta_1 \right\} / r_1^2 \right. \\ & \left. - \left\{ \cos^4\theta_2 - 3(1+\nu)\cos^2\theta_2\sin^2\theta_2 + \nu\sin^4\theta_2 \right\} / r_2^2 \right] \end{aligned} \quad (5-7a)$$

$$\begin{aligned} \partial\epsilon_y/\partial y = & -(2P/\pi E) \left[\sin 2\theta_1 (\cos 2\theta_1 + 2\nu \cos^2\theta_1) / r_1^2 \right. \\ & \left. + \sin 2\theta_2 (\cos 2\theta_2 + 2\nu \cos^2\theta_2) / r_2^2 \right] \end{aligned} \quad (5-7b)$$

が得られる。

ここで、 $\partial\epsilon_x/\partial x$ の分布についてとくに詳しく調べる。

任意の点における $\partial \varepsilon_x / \partial x$ の値を知るには、(5-7a)式を x および y を用いて表わした方が便利である。すなわち、

$$\begin{aligned} \partial \varepsilon_x / \partial x = (2P/\pi E) & \left[\frac{\{(a+x)^4 - 3(1+\nu)y^2(a+x)^2 + \nu y^4\}}{\{(a+x)^2 + y^2\}^3} \right. \\ & \left. - \frac{\{(a-x)^4 - 3(1+\nu)y^2(a-x)^2 + \nu y^4\}}{\{(a-x)^2 + y^2\}^3} \right] \end{aligned} \quad (5-8)$$

あるいは、さらに変形して、円板の半径で規格化した座標

$$\xi = x/a \quad (5-9a)$$

$$\eta = y/a \quad (5-9b)$$

を用いて書きなおせば、

$$\begin{aligned} \partial \varepsilon_x / \partial x = (2P/\pi E a^2) & \left[\frac{\{(1+\xi)^4 - 3(1+\nu)\eta^2(1+\xi)^2 + \nu\eta^4\}}{\{(1+\xi)^2 + \eta^2\}^3} \right. \\ & \left. - \frac{\{(1-\xi)^4 - 3(1+\nu)\eta^2(1-\xi)^2 + \nu\eta^4\}}{\{(1-\xi)^2 + \eta^2\}^3} \right] \end{aligned} \quad (5-10)$$

となる。ここで、 η に適当な数値を代入して、 $\partial \varepsilon_x / \partial x$ を計算し、その等しい値を連ねて等ひずみ勾配の曲線を描くと、図5.2のようになる。なお、図5.2の中に記されている数値は、 $\partial \varepsilon_x / \partial x$ の係数 $2P/\pi E a^2$ を除いた値である。Si の $\langle 100 \rangle$ 方向のヤング率を用い、半径11.5mm、厚さ0.8mmの円板結晶を2.5kg重の力で圧縮したとき、その値は $2.1 \times 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$ となる。

この等ひずみ勾配の分布は次のような特徴を持っている。

(1) x 軸に関して対称な分布である。

(2) y軸に関しては、その分布は反対称である。

(3) 破線が $\partial \epsilon_x / \partial x = 0$ の軌跡を表わす。圧縮域の近くでは五つの木の葉形の領域に分かれる。それぞれの葉形の領域は交互に異なった符号を持つ。

(4) 圧縮域に近づくほど $|\partial \epsilon_x / \partial x|$ は大きくなる。その値は、大体圧縮域からの距離の自乗に逆比例する。

葉形のひろがりの角度は、ポアッソン比に依存する。実際、 $\partial \epsilon_x / \partial x = 0$ の軌跡である破線が圧縮域の近くでどのような角度を持つかは次のようにして知られる。一方の圧縮域の近くでは、他方の影響はほとんど無視できるから、

$$\begin{aligned} g(\theta) &\equiv \cos^4 \theta - 3(1+\nu) \cos^2 \theta \sin^2 \theta + \nu \sin^4 \theta \\ &= 0 \end{aligned} \quad (5-11)$$

という方程式を解くことにより角度 θ が求められる。それは明らかに ν の関数である。図5.2における ν は S_z の $\langle 100 \rangle$ 方向の値、0.278、を使用した。

一方、x軸上のひずみ勾配の値、 $(\partial \epsilon_x / \partial x)_{y=0}$ 、を知ることは実験上興味がある。それは、(5-10)式において、 $\eta = 0$ とおくことにより求められる。すなわち、

$$\left(\frac{\partial \epsilon_x}{\partial x} \right)_{y=0} = \left(\frac{2P}{\pi E a^2} \right) \left\{ \frac{1}{(1+\xi)^2} - \frac{1}{(1-\xi)^2} \right\} \quad (5-12)$$

である。この値は、 ξ が負のとき正であり、 ξ が正のとき

負の値をとる。 ξ が ± 1 に近いところでは、前述のように $\pm \infty$ に近づく。四板の中心ではひずみ分布は零になる。

最後に、(5-7b)式で表わされる $\partial \varepsilon_y / \partial y$ の特徴を調べる。この分布は、 $\partial \varepsilon_x / \partial x$ の分布とは異なり、 x 軸に関して反対称である。そのとき x 軸が $\partial \varepsilon_y / \partial y = 0$ の軌跡になっている。一方、 y 軸に関しては対称である。また、圧縮変位の近くの葉形の形も異なり、その数も四つになっている。

5.2 動径圧縮を加えた正方形板のひずみ分布

前節で述べたように、動径圧縮を加えた四板のひずみ分布は、極座標を用いて解析的に求めることができた。これに対して、正方形板の場合には、動径圧縮を加えたとき境界上のどの点も同じ応力を受けているというわけではない。したがって、その応力状態を一つの応力関数で表わし、そのひずみ分布を解析的に求めることは困難である。しかしながら、正方形板の厚さに比べて一辺の長さが十分長いならば、圧縮変位近傍では半無限平板に集中応力を加えたときと同じひずみの分布が実現されているものと思われる。

したがって、回折の問題としては、正方形板の場合も、圧縮変位近傍のひずみ分布は(5-1)式の応力関数を用いて求めると十分良い近似になっていると考えられる。ひずみと

のものを厳密に求める目的には、このような考え方は許されないであろう。しかしながら、我々の考えようとする×線回折の問題では、ひずみの変化が問題になるのだから、このような考え方も可能である。実際に得られた回折トポグラフにおいても外形による差異はほとんど見い出されなかった。その真例は第七章に見られる。

しかしながら、厳密な解が得られればそれにこしたことはない。この種の問題を解くための一般論はいくつか提案されている。たとえば、正方形板をある種の極座標変換によって変換して応力分布を求める方法がある⁶⁰⁾。その方法によれば、正方形板上の任意の点における応力は求められるが、x軸およびy軸の概念が失われるため、我々が必要とするひずみ分布のx方向あるいはy方向の変化量を求めるには適しない。

一方、Timoshenko と Goodier の本⁵⁹⁾に、二次元応力問題を Fourier 級数を用いて解く一般的な方法が示されている。そこでは、y軸方向から加えたy軸に対称な応力を表わす応力関数として、

$$\phi = \cos \frac{m\pi x}{l} f(y) \quad (5-13)$$

を仮定している。この ϕ が倍調和方程式

$$\frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4 \phi}{\partial y^4} = 0 \quad (5-14)$$

を満すという条件から， $f(y)$ の満足する方程式，

$$\alpha^4 f(y) - 2\alpha^2 f''(y) + f^{(4)}(y) = 0 \quad (5-15)$$

を導く。ここに， $\alpha = m\pi/l$ である。この微分方程式の一般解として，

$$f(y) = C_1 \cosh \alpha y + C_2 \sinh \alpha y \\ + C_3 y \cosh \alpha y + C_4 y \sinh \alpha y \quad (5-16)$$

が得られる。(5-16) 式を (5-13) 式に代入すれば，応力関数が積分定数の関数として求められる。したがって，(5-3 a, b および c) 式の関係により σ_x , σ_y および τ_{xy} が定数係数 C_1, C_2, C_3 および C_4 を含む表式で与えられる。一方，結晶の境界に加えられた荷重が y 軸対称の場合には，

$$q = A_0 + \sum_{m=1}^{\infty} A_m \cos \frac{m\pi}{l} x \quad (5-17)$$

と展開できる。この外力と境界での応力が連続になるように定数係数を定めれば応力が求まる。その場合，(5-17) 式の荷重として集中応力の場合の展開係数を用いれば，我々の問題も級数和として求められる。ただし，具体的な計算はここでは行わなかった。結晶異方性の考慮の方がより重要であることが実験的に明らかにされたためである。

5.3 単結晶の弾性定数

5.1 および 5.2 節においては、物質は等方的であると仮定して議論を進めた。しかしながら、単結晶の場合には結晶方位によってその弾性定数は異っている。ここでは、弾性定数に関する一般論を述べ、その後で実験に用いた S_i 単結晶の弾性定数を求める。

一般に、直交三軸に関する弾性ひずみの各成分 ϵ_{ij} は、弾性応力成分 σ_{kl} の一次結合として、

$$\epsilon_{ij} = S_{ijkl} \sigma_{kl} \quad (5-18)$$

と表わされる。ここで、係数 S_{ijkl} は弾性定数と呼ばれるテンソルの成分である。また、 i, j, k および l はそれぞれ 1, 2 および 3 の値をとり、右辺の同じ文字のところは和をとることを意味する。さらに、

$$11 \rightarrow 1 \quad 22 \rightarrow 2 \quad 33 \rightarrow 3$$

$$23 \rightarrow 4 \quad 31 \rightarrow 5 \quad 12 \rightarrow 6$$

という縮約記号を用いれば、弾性定数は

$$S_{ij} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} & S_{15} & S_{16} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & S_{24} & S_{25} & S_{26} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & S_{34} & S_{35} & S_{36} \\ S_{41} & S_{42} & S_{43} & S_{44} & S_{45} & S_{46} \\ S_{51} & S_{52} & S_{53} & S_{54} & S_{55} & S_{56} \\ S_{61} & S_{62} & S_{63} & S_{64} & S_{65} & S_{66} \end{pmatrix} \quad (5-19)$$

と表わされる。ただし、ここで

$$S_{ijkl} = S_{mn} \quad m \text{ および } n \text{ が } 1, 2 \text{ ある いは } 3 \text{ のとき}$$

$$2 S_{ijkl} = S_{mn} \quad m \text{ ある いは } n \text{ のいずれかが } 4, 5 \text{ ある いは } 6 \text{ のとき}$$

$$4 S_{ijkl} = S_{mn} \quad m \text{ および } n \text{ の両方が } 4, 5 \text{ ある いは } 6 \text{ のとき}$$

という表現を用いることにする。

最も対称性の低い結晶系である三斜晶系の場合でも、ひずみエネルギーの関係から行列 S_{ij} は、対称行列になることが知られている。また、最も対称性の高い等方的な物質の場合には、 S_{ij} 行列は三つの弾性定数で表わされ、

$$S_{ij} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & & & \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & & & \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & & & \\ & & & S_{44} & 0 & 0 \\ & & & 0 & S_{44} & 0 \\ & & & 0 & 0 & S_{44} \end{pmatrix} \quad (5-20)$$

となる。これらの三つの弾性定数はたがいに独立ではなく、それらの間には

$$2(S_{11} - S_{12}) = S_{44} \quad (5-21)$$

という関係がある。ここで、 S_{11} の逆数がヤング率を表わし、 S_{11} と S_{12} の比の絶対値がポアソン比である。

立方晶系の場合の S_{ij} 行列は、 $[100]$ 、 $[010]$ および

[001]軸を直交三軸に選ぶならば(5-20)式で与えられる。ただし，等方的な場合のような条件はなく，三つの弾性定数はたがいに独立である。むしろ，

$$A \equiv 2(s_{11} - s_{12})/s_{44} \quad (5-22)$$

で表わされるAが1のとき等方的であるから，異方性因子と呼ばれる量Aが定義される。

$\langle 100 \rangle$ を基本とする座標系 x_j から任意の座標系 x'_i へ変換する方向余弦を a_{ij} で表わすと，

$$x'_i = a_{ij} x_j \quad (5-23)$$

と書ける。このように変換された座標系 x'_i における弾性定数行列 s'_{ij} は，もとの s_{ij} 行列から座標変換の方向余弦 a_{ij} を用いて次のように表わされる。

$$s'_{ijkl} = a_{ip} a_{jq} a_{kr} a_{ls} s_{pqrs} \quad (5-24)$$

通常，弾性定数としてデータが与えられているのは，(5-18)式を逆変換したときの係数 C_{ij} である。すなわち，

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \epsilon_{kl} \quad (5-25)$$

で与えられる係数である。立方晶系の場合には， C_{ij} と s_{ij} の間に次のような関係が成り立つ。

$$s_{11} = (C_{11} + C_{12}) / (C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12}) \quad (5-26a)$$

$$s_{12} = -C_{12} / (C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12}) \quad (5-26b)$$

$$S_{44} = 1/C_{44}$$

(5-26c)

試料として用いた S_i はダイヤモンド構造であるから、弾性定数行列は立方晶系のそれを用いて表わされる。 $\langle 100 \rangle$ を直交三軸としたときの弾性定数は、次のように与えられる⁶¹⁾。

C_{11}	C_{44}	C_{12}
16.57	7.96	6.39×10^{11} dynes/cm ²

これらの値を用いて、(5-26 a, b および c) 式の関係から S_{ij} を求める。その際、次の方位をそれぞれ記された順に座標軸として選んだ場合の値を求める。

$$A: [100], [010], [001]$$

$$B: [110], [\bar{1}10], [001]$$

$$C: [01\bar{1}], [\bar{2}11], [111]$$

それぞれの場合の行列を $(S_{ij})_A$, $(S_{ij})_B$ および $(S_{ij})_C$ と呼ぶことにする。

$\langle 100 \rangle$ 軸を直交三軸とする場合の行列, $(S_{ij})_A$, は

$$(S_{ij})_A = \begin{pmatrix} 0.768 & -0.214 & -0.214 & & & \\ -0.214 & 0.768 & -0.214 & & & \\ -0.214 & -0.214 & 0.768 & & & \\ & & & 0 & & \\ & & & & 1.256 & 0 & 0 \\ & & & & 0 & 1.256 & 0 \\ & & & & 0 & 0 & 1.256 \end{pmatrix} \quad (5-27)$$

となる。ここで、0は零行列を意味する。なお、ここに示された数値の単位は $\times 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{dyne}$ である。今後、弾性定数 S_{ij} はこの単位を用いて表わすことにする。

座標系 B は、座標系 A と (001) 面内で 45° 回転して得られるものであり、その弾性定数行列、 $(S_{ij})_B$ は

$$(S_{ij})_B = \begin{pmatrix} 0.591 & -0.037 & -0.214 & & & \\ -0.037 & 0.591 & -0.214 & & & \\ -0.214 & -0.214 & 0.768 & & & \\ & & & 0 & & \\ & & & & 1.256 & 0 & 0 \\ & & & & 0 & 1.256 & 0 \\ & & & & 0 & 0 & 1.964 \end{pmatrix} \quad (5-28)$$

となる。また、座標系 C に対する弾性定数行列、 $(S_{ij})_C$ は

$$(S_{ij})_C = \begin{pmatrix} 0.591 & -0.155 & -0.096 & -0.166 & & \\ -0.155 & 0.591 & -0.096 & 0.166 & & \\ -0.096 & -0.096 & 0.532 & 0 & & \\ -0.166 & 0.166 & 0 & 1.728 & & \\ & & & & 0 & \\ & & & & & 1.728 & -0.166 \\ & & & & & -0.166 & 1.492 \end{pmatrix} \quad (5-29)$$

となる。

第六章で述べる種々の結晶方位を持った正方形板結晶の弾性論的性質はこの三つの行列のいずれかで記述できる。その際に、(5-27)、(5-28)および(5-29)式に示された行列は、それぞれの場合に記されている順に直交三軸を選

んだときに得られることに注意する必要がある。又、 y および z 軸として、ここで採用したものは異なった順に選
びたいときには、対応する弾性定数行列を適当に取りかえ
て読みなおす必要がある。たとえば、(011)面を表面とす
る結晶板を考へ、それに垂直な軸を z 軸とし、 $[01\bar{1}]$ およ
び $[\bar{1}00]$ 方向をそれぞれ x 軸および y 軸に選ぶことにす
る。このとき、行列 $(s_{ij})_B$ は変換されて、

$$(S_{ij})'_B = \begin{pmatrix} 0.591 & -0.214 & -0.037 & & & \\ -0.214 & 0.768 & -0.214 & & & \\ -0.037 & -0.214 & 0.591 & & & \\ & & & 0 & & \\ & & & & 1.256 & 0 & 0 \\ & & & & 0 & 1.964 & 0 \\ & & & & & 0 & 1.256 \end{pmatrix} \quad (5-20)$$

となる。

一般に、弾性定数行列 s_{ij} は、採用された座標軸に関する結晶構造の対称性を反映している。 $\langle 100 \rangle$ 軸を直交三軸とする立方晶系の弾性定数行列が (5-20) 式のような単純な行列で表わされるのは、 $\langle 100 \rangle$ 軸に関する立方晶系の結晶の対称性が高いためである。結晶板の外形および応力を加える方向が上述の対称性を損わないならば、ひずみ分布もまた類似の対称性を持つ。また、弾性定数 $(s_{ij})_c$ を持つ結晶では、かなり複雑な変形が生じることが予想される。

一方, s_{11} の逆数, すなわちヤング率の大きさを結晶方位と一致させて極座標表示したものは, *representation surface* と呼ばれる。任意の結晶面内の *representation surface* がいかなる形をとるかを調べる。立方晶系の場合には, 基本座標系 A から任意の座標変換 a_{ij} を行ったとき, その座標系における弾性定数, s'_{11} , は

$$\begin{aligned} s'_{11} &= s'_{1111} = a_{1p} a_{1q} a_{1r} a_{1s} s_{pqrs} \\ &= (a_{11}^4 + a_{12}^4 + a_{13}^4) s_{11} + (a_{11}^2 a_{12}^2 + a_{12}^2 a_{13}^2 + a_{13}^2 a_{11}^2) (2s_{12} + s_{44}) \end{aligned} \quad (5-31)$$

となる。さらに, 方向余弦の間の関係式 $a_{11}^2 + a_{12}^2 + a_{13}^2 = 1$ を用いて変形すると,

$$s'_{11} = s_{11} - 2(s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44})(a_{11}^2 a_{12}^2 + a_{12}^2 a_{13}^2 + a_{13}^2 a_{11}^2) \quad (5-32)$$

となる。この式から任意の面における *representation surface* が求められる。 s'_{11} が最も大きくなるのは, $a_{11}^2 a_{12}^2 + a_{12}^2 a_{13}^2 + a_{13}^2 a_{11}^2 = 0$ となる $\langle 100 \rangle$ 方向である。また, 最も小さくなるのは, $a_{11}^2 a_{12}^2 + a_{12}^2 a_{13}^2 + a_{13}^2 a_{11}^2 = 1/3$ となる $\langle 111 \rangle$ 方向である。この結果は, S_2 の場合のそれぞれの行列においても確かめられる。

さらに, この *representation surface* に関する特徴

的な結果として、 $\{111\}$ 面内ではあらゆる方向に対してヤング率が同じになり、その representation surface は円になることがあげられる⁶²⁾。この結果は、次のようにして確かめられる。すなわち、 z 軸が $\langle 111 \rangle$ 軸となるような座標変換の行列は、

$$a_{ij} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} \end{pmatrix} \quad (5-33)$$

で与えられる。しかも、それらが方向余弦を表わすことに注意すると、

$$a_{11}^2 a_{12}^2 + a_{12}^2 a_{13}^2 + a_{13}^2 a_{11}^2 = 1/4 \quad (5-34)$$

という関係が得られる。この結果、(5-32)式の S_{ii} は、 a_{ij} に依存しない定数

$$S_{ii} = (S_{11} + S_{12})/2 + S_{44}/4 \quad (5-35)$$

となることが知られる。 S_{ii} の場合には、その値は $0.591 \times 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{dyne}$ である。

5.4 異方性を考慮にいれた弾性論

この節では、結晶方位によって異なった弾性定数を持つ単結晶が応力を受けたときいかなる変形をするかを考える。

結晶方位によって弾性定数が異なる場合には、同じ応力を受けたときでも方位によって生じるひずみは異なる。また、応力そのものが異方性の存在によって、等方的な場合とは異なることが考えられる。

5.1節で取り扱った問題では、結晶が等方的であると仮定したときには、円周上のすべての点で動径方向に等しい静水圧が加わるという条件が実現されていた。しかしながら、円板の各方向の弾性定数が異なっているときにもこれと同じ条件が成り立つか否かは疑問である。さらに、行列 (s_{ij}) のような弾性定数を持った結晶の場合には、たとえ外形は十分薄い結晶板でも平面応力状態が実現されるか否かすら疑問である。したがって、等方性と仮定して計算した応力に、方向によって異なる弾性定数を乗じてひずみを求める取り扱いでは不十分であると思われる。最初から異方性が存在したときの弾性論を展開して、応力あるいはひずみを計算することが必要であると思われる。しかしながら、このこと自体非常にむずかしい問題である。実際、我々が必要とする動径圧縮の問題を、異方性を考慮して取り扱った計算例は見い出すことができなかった。

異方性を考慮した弾性論の一般論として、平面応力問題

を取り扱ったものはいくつかある⁽⁶³⁾⁽⁶⁴⁾。異方性のある場合も弾性論が成り立つとするかぎりは、次の二つの条件式が満足されねばならない。一つは、物体の各部分における応力のつりあいから導かれる平衡条件式で、物体力を考えない平面応力問題の場合には、

$$\frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} = 0 \quad (5-36a)$$

$$\frac{\partial \sigma_y}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} = 0 \quad (5-36a)$$

と表わされる。他の条件は、ひずみ成分 ϵ_x, ϵ_y および γ_{xy} がたがいに独立ではないことを表わす適合条件式

$$\frac{\partial^2 \epsilon_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \epsilon_y}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 \gamma_{xy}}{\partial x \partial y} \quad (5-37)$$

である。

平面応力問題の場合には、(5-3)式で定義される応力関数を用いると、(5-36)の平衡条件式は必然的に満たされる。等方的な物質の場合には、*simple radial distribution* に対する応力関数は(5-1)式で表わすことができた。ところが、異方性のある場合には、同じ圧縮の問題も(5-1)式のような単純な応力関数で表わすことはできない。この場合には、(5-18)式を(5-37)式に代入して、各応力成分を応力関数中を用いて書き表わし、応力関数の満足する

微分方程式を求めると

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{K_1^2} \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{1}{K_2^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}\right) = 0$$

(5-38)

となる。ここで、 K_1 および K_2 は、弾性定数 S_{ij} を用いて表わされる定数である。異方性のない場合には、 $K_1 = K_2 = 1$ となり、(5-38)式は(5-14)式と同じ倍調和方程式になる。異方性のある場合には、 K_1 および K_2 はたがいに異なる定数であるから、(5-38)の微分方程式を解析的に解くことは容易ではない。したがって、数値計算法で解くかあるいは Fourier 級数で展開される応力関数を求めて、それから応力を計算し、ひずみ分布を求めていく手順をふまねばならない。しかしながら、本研究ではその具体的な計算は行われなかった。

第六章 実験装置および実験方法

この章では、X線回折装置、試料の作成法、試料に動径圧縮を加える装置およびそれらを用いて回折トポグラフを得る方法を記述する。

6.1 実験装置

本実験では、封じ切りの通常管球を取りつけた東芝製のX線発生装置を用いた。管球は直立させて、 6° の仰角でX線ビームをとり出した。ターゲット上の焦点の大きさは、 $1\text{mm} \times 10\text{mm}$ であるから、とり出したビームに対応する有効焦点は約 $1\text{mm} \times 1\text{mm}$ である。加速電圧は、管球のターゲットがAg, Mo およびCuの場合に、それぞれ50kV, 45kV および40kVであった。ビーム電流は、ターゲットの種類にはよらず約 10mA であった。

一部の実験は、理学電機製の微小焦点X線発生装置(D-4C)を用いて行った。ビーム電流は 0.7mA 、ターゲット上の焦点は約 $100\mu\text{m} \times 1\text{mm}$ であった。管球は水平に係り、同一面内で 6° の仰角でX線ビームをとり出した。この結果、前述の通常管球に比して数倍高い輝度を得られた。なお、この装置は開放型であるため、 $8\text{l}/\text{sec}$ の排気

速度のイオン・ポンプで絶えず排気して、昼夜連続運転を可能にした。定常状態に達したとき、その真空度は約 8×10^{-6} mmHg であった。

X線回折トポグラフは、通常の Lang カメラ¹⁾ を用いて撮った。単結晶X線回折スペクトロメータに、結晶と写真乾板とを同時に往復運動できる *Traverse* ステージが取り付けられている。ステージの駆動には、機械的な振動を避けるため同期電動器を使用した。また、ステージを固定して *Section* トポグラフを撮ることも可能である。

X線源と回折装置の配置を図 6.1 に示す。線源から出たビームのうち、管壁などで散乱されたものは第一スリットでさえぎられる。そのビームは結晶の直前(本実験では、幾何学的な制約から結晶の前約 5 cm)に置かれた第二スリットで細長い矩形型のビームに限られる。*Traverse* トポグラフを撮るときと、*Section* トポグラフを撮るときとは、スリットの中を変えてそれぞれ $150 \mu\text{m}$ および $30 \mu\text{m}$ とした。線源と第二スリットとの間の距離は約 40 cm であるから、水平方向の開き角はそれぞれ 1 分強と 20 秒弱である。前述のように線源が揺れを持ち場合でも、第一スリットでビームの中を 0.5 mm 以下に限れば、 $\text{K}\alpha_2$ 線と

K α_2 線 の分離は可能である。これに対して、垂直方向の周き角は、Traverse トポグラフの場合と Section トポグラフの場合で差はない。その値は、結晶の大きさによって決り、10 mm の高さの結晶の場合約 1° である。

Traverse ステージの中央に固定されたゴニオメタに結晶を取りつけ、X線回折トポグラフを得た。その際、露出時間が非常に長い（数時間から数十時間）から、その間に結晶あるいは乾板が動かないように注意する必要があった。昼と夜の温度差（最大で約 10°C）による動きを避けるため、回折装置全体をビニールテントでおおい、中の温度をサーミスタで検知し、電球の減滅を行って温度制御した。この結果、温度変化は 1°C 以内に留めることができた。

6.2 試料の作成法

材料として用いた Si 単結晶は、 $\langle 111 \rangle$ 軸を引き上げ軸とする直径約 23 mm の丸棒⁺であり、非常に高純度でかつ結晶転位はまったく含まれていない。その丸棒を輪切りにして、 $\{111\}$ 面を結晶表面とする円板試料を作成した。その円からののはずれは、最長半径と最短半径の差で比較し

⁺ この Si 単結晶は、Texas Instrument 社から市販されている。

て1%以内であった。また、表面が $\{100\}$ 、 $\{011\}$ あるいは $\{111\}$ 面になるように三種類の薄板を切り出して、正方形板試料を作成した。その一辺の長さは約11mmとした。なお、すべての板は約1mm厚に切り出した。

得られた試料の外形と方位をまとめて図6.2に示す。以後、それぞれの結晶を表わすのに図6.2に示したアルファベットを用いて、結晶(a)、結晶(b)、……と呼ぶことにする。第五章で述べたように、ひずみ分布の計算の容易さだけからすれば、すべて円形結晶にするのが望ましい。しかしながら、塑性変形を生じないで外形を円に成形することはかなり困難なことである。したがって、結晶(f)以外はすべて正方形板にした。得られた試料において、実際に成形された面と結晶方位との違いは最も大きい場合で約2°であった。これは、Lane写真を撮るか、あるいはBragg反射を生じる角度を調べるかして確かめられた。

結晶板は、アルミナで研磨して加工層を除去し、同時にカッターの刃のぶれによって落ちていた平行性を高めた。この操作は、ガラス板上で手仕上げによって行った。アルミナの粒度は、#400から順次#800、#2000および#3000と細かくした。最終的には、結晶の厚さは約0.8mmとし

た。場所による厚さの違いは、 $5\mu\text{m}$ 以下におさえることができた。正方形板結晶の側面は、結晶を立方体の治具にビース・ワックスではりつけて研磨した。研磨を終った結晶は、 $\text{HF}:\text{HNO}_3 = 1:9$ の液で3~5分間エッチして、表面研磨層数 $10\mu\text{m}$ を取り除いた。

作成された試料は、*Traverse* トポグラフを撮ってその完全性を調べた。まれに、結晶の縁の部分で異常な回折強度が認められることがあったが、大部分は一樣な回折強度を示し、完全結晶であることが確かめられた。

6.3 実験方法

結晶にひずみを与える装置の概略を図6.3に示す。四板あるいは正方形板の水平二等分面に金属製のくさびをあてて、動径圧縮による変形を生じさせた。くさびとしては必要に応じて次の三種類のものを使用した。一つは、ステンレス製の先端が鋭い直線状のくさびである。このくさびを“*S*くさび”と呼ぶ。また、アルミ棒の先端をすりこぎ状に丸くつぶしたものも使用した。これを“*D*くさび”と呼ぶ。さらに、先端が鋭く尖った“*P*くさび”もまれに使用した。第五章で仮定した集中応力が加えられるという条件は、*S*くさびを用いたとき最もよく満たされている。このこ

とを考慮して、くさびを最も多く使用した。実験結果を示すときも、DあるいはPくさびを使用したときにだけ、その形を明示することにする。なお、Traverseトポグラフにおいては、表面反射(7.1節参照)の生ずる側に、くさびの影(吸収による白い抜けあがり)が認められる(たとえば図7.2(c)の右側、7.2(d)の左側)。したがって、その形をすぐに判別できる。

動径圧縮に要した力の大きさは、ロード・セル型の半導体ひずみ計[†]を用いて測定した。その動作原理を書くと次のようになる。くさびの他端がロード・セルの腹の部分を押すようにしてあるから、ねじでセル全体を押したときくさびに力が加わり、セルの腹に張ってある隣青銅の板が変形する。板の変形を半導体ひずみ計の抵抗変化でおきかえ、それに電圧を加えて電流変化として読みとるわけである。一方、ロード・セルだけを取りはずして、荷重の大きさと電流の関係をあらかじめ較正することができる。その較正曲線の例を図6.4に示す。その直線性は、後述の使用範囲

[†] このひずみ計は、豊田中央研究所の五十嵐伊勢美氏にその製作をお願いした。半導体ひずみ計およびその応用に関する研究は、同氏の学位論文(名大,工学部)に詳しい。

では非常によいことがわかる。

実験は、ほとんどの場合、荷重の大きさは固定して回折条件だけを変えて行った。とくに断わらない限り、第七章以降に示す実験結果は、円板結晶のとき約2.5 kg重、正方形板結晶のとき約1 kg重の力を加えて得られたものである。

(5-1) 式で用いた1 cm 厚さあたりの荷重になおすと、結晶の厚さは0.8 mm であるから、それぞれ $P=31 \text{ kg/cm}$ および 13 kg/cm となる。これらの荷重の比と、円板の直径と正方形板の一辺の長さの比はほぼ等しいから、圧縮点から同じ割合だけ離れた場所のひずみ勾配の大きさは、両者で同程度の値をとると考えられる。

結晶の取りつけに際しては、動径圧縮の条件ができるだけよく満足されるように注意した。正方形板結晶の場合には、その中心線にくさびがあたるように注意した。円板結晶の場合には、直径上で圧縮したとき、その方向が問題にしようとする観平面に垂直でなければならぬ。この条件をできるだけよく満足させるために、次のような方法を試みた。試料を取りつけて Bragg 反射を探し、そのロック・カーブが最も鋭くなるように方位角を調整する。この状態で入射波による Traverse トポグラフを撮り、試

料ならびにくさびの影から、くさびの先端が円の直径上にあるか否かを確かめる。その像に入射波の像(網平面と平行)を重ねて撮ったとき、それとくさびの先端と結ぶ線が直角であれば必要な条件が満たされていると言える。直角でないときには、直角になるまでこの操作を繰り返した。

図6.3から予想されるように、幾何学的な制約により、X線回折トポグラフとしては鉛直軸を晶帯軸とする網平面によるものだけが得られた。言いかえれば、反射ベクトルはすべて圧縮方向と同じ赤道面内にある。第七章以降に示す回折トポグラフは、特別の場合を除けば、X線入射の側から見た状態のものを示す。

Bragg 反射波の強度は、シンチレーション・カウンタで測定し、ロッキング・カーブが最も鋭くなるように方位角を調整し、 $K\alpha_1$ 線のピーク位置に結晶の回転角を固定した。通常は、結晶の後3cmの位置に原子核乾板を置いて回折トポグラフを得た。原子核乾板としては、Ilford社製のタイプL4, 100 μm 厚のものを使用した。現像にはD196液を用い、30分間0°Cに保ちゼラチン膜の内部まで現像液を浸透させ、その後30分かかって8°Cまで上げて現像した。それを30分間停止液に浸し、3時

る。Cu, Mo および AgK α 線によって得られた *Traverse* トポグラフをそれぞれ図 7.1, 7.2 および 7.3 に示す[†]。

写真の黒い部分が回折強度の強い領域を表す。円板の像が二つに別れているのは、結晶が大きくその *Traverse* トポグラフを一枚の乾板に撮れなかったためである。

これらのトポグラフに見られる強度領域は、第五章で計算したひずみ勾配の分布を表す図 5.2 に類似して、圧縮方向近くで五つの葉形に分かれている^{††}。相隣る葉形の領域は交互に黒および白のコントラストを示す。しかしながら、個々のトポグラフは吸収の大きさおよび反射の条件に応じ

[†] 結晶の大きさはすべて同じであるから、一部の図にだけその寸法を記入した。図 7.2 および 7.3 では、一様な強度を示す上端、下端および中心部を切り落して示した。また、番号を附した矢印は、後述の *Section* トポグラフが撮られた位置を表す。

^{††} 葉形の数を五つと見るのは少し困難かもしれない。とくに、円周を含む一番外の葉形の幅がりは図 5.2 にも見られるように非常に狭く、識別し難い。また、葉形が白のコントラストを持つときもそれを葉形とは認め難い。しかしながら、そのような場合でも、反射ベクトルの向きを逆にしたトポグラフで同じ場所のコントラストを比較すれば、五つの葉形が存在することが確かめられる。

同定着した後、水洗して乾燥した。

Traverse トポグラフの露出時間は、 $A\alpha$ および $MoK\alpha_1$ 線などの吸収の少ないX線を用いたとき、約 2 hr/mm であった。高次の反射では、その2倍以上の露出が必要であった。 $CuK\alpha_1$ 線の場合は吸収が大きいため、低次の反射でも、 10 hr/mm の露出を要した。Section トポグラフの場合には、第二スリットを狭くして使用したため、単位の中あたりの露出は長くなった。吸収が少くかつ低次の反射を用いたときでも、30分程度の露出を要した。

結晶に加える力を除いて回折トポグラフを撮ると、多くの場合、結晶全体にわたって一様な回折強度が得られた。しかし、まれには力を除いた後も、くさびの触れていた近傍に強い回折強度が認められた。これは、くさびの触れていた近傍だけ塑性変形したことによるものと思われる。しかしながら、一般にこの方法で結晶を変形させたときに得られる回折トポグラフは弾性変形によるものと言える。

写真法による観測だけでなく、必要に応じてカウンターの前に 0.2 mm の高さのスリットを置き、結晶の任意の場所における回折強度をシンチレーション・カウンターで測定した。その強度測定の誤差は5%以内であった。

第七章 実験結果

この章では、動径圧縮を加えた結晶によって得られたX線回折トポグラフについて述べる。結晶全体に関する情報を得るために *Traverse* トポグラフを利用し、個々の場所に関する情報をより詳しく得るために *Section* トポグラフを利用した。入射X線の波長の違いや結晶方位の違いによるトポグラフの差異を、おもに *Traverse* トポグラフに基づいて論じる。とくに、回折トポグラフのコントラストと、*Pendellösung* 縞の振舞いに重きを置く。

7.1 黒および白のコントラスト

ここで用いる黒および白のコントラストの意味は、(3-44a および b) 式で定義されたものと同じである。一般に、黒および白のコントラストは、与えた結晶による回折トポグラフすべてに認められる。本研究では、とくに四板結晶 (f) と $[01\bar{1}]$ 方向から圧縮した場合について、そのコントラストを系統的に調べた。この節では、結晶 (f) の $0h\bar{h}$ 反射 ($h=2, 4$) および $0\bar{h}h$ 反射[†] の結果を述べる。なお、この面 $10h\bar{h}1$ は対称 *Lane* の条件を満してい

[†] 以後、 g 反射と \bar{g} 反射をまとめて $|g|$ 反射と書く。

て著しく異なっている。とくに、 σ 反射と π 反射とで同じ場所の回折強度を比較すると、黒および白のコントラストが逆転していることがしばしば認められる。これは Friedel 則背反の現象にほかならない。以後、この現象も含めて、吸収の大きい場合と小さい場合に分けて記述する。

なお、ここで吸収の大きさには依らずにトポグラフ一般に見られる現象に注意しておく。その一つは、たとえば図 7.1 (a) の上部に見られるような水平な白い線についてである[†]。これは、問題にしている網平面とは異なった網平面による同時反射が生じて、その抜けあがりの軌跡が現われたものと考えられる。この線がトポグラフの端(102面)に平行)に対してほとんど垂直であることから、結晶の取り付けがよい精度でなされていることがわかる。この種の同時反射の軌跡と思われる白線は、以下に示すトポグラフにおいてもしばしば認められる。それらは、結晶の取り付けおよび正方形板結晶の場合にはその結晶方位と外形との一致の精度などを確かめる目安となる。

その二は、しばしば田の外周が非常に強い反射強度を帯

† 入射 X 線に平行な方向の結晶の方位角を変えると、白い線の生じる位置が上下に変化する。

つことである（たとえば図 7.1(a) の右側および 7.1(b) の左側）。これは，結晶の側面が Bragg 条件を満足して入射線を反射した強度と考えられる。いわゆる表面反射であるから，吸収を受けないため通常の透過回折像に比して強度が強い。表面反射が生じるのは，反射ベクトルの先端の方向と一致することに注意すると，以下の写真を見るときに便利である。

(a) 吸収の大きい場合

S_z による $CuK\alpha_1$ 線の吸収は大きく， 0.8 mm 厚の結晶で $\mu_0 t$ は約 12 になる。この場合の $102\bar{2}$ 反射の例が図 7.1 に示されている[†]。円板の中心近く (r_1 および $r_2 \leq 0.5a$) の強度はほとんど一様である。したがって，その領域は一様なひずみを持った領域とみなすことができる。それに対して，圧縮変近くの領域 (r_1 および $r_2 \leq 0.1a$) では反射強度はほとんど零である。弾性論の計算によれば，この領域におけるひずみ勾配は $8 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ より大きい。この白のコントラストは，反射ベクトルを g から裏の反射面に変えても変化しない。この事実を，吸収の大きいとき

[†] この場合， $102\bar{2}$ 反射に対する Bragg 角は約 23° であり，実験装置の制約からその高次反射は得られなかった。

転位の像が白く抜けおがり，それが φ 反射と $\bar{\varphi}$ 反射とで変わらないことと類似である³⁸⁾。 φ 反射と $\bar{\varphi}$ 反射とでともに白のコントラストを与える場合を，白-白のコントラストと呼ぶことにする。

上述の二つの領域の間では，葉形の領域は黒あるいは白のコントラストを示す ($0.1a \leq r_1$ あるいは $r_2 \leq 0.5a$)。同じ領域に注目して， φ 反射と $\bar{\varphi}$ 反射のコントラストを比較すると，黒は白にそして白は黒に変わっていることが確かめられる。たとえば，図 7.1(a) の左側で，カを加えている軸を含む領域のコントラストは白であるが，その裏の反射 (図 7.1(b) の左側) では，同じ領域が黒のコントラストを示す。このように， φ の向きを変えることによって，黒および白のコントラストがいれかわる場合を黒-白のコントラストと呼ぶ。

別の見方をして，たとえば図 7.1(a) の左右のトポグラフを比較すると，対応する場所のコントラストが逆転していることがわかる。さらに，図 7.1(a) の左側(右側)と図 7.1(b) の右側(左側)とは，垂直な中心線に関して対称である。これらのトポグラフとひずみ勾配の計算結果 (図 5.2) とを比較すると，コントラストの逆転に対する次

のような規則性が得られる。すなわち、

$$\partial \epsilon_x / \partial x > 0 \quad : \text{白} \quad (7-1a)$$

$$\partial \epsilon_x / \partial x < 0 \quad : \text{黒} \quad (7-1b)$$

である。ここで、 x 軸は反射ベクトルに平行であり、その向きを正にとっている。裏の反射の場合は x 軸の向きが逆になるから、 $\partial \epsilon_x / \partial x$ の符号も必然的に逆になる。

このように、弾性論から予想されるもの(図5.2)と比較的類似のトポグラフが得られたわけであるが、細かい点では二三の相違が認められる。一つは、圧縮軸に関して上下の対称性がやや悪いことである。これに関連したことは次節以下に詳しく述べる。他の一つは、圧縮軸を含む葉形の領域の振がりの角度が理論から予想されるものより狭いということである。

(b) 吸収の小さい場合

M_0 および $AgK\alpha_2$ 線を用いた場合、 0.8mm 厚の S_i に対して μ_0 はそれぞれ1.3および0.6になる。この値は Cu の場合に比べると一桁小さく、吸収の小さい場合と言える。 $M_0K\alpha_1$ 線による $Transverse$ トポグラフ(図7.2)と $AgK\alpha_2$ 線によるそれ(図7.3)はほとんど同じである。したがって、とくに断わらない限り両者を区別しないで述べる。

結晶の中心近くでは、Cuの場合と同様、一様な強度が認められる。一方、変形の最も激しい領域は、反射ベクトルの向きとは無関係に非常に大きな強度を示す。Cuの場合の白-白のコントラストに対応して、このコントラストを黒-黒のコントラストと呼ぶ。適当に乱れた領域では、関係式(7-1 a および b)とまったく同じ規則に従う黒-白のコントラストが認められる。対称性に関しては、Cuの場合と類似であるが、右半分の上下の対称性はCuの場合より悪い。

Cuの場合と大きく異なる点は、白の葉形の領域の中にも小さな黒いコントラストの領域が認められることである。その黒い領域は、圧縮変に近づくにつれて強度が増大している。一般的には、Moの方がAgの場合に比して、黒-白のコントラストの生じる領域は広い。しかしながら、白のコントラストの領域の中に生じる黒のコントラストの振がりは、Agの方がMoの場合より大きい。このことは、図7.3(a)の圧縮軸を含む領域において最も顕著である。すなわち、図7.2(a)の左側では圧縮軸を含む葉形は白のコントラストを示すが、図7.3(a)ではわずかに黒のコントラストを生じている。

高次の反射1044の *Traverse* トポグラフ (図7.2(c), (d) および図7.3(c), (d)) は, 低次反射のそれ (図7.2(a), (b) および図7.3(a), (b)) とよく対応している。ただし, 黒-白のコントラストを示す中間領域は, 高次反射では r_1 あるいは r_2 が約 $0.8a$ のところまで広がっている。それとともに, 前述の白の領域の中に生じる黒のコントラストも広い領域として現われている。しかし, これを新しい葉形の領域の出現と見る必要はないことは, 8.1節で詳しく述べる。これらの実験から, 高次の反射ほどひずみに対して敏感であることがわかる。

葉形の等高線のような縞がしばしば認められる (たとえば, 図7.2(b), (c))。これは8.2節で詳しく説明する *Pendellösung* 縞である⁽²⁾⁴¹⁾。この *Pendellösung* 縞は白のコントラストの領域の方がよりはっきりと認められる。また, 高次の反射ほど広い領域にわたって縞が認められる。ちなみに, 平行板完全結晶の場合には一様な回折強度しか得られず, *Pendellösung* 縞は観測されないはずである。

(c) 強度測定

回折強度をより定量的に調べるために, 6.3節で述べた方法によって, 圧縮軸上の Bragg 反射波の強度を測定し

た。その測定結果を図7.4に示す。結晶の中心附近の測定
の平均値と完全結晶の強度とみなして、その値で規格化し
た強度がプロットされている。また、MoおよびAgK α_1 線
の場合に対しては、円板の左半分の部分に対応する値だけ
を示す。

強度測定は回折トポグラフの場合と同様、 $P=31 \text{ kg/cm}$
の圧縮荷重の下に行われた。このときの圧縮軸上のひずみ
勾配の大きさ $(\partial \epsilon_x / \partial x)_y=0$ は、(5-12)式を用いて計算さ
れる。Siのヤング率としては、(111)面内の値 $1.69 \times$
 $10^{12} \text{ dynes/cm}^2$ を用いた。圧縮軸上の各場所でのひずみ
勾配が求まれば、(2-24)および(3-7b)式を用いて ϵ の
値を計算することができる。なお、この ϵ の値は入射X線の
の波長に依存して異なった値をとる。

本実験に対応する吸収のパラメータ M を与えたときの強
度曲線は図3.8に示されている。その図から、 ϵ に対応す
る強度を読みとれば、圧縮軸上の各点に対応する理論強度
が得られる。こうして得られた理論曲線も同じ図7.4に示
されている。実線がORR反射に対する理論曲線であり、
黒丸がそれに対応する実験結果である。破線と白丸がORR
反射に対する理論曲線と実験結果を表わす。実線と破線は

長がいに中心 ($x=0$) に関して対称である。

図 7.4 から、定性的には理論と実験の間の一致は良いと言える。とくに、吸収の大きい Cu の場合の方がその一致の度合いが良い。吸収が小さい場合の測定結果においては、表面反射の生ずる側の圧縮近づくに非常に鋭い強度の落ちが認められる。この強度の落ちは、対応する *Traverse* トポグラフにおいても認められる。しかしながら、少なくとも等方性物体の弾性論をもとにした理論からは、このような強度の落ちは期待されない。理論と実験の間のこの差異は、結晶異方性の考慮あるいは、圧縮近傍の弾性論で取り扱える範囲を越えた乱れによって説明されることが期待される。

(d) *Section* トポグラフ

この節の (a) および (b) で述べた *Traverse* トポグラフに対応する *Section* トポグラフの特徴をここでまとめて述べる。 Cu の線による *Section* トポグラフの例を図 7.5 に示す。図 7.5 (a) および (b) は、それぞれ図 7.1 (a) および (b) の左半分の適当な位置で撮った *Section* トポグラフである。図 7.1 と図 7.5 は同じ倍率で示されているから、図 7.1 の圧縮方向に垂直な弦の長さがそのまま *Section*

トポグラフの縦方向の長さに対応する。したがって、両者を比較することによって、Section トポグラフの撮られた位置がわかる。なお、二三の場合に、Traverse トポグラフに Section トポグラフの撮られた位置を矢印で示した。そこに対する番号は、Section トポグラフに付けた番号と一致する。今後、このような表わし方をする。

これらの Section トポグラフは中心線(図 7.5 のいくつかの Section トポグラフに ∇ で示す)上で最も反射強度が強く、中心線から離れると急激に減少し、いわゆる margin ではその強度はほとんど零になる。これは、Borrmann 吸収が生ずる場合に特徴的な現象であり、図 3.7 (e) および (f) から理論的にも予想されることである。また、Pendellösung 縞は観測されない。吸収が大きい場合の完全結晶に特徴的な現象が、乱れた結晶の場合にも認められることが知られる。

一方、図 7.5 では上述の特徴の他に、Traverse トポグラフで観測された黒および白のコントラストに対応する強度が観測される。Section トポグラフの場合も (3-44 a および b) 式の定義と類似して、完全結晶の Section トポグラフの強度より大きいとき黒のコントラスト、小さい

いとき白のコントラストと呼ぶことにする。この定義によれば、図7.5(a)では中心線Dに沿って、上から下へ黒-白-黒のコントラストが認められる。これらのコントラストが認められるよりもさらに上方あるいは下方の強度は一樣であり、完全結晶の強度と考えられる。逆に、裏の反射(図7.5(b))では、白-黒-白のコントラストが認められる。圧縮率に近い位置で撮られたSection トポグラフではこれらの規則性がくずれて、黒のコントラストは観測されない。Traverse トポグラフに見られた黒および白のコントラストは、このSection トポグラフに見られる黒および白のコントラストを重ねあわせたものと考えられる。なお、これらのSection トポグラフの中心線Dに関する左右の対称性ならびに上下の対称性は比較的良い。

これに対して、吸収の小さい場合のSection トポグラフはかなり複雑である。MoK α_1 線による $\{02\bar{2}\}$ 反射の例を図7.6に示す。これに対応するTraverse トポグラフは、図7.2(a)および(b)の左半分である。図7.6のうちのいくつかを4倍に拡大したものを図7.7に示す。また、AgK α_1 線の $\{04\bar{4}\}$ 反射の例を図7.8に示す。この倍率は、図7.7の場合と同じである。

これらの Section トポグラフの一般的な特徴は、黒および白のコントラストが認められることと、Pendellösung 縞および margin における回折強度の増大 (margin 効果) が認められることである。後の二つの現象は、吸収の小さいときに特有のものである。完全結晶ならば、Pendellösung 縞は margin に平行になるはずであるから、図 7.7 および 7.8 に見られるかぎ形や楕円形の縞は結晶の乱れによるものである³²⁾。margin の強度も、完全結晶の場合のように、上から下まで一様であるわけではない。

この場合の黒および白のコントラストの現われ方は、Cu の Section トポグラフと類似である。圧縮点から十分離れた位置で撮られた Section トポグラフは Cu の場合とよく対応しており、中心線に關する対称性と上下の対称性も比較的よい。しかしながら、力を加えていると近くなるとトポグラフは複雑になり、上下および左右の対称性はなくなる。さらに圧縮点に近くなると、非常に強い強度を持った線状の領域が中心線上に現われ、その両側にめだす状の強度領域が現われる³²⁾。これらの非常に強い強度領域のまわりでは、極端に弱い回折強度が観測される。

低次の反射に比して、高次の反射では強度の現われ方も

より複雑になる。しかし、黒および白のコントラストが現われる様子は低次反射の場合と類似である。また、*Pendel-lösung* 縮も高次反射の場合の方が乱れの増大とともにその数が増し、より複雑になることがわかる。

7.2 結晶の対称性と *Traverse* トポグラフの対称性の間の関係

前節 (a) および (b) において、吸収の大小に依存する *Traverse* トポグラフの特徴について述べた。その結果、コントラストは吸収の大小によって著しく異なるが、葉形の形は、吸収の大きさが変わっても変わらないことが明らかにされた。ここでは、異なった結晶方位を持つ試料によって得られた *Traverse* トポグラフについて論じる。なお、簡単のため圧縮方向に垂直な対称 *Laue case* のトポグラフだけを問題にした。また、葉形の特徴が認めやすいという意味で、おもに $M\alpha_1$ 線を使用した。この節では、結晶構造の対称性とトポグラフの対称性の間の関係に重点を置いて述べ、図形としての特徴は次節で詳しく述べる。

最初に、図 6.2 の結晶 (c) を用いて得られた $04\bar{4}$ 反射の *Traverse* トポグラフ (図 7.9 (a)) の特徴を調べる。高次反射の例を最初に示したのは、図形の特徴が見やすい

ためである。そのトポグラフの上下の対称性は非常によい。一方、この結晶(c)の水平および垂直な細平面(100)および(011)は、ともに結晶構造に対する mirror 対称面になっている。圧縮の幾何学的配置もその両方の面に周して対称である。この観察から、トポグラフの垂直二等分線に周する左右の対称性を見ると、一見したところ対称性はないように思われる。しかしながら、前節で述べた黑白逆転の現象を思いおこすと、そのトポグラフは左右反対称であることがわかる。このことは、裏の $0\bar{4}4$ 反射の Traverse トポグラフ(図7.9(b))によっても確かめられる。また、同じ結晶(c)の低次反射 $102\bar{2}$ においても同様の対称性が認められた。図7.10(a)にその一例を示す。

次に、結晶(e)の $\{422\}$ 反射の Traverse トポグラフを調べる。ちなみに、この結晶の(011)面は mirror 対称面であるが、それに垂直な(211)面は mirror 面ではない。図7.11(a)および(b)に見られるように、トポグラフの上下の対称性は非常によい。しかしながら、右と左では黒-白の逆転を考慮しても、図7.9および7.10に見られたような明瞭な反対称性は認められない。次節で詳しく述べるが、結晶の入射面と出射面とをとりかえた場合も、対称

性に関しては同じ結果が得られる[†]。

一方、同じ結晶の10R系[†]反射では、上下の対称性はそれほどよくないが、左右の対称性は非常によい(図7.12および7.13)。図7.1から7.3までの Traverse トポグラフも、結晶の外形は異なるがこれと同じ別と見ることが出来る。両方のトポグラフと比較すれば、第五章で述べたように、円と正方形という外形の違いは本質的なものではないことは明らかである。この結晶(e)あるいは(f)の場合にも、結晶学的な mirror 対称面がある場合にはトポグラフも対称であることが結論される。逆に、mirror 対称面がない場合にはトポグラフの対称性もない。

結晶の対称性とトポグラフの関係をより明確にするために結晶(d)を用いた一連の Traverse トポグラフを撮った。この結晶においては、mirror 対称面は水平あるいは垂直な二等分線に対して30°あるいはその余角をなしている。したがって、圧縮軸は mirror 対称面には含まれない。その場合の Traverse トポグラフの例を図7.14

[†] この反射を *reciprocal* という意味で R_g 反射と表わすことにする。なお、*reciprocal* な反射によるトポグラフはすべて、*standard* な反射のトポグラフと場所的対応がつかうように、得られた乾板を裏表逆に焼き付けて示す。

に示す。 $\{4\bar{2}2\}$ および $\{71\bar{7}\}$ 反射の両方の場合に、上下
および左右のいずれの対称性も認められない。

このようにして、結晶の対称性とトポグラフの対称性の
間には、一対一の対応があることが知られた。この結果を、
さらに裏付けるものとして、上記以外の結晶で水平および
垂直な *mirror* 対称面を持つ結晶による *Traverse* ト
ポグラフを撮った。図 7.15 は、結晶 (b) の $\{220\}$ 反射の
Traverse トポグラフである。その葉形の特徴は、図 7.9
および 7.10 とは非常に異なるが、対称性という点では同
じ性質を示す。これと類似の *Traverse* トポグラフは、結
晶 (a) および (c) の $\{400\}$ 反射によっても得られた。そ
の例を図 7.16 および 図 7.17 に示す。ただし、図 7.16
の場合は少し対称性が悪い。なお、図 7.17 は図 7.9 およ
び 7.10 を得たのと同じ結晶を用いて撮られたことに注意
する必要がある。その圧縮方向および使用した観平面が
 90° 異なっているだけでまったく異なった図形が得られた
わけである。

7.3 結晶方位の違いと *Traverse* および *Section* ト ポグラフの間の関係

この章の第一節および第二節で述べた *Traverse* トポグ

ラフは、その葉形の特徴によって次の三つに類別される。一つは、理論から期待されるものと比較的類似の図形で、圧縮点近くでそのコントラストを持つ領域が五つの葉形にわかれている。第二のグループのトポグラフでは、その葉形の領域は三つに分かれている。このいずれにも属さないトポグラフにおいては、葉形の領域そのものがはっきりしないことが多い。それを第三のグループとする。いずれのグループに属する *Traverse* トポグラフでも、結晶の同じ場所に注目して、裏表の反射によるコントラストを比較したときその相違が認められた。すなわち、*Friedel* 則背反の例は、葉形の図形の違いにはよらずにいつも認められた。

この節では、それぞれのグループに属するトポグラフの特徴を述べ、力を加えるくさびの形の違いの影響についても述べる。その際、対応する *Section* トポグラフも参照しながら結果を述べる⁺。

十 ほとんどの場合、*Section* トポグラフと *Traverse* トポグラフは同じ倍率で示す。*Section* トポグラフの撮られた位置は、矢印 1, 2, ... で示されている。*Traverse* トポグラフを示さない場合も大体同じ位置で撮られた。その位置は、*Section* トポグラフと *Traverse* トポグラフとを比較すれば、ある程度は予想される。

(a) 葉形が五つにわかれる場合

このグループに属するトポグラフは、結晶(c), (e)および(f)の $\{10\bar{1}1\}$ 反射によって得られた。この場合には、異方性を考慮しない弾性論から期待されるものと類似の葉形の図形が得られた。しかし、7.1節でも述べたように、面かけ角ではかなり差がある。とくに、結晶(c)の低次反射(図7.10)では、圧縮軸を含む領域のコントラストはほとんど認められず、葉形とは認め難い。高次の反射では、その領域もコントラストを持つが、表面反射の生ずる側に鋭い強度の落ちが認められる。7.1節に述べたように、この結果は、少なくとも等方性物体の弾性論からは予想できないことである。また、高次反射の完全結晶領域に近い部分に、弱い黒白のコントラストを示すあばた像が多数認められる(たとえば図7.9)。とくに、それは必ず黒のコントラスト領域において顕著である。この現象に関しては、8.5節(c)の後半に詳しく述べる。

この結晶(c)の場合には、くさびの形が変わるとトポグラフもかなり異なったものになることが確かめられた。すなわち、図7.9(c)に見られるように、Dくさびで圧縮したとき、圧縮軸を含む領域のコントラストは高次反射である

にもかかわらぬかなり不明瞭である。しかし、 D くさびで圧縮した場合には、図 7.10 (b) に見られるように図 7.10 (a) と相似のトポグラフが得られた。

同じ結晶 (c) の Section トポグラフにおいても、くさびの差による図形の差が認められた。図 7.18 は、 S くさびで圧縮した場合の $\{02\bar{2}\}$ 反射の Section トポグラフの例である。結晶端に最も近い位置で撮られた Section トポグラフ (図 7.18 (a) および (b) の左右の端に示す) を除けば、その中心線 D に関する左右の対称性は非常によい。上下の対称性も、*Traverse* トポグラフの場合と同様、非常によい。これに対して、 D くさびで圧縮した場合には図 7.19 に見られるように、中心線 D に関する対称性は図 7.18 の場合ほどよくない。この場合も、上下の対称性は非常によい。

結晶 (e) の Section トポグラフには、円板結晶 (f) の場合 (図 7.6, 7.7 および 7.8) と類似の特徴が見られる。その例を図 7.20 に示す。この場合には、上下および左右

十 これ以外の方角を持った結晶の Section トポグラフすべてにおいて、中心線 D に関する左右の対称性は、この場合ほどよくなかった。

の対称性いふれもよくない。しかしながら、回折条件を変えたとき、左右の強度非対称はある規則に従って生じることが明らかになった。すなわち、反射ベクトルの向きを変えると強度は左右逆転することがわかる。ここで、図7.21に示した入射波の側および Bragg 反射波の側[†]という定義を用いれば、 \mathbf{g} ベクトルの向きを変えても強度の強い側は変化しないと言える。たとえば、図7.20において、結晶の右上の部分では D-側の強度が強い。それは、図7.20(a)および(b)に見られるように、 \mathbf{g} ベクトルの向きを変えても変わらない。ところが、結果は示さなかったが、図7.20の *reciprocal* な反射では対応する場所で、B-側の強度の方が強いことが明らかにされた。

このように、*standard* な反射(図7.21参照)と *reciprocal* な反射で強度の強い側がいれかわり、 \mathbf{g} ベクトルの向きの変換ではそれが変わらないという規則性は、以下に示す Section トポグラフでもしばしば観察された現象である。この結果は、入射面と出射面が同等でないこと、すなわち、結晶の深さ方向のひずみ分布の変化を示唆する。

[†] 反射ベクトルの矢印の先端の側が Bragg 反射の側である。以後、D-側および B-側と呼ぶことにする。

したがって、Traverse トポグラフを *reciprocal* な条件で撮ってみる必要がある。その結果が、図 7.12 (c) および (d) に示されている。この場合の Traverse トポグラフでは、*standard* な反射と *reciprocal* な反射の差はないことがわかる。

(b) 葉形が三つに分かれる場合

このグループに属する Traverse トポグラフは、圧縮軸の近くで三つの葉形のコントラスト領域を持つ。圧縮軸を含む領域のコントラストは、この節の (a) に述べた五つの葉形に分かれる場合のそれと逆である。すなわち、表面反射を生ずる側の葉形が白のコントラストを持ち、その中に黒い小さなコントラスト領域 (7.1 節 (b) 参照) が生じる。これらのトポグラフは、前節 (7.2 節) の最後に述べたグループの結晶によって得られた。それらのうち、結晶 (a) の ± 400 反射 (図 7.16) だけは他のものと少し異なる。たとえば、圧縮軸を含む領域に見られる *Pendellösung* 縞は、他の例 (図 7.15 および 7.17) に比して、上下の対称性が悪い。

くさびの形の違いは、コントラストの領域の拡がりの角度に影響を及ぼす程度であり (図 7.15 および 7.17, あ

るいは図7.22(a)参照), この節の(a)に述べたような本質的相違いはひきおこさない。一方, 結晶(b)は圧縮方向を 90° 回転しても, まったく同等な結晶構造を持つ。その場合, トポグラフも図7.15と類似のものが得られることを, P くさびを用いた場合を例として示す(図7.22(b))。同じ結晶(b)の高次反射の Traverse トポグラフの一例を図7.23(a)に示す。また, 図7.15(b)と同じ回折条件で, 圧縮力を約2倍の2kg 重にした場合の Traverse トポグラフを図7.23(b)に示す。強度領域が広がっていることと, 高次反射のときに見られたような黒白のコントラストのむらが目立つことを除けば, カの弱いときと同じ特徴が認められる。

このグループに属する結晶の Section トポグラフは, 比較的単純であり, 上下の対称性は非常によいが左右は非対称である。 P くさびで押した場合に, その強度の非対称性が顕著である。図7.21に対応する四種類の回折条件で, 結晶の同じ部分から得られた Section トポグラフの例を図7.24に示す。それぞれの場合の右端の Section トポグラフを除けば, この節の(a)で述べたのと同じ強度非対称の規則が成り立っていることがわかる。すなわち, stan-

andardな反射(図7.24(a)および(b))では, 裏表の反射
とともにB-側の強度が強い。一方, *reciprocal*な反射
(図7.24(c)および(d))では, その強度の強い側は逆
転してD-側になっている。前述の規則では, どの回折条
件するときどちらの側が強いかは解らない。しかしながら,
ある条件のときいずれかの側が強いという非対称が生じた
とき, 他の回折条件のもとでの非対称性が予想できる。

図7.24(a), (b), (c)および(d)のそれぞれの右端
のSectionトポグラフは, 上述のものとは異なった強度
変化を示す。すなわち, いかなる回折条件においても, 圧
縮率に近い側の強度が強い。DおよびBを用いて言えば,
 g ベクトルの逆転によって強度の強い側はDからBあるい
はその逆にいれかわり, *reciprocal*な反射ではDおよ
びBは不変である。この規則は, 明らかに明瞭ではない
が, 圧縮率に近い位置で撮ったSectionトポグラフにおい
てはいつも成り立つ。

ふくさびで圧縮した場合のSectionトポグラフ(図7.
25)でも, まったく同じ規則に従う強度の非対称が認め
られた。ただし, 図7.24に比べれば図形がやや複雑であ
る。このグループに属する他の結晶によるSectionトポ

グラフ (図 7.26 および 7.27) においても, 類似のトポグラフならびに強度の非対称性が認められた。なお, 図に示されていない場合でも, 前述の規則が成り立つことは確かめられた。

(c) 葉形の領域がはっきりしない場合

上述の二つのグループに属さなかった *Traverse* トポグラフ, すなわち, 結晶 (e) および (f) の $\{422\}$ 反射と, 結晶 (d) の $\{4\bar{2}2\}$ 反射および $\{1\bar{1}1\}$ 反射がこのグループに属する。結晶 (e) の $\{422\}$ 反射の場合 (図 7.11) は, 外周を含む周囲の葉形の領域は比較的にはっきりしているが, 圧縮軸を含む領域の境界がはっきりしない。この結晶の場合には, くさびの形あるいは圧縮の仕方によってかなり異なったトポグラフが得られた。後者に関しては, 次節で詳しく述べる。Section トポグラフの特徴もそこで述べる。さらに, この結晶の場合には, *reciprocal* な反射と *standard* な反射でもらうとも同じ *Traverse* トポグラフが得られるとは限らない (図 7.11 (c) および (d) 参照)。

結晶 (d) の *Traverse* トポグラフは, 7.2 節でも見たように, 上下および左右の対称性はまったく認められない。

しかし、この場合でも対応する場所のコントラストを比較すると、Friedel 則背反の現象は認められる。また、 $\{4\bar{2}2\}$ 反射の Section トポグラフの例を図 7.28 に示す。それは、Traverse トポグラフの場合と同様、かなり複雑である。しかしながら、回折条件を変えたときの強度の非対称性は、前述の規則に従って変化していることが認められる。

7.4 田板結晶の種々の廻平面による回折トポグラフ

田板結晶(f)と、 $[01\bar{1}]$ 方向から動径圧縮したときに得られる $\{0\bar{a}\bar{r}\}$ 反射の Traverse および Section トポグラフの特徴は、7.1節で詳細に述べた。この節の(a)では、7.1節とまったく同じ圧縮条件で、結晶表面に対して傾いた廻平面を用いて得られた回折トポグラフについて述べる。(b)では、 $[\bar{2}11]$ 方向に圧縮したときの $[01\bar{1}]$ 軸を晶帯軸とする種々の廻平面による回折トポグラフについて述べる。回折トポグラフを撮った廻平面と、図 7.29 のステレオ投影の中に四角で囲んで示す。なお、この節で示す回折トポグラフはすべて、 S くさびで圧縮して $AgK\alpha_2$ 線を用いて撮られたものである。

(a) $[01\bar{1}]$ 方向に圧縮した場合

7.1節とまったく同じ圧縮条件で、対称 *Lamé case* からはいれた綫平面 ($10\bar{1}$) による *Traverse* および *Section* トポグラフを図 7.30 および 7.31 に示す。また、表面に垂直な綫平面 ($01\bar{1}$) に関して ($10\bar{1}$) 面と同じ角度だけ反対側に傾いた綫平面 ($1\bar{1}3$) によるトポグラフを図 7.32 および 7.33 に示す。 *Traverse* トポグラフでは、圧縮軸に関する上下の対称性はまったく認められない。また、反射ベクトルを逆転したときのコントラストの変化もそれほど明瞭ではない。 *Section* トポグラフでも類似の特徴が認められる。

対称 *Lamé* 条件からはいれている場合でも、平面応力状態が実現されているならば、トポグラフの上下は対称になるはずである (8.5節 (d) 参照)。したがって、この場合理想的な条件から相当異なったひずみ分布が実現されていると言える。図 7.6 から図 7.8 までに見られた *Section* トポグラフの上下非対称性とも相まって、結晶の深さ方向のひずみ勾配の存在が強く支持される。

(b) $[211]$ 方向に圧縮した場合

$[211]$ 方向に圧縮した場合には、力の加え方が少し変わると、トポグラフがかなり著しく異なることがある。たとえ

ば、二枚の S くさびの先端が同一平面内にはあっても平行ではないとき、結晶全体が曲るといふ変形が容易に生じる。実際に結晶が曲っていることは、結晶の広い範囲を走査するとき Bragg 反射のピークを与える視射角が場所によって変ることから確かめられる。図 7.34 にその場合の $\{422\}$ 反射の Traverse トポグラフの例を示す。その図では、葉形の領域は周囲近くになずかにその形跡を残すだけである。結晶全体が一つの領域となり、それを取り巻く Pendellösung 縞がはっきりと認められる。もしも一様な曲りが生じているとするならば、対称 Lane case であるから、完全結晶と同じ回折効果が期待され²⁷⁾、このような Pendellösung 縞は観測されない。また、図に見られる Pendellösung 縞は、反射ベクトルの向きを逆転したときもその生じる場所は変わらない。これは、Pendellösung 縞の強度は、ひずみ勾配を表わすパラメータ ϵ の符号 (ϵ ベクトルの逆転により逆転する) には依存しないという理論結果 (3.3 節参照) に対応する。reciprocal な条件で撮っても同じように Pendellösung 縞が認められる (図 7.34 (c) および (d))。

これらの Traverse トポグラフに対応する Section

トポグラフを図7.35に示す。この図に見られる強度の左右非対称も前述の規則に合致して変化することが容易に確かめられる。一方、圧縮軸に近い場所で撮ったSectionトポグラフは、中央部だけが強い反射強度を示し、上端および下端に近い部分はほとんどBragg条件が満たされていない。図7.36に示すように、同じ場所で視射角を変えてSectionトポグラフを撮ってみると、このことはよりはっきりする。すなわち、ロッキング・カーブのピーク強度は、圧縮軸近くのコントラストの強い部分がBragg条件を満たしたときに得られる。また、比較的結晶全体がBragg条件を満たしたときの視射角は、ロッキング・カーブのピークより大きい角度の側($K\alpha_2$ 線の側)へずれている。

可能な限り、曲りが入らないように注意して圧縮した場合の回折トポグラフの例を以下に示す。図7.37は圧縮力が1kg重のときの{422}反射のTraverseトポグラフである。左半分の図形は、図7.11(a)とよく似ている。しかし、右半分に類似のTraverseトポグラフは正方形板結晶では見られなかった。このトポグラフは、前節の(a)に述べたタイプの図形と一見したところ類似している。しかしよく見ると、表面反射の現われる側(図7.37(a)の右半

分)の圧縮軸を含む領域は白のコントラストを示し、前述の場合とは逆であることがわかる。その他の葉形のコントラストも逆になっている。

この状態のままで、圧縮力だけを増して、7.1節の場合と同じ2.5 kg 重としたときの $\{422\}$ 反射による *Traverse* トポグラフを図7.38に示す。このように、圧縮力が大きくなると、左右の対称性が生じる。これは、正方形板結晶(e)では認められなかった現象である。ただし、この場合も圧縮軸を含む領域のコントラストはほとんど認められない。したがって、葉形の領域の数は四つであると言える。また、反射ベクトルを逆転したとき、コントラストの領域の振がりは変化するが、前節までに見られたような明瞭なコントラストの逆転は認められない。とくに、白のコントラストの領域がほとんど現れない。これは、入射線が $A_g K \alpha_1$ 線であるため、白のコントラストが生じるひずみ勾配の領域が狭いことによると思われる。また、この場合は *reciprocal* な反射でも *standard* な場合とほとんど差がない。

これらの *Traverse* トポグラフに対応する *Section* トポグラフを図7.39に示す。それぞれの *Section* トポ

グラフにおいて、上から下へ $D-B-D$ あるいは $B-D-B$ の側が強くなるという強度の左右非対称が認められる。対応する場所のトポグラフと比較して、7.3節で述べたものと同じ強度非対称の規則が成り立っていることが確かめられる。前節で写真は示さなかったが、結晶(c)の Section トポグラフもここに示したものとまったく同じ特徴を持つことが確かめられている。

以下に、圧縮条件は変えないで、 $[01\bar{1}]$ 軸を晶帯軸とする細平面 ($\{422\}$ 反射は除く) によって得られた回折トポグラフについて述べる。 $\{111\}$ 反射の Traverse トポグラフの例を図7.40に示す。この場合は、 $\{422\}$ 反射のトポグラフとは異なり、葉形の領域はわずか二つしか生じていない。反射ベクトルの向きを変えてもそのコントラストはほとんど変わらないことは、 $\{422\}$ 反射の場合と類似である。また、二つの領域をとりまく *Pendellösung* 縞が認められる。ただし、*Pendellösung* 縞のコントラストは、強度領域が白のコントラストを持つとき比較的大きいのが、黒のコントラストのときはそれほどはっきりしない。たとえば、図7.40(c)の左側と図7.40(d)の右側は白のコントラストの領域であり、*Pendellösung* 縞もはっきりと

認められる。この二つのトポグラフは、垂直軸に関して対称
であると言える。したがって、対称 *Laue case* でなくて
も、同じ場所で反射ベクトルを逆転した *Traverse* トポグ
ラフを撮れば、結晶全体のトポグラフを得たことに相当す
ることが実験的に結論される (8.5 節 (d) 参照)。

なお、高次反射の *Traverse* トポグラフの例を図 7.41
に示す。二つの葉形の強度領域が非常に広くなり、それと
取りまく *Pendellösung* 縞もほとんど結晶全体に広がって
いる。これに対応する *Section* トポグラフを図 7.42 に示
す。図 7.39 と類似の強度の非対称が認められる。結果の
例は示さなかったが、*reciprocal* な場合にも図 7.39
と類似の結果が得られた。また、低次反射 ($h=1$) の *Section*
トポグラフでも同じ傾向が認められた。こうして、 $(h=2)$
反射 ($h=1, 3$) で得られる二つのコントラストの領域は、
 $(h=2)$ 反射に見られた圧縮軸をはさむ二つの領域だけが
強調されて生じているものと考えられる。

($h=1$) 面に関して、($h=1$) 面と反対の側へ傾いた相手面
($h=2$) を用いて得られた *Traverse* トポグラフの例を図 7.
43 に示す。この場合には、強度領域は三つに分かれてい
る。($h=1$) 面および ($h=2$) 面によるトポグラフとはかな

り異なり，圧縮軸を含む領域が最も大きいコントラストを示す。反射ベクトルの逆転によるコントラストの逆転がはっきりしないという点は前述の場合と同じである。また，*reciprocal* な反射と *standard* な反射とでは，葉形の領域が少し異なっている。これらの *Traverse* トポグラフに対応する *Section* トポグラフは図 7.44 に示されている。図形は複雑であるが，7.3 節で述べた非対称に関する規則性は同じように満していることが知られる。

($0\bar{1}\bar{1}$) 面と同じ側へさらに大きく傾いた網平面 (100) によって得られた *Traverse* トポグラフを図 7.45 に示す。この場合も，強度領域は三つに分かれており，中央の強度領域が非常に大きく振っている。そのまわりには *Pendel-lösung* 帯が認められる。対応する *Section* トポグラフを図 7.46 に示す。中央部全体が強いコントラストを示し，今までの例に見られた強度非対称の規則が成り立っているか否かを判断し難い。

以上述べた $[01\bar{1}]$ 軸を晶帯軸とする網平面によるトポグラフはすべて上下の対称性は非常によい。したがって，ひずみの分布は圧縮軸に関して上下対称であることが結論できる。一方， $\{22\}$ 反射と $(\bar{1}\bar{1}1)$ 面による反射では，圧

縮軸を含む領域はコントラストを持たず、その上下に強いコントラストの領域が認められた。これに対して、反対方向に傾いた斜平面 (PTI) および (100) による反射では、圧縮軸を含む領域が強いコントラストを持っていた。しかも、表面に垂直な面からの傾きが大きくなるほど、その領域は歪がっていた。これらの結果から、結晶の深さ方向にひずみが増していることが予想される。さらに、Sectionトポグラフに見られた D-B-D あるいは B-D-B の強度非対称は、明らかに中心部とその上下で深さ方向に逆向きひずみ変化が存在することを示唆する。そのひずみ変化が傾いた斜平面を用いるとき、より強調されるような結果が生ずると考えられる。

第八章 実験結果の考察

この章では、理論の部で得られた結果と考慮して、第七章に述べた実験結果に対する考察を加える。乱れた結晶におけるX線回折強度および *Pendellösung* 縞に関する現象を明らかにする。また、ひずみ勾配が場所とともに変る場合の回折現象が論じられ、それにともなって、弾性変形の結晶方位依存性が結論される。乱れた結晶におけるX線回折現象として興味のある上記以外の二三の話題についても述べる。

8.1 黒および白のコントラストと Friedel 則背反現象
乱れた結晶の *Traverse* トポグラフにおける強度は、要約すれば黒あるいは白のコントラストで特徴づけられる。そのコントラストは、ひずみ勾配の大きさとその符号および吸収の大きさによって異なることが第七章において実験的に明らかにされた。ここでは、その実験の結果が一樣なひずみ勾配を持つ結晶に対して展開された理論の結果を用いて定性的に説明できることを示す。

まず最初に、第三章で得られた回折強度の振舞いの物理的意味を明らかにする。 *Traverse* トポグラフに対する

回折強度の特性は、Sectionトポグラフに対するそれと物理的意味は同じであると考えられる。ここでは、簡単のためSectionトポグラフの強度について考える。

干渉項を除いた回折強度は、分散面の(1)および(2)の分枝に属する波の強度の和で与えられる。それぞれの波の強度は、吸収を考慮しないときの回折強度因子と Borrmann 吸収の強度因子の積として表わされる。吸収を考慮しないときの強度因子は、入射面および出射面における波の透過能と結晶内のビームの拡がりの因子を乗じたものであり、軌道に固有の量である。具体的にその因子を計算した結果、 K の項の符号が正のときは分枝(1)の波に対する強度因子の方が分枝(2)の波に対するそれより大きいことが明らかにされた。 K の符号が逆になると、分枝(1)の波の軌道と(2)の波の軌道が入れかわり、それにともなって強度因子の大小も逆になる。これに対して、Borrmann効果の強度因子は K の項の符号にはよらず、分枝(1)の波に対するそれの方が分枝(2)の波に対するそれよりつねに大きい。

したがって、 K の項が正のときには分枝(1)の波の二つの強度因子はいずれも分枝(2)の波のそれらより大きい値をとる。 K の項が負のときには、分枝(1)の波の吸収を合

まない強度因子は弱く、それが Borrmann 効果で強められる。分枝(2)の波は、吸収を含まない強度因子は大きい
が、Borrmann 効果でその強度は弱められる。それゆえ、
Schwarz の不等式が成り立ち、分枝(1)の波の強度と(2)
の波の強度を加えた Section トポグラフの非干渉項の強
度は、 K の項が正の場合の方が負の場合より大きくなる。
Section トポグラフの強度を積分した Traverse トポグラ
フの強度に關しても同じことが言える。また、 K の項の符
号とパラメータ α の符号は同じであるから、これが (3-45)
式の物理的な説明である。さらに、 K の項の符号を変える
ことは反射ベクトルの向きを変えることと同等であるから、
この結果が Friedel 則背反の現象にほかならない。

以上の結果を、吸収の大きさとしずみ勾配の大きさを変
数と考えてさらに詳しく調べると、図3.10に示したよう
に黒および白のコントラストがどのような領域で得られる
かが明らかになる。この結果と 7.1 節で述べた実験結果と
はよく一致していることがわかる。なお、この黒および白
のコントラストが生じる原因は、従来の現象論的な表現に
よれば次のように説明される。すなわち、結晶が乱れるこ
とによっていわゆる消衰効果が減少して反射強度が増大す

る要因と、乱れによって *Borrmann* の異常透過が減少する要因とのかねあいによって生じると言える。

理論結果と別の観測から見ると、乱れた結晶における回折現象は、吸収の大きさを別にすれば、パラメータ Z の符号および大きさを知れば明らかにされることがわかる。ここで、 Z の表式から、黒および白のコントラストの波長依存性と反射の次数依存性を調べる。その際、理論から期待されるものと比較的類似の *Traverse* トポグラフが得られた 7.1 節の実験結果と対比して考える。なお、等方的でかつ平面応力状態が実現されているという仮定は、実験結果と矛盾するという例証はいくつか得られているが、ここでは簡単のためこの仮定を採用する。7.1 節の結果と比較するにせよ、この仮定はある程度支持される。

平面応力状態では、力の項としては (2-24) 式の第二項からの寄与だけが残る、それを (3-7b) 式に代入して、 Z の表式になおすと、

$$Z = -A(\lambda_0/d^3|F_g|) (\partial \epsilon_x / \partial x) (z - z_e) \quad (8-1)$$

となる。ここで、 A は正の定数であり、 d および F_g はそれぞれ用いた廻平面の面間隔および結晶構造因子である。 $(z - z_e)$ は正の量であるから、 $\partial \epsilon_x / \partial x$ が負のとき Z は正

の値をとることがわかる。したがって、 Z の正負とコントラストの関係をおいおせば、実験の結果得られた(7-1 aおよびb)の関係式は理論結果と一致していることが確かめられる。

吸収の小さい場合の Traverse トポグラフにおいて、白のコントラストを持った葉形の領域の中に認められた黒のコントラスト(7.1節(b))は次のように説明される。吸収のパラメータ M を固定して考えたとき、 $|Z|$ の増大とともに白のコントラストから黒のコントラストへの遷移が生じ、いわゆる黒-黒のコントラストが得られることに対応する。図3.8あるいは図3.10から、白から黒への遷移が生じるときの Z の値は、 A_g および M_0 に対してそれぞれ $Z_{A_g} = -1.6$ および $Z_{M_0} = -4.0$ であることがわかる。この値を(8-1)式に代入して波長の違いを考慮すると、遷移を生じるひずみ勾配の大きさの間に、

$$(\partial \epsilon_z / \partial x)_{A_g} = 0.50 \times (\partial \epsilon_z / \partial x)_{M_0}$$

という関係が成り立つことがわかる。白から黒への遷移は A_g の場合、 M_0 の場合の半分のひずみ勾配の大きさのときに生じる。これによって、白のコントラストの中に生じる黒の領域は、 A_g の場合の方が M_0 の場合に比して大き

くなるという実験結果が説明できる。

(8-1)式において、波長およびひずみ勾配の大きさを固定して、 $d^3|F_g|$ という因子の意味を考える。高次の反射になるほど $d^3|F_g|$ は減少するから、 $|Z|$ は高次の反射になるにつれて大きくなる。このことは、結晶の乱れによる回折効果が低次の反射より高次の反射における方がより敏感であることを意味する。低次の反射に比して高次の反射の方が同じ圧縮力の場合にも、黒および白のコントラストの領域が広くなることは実験でいつも観測されたことである。また、回折現象としてその効果を反ばすのはいつも Z の値としてだけであるから、ひずみ分布の違いを考えない限りは、反射面による違いは本質的なものではないはずである。

8.2 乱れた結晶における Pendellösung 縞

第三章において、吸収があまり大きくないときには、乱れた結晶においても Pendellösung 縞が観測されることを述べた。実際に、第七章に示した種々のトポグラフの中に Pendellösung 縞が観測される。ここで、比較のため完全結晶における Pendellösung 縞の特徴を調べておく。その結晶中の強度場は、入射角を通る入射波と Bragg 反射波の方向を表わす直線を漸近線とする双曲線である⁽¹⁾。

双曲線の頂点の間隔は、最初の二三本の間隔を別にすれば¹²⁾、ほとんど等間隔である[†]。結晶内のこの強度場を入射面に平行な出射面で切った切り口では、marginに平行な *Pendellösung* 縞が期待される。

結晶が乱れているときには、*Pendellösung* 縞は等間隔ではなくなり、 $|Z|$ の増大（ひずみ勾配は不変で結晶の厚さが増すだけでもよい）とともに減少することがふり節で明らかにされた。その場合でも縞の形は双曲線であることが確かめられた。したがって、平行板結晶全体に一様なひずみ勾配が存在する場合には、Section トポグラフでは margin に平行な *Pendellösung* 縞が期待される。本実験では、Section トポグラフの margin は図5.1(b)の y 軸に平行であり、ひずみ勾配の $\partial \epsilon_x / \partial x$ は (5-8) 式にみられるように y の関数である。したがって、Section トポグラフに寄与する領域（ y 軸に平行な線状領域）全体にわたって、ひずみ勾配が一定であるということはありません。

[†] Bessel 関数の零点が *Pendellösung* 縞の頂点に対応するから、最初の間隔は十分厚いところの間隔に比して約 1/4 長い。十分厚いところでは等間隔であり、その位置は最初から等間隔であったと仮定したときの位置より、1/4 だけ遠い位置になる。最初の二三本の縞でその位置がほとんど 1/4 ずれることが知られている。

ない。

結晶内のひずみ勾配の分布が Section トポグラフの中央部で最も大きいと仮定すると、Pendellösung 縞はそこで最も密になり、強度の場は図 8.1 (a) に示したようになる。その中央における断面図は図 8.1 (b) に示されている。結晶内にこのような強度場が存在したとき、結晶の射出面では図 8.1 (c) のような図形が期待される。実験では確かに、ひずみ勾配の絶対値の大きいところで楕円形およびかぎ形の Pendellösung 縞が観測された。もし理論とは逆に、ひずみ勾配の増大とともに縞間隔が大きくなるとすると、図 8.1 (d) のような縞模様が観測されるはずである。

相隣る葉形の領域の境界附近では、図 8.1 (d) に類似の縞模様が認められた。しかしながら、この場合に理論と逆の結果が得られたというわけではない。葉形の領域の境界ではひずみ勾配の値は零になり、その上下ではひずみ勾配の絶対値は大きくなっている。したがって、境界で Pendellösung 縞の数が最も少なくなり、Section トポグラフには図 8.1 (d) のような縞模様が観測されたわけである。葉形の領域の中心附近ではひずみ勾配が最も大きく、図 8.1 (c) のような Pendellösung 縞のわき出しが認められた。

次に、Traverse トポグラフの場合を考える。完全結晶の場合にはその結晶の厚さに対応する回折強度が得られ、平行板結晶では一様な強度が期待される。結晶の厚さが一様でないときに生じる *Pendellösung* 縞は、電子顕微鏡像において等厚干渉縞と呼ばれるものと同じである。結晶が乱れているときには、その厚さは一様でもひずみ勾配の大きさに応じて α が場所によって異なる。そのとき、*Pendellösung* 縞を一本新しく生じるのに必要なだけ α が変化している場所を連ねて縞が現われる。したがって、平行板結晶の Traverse トポグラフに認められる *Pendellösung* 縞は "等ひずみ勾配の縞" と呼ぶことができる²⁾。なお、この *Pendellösung* 縞は理論から予想されたように、力の項の符号とは無関係であり、反射ベクトルを逆転しても、その縞の生じる位置は不変であることが確かめられた。

以上の議論から、逆に *Pendellösung* 縞の次数を調べてその場所でのひずみ勾配の大きさを知ることができる。完全結晶領域の *Pendellösung* 縞の次数は結晶の厚さと知れば求まるから、それを基にして新しく生じた縞の次数を順次決めていくことができる。図3.9に見られたように、Section トポグラフにおける縞のピーク位置と Traverse

トポグラフのそれでは縞間隔の約1/8だけ異なることと、完全結晶の縞の次数が端数まで正確には出せないことからその精度はあまり出せない。しかし、ひずみ勾配の大きさの程度を知るだけなら十分利用できる。さらに、回折コントラストあるいは裏表の反射を適当に利用することによって、そのひずみ勾配の符号も決定できる。このようにして、*Pendellösung* 縞の認められる領域における反射面に垂直なひずみ勾配を決めることができる。

8.3 Section トポグラフによるひずみ勾配の変化方向の識別

第三章に述べたように、一様なひずみ勾配を持つ結晶による Section トポグラフの強度はその中心に関して左右対称である。ただし、この議論は任意の乙断面に対して成り立つものであるから、厳密には対称 *Laue case* についてのみトポグラフの対称性を論じる意味がある。しかるに、第七章に得られた実験結果によれば、対称 *Laue case* でも図 7.18 を除くすべての Section トポグラフにおいて強度の左右非対称が観測された。このことは、Section トポグラフに寄与する *Borrmann* 扇の中で、ひずみ勾配が一様でないことを意味する。

しかしながら、その非対称性には規則性があることも見
い出されている。適当に乱れた領域で撮られた Section
トポグラフにおいては、反射ベクトルの向きを変えても強
度の強くなる側が入射波の側(D-側)であるか、Bragg
反射波の側(B-側)であるかということは変らなかった。
しかし、結晶の入射面と出射面をいれかえて *reciprocal*
な条件で Section トポグラフを撮った場合には、強度の
強くなる側は逆転した。これに対して、乱れが非常に大き
いところで撮った Section トポグラフでは、反射ベクト
ルの逆転によって強度が強くなる側が逆転した。力を加え
ている 奥に近い側の強度が強いという意味では裏表の反射
で変りがなかった。この事情は、*reciprocal* な場合にも
変らなかった。この実験結果の典型的な例は図 7.24 に
見られる。

ひずみ勾配が一樣でない場合でも、その回折現象は(2-
24)式で定義された力の項 $f(x, z)$ によって特性づけられ
る。一樣でない $f(x, z)$ のモデルとして最も単純なものは
次の二つである。

(i) モデル A ; f が x 依存性だけを持つ場合。この場合
には、図 8.2 (a) に示されるように、*reciprocal* な実

験は *standard* な実験に於いて結晶の中心で鏡面反射をとることによって実現される。このような鏡面反射に対して結晶内のひずみの状態は不変であることがこのモデルの特徴である。したがって、この場合には、強度が強められる側は *reciprocal* な実験と *standard* な実験とで不変であることがわかる。

(ii) モデル B; f が x に依存しない場合。この場合は、図 8.2 (b) において、入射波 E あるいは \bar{E} を x 軸に平行に z へ移動しても回折現象としては全く変わらない。すなわち、光路 $\bar{S}E\bar{B}$ を持つ波の強度、 $I(\bar{S}, \bar{B})^+$ は光路が DES である波の強度、 $I(D, S)$ 、と同じである。同様に、 $I(\bar{S}, \bar{D})$ と $I(B, S)$ は同じである⁺⁺。

一方、相反定理⁽⁵²⁾によれば、同じ光路をたがいに逆行する波の強度は等しい。したがって、 $I(D, S) = I(S, D)$

+ 光源と観測点を指定すれば光路は一義的に決まるから、強度を定義するにもその二点を指定すれば十分である。

++ 光路 $\bar{S}E\bar{B}$ と $\bar{S}E\bar{D}$ ではその物理的意味が異なる。すなわち、入射面で Bragg 反射された波と、出射面で Bragg 反射された波とは異なるものであり、今この差を問題にしようとしている。

および $I(B, S) = I(S, B)$ という関係式が導かれる。また、この記法によれば $I(S, D)$ および $I(S, B)$ はそれぞれ *standard* な実験における D-側の強度および B-側の強度である。この結果、*reciprocal* な実験においては D-側と B-側の強度がたがいにいれかわることがわかる。したがって、いずれか一方の側の強度が強いという非対称性が存在したとすると、その強度の強い側は *reciprocal* な実験でいれかわることがわかる。

実際の結晶は、一般に複雑なひずみ勾配を持っていると考えられるが、それを f の値になおしたとき モデル A あるいは B のいずれに近いかによってその非対称の性質が決る。実験結果によれば、適当にひずんだ領域ではモデル B が妥当であり、近接点の近くではモデル A が妥当であることが結論された。モデル B が成り立つということは、結晶の深さ方向にひずみ勾配が変化しているのであるから、その場合には平面応力状態そのものが実現されていないと言える。また、極端に乱れの大きいところでモデル A が妥当であるという結論は、そこではひずみ勾配が x に関して大きく変化していると考えられるから当然であると言える。このように、*reciprocal* な条件で Section トポグラフを撮

ることによって f の変化している方向が決められるということ、結晶内の乱れの様子を知らるために有用である。

しかしながら、このモデルでは反射ベクトルの向きを変えた場合の強度変化を議論できない。実験では、前述のように、*reciprocal* な条件で強度の強い側が変化しない場合には、むしろ反射ベクトルの向きを変えたときに強度の強い側が変わるという結果が得られている。この結果の対偶に相当する実験結果も得られている。これらの結果は、反射ベクトルの向きを変えた Section トポグラフの強度変化を調べるだけで f の変化している方向が明らかにできることを示唆する。

第四章に述べたひずみ勾配が一様でない場合の理論において、特定の場合には反射ベクトルの逆転による Section トポグラフの強度の非対称が生ずることが導かれた。すなわち、 f の項が結晶の深さに比例してゆるやかに変化している場合には、その Section トポグラフの反射強度の強い側は反射ベクトルをいれかえても変わらないことが示された。そこでは、いずれの側の強度が強いかによって、深さとともにひずみ勾配が増大するかあるいは減少するかを区別できることを述べた。*reciprocal* な条件では、その

強い側が逆転することも確かめられた。x方向にひずみ勾配が変化している場合に関しては、具体的な数値計算は行わなかったが、z方向のひずみ変化の場合から類推すると、実験結果と一致する結果が得られることが予想される。

8.4 結晶異方性と回折現象

異なった方位を持つ結晶に動径圧縮を加えたとき、そのx線回折トポグラフは、結晶方位によってかなり著しく異なることが7.2および7.3節で明らかにされた。また、回折トポグラフはあらゆる場合に結晶の対称性を反映していることが示された。これらの結果は、実験条件のわずかな違いなどのつまらない原因で変るものではない。実際に、(111)結晶、(e)あるいは(f)、の $\langle 211 \rangle$ 圧縮のような特定の方角の場合を除けば、同じ回折条件ではいつも類似の回折トポグラフが得られた。このことは、結晶の変形における異方性の考慮が不可欠であることを意味する。

さらに、結晶異方性を考慮しなければ説明できないと思われるいくつかの実験事実が得られている。前節で述べた結晶の深さ方向に変化するひずみ勾配の存在も、この異方性が原因であると考えられる。もしも等方的な物質で平面応力状態が実現されているならば、ひずみ勾配の深さ方向

の変化は存在しないはずである。また、ひずみ勾配の変化を裏証する Section トポグラフの非対称図形そのものが結晶方位によって著しく異なるのもその例である。

(111)面を結晶表面とする結晶では、その面内のヤング率およびポアッソン比は、あらゆる方向に対して同じであることが5.3節で知られた。それゆえ、平面応力状態が実現されるとすれば、どの方向から動径圧縮を加えてもまったく同じひずみ分布が得られるはずである。しかるに、実際に得られた回折トポグラフは $\langle 01\bar{1} \rangle$ 方向から圧縮したときと $\langle 211 \rangle$ 方向から圧縮したときではかなり異っていた。その場合、対称 Lane の条件を満足しない傾平面によって得られた回折トポグラフもあわせて考えることにより、結晶の深さ方向のひずみ分布の考慮が不可欠であることが示された。

かくして、動径圧縮を加えたときの結晶の変形状態は結晶方位によって著しく異なり、十分薄い結晶板を使用しても平面応力状態を実現することは困難であることが明らかになった。ほとんどすべての場合に結晶の深さ方向のひずみ勾配の変化があることが裏証された。ここで、弾性定数の異方性を考慮して、どのような形で(2-24)式の力の

項に結晶の深さ方向依存性が含まれてくるかを調べる。簡単のため、対称 Lane case だけを考えることにして、結晶表面に平行な圧縮軸の方向に x 軸ととり⁺、結晶の深さ方向に z 軸をとる。

この座標系を用いれば、(2-24)式に含まれる変位ベクトルと反射ベクトルの内積は、x 方向の変位成分 u_x を面間隔で除したものにほかならない。したがって、変位成分とひずみ成分の間の関係、

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} = \varepsilon_x, \quad \frac{\partial u_x}{\partial z} = \gamma_{xz} \quad (8-2)$$

を用いれば、(2-24)式は次のように書きなおされる。

$$f(x, z) = \frac{\pi}{d_g} \left(\cot \theta_B \frac{\partial \gamma_{xz}}{\partial z} - \tan \theta_B \frac{\partial \varepsilon_x}{\partial x} \right) \quad (8-3)$$

平面応力状態であれば、 $\partial \gamma_{xz} / \partial z = 0$ であるから、(8-3)式のかっこの中の第二項だけが残り、乙になおすと、(8-1)式のようになることがわかる。ひずみ成分 ε_x および γ_{xz} は、(5-18)式を用いれば応力成分の一次結合

⁺ x 軸の正方向は反射ベクトルと一致させる必要があるが、ここでは簡単のため、結晶に固定した正方向を定める。反射ベクトルと x 軸の正方向が反対のときは、f の符号を変えることにする。

として次のように表わされる。

$$\epsilon_x = S_{11}\sigma_x + S_{12}\sigma_y + S_{13}\sigma_z + S_{14}\tau_{yz} + S_{15}\tau_{zx} + S_{16}\tau_{xy} \quad (8-4a)$$

$$\gamma_{xz} = S_{51}\sigma_x + S_{52}\sigma_y + S_{53}\sigma_z + S_{54}\tau_{yz} + S_{55}\tau_{zx} + S_{56}\tau_{xy} \quad (8-4b)$$

(8-4a および b) 式を (8-3) 式に代入すれば、力の項の場所依存性が明らかにされる。実験結果から、 γ_{xz} が z の関数であることが結論された。

ここで、力の項にどのようにして z 依存性が生じるかを考える。最初に、7.3 節の (b) に述べたグループに属する結晶を内題にする。それらの結晶の弾性定数は、行列 $(s_{ij})_A$ あるいは $(s_{ij})_B$ で表わされる。このとき (8-4a および b) 式は、

$$\epsilon_x = S_{11}\sigma_x + S_{12}\sigma_y + S_{13}\sigma_z \quad (8-5a)$$

$$\gamma_{xz} = S_{55}\tau_{zx} \quad (8-5b)$$

となる。この値を (8-3) 式に代入したとき、 z 依存性を持つためには、応力成分のいづれかが z に依存しなければならぬ。一方、動径圧縮の実験条件から考えると、 σ_z は零になるはずである。また、 σ_x および σ_y の z 依存性も考え難い。残る τ_{zx} も、平面応力の実験が理想的に行われているならば、零になるはずである。したがって、この

ような考え方ではどの応力成分にも依存性が存在するのかわかることはできない。さらに、この弾性定数行列の形だけを議論する考え方からすると、結晶(c)の $[01\bar{1}]$ 圧縮のときだけ理想的な場合に近いたポポグラフが得られたという実験結果は理解し難い。すなわち、弾性定数行列の形という意味では、結晶(a), (b) および (c) はすべて同等である。

結晶(c)の $[100]$ 圧縮と $[01\bar{1}]$ 圧縮とでは、まったく異なった *Traverse* トポグラフが得られた。両者に対する弾性定数を比較すると、ポアッソン比に対応する定数 s_{12} および s_{13} がたがいに逆になっている。その値は数倍異なっているが、それだけの違いでして依存性を説明するとすれば次のようになる。平面応力状態からはずれて、 σ_y あるいは σ_z のいずれかが依存性を持つものとするれば、 x 方向に圧縮しているのであるから、 σ_z が依存性を持つ可能性の方が σ_y のそれより強い。したがって、 σ_z の係数 s_{13} が小さい $[01\bar{1}]$ 圧縮の場合の方が依存性の寄与が大きいと考えられる。この結果は、実験結果と一致する傾向にはあるが、やはりこのような係数だけを考える方法では不十分であると思われる。異方性の存在により応力

成分そのものが、等方的な場合に比して大きく変化していることが予想される。さらに、 $\langle 111 \rangle$ 方向に伸びている *bonding charge* による弾性変形への影響も考えられる。

次に、(111)結晶の場合について考える。この場合の弾性定数行列 (S_{ij}) はかなり複雑である。 ϵ_x に対しても、せん断応力 τ_{yz} あるいは τ_{zx} が寄与する。そのとき、 $[011]$ 圧縮に対しては τ_{yz} の係数が零とは異なり、 $[211]$ 圧縮に対しては τ_{zx} の係数が零とは異なる。いずれの場合も、 x 方向に圧縮しているのであるから、もしせん断応力が存在するとすれば、 τ_{zx} の方が τ_{yz} より大きいと考えられる。したがって、 $[211]$ 圧縮の方が理想的な場合からはずれる可能性が強いと言える。Traverse トポグラフでは確かにこれに対応する結果が得られた。しかしながら、この場合にも τ_{xz} はどのような寄与をするかということは議論できない。また、理論結果に近いトポグラフの得られた $[011]$ 圧縮の場合でも、Section トポグラフで見れば z 方向のひずみ変化が存在することは歴然としていたわけである。したがって、この結晶の場合も、弾性定数だけでは決定的な結論を導くことはできない。

実験的に Pendellösung 縞の次数を調べ、反射強度を測定することによって、結晶内のひずみ勾配の分布を求めることは可能である。しかしながら、現在の段階ではそれと比較しうる弾性論の計算が得られていない。異方性のある単結晶の弾性変形を正統的に取り扱える弾性論の発展が望まれる。

また、これとは異なる議論であるが、本論文で取り扱った X 線回折法では、通常のひずみの測定法に比して、 Σ 方向のひずみ変化が強調される可能性はある。たとえば、(8-3) 式において Bragg 角は通常 10° 前後であるから、かっこの中の第一項が存在するとすれば第二項に比して大きく寄与することは考えられる。また、 Σ 方向に変化がある場合は、結晶の中を X 線波が進んでいく間、連続的にひずみ勾配の変化の影響を受ける。これに対して、 Σ 方向にひずみ勾配が変化している場合には、軌道の接線の傾きが逆になればもとの変化とは逆の場の中を波が進むことになる。この場合には、結果として得られるひずみ勾配の寄与は小さい。したがって、回折現象としては Σ 方向にひずみ勾配が変化している方が効果的に影響を及ぼすことが考えられる。

8.5 乱れた結晶における回折現象として興味のある二三の現象

(a) 乱れが非常に激しい場所における回折トポグラフ
結晶に力を加えている近傍では、一般に複雑でかつ非常に激しい結晶の乱れが存在する。吸収の小さい場合には、そのような場所で撮られた回折トポグラフは複雑である。とくに、Section トポグラフにおいてそのことは顕著である。強い強度を持った複雑な像と、その近傍に鋭い強度の抜けあがりやしばしば観測される。これは、結晶の乱れが激しいために、結晶のある一部で Bragg 反射を生じても、そのすぐ隣りでは同じ視射角の入射波は Bragg 反射されないことに依ると考えられる。図 7.36 および 8.3(c) に見られるように、視射角をロッキング・カーブのピーク位置からずらして撮った Section トポグラフがそれぞれ少しずつ異なり、強度の強い場所がわずかに変化しているのもこのためと考えられる。この現象はしばしば観測されるが、このような回折トポグラフを与える具体的な変形状態を推測することは容易ではない。

結晶の乱れが大きくなったときの回折強度の増大は、一般に消衰効果の減少によって説明される。結晶が完全であ

るときは、動力学的効果による入射波の弱まりが生じ、その結果としていわゆる一次消衰効果⁽⁵¹⁾による Bragg 反射波の弱まりが生じる。ところが結晶が乱れてくると一次消衰効果は弱まり、むしろ運動学的理論から予想される反射強度に近くなる。その場合には、入射波の強度の弱まりは考慮しなくてもよい。さらに別の強度増大の原因として、完全結晶の場合に比してより広い角度中の入射波が Bragg 反射されることが考えられる。

極端な場合には、 $K\alpha_2$ 線に対して Bragg 反射を生じるように取付けても、結晶のある部分では $K\alpha_2$ 線を反射するという現象が生じる。その実験例を図 8.3 に示す。それは、直径約 8 mm の Si の (111) 円板結晶に動径圧縮を加え、 $Ag K\alpha_2$ 線による $\theta = 23^\circ$ 反射を生じさせたときの Section トポグラフである。図 8.3 (a), (b) および (c) は全く同じ回折条件で、写真乾板の位置だけをそれぞれ結晶の後 3 cm, 7 cm および 12 cm と変えて撮ったものである。(a) は通常の Section トポグラフと同じである。(b) ではその中央部に通常の Section トポグラフの外に強度が認められる。(c) では、(b) で認められたビームのトビ出しがよりはっきりと認められる。(c) のうちでも視射

角をロッキング・カーブのピークより大きくしたときそのとび出しが顕著である。また、通常のトポグラフの中には、とび出したビームに対応する白い抜けあがりが見られる。(b) および (c) から、とび出したビームの位置を測定してその反射角を知ることができる。その結果、とび出したビームは通常の Bragg 反射波より約 $8'$ 大きい角度方向へ反射されたものであることが知られた。この値は、 S_2 の 220 反射に対する $AgK\alpha_1$ 線と $AgK\alpha_2$ 線の Bragg 角の違い、 $\Delta\theta_B$ 、の約 2 倍である。したがって、ビームのとび出しは $AgK\alpha_2$ 線の Bragg 反射と考えられる。その様子を模式的に書くと図 8.4 のようになる。極端に大きく乱れた場所 (図 8.4 の F 点) で $K\alpha_2$ 線が Bragg 反射されたとすると、入射方向に対するその角度は $2(\theta_B + \Delta\theta_B)$ となる。したがって、通常の Section トポグラフに比して $2\Delta\theta_B$ だけ大きい方向へ Bragg 反射される。

以上の結論を確かめる目的で、ビームのとび出しが生じる結晶位置で、ロッキング・カーブの $K\alpha_1$ 線のピーク位置と $K\alpha_2$ 線のピーク位置に視射角を固定して二種類の Section トポグラフを撮った。Mo 線による結晶 (f) の 02 $\bar{2}$ 反射の例を図 8.5 に示す。(b) および (d) は $MoK\alpha_1$ 線による

Section トポグラフであり，(a)および(c)は $MoK\alpha_2$ 線によるものである。 $MoK\alpha_2$ 線のピーク位置の視射角で撮ったときには，大きい反射角の方向にビームのとび出しが生じ， $MoK\alpha_2$ 線のピーク位置で撮ったときには，小さい角度の側にビームのとび出しが生じることが確かめられる。また，その角度の違いは $2\theta_B$ であることも確かめられた。これらの結果は上述の結論の正しさを実証する。すなわち，前者は $K\alpha_2$ 線が同時に反射されたものであり，後者は $K\alpha_1$ 線の反射と考えられる。なお，この他にも通常のトポグラフととび出したビームの間，あるいはとび出しとは反対の側にもわおかに反射強度が認められた。これは， $K\alpha_1$ 線および $K\alpha_2$ 線に近い波長の白色X線が同時に反射されたものと考えられる。

(b) 二重に重なった Pendellösung 縞

非常にまれにはあるが，図7.8(b)の2の Section トポグラフに矢印で示したような二重に重なった Pendellösung 縞が観測された。図7.8(c)にその拡大写真が示されている。ここでは，明らかに二種類の Pendellösung 縞が重なって生じている。この写真は， $AgK\alpha_1$ 線を用いた 044 反射によって得られたものである。この条件は，

Pendellösung 縞に異常が生じるとすれば、それを最も見出しやすい条件になっている。すなわち、Pendellösung 縞のコントラストは吸収の小さい場合の方が大きい。また、(8-1)式でも見たように高次の反射の方がひずみ勾配に対して敏感であり、Pendellösung 縞の様相も複雑になる。しかし、低次の反射においてもごくまれに、特定の位置で撮った Section トポグラフの中に、この種の二重の Pendellösung 縞が見い出された。

通常の Pendellösung 縞は、分岐(1)の波と(2)の波の干渉によって生じる。したがって、二種類の干渉縞が生じるには、少なくとも三種類以上の modified Bloch 波が励起されなくてはならない。一般にこのような条件は、結晶の中に積層欠陥があるとき⁵⁰⁾とか、あるいは二つの結晶がその方位をごくわずかだけ変えて存在するときに満たされる。後者の場合には、通常の Pendellösung 縞に moiré 縞⁶⁵⁾が重なって生じる⁴⁵⁾。天然水晶の Section トポグラフでも、しばしばこれと類似の二重の Pendellösung 縞が観測される⁶⁶⁾。その場合には、積層欠陥が存在すると考えられる。しかし本実験のように軸径圧縮を加えた場合には、積層欠陥が生じることは考之にくい。さらに、結

晶が二つに別れている訳ではないから *moiré* 縞とも考えにくい。

最も可能性のある解釈として、いわゆる *interbranch transition* ⁶⁷⁾ が考えられる。結晶の乱れが十分大きくなったとき、結晶の乱れと結晶液の間にエネルギーの授受が生じ、分枝(1)の波と(2)の波の間にとびが生じる。一度とびを生じた波は、もとの波とは異なるし、同じ分枝にもともとあった波とも異なる。そのような波の間に干渉が生じた場合には、まったく異なった二種類の *Pendellösung* 縞が重なって現われることが期待される。

さらに別の可能性として、入射X線の偏光が考えられる。通常の入射X線は二種類の偏光成分から成っている。完全結晶の場合には、それらの成分はそれぞれ異った周期を持つ双曲線状の干渉縞を生じ、それらが重なりあっていわゆる *fading* の現象を生じる ¹⁰⁾。しかしこの場合には、二種類の *Pendellösung* 縞が認められるわけではない。乱れた結晶でもその乱れが極端に大きくない場合には、*fading* の現象が生じることが知られている ¹¹⁾。今の場合は結晶の乱れがかなり激しいから、二種類の偏光波が異なった方向に *Pendellösung* 縞を生じる可能性が考えられる。

(c) *surface damage* による回折像

Traverse トポグラフにおいて、しばしば莫状の黒白の対の像が認められた。それらは、結晶を取りつけなおしたときに新たに生じることもしばしばある。たとえば、図 7.9 (a), (b) および 7.10 (a), (b) の左側の境界近くに縦に並んだいくつかの像は、同じ結晶のトポグラフ、図 7.9 (c) あるいは直角だけ回転して得られた図 7.17, には認められない。このことから、前者に見られる像は、後者の取りつけの後に、結晶の取り扱いの際に入った *surface damage* による像と考えられる。

ここでは、図 7.11 (a) および 7.12 (a) などに黒丸で囲んだ最も典型的な回折像を系統的に調べた結果を述べる。図 7.12 (a) ~ (d) の右上の部分を拡大した写真を図 8.6 (a) ~ (d) に示す。また、高次反射(図 7.13 (a) および (b)) の同じ部分の拡大像を図 8.6 (e) および (f) に示す。standard な反射では丸い対の像が見られ、たがいに黒および白のコントラストを示す。白のコントラストの中には、7.1 節の (b) に述べたような黒い莫状のコントラストが認められる。また、反射ベクトルの矢印の先端の側がいつも黒のコントラストになっている。高次反射では像の領域が広

くなっているが、そのコントラストの現われ方は低次反射の場合と良く似ている。これに対して、*reciprocal*な条件で撮ったトポグラフの中に認められる像は、反射ベクトルの先端の側が強いコントラストを持ち、その反対側には長いすい星状の白い抜けあがりが見られる。黒い像の端から白い抜けあがりの端までの長さは、この反射の *Section* トポグラフの中にもほぼ等しい。

$AgK\alpha_1$ 線による同じ場所の回折像を図 8.7 に示す。その結果は、 $M\alpha$ の場合と類似である。ただし、白のコントラストはその中に生じた黒のコントラストでおきかえられていることもある。直角だけ異なった観平面による *Transverse* トポグラフ (図 7.11) の同じ部分の拡大像を図 8.8 に示す。この場合も、*standard* な反射では黒白の対の像が認められ、*reciprocal* な反射では白い抜けあがりが見られる。ただし、その抜けあがりの長さが長く (*Section* トポグラフの中が広いことに対応する)、コントラストがはっきりしない場合もある。なお、これらの現象は、丸で囲んだ像に限らず、そのまわりの *surface damage* の像すべてに共通に認められる。以下に、これらの像を *surface damage* によるものであると考える

根拠を示す。

standard な反射と *reciprocal* な反射で *Traverse* トポグラフの像が著しく異なるのは、それが結晶の深さ方向に極端に大きなひずみの変化を持つ欠陥による像であることを示唆する。第四章で述べたように、結晶の深さ方向全体にひずみ勾配が変化している場合には、*standard* な反射と *reciprocal* な反射の差は *Section* トポグラフにおいてのみ認められるはずである。また、*reciprocal* な反射のときの像の拡がり、*Section* トポグラフの中とほぼ一致するということは、この条件のとき欠陥が結晶の入射面近くにあることを意味する。その様子を図 8.9 に示す。図 8.9 において、乱れの極端に大きいところへ入射した波の大部分は、入射面近傍で散乱されて *kinematical image* を生じる⁺。入射波がほとんど散乱されてしまう

⁺ *matrix* 全体が *Bragg* 条件を満足しているときに観測される強度の異常は、動力学的に解釈すべきであるという考え方もある(立野, 石田, 高木; 日本物理学会秋の分科会予稿集(1969), 8pN3, P. 150)。ここでは、使用した特性X線が網平面の局所的な変形によって反射されて生じるコントラストのみならず、特性X線に近い波長の白色X線も強度に寄与する可能性があることも含めて *kinematical image* と呼ぶことにする。

のだから結晶の残りの部分による *dynamical image* の強度は非常に弱い。その影響は、*Section* 図形の中全体に及ぼされる (図 8.9 (b) の DK の間)。*Traverse* トポグラフィの場合には、欠陥から離れた点へ入射したビームも図 8.9 の DK の間に *dynamical* な強度の寄与をするから、DK の間の強度は零ではない。その結果、*reciprocal* な条件のときに観測された星状の強度の抜けあがりもやはりコントラストを持っている。*standard* な条件のときには、欠陥は出射面に来るから、図 8.9 (a) に見られるように欠陥のごく近傍に達した波 (入射波とは限らない) だけが乱れの影響を受けて *dynamical image* を作る。

これを *Section* トポグラフィで調べるとよりはっきりする。*surface damage* の近傍で入射ビームの位置を約 50 μm ほど移動して撮った *Section* トポグラフィを図 8.10 に示す。それらの像は、 $A_g k \alpha_2$ 線によるものであるから対応する *Traverse* トポグラフィは図 8.7 に示されている。*standard* な条件で撮った場合には、入射点を変えても像の特徴は変わらず、その現われる位置だけが変っている。これは、出射面に到達した波が欠陥のあるところでのみ、

dynamical image を形成するためと考えられる。ただし、入射波そのものが直接欠陥の近傍を通ったと思われ、図8.10(a)の右から三つ目と図8.10(b)の左端に示した Section トポグラフでは *dynamical image* に加えて *kinematical image* も認められる。これに対して、*reciprocal* な条件の場合には、入射面に存在する欠陥のごく近傍に入射した波は B-側に *kinematical image* を生じる(図8.9(b)のKBに相当する)。残りの部分(図8.9(b)のDK)は *Traverse* トポグラフの場合に比して極端に弱い強度を与える。欠陥から少し離れたところへ入射したビームによっては、*dynamical image* が形成される。なお、図8.10に示された像は必ずしも一義的なものではない。視射角を変えて撮ったトポグラフではかなり複雑なコントラストの変化が認められる。たとえば、図8.10(a)の左三つの Section トポグラフは、ロッキング・カーブのピークから少しはぶいた視射角の入射線で撮ったため黒のコントラストがよく出ていない。

こうして、*surface damage* による像と考えるのが妥当であることが確かめられた。しかしながら、実体顕微鏡で観測しても結晶表面にその像に相当する傷は認められな

かった。一方，結晶方位の違いによってその像が著しく変わるわけではないという事実から，*surface damage* のひずみ分布に対して次のようなモデルが考えられる。すなわち，結晶表面近くの欠陥はその方位依存性が少なく，比較的等方的なひずみ分布を持っていると考えられる⁺。等方的なひずみの分布があるとき，反射ベクトル（ x 軸に平行）に平行なひずみ勾配の成分を考えると，符号の異った二つの領域に分かれる。それを極座標表示すると，図 8.11 に示すように欠陥のところでたがいに相接する二つの円になる。この対になった領域が，*surface damage* の黒白の像を与えると考えられる。これと実験で得られたコントラストとを対比することによって，おのおのの領域における f の符号は決められる。しかしながら，この場合には欠陥の近傍で面間隔が変化しているのみならず，細平面の曲りも存在するはずである。したがって，両者を適当に組みあわせ具体的な変形のモデルを考えることは容易ではない。従来，この種の対になった像に対する実験結果の解釈⁽⁶⁸⁾⁽⁶⁹⁾

⁺ この場合でも，結晶が非常に薄くなって，欠陥の深さ方向の抗がりの大きさが結晶の厚さに比して無視できない程度に大きくなると，ひずみ分布は等方的でなくなる（岡田氏（電気試験所）：私信）。

は、その実験方法が通常の *Traverse* トポグラフ法に限られていたため、十分になされているとは言えない。本実験で行ったように、*reciprocal* な実験あるいは入射角を変えて *Section* トポグラフを撮る実験を行えば、より有効な結論が導かれると思われる。

通常の *surface damage* とは少し異なるが、高次反射の *Traverse* トポグラフの黒のコントラストの領域に、月面写真に見られるクレーターの像と類似のわずかなコントラストを持った像がしばしば認められた（たとえば、図 7.9 あるいは 7.23）。これと類似の強度のむらも、低次反射においても認められる。また、*Section* トポグラフにおいても拡大倍率を大きくしたとき、やがて黒のコントラストの領域に類似の強度むらが認められる（たとえば図 7.18）。これらの像は、エッチングの際に生じた結晶表面のわずかなくぼみに応力が加わって得られるものと思われる。厚さの差によるコントラストでないことは、力の大きさや反射の次数によってそのコントラストが変ることから明らかである。これに対応するくぼみは、表面にすれすれの方角から見たとき肉眼でもわずかに認められる。その一例を図 8.12 の光厚写真に示す。それは、表面にすれすれの方角か

ら反射光を利用して見た実体顕微鏡写真である。Hunter²⁴⁾が、結晶表面に *micro strain* が入って、それによる強度のむらを観測されると報告しているのは、これに対応するものと思われる。

(d) 対称 *Laue case* からはおいた場合の回折現象

7.4 節で述べた対称 *Laue* の条件を満たさない網平面による反射では、どのようなトポグラフが理論的に予想されるかを調べる。計算を簡単にするため、実際とはかなり異なった仮定を置く。すなわち、この章の第三節および第四節で、平面応力状態は実際の結晶では実現されていないことが結論されたが、ここでは平面応力状態と仮定した場合に得られる回折現象を調べる。図 8.13 に示すように、平行板結晶に固定した直交軸 x, y および z を定義し、その任意の y 断面を考えることにする。このとき、 z 軸から α だけ傾いた面による回折現象は、その場合の力の項 f を求めれば知られる。ただし、(2-24) 式で用いた x および z は、問題にする網平面および反射ベクトルに基づいて定義された座標である。

したがって、図 8.13 に示す網平面に属する座標 (x', z') を用いて f の式を具体的に書くと、

$$f = \frac{2\pi}{\sin 2\theta_B} \left(\cos^2 \theta_B \frac{\partial^2}{\partial z'^2} - \sin^2 \theta_B \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \right) (\bar{q}' \cdot u) \quad (8-6)$$

となる。面平面に垂直な変位成分は結晶に固定した軸 (x , z) に関する変位成分を用いて書くことができる。したがって、 $(\bar{q}' \cdot u)$ は次のように書きなおされる。

$$\begin{aligned} (\bar{q}' \cdot u) &= |\bar{q}'| \cdot u_{x'} \\ &= |\bar{q}'| \cdot (u_x \cos \alpha + u_z \sin \alpha) \end{aligned} \quad (8-7)$$

また、 x' および z' 方向の偏微分は x および z 方向の偏微分と次のような関係がある。

$$\frac{\partial}{\partial x'} = \frac{\partial}{\partial x} \cos \alpha + \frac{\partial}{\partial z} \sin \alpha \quad (8-8a)$$

$$\frac{\partial}{\partial z'} = -\frac{\partial}{\partial x} \sin \alpha + \frac{\partial}{\partial z} \cos \alpha \quad (8-8b)$$

さらに、ひずみ成分の定義式

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} = \varepsilon_x, \quad \frac{\partial u_z}{\partial z} = \varepsilon_z \quad (8-9)$$

および平面応力状態にあるという仮定から、次のような関係式が得られる。

$$\varepsilon_x = \varepsilon_x(x, y) \quad (8-10a)$$

$$\varepsilon_y = \varepsilon_y(x, y) \quad (8-10b)$$

$$\frac{\partial u_x}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} = 0 \quad (8-10c)$$

これらの関係を用いて，(8-7)式を書きなおすと，

$$f = \frac{2\pi|\bar{g}'|}{\sin 2\theta_0} \left\{ (\cos^2\theta_0 \sin^2\alpha - \sin^2\theta_0 \cos^2\alpha) \cos\alpha \frac{\partial \epsilon_x}{\partial x} - (\cos^2\theta_0 \sin\alpha - \sin^2\theta_0 \cos\alpha) \cos\alpha \sin\alpha \frac{\partial \epsilon_z}{\partial z} \right\} \quad (8-11)$$

となる。 y を固定して考えるかぎり，力の項は x だけの関数である。これは平面応力状態と仮定したため，すべてのひずみ成分がそれに無関係な量となり，それを傾いた綫平面へ射影しても z 方向の変化は生じないことによると考えられる。

結晶内のひずみの分布は変らないとして，同じ綫平面の裏の反射を考える(図8.13(b))。このとき，

$$(-\bar{g}' \cdot u) = -|\bar{g}'| \cdot u_x' \quad (8-12)$$

となる。(8-8 a および b) 式の代わりに，この場合に適する変換式を用いて(8-6)式の力の項を計算する。その結果，(8-11)式と絶対値は同じで符号が反対の値が得られる。

この反射ベクトルの逆転による力の項の符号の逆転は，第三章で結論されたことであり，対称 Lane case でなくても成り立つことは f の定義式から必然的に導かれる。もちろん，平面応力状態でなくても f の逆転は生じる。

次に， z 軸に関して反対側へ α だけ傾いた綫平面を考え

てみる。前述の方法で、この場合に対する f を計算した結果、(8-11) 式と全く同じ値が得られることが明らかになった。 f の値が同じであれば、当然同じ回折現象が期待される。したがって、平面応力状態が実現されているとするならば、対称 Laue case から同じ角度だけ異った側へ傾いた細平面による回折現象は全く同じであることが結論される。この考え方からは、7.4 節に述べた $[01\bar{1}]$ 圧縮のときの $\{1\bar{1}3\}$ 反射と $\{13\bar{1}\}$ 反射の違いは期待することができない。結局、その場合には平面応力状態が実現されていないという何回も述べた結論に到達せざるを得ない。

結 論

従来、理論的あるいは実験的にそれぞれ独立に解明されてきた乱れた結晶におけるX線回折現象が、本研究では理論および実験の両面から系統的に明らかにされた。加藤によって提案された波動光学理論を基礎にしたという意味では理論としての新しさはないが、それを発展させることによって種々のX線回折現象が説明された。

ひずみ勾配の大きさに依存して変化する回折強度のみならず、Bormann吸収の強度因子も含めてX線回折強度が計算された。その結果、吸収の大きさ、ひずみ勾配の大きさおよびその符号に依存するSectionおよびTraverseトポグラフの回折強度が求められた。完全結晶の強度と対比して黒および白のコントラストを定義したとき、それらがどのような回折条件のときに得られるかが示された。また、ひずみ勾配の符号とコントラストとの関係を明らかにすることによって、従来実験的に知られていたFriedel則背反の現象が理論的に説明された。この現象は、吸収が存軽しさえすれば、その大小には無関係に生ずることが結論された。

乱れた結晶における Pendellösung 縞の振舞いが明らかにされた。この Pendellösung 縞には Borrmann 吸収が関与しないため、加藤によってなされた、吸収を考慮しない場合の理論²⁷⁾と同じ結果が得られた。また、ひずみ勾配が一様でない結晶においても、その場所変化がゆるやかであり、しかもそれが特定の方向にだけ変化している場合には、類似の理論が展開できることが示された。その結果、現実の場合に比較的近い乱れが存在するときの回折現象が予測された。

乱れた結晶における回折現象を実験的に解明するために、X線回折トポグラフ法が系統的に利用された。比較的薄い単結晶試料に動径圧縮を加えたとき、結晶内のひずみ分布は場所によってかなり著しく異なっている。したがって、結晶全体の Traverse トポグラフを撮ることによって、ひずみ勾配の大きさおよびその符号が異なった値をとる場合の回折強度と同時に調べることができた。また、反射ベクトルの向きを逆にした実験を行うことによって、Friedel 則相反の現象が詳しく調べられた。入射X線を Cu, Mo および Ag $K\alpha_1$ 線と変えることによって、吸収による回折現象への寄与も明らかにされた。さらに、Section トポ

グラフを適当な場所で撮ることによって、X線回折現象がより詳しく調べられた。これらの回折トポグラフにおいて、Pendellösung 縞がしばしば観測され、結晶の乱れと Pendellösung 縞の関係が明らかにされた。とくに、Traverse トポグラフにおいては、“等ひずみ勾配の縞”と呼ばれるきれいな Pendellösung 縞が観測された²⁾。

上述のように系統的な実験を行うことによって、理論的に予想された結果が実証された。これらの結果は、一般に極端に大きな乱れを除く弾性変形による通常のX線回折像を理解するのに重要であり、かつ有効であると考えられる。逆に、光弾性実験と類似して、種々の網平面によるX線回折トポグラフを撮り、それから結晶内のひずみ分布を知る新しい実験法が確立できると言える。

一方、結晶方位の異なった正方形板結晶の動径圧縮によって、結晶構造の対称性と得られたトポグラフの対称性の間には一対一の対応があることが明らかにされた。トポグラフの対称性のみならず、図形そのものが結晶方位に依存して著しく異なるという結果が得られた。このことから、単結晶の弾性変形においては、異方性の考慮が不可欠であることが結論された。これは、むしろ当然の結果である。

考えられるが、従来のX線回折法による結晶の乱れの研究においてはほとんど問題にされなかったことである。

従来のX線回折トポグラフ法に加えていくつかの実験的試みがなされた。乱れの大きい場所における回折現象を詳しく知るために、入射線の視射角をわすかずつ変化させてSectionトポグラフが撮られた。また、視射角は固定して、乾板の位置を結晶から十分離れた位置において、Sectionトポグラフを撮る方法も試みた。その結果、極端に乱れの大きい場所では、通常のBragg反射の角度中よりも広い波長領域の入射線が同時にBragg反射されることが明らかになった。極端な場合には、 $K\alpha_1$ 線と $K\alpha_2$ 線が同時にBragg反射される現象が観測された。

入射面と出射面をいれかえてSectionトポグラフを撮り、その強度を調べることにより、ひずみ勾配の変化の様子を定性的に知ることができるという実験法が示された。実験結果によれば、ほとんどの場合、結晶の深さ方向にひずみ勾配が変化していることが明らかになった。特定の場
合には、その結果は理論的にも導かれた。この実験法は、*surface damage*の回折像を詳しく調べるときにも、有効に利用された。

本研究で行わなかったことで、回折現象を調べるのに有用であると思われるのは、入射波方向の Section トポグラフを調べることである。二結晶スペクトロメータ⁷⁰⁾を使用し、前述の視射角を変えて Section トポグラフを撮る方法と併用することによって、乱れの十分大きいところでの回折現象が明らかにされることが期待される。また、二重の *Pendellösung* 橋がどのような条件のときに生じるかを実験的に詳しく調べることも興味がある。

今後、回折現象そのものを調べる観点から離れて、回折現象を利用して実際の結晶内のひずみ分布を明らかにしていくという実用的な観測に立つならば、異方性を考慮した弾性論を明らかにして、理論的および実験的により定量的な議論を深めていく必要があると思われる。

謝 辞

本研究を行うにあたって、終始指導および助言をいただきました加藤範夫教授に深く感謝致します。また、本研究に専心できるよう便宜をはかって下さいました上田良二教授ならびに美浜和弘助教授に深く感謝致します。七里公毅氏、本間茂氏(現在、無機材質研究所)をはじめ加藤研究室および上田研究室の方々には、実験あるいはその他の種々の面から御援助いただきました。ここに感謝の意を表します。

平板結晶のひずみ分布の計算のチェックを村上澄男助教授にお願いしました。半導体ひずみ計は豊田中央研究所の五十嵐伊勢美博士にお願いして製作していただきました。また、実験装置の製作は平野誠一氏はじめ工作室の方々をお願いしました。ここで皆様に深く感謝致します。なお、本論文の四画および写真の作成および整理に際しての、渡辺貞好君、山内建治君ならびに岡田須美子さんの御協カに感謝します。

参考文献

- 1) A. R. Lang: Acta Cryst. 12(1959) 249.
- 2) G. H. Schwuttke: J. Appl. Phys. 36(1965) 2712.
- 3) C. G. Darwin: Phil. Mag. 27(1914) 315, 675.
- 4) P. P. Ewald: Ann. Phys. 49(1916) 1, 117; 54(1917) 519.
- 5) M. von Laue: Ergeb. Exact. Naturwiss. 10(1931) 133.
- 6) N. Kato and A. R. Lang: Acta Cryst. 12(1959) 787.
- 7) N. Kato: Acta Cryst. 14(1961) 526, 627.
- 8) N. Kato: J. Appl. Phys. 39(1968) 2225, 2231.
- 9) H. Hattori, H. Kuriyama, T. Katagawa and N. Kato: J. Phys. Soc. Japan 20(1965) 988.
- 10) H. Hattori, H. Kuriyama and N. Kato: J. Phys. Soc. Japan 20(1965) 1047.
- 11) H. Hattori and N. Kato: J. Phys. Soc. Japan 21(1966) 1772.
- 12) S. Homma, Y. Ando and N. Kato: J. Phys. Soc. Japan 21(1966) 1160.
- 13) M. Hart and A. R. Lang: Acta Cryst. 19(1965) 73.
- 14) N. Kato: Acta Cryst. 16(1963) 276, 282.
- 15) A. Howie and M. J. Whelan: Proc. Roy. Soc. A263(1961) 217; A267(1962) 206.
- 16) N. Kato: J. Phys. Soc. Japan 7(1952) 397, 406.
- 17) M. Wilkens: phys. stat. sol. 5(1964) 175; 6(1964) 939; 13(1966) 529.
- 18) H. A. Bethe: Ann. Phys. 87(1928) 55.
- 19) S. Takagi: Acta Cryst. 15(1962) 1311.
- 20) S. Takagi: J. Phys. Soc. Japan 26(1969) 1239.
- 21) D. Taupin: Bull. Soc. Fr. Minér. 87(1964) 469.

- 22) H. Schlangenotto: Z. Phys. 203(1967) 17.
- 23) P. Penning and D. Polder: Philips Res. Rept. 16(1961) 419.
- 24) U. Bonse: Z. Phys. 177(1964) 385.
- 25) N. Kato: J. Phys. Soc. Japan 18(1963) 1785.
- 26) N. Kato: J. Phys. Soc. Japan 19(1964) 67.
- 27) N. Kato: J. Phys. Soc. Japan 19(1964) 971.
- 28) K. Kambe: Z. Naturforsch. 20a(1965) 770.
- 29) N. Kato and Y. Ando: J. Phys. Soc. Japan 21(1966) 964.
- 30) M. Hart: Appl. Phys. Letters 7(1965) 96.
- 31) M. Hart: Z. Phys. 189(1966) 269.
- 32) Y. Ando and N. Kato: Acta Cryst. 21(1966) 284.
- 33) G. Hildebrandt: Z. Krist. 112(1959) 312.
- 34) L. P. Hunter: J. Appl. Phys. 30(1959) 874.
- 35) B. Okkerse and P. Penning: Philips Res. Rept. 18(1963) 82.
- 36) E. Fukushima, K. Hayakawa and H. Nimura: J. Phys. Soc. Japan 17(1962) 709.
- 37) E. Fukushima, K. Hayakawa and H. Nimura: J. Phys. Soc. Japan 18(1963) Supplement II, 348.
- 38) G. Borrmann, W. Hartwig and H. Irmeler: Z. Naturforschg. 13a(1958) 423.
- 39) Z. Ishii and K. Kohra: J. Phys. Soc. Japan 14(1959) 1250.
- 40) K. Kohra, S. Nakano and M. Yoshimatsu: J. Phys. Soc. Japan 18(1963) Supplement II, 341.
- 41) Y. Ando and N. Kato: J. Appl. Cryst. in printing.
- 42) G. J. Carron and L. K. Walford: J. Appl. Phys. 38(1967) 3949.

- 43) E. S. Meieran and I. A. Blech: J. Appl. Phys. 36(1965) 3162.
- 44) G. H. Schwuttke and J. K. Howard: J. Appl. Phys. 39 (1968) 1581.
- 45) S. Ikeno, H. Maruyama and N. Kato: J. Cryst. Growth 3, 4(1968) 683.
- 46) G. Borrmann: Phys. Z. 42(1941) 157.
- 47) M. von Laue: Acta Cryst. 2(1949) 106; 5(1952) 619.
- 48) A. J. van Bommel: Acta Cryst. 17(1964) 956.
- 49) U. Wattenberg: J. Appl. Cryst. 1(1968) 184.
- 50) K. Usami, T. Katagawa and N. Kato: Advances in X-Ray Analysis Vol.10, p.46 (Plenum Press, 1967).
- 51) W. H. Zachariasen: Theory of X-Ray Diffraction in Crystals (Wiley, New York, 1945).
- M. von Laue: Röntgenstrahl-Interferenzen (Akademische Verlag., Leipzig, 1948).
- R. W. James: The Optical Principles of the Diffraction of X-Rays (Bell and Sons, London, 1948).
- 三宅: X線の回折 (朝倉書店, 東京, 1949).
- 仁田: X線結晶学 上・下 (丸善, 東京, 1959).
- 52) N. Kato: Acta Cryst. A24 (1968) 157.
- 53) M. von Laue: Acta Cryst. 5(1952) 619.
- 54) N. Kato: Acta Cryst. 11(1958) 885.
- 55) P. P. Ewald: Acta Cryst. 11(1958) 888.
- 56) N. Kato: Acta Cryst. 13(1960) 349.
- 57) N. Kato: J. Phys. Soc. Japan 10(1955) 46.
- 58) N. Kato and J. R. Patel: Appl. Phys. Letters 13(1968) 42.
- 59) S. Timoshenko and J. N. Goodier: Theory of Elasticity

(McGraw-Hill, New York, 1951).

- 60) 斎藤: 機械学会論文集 18 (1952) 15.
- 61) H. J. McSkimin: J. Appl. Phys. 24(1953) 988.
- 62) J. F. Nye: Physical Properties of Crystals (Oxford, London, 1957).
- 63) J. D. Eshelby, W. T. Read and W. Shockley: Acta Metal. 1(1953) 251.
- 64) N. Ahmed: J. Appl. Phys. 37(1966) 9.
- 65) A. R. Lang and V. F. Miuscov: Appl. Phys. Letters 7(1965) 214.
- 66) S. Homma: unpublished.
- 67) A. R. Lang: Z. Naturforsch. 20a(1965) 636.
- 68) M. Yoshimatsu: J. Phys. Soc. Japan 18(1963) Supplement II, 335.
- 69) Y. Yukimoto: Japan. J. Appl. Phys. 8(1969) 568.
- 70) M. Renninger: Acta Cryst. 8(1955) 597.

弾性ひずみを持つ結晶
におけるX線回折現象
図・表

名古屋大学工学部
応用物理学科
安藤義則

報告番号	※甲第	535	号
------	-----	-----	---

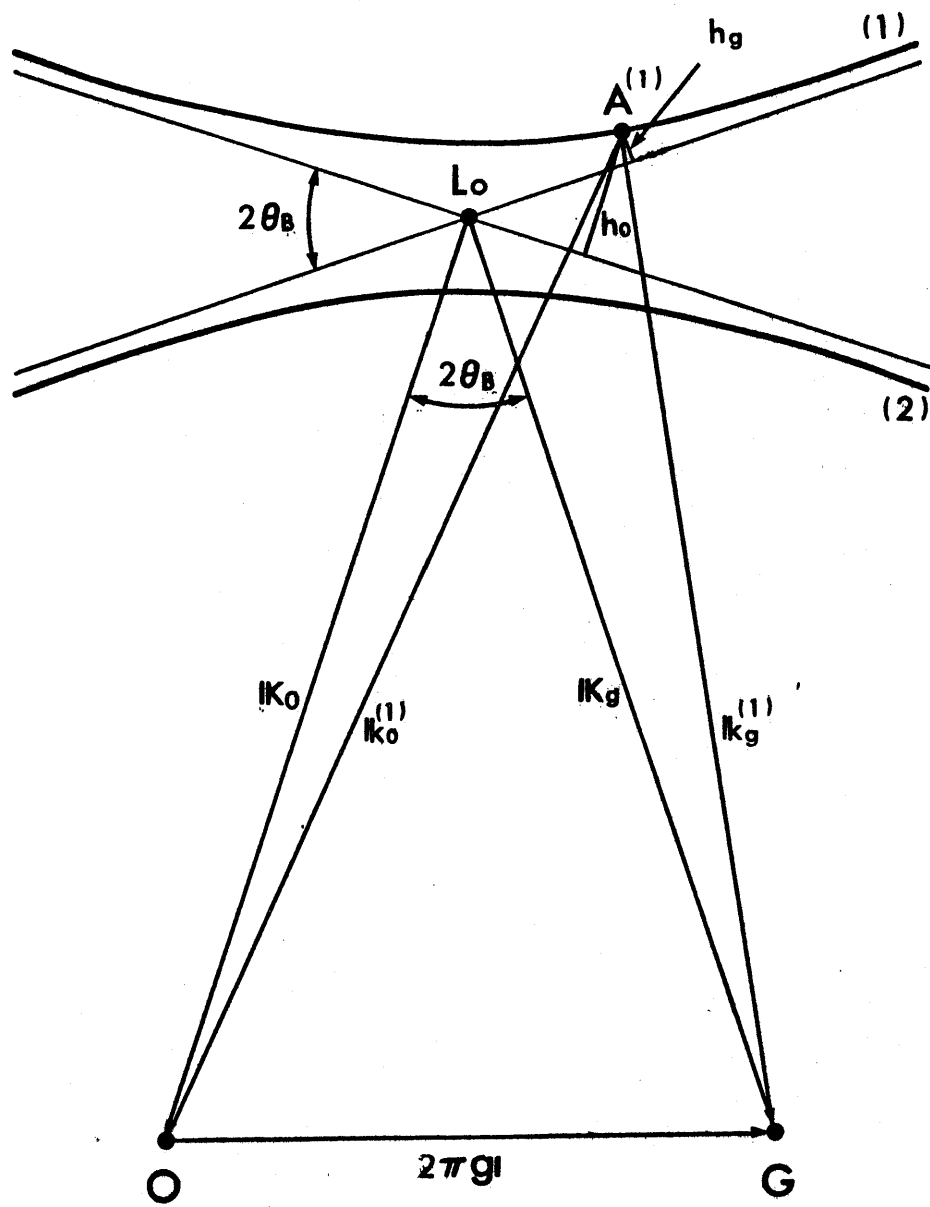


図1.1 分散面を示す図。 Lo : Lorentz 莫。 (1) および (2) は分枝の名前。 $A^{(i)}$ は分枝 (i) 上の励起莫。

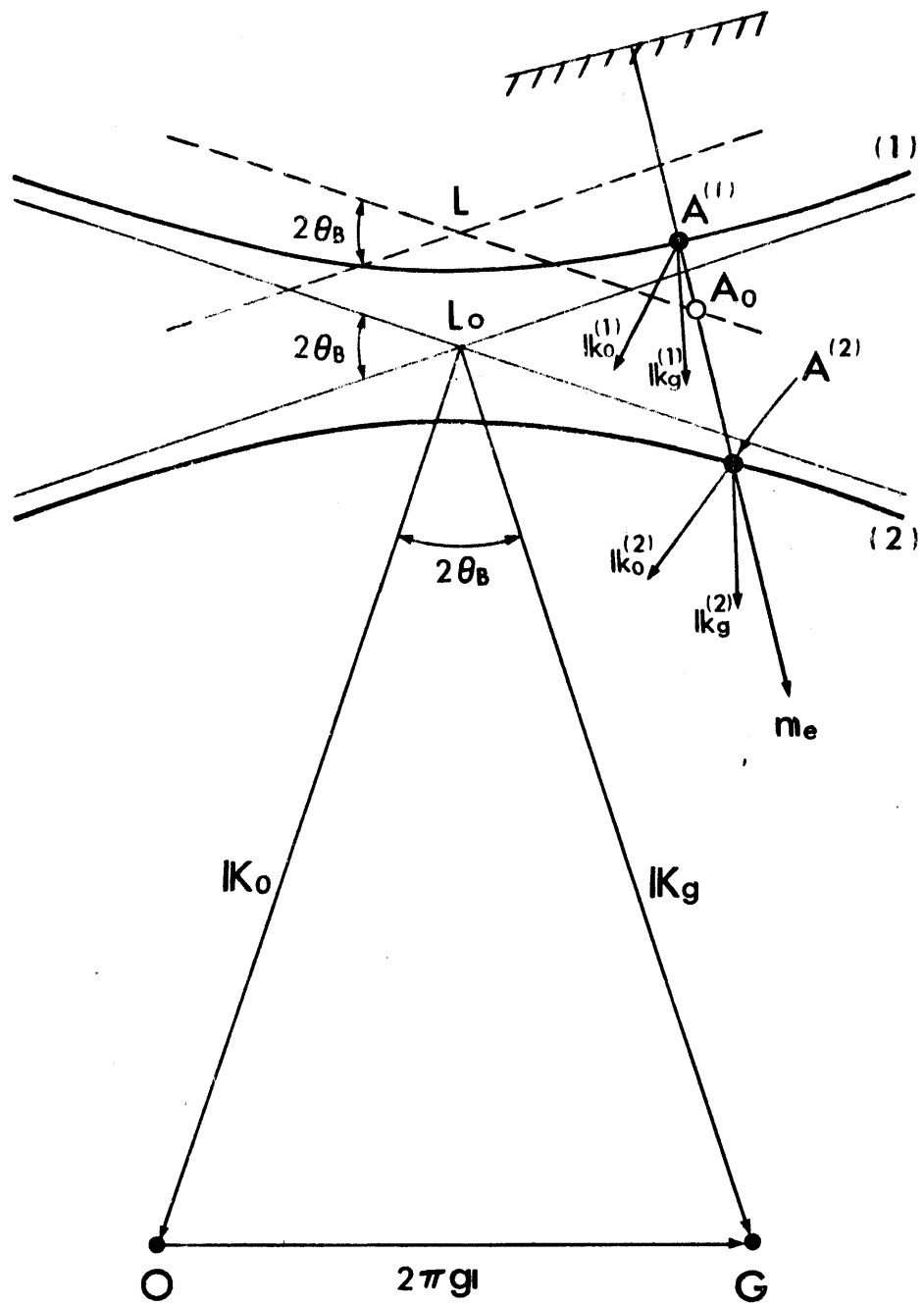
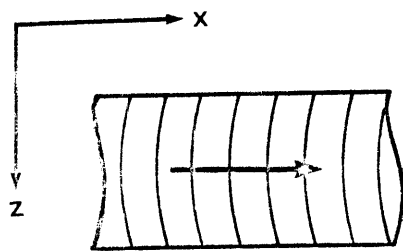
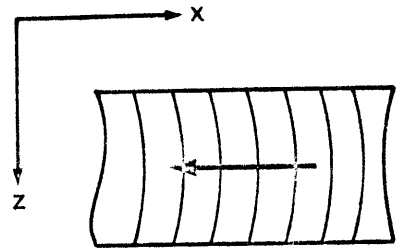


図 1.2 励起点の求め方。 A_0 : 真空中の入射波の励起点。
 m_e : 入射面の法線。 L : Lane 点。



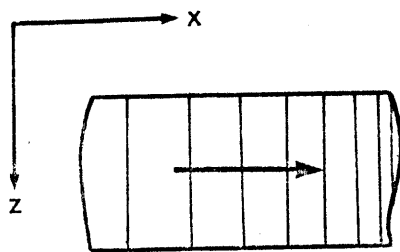
$$f_0 > 0$$

(a)



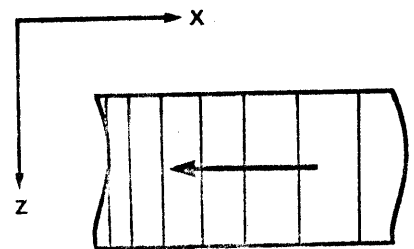
$$f_0 < 0$$

(b)



$$f_0 > 0$$

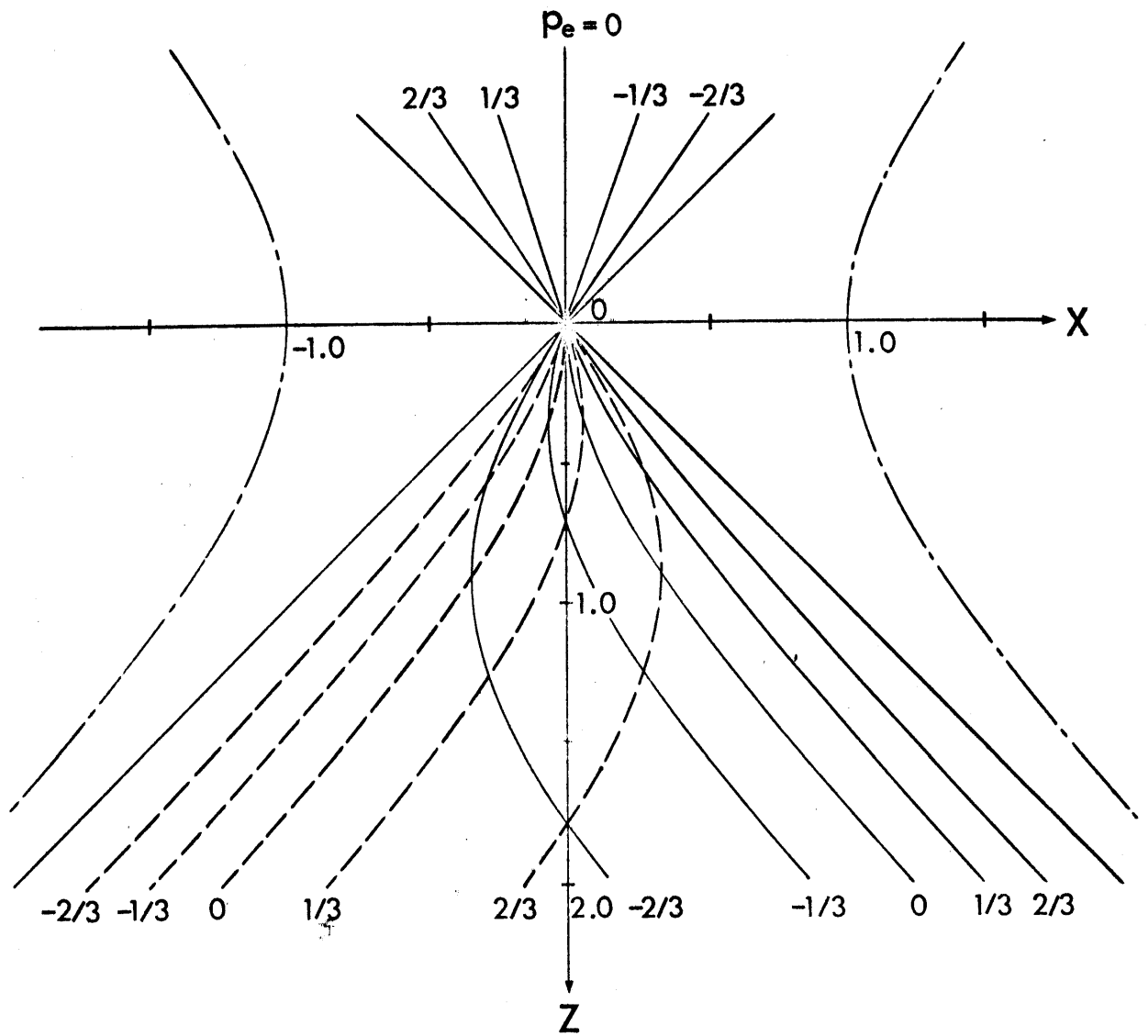
(c)



$$f_0 < 0$$

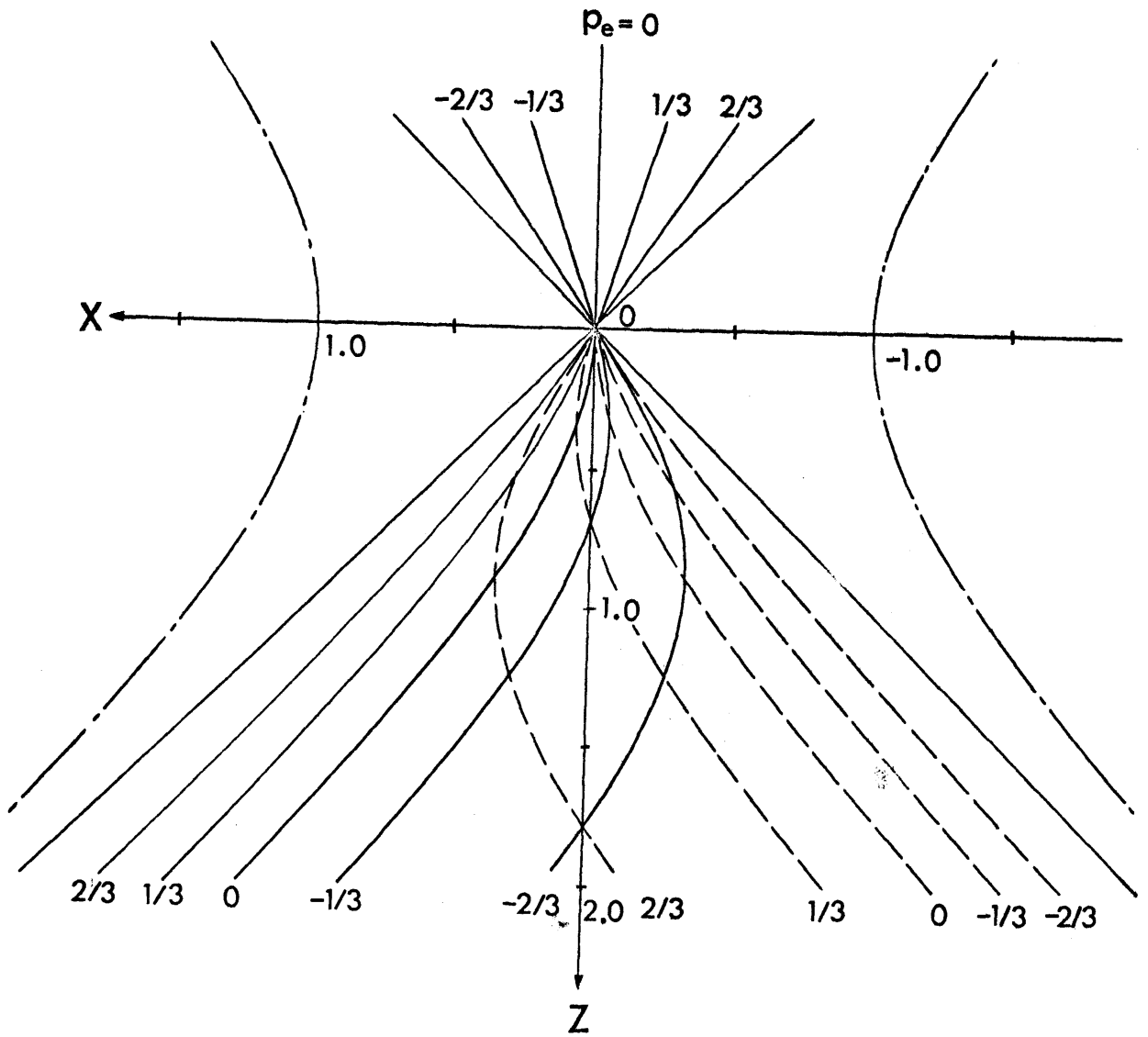
(d)

図3.1 一様ないすみ配の単純な例とその符号。(a) および (b) ; 網平面の曲りだけがある場合。(c) および (d) ; 面間隔の変化だけがある場合。結晶の中に表示した矢印は分散波の動く方向を示す。

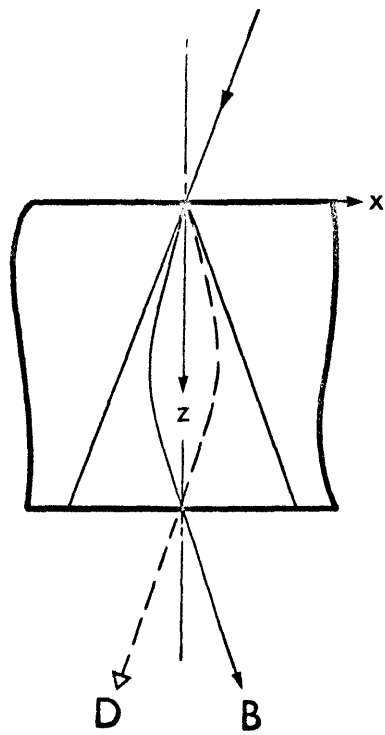


(a)

図 3.2 双曲線軌道の例 (規格化座標系). $Pe = 0, \pm 1/3, \pm 2/3$ の場合の軌道. 実線が分枝 (1) の波の軌道, 破線が分枝 (2) の波の軌道を表す.

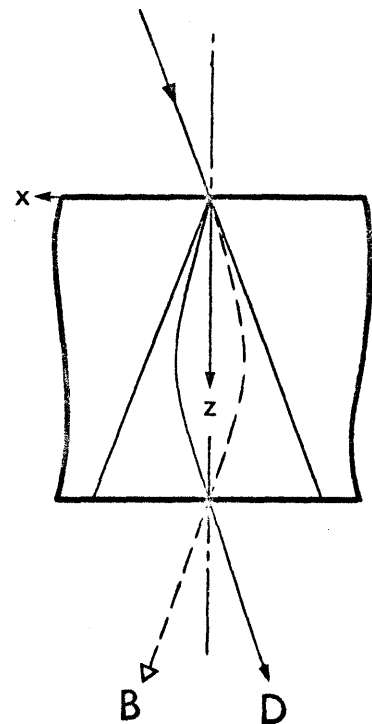


(b)



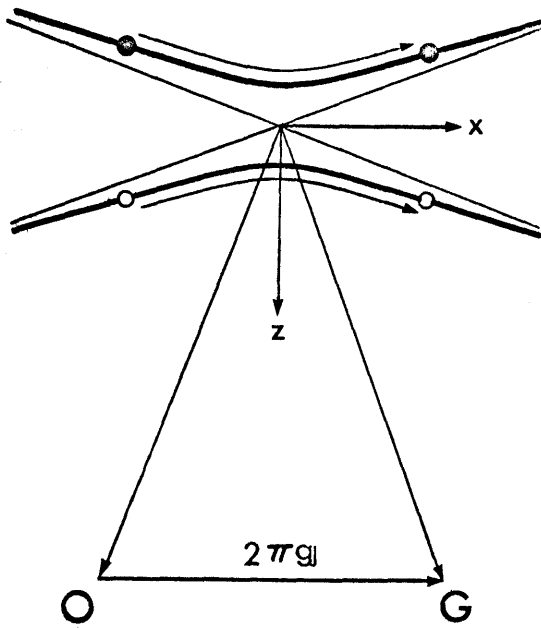
$$f_0 > 0$$

(a)



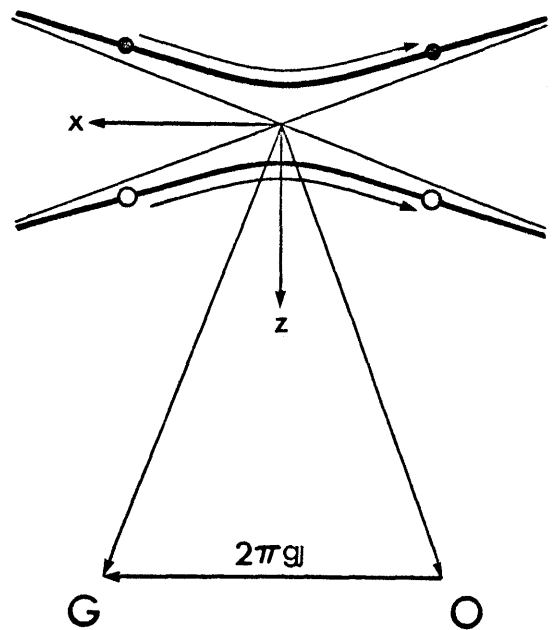
$$f_0 < 0$$

(b)



$$f_0 > 0$$

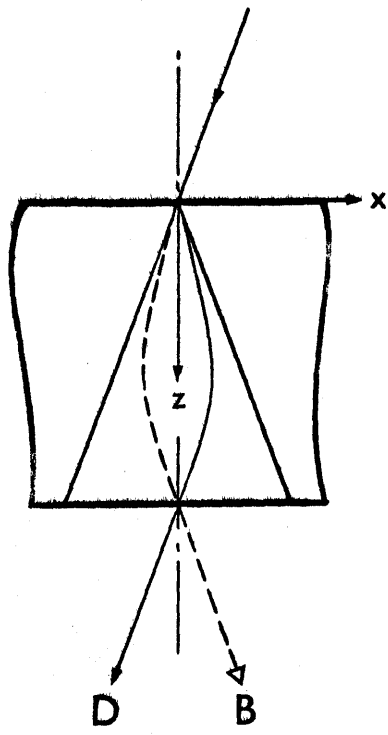
(c)



$$f_0 < 0$$

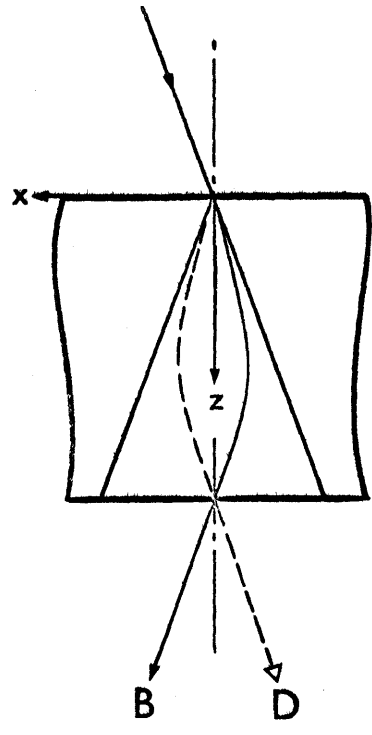
(d)

図 3.3 実空間における軌道と分散面の関係。おのこの図の上下が対応する。実線軌道が分枝(1)の波と、破線が分枝(2)の波の軌道を表わす。Dは入射波、Bは Bragg 反射波を表わす。



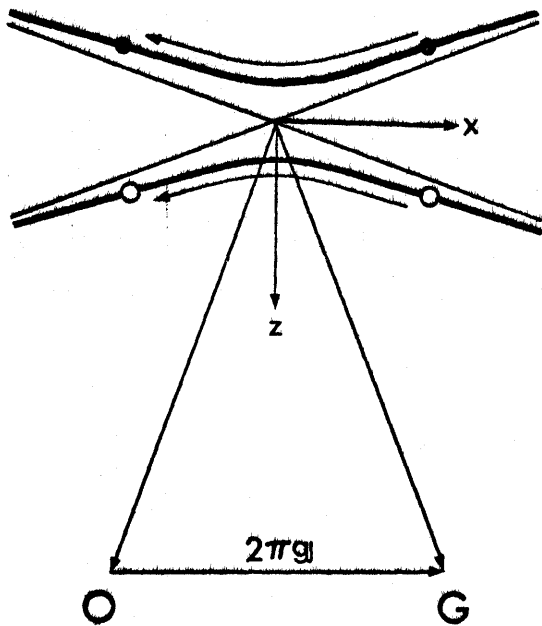
$$f_0 < 0$$

(e)



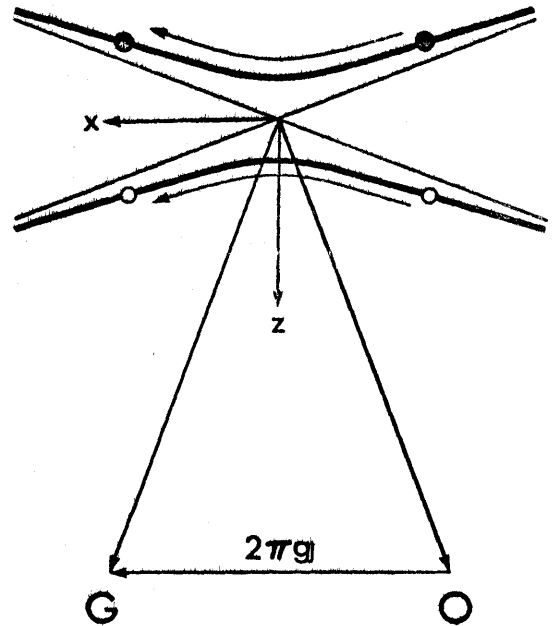
$$f_0 > 0$$

(f)



$$f_0 < 0$$

(g)



$$f_0 > 0$$

(h)

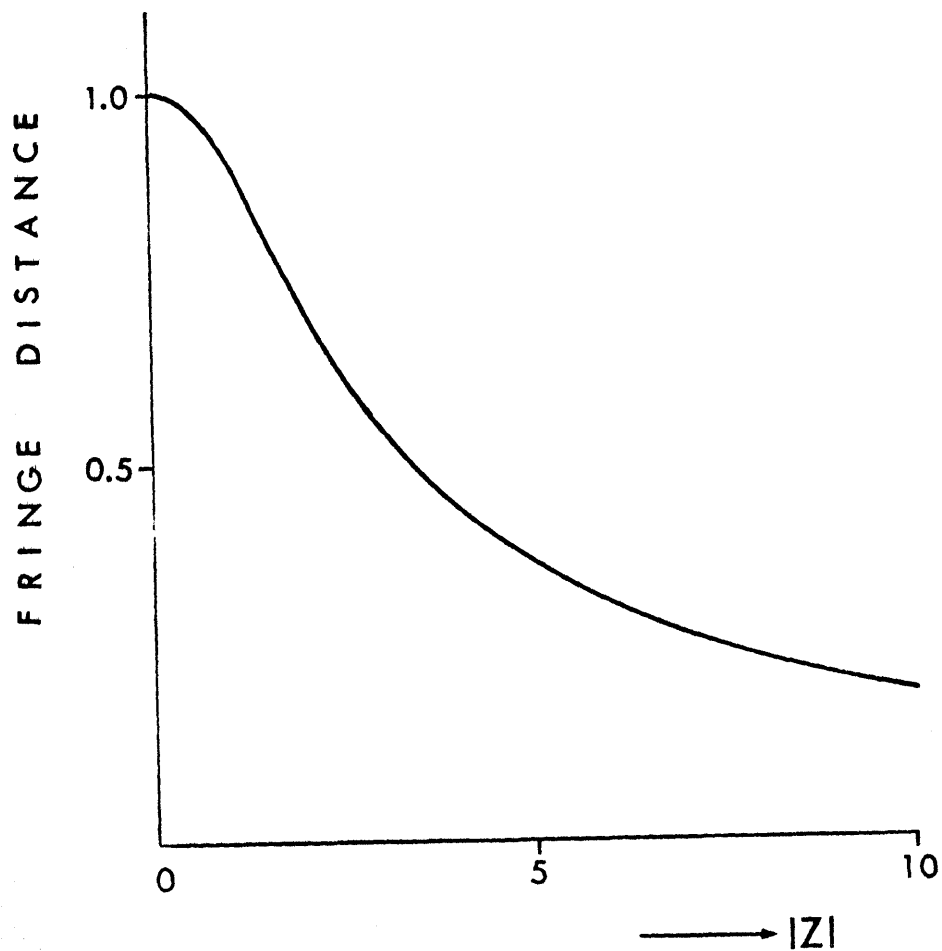


図 3.4 網平面上の Pendellösung 縞の間隔の変化。完全結晶の縞間隔で規格化した値, $\lambda_{x=0}/\lambda_0$ が示されている。

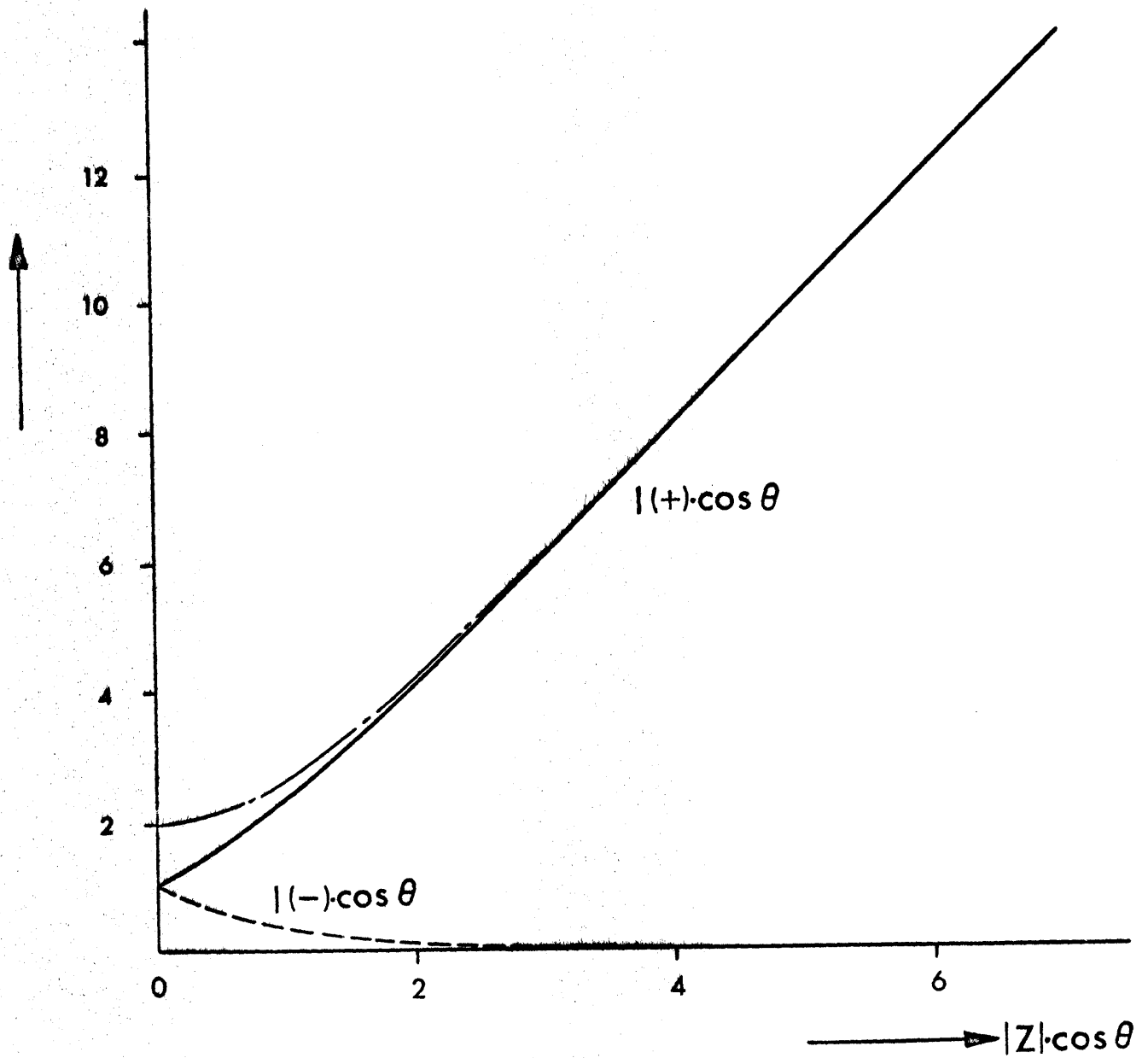


図3.5 $I(\pm)\cdot\cos\theta$ の図。一実線は、
 $I(+)\cdot\cos\theta + I(-)\cdot\cos\theta$ と表わす。

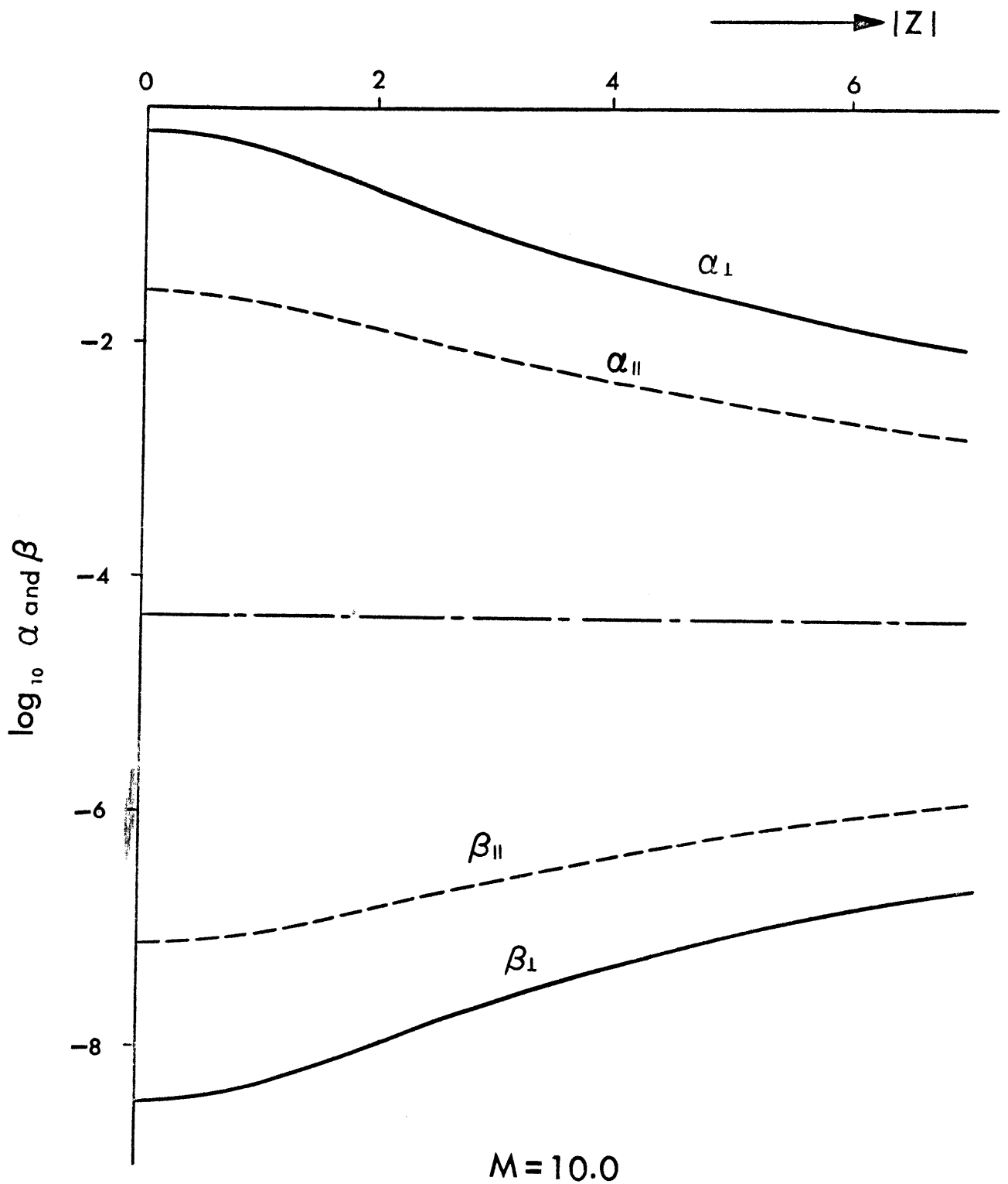
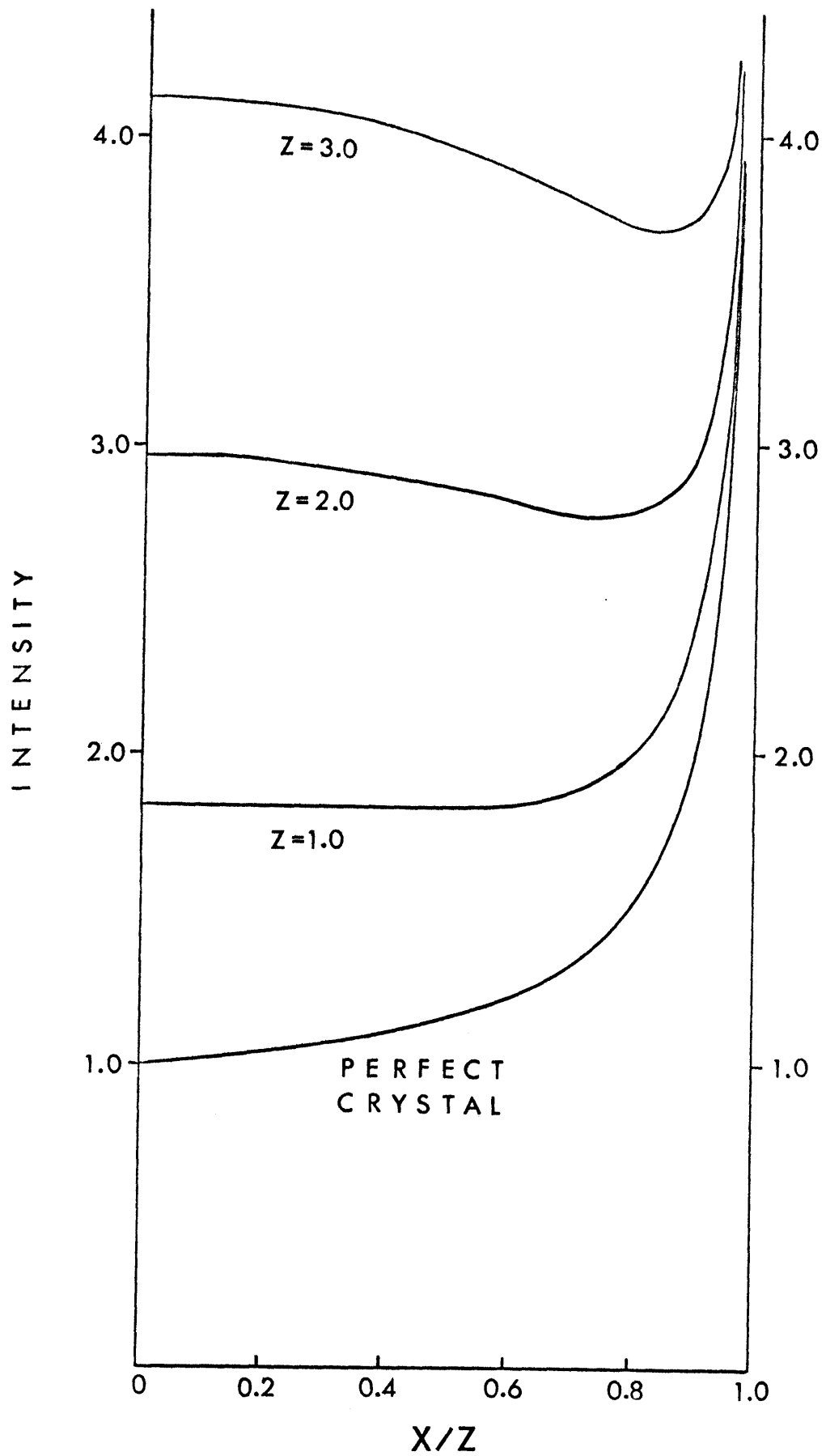


図3.6 Bormann 吸収の強度因子。一頁鎖線は平均の吸収の強度因子を表わす。



(a)

図 3.7 Section 圓形の強度。Pendellösung 線に対応する項は除く。(a) $M=0.6$ 。Zが正の場合。

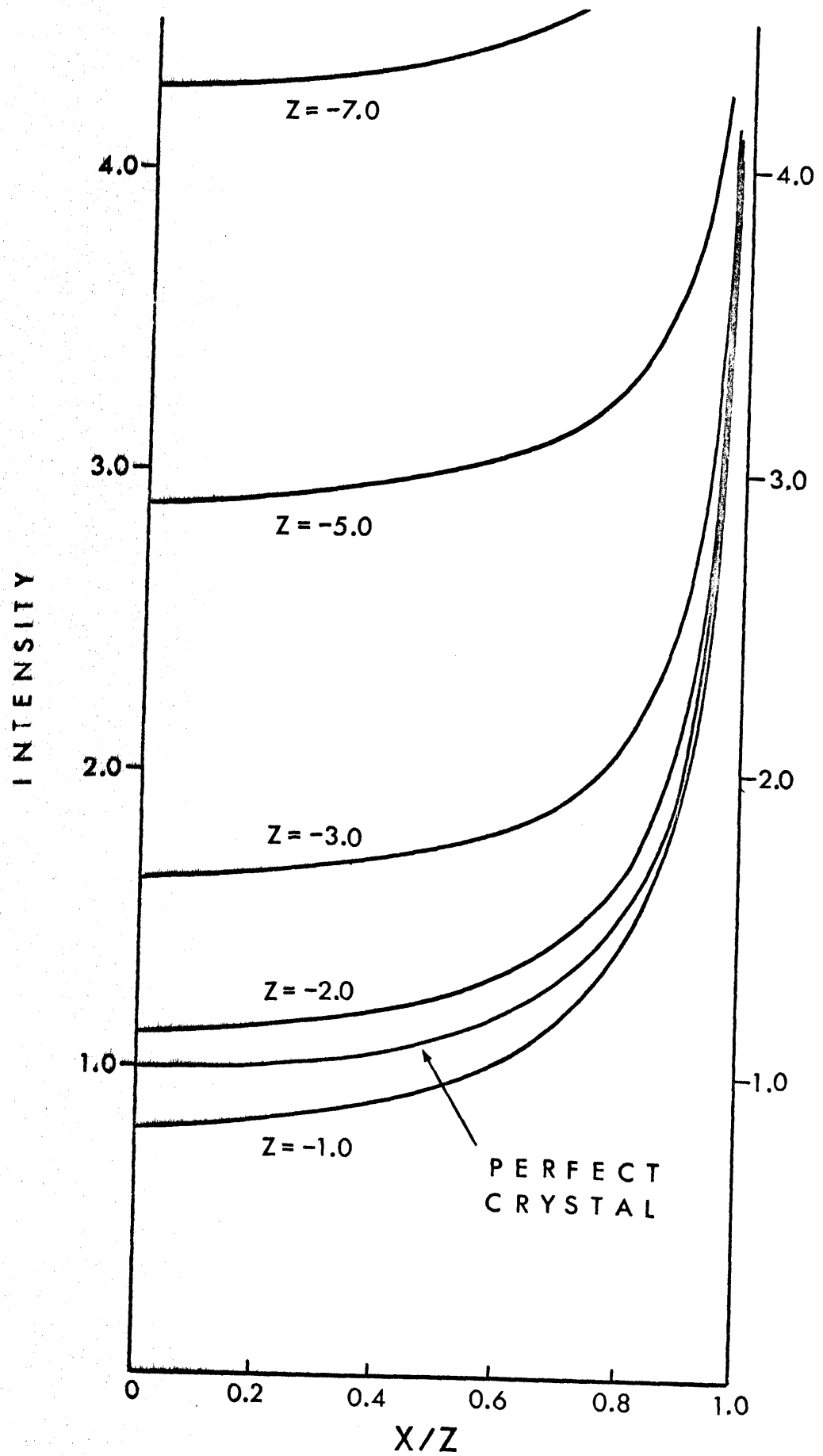


図 3.7 (b) $M=0.6$. Z が負の場合.

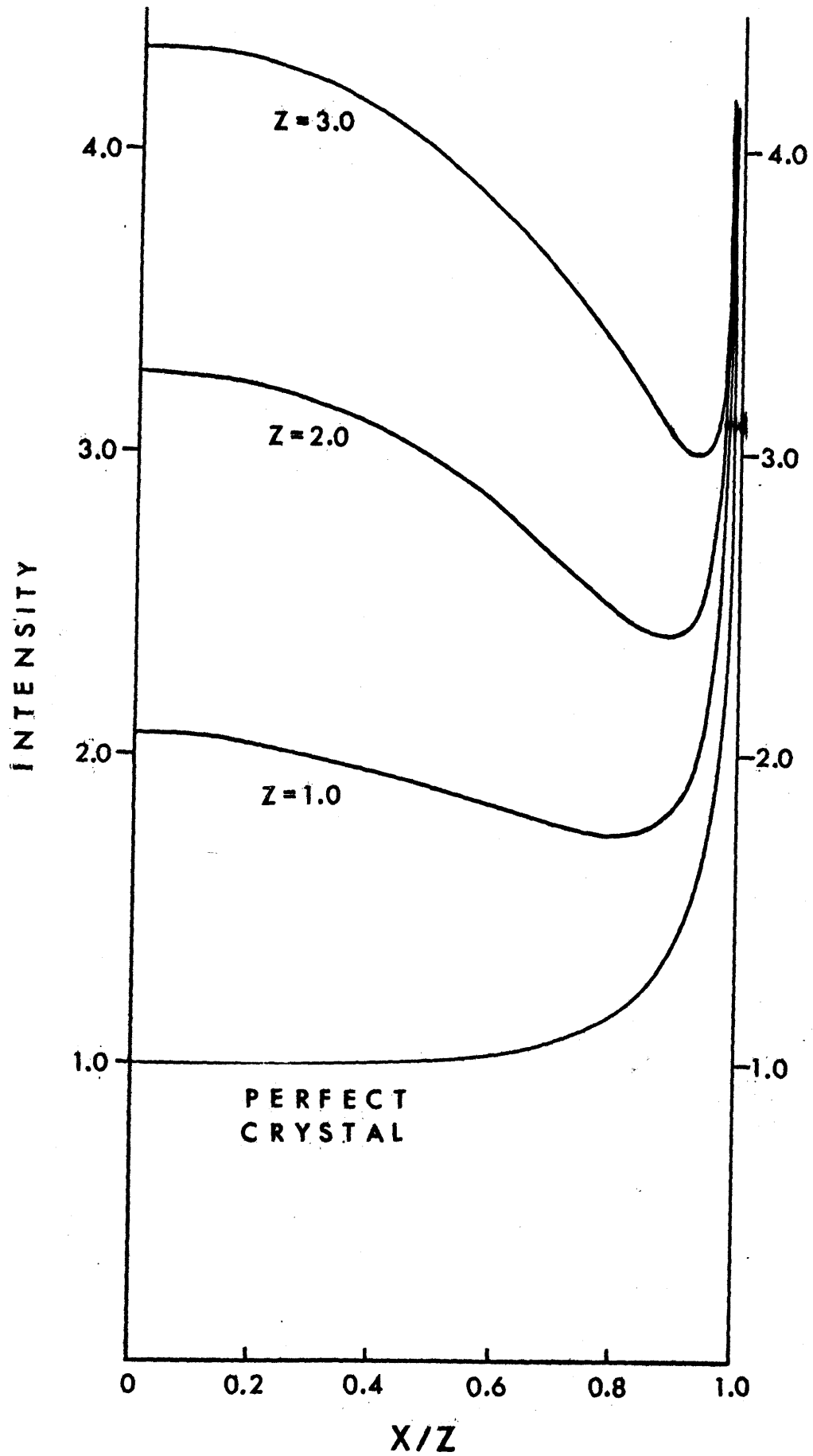


図 3.7 (c) $M = 1.2$, Z が正の場合

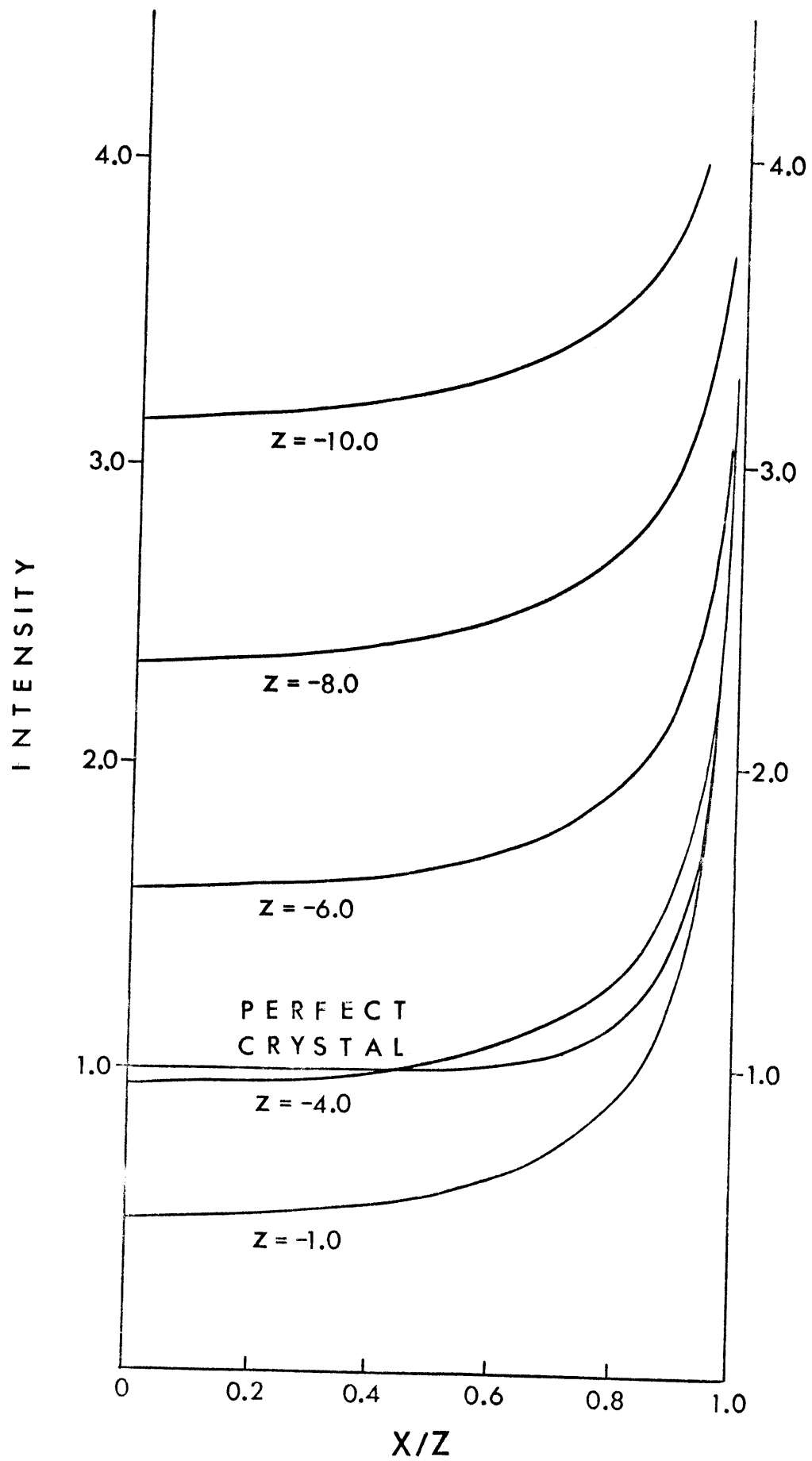


図 3.7 (d) $M = 1.2$. Z が負の場合.

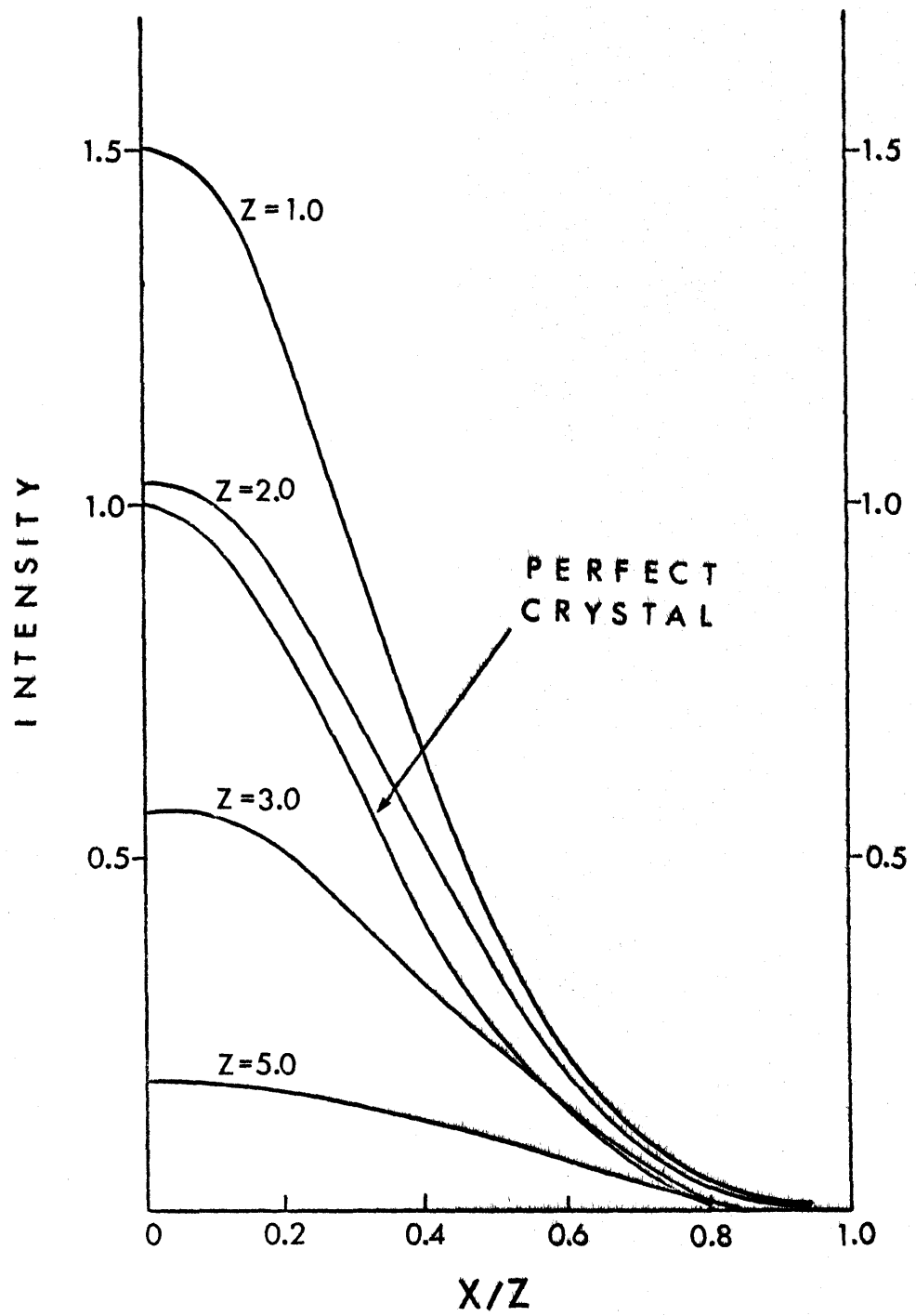


図 3.7 (e) $M=11.7$. Z が正の場合。

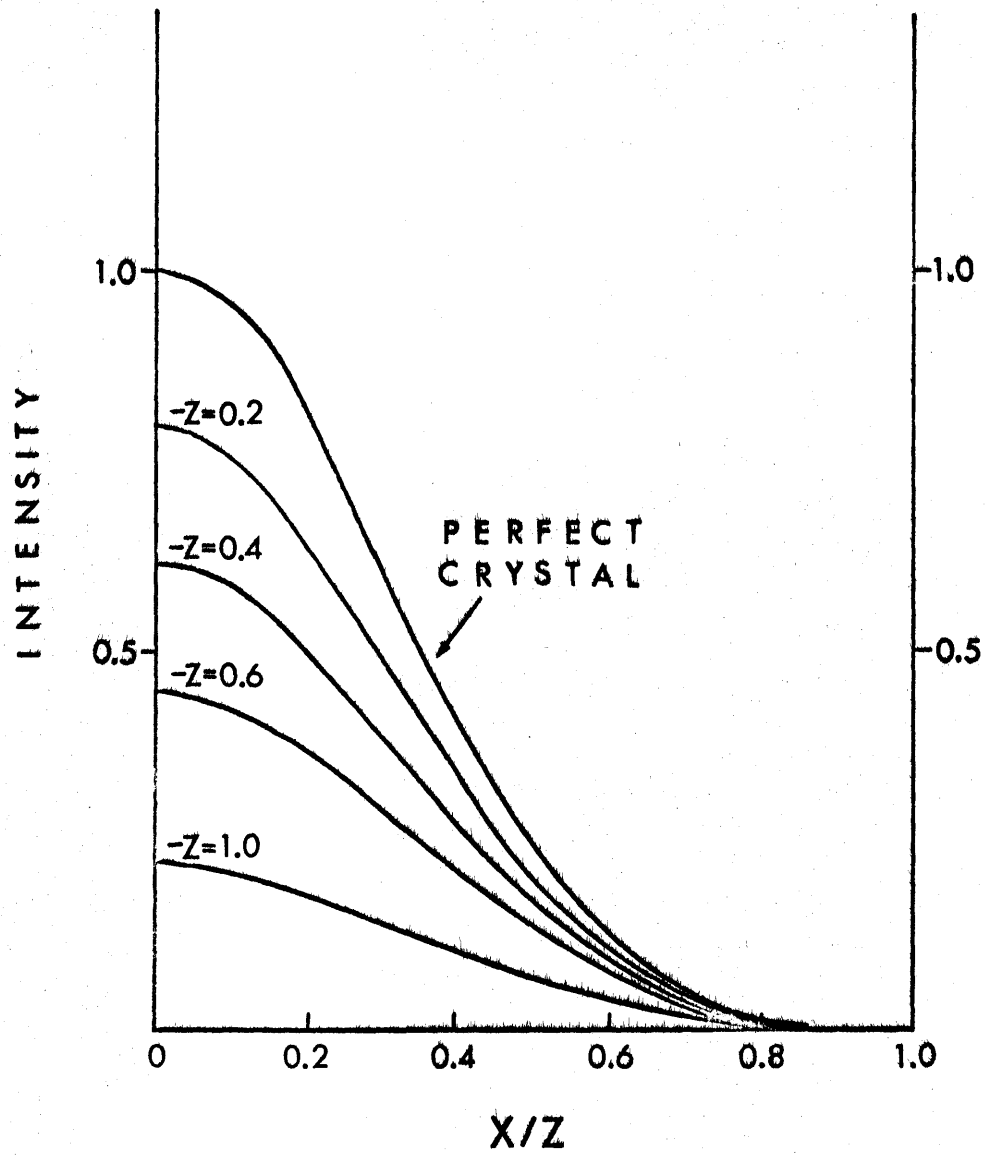
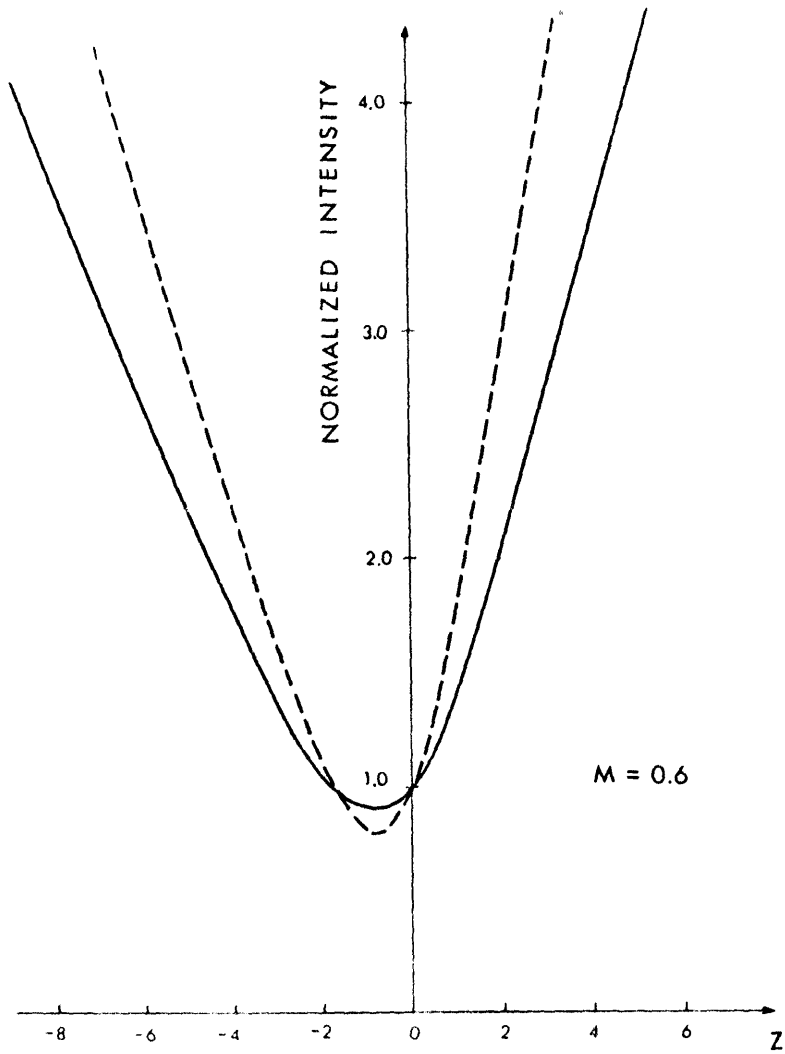
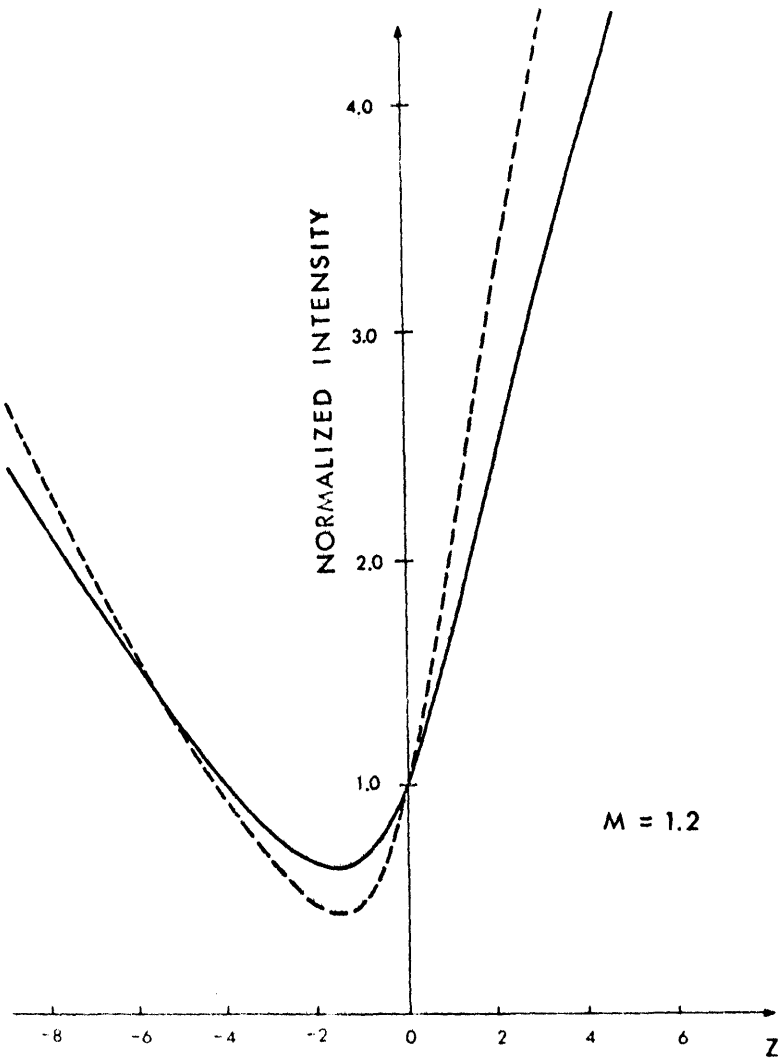


図 3.7 (f) $M=11.7$. Z が負の場合。



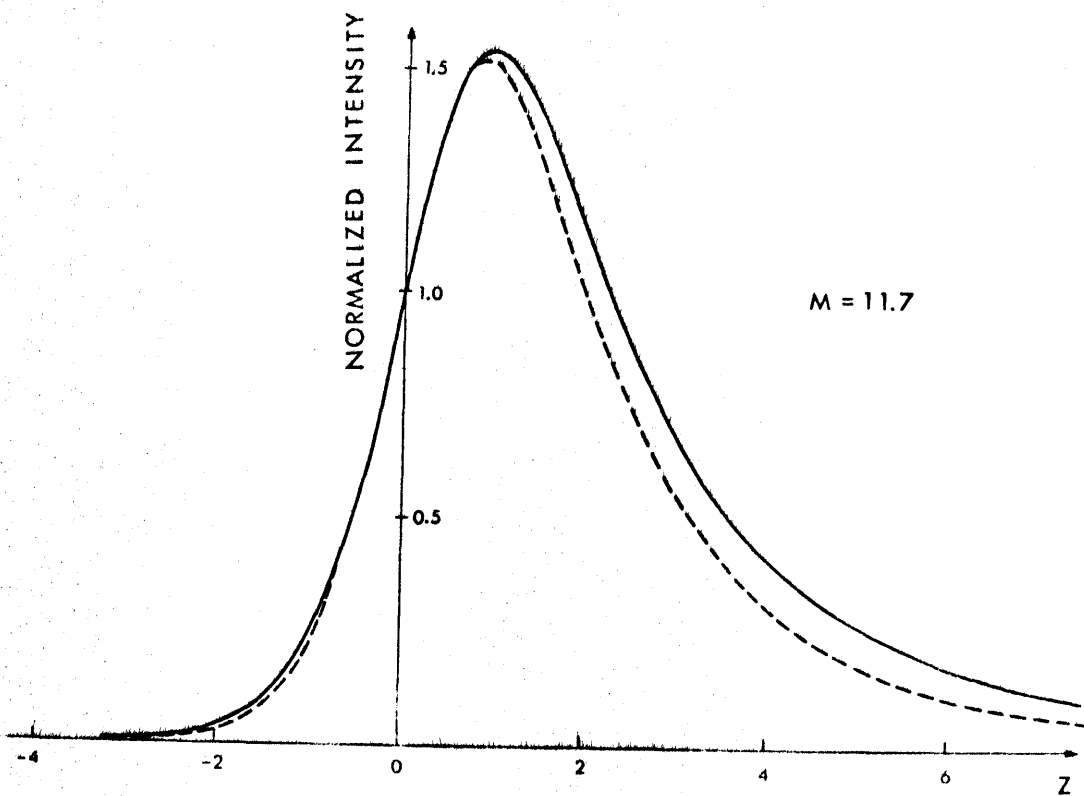
(a)

図3.8 Z に対する強度曲線。振動項は除く。実線が *Traverse* 四形の強度 $E(Z, M)/E(0, M)$ 。破線が *Section* 四形の中心 ($X=0$) における強度 $I(Z, M)/I(0, M)$ と表わす。



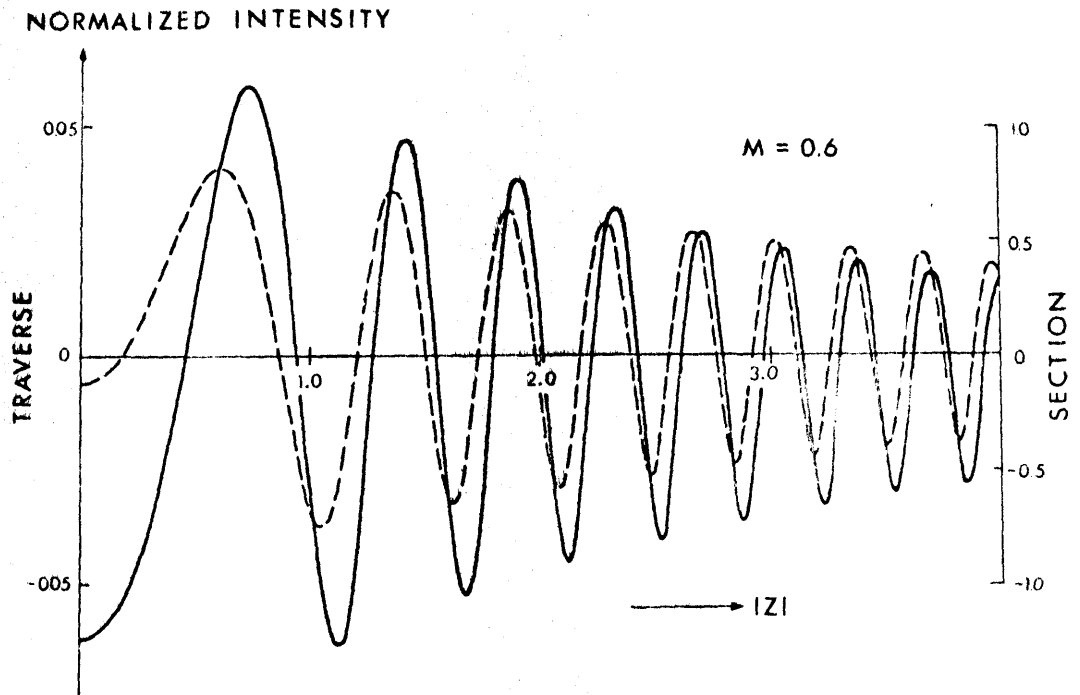
(b)

图 3.8



(c)

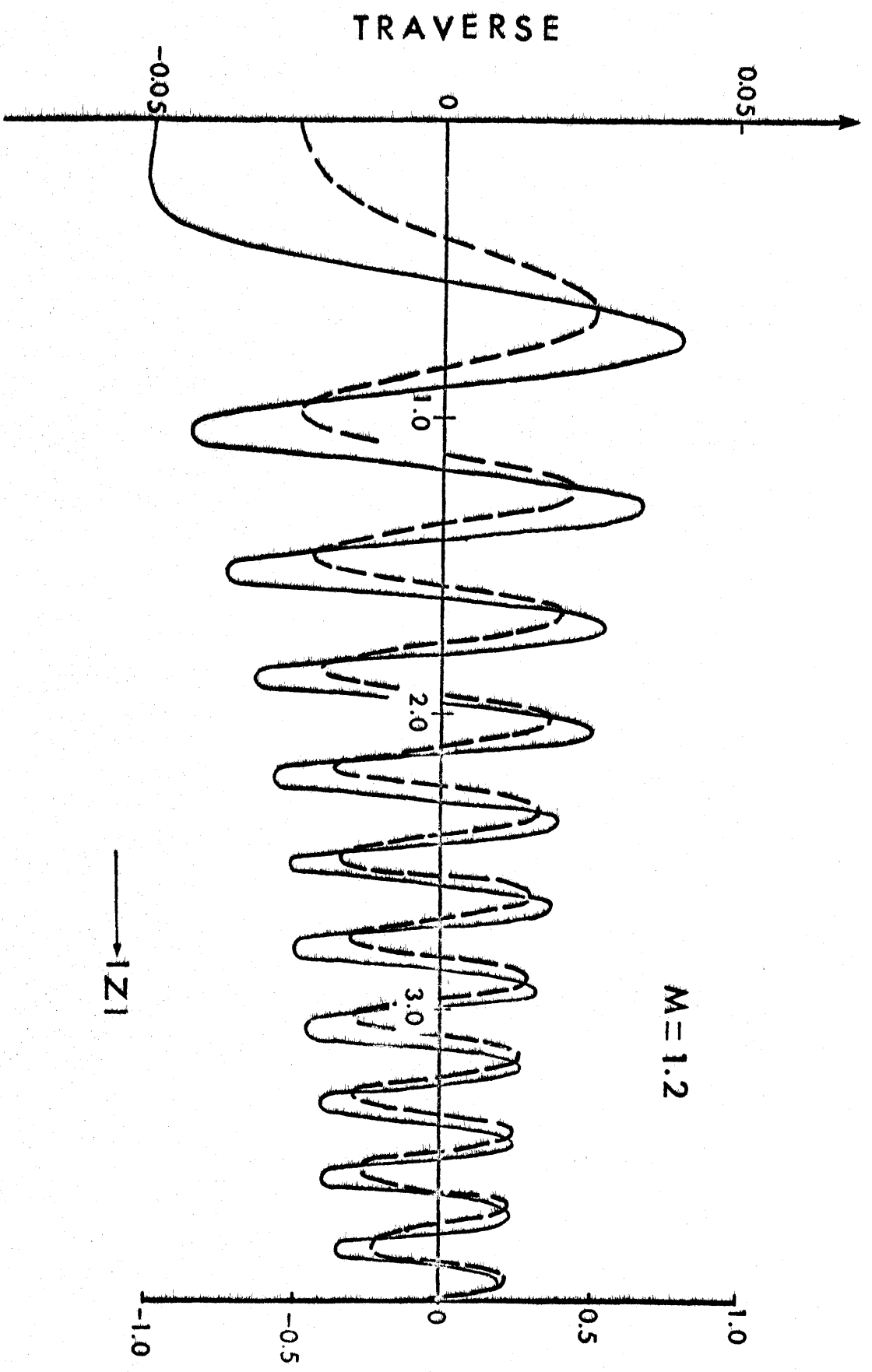
图 3.8



(a)

図 3.9 Pendellösung 線の $|Z|$ に対する強度曲線。実線は Traverse 図形の強度 $F(Z)/E(0, M)$ を表わし、破線は Section 図形の中心における強度 $2\sqrt{I^{(1)}I^{(2)}} \cos \Phi / I(0, M)$ を表わす。一定の位相差 Φ としては $\pi/2$ を用いた。Section 図形と Traverse 図形で強度のスケールが異なることに注意。

NORMALIZED INTENSITY



SECTION

(b)

3.9

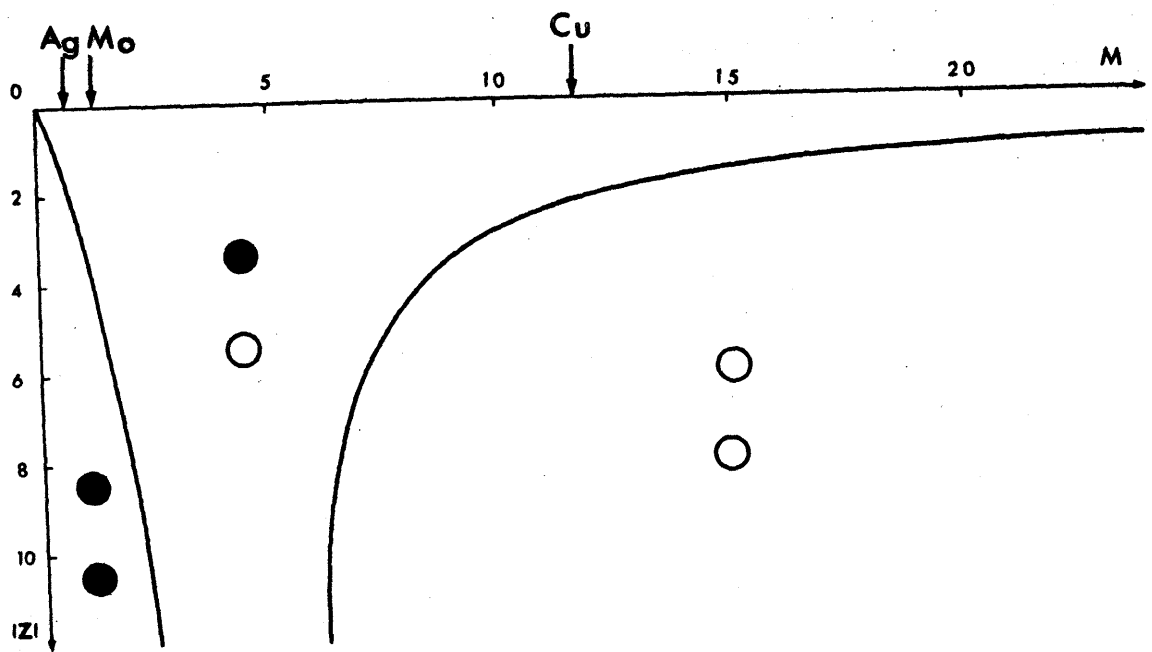


図3.10 黒および白のコントラストの領域..上の丸と下の丸はそれぞれ Z が正および負の場合を示す。矢印で示した値は、それぞれの波長を用いたときの、 0.8mm 厚の Si の $\{220\}$ 反射の M の値を示す。

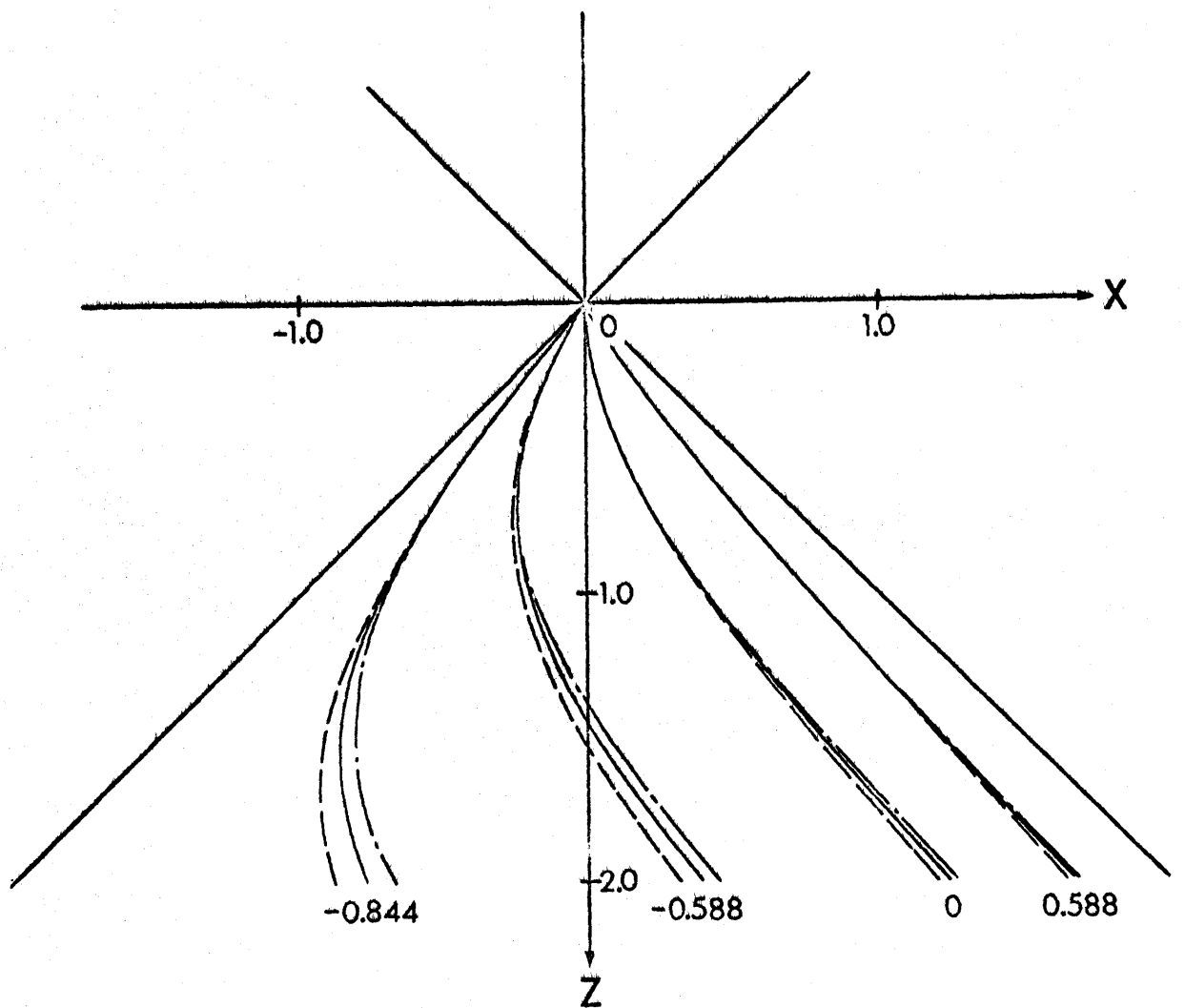


図4.1 ϵ に比例するひずみ勾配がある場合の軌道の例。
 実線は振動項のないとき，一点鎖線は振動係数 $A_1 = 1/20$ のとき，破線は $A_2 = -1/20$ のときの軌道を表わす。
 軌道の先端に書かれているのは入射角での傾き θ_0 の値。

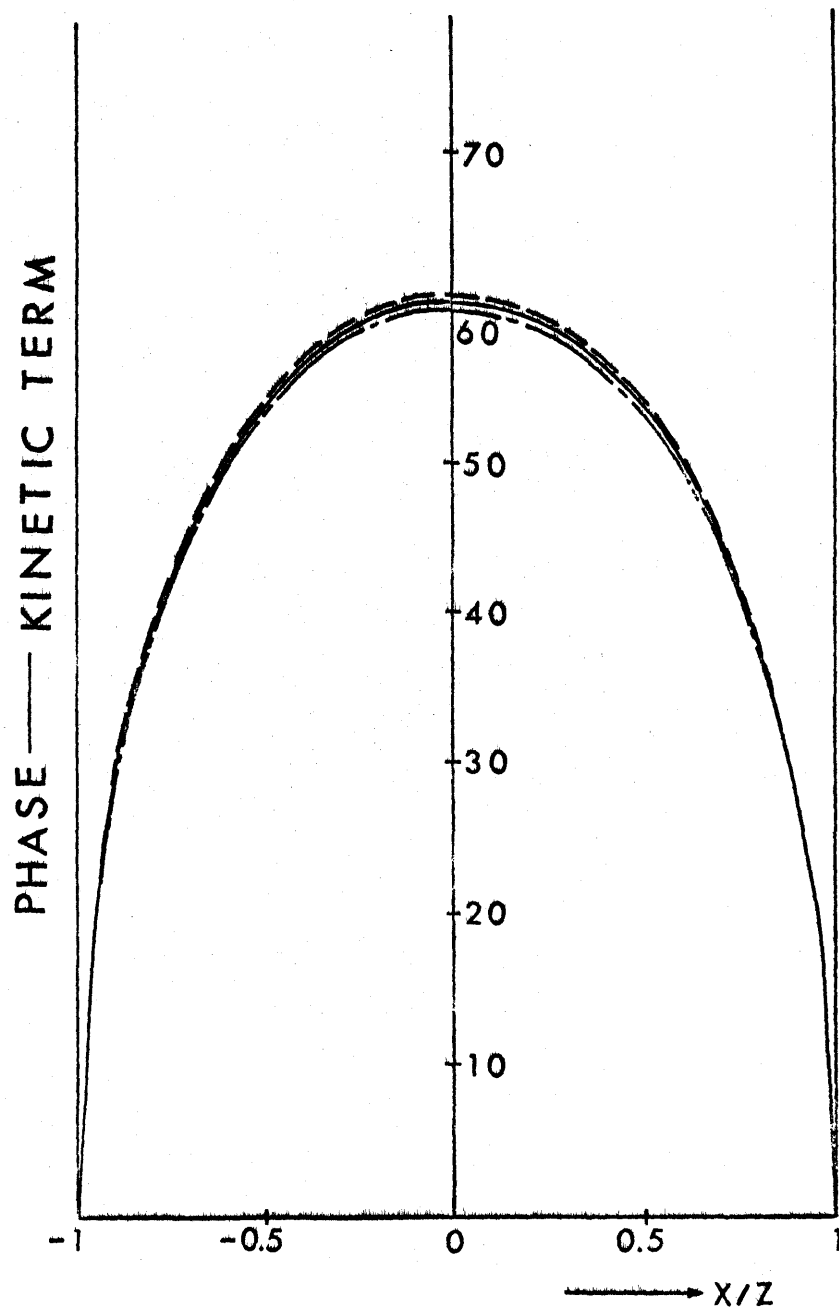


圖 4.2 ξ に比例する μ の配がある場合の kinetic term. $Z=2$ の場合。実線は振動のないときの値、
 - 点鎖線および破線はそれぞれ $R=0.1$ および -0.1 のときの値。

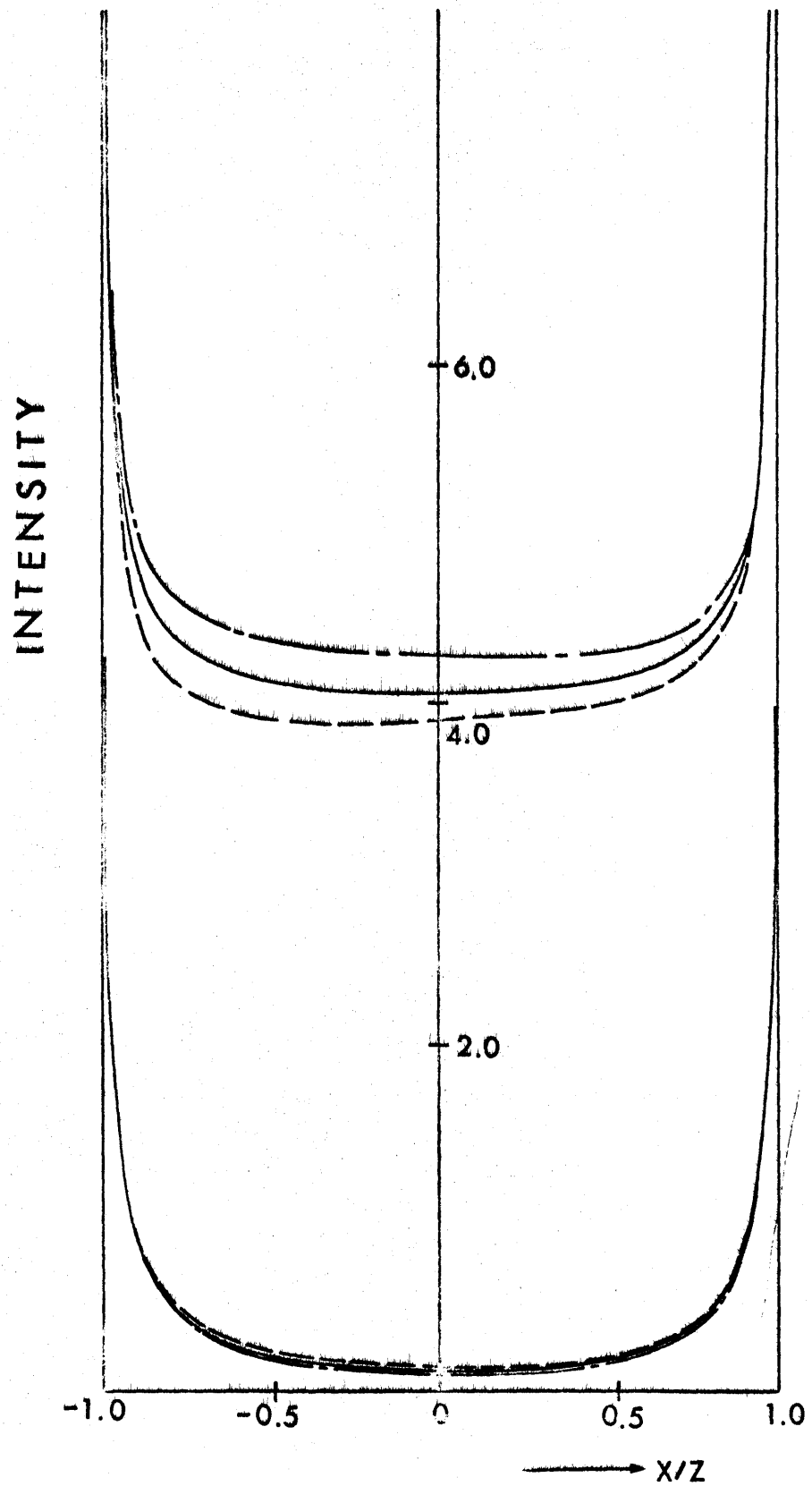
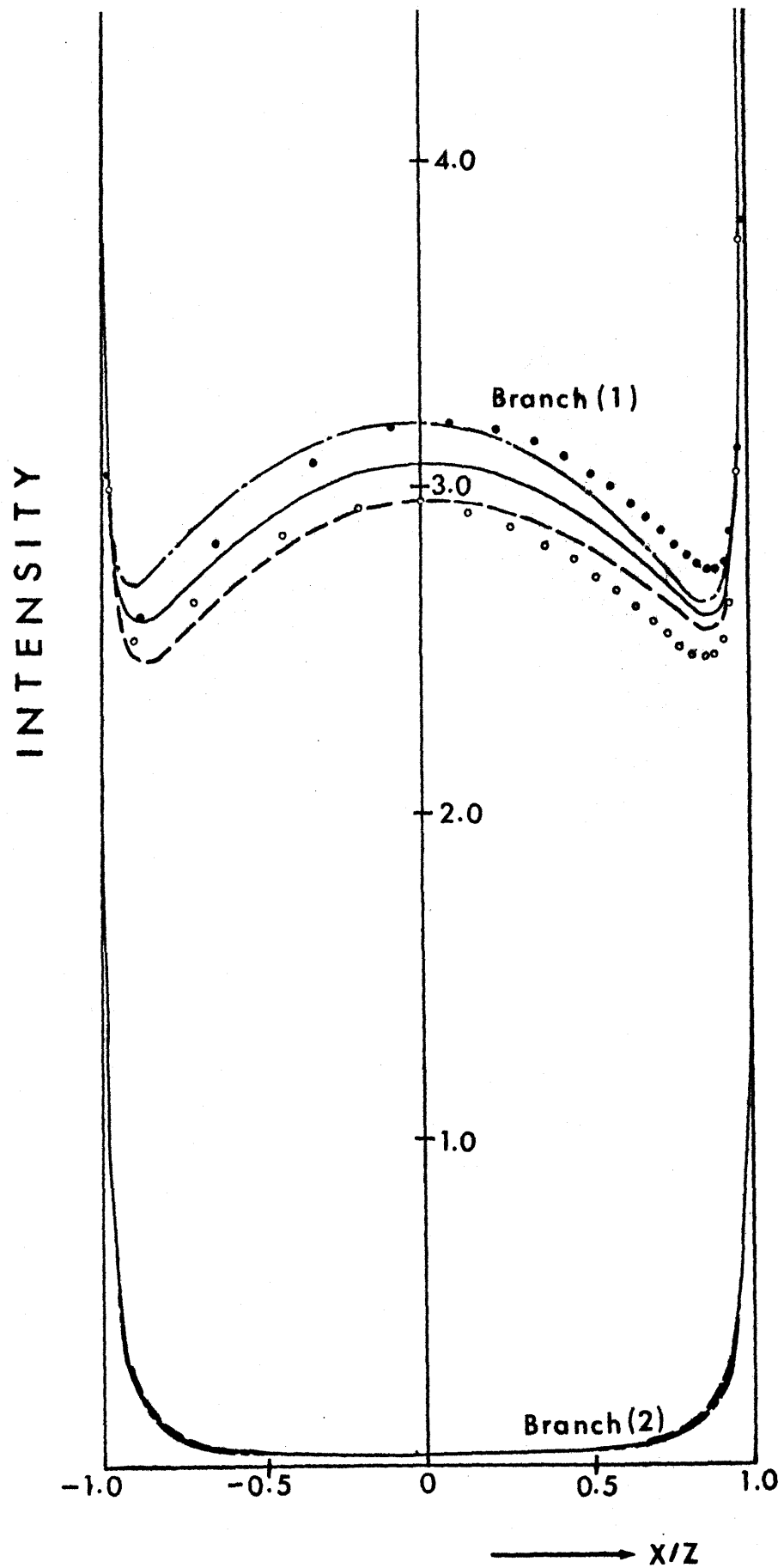
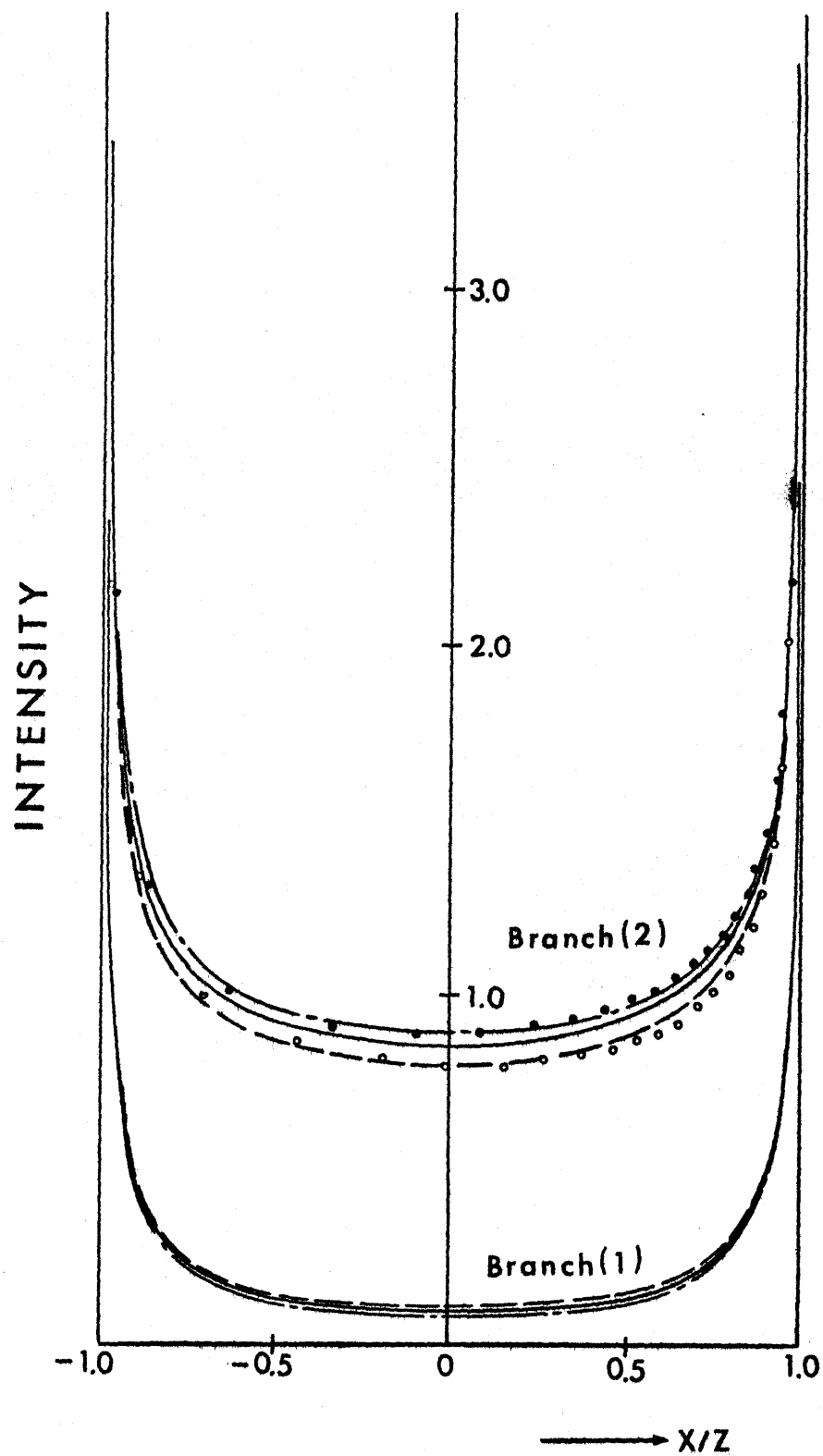


図 4.3 吸収を考慮しないときの *Section* 四形の強度。
 $Z = |z|$ の場合。実線，- 点鎖線および破線はそれ
 れ $R = 0, 0.1$ および -0.1 に対応する。



(a)

図 4.4 吸収を考慮した Section 図形の強度 ($M=0.73$)
 実線, 一英鎖線および破線はそれぞれ $R=0, 0.1$ およ
 び -0.1 の場合の値を示す。(a) $Z=2.0$ の場合。



(b)

图4.4 (b) $Z = -2.0$ の場合。

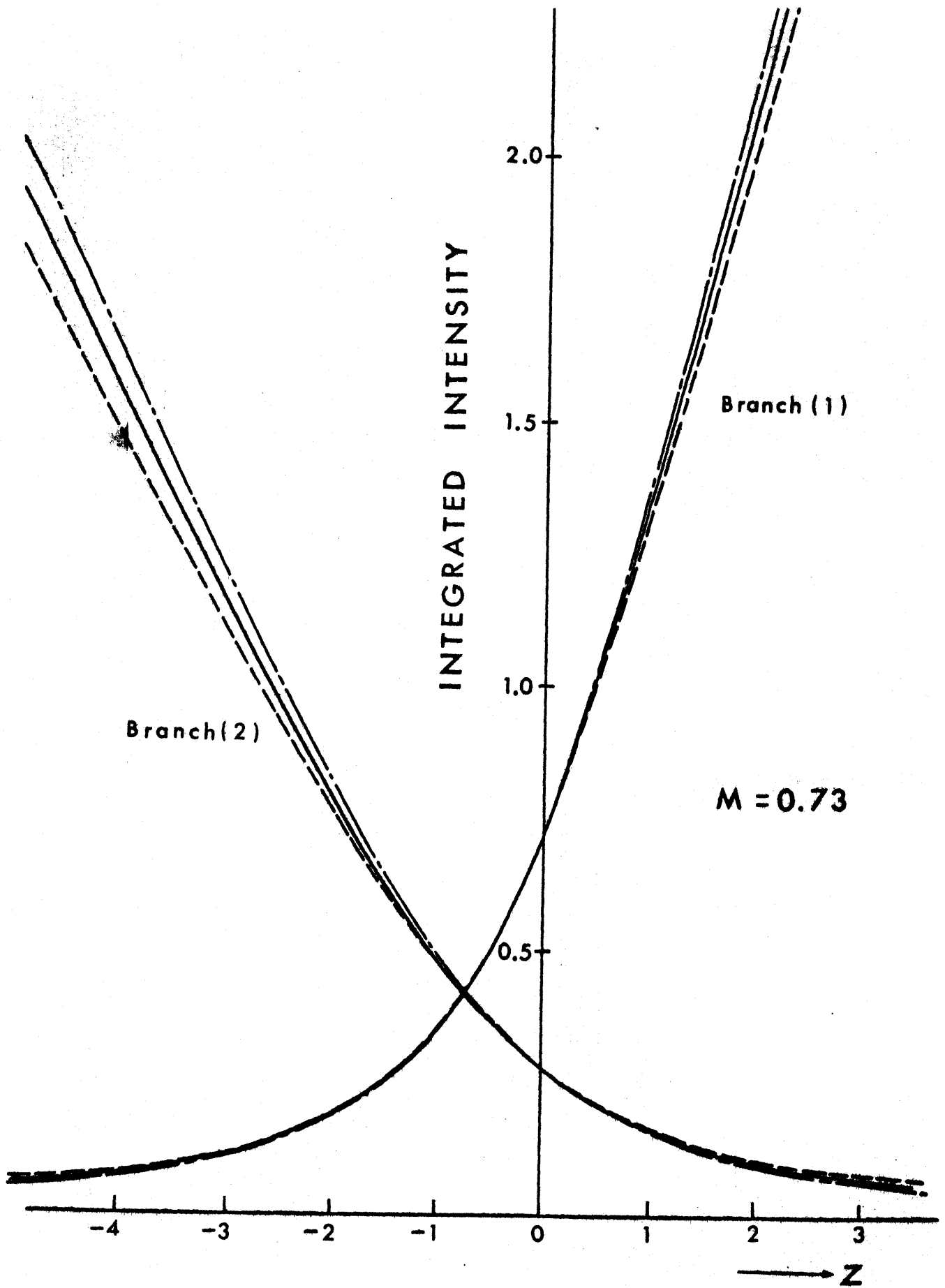
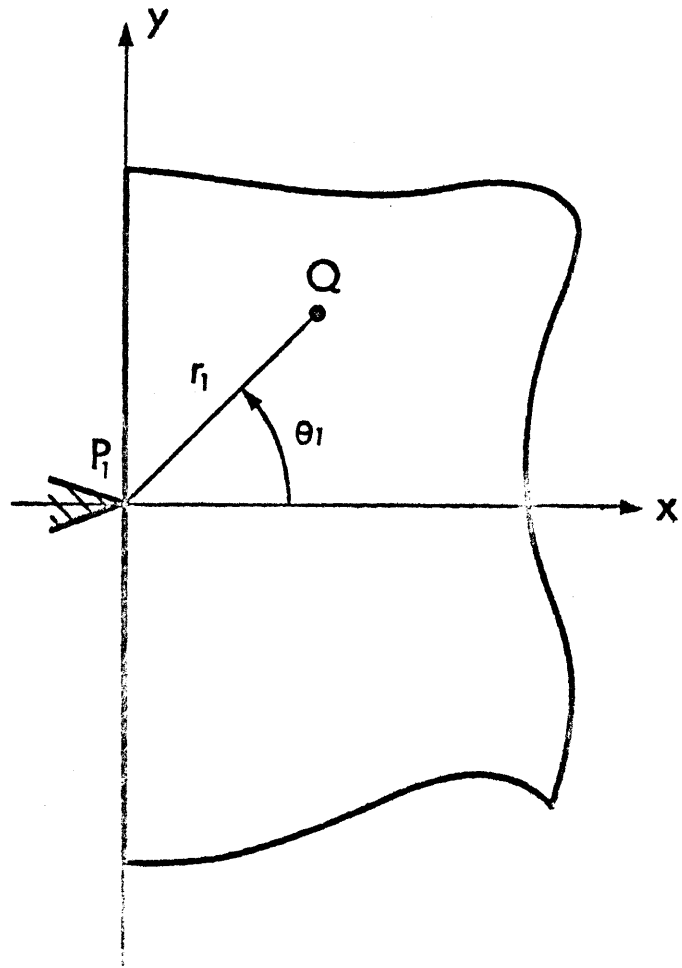
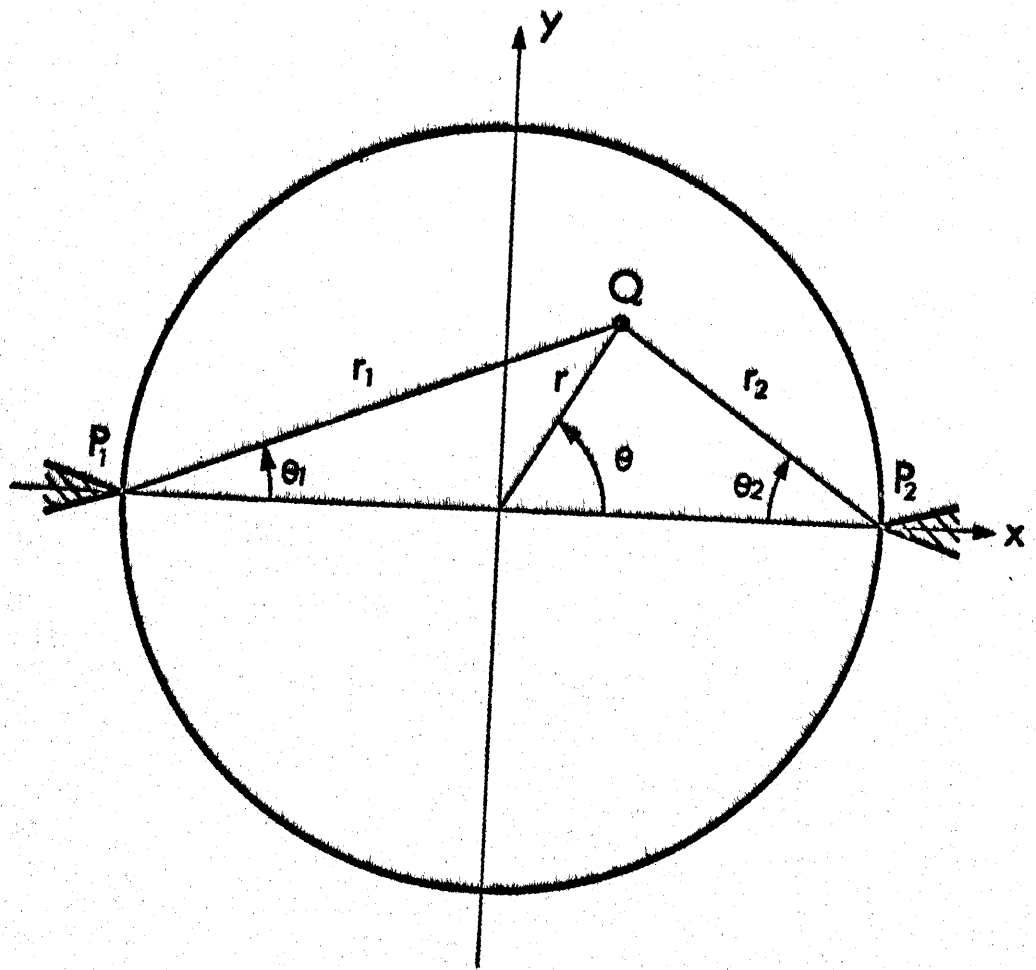


図 4.5 Traverse 圓形の強度 ($M=0.73$)。實線, - 實
鎖線および破線はそれぞれ $R=0, 0.1$ および -0.1 に対応する。



(a)

図 5.1 座標の定義. (a) 半無限平板の場合.



(b)

図 5.1 (b) 四板の場合.

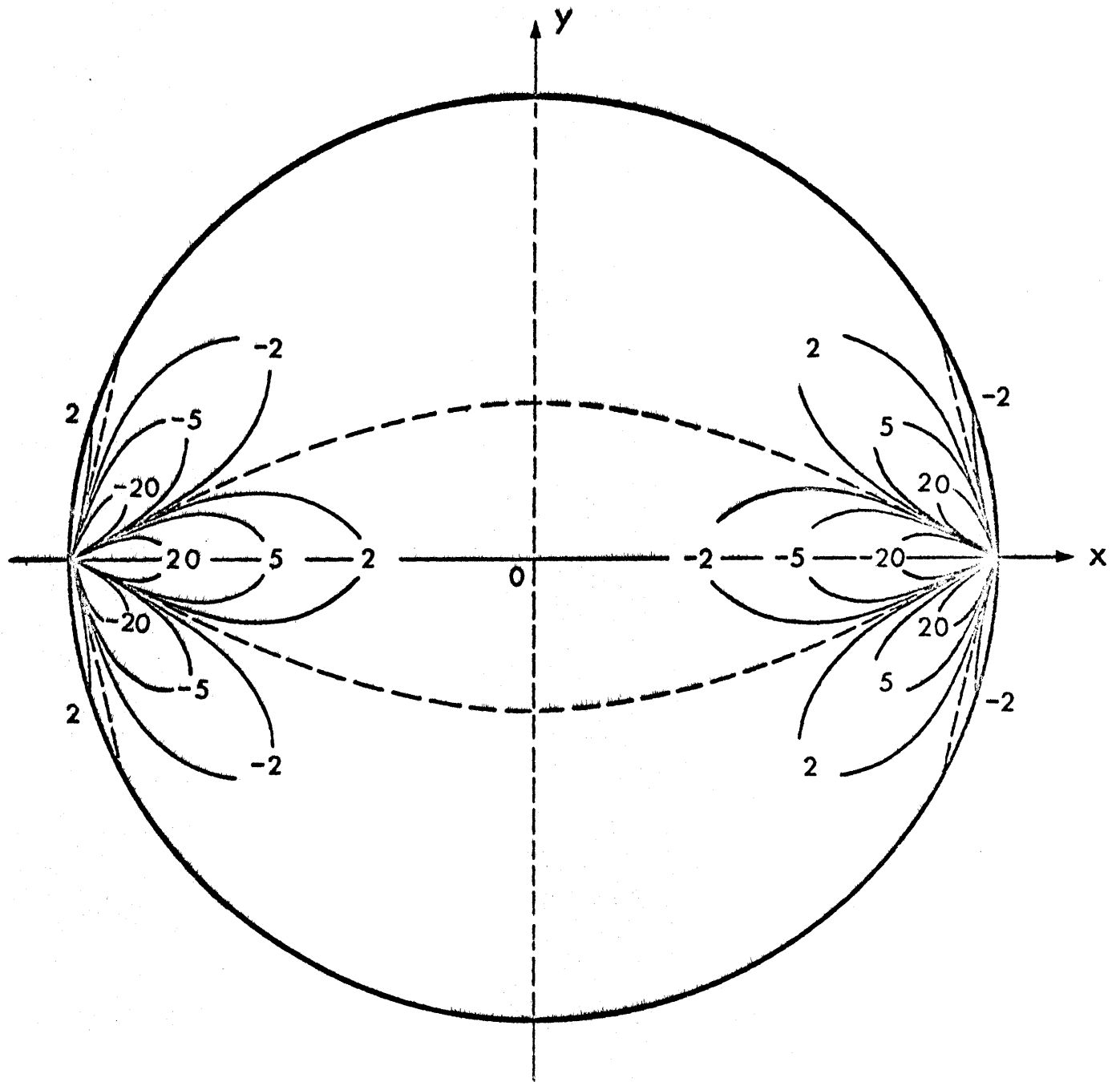


図 5.2 動径圧縮を加えた円板のひずみ勾配の分布。
 $(\partial \epsilon_x / \partial x) / (2P / \pi E a^2)$ の値が図の中に記されている。

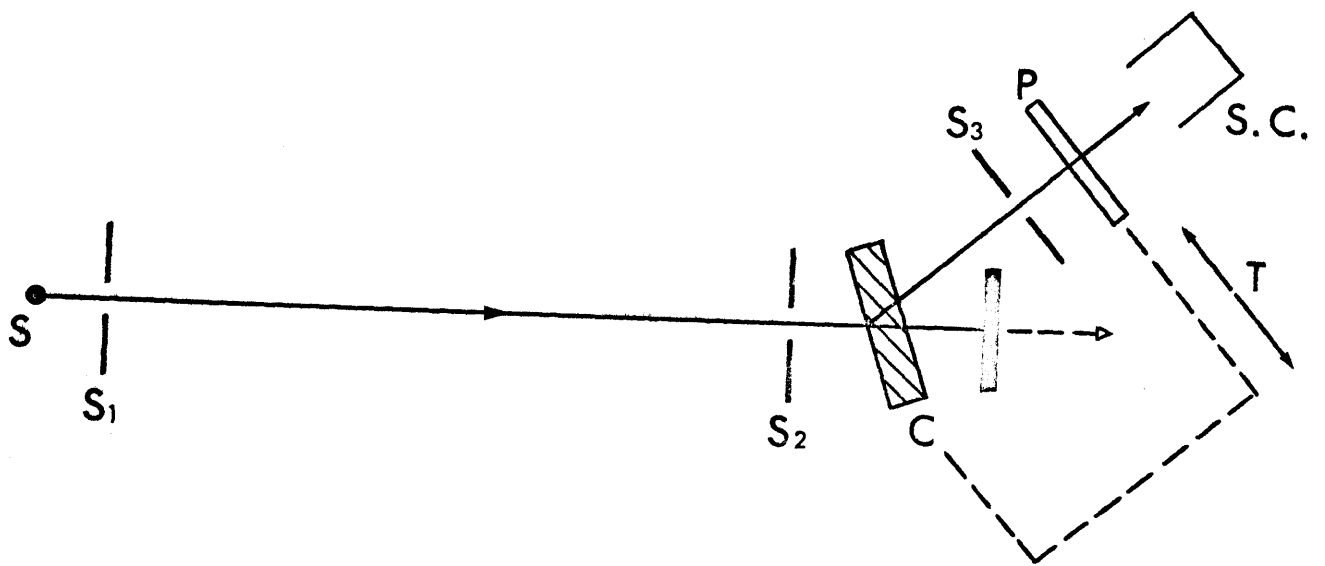


図 6.1 X線回折装置の配置。S: X線源。S₁: 第一スリット。S₂: 第二スリット。S₃: 第三スリット。C: 結晶。P: 写真乾板。S.C.: シンチレーションカウンタ。T: Traverse 方向を示す。

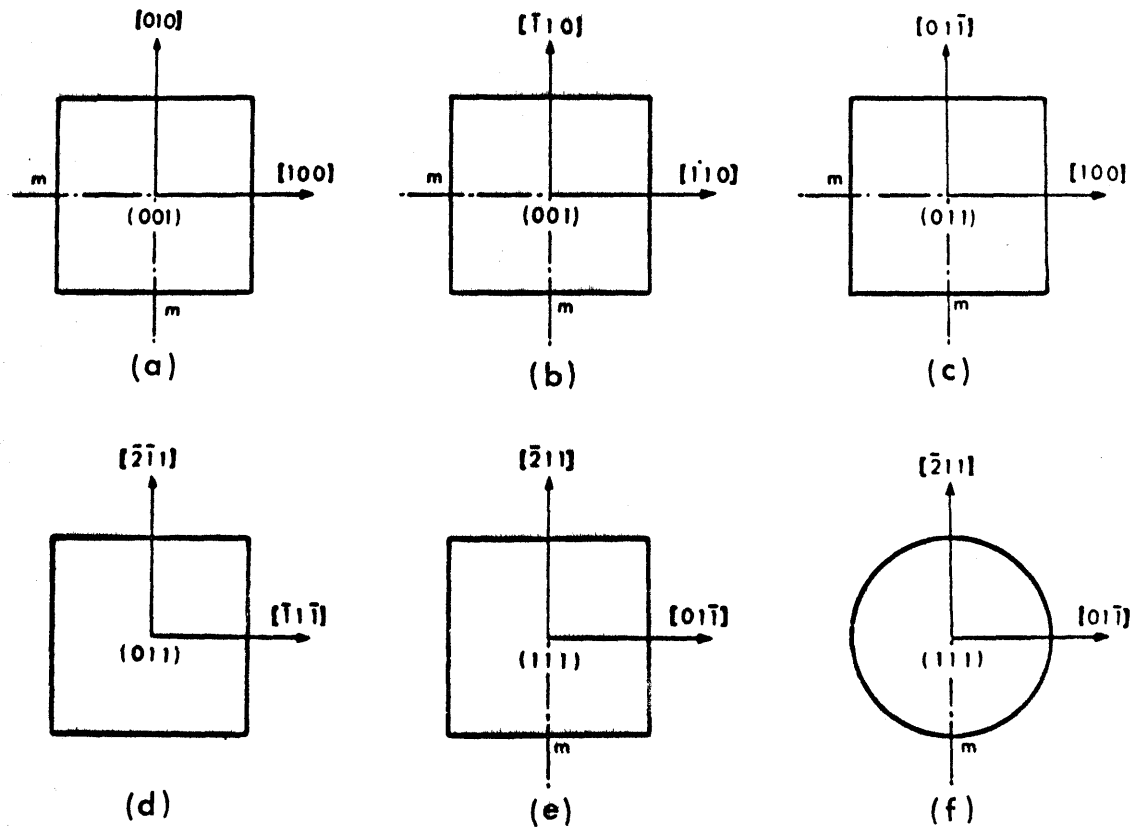


図 6.2 結晶の外形と方位。 m は結晶表面に垂直な mirror 対称面が存在することを示す。動径圧縮の方向は、図の外形の水平方向か垂直方向のいずれかである。

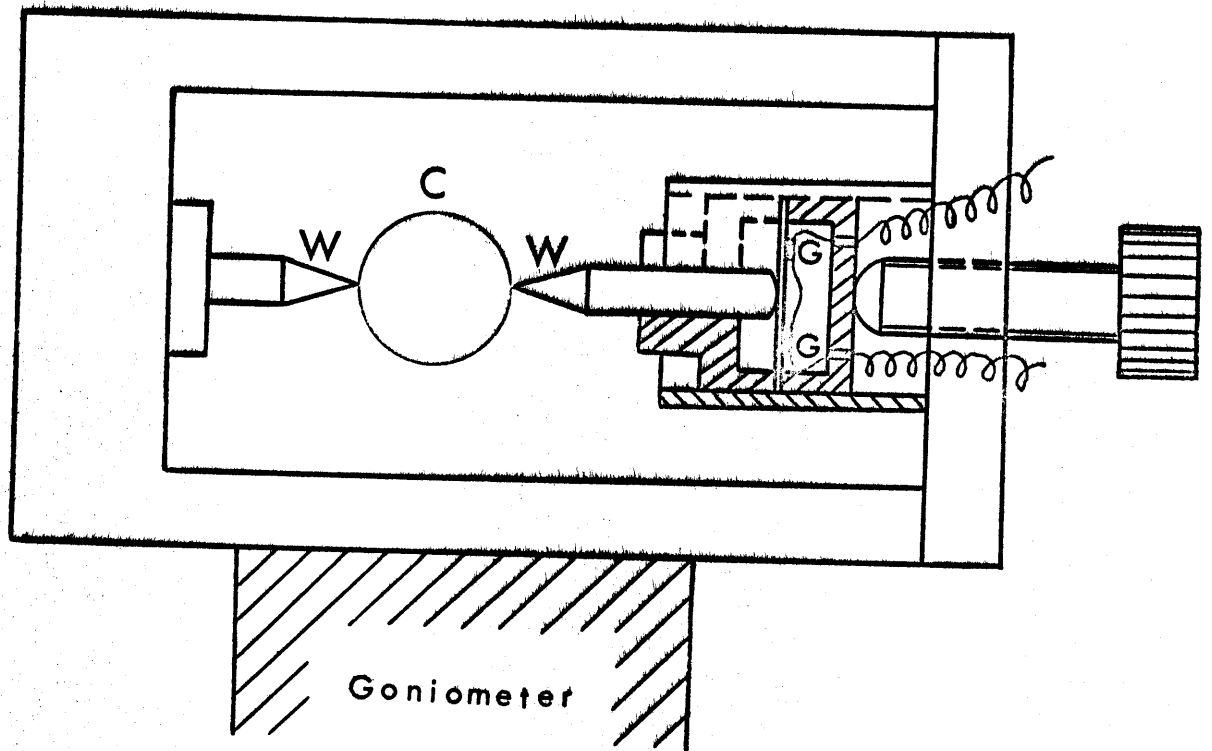


図 6.3 結晶にひずみを与える装置。C: 試料結晶。W
: くさび。G: 半導体ひずみ計素子。

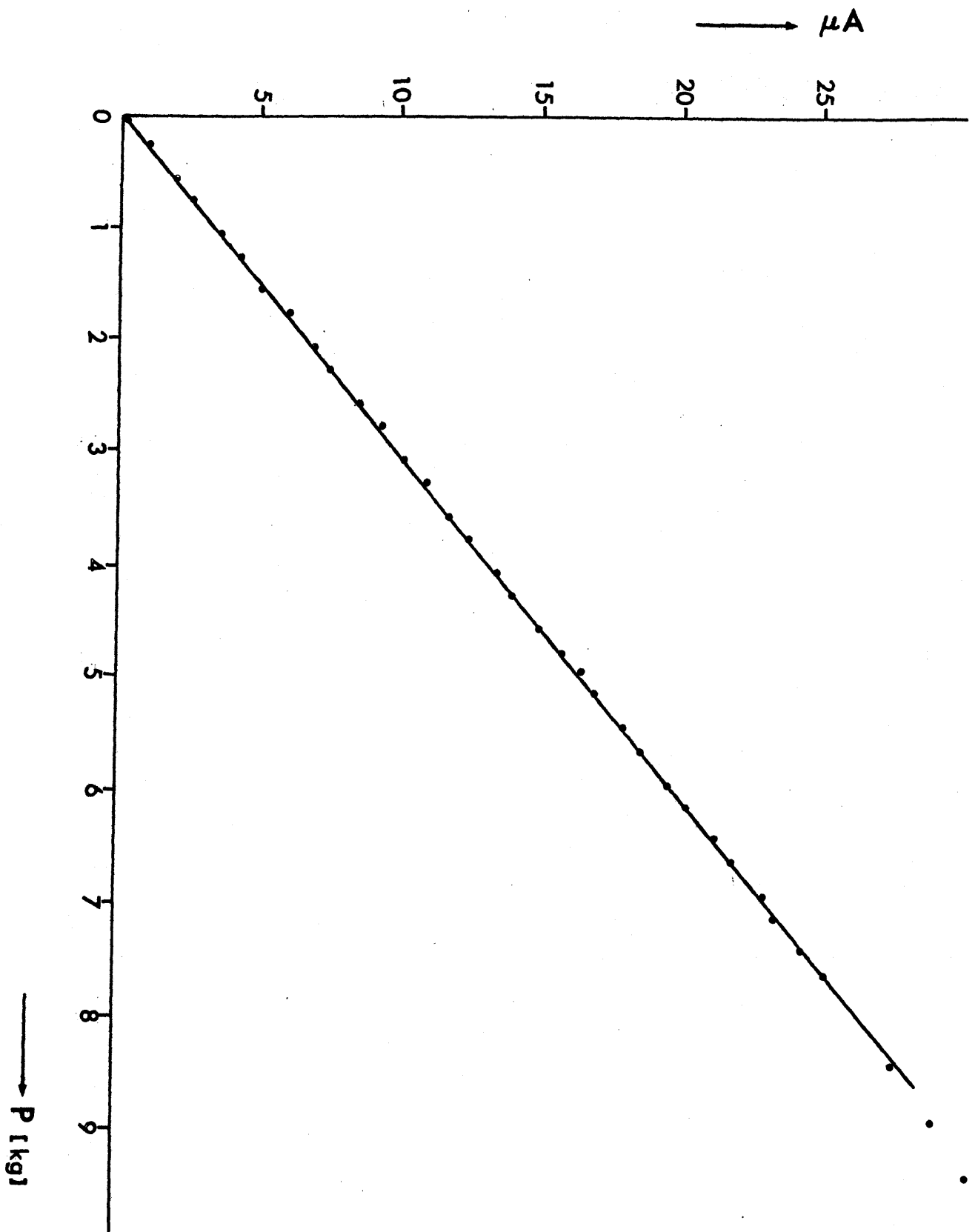


図6.4 半導体ひびみ計の caribration 曲線。

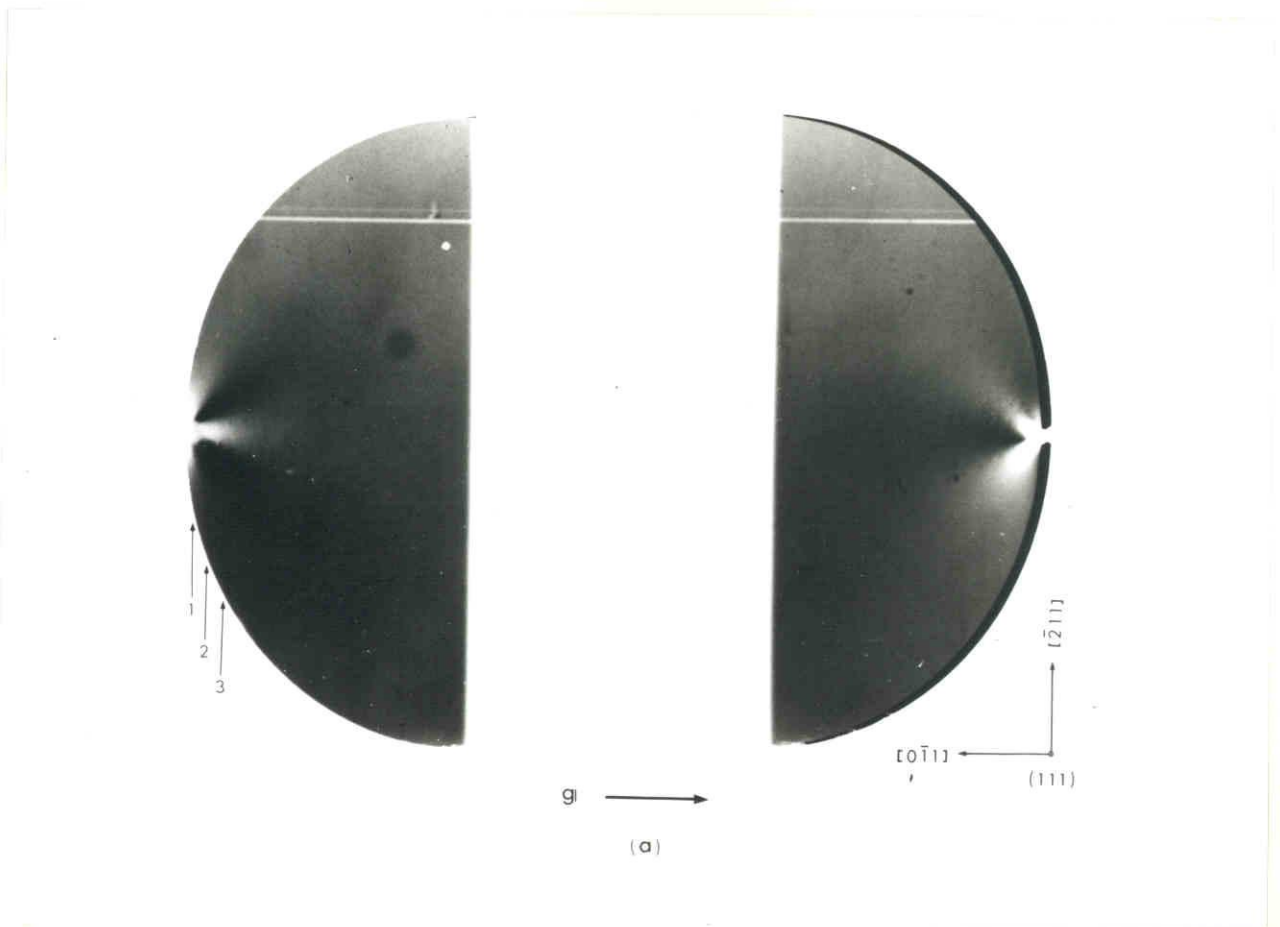


図 7.1 結晶 (f) の Traverse トポグラフ (Cu $K\alpha_1$ 線).
 (a) $02\bar{2}$ 反射.

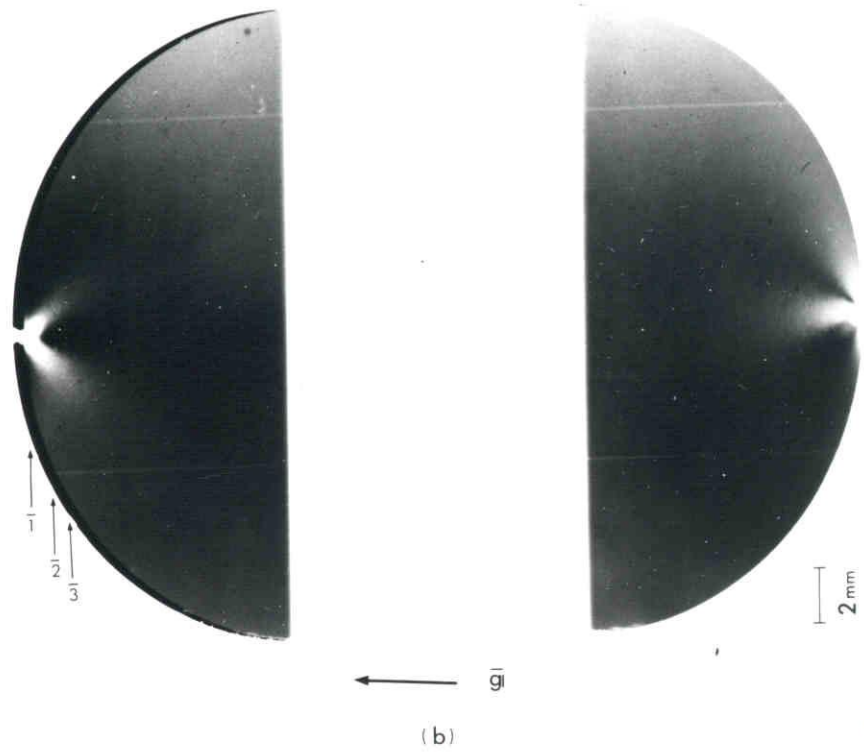


圖 7.1 (b) $0 \bar{z} z$ 反射.

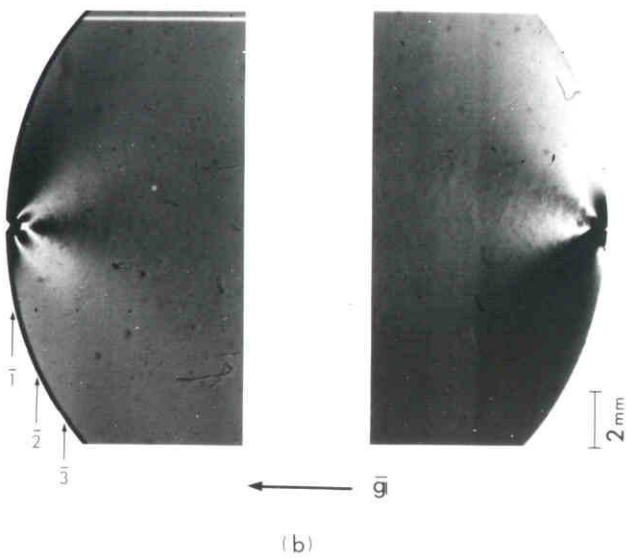
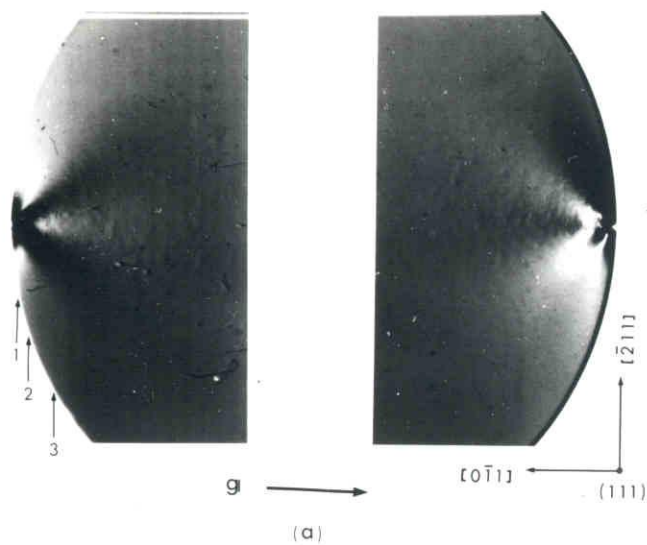
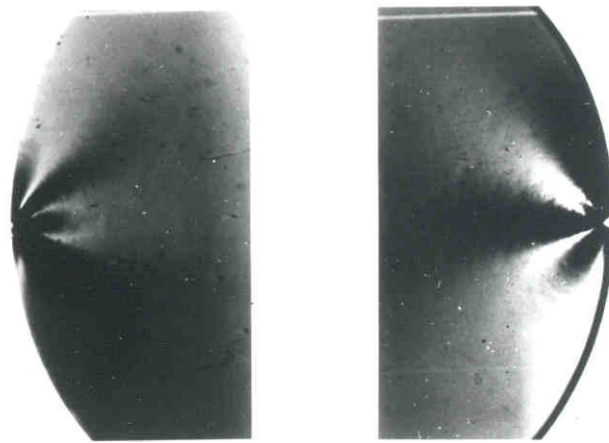
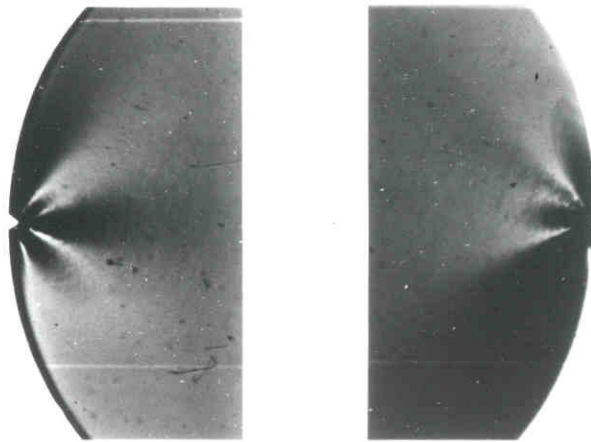


図 7.2 結晶(f)の Traverse トポグラフ (Mo $K\alpha_1$ 線)。
 (a) $02\bar{2}$ 反射。 (b) $0\bar{2}2$ 反射。



g →

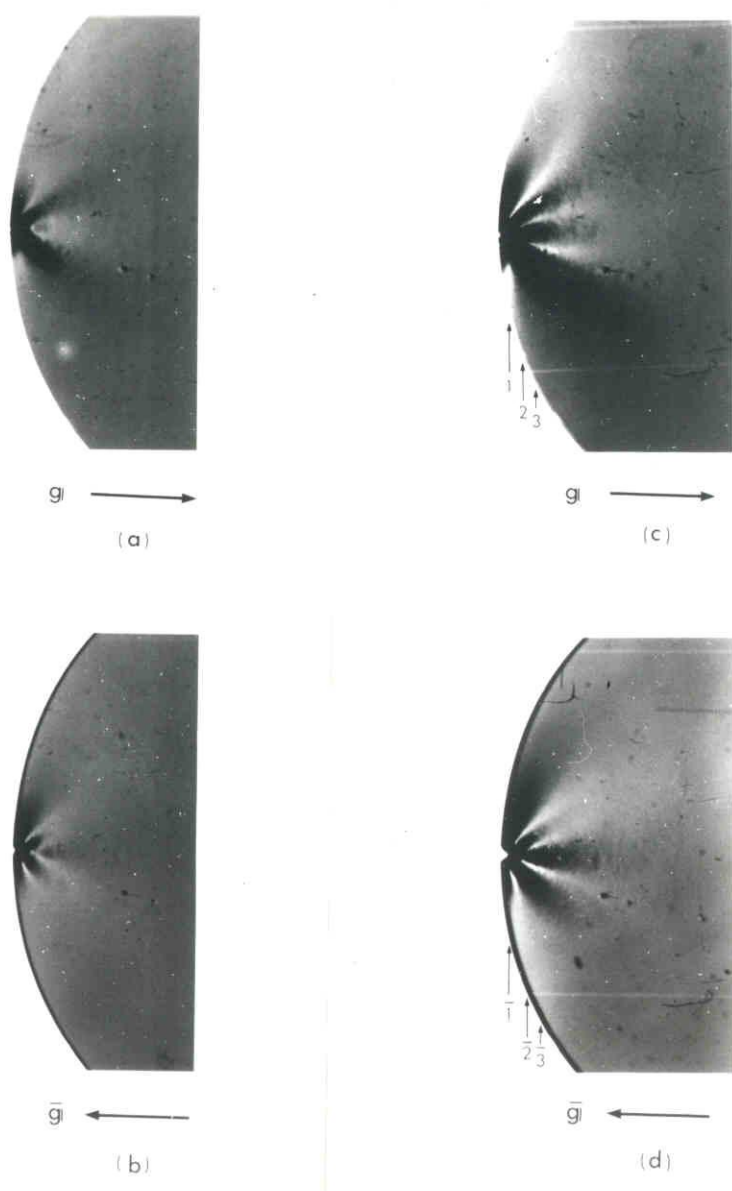
(c)



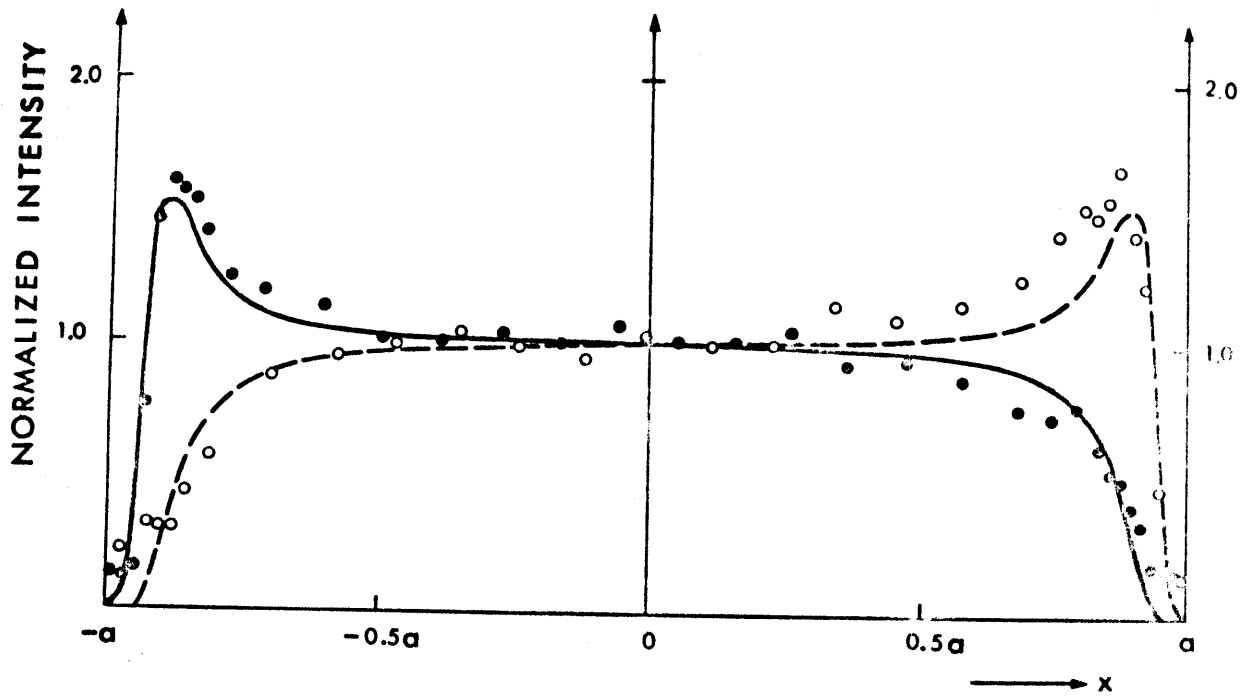
← \bar{g}

(d)

圖 7.2 (c) $04\bar{4}$ 反射。 (d) $0\bar{4}4$ 反射。



四七.三 結晶(f)の Traverse トポグラフ ($A_g K\alpha_1$ 線).
 (a) $02\bar{2}$ 反射. (b) $0\bar{2}2$ 反射.
 (c) $04\bar{4}$ 反射. (d) $0\bar{4}4$ 反射.

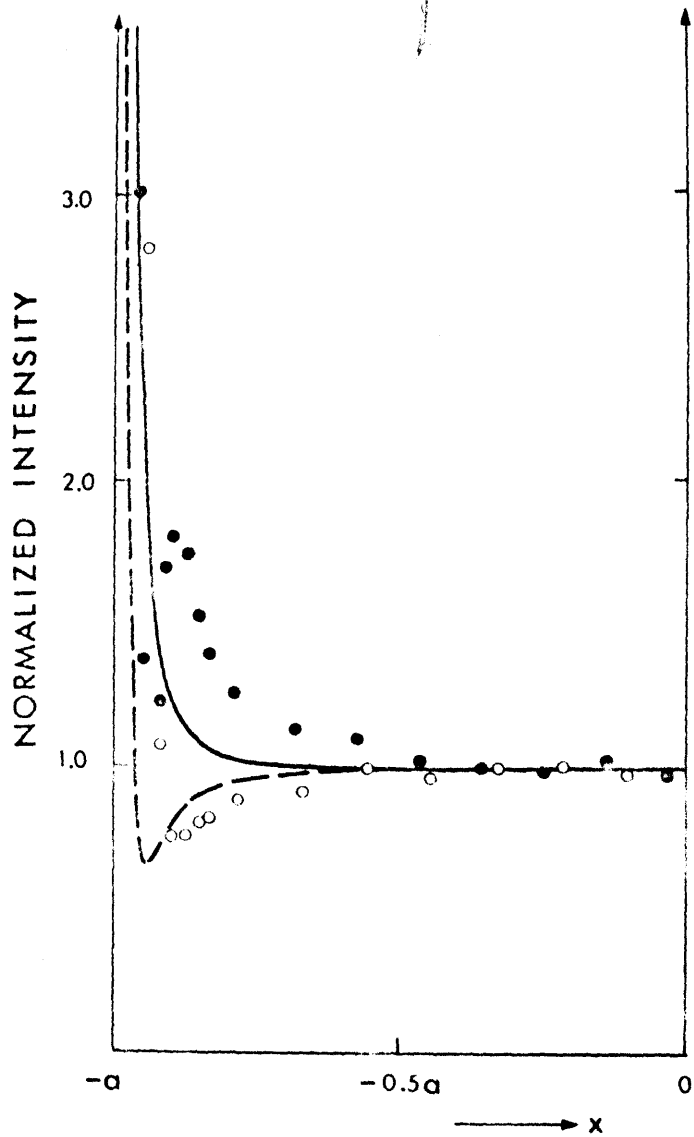


(a)

図 7.4 結晶 (f) の圧縮軸に沿った強度分布の測定結果と理論曲線。

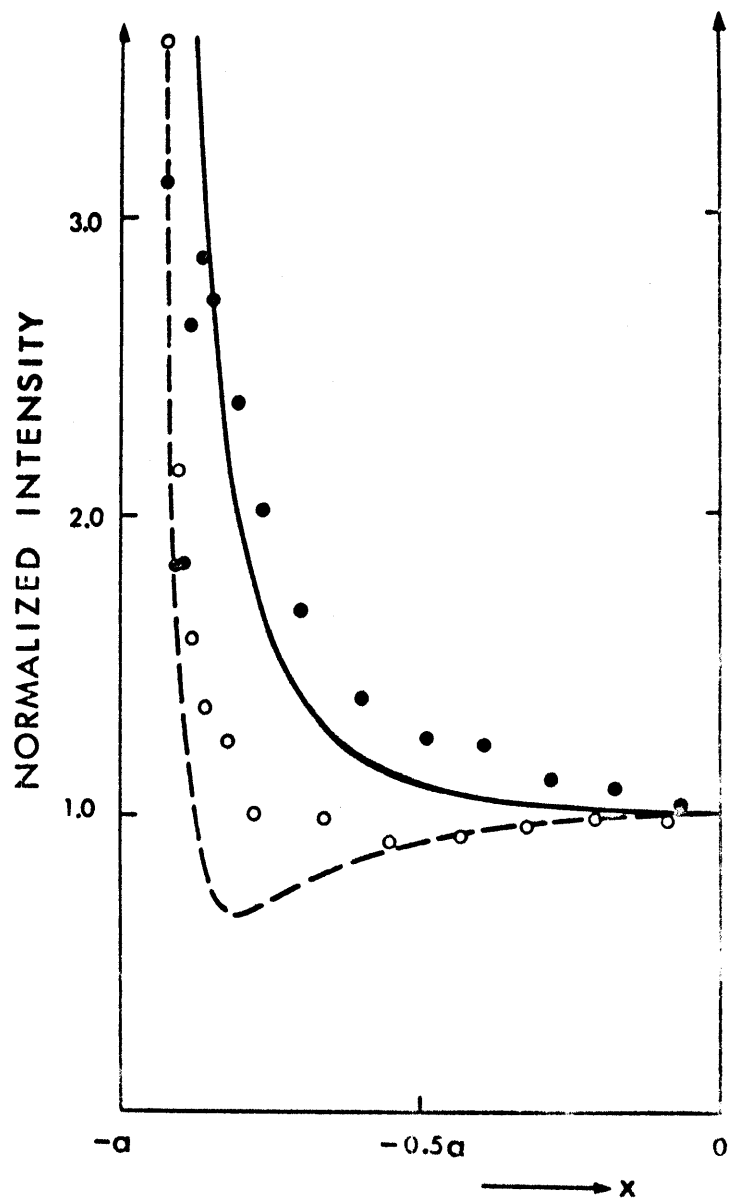
(a) Cu $K\alpha_1$ 線による $\{022\}$ 反射。

(cf. 図 7.1 (a) および (b))



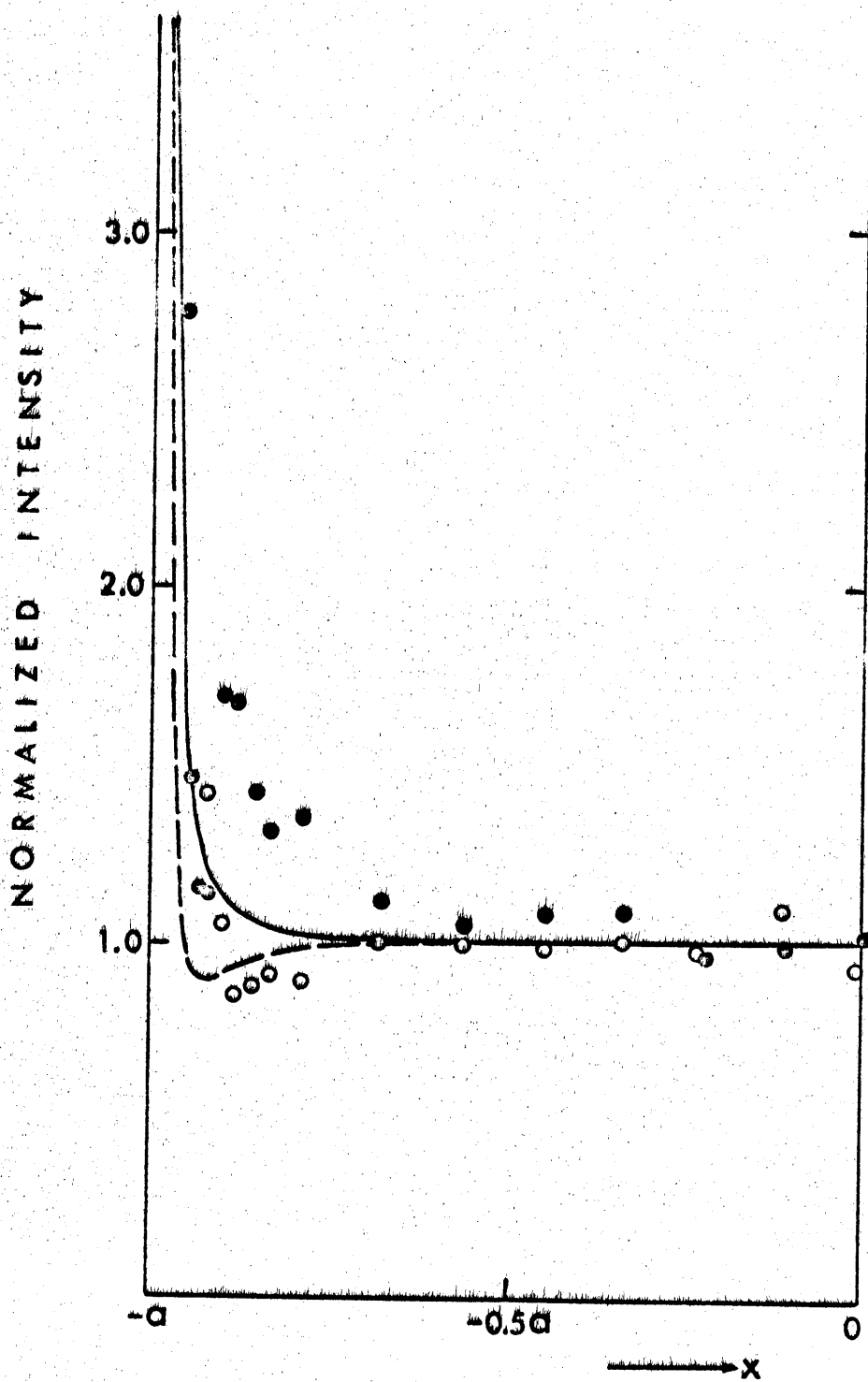
(b)

図 7.4 (b) $\text{Mo K}\alpha_1$ 線による $\{02\bar{2}\}$ 反射。
 (cf. 図 7.2 (a) および (b))



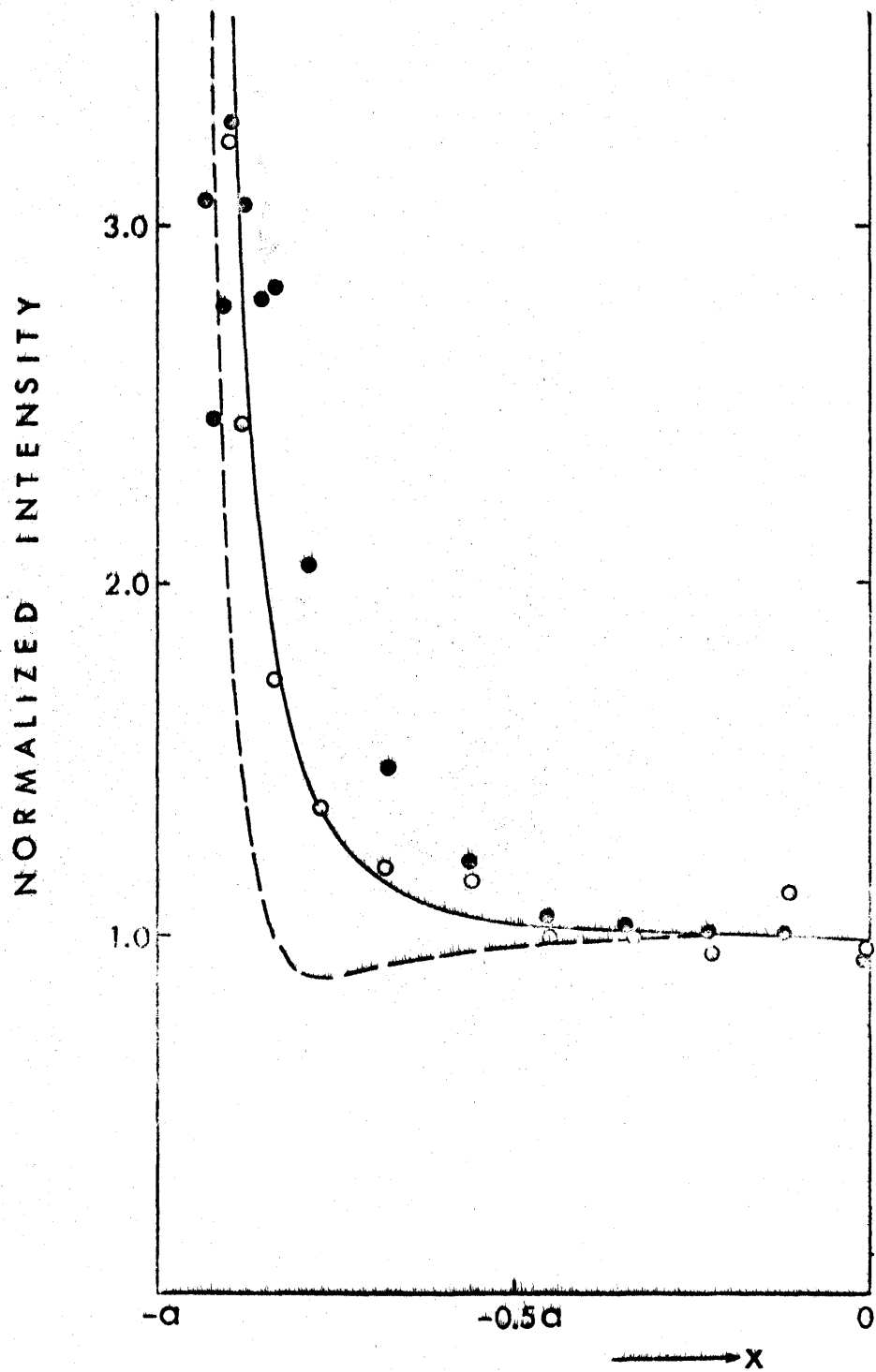
(c)

図 7.4 (c) $\text{Mo K}\alpha_1$ 線による $\{04\bar{4}\}$ 反射。
 (cf. 図 7.2 (c) および (d))



(d)

圖 7.4 (d) $Ag K\alpha_2$ 線による $\{02\bar{2}\}$ 反射。
(cf. 圖 7.3 (a) および (b))



(e)

圖 7.4 (e) $Ag K\alpha_1$ 線に對する $\{04\bar{4}\}$ 反射。
 (cf. 圖 7.3 (c) および (d))

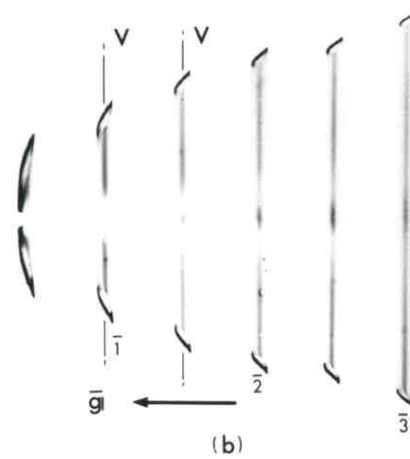
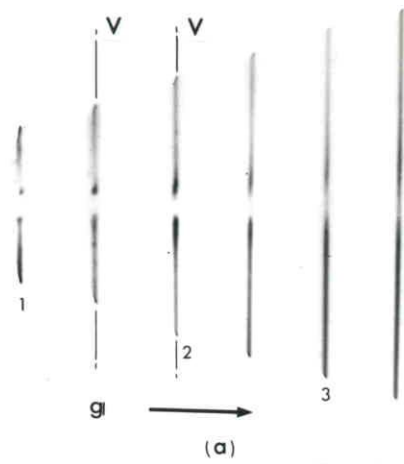


図 7.5 結晶 (f) の Section トポグラフ (Cu K α_1 線)。
 図 7.1 (a) および (b) の左半分に対応する。
 (a) $02\bar{2}$ 反射。 (b) $0\bar{2}2$ 反射。

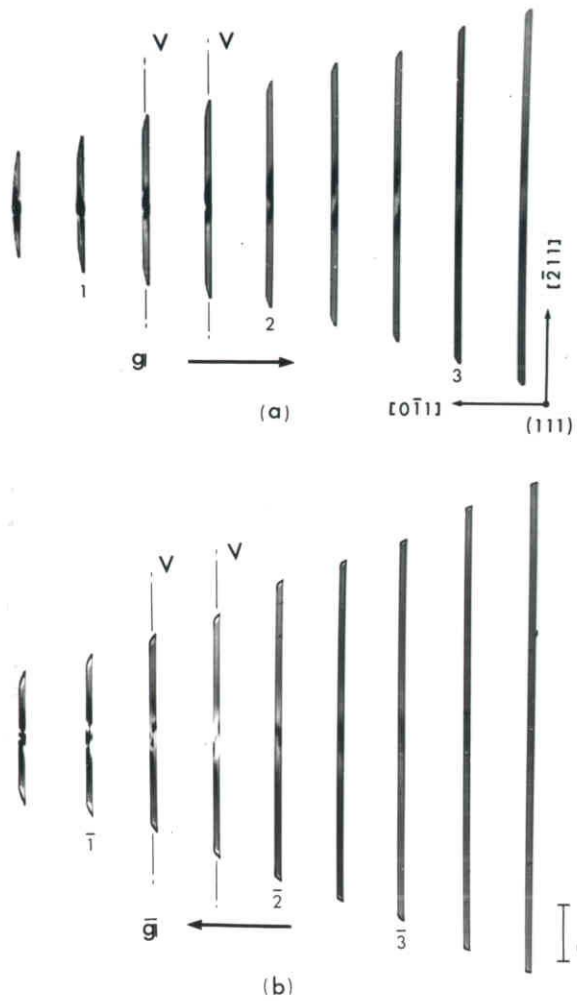


図 7.6 結晶 (f) の Section トポグラフ (MoK α 線)。
 図 7.2 (a) および (b) の左半分に対応する。
 (a) 022 反射。 (b) 032 反射。

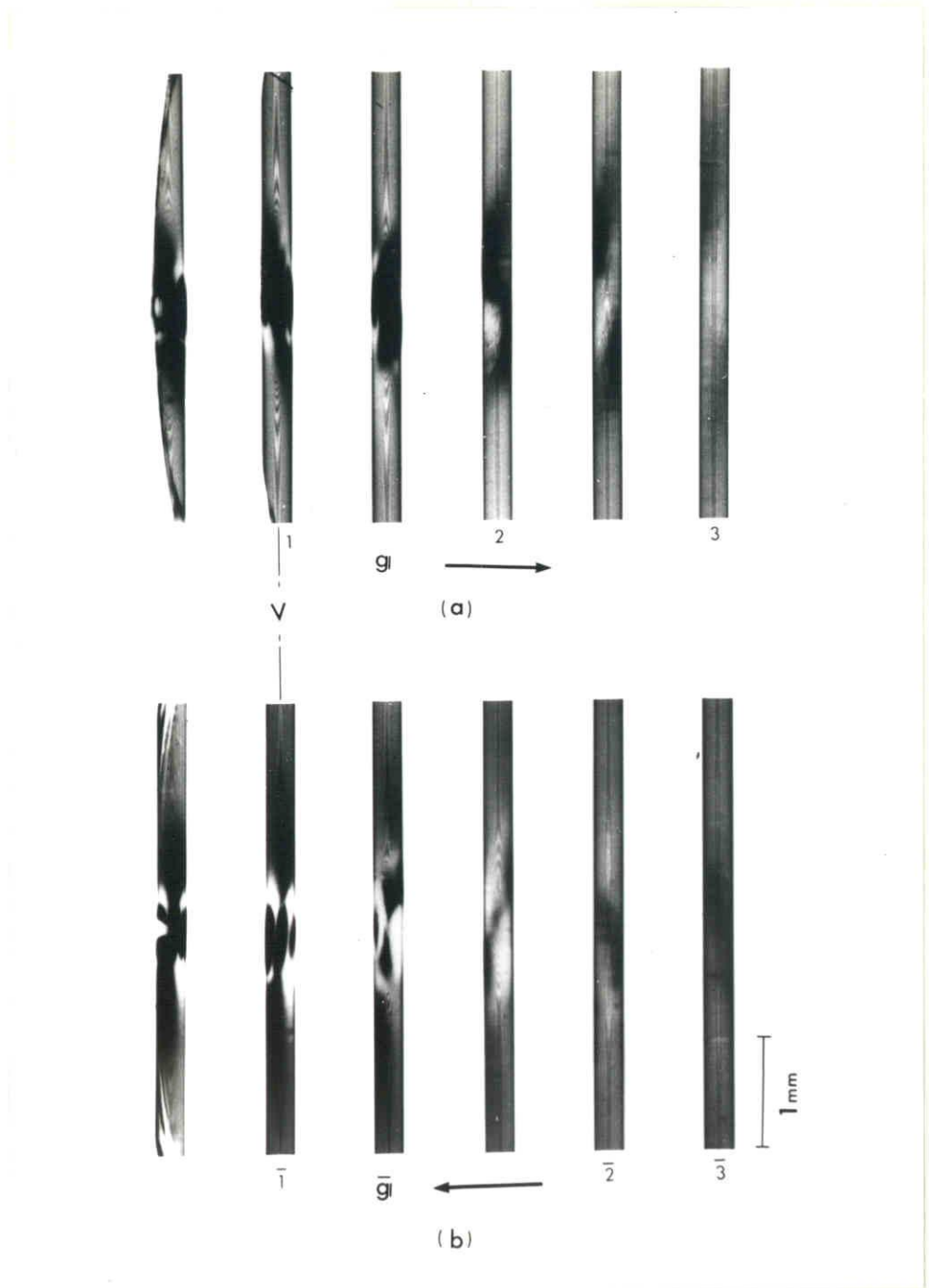


図 7.7 結晶 (f) の Section トポグラフ (MoK α_1 線)。
 図 7.6 (a) および (b) の一部と拡大したもの。
 (a) O Σ 反射。 (b) O Σ 反射。

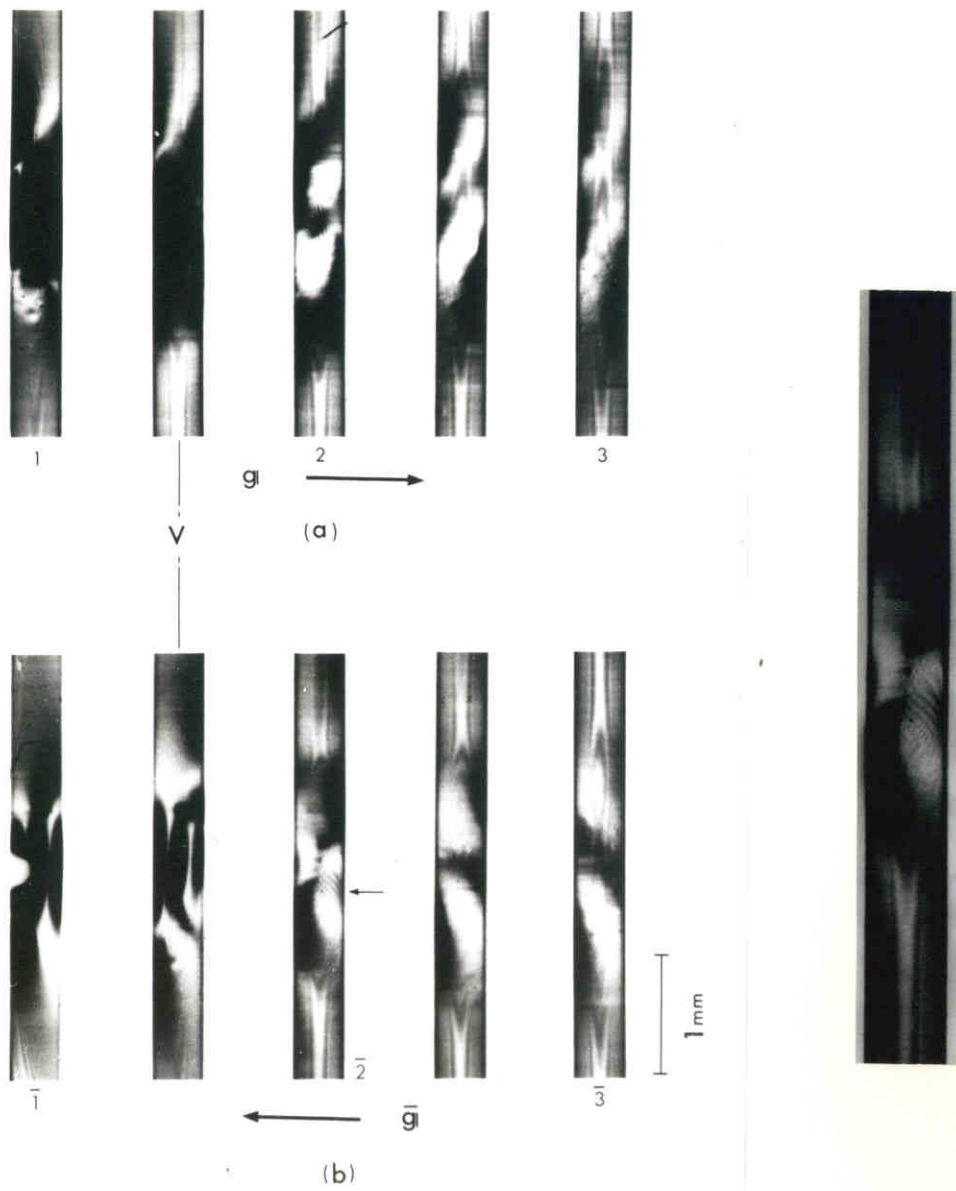


図7.8 結晶(f)の Section トポグラフ ($AgK\alpha_1$ 線)。
 図7.3 (c) および (d) に対応する。ただし拡大
 倍率は異なる。

- (a) $04\bar{4}$ 反射。 (b) $0\bar{4}4$ 反射。
- (c) (b)の $\bar{2}$ の拡大写真。

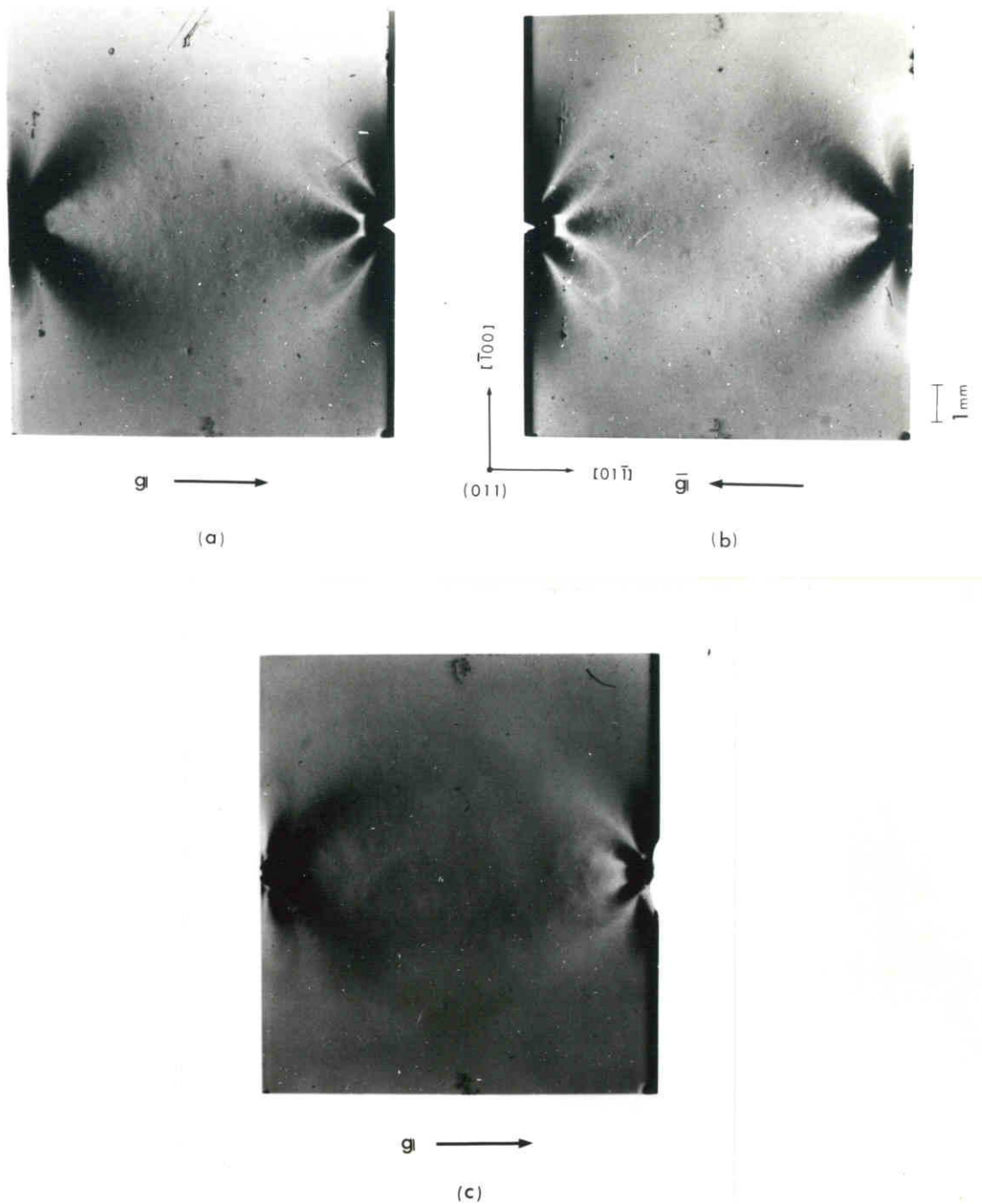
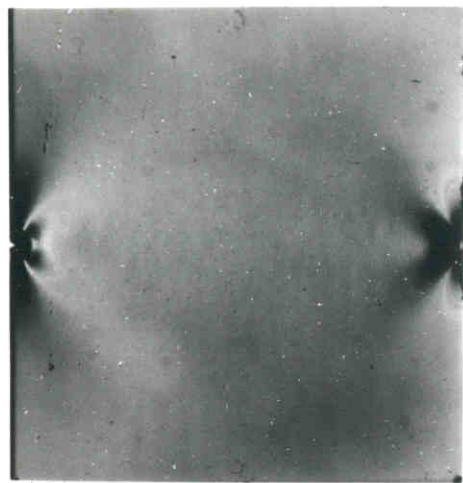


図 7.9 結晶 (c) の Traverse トポグラフ ($M_0K\alpha_1$ 線)。
 (a) $04\bar{4}$ 反射. (b) $0\bar{4}4$ 反射.
 (c) $04\bar{4}$ 反射 (D くさび).

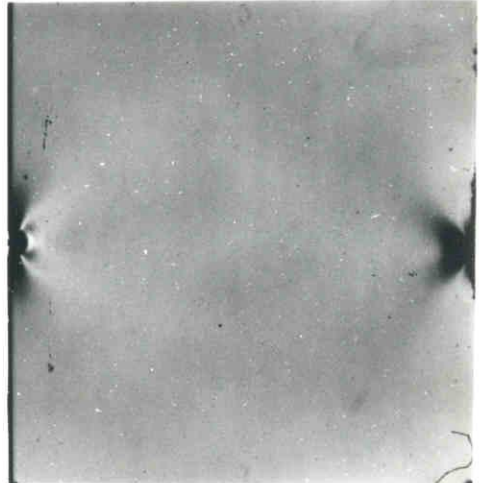


↑↑↑
1 2 3

\bar{g} ←

↑↑↑
4 5 6

(a)



\bar{g} ←

(b)

図 7.10 結晶(c)の Traverse トポグラフ (MoK α_1 線).
 (a) $0\bar{2}2$ 反射. (b) $0\bar{2}2$ 反射 (P \llcorner に).

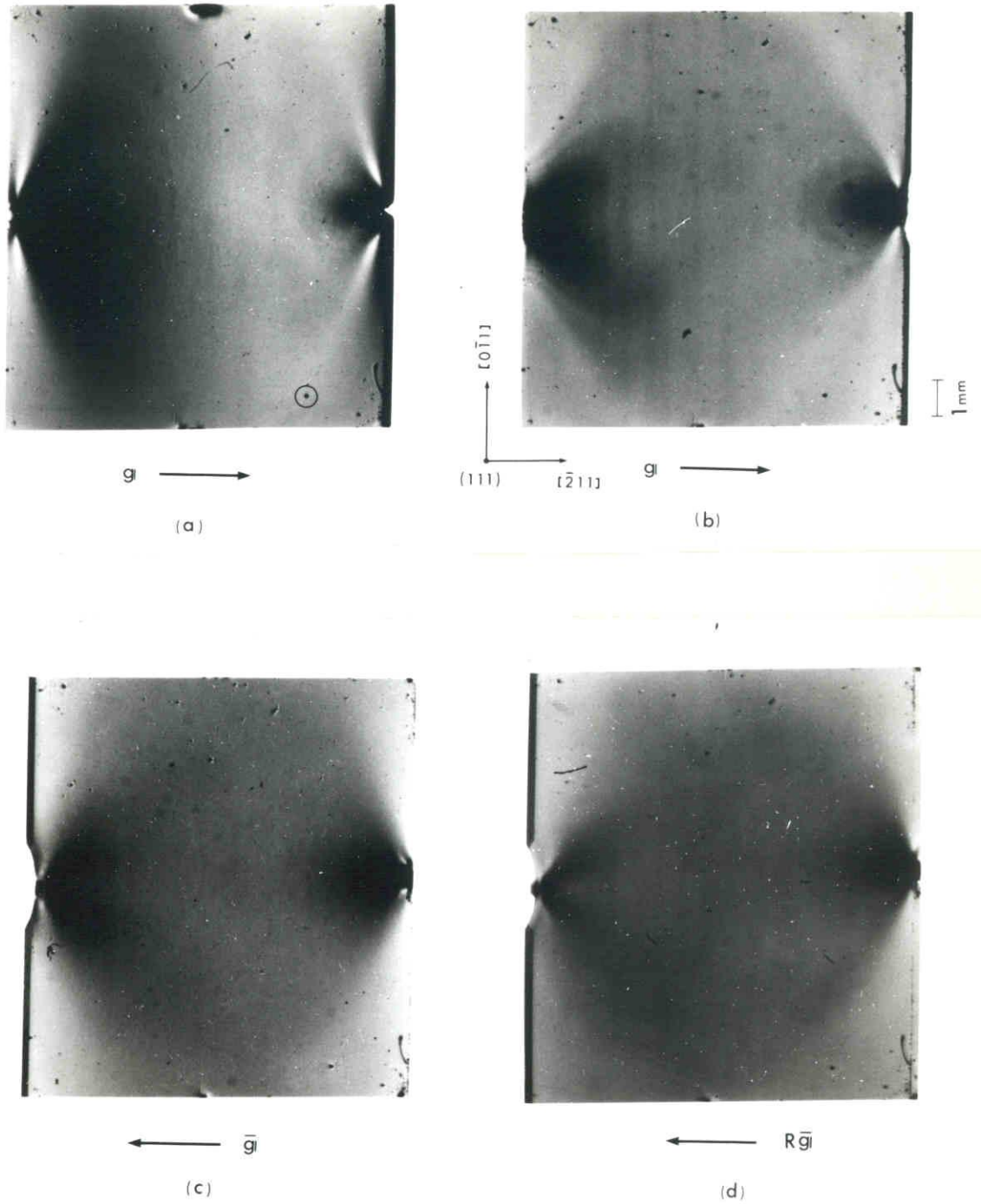
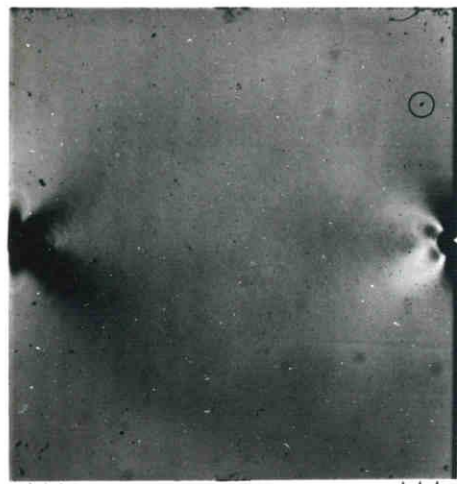
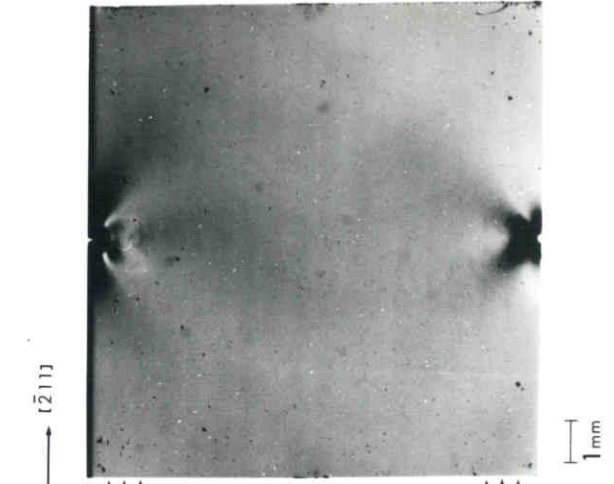


図7.11 結晶(e)の Traverse トポグラフ。(a) $\bar{4}22$ 反射 ($MoK\alpha_1$ 線)。(b) $\bar{4}22$ 反射 ($AgK\alpha_1$ 線; D 長さ)。(c) $4\bar{2}\bar{2}$ 反射 ($MoK\alpha_1$ 線; D 長さ)。(d) $R4\bar{2}\bar{2}$ 反射 ($MoK\alpha_1$ 線; D 長さ)。



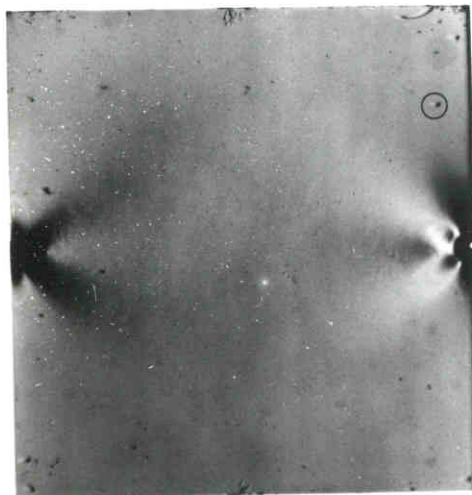
$g \rightarrow$

(a)



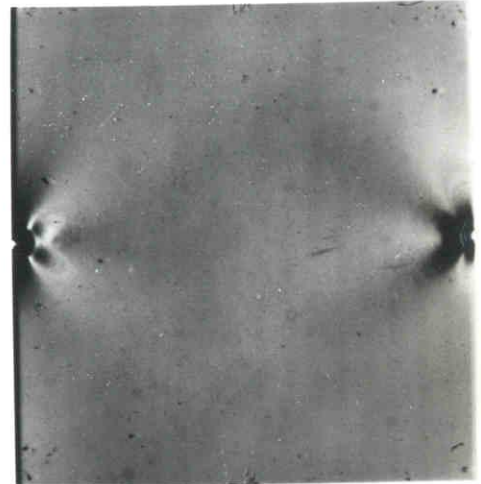
$\bar{g} \leftarrow$

(b)



$Rg \rightarrow$

(c)

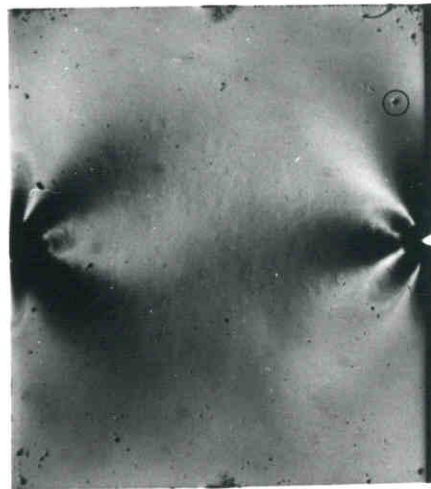


$R\bar{g} \leftarrow$

(d)

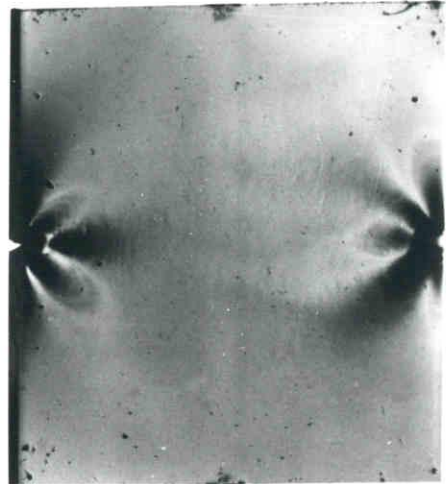
図 7.12 結晶 (e) の Traverse トポグラフ (MoK α_1 線)。

- (a) $02\bar{2}$ 反射。 (b) $0\bar{2}2$ 反射。
 (c) $R02\bar{2}$ 反射。 (d) $R0\bar{2}2$ 反射。



g \longrightarrow

(a)



$\longleftarrow g$

(b)

図 7.13 結晶 (c) の *Traverse* トポグラフ ($MoK\alpha_1$ 線)。
(a) $04\bar{4}$ 反射。 (b) $0\bar{4}4$ 反射。

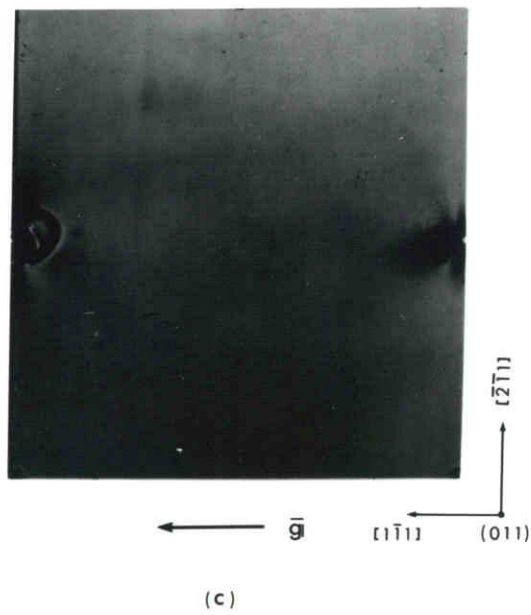
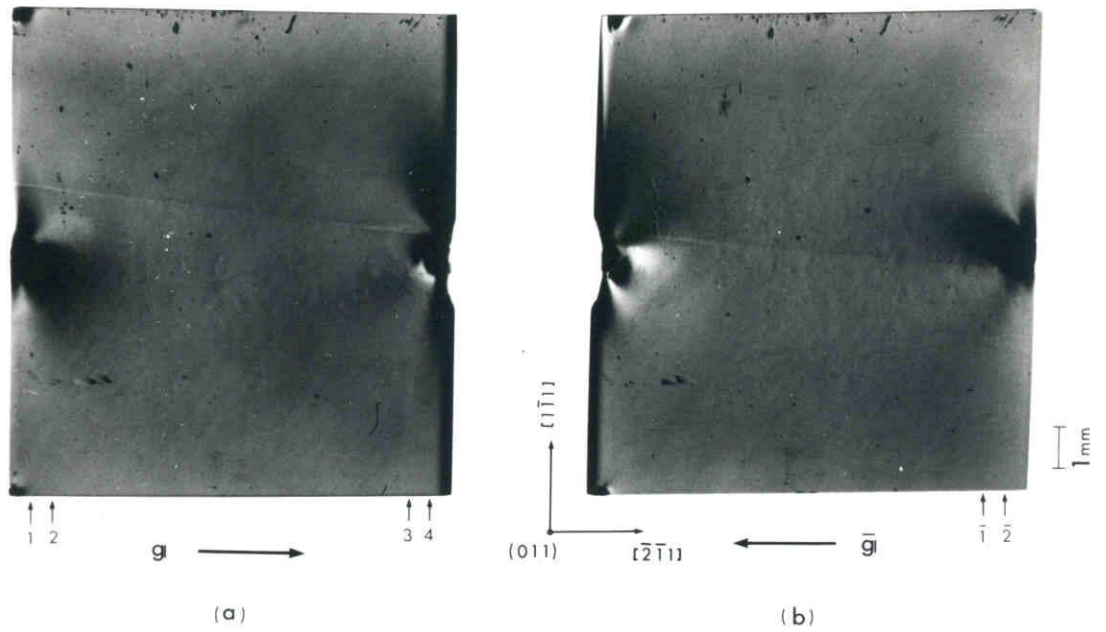


図7.14 結晶 (d) の Traverse トポグラフ (MoK α_1 線).
 (a) $\bar{4}\bar{2}2$ 反射 ($D<\alpha\omega$). (b) $42\bar{2}$ 反射 ($D<\alpha\omega$). (c) $1\bar{1}1$ 反射.

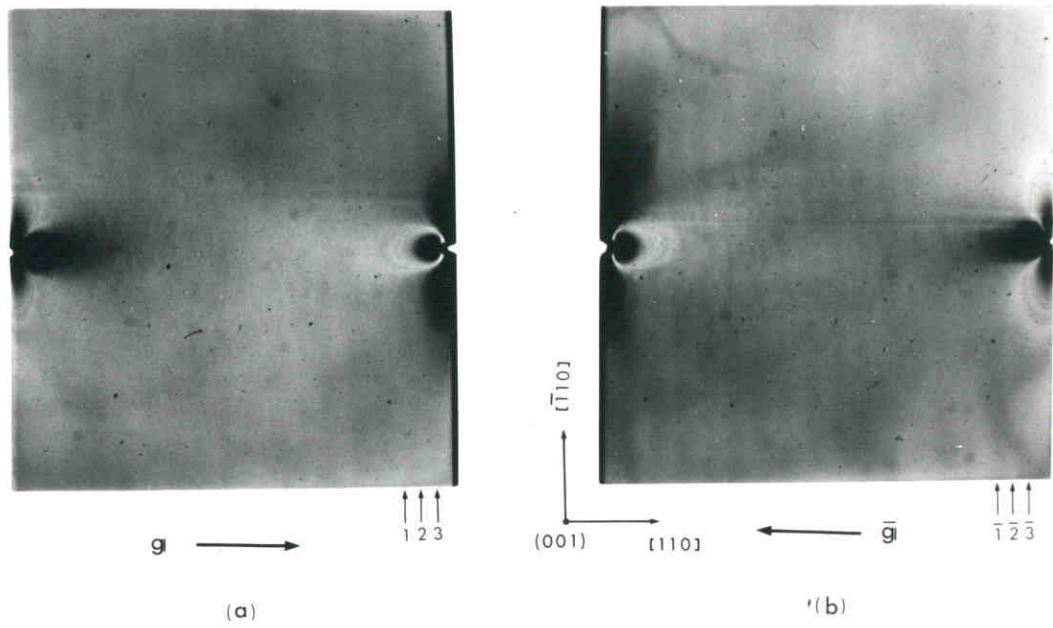
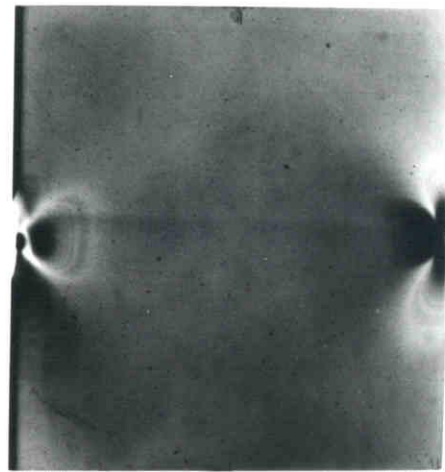
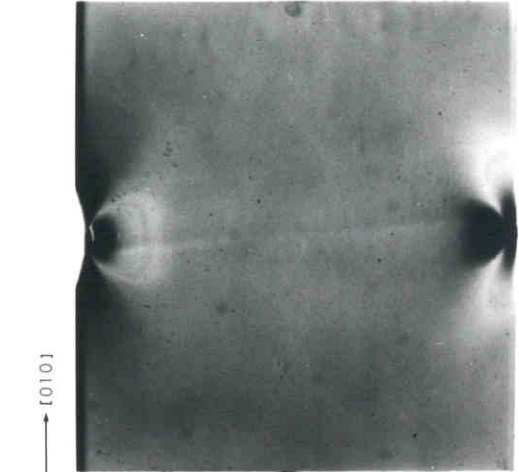


図7.15 結晶(b)の Traverse トポグラフ (MoK α_1 線)。
 (a) 220 反射。 (b) $\bar{2}\bar{2}0$ 反射。



(a)



(b)

図7.16 結晶(a)のTraverseトポグラフ(MoK α_1 線; Dくさび). (a) $\bar{4}00$ 反射. (b) $R\bar{4}00$ 反射.

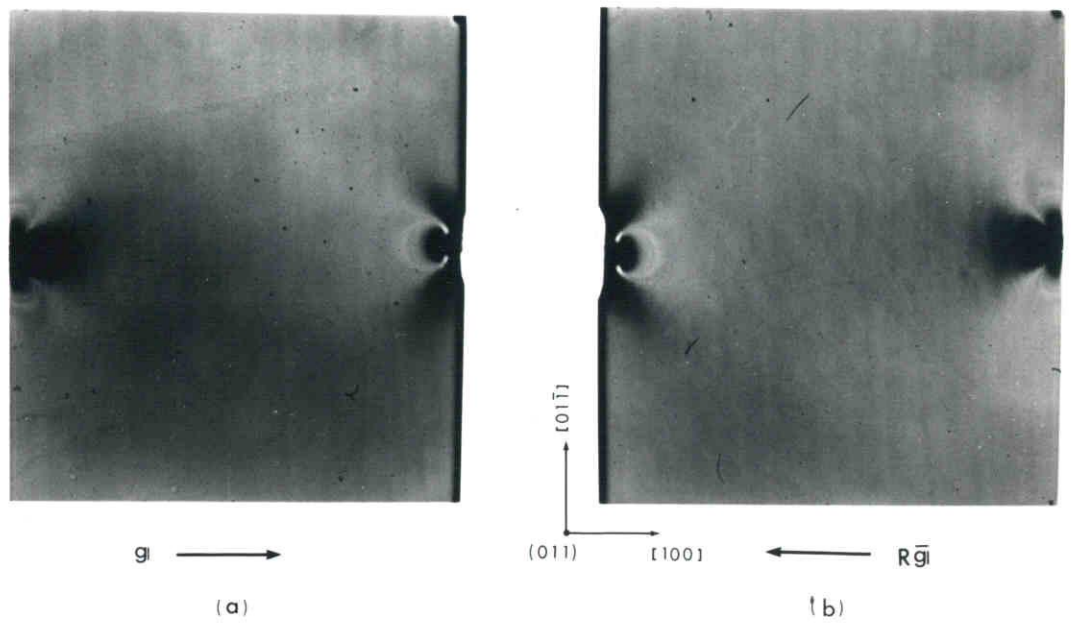


図 7.17 結晶 (c) の *Traverse* トポグラフ ($M\alpha_1$ 線; $D < \lambda$), (a) 400 反射. (b) $R\bar{4}00$ 反射.

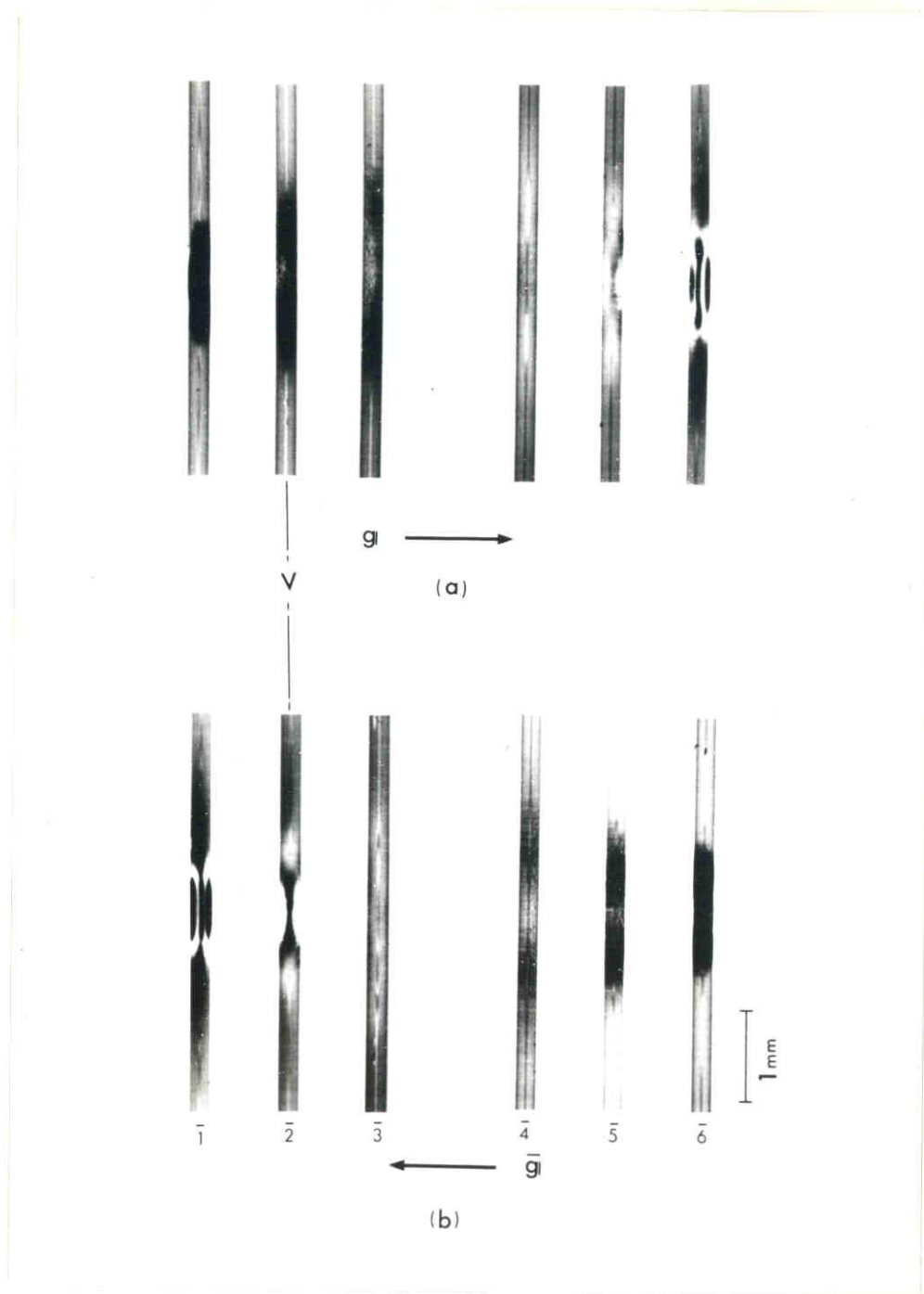


図 7.18 結晶 (c) の Section トポグラフ (MoK α_1 線).
 (a) 022 反射. (b) 02-2 反射. (b) に
 対応する Traverse トポグラフは 図 7.10 (a).
 ただし, 拡大倍率は異なる.

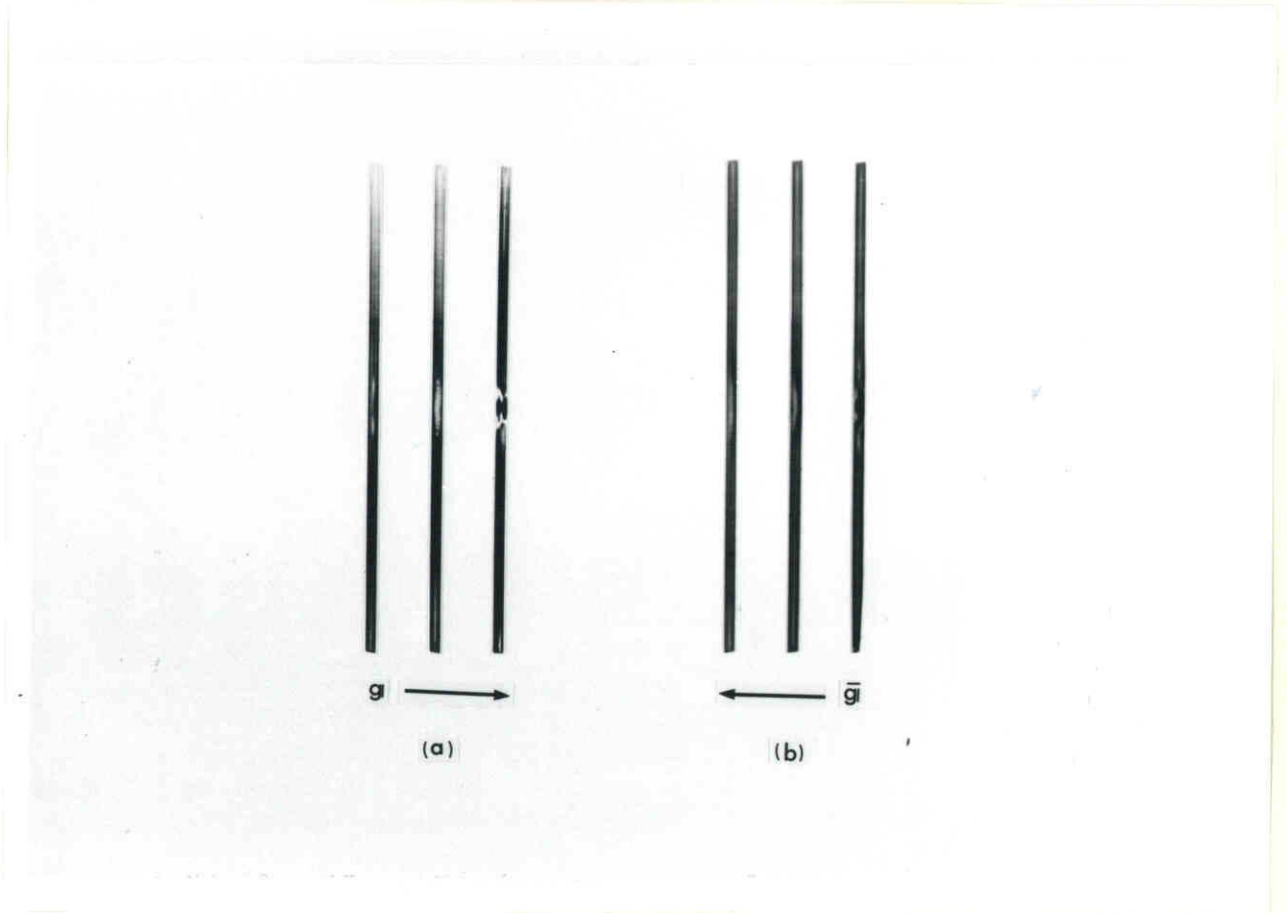


図 7.19 結晶 (c) の右側の部分による Section トポグラフ (MoK α 線; Dくさび). (a) 02 $\bar{2}$ 反射. (b) 0 $\bar{2}$ 2 反射.

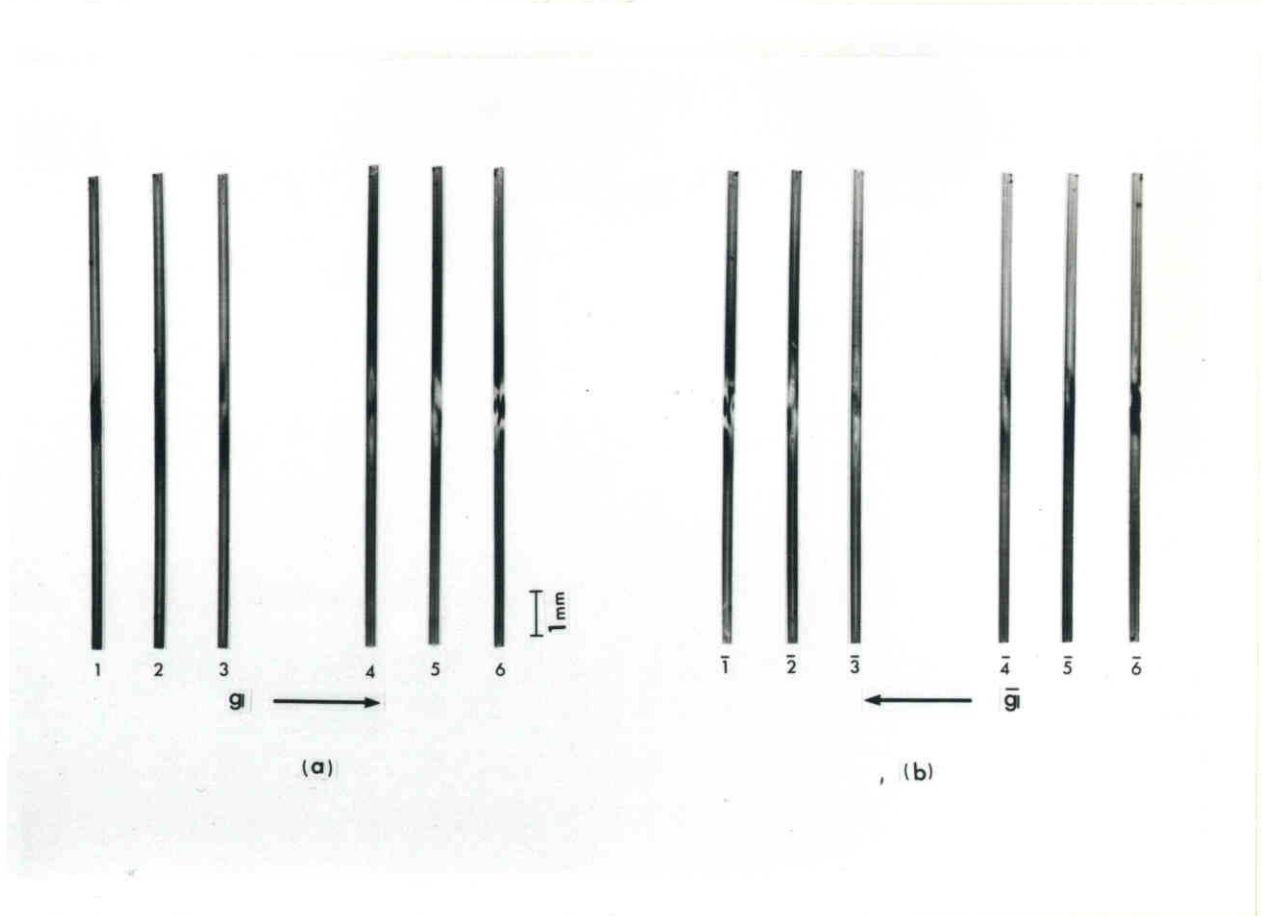


図 7.20 結晶 (c) の Section トポグラフ (Mo K α 線).
 (a) 02 $\bar{2}$ 反射. (b) 0 $\bar{2}$ 2 反射. 対応
 する Traverse トポグラフは, 図 7.12 (a)
 および (b).

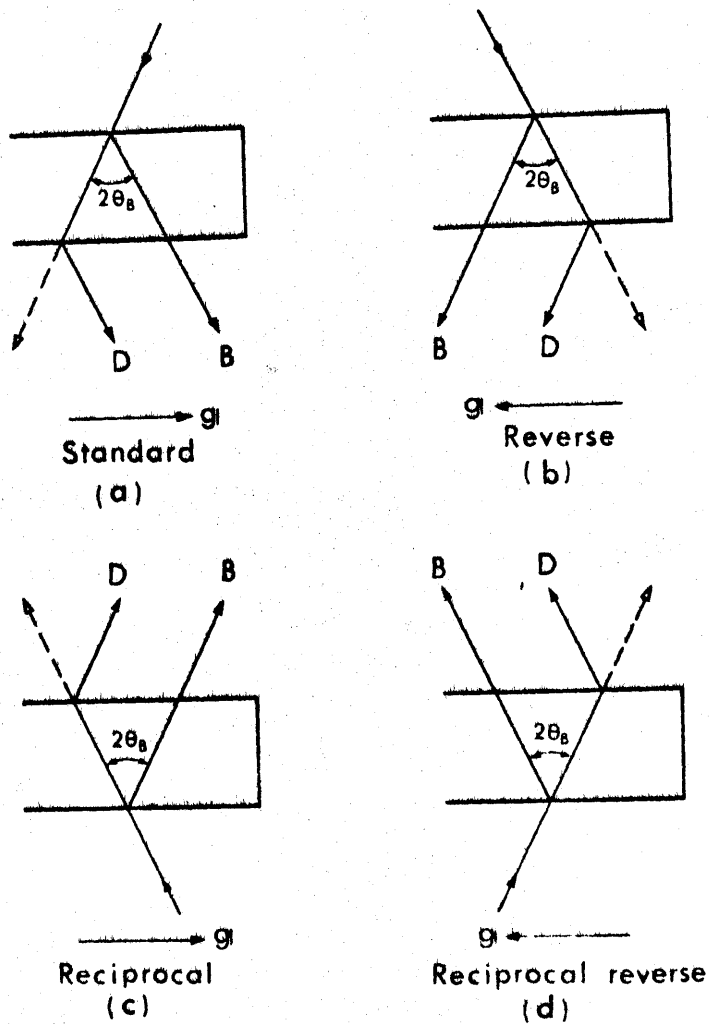


圖7.21 回折条件の定義。D : 入射波の側。B : Bragg 反射波の側。

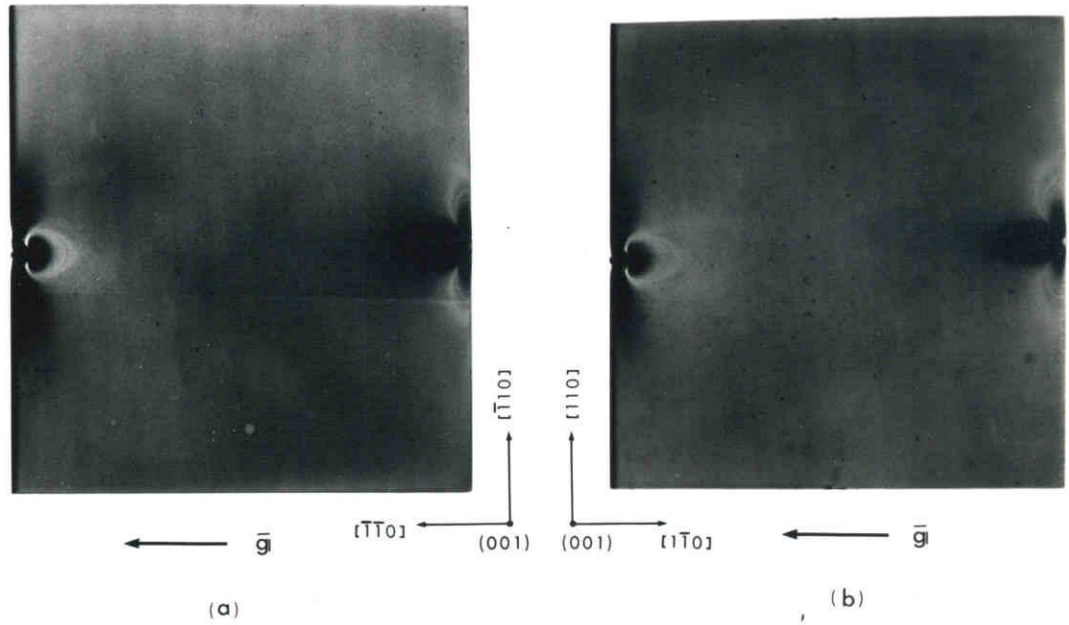
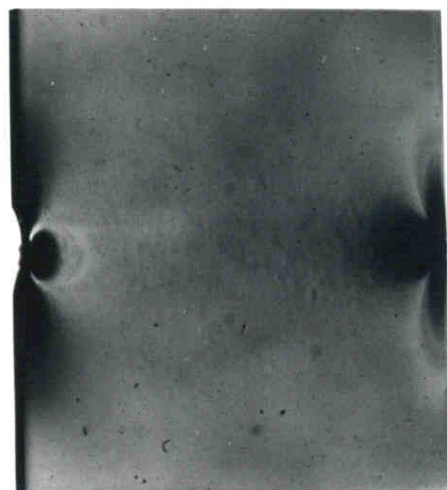
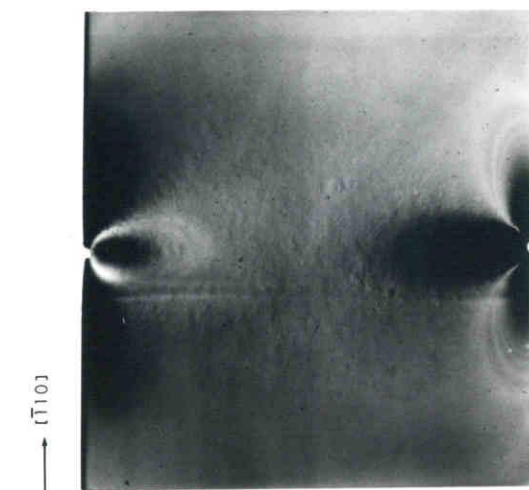


図 7.22 結晶 (b) の Traverse トポグラフ (MoK α_1 線).
 (a) $\Sigma 20$ 反射 ($D < \alpha$).
 (b) $\Sigma 20$ 反射 ($P < \alpha$).



← \bar{g}

(a)



[110]

(001)

[110]

← \bar{g}

(b)

図 7. 23 結晶 (b) の Traverse トポグラフ (MoK α 線)。
 (a) 440 反射 (Dくさび)。 (b) 2kg 重
 の圧縮を加えたときの 220 反射。

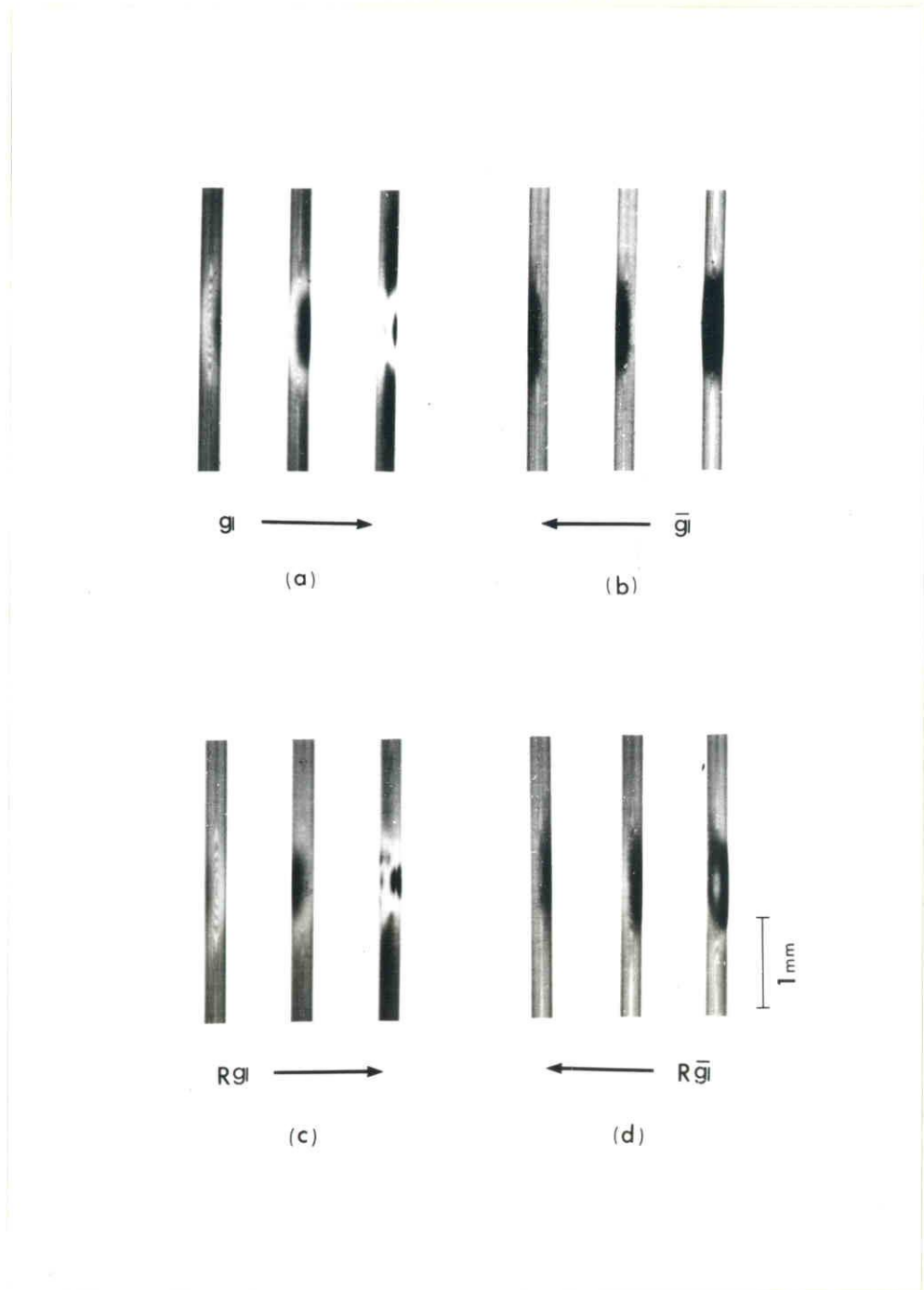


図 7.24 結晶 (b) の Section トポグラフ (MoK α 線; P くさび). (a) 220 反射. (b) $\bar{2}\bar{2}0$ 反射. (c) $R220$ 反射. (d) $R\bar{2}\bar{2}0$ 反射.

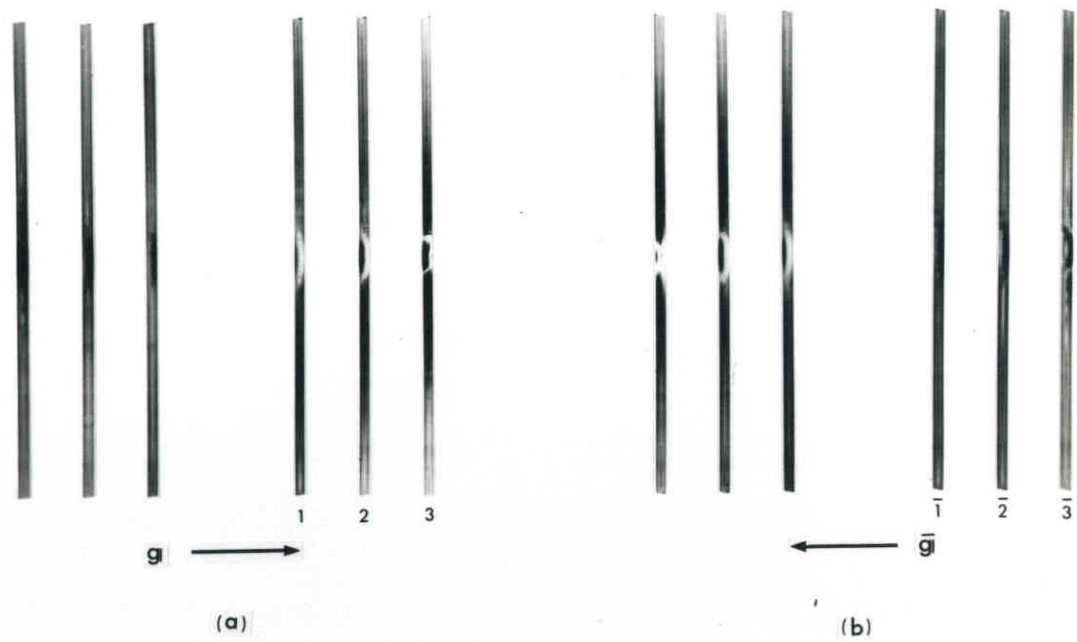


図 7.25 結晶 (b) の Section トポグラフ (Mo K α 系線)。
 (a) 220 反射。 (b) $\bar{2}\bar{2}0$ 反射。
 対応する Traverse トポグラフは、図 7.15
 (a) および (b)。

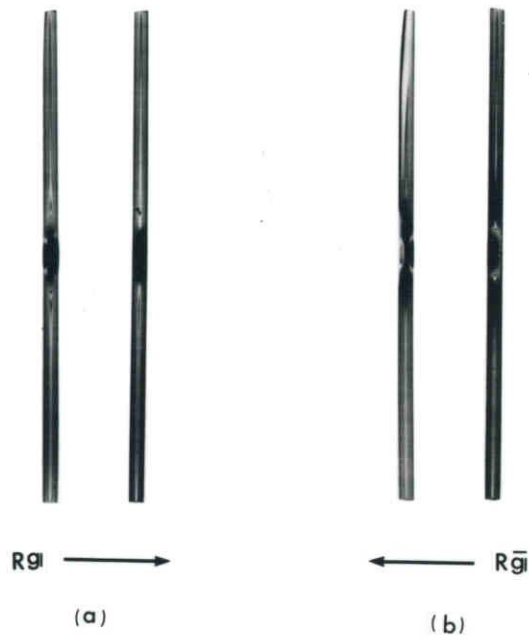


図 7.26 結晶 (c) の左側の部分による Section トポグラフ (Mo $K\alpha_1$ 線; $D < 50 \mu$). (a) R400 反射. (b) R400 反射. (b) に対応する Traverse トポグラフは図 7.17 (b).

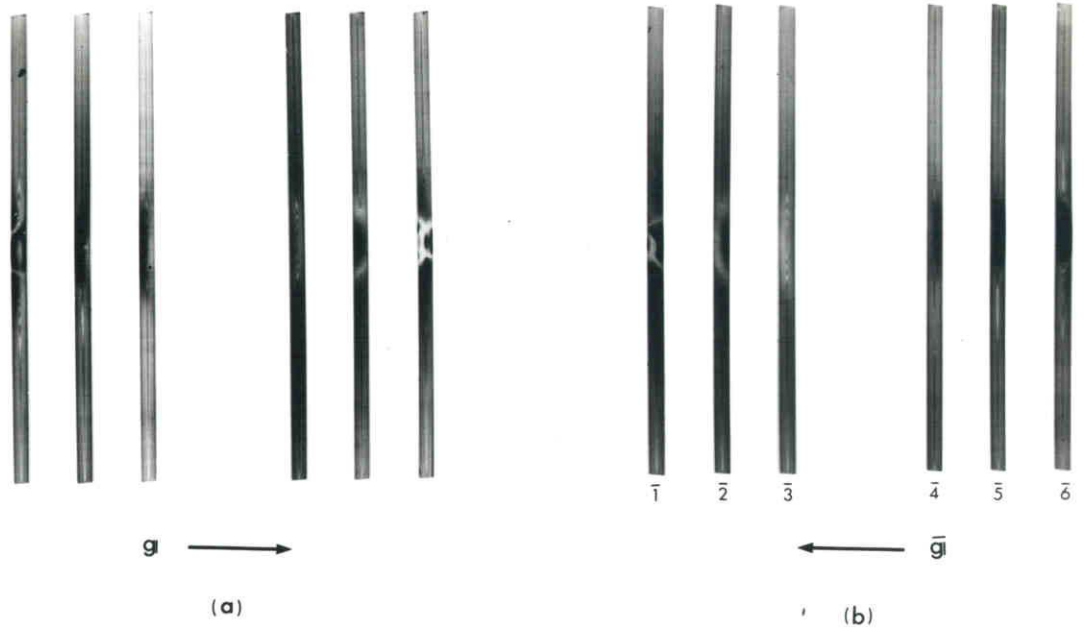


図 7.27 結晶 (a) の Section トポグラフ (MoK α_1 線; $D < \lambda$), (a) 400 反射. (b) $\bar{4}00$ 反射. (b) に対応する Traverse トポグラフは図 7.16(a).

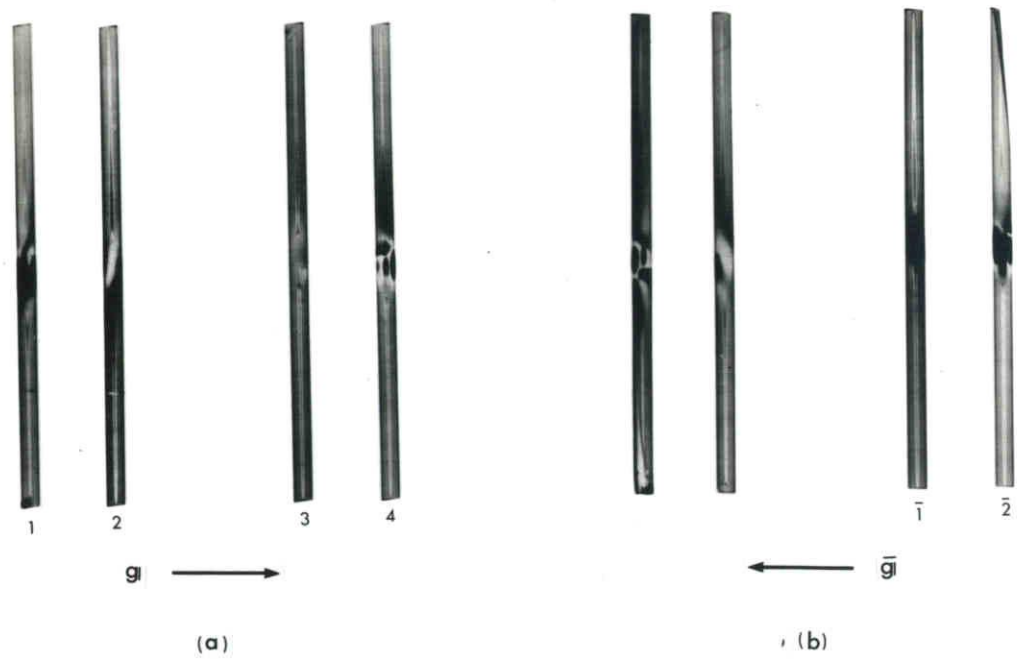


図7.28 結晶(d)のSectionトポグラフ(MoK α 線; D<さび)。 (a) $\bar{4}\bar{2}2$ 反射。 (b) $42\bar{2}$ 反射。
 対応する Transverse トポグラフは, 図7.14 (a) および (b)。

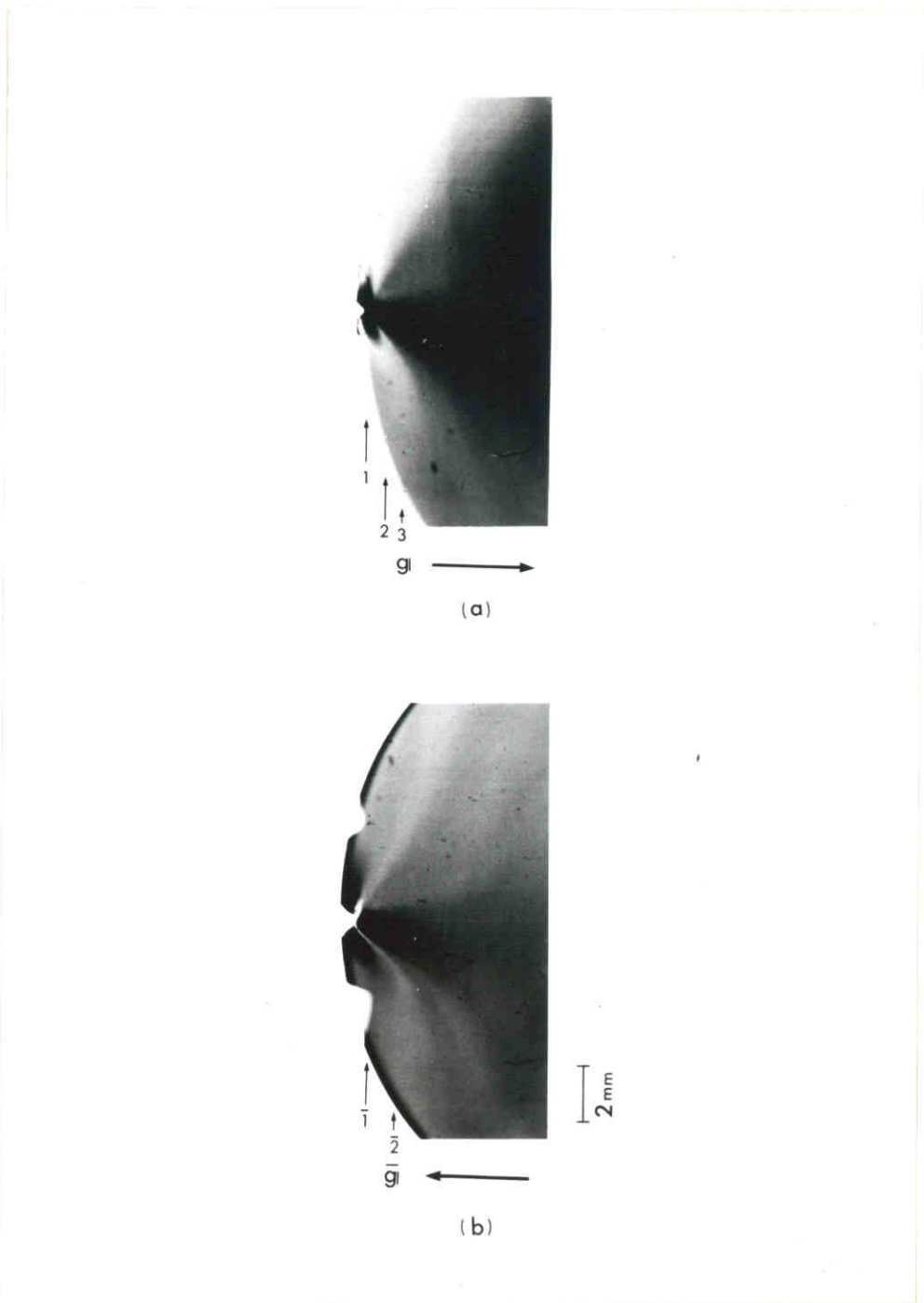


図 7.30 結晶 (f) の *Traverse* トポグラフ ($Ag K\alpha_1$ 線).
 (a) $10\bar{1}$ 反射. (b) $\bar{1}\bar{3}1$ 反射.

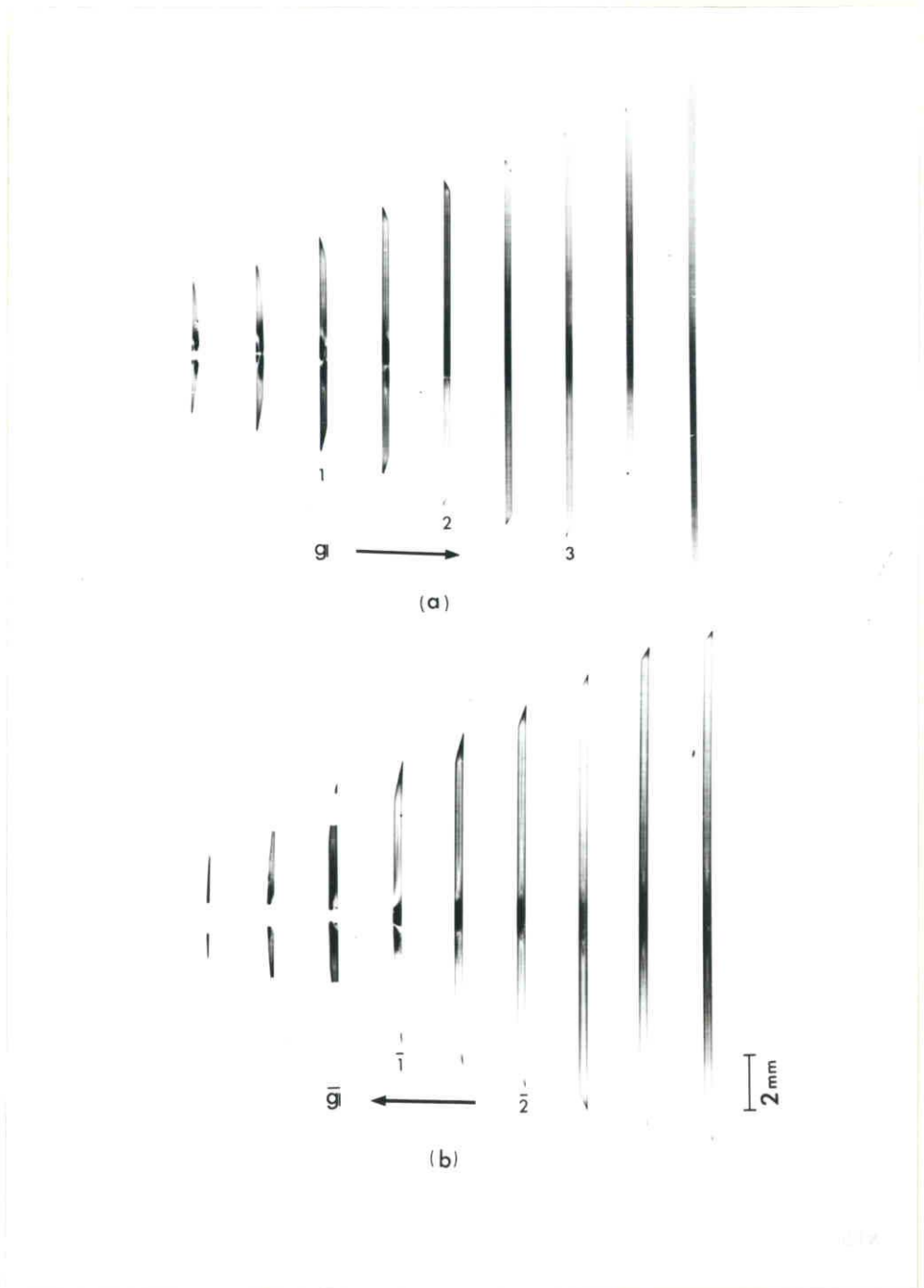


図 7.31 図 7.30 に対応する Section トポグラフ。
 (a) 13 T 反射。 (b) T₃₁ 反射。



(a)



(b)

図 7.32 結晶 (f) の Traverse トポグラフ ($AgK\alpha_1$ 線).
 (a) $\bar{1}1\bar{3}$ 反射. (b) $1\bar{1}3$ 反射.

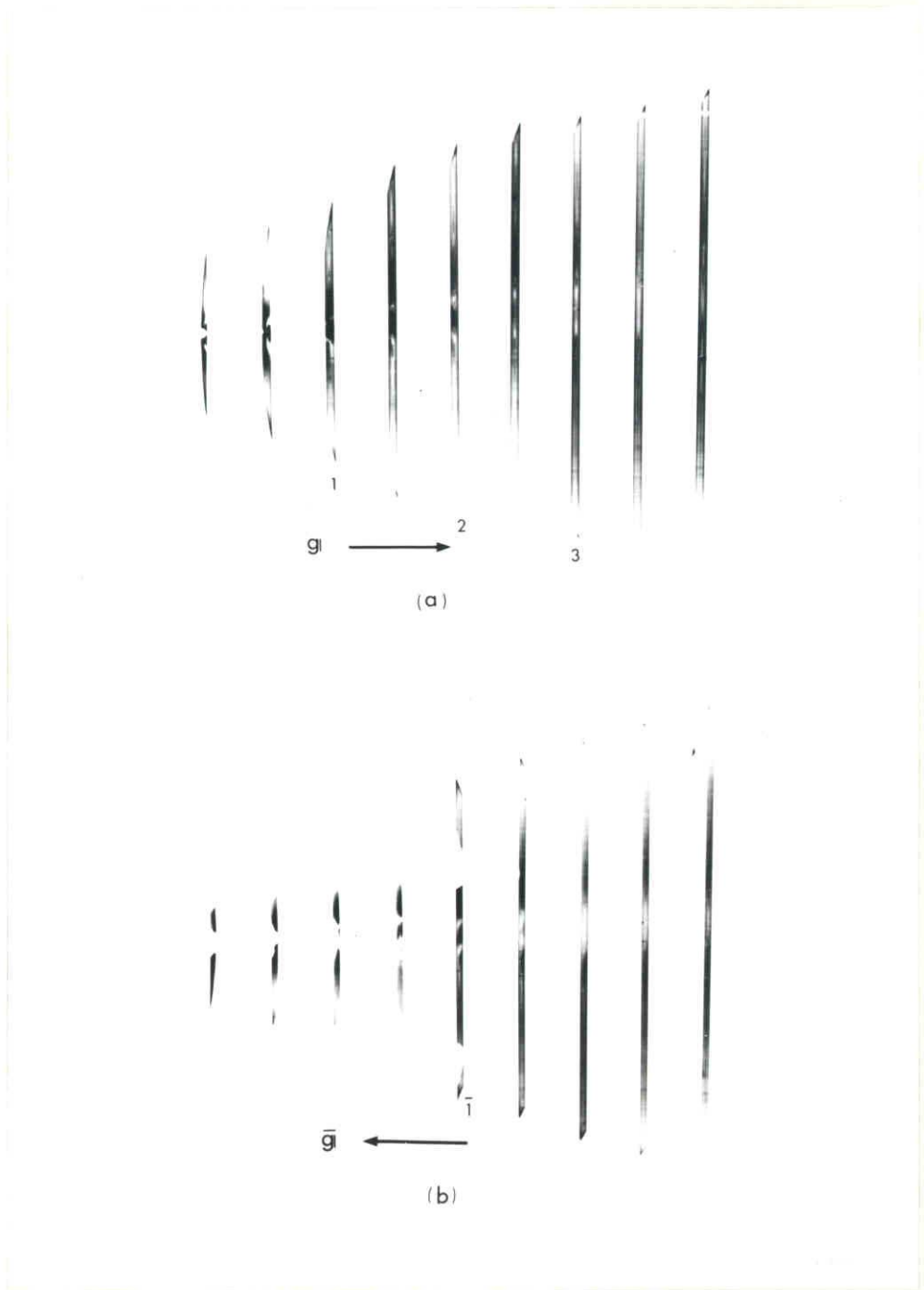


図 7.33 図 7.32 に対応する Section トポグラフ。
 (a) $\bar{1}\bar{1}\bar{3}$ 反射。 (b) $1\bar{1}3$ 反射。

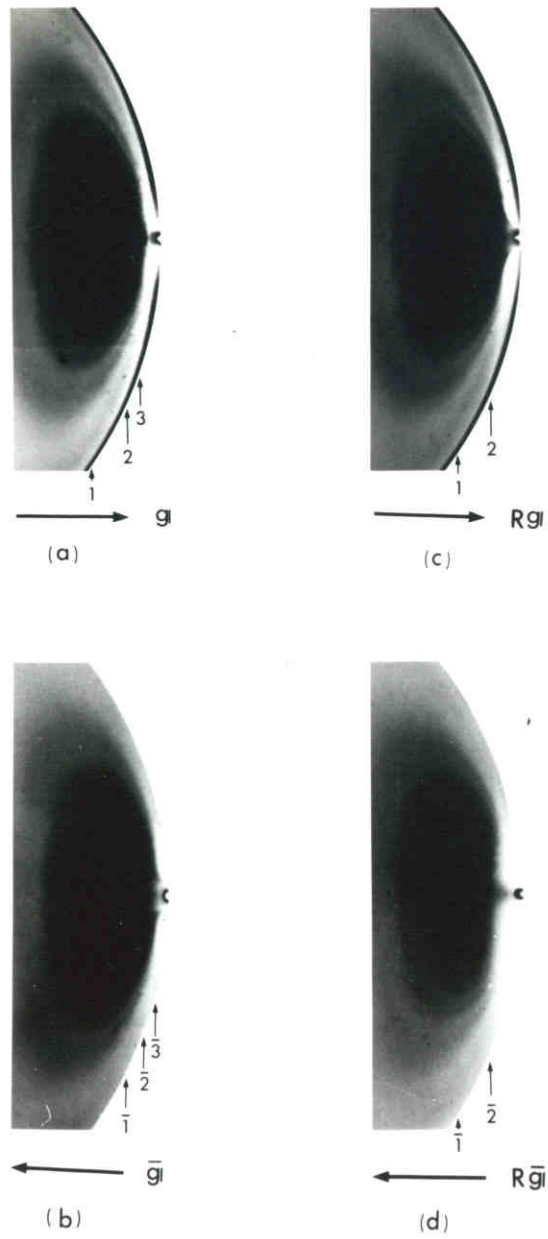


図 7.34 結晶全体が曲っている場合の Traverse トポグラフ (Ag $K\alpha_2$ 線)。 (a) $\bar{4}22$ 反射。 (b) $4\bar{2}\bar{2}$ 反射。 (c) $R\bar{4}22$ 反射。 (d) $R4\bar{2}\bar{2}$ 反射。

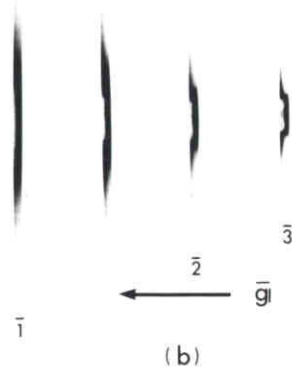
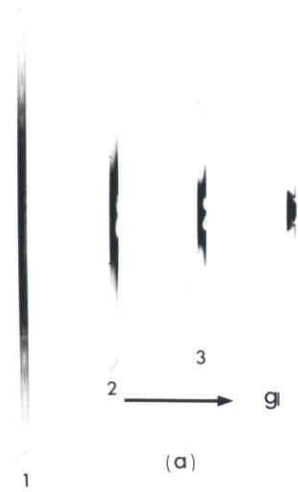


図 7.35 図 7.34 に対応する Section トポグラフ。
 (a) $\bar{4}22$ 反射。 (b) $4\bar{2}\bar{2}$ 反射。

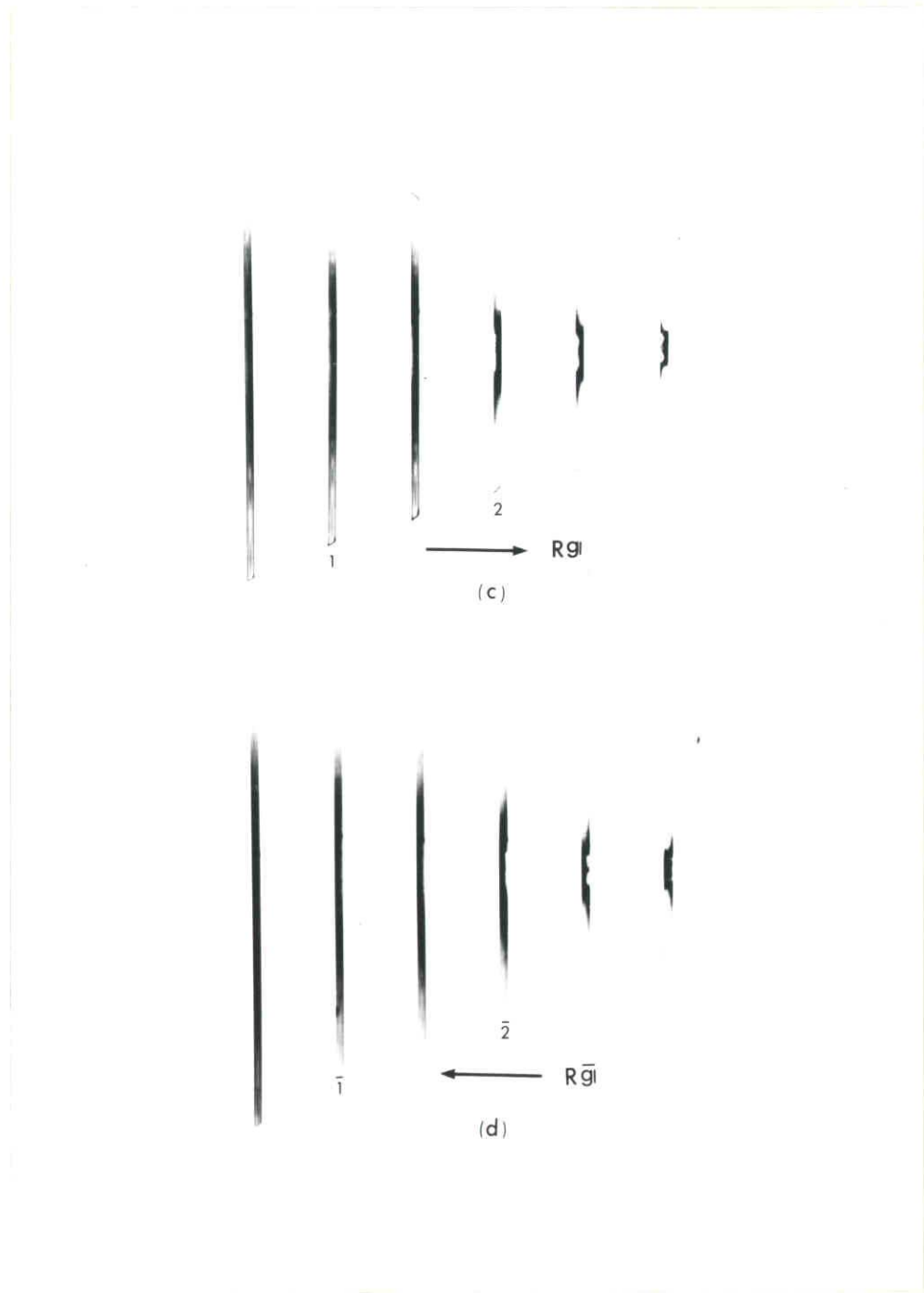


图 7.35 (c) $R\bar{4}22$ 反射, (d) $R4\bar{2}\bar{2}$ 反射.

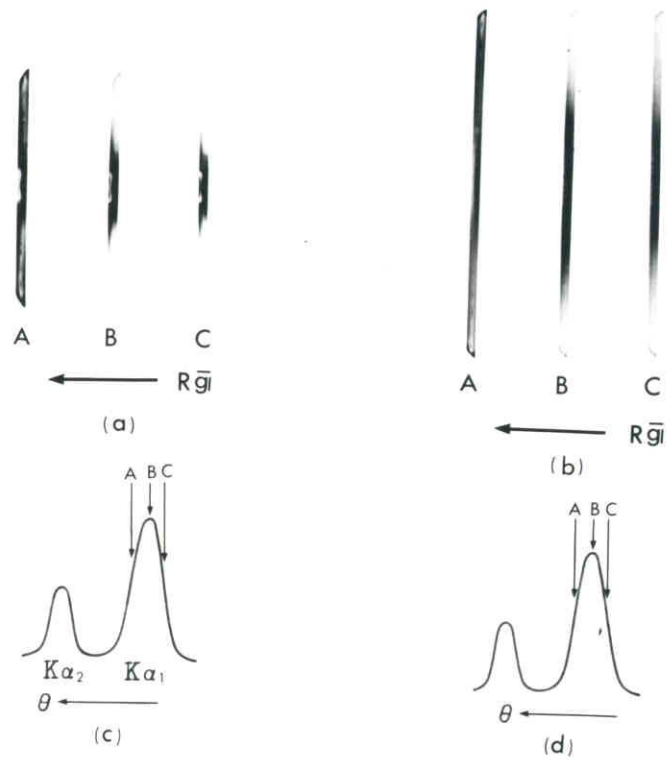


図 7.36 図 7.35 と同じ条件で、視射角を変えて撮った Section トポグラフ。(a) および (b), $R4\bar{2}\bar{2}$ 反射。おのおのの Section トポグラフが撮られたときの視射角を、(c) および (d) に模式的に示す。

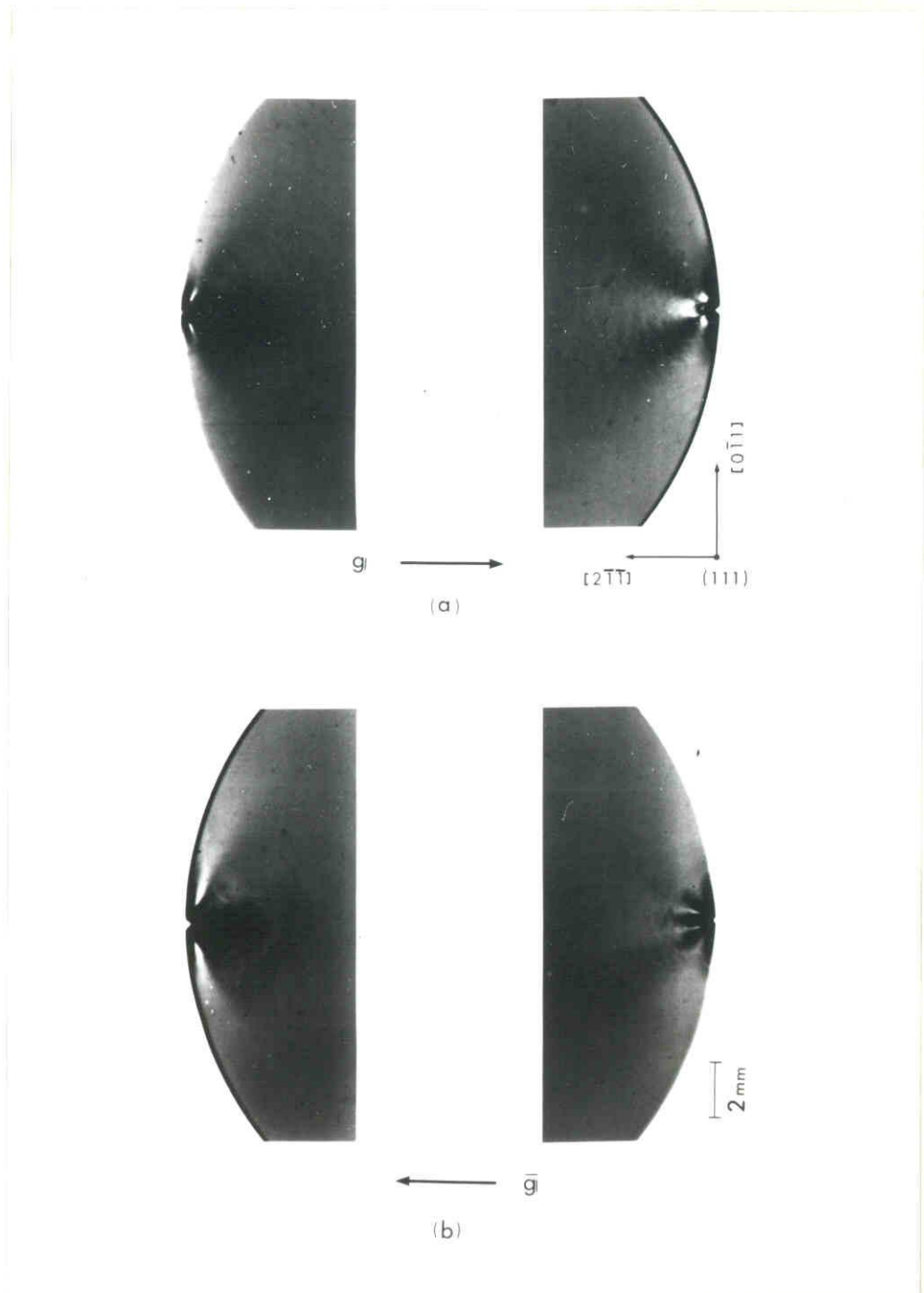


図 7.37 結晶 (f) の $[211]$ 圧縮の Traverse トポグラフ
 ($A_g K\alpha_1$ 線)。圧縮力は約 1 kg 重。
 (a) 422 反射。 (b) $4\bar{2}\bar{2}$ 反射。

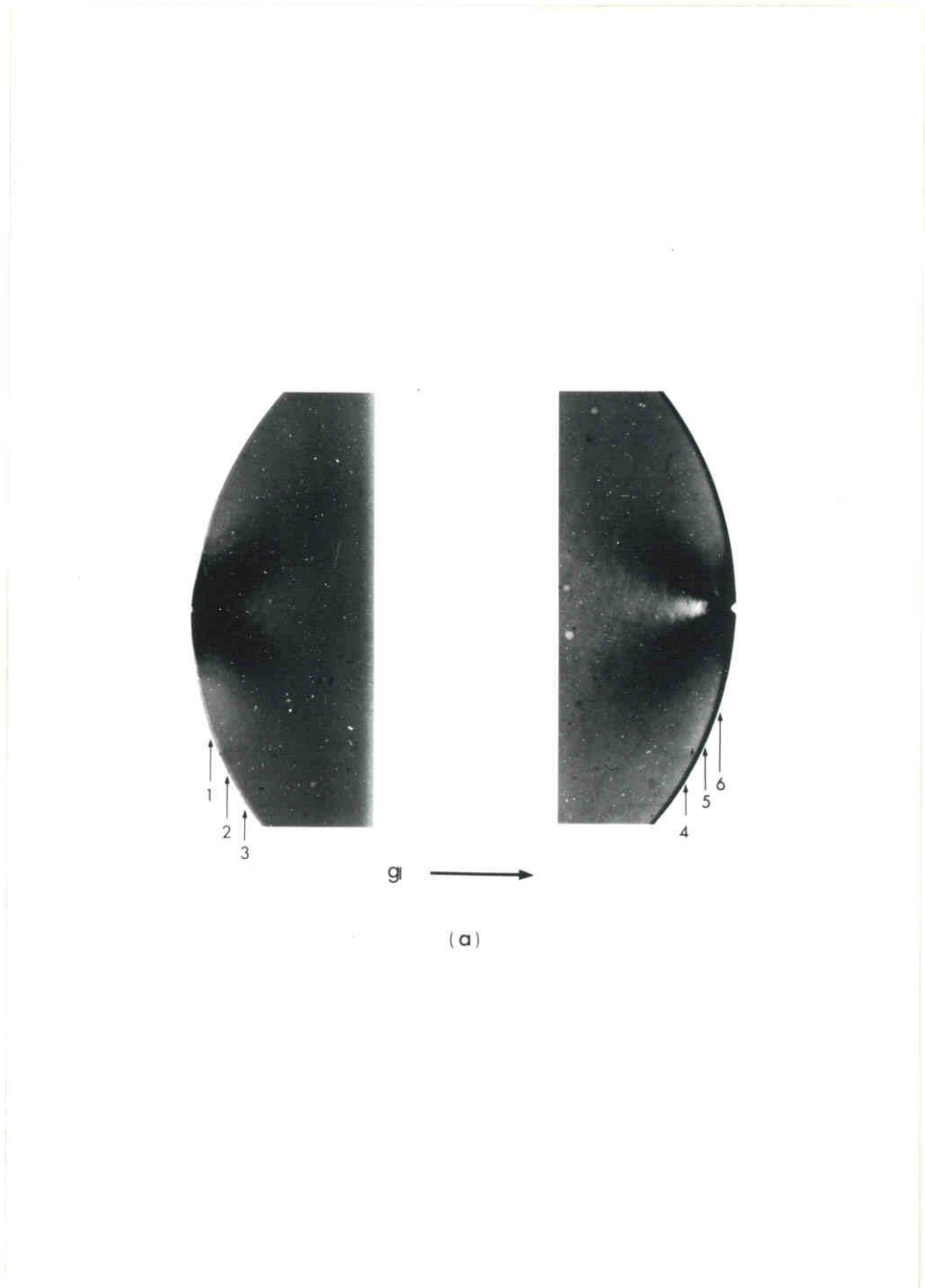


図 7.38 結晶 (f) の $[\bar{2}11]$ 圧縮の Traverse トポグ
 ラフ ($A_g K\alpha_1$ 線)。圧縮力は約 2.5 kg 重。以下
 図 7.46 まではすべて同じ条件で得られた。

(a) $\bar{4}22$ 反射。

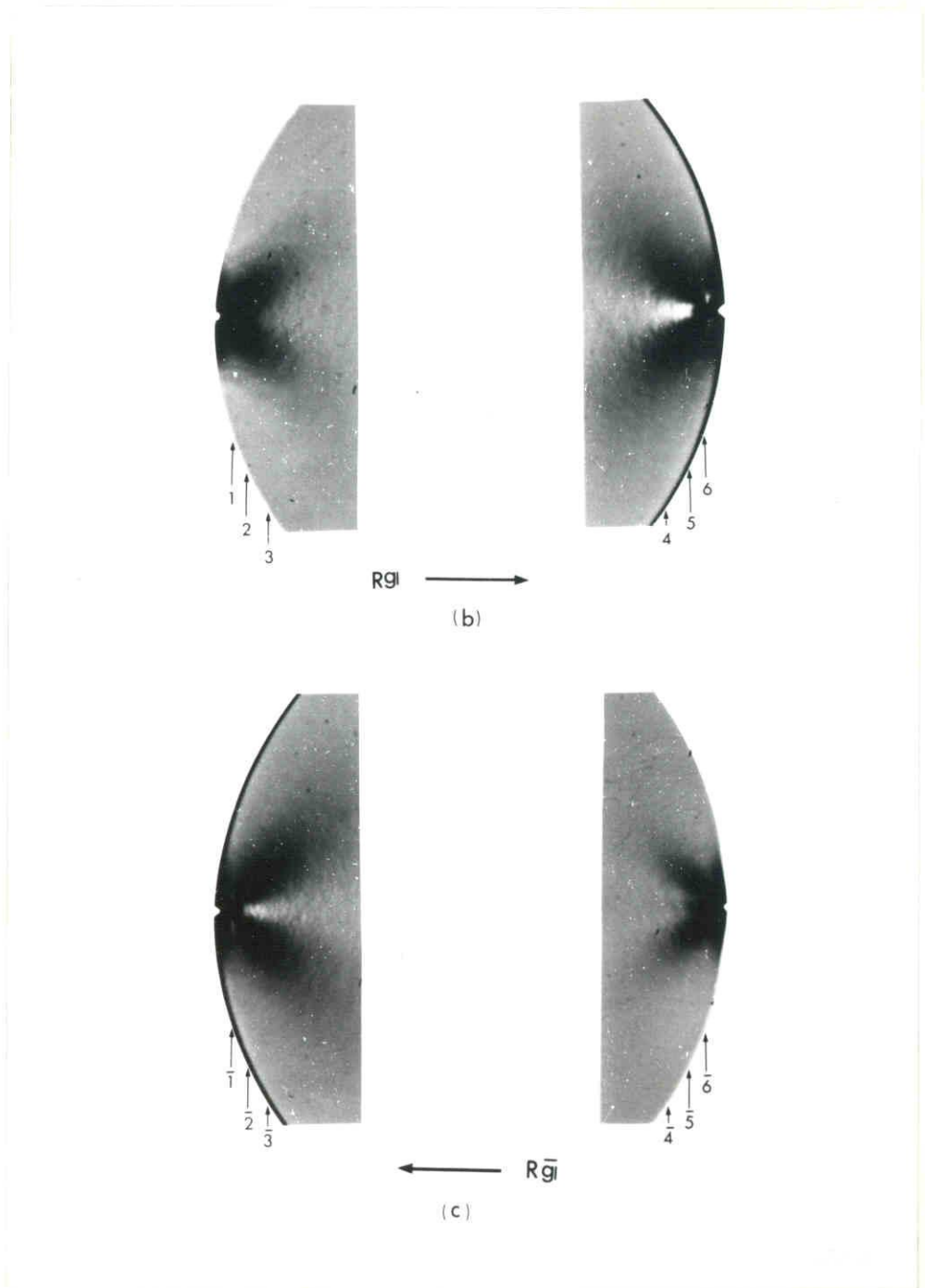


圖 7.38 (b) $R\bar{4}22$ 反射。(c) $R4\bar{2}\bar{2}$ 反射。

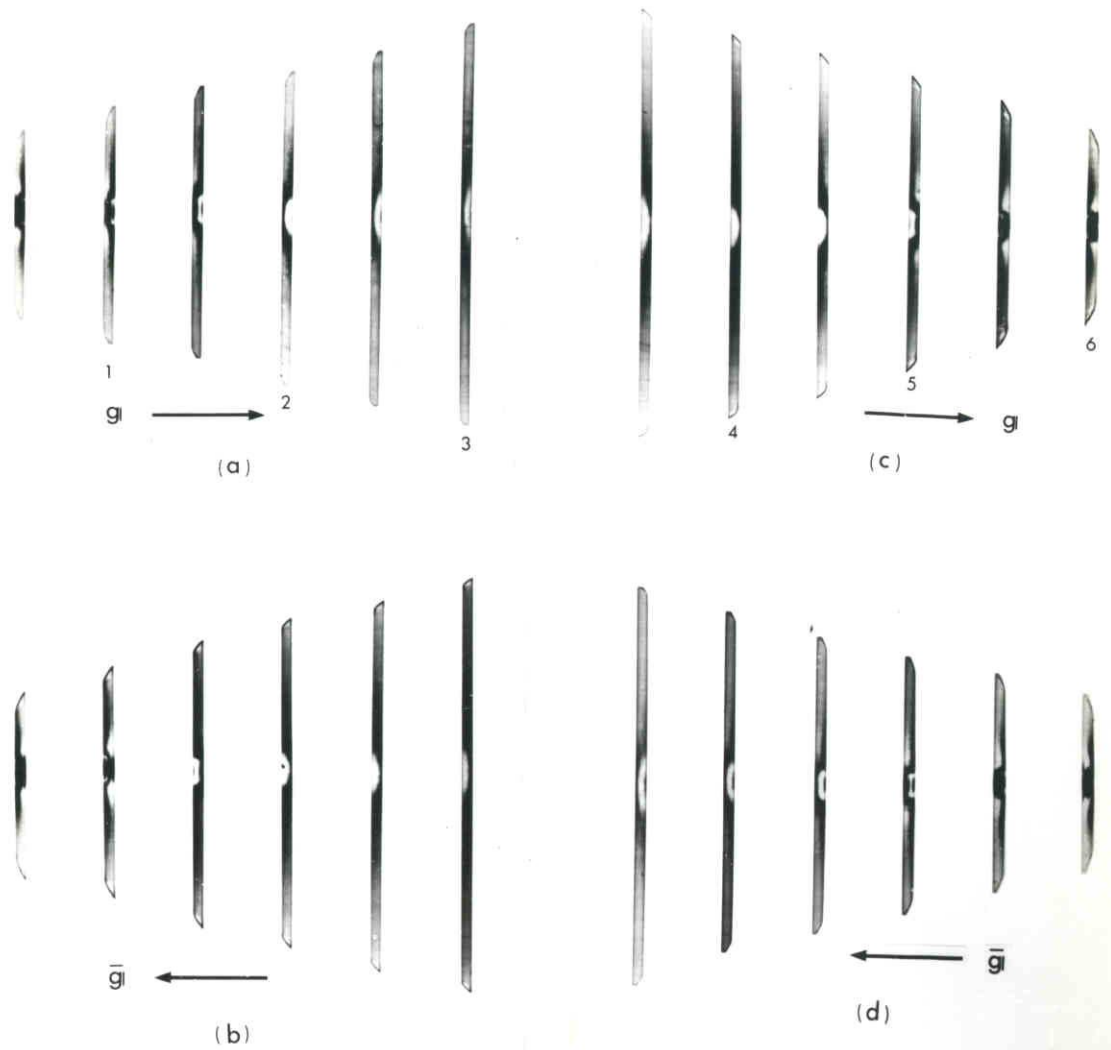
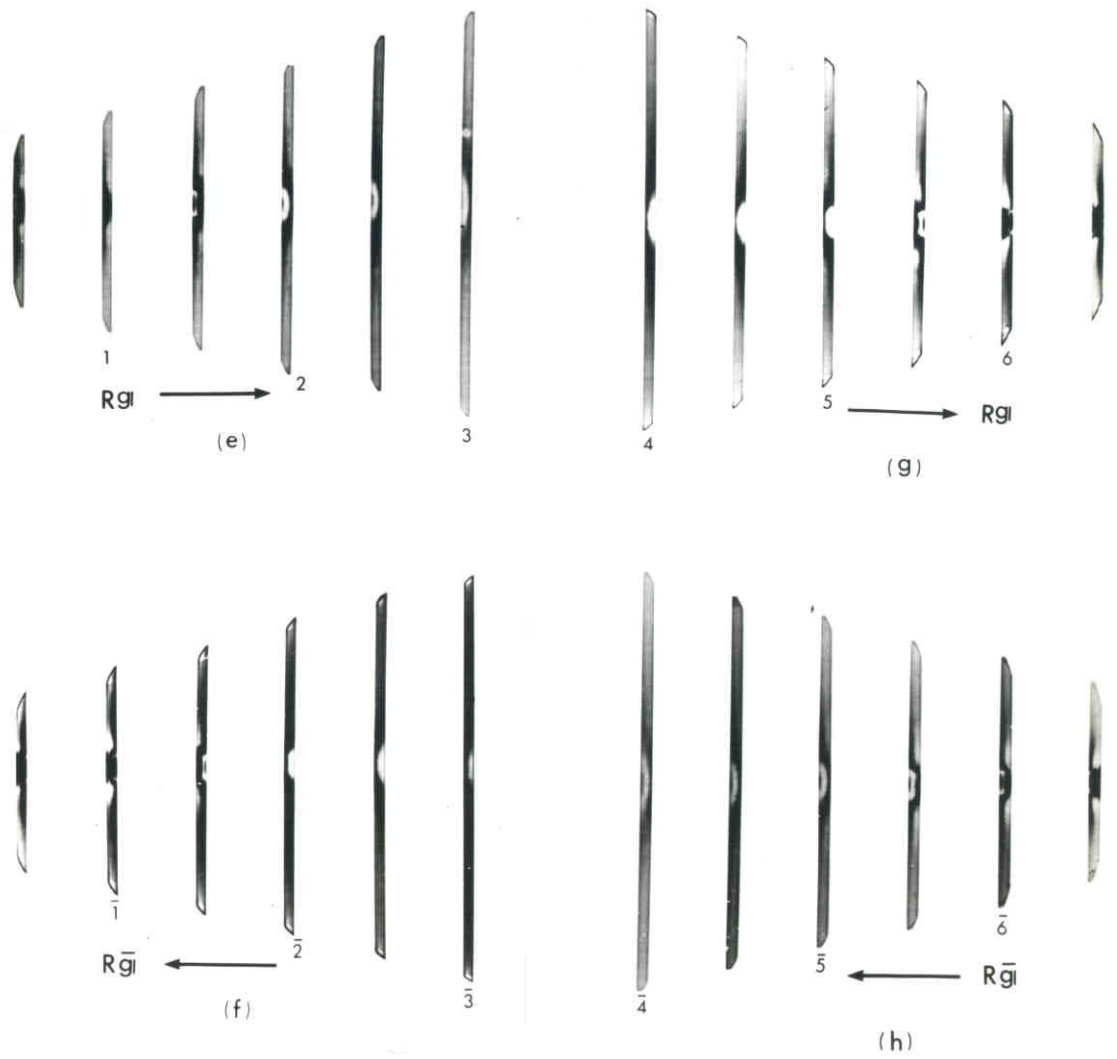


図 7.39 図 7.38 に対応する Section トポグラフ。

- (a) $\bar{4}22$ 反射, (b) $4\bar{2}\bar{2}$ 反射; 結晶の左半分.
 (c) $\bar{4}22$ 反射, (d) $4\bar{2}\bar{2}$ 反射; 結晶の右半分.



四 7. 39

(e) $R\bar{4}22$ 反射, (f) $R4\bar{2}2$ 反射; 結晶の左半分.
 (g) $R\bar{4}22$ 反射, (h) $R4\bar{2}2$ 反射; 結晶の右半分.

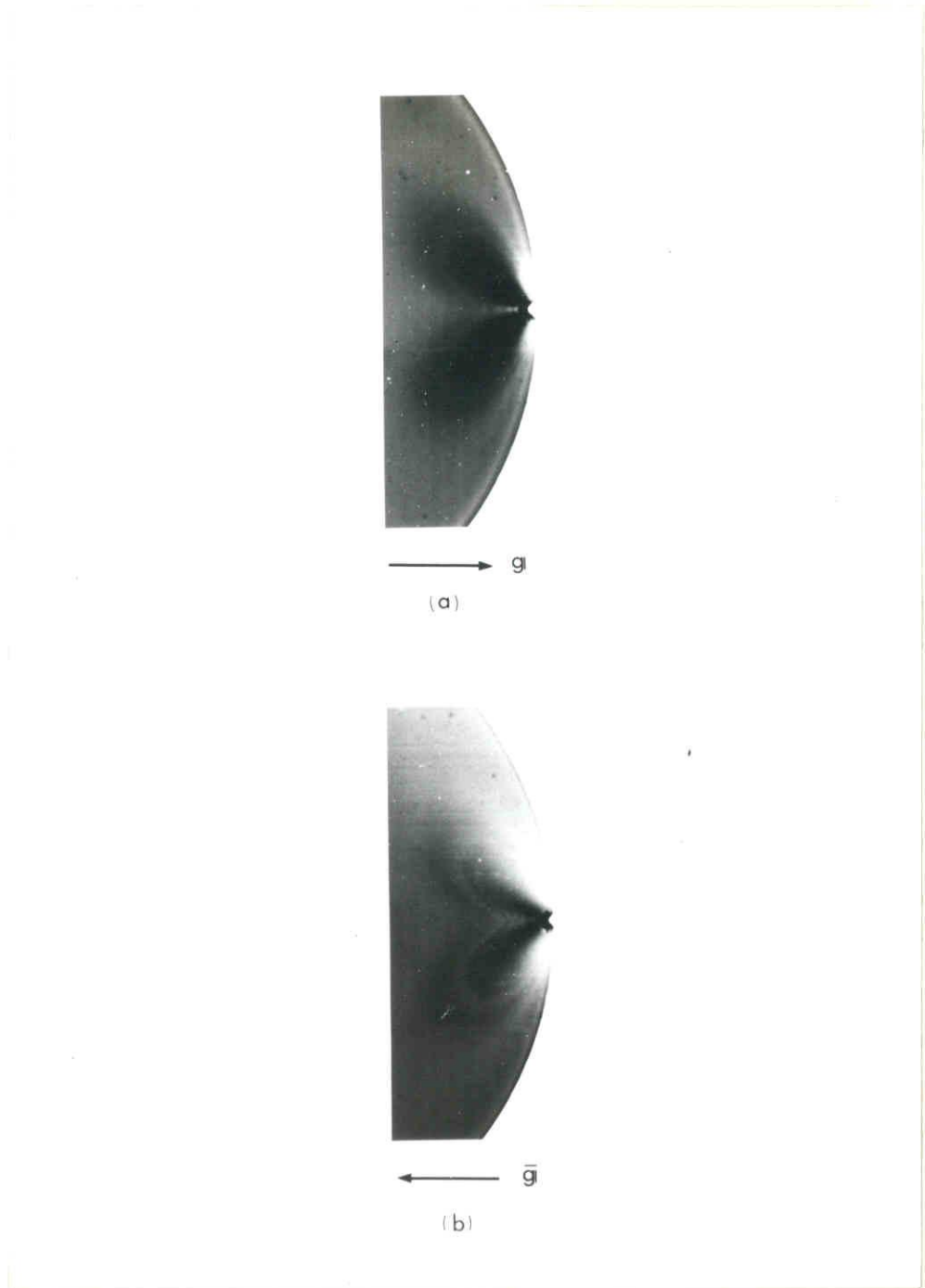


図 7.40 結晶 (f) の *Traverse* トポグラフ ($A_g K\alpha_1$ 線)。
 (a) $\bar{1}11$ 反射。 (b) $1\bar{1}\bar{1}$ 反射。

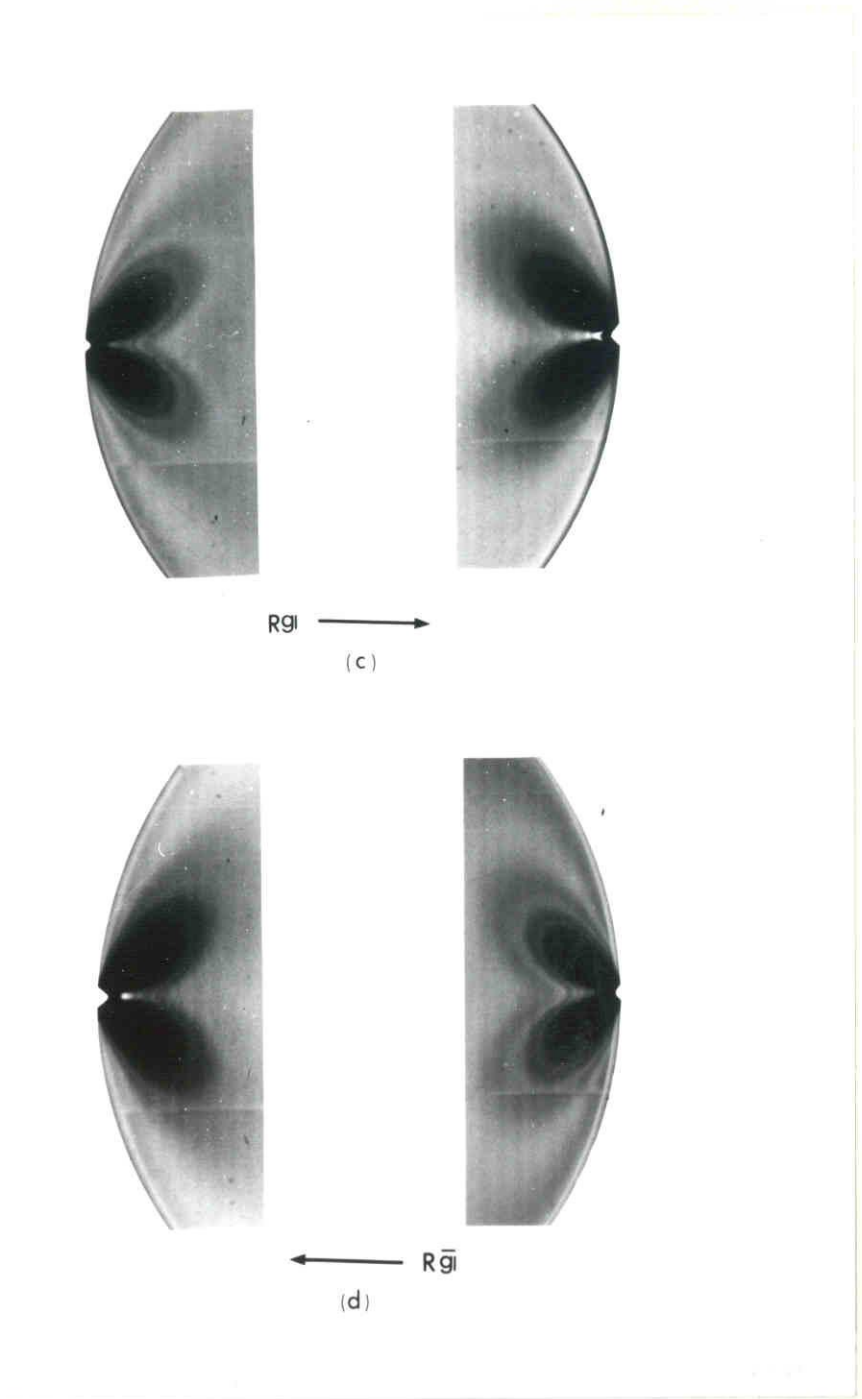


圖 7.40 (c) $R\bar{1}11$ 反射。 (d) $R1\bar{1}\bar{1}$ 反射。

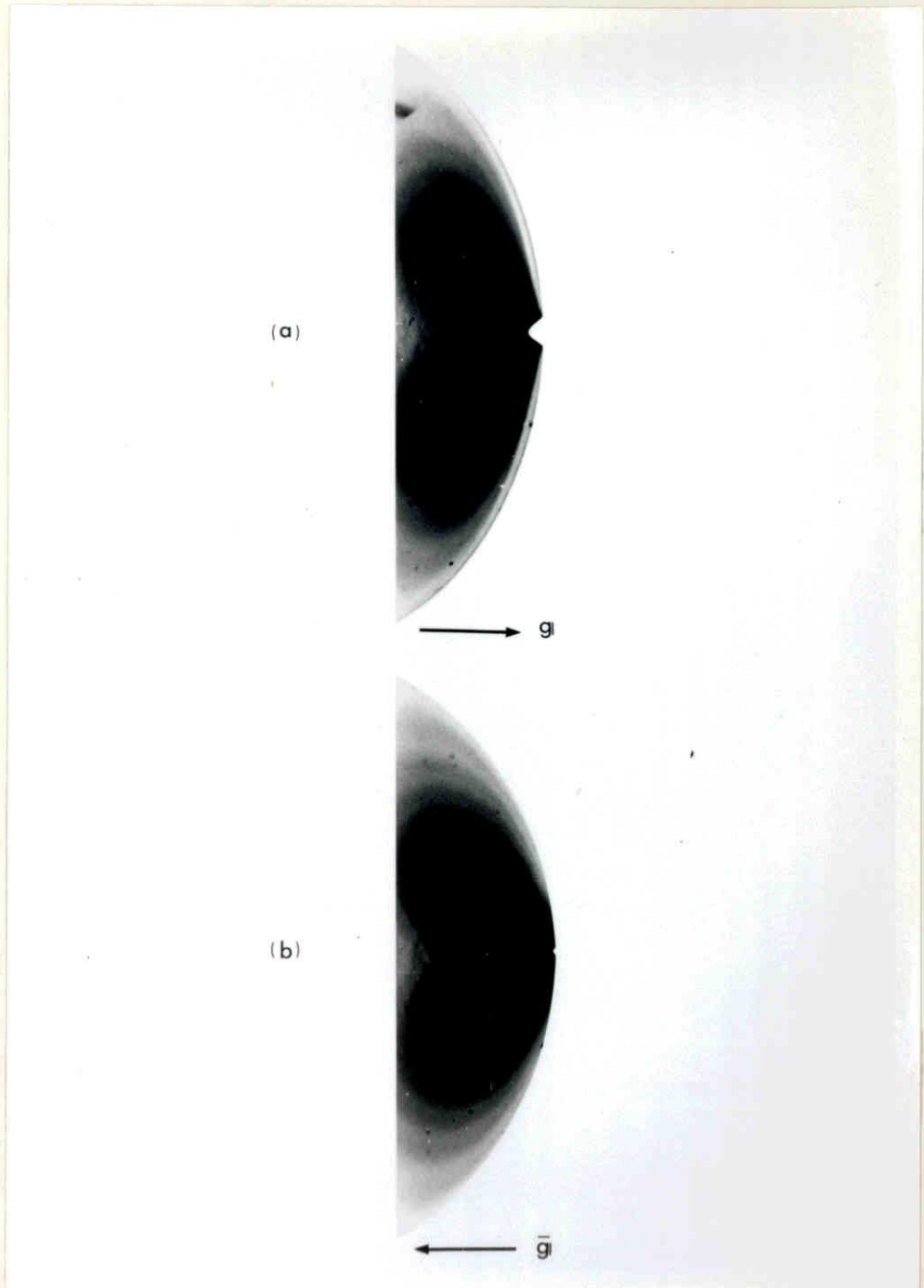


図 7.41 結晶 (f) の *Traverse* トポグラフ ($AgK\alpha_1$ 線).
 (a) 333 反射. (b) $3\bar{3}\bar{3}$ 反射.

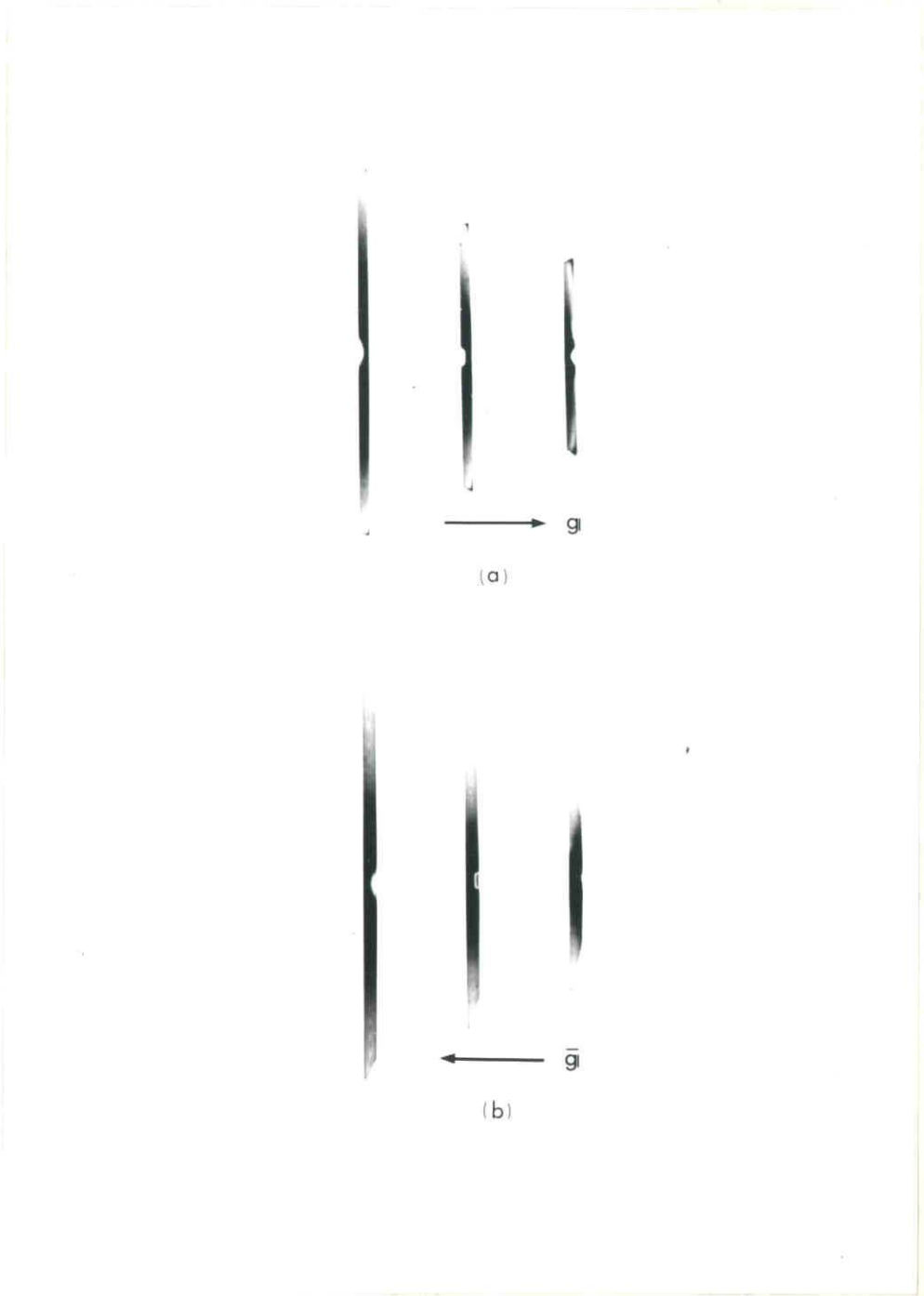


図 7.42 図 7.41 に対応する Section トポグラフ。
 (a) \bar{g} 反射。 (b) g 反射。

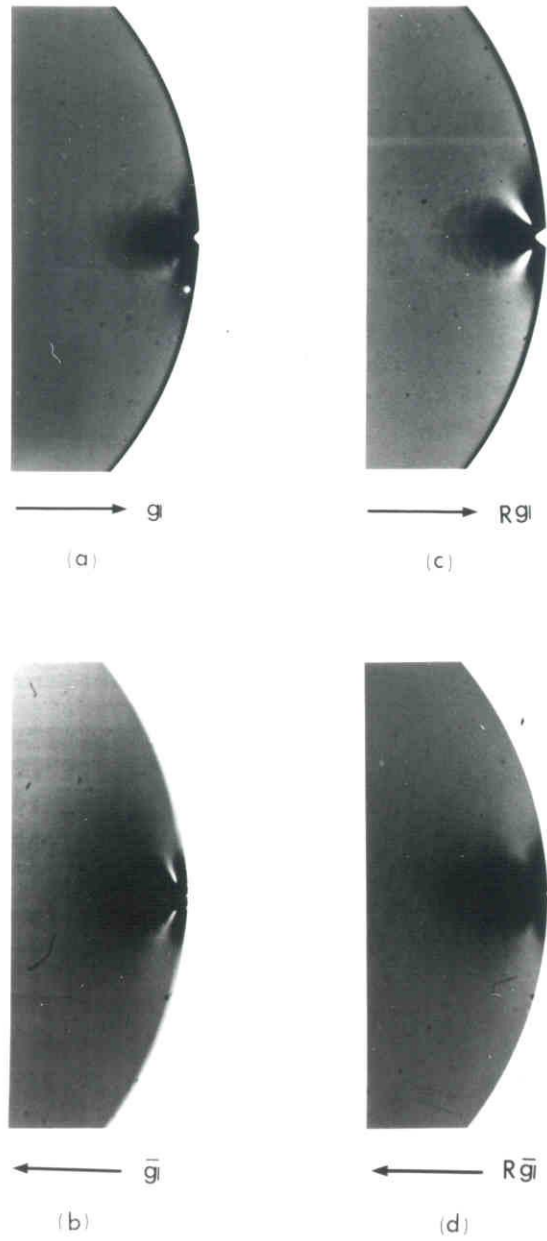


図 7.43 結晶 (f) の Traverse トポグラフ ($Ag K\alpha_1$ 線).
 (a) $\bar{3}11$ 反射. (b) $3\bar{1}\bar{1}$ 反射.
 (c) $R\bar{3}11$ 反射. (d) $R3\bar{1}\bar{1}$ 反射.

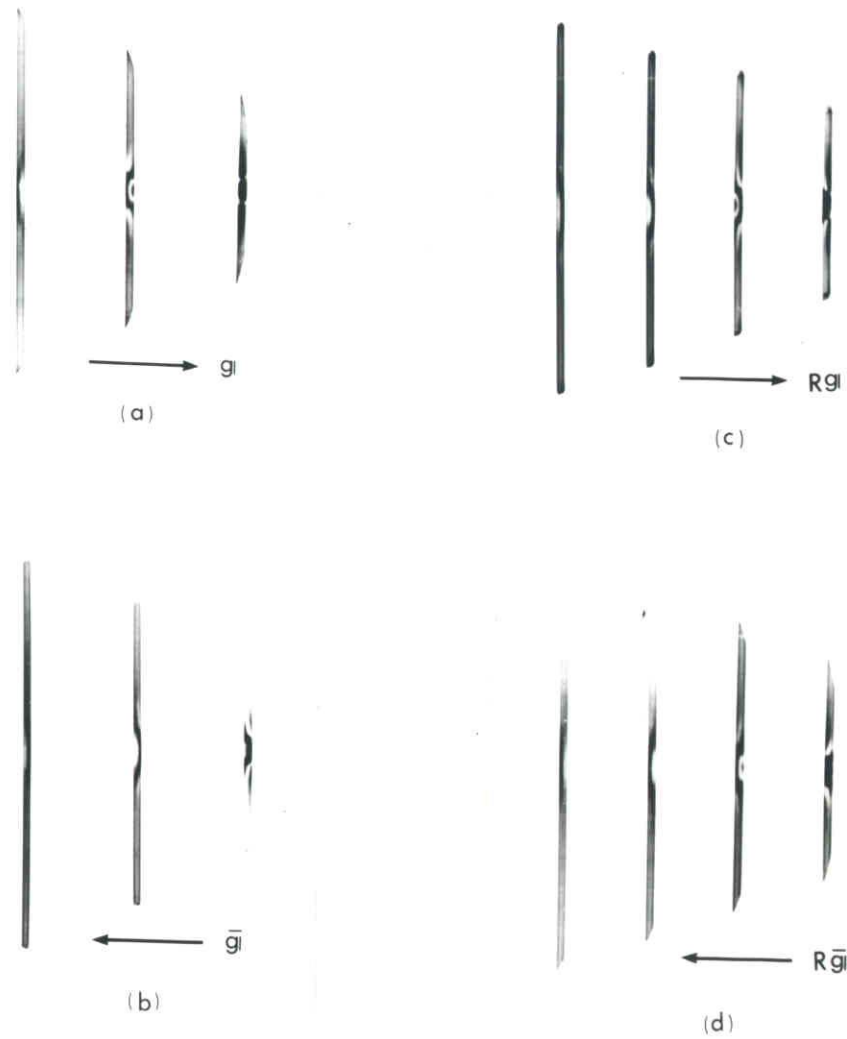


図 7.44 図 7.43 に対応する Section トポグラフ。
 (a) $\bar{J}11$ 反射。 (b) $\bar{J}II$ 反射。
 (c) $R\bar{J}11$ 反射。 (d) $R\bar{J}II$ 反射。

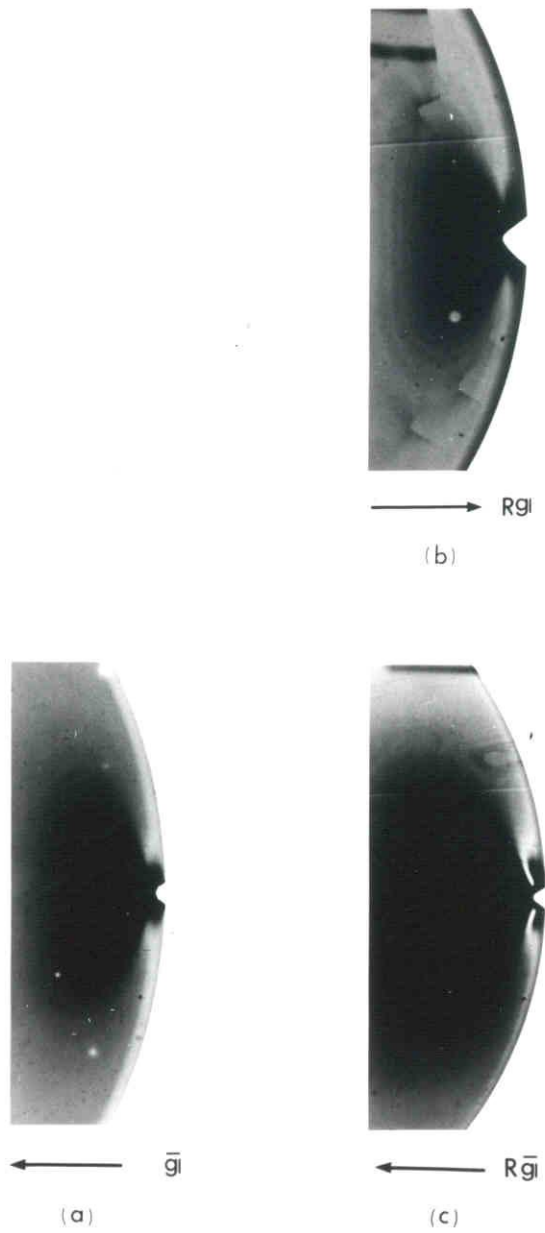


図 7. 45 結晶 (f) の Traverse トポグラフ ($Ag K\alpha_1$ 線).
 (a) 400 反射. (b) $R\bar{4}00$ 反射.
 (c) $R400$ 反射.

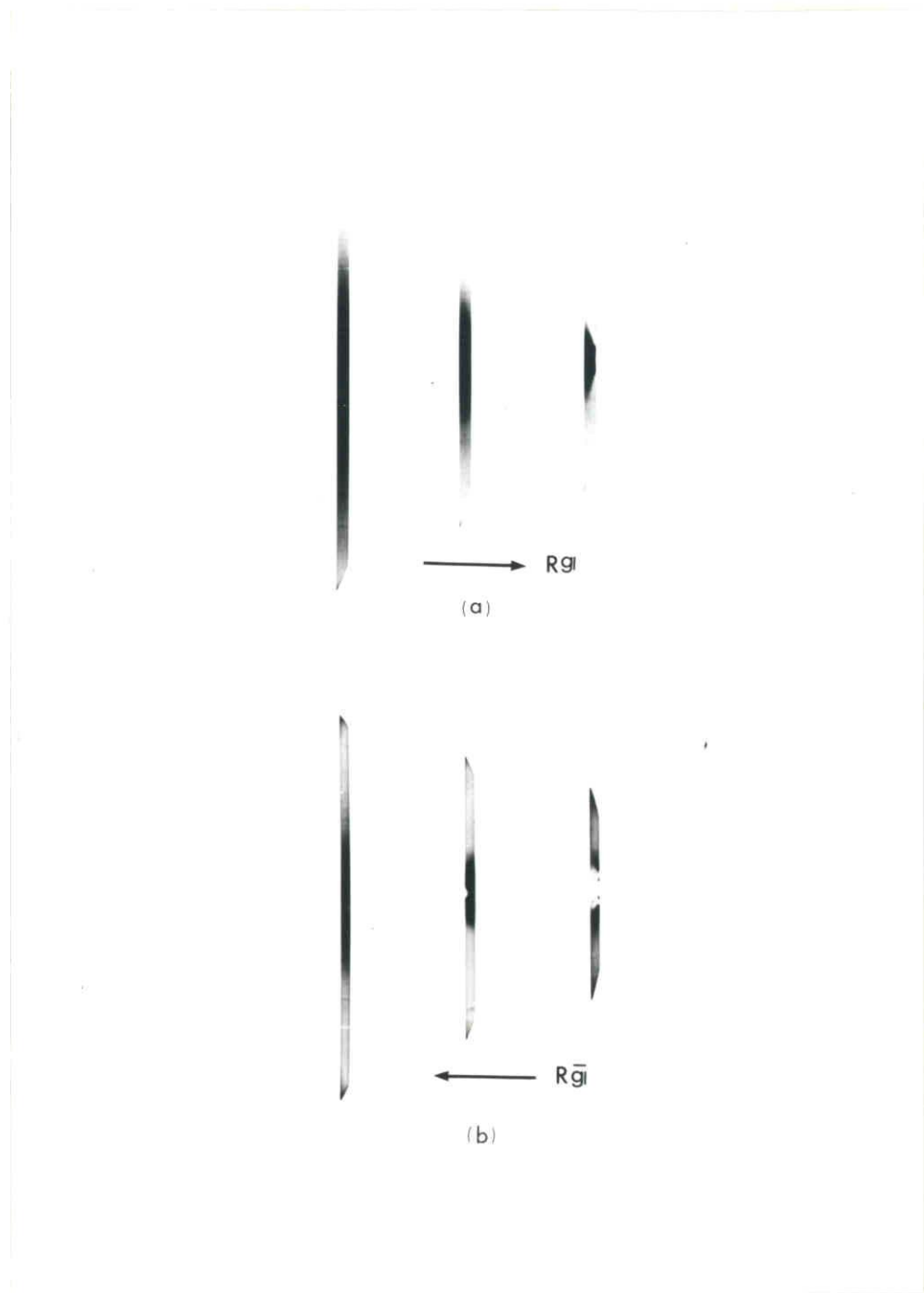


図 7.46 図 7.45 に対応する Section トポグラフ。
 (a) $R\bar{4}00$ 反射。 (b) $R400$ 反射。

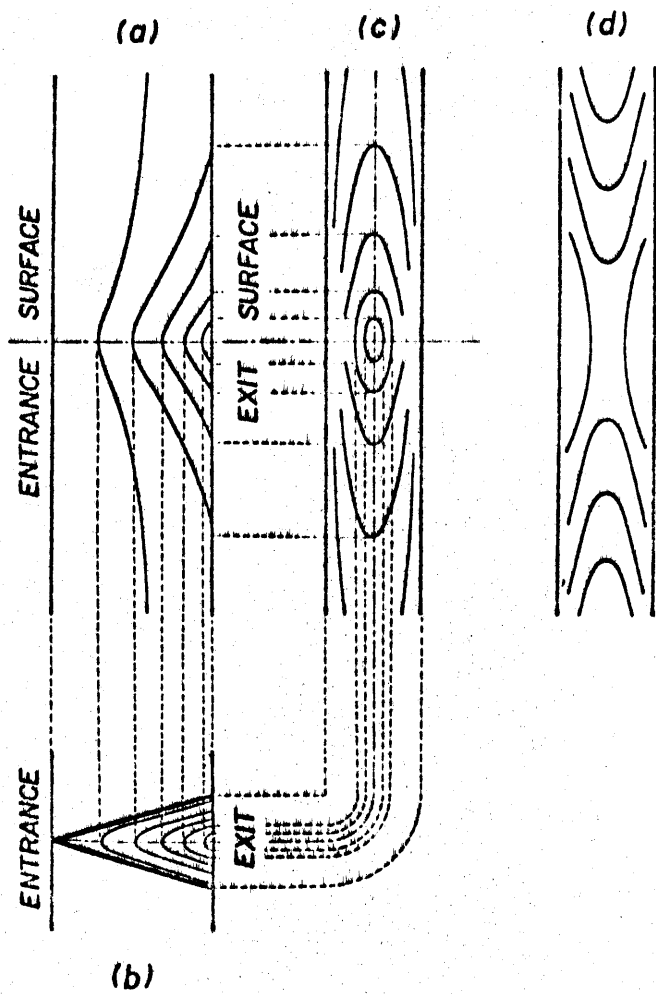


図 8.1 Section 図形に見られる Pendellösung 縞。(a) 入射波を通る断面図。(b) (a)に垂直な面内の強度場。(c) 出射面に観測される縞模様(実際の場合)。(d) 出射面に観測される縞模様(仮想的な場合)。

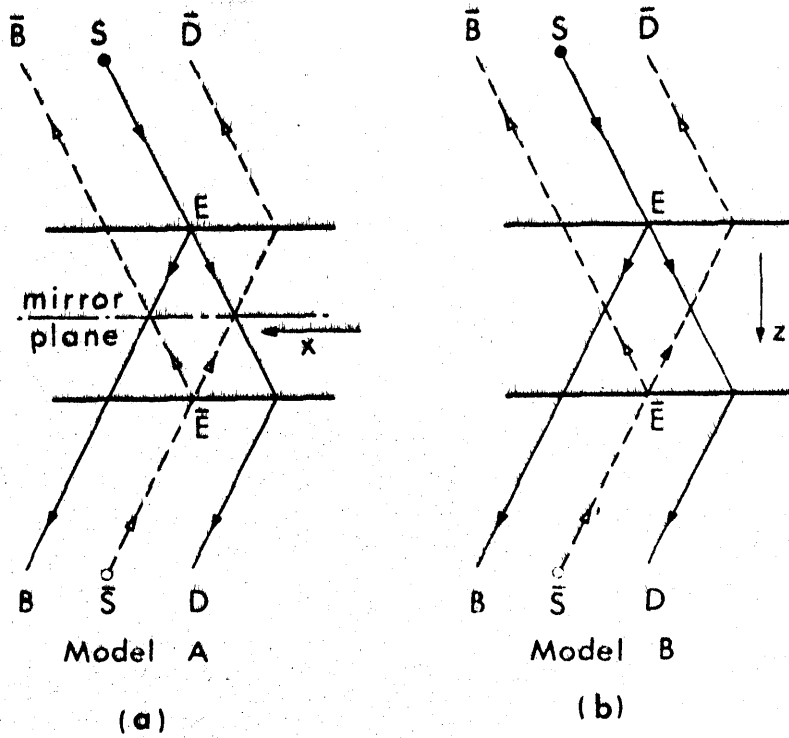


図 8.2 一様でない $U(1)$ の配のモデル。(a) f が x 依存性だけを持つ場合。(b) f が x に依存しない場合。

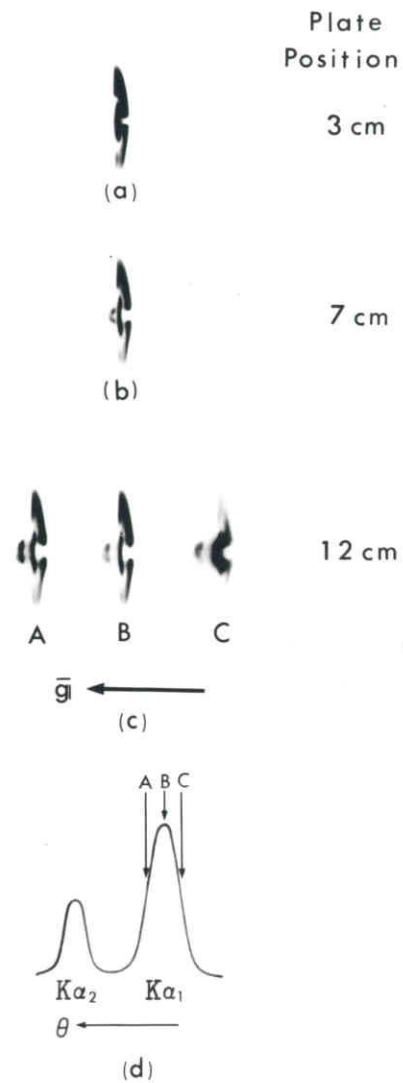


図 8.3 非常に乱れの大きい場所で撮った Section トポグラフ ($AgK\alpha_1$ 線)。 (a), (b) および (c) は、写真乾板とそれぞれ結晶の後、3 cm, 7 cm および 12 cm に置いて撮った。 (d) は、(c) の写真を撮ったときの視射角と模式的に示す。0 次 2 反射。

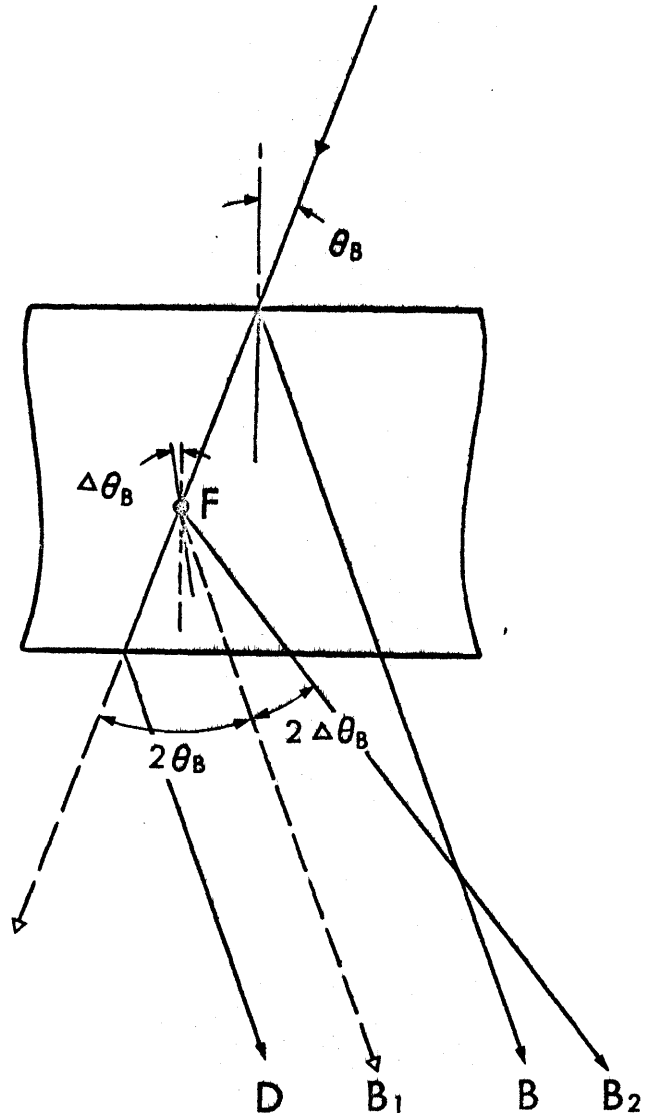


図 8.4 $K\alpha_2$ 線の Bragg 反射を示す図。F 点の近くで $\Delta\theta_B$ だけ網平面の曲りがあるとする。B₁ は通常の $K\alpha_1$ 線が反射される方向、B₂ が $K\alpha_2$ 線の反射方向を示す。

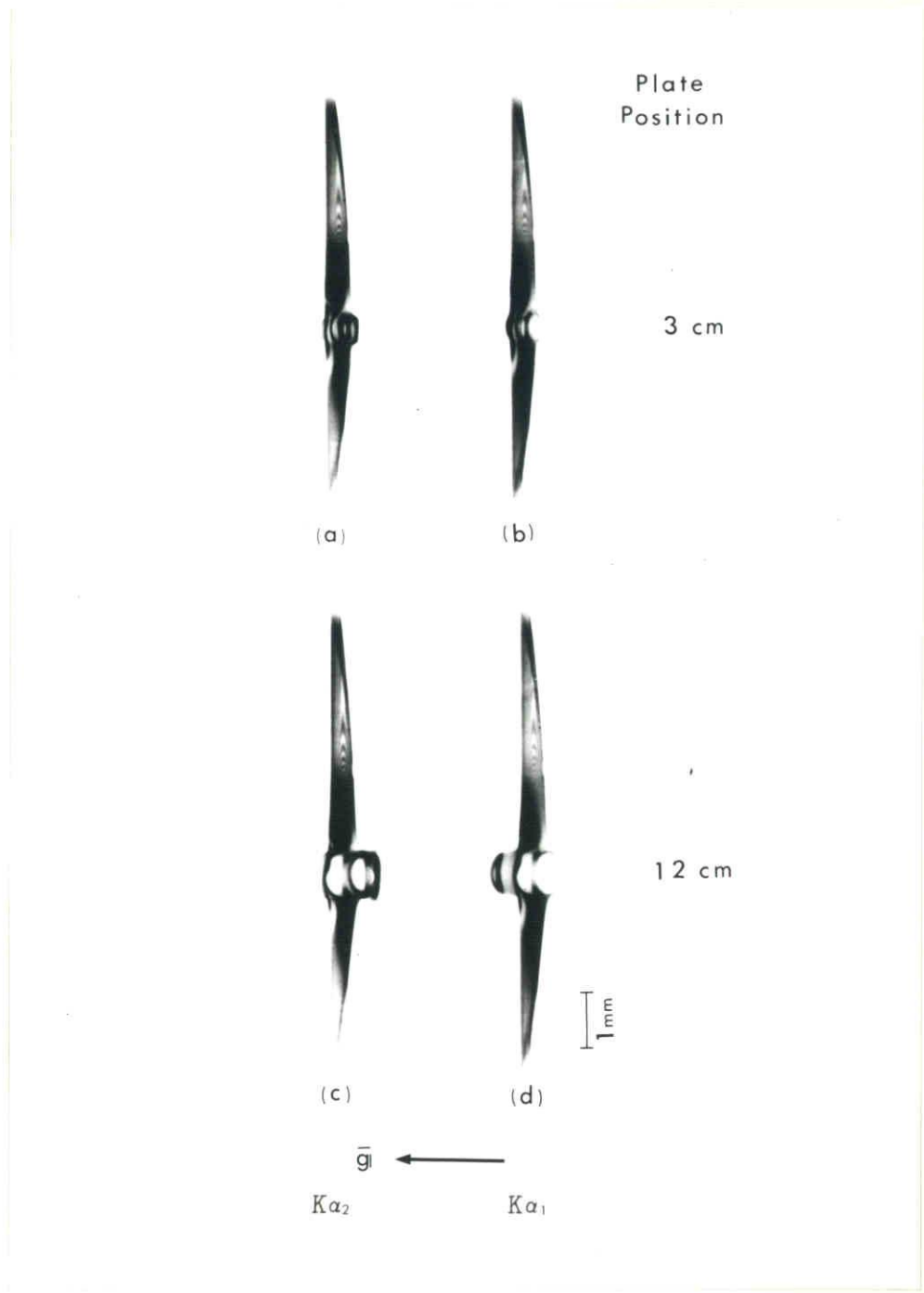


図 8.5 $M_0K\alpha_1$ および $K\alpha_2$ 線による Section トポグラフ。結晶 (f) の 022 反射。(a) および (c) は、ロッキング・カーブの $K\alpha_2$ 線のピークの視射角で撮ったもの。(b) および (d) は、ロッキング・カーブの $K\alpha_1$ 線のピークの視射角で撮ったもの。

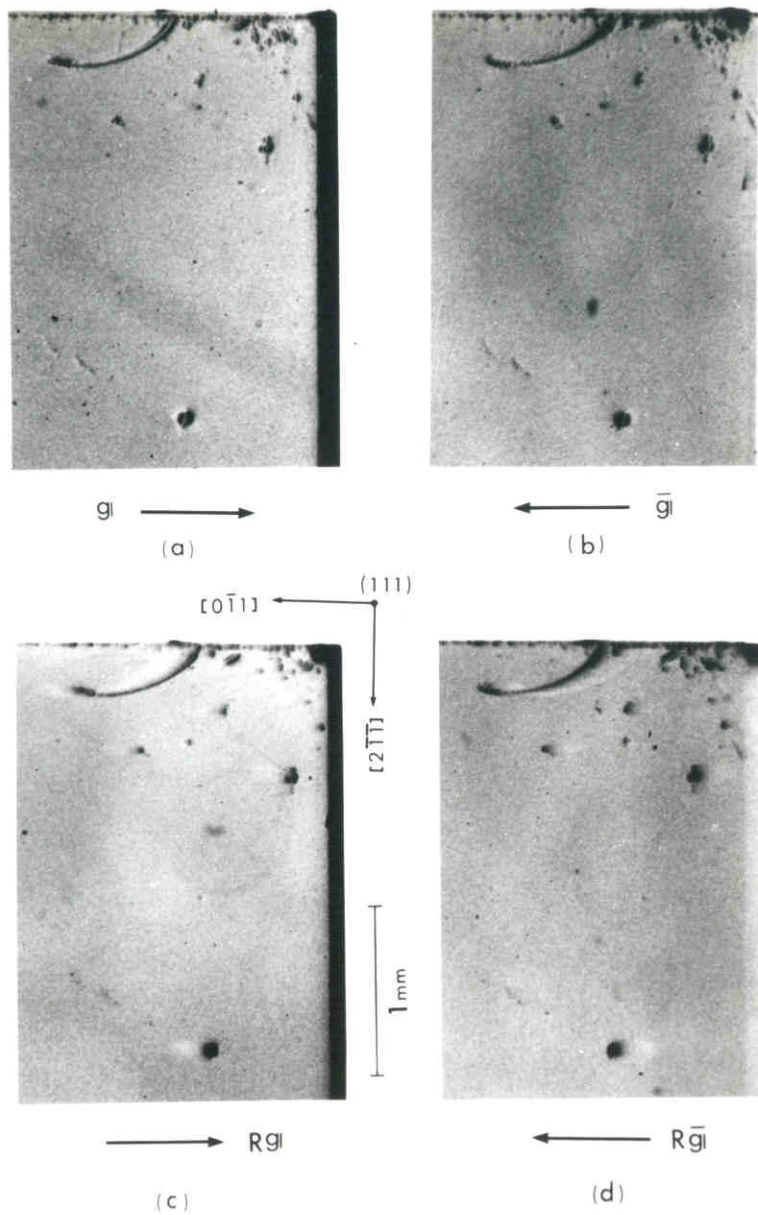
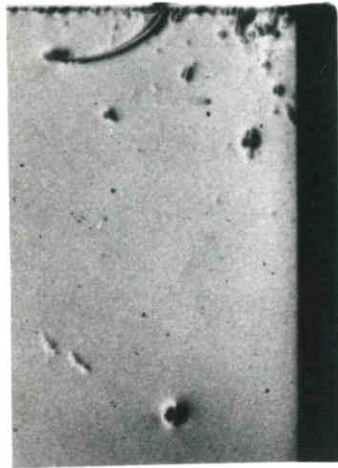
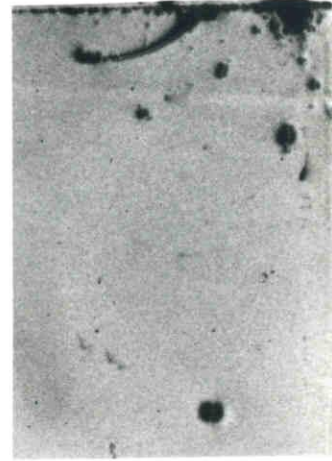


図 8.6 Surface damage の像 ($MoK\alpha_1$ 線; 結晶 (e)).
 (a) $02\bar{2}$ 反射. (b) $0\bar{2}2$ 反射.
 (c) $R02\bar{2}$ 反射. (d) $R0\bar{2}2$ 反射.
 これらは, 図 7.12 (a), (b), (c) および (d) の
 拡大写真.



g \longrightarrow

(e)



\longleftarrow \bar{g}

(f)

図 8.6 (e) $04\bar{4}$ 反射。 (f) $0\bar{4}4$ 反射。
図 7.13 (a) および (b) の拡大写真。

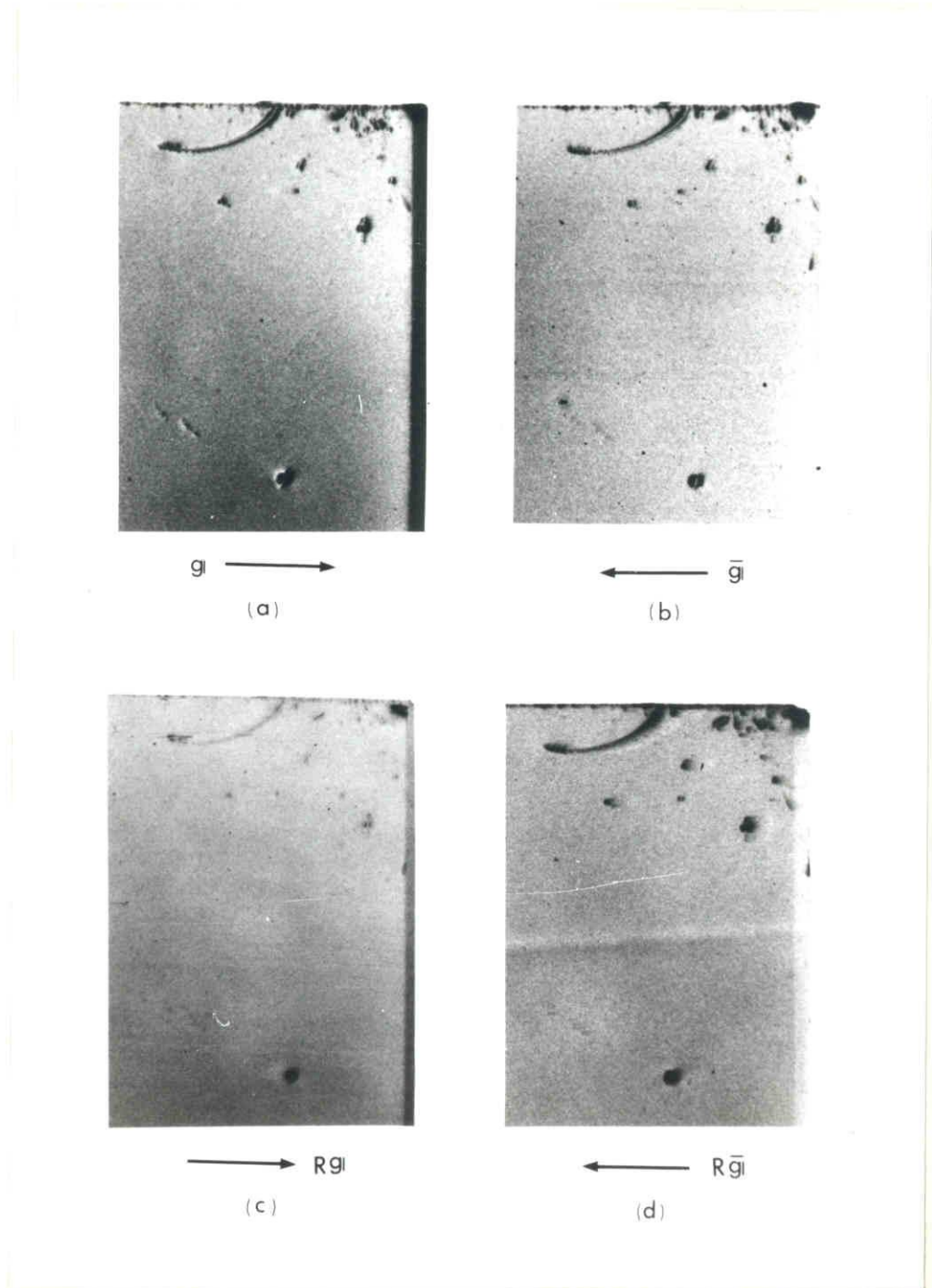


图 8.7 Surface damage の像 ($AgKX_2$ 標; 結晶 (e)).
 (a) $02\bar{2}$ 反射. (b) $0\bar{2}2$ 反射.
 (c) $R02\bar{2}$ 反射. (d) $R0\bar{2}2$ 反射.

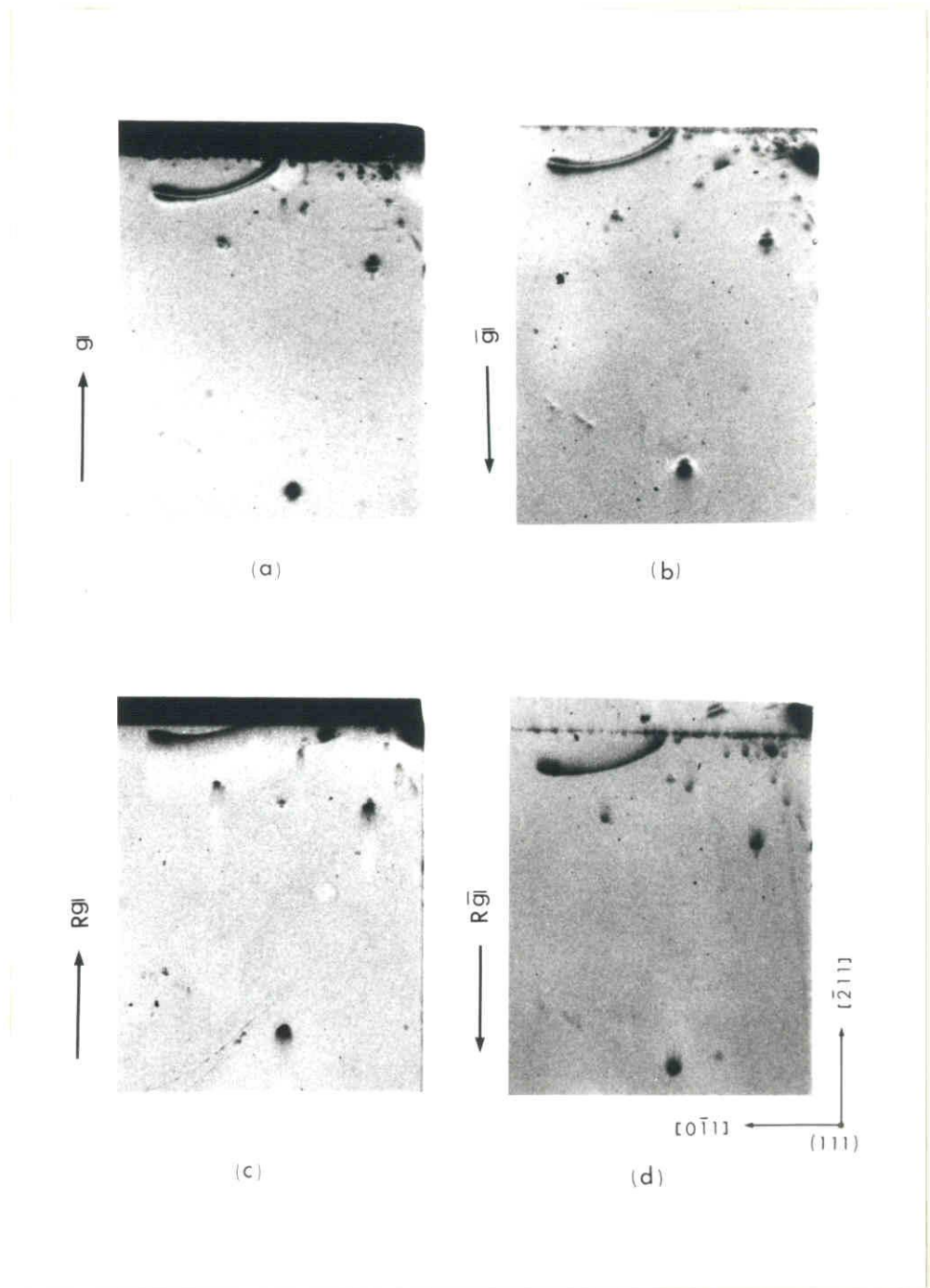
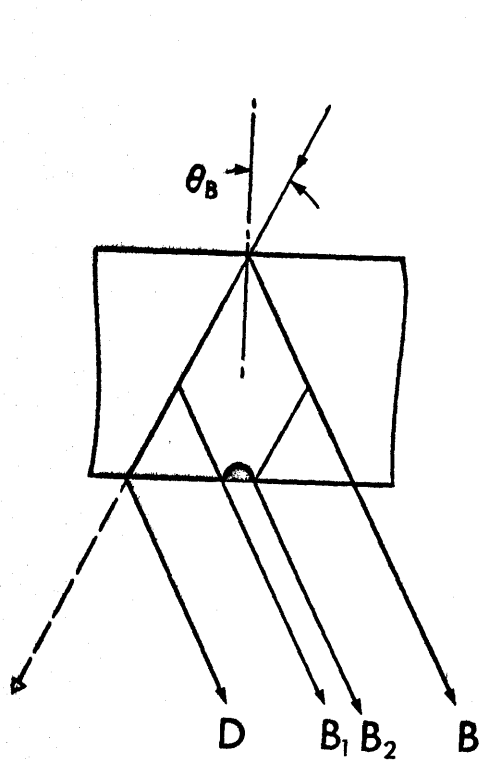
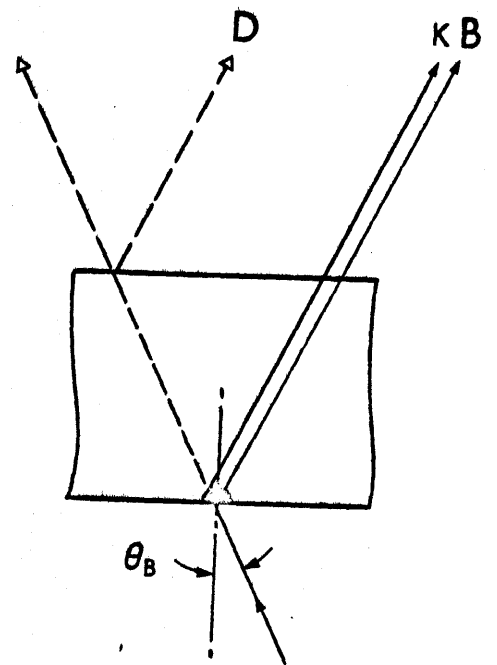


図 8. 8 Surface damage の像 (MoK α 線; 結晶 (e)).
 (a) $\bar{4}22$ 反射。 (b) $4\bar{2}\bar{2}$ 反射。
 (c) $R\bar{4}22$ 反射。 (d) $R4\bar{2}\bar{2}$ 反射。
 図 7. 11 (a), (b), (c) および (d) の拡大写真。



Standard
(a)



Reciprocal
(b)

図8.9 Surface damageによる回折像。(a) standard
な場合。B₁B₂の間に見られるのが dynamical image。
(b) reciprocal な場合。KBの間には kinematical
image, DKの間には dynamical image が見られる。

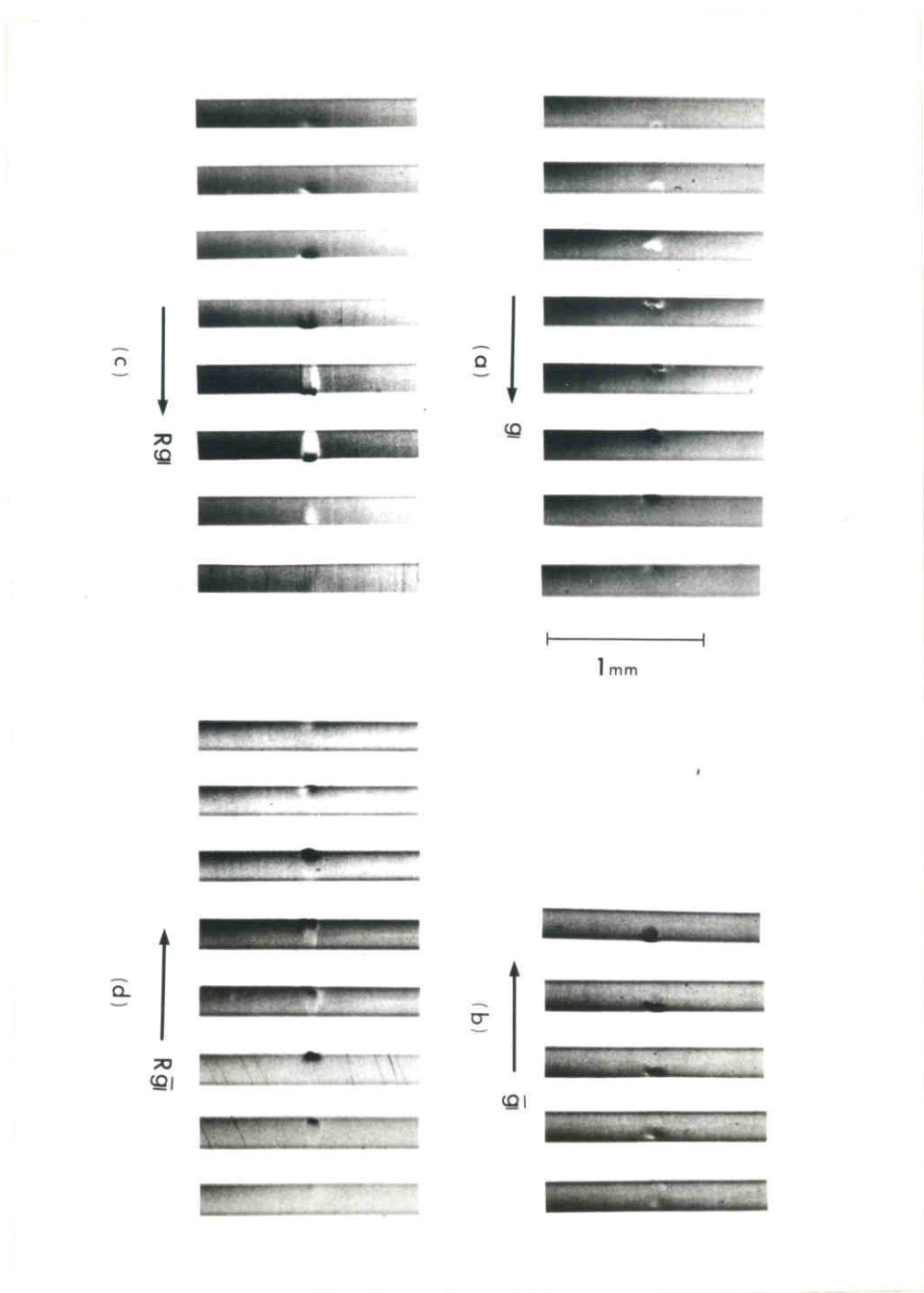


図 8.10 Section トポグラフにおける *Surface damage*
 の像 ($Ag K\alpha_1$ 線; 結晶 (e)). (a) 022 反射。
 (b) 022 反射。 (c) R022 反射。 (d) R022 反射。
 対応する *Transverse* トポグラフは図 8.7 に見られる。

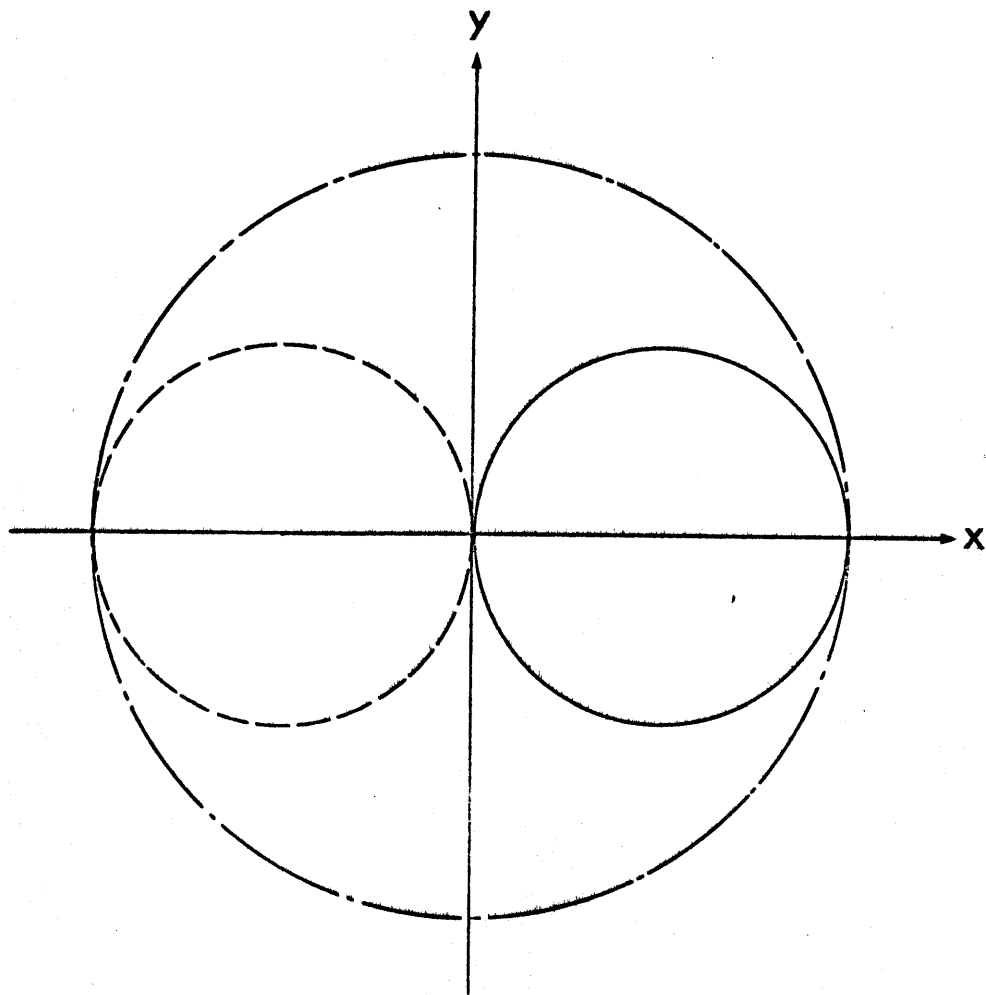


図 8.11 *Surface damage* のひずみ回配の分布のモデル。

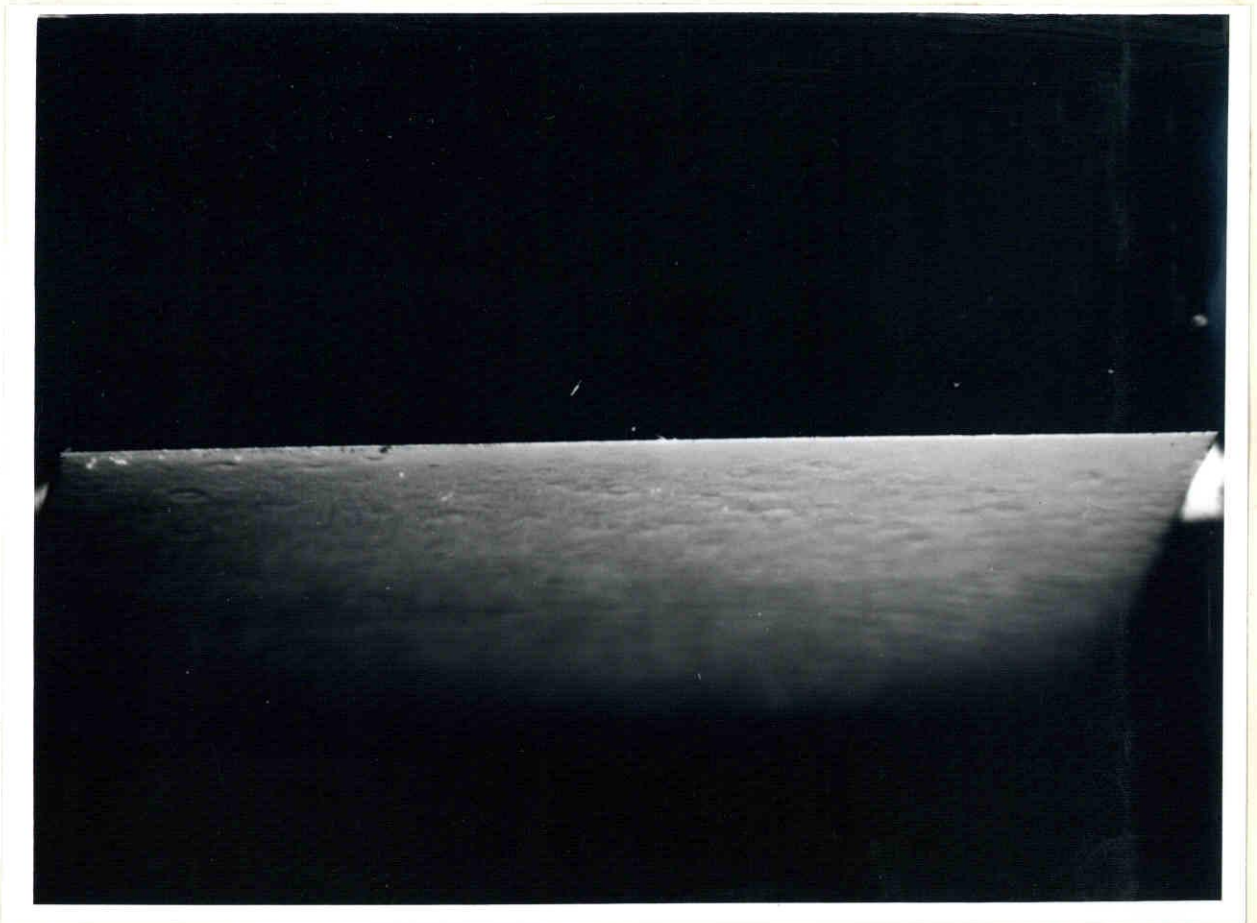
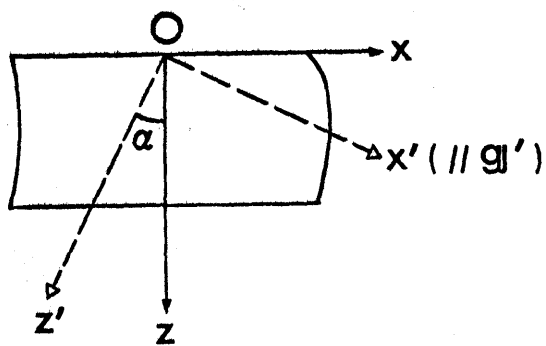
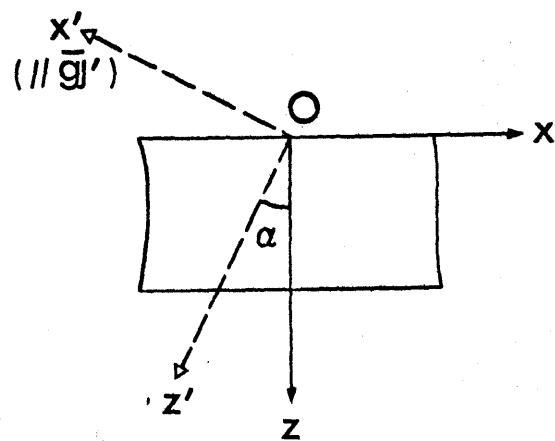


図8.12 結晶(e)の光学写真($\times 44$)。結晶表面にすれすれの反射光で観察しているため、ピントは一部分にしかあっていない。しかし、表面に存在する凹凸のコントラストは認められる。



(a)



(b)

図 8.13 対称 Lane case から決めた場合の座標の定義。