

報告番号 ※ 甲第 535 号

## 主論文の要旨

題名 弾性ひずみを持つ結晶  
におけるX線回折現象

氏名 安藤義則



D

# 弾性ひずみを持つ結晶におけるX線回折現象

## 論文要旨

完全結晶におけるX線回折現象は、現在では理論および実験の両面からほとんど完全に解明されている。しかし乱れた結晶の場合には、そのX線回折現象はまだ十分明らかにされているとは言い難い。最近になって、種々の理論的な取り扱い法が提案されたが、それらは多くの場合基本的な方法を述べるに留まり、具体的な問題に応用できる理論は少ない。その中では、PenningとPolderによって展開された幾何光学理論、およびそれを波動光学的な理論に発展させた加藤の理論は、比較的容易に実際の問題に適用できるものである。

一方、乱れた結晶による回折現象を実験的に明らかにしようとする試みもなされている。この目的には、完全結晶を人為的に変形させ、比較的よくわかったひずみ分布が存在するときの回折現象を調べるのが望ましい。また、X線回折現象に

おいては，結晶の厚さ，吸収の大きさ，ひずみ勾配の大きさあるいは反射ベクトルに対するひずみ勾配の符号などのいくつかの因子が関与する。しかしながら，これらの因子を系統的に考慮した実験はいままでほとんど行われていない。

以上の観測から，本研究においては，理論的には加藤の理論を基礎にして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，それと対比できるような実験を行い，理論および実験の両面から乱れた結晶におけるX線回折現象を明らかにすることを目的とした。なお，本論文は理論の部と実験の部とから構成される。

理論の部では，第一章でX線回折の動力学理論を要約して述べる。とくに，二波近似の場合を取り扱う。第二章で乱れた結晶に対する理論的取り扱いの基礎を述べる。加藤の理論に基づいて，*modified Bloch* 波を考え，*Fermat* の原理

を適用して軌道の方程式および位相の一般的な表式を求める。乱れた結晶における Borrmann 吸収の因子は、位相項の虚数部から計算される。また、適当な境界条件のもとに、回折トポグラフの強度を求める表式が得られる。

第二章で展開された一般論を、第三章で一様なひずみ勾配を持つ結晶に対して適用する。modified Bloch 波のエネルギー流の軌跡に沿ってその位相を計算し、完全結晶に見られる Pendellösung 縞が結晶ひずみによって変形されることが導かれる。Section および Traverse トポグラフの回折強度が、ひずみ勾配に比例する量、および吸収の大きさに比例する量をパラメータとして求められる。それらの回折強度は、ひずみ勾配の大きさおよびその符号によってかなり著しく異なることがわかる。この事によって、従来実験的に見い出されていた黒および白のコントラストが反射ベクトルの向きを逆転することによって逆転する現象、およ

び Friedel 則背反現象と呼ばれていた現象を説明することができる。また、吸収の大小に依存する回折強度の差異を指摘する。

第四章で、ひずみ勾配が場所の関数である場合の理論的取り扱いについて述べる。ひずみ勾配の場所変化がそれほど大きくなく、かつ特定の方向に存在する場合には、一様なひずみ勾配からのはずれの量を摂動と考えて計算することができる。その結果、ひずみ勾配が一様な場合との相違が明らかにされた。

実験の部では、第五章で、実験条件に対応して、動径圧縮を加えた円板および正方形板のひずみ勾配の分布を、等方性物体に対する弾性論に基づいて求める。実験に用いた  $\text{Si}$  単結晶の弾性定数の異方性についても考察する。第六章で、試料作成法、実験装置およびその操作法などについて述べる。第七章で、X線回折トポグラフ法による実験

結果をいくつかの特徴的な項目に分けて述べる。波長およびひずみ勾配の大きさと黒および白のコントラストとの関係、乱れによる *Pendellösung* 縞の変化、結晶の対称性とトポグラフの間の関係などが実験的に明らかにされる。最後に第八章で、理論結果を考慮して上述の実験結果に対する考察を加える。

本研究では、上述の吸収、ひずみ勾配の大きさおよびその符号などの要因を系統的に考慮して実験を行った。黒および白のコントラスト、*Pendellösung* 縞などに関する実験結果は、理論の部で述べられた結果と半定量的に一致することが確かめられた。黒および白のコントラストが現われる現象 (*Friedel* 則背反) は、従来の現象論的な考え方によれば次のように説明できることが明らかにされた。すなわち、結晶が完全結晶からはずれることによって *Borrmann* の異常透過が減少して

回折強度が弱まる要因と、いわゆる消衰効果が減少して回折強度が増大する要因とのかねあいで生じる。

異なった方位の試料結晶を用いて、乱れによる回折トポグラフの結晶方位依存性が調べられた。その結果、二つの特定の結晶方位の場合に限り、異方性を考慮しない弾性論（第五章）から期待されるものと類似の回折トポグラフが得られた。しかしいずれの場合にも、回折トポグラフは結晶の持つ対称性を反映していることが明らかにされた。このことは、回折トポグラフを理解するにあたり、弾性定数の異方性を考慮すべきであることを意味する。また、Sectionトポグラフの中心に関する強度の非対称性からひずみ勾配の場所的变化が推定できることが示された。その他、回折現象として非常に興味のある二つの現象が実験的に明らかにされた。

本研究は、比較的簡単な弾性ひずみを持つ結晶  
に対する回折現象の基本的問題を考察したもので  
あるが、その結果は人工結晶や、自然界に産する  
結晶に見られる転位、不純物による成長稿、結晶  
粒界に存在する弾性ひずみなどの格子ひずみをX  
線トポグラフ法によって調べる際に適用すること  
ができる。