

実験と計算機シミュレーションによる 3,4,5,6,8,12波ケースのピンホールトポグラフ

沖津康平¹, 今井康彦², 依田芳卓², 石綿元^{3,4}

¹東大工, ²JASRI, ³総研大, ⁴統数研

$$\frac{\partial}{\partial s_i} D_i^{(l)}(\mathbf{r}) = -i\pi K \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{m=0}^1 \chi_{h_i - h_j} \exp[i2\pi(\mathbf{h}_i - \mathbf{h}_j) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})] C_{i,j}^{(l,m)} D_j^{(m)}(\mathbf{r}),$$

where $i, j \in \{0, 1 \dots n-1\}$, $l, m \in \{0, 1\}$, $n \in \{2, 3, 4, 5, 6, 8, 12\}$.

\mathbf{r} : 位置ベクトル,

\mathbf{s}_i : i 番目の波の伝播方向の単位ベクトル,

$\mathbf{e}_i^{(0)}, \mathbf{e}_i^{(1)}$: \mathbf{s}_i に垂直な単位ベクトル,

($\mathbf{s}_i, \mathbf{e}_i^{(0)}, \mathbf{e}_i^{(1)}$ は, この順に右手系をなす),

\mathbf{h} : 反射ベクトル,

$\frac{\partial}{\partial s_i}$: i 番目の波の \mathbf{s}_i 方向の微分,

$D_i^{(l)}$: i 番目の波, l 偏光の振幅,

K : 波数($1/\lambda$),

$\beta^{(0)}, \beta^{(1)}$: $\mathbf{e}_0^{(0)}, \mathbf{e}_0^{(1)}$ 方向への反射条件のズレ角,

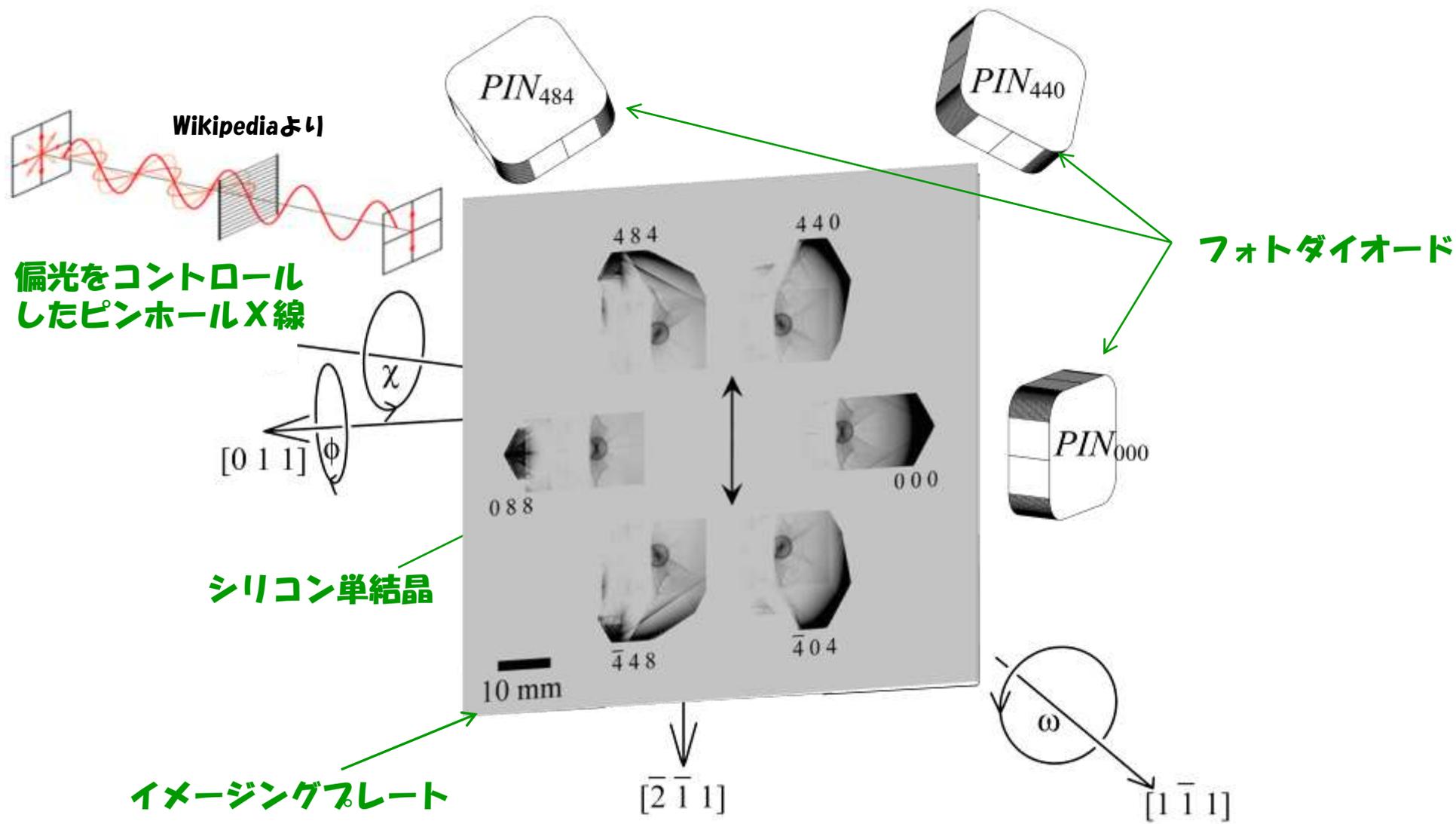
S, C : 偏光因子;

$$\mathbf{e}_j^{(m)} = S_{i,j}^{(m)} \mathbf{s}_i + C_{i,j}^{(0,m)} \mathbf{e}_i^{(0)} + C_{i,j}^{(1,m)} \mathbf{e}_i^{(1)},$$

χ_h : 電気分極率の \mathbf{h} 次のフーリエ係数

\mathbf{u} : 格子変位ベクトル.

X線ピンホールトポグラフィの撮り方

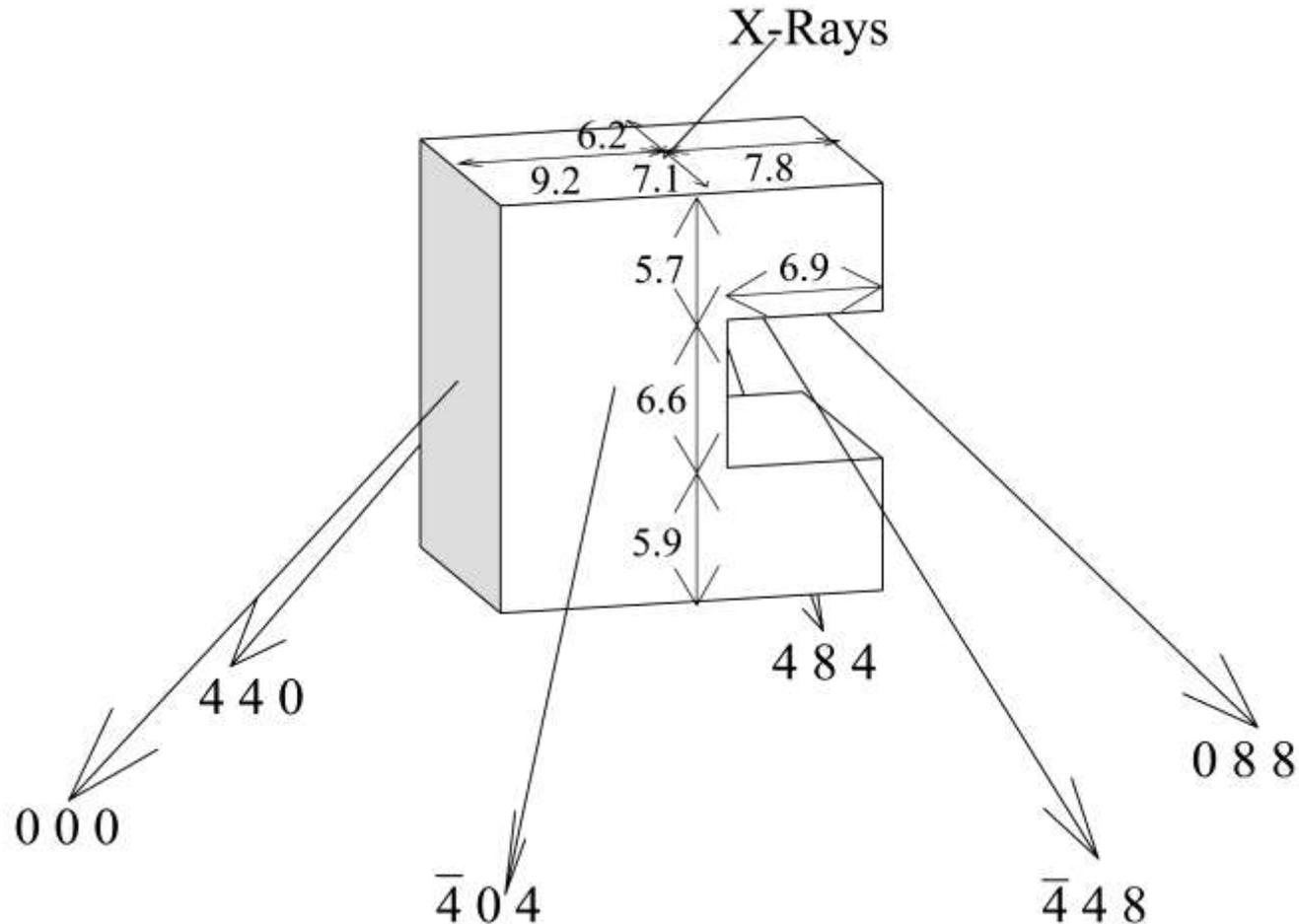


3波ケース, 4波ケース, 5波ケース, **6波ケース**, 8波ケース, 12波ケース

6波ケース

チャンネルカット結晶の形

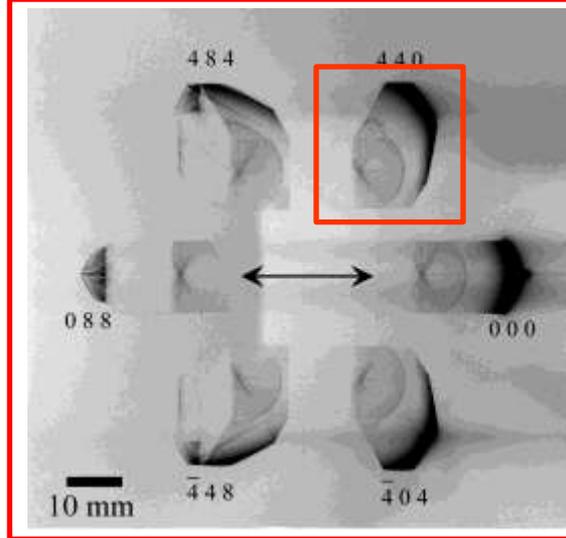
(新理論とその数値解法が、複雑な形状の結晶に対応することを示すため、あえて複雑な形の結晶を使った)



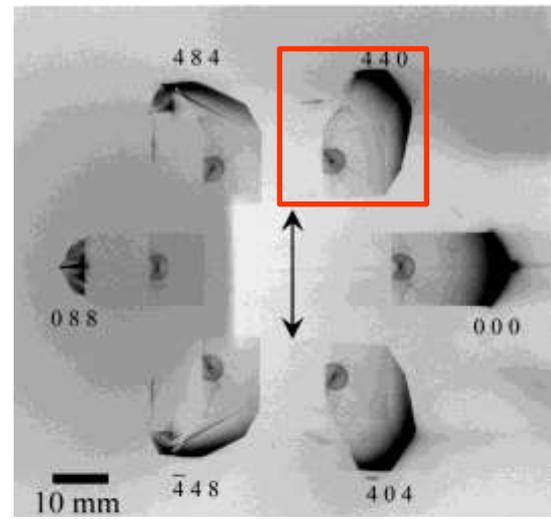
結晶のX線回折写真とコンピューターシミュレーション

6波ケース チャンネルカット結晶 (18.475keV)

よこ偏光

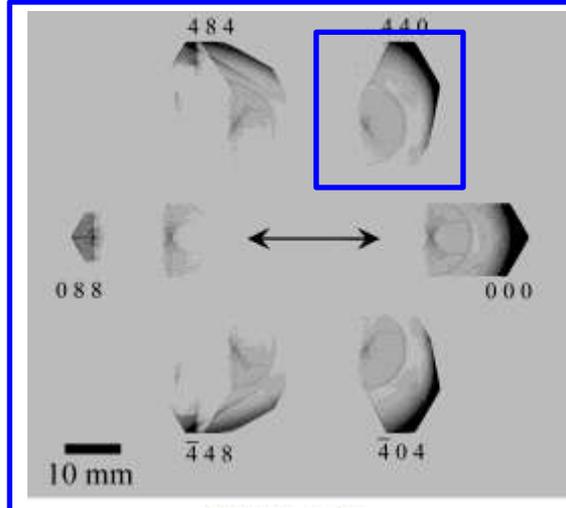


たて偏光

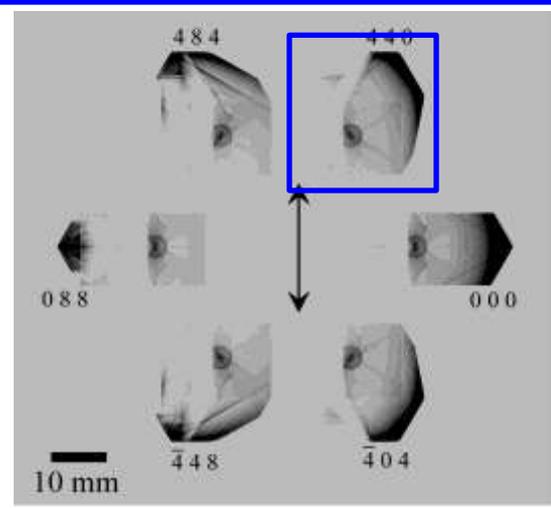


実際に撮影したX線回折写真 著者 (沖津), 今井, 依田 撮影

よこ偏光



たて偏光

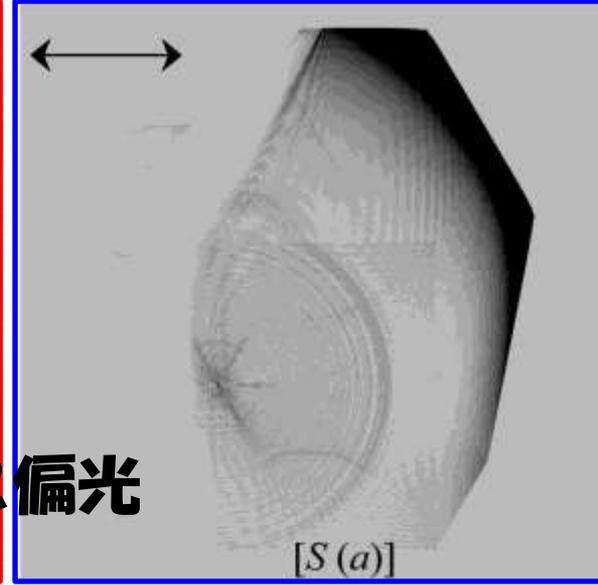
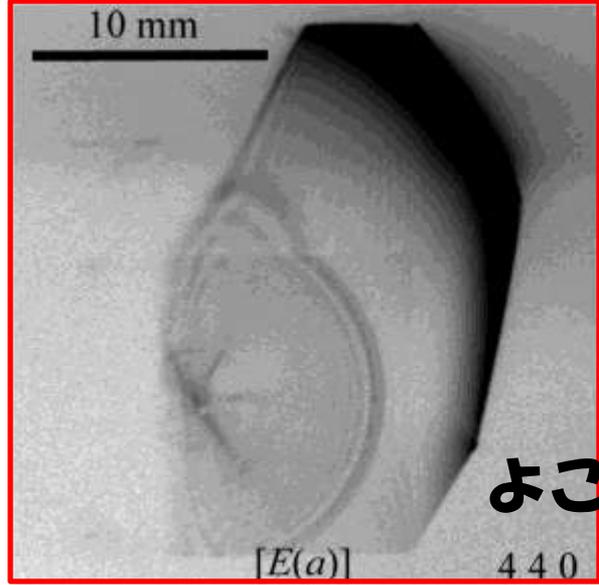


コンピューターで計算した写真 著者による

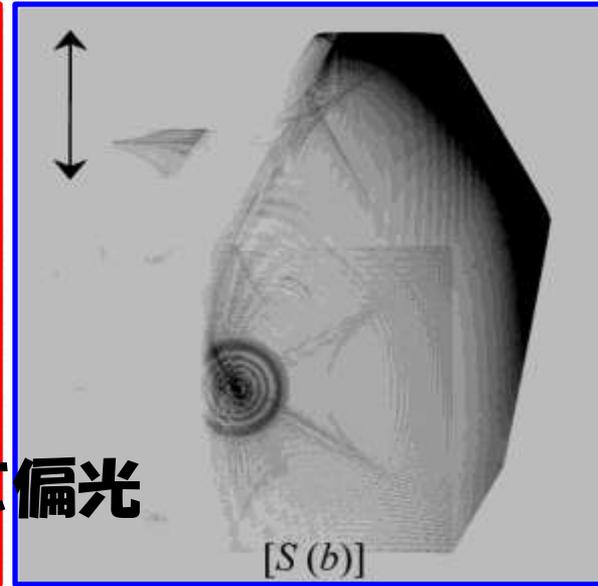
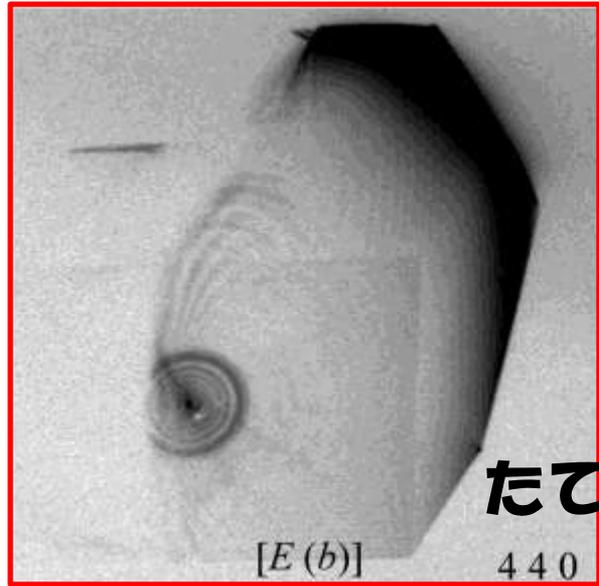
結晶のX線回折写真とコンピューターシミュレーション

6波ケース チャンネルカット結晶 (拡大)

実際に撮影したX線写真



よこ偏光

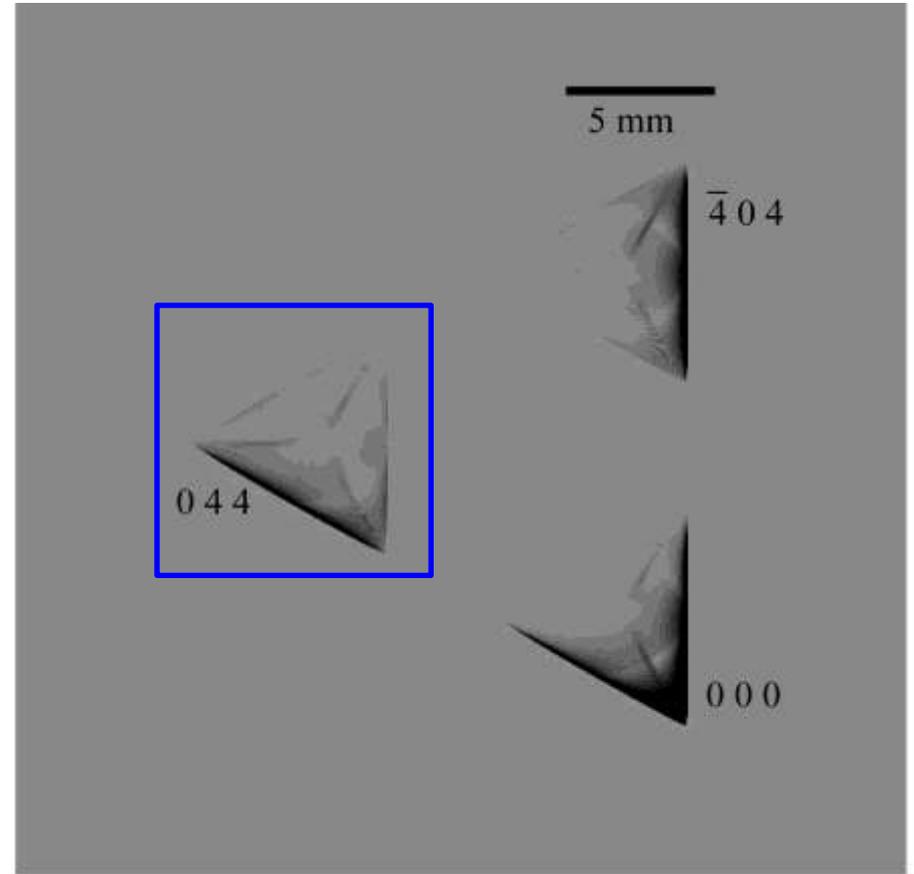
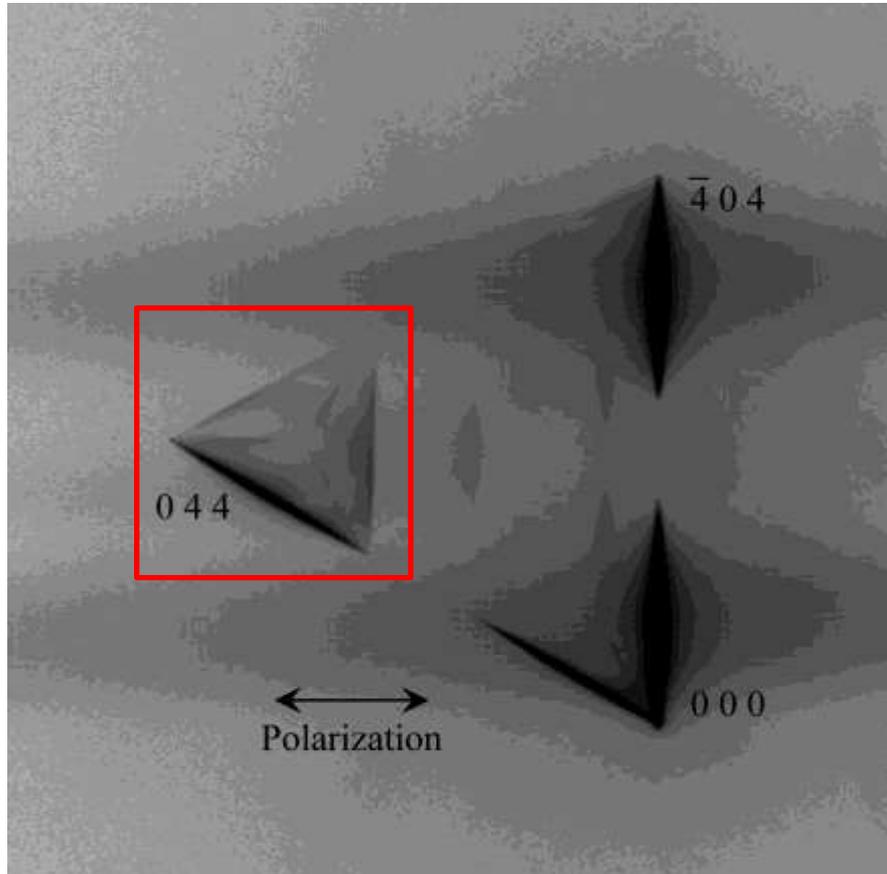


たて偏光

コンピューターで計算した写真

結晶のX線回折写真とコンピューターシミュレーション

3波ケース (18.245keV)



実際に撮影したX線写真

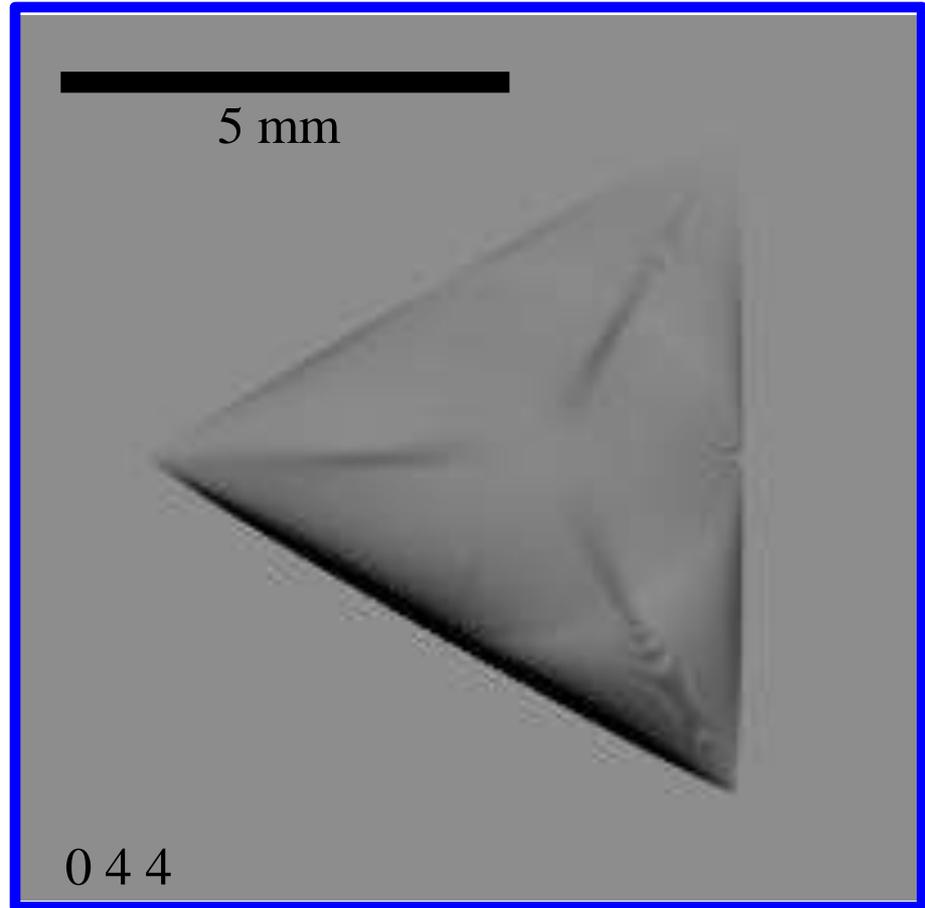
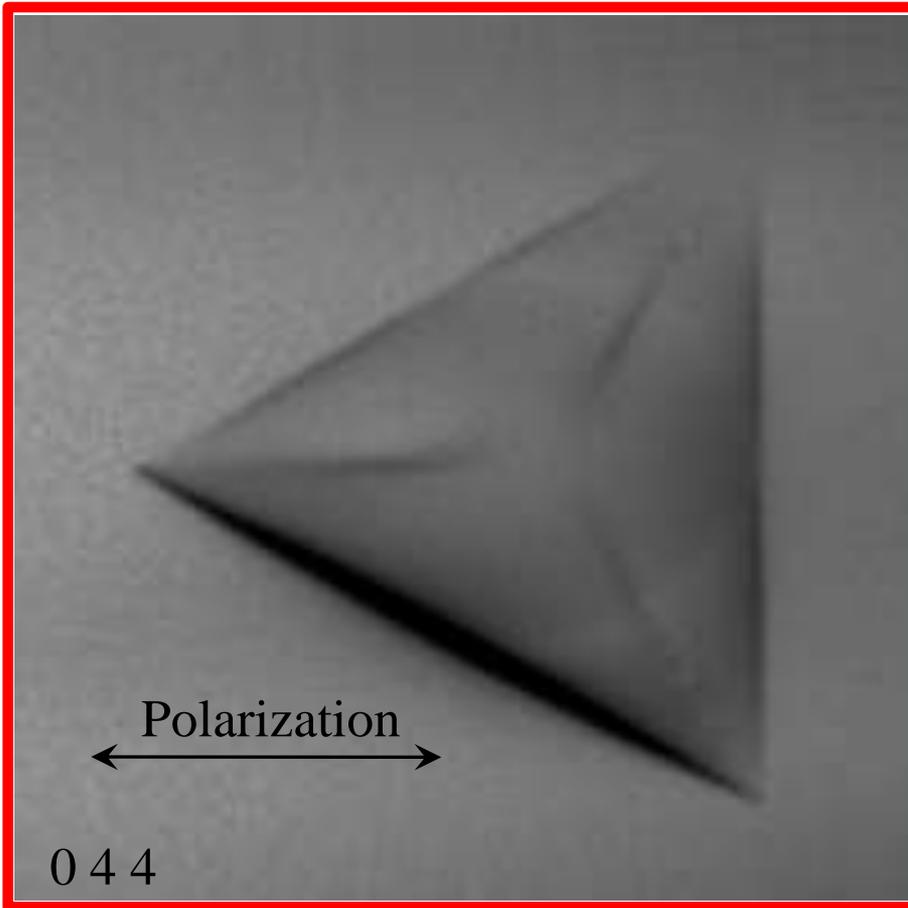
著者 (沖津), 石綿, 今井, 依田 撮影
SPring-8 BL09XU にて

コンピューターで計算した写真

著者による
Hitachi SR-11000スーパーコンピュータにて

結晶のX線回折写真とコンピューターシミュレーション

3波ケース (拡大)



実際に撮影したX線写真

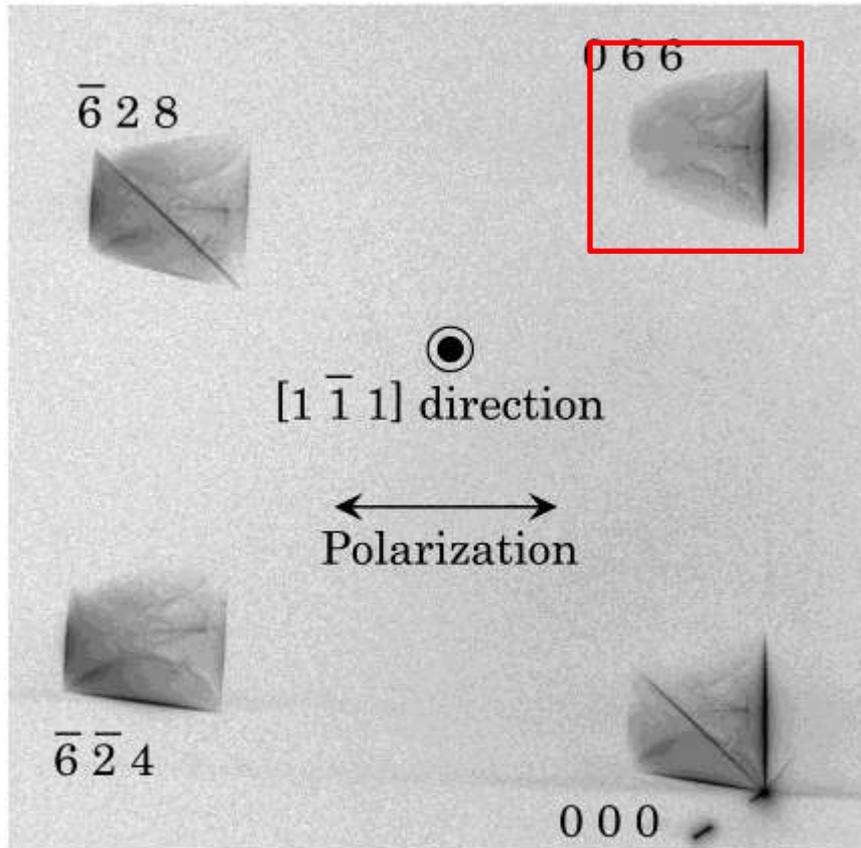
著者 (沖津), 石綿, 今井, 依田 撮影
SPring-8 BL09XU にて

コンピューターで計算した写真

著者による
Hitachi SR-11000スーパーコンピュータにて

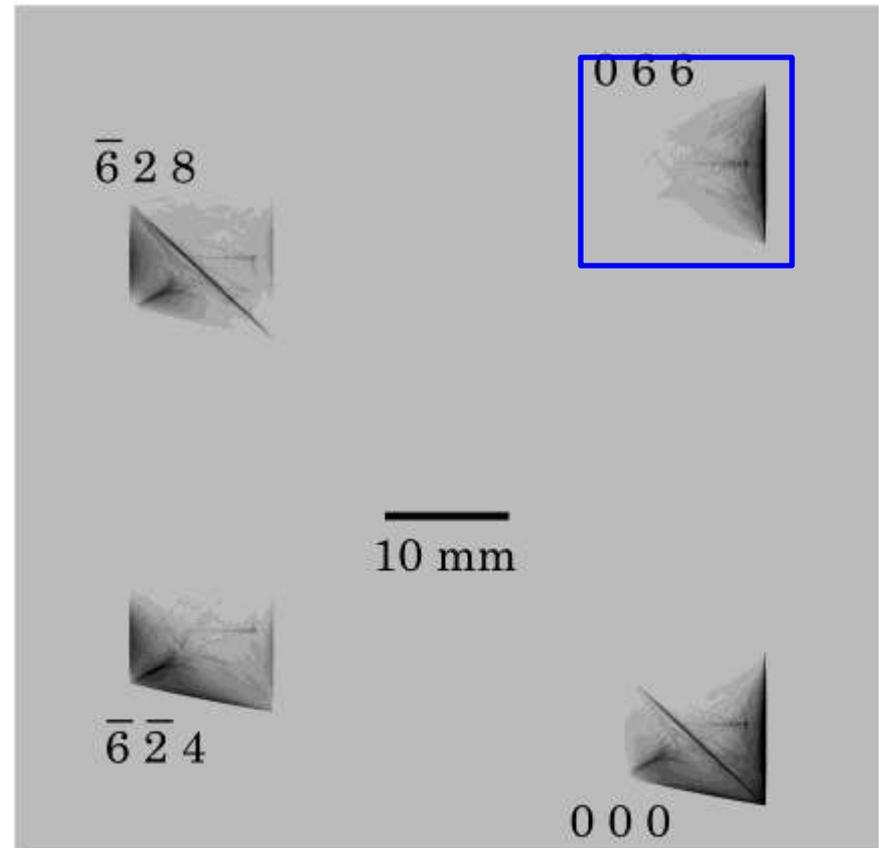
結晶のX線回折写真とコンピューターシミュレーション

4波ケース (18.245keV)



実際に撮影したX線写真

著者 (沖津), 今井, 依田 撮影
Spring-8 BL09XU にて

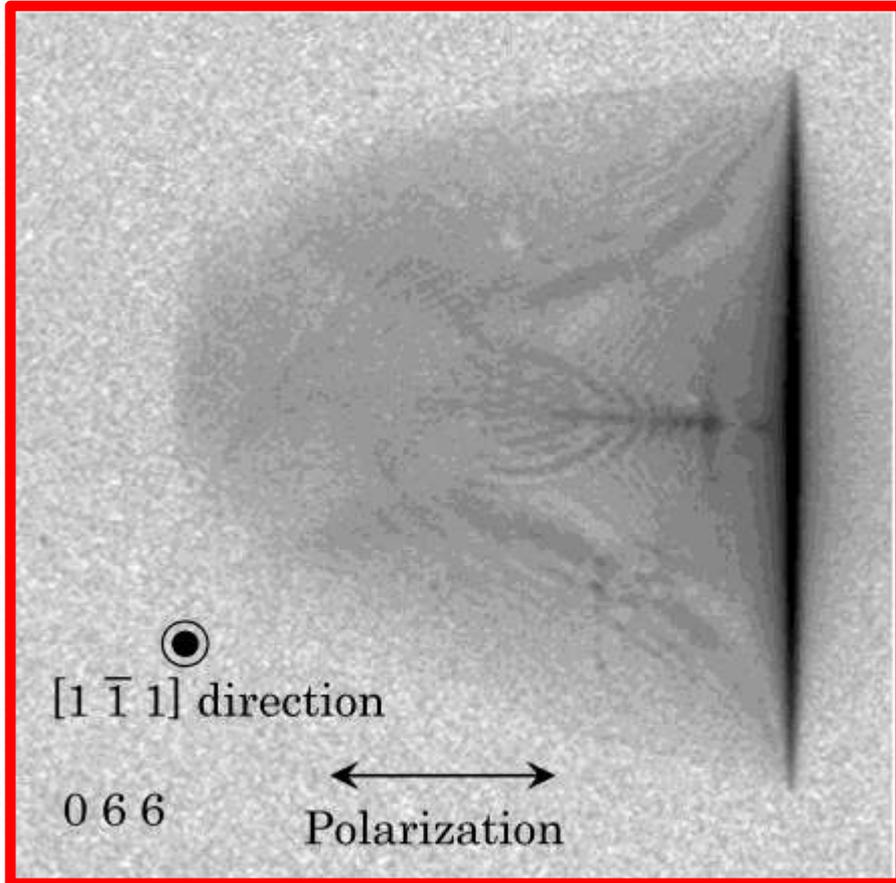


コンピューターで計算した写真

著者による
Hitachi SR-11000スーパーコンピュータにて

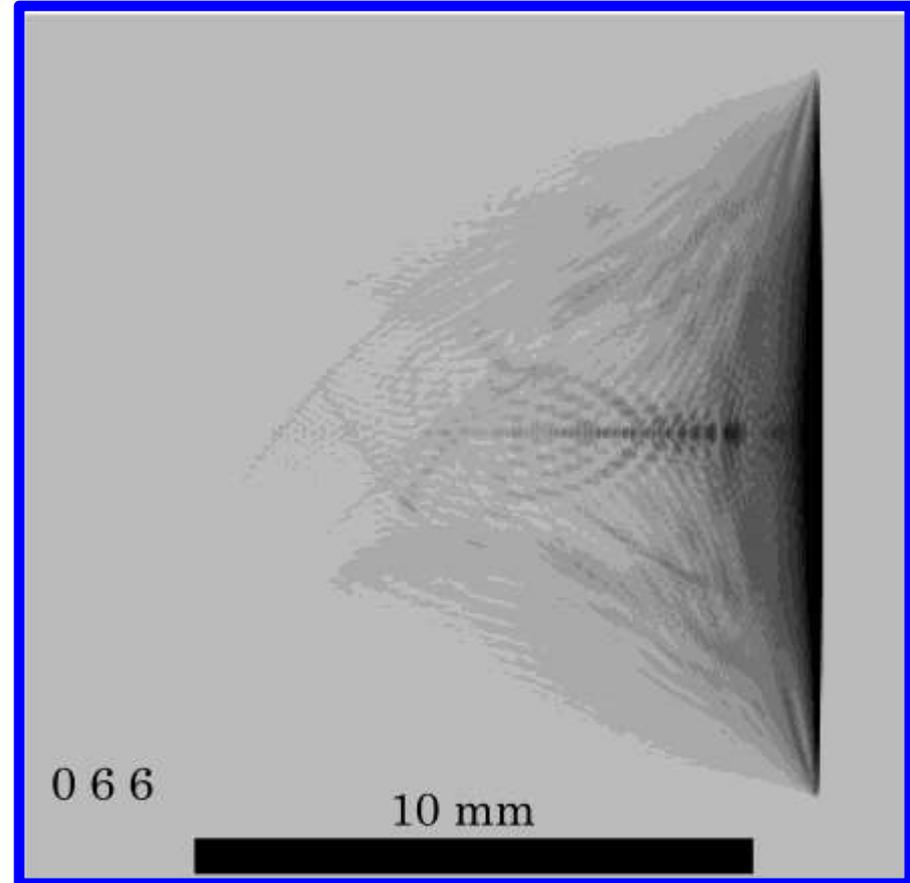
結晶のX線回折写真とコンピューターシミュレーション

4波ケース (拡大)



実際に撮影したX線写真

著者 (沖津), 今井, 依田 撮影
SPring-8 BL09XU にて

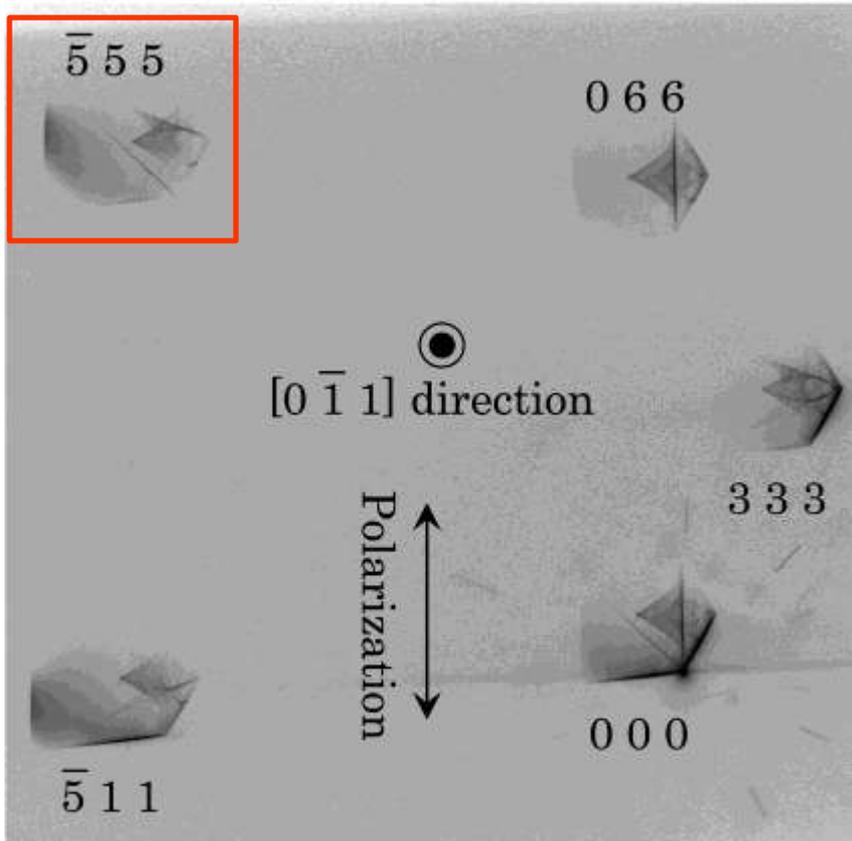


コンピューターで計算した写真

著者による
Hitachi SR-11000スーパーコンピュータにて

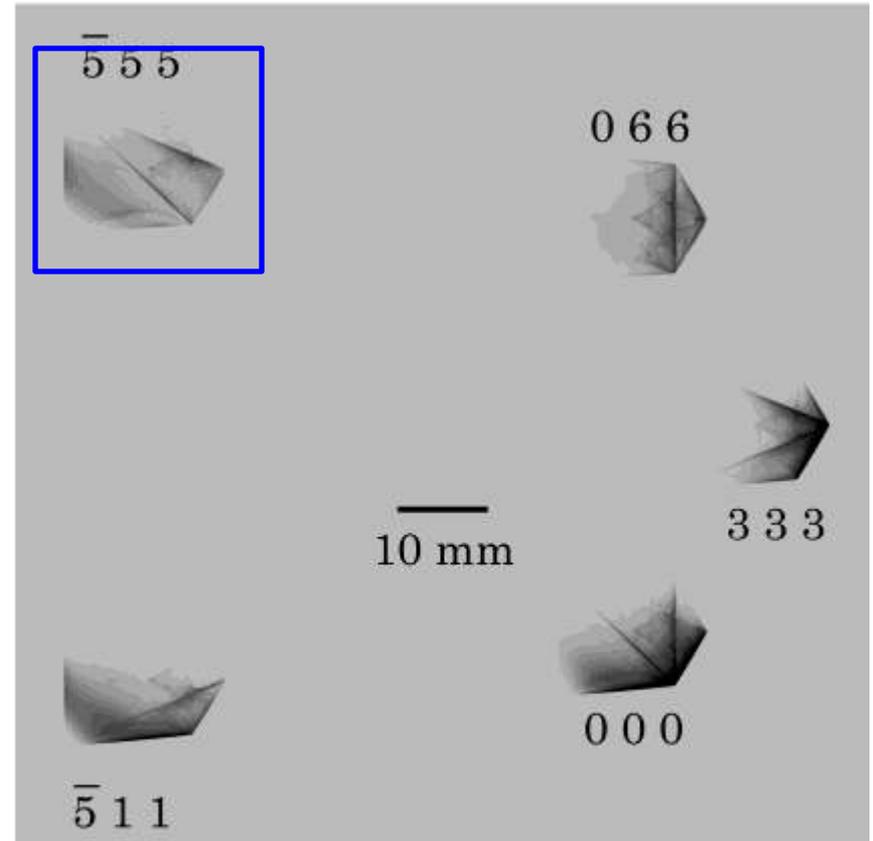
結晶のX線回折写真とコンピューターシミュレーション

5波ケース (18.245keV)



実際に撮影したX線写真

著者 (沖津), 今井, 依田 撮影
Spring-8 BL09XU にて

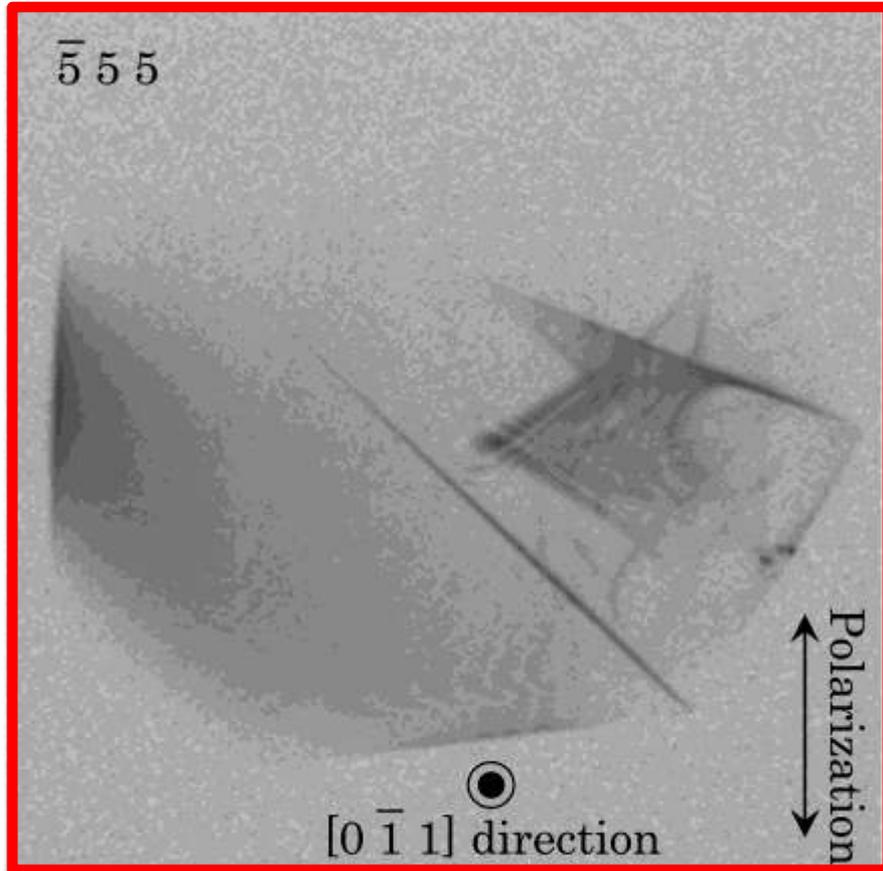


コンピューターで計算した写真

著者による
Hitachi SR-11000スーパーコンピュータにて

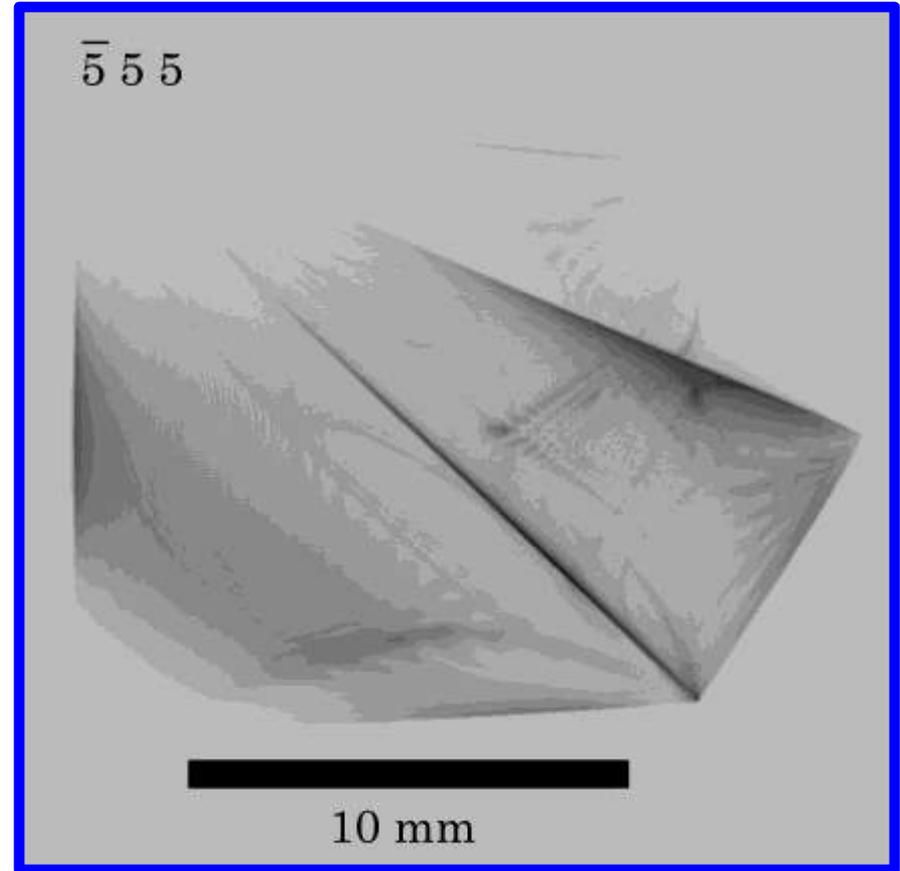
結晶のX線回折写真とコンピューターシミュレーション

5波ケース (拡大)



実際に撮影したX線写真

著者 (沖津), 今井, 依田 撮影
Spring-8 BL09XU にて

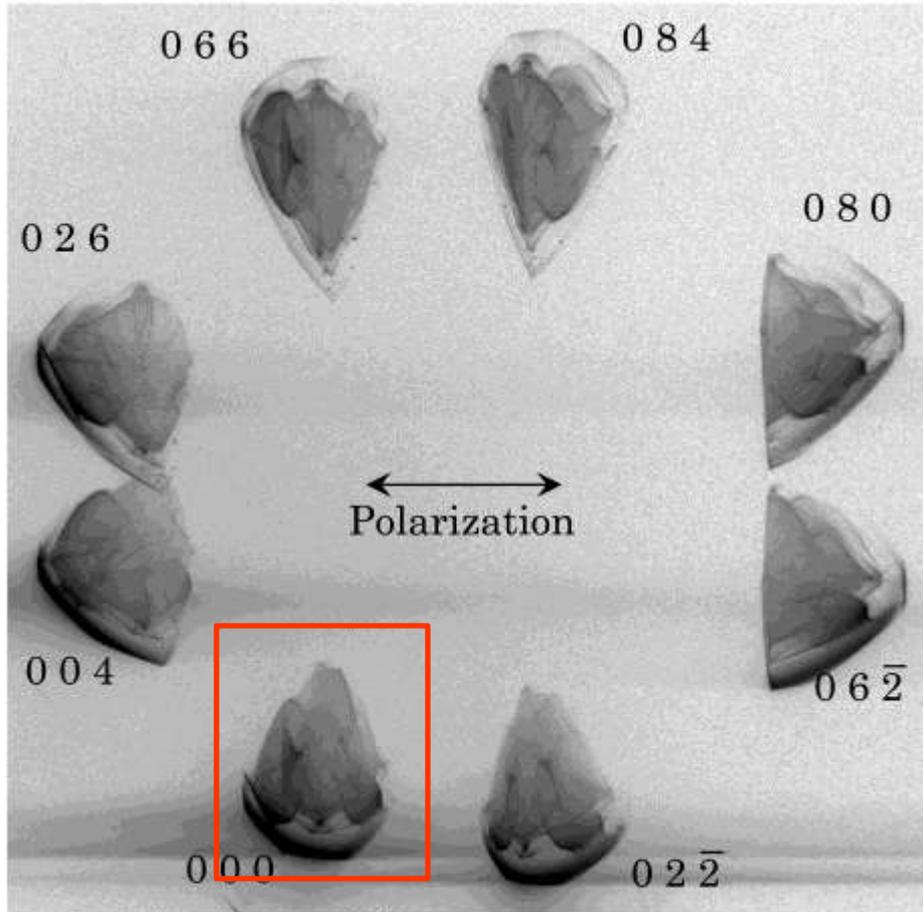


コンピューターで計算した写真

著者による
Hitachi SR-11000スーパーコンピュータにて

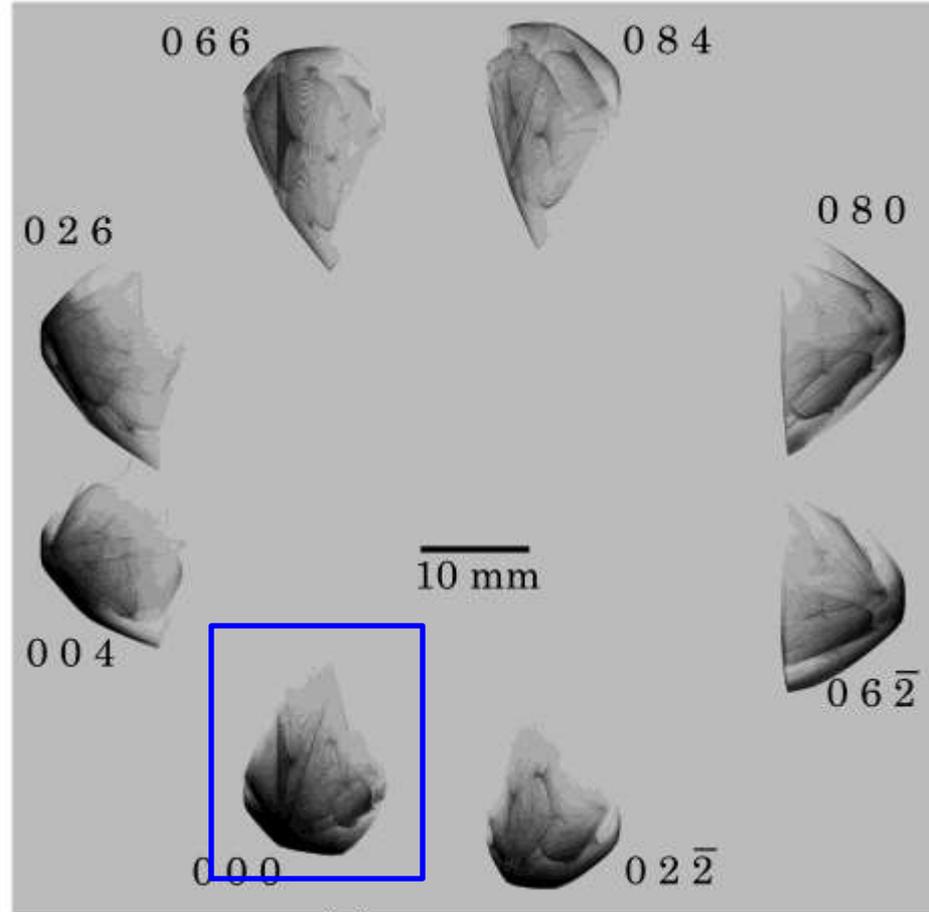
結晶のX線回折写真とコンピューターシミュレーション

8波ケース (18.245keV)



実際に撮影したX線写真

著者 (沖津), 今井, 依田 撮影
Spring-8 BL09XU にて

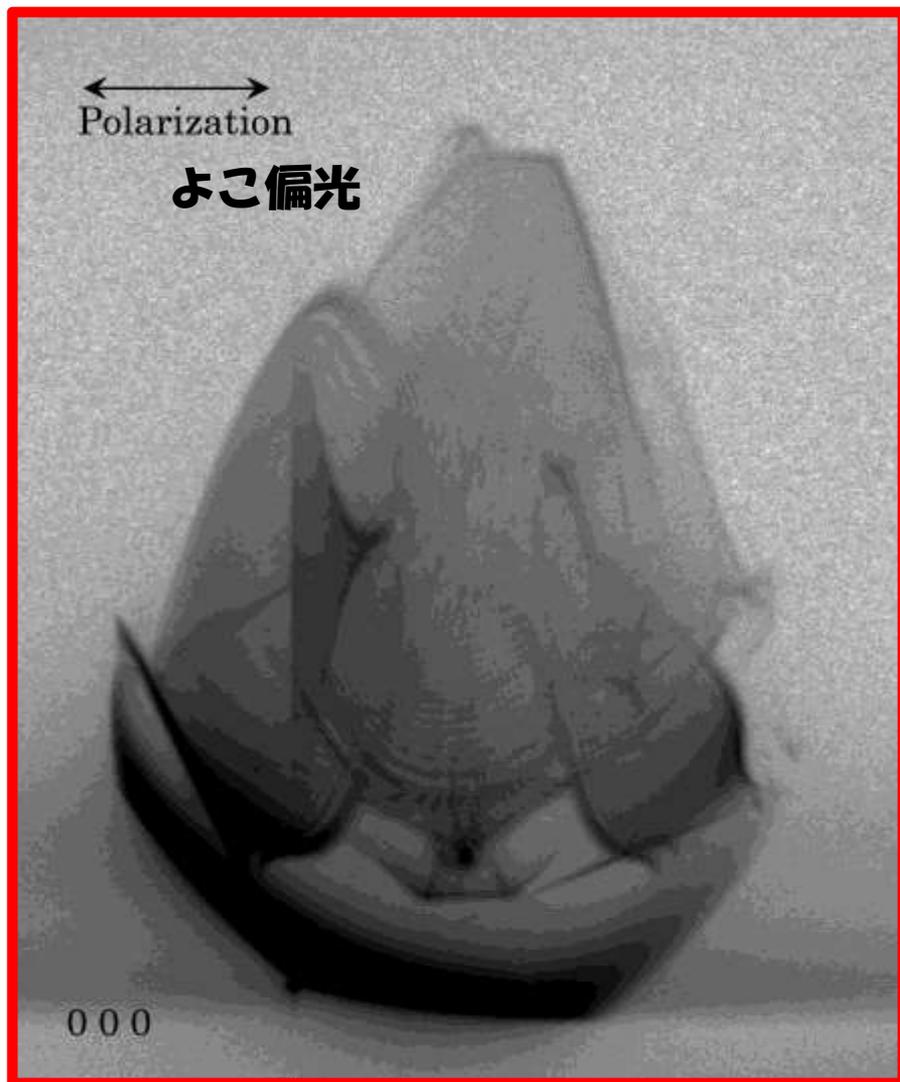


コンピューターで計算した写真

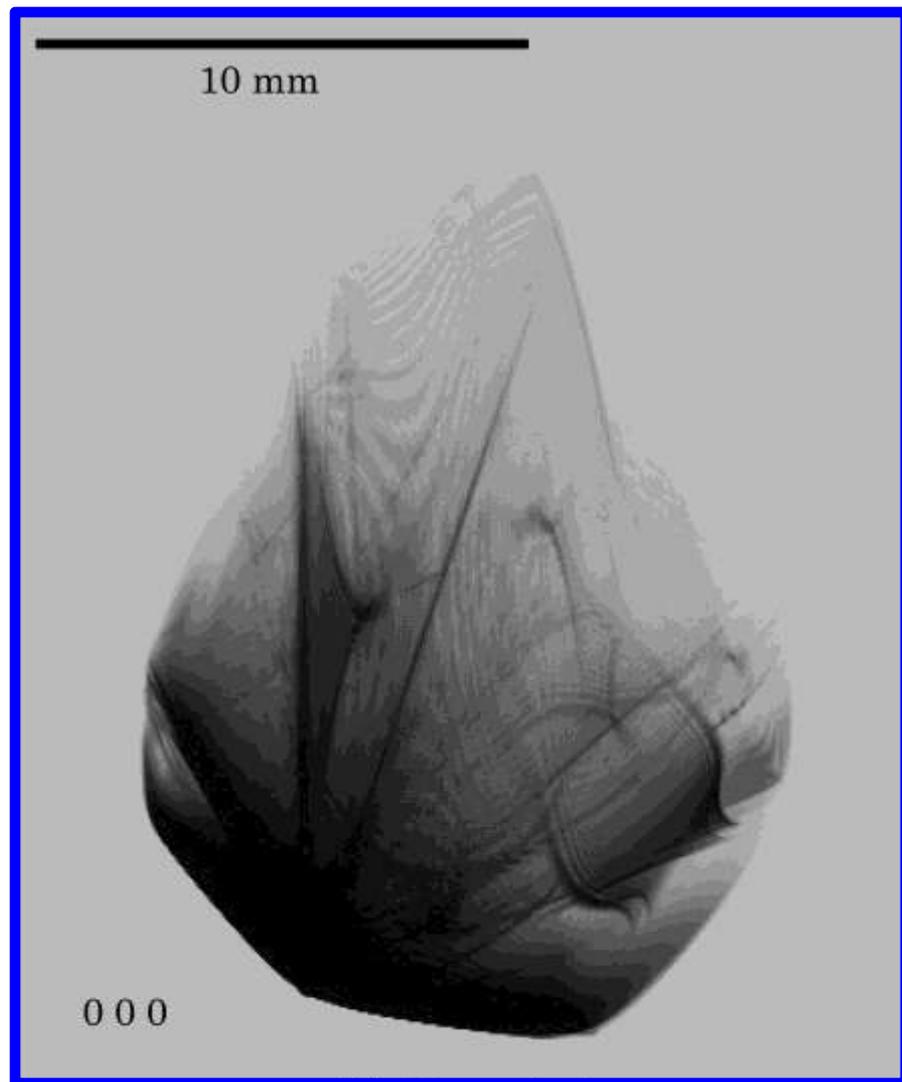
著者による
Hitachi SR-11000スーパーコンピュータにて

結晶のX線回折写真とコンピューターシミュレーション

8波ケース (拡大)



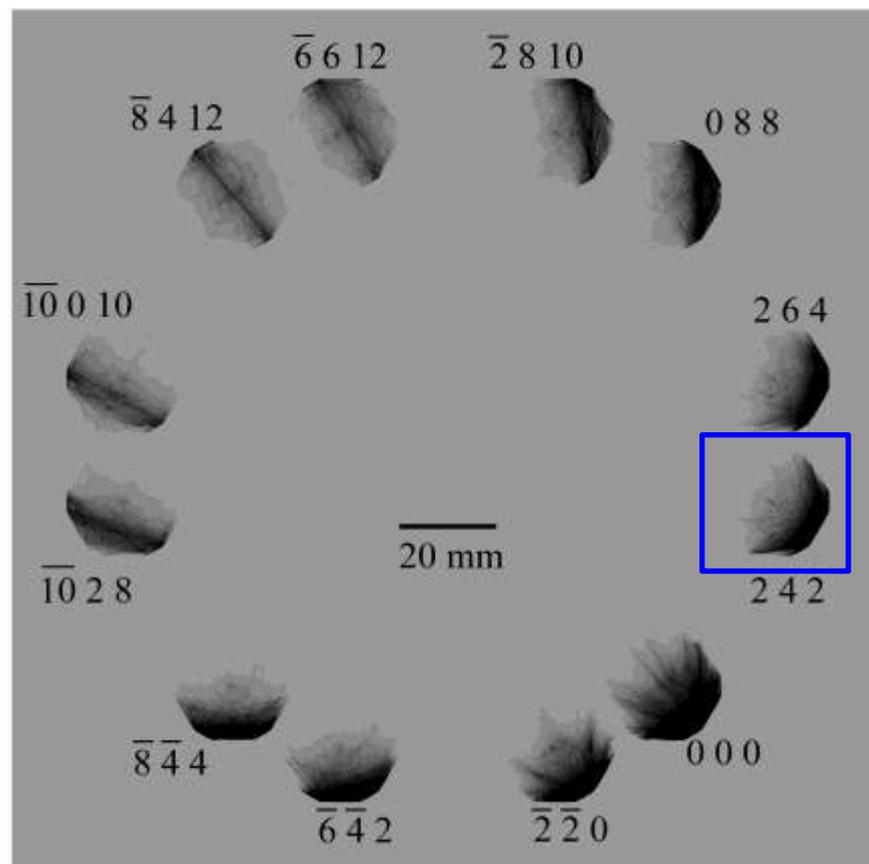
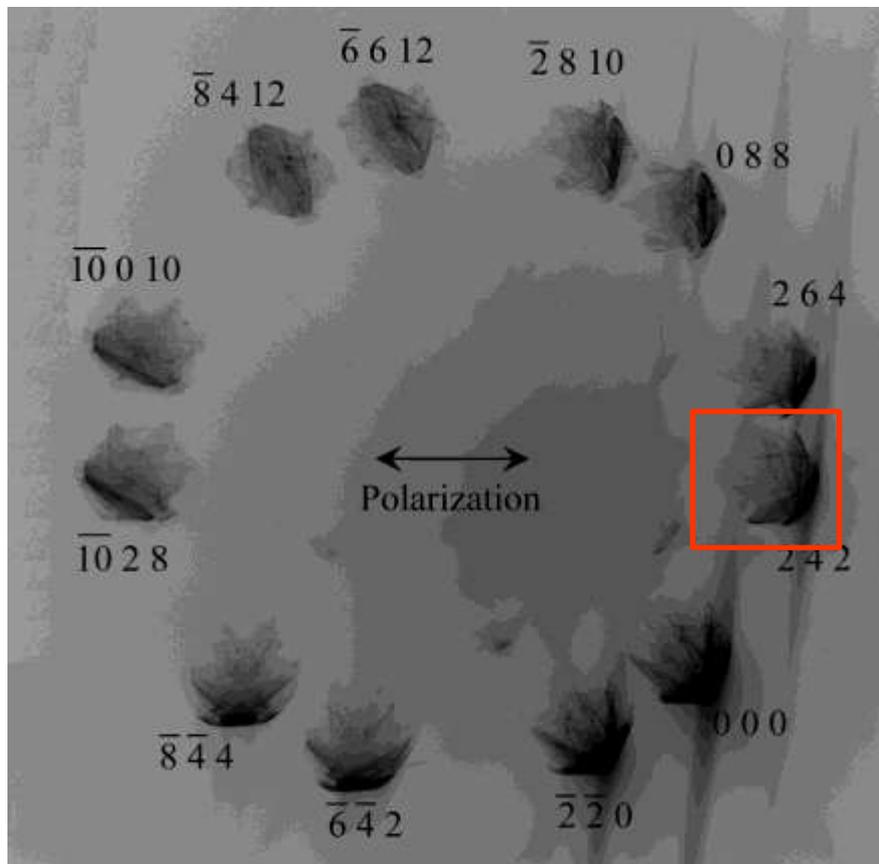
実際に撮影したX線写真



コンピューターで計算した写真

結晶のX線写真とコンピューターシミュレーション

12波ケース (22.0keV)



実際に撮影したX線写真

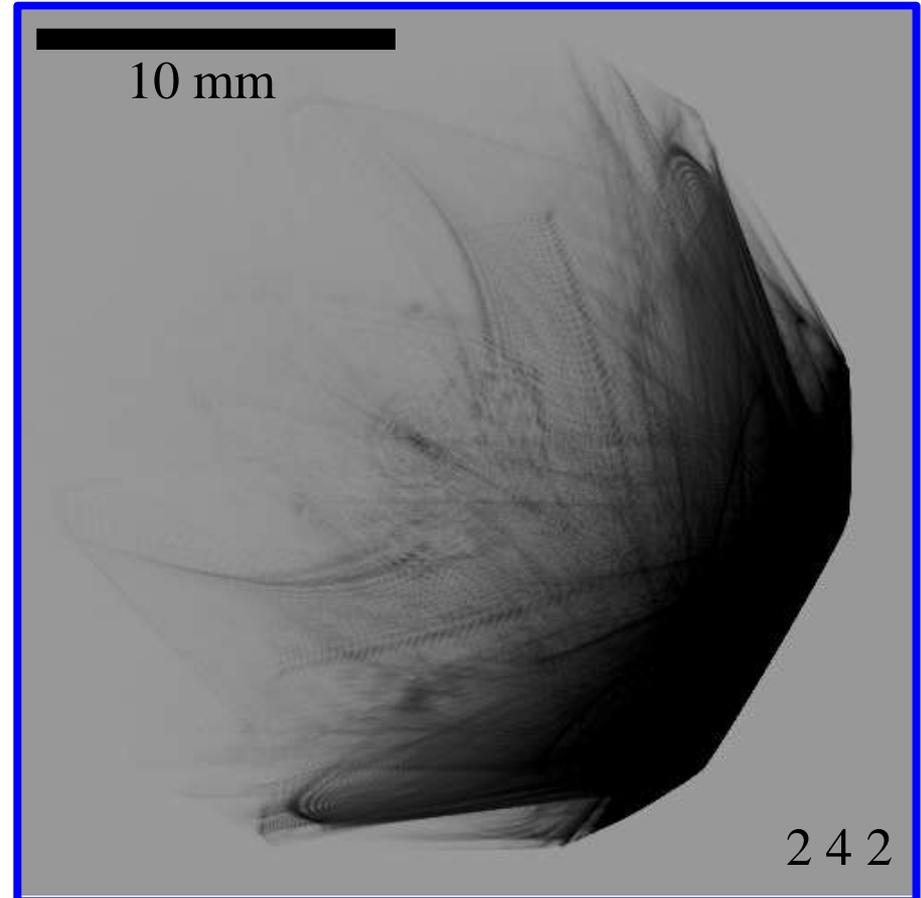
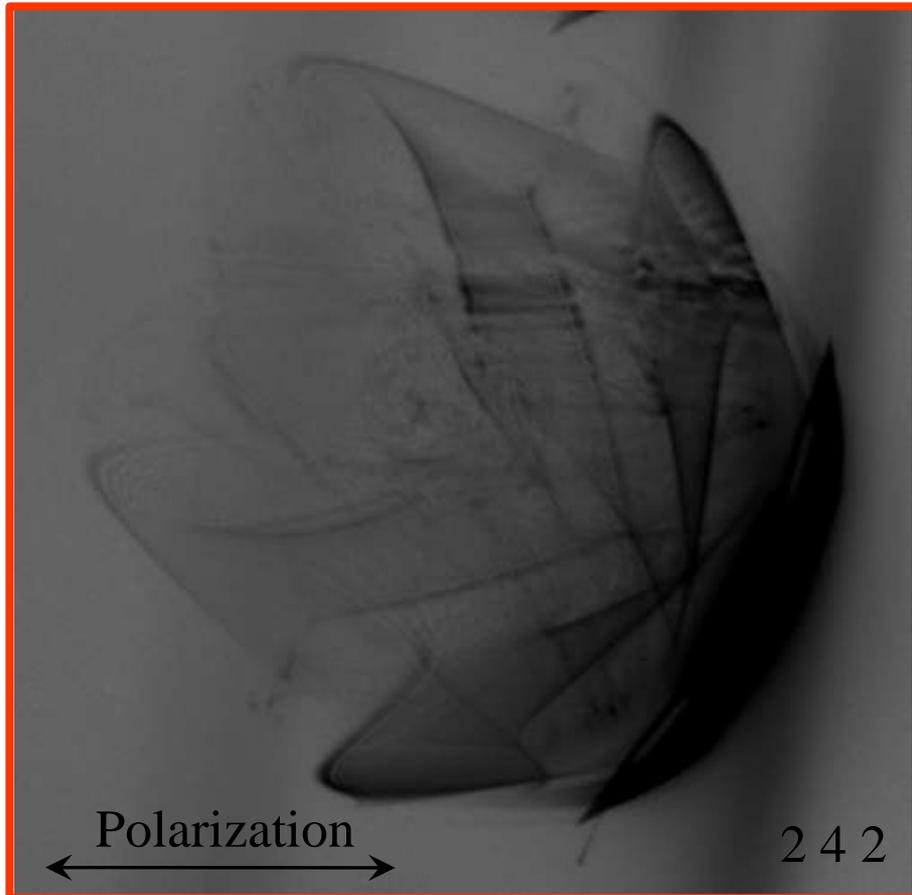
著者 (沖津), 石綿, 今井, 依田 撮影
SPring-8 BL09XU にて

コンピューターで計算した写真

著者による
Hitachi SR-11000スーパーコンピュータにて

結晶のX線回折写真とコンピューターシミュレーション

12波ケース (拡大)



実際に撮影したX線写真

著者 (沖津), 石綿, 今井, 依田 撮影
SPring-8 BL09XU にて

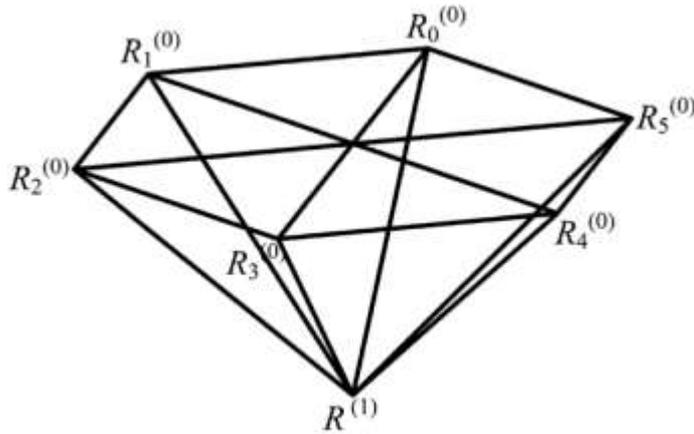
コンピューターで計算した写真

著者による
Hitachi SR-11000スーパーコンピュータにて

まとめ

$$\frac{\partial}{\partial s_i} D_i^{(l)}(\mathbf{r}) = -i\pi K \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{m=0}^1 \chi_{h_i-h_j} \exp[i2\pi(\mathbf{h}_i - \mathbf{h}_j) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})] C_{i,j}^{(l,m)} D_j^{(m)}(\mathbf{r}),$$

where $i, j \in \{0, 1 \dots n-1\}$, $l, m \in \{0, 1\}$, $n \in \{2, 3, 4, 5, 6, 8, 12\}$.



$$\begin{aligned} & \frac{D_i^{(l)}(R^{(1)}) - D_i^{(l)}(R_i^{(0)})}{|\overrightarrow{R_i^{(0)} R^{(1)}}|} \\ &= -i\pi K \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{m=0}^1 \left\{ \chi_{h_i-h_j} \exp[i2\pi(\mathbf{h}_i - \mathbf{h}_j) \cdot \mathbf{u}(Rm_i)] \right. \\ & \quad \left. \times C_{i,j}^{(l,m)} \frac{D_j^{(m)}(R_i^{(0)}) + D_j^{(m)}(R^{(1)})}{2} \right\}. \end{aligned}$$

理論と数値計算法の正しさが確かめられた