

# 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<sup>1</sup>, 今井康彦<sup>2</sup>, 依田芳卓<sup>2</sup>, 石綿元<sup>3,4</sup>

<sup>1</sup>東大工, <sup>2</sup>JASRI, <sup>3</sup>総研大, <sup>4</sup>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,

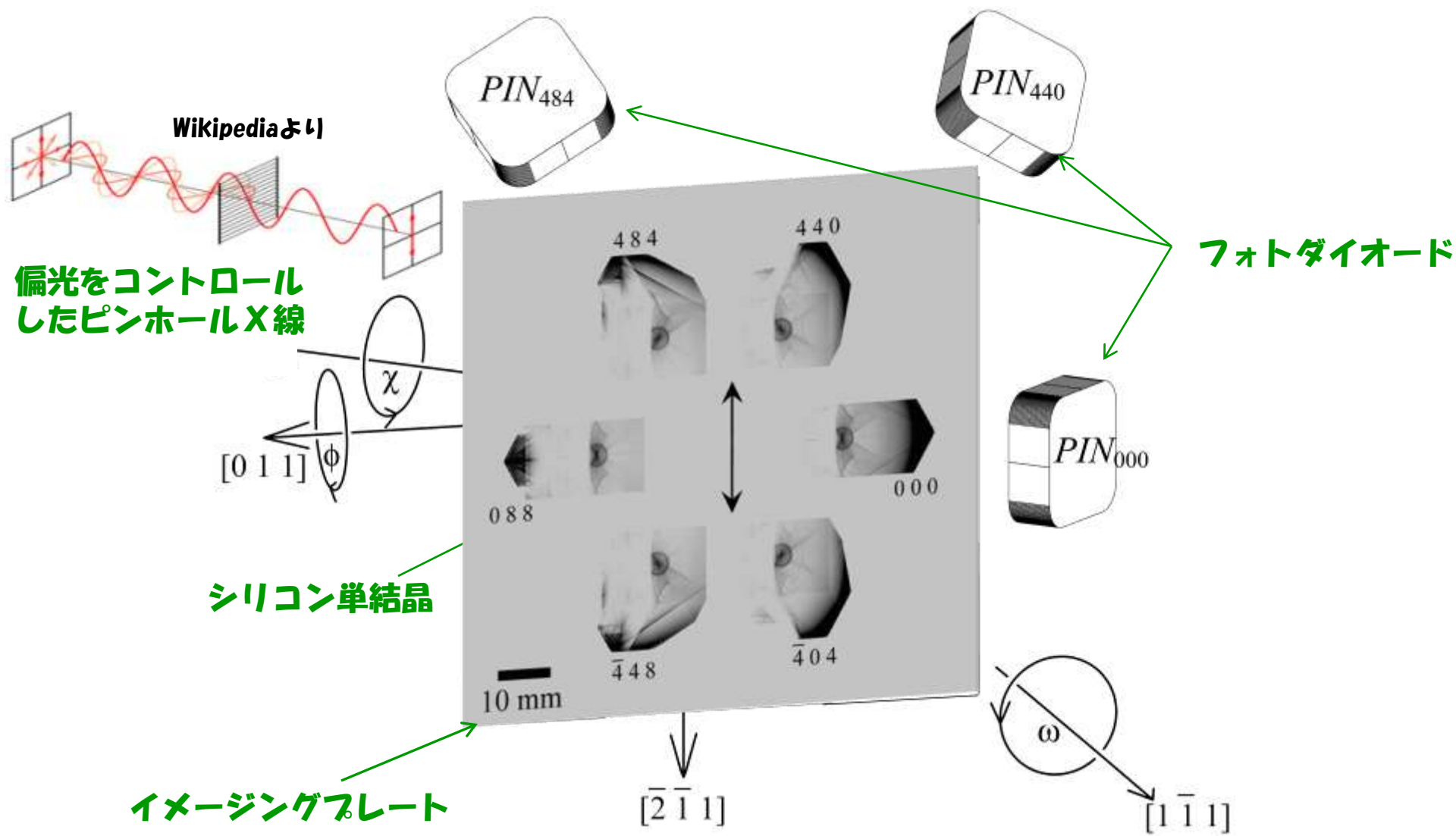
$S, C$ : 偏光因子;

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

$\chi_h$ : 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

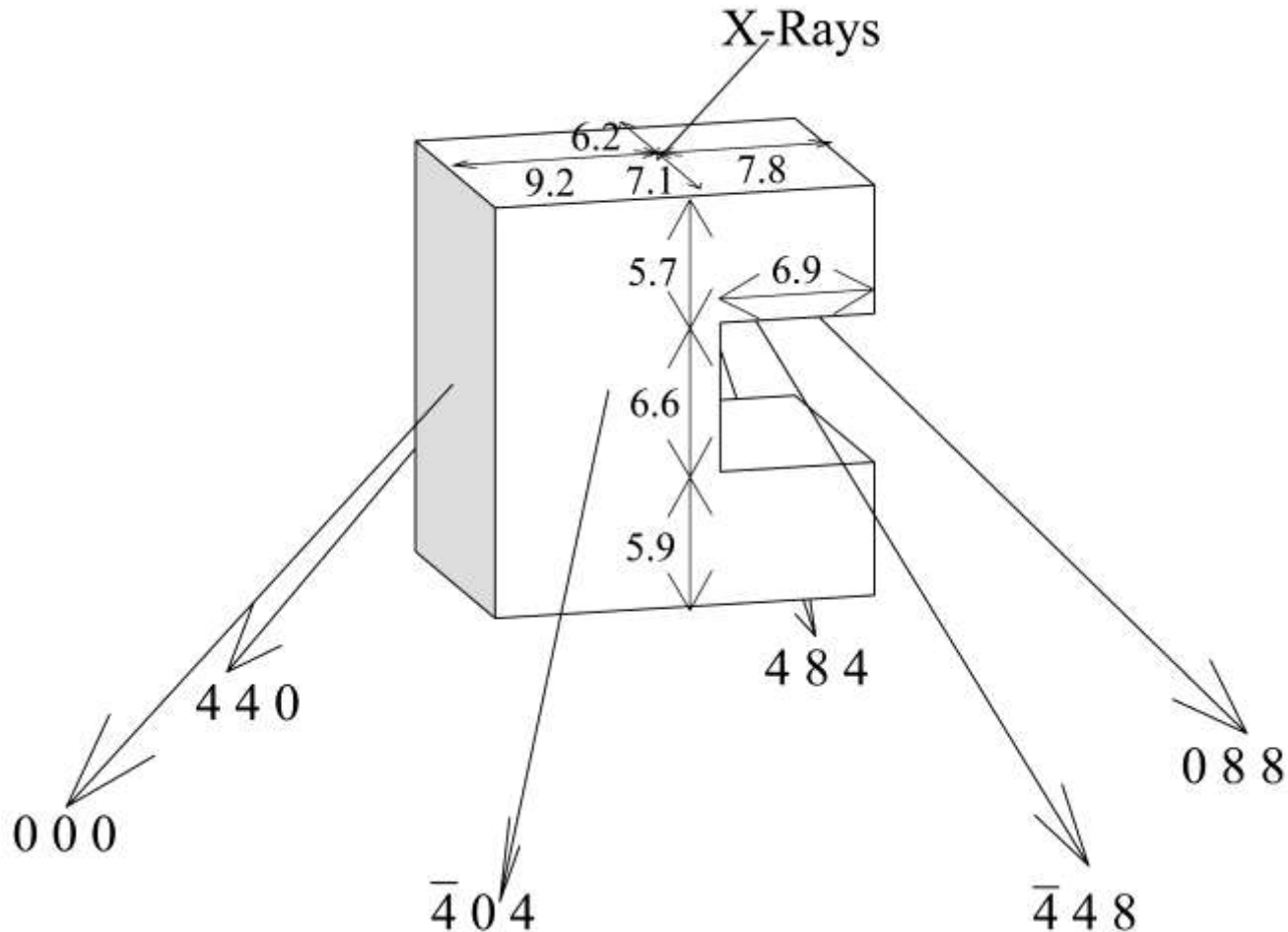


3波ケース, 4波ケース, 5波ケース, **6波ケース**, 8波ケース, 12波ケース

# 6波ケース

## チャンネルカット結晶の形

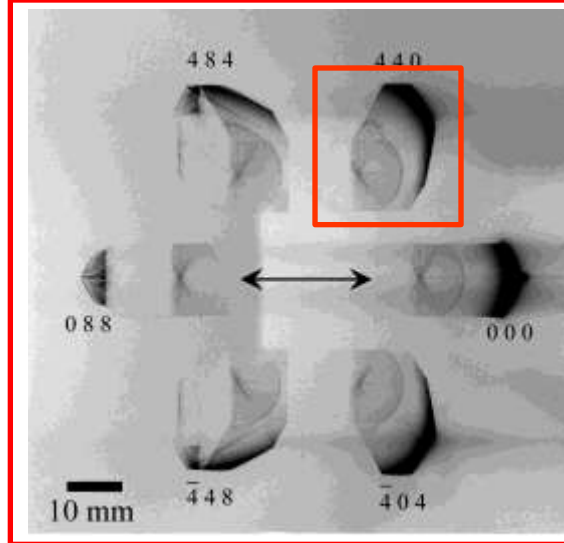
(新理論とその数値解法が、複雑な形状の結晶に対応することを示すため、あえて複雑な形の結晶を使った)



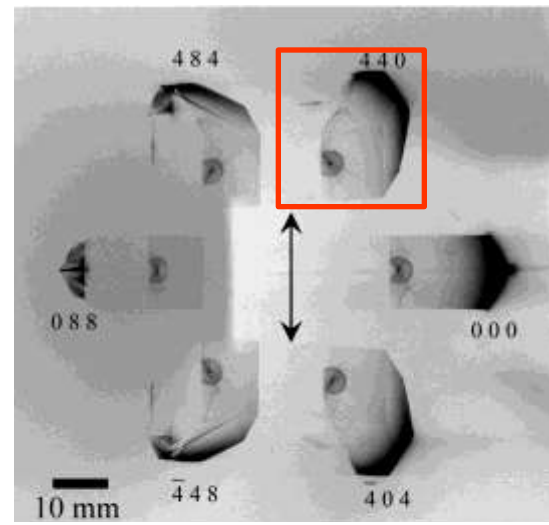
# 結晶のX線回折写真とコンピューターシミュレーション

## 6波ケース チャンネルカット結晶 (18.475keV)

よこ偏光

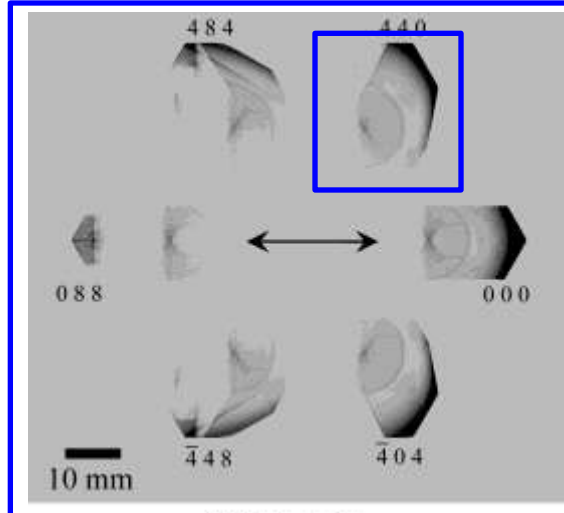


たて偏光

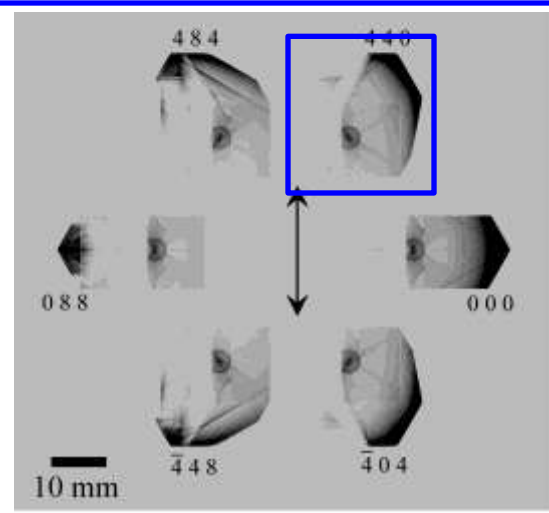


## 実際に撮影したX線回折写真 著者 (沖津), 今井, 依田 撮影

よこ偏光



たて偏光

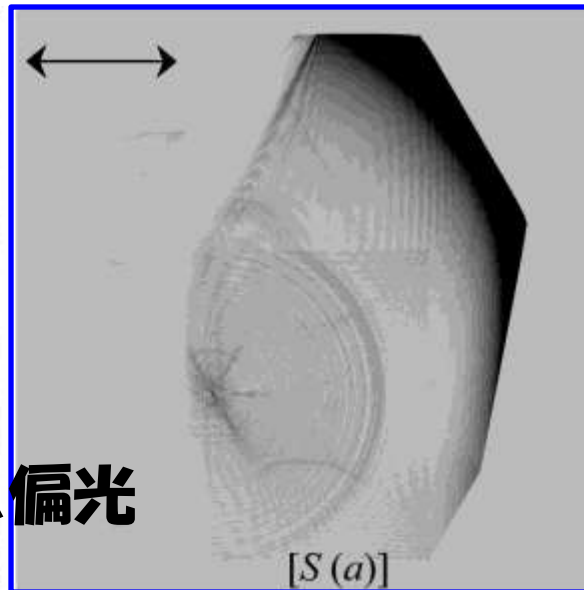
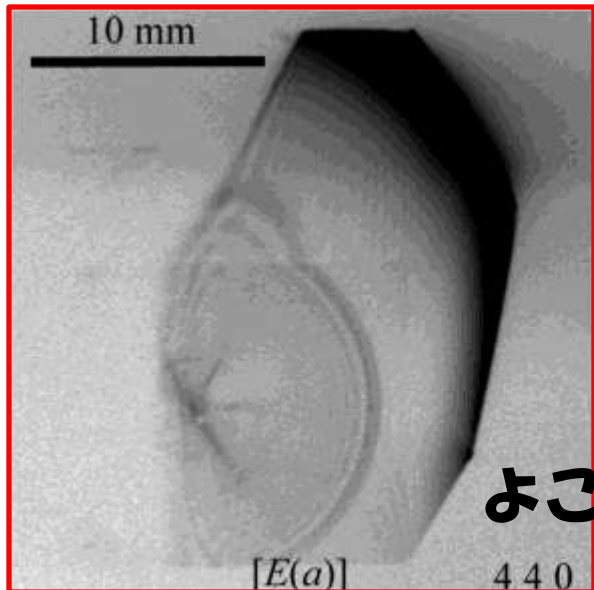


## コンピューターで計算した写真 著者による

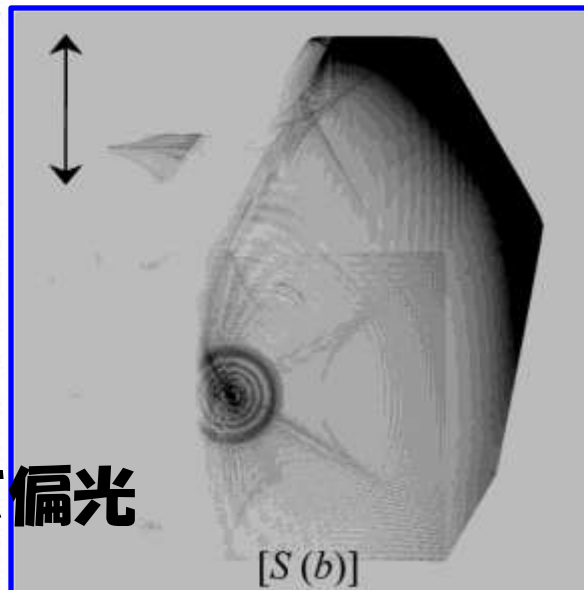
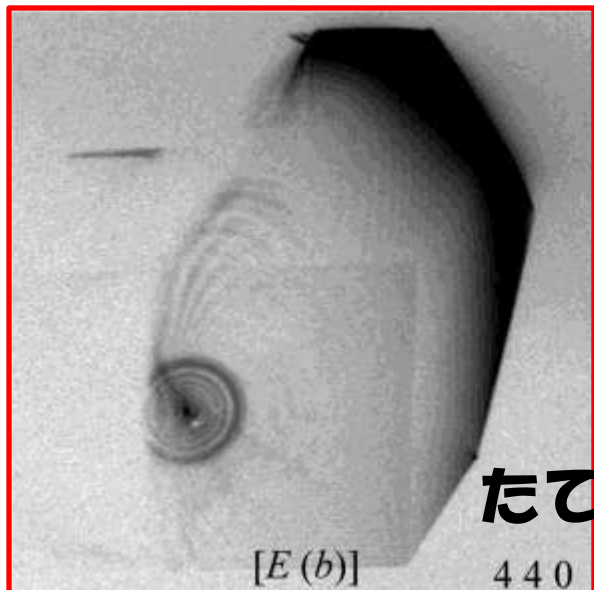
# 結晶のX線回折写真とコンピューターシミュレーション

## 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

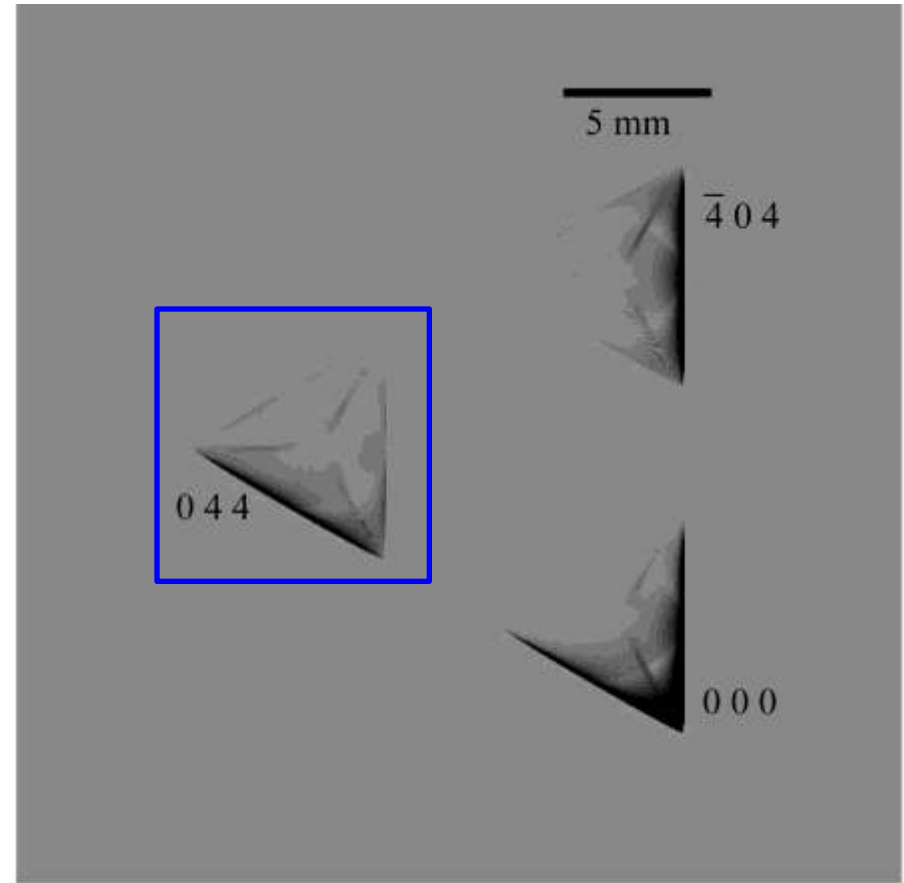
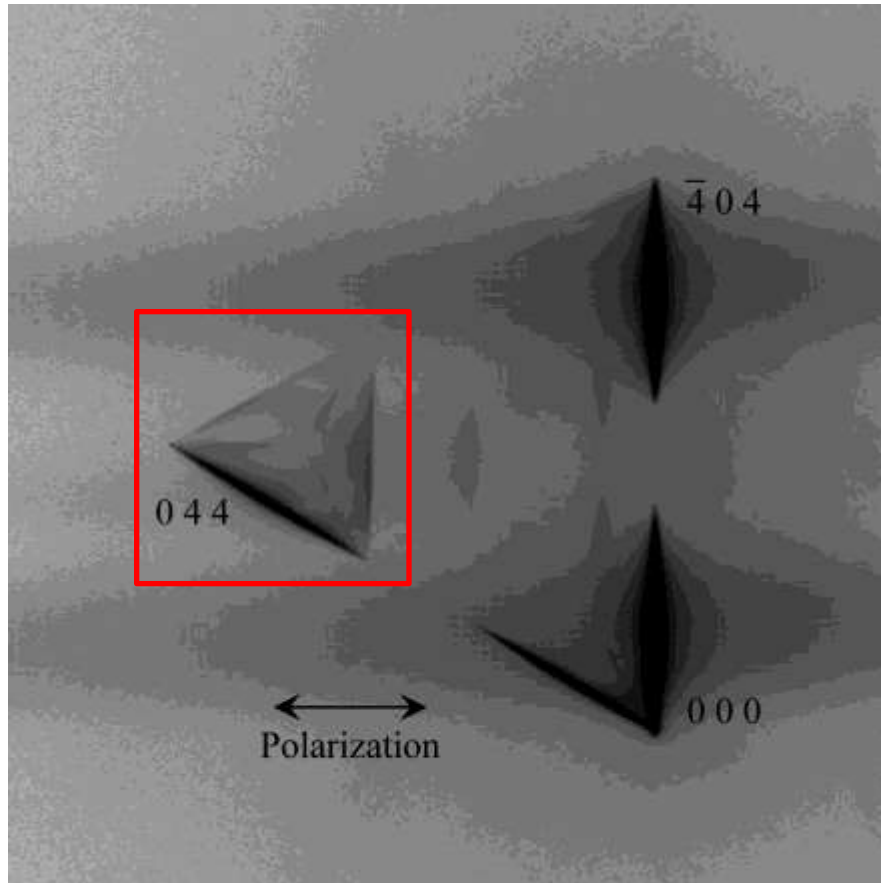


たて偏光

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

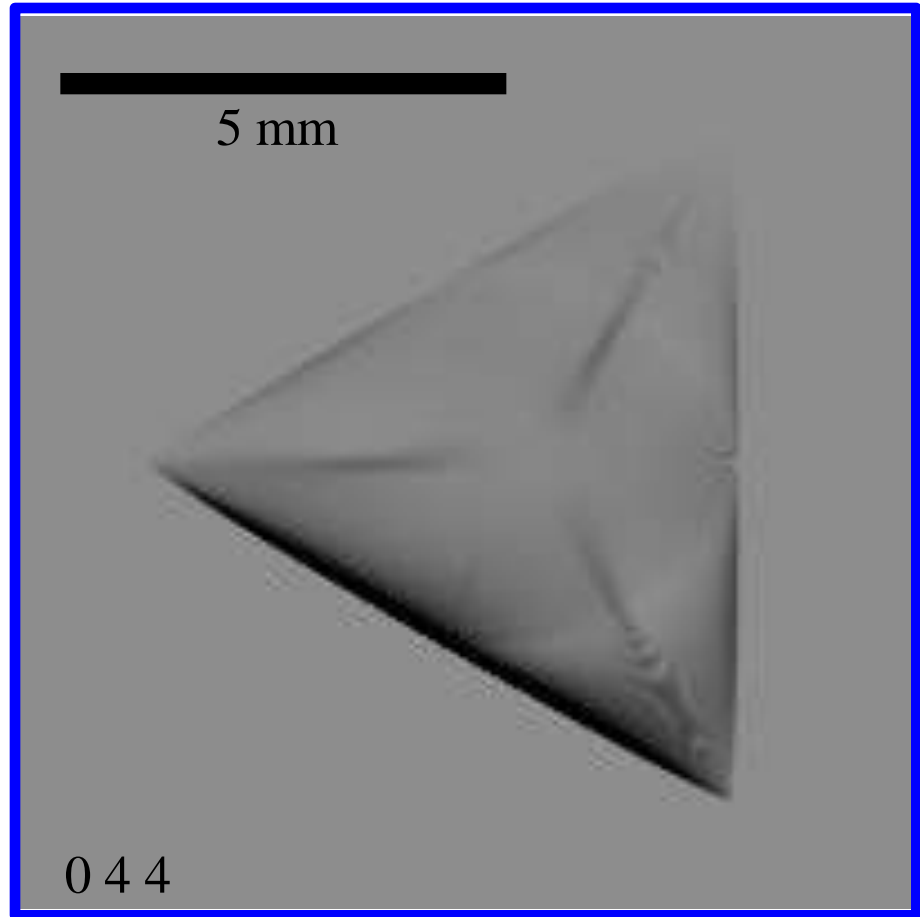
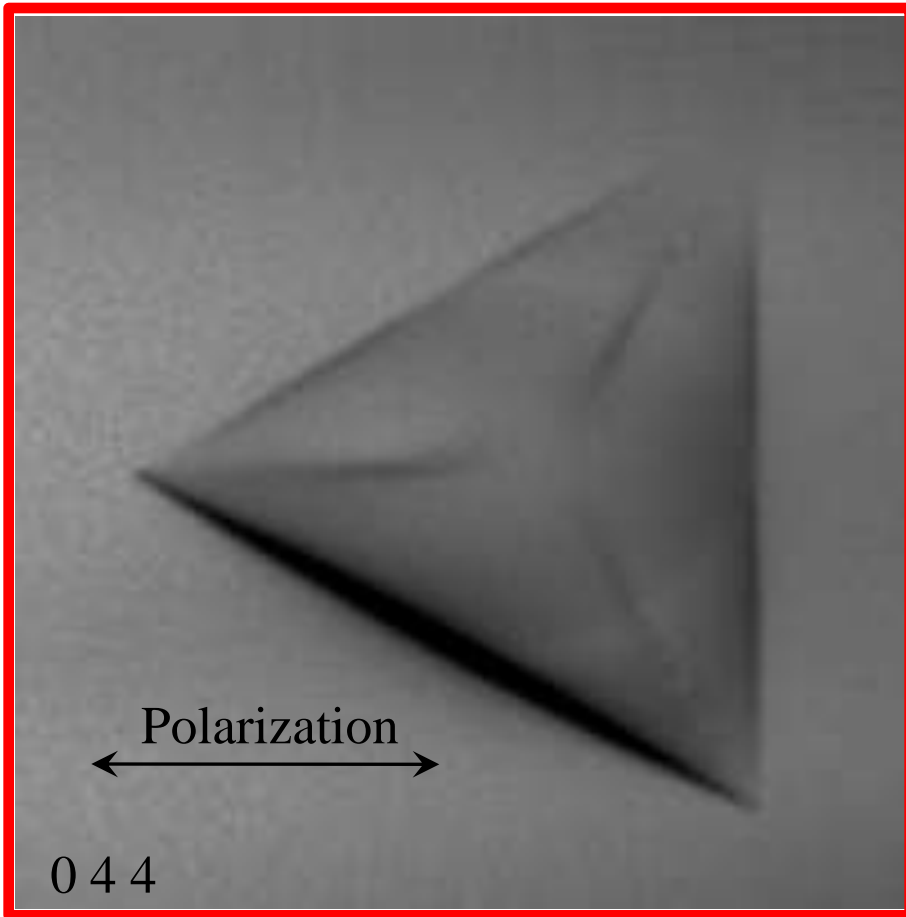
著者 (沖津), 石綿, 今井, 依田 撮影  
SPring-8 BL09XU にて

### 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

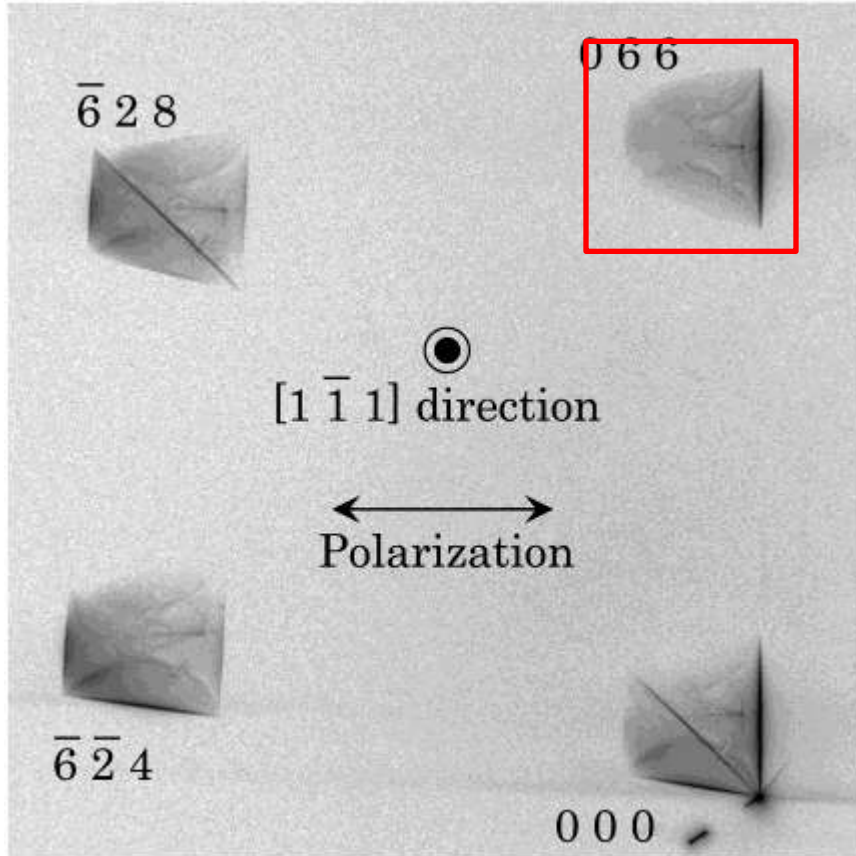
著者 (沖津), 石綿, 今井, 依田 撮影  
SPring-8 BL09XU にて

### 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

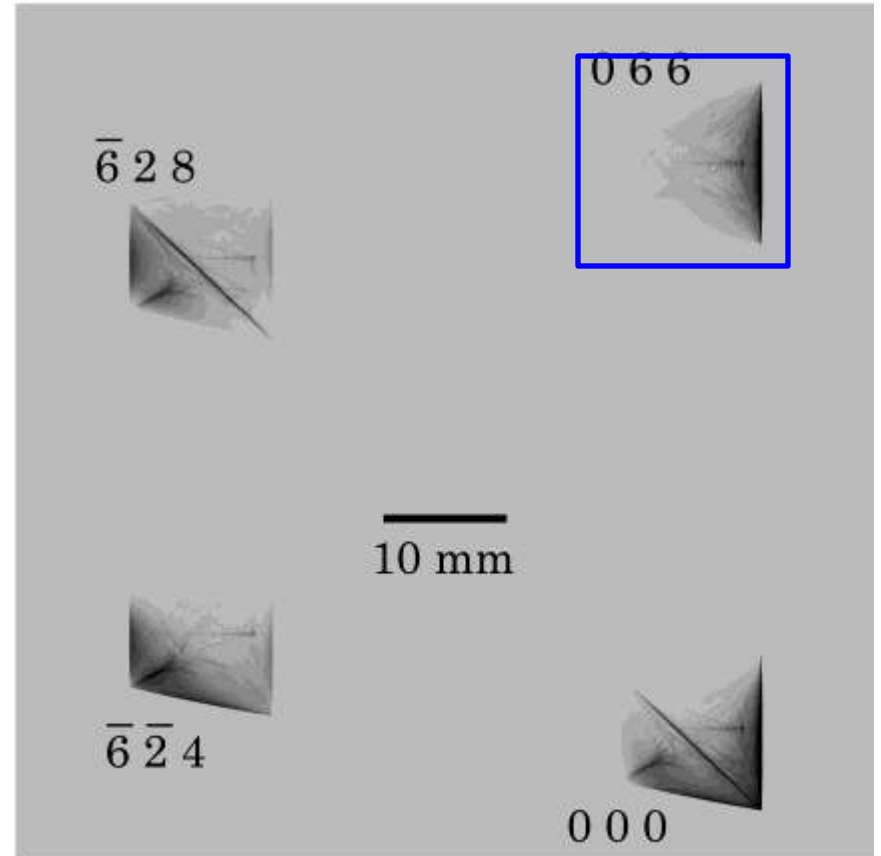
# 結晶のX線回折写真とコンピューターシミュレーション

## 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



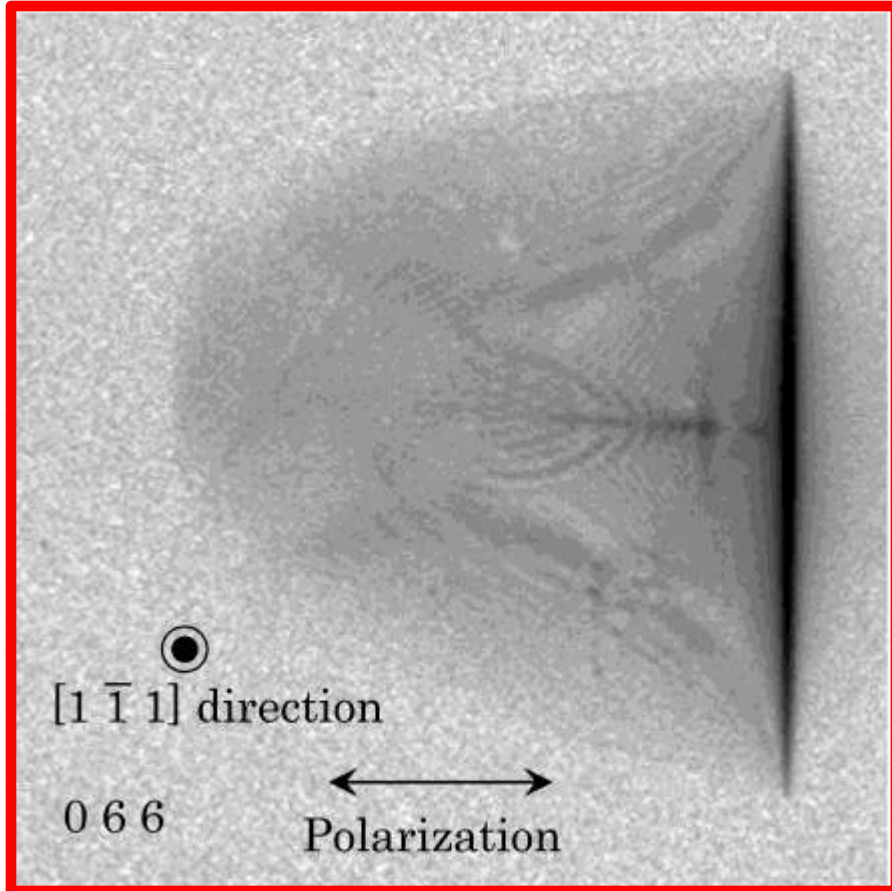
### コンピューターで計算した写真

著者による  
Hitachi SR-11000スーパーコンピュータにて



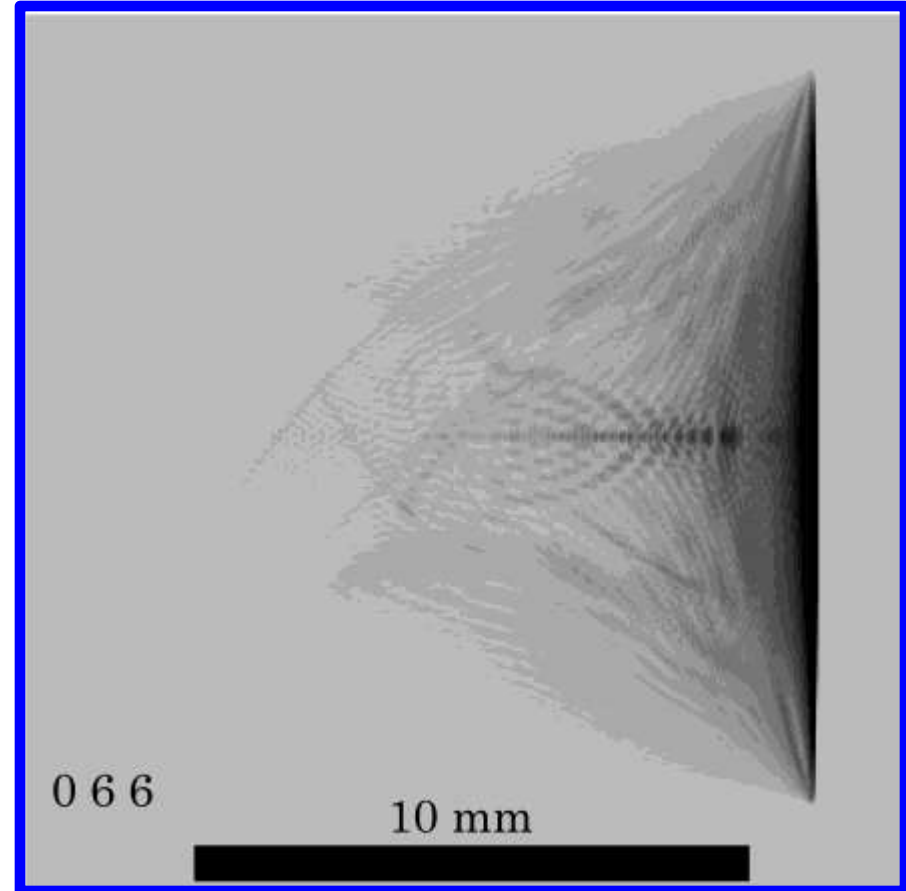
# 結晶のX線回折写真とコンピューターシミュレーション

## 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

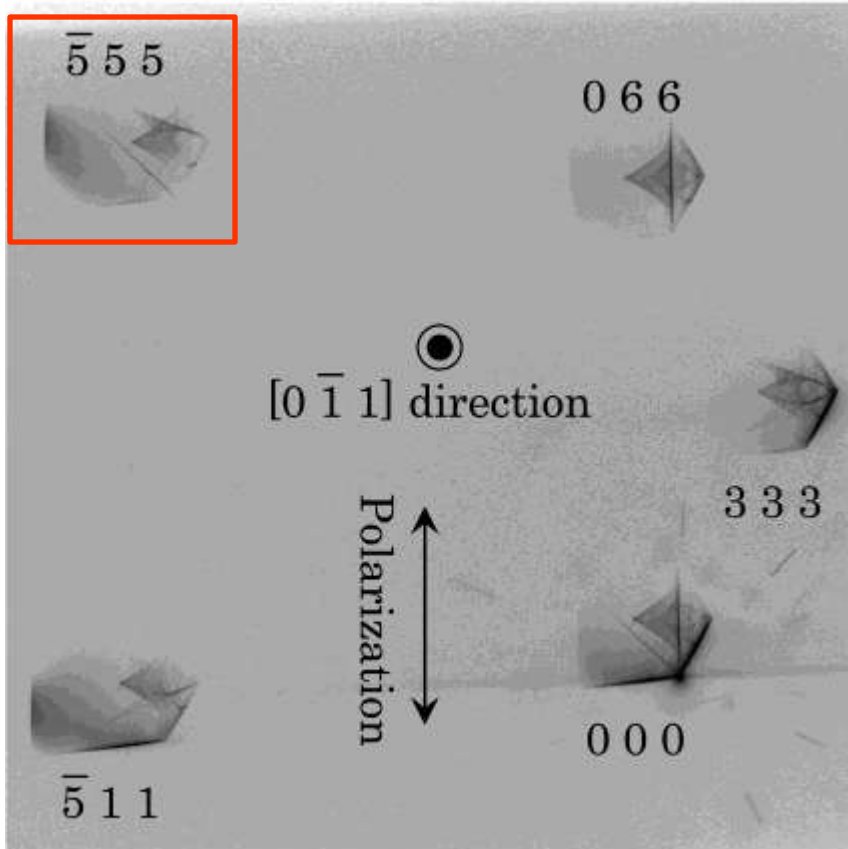


### コンピューターで計算した写真

著者による  
Hitachi SR-11000スーパーコンピュータにて

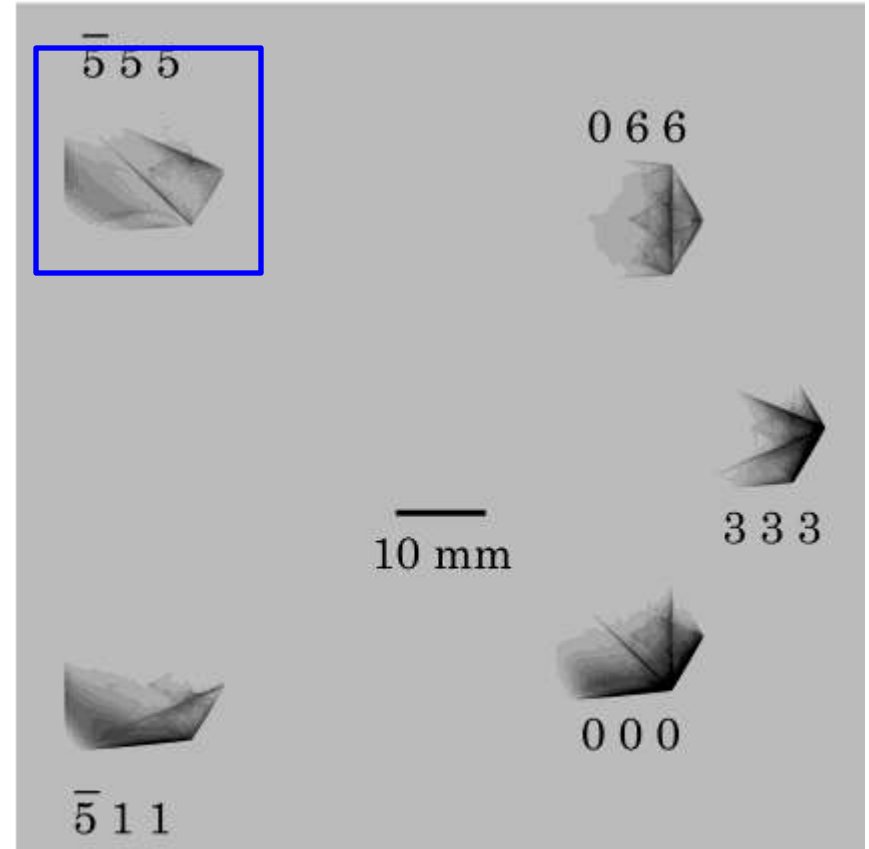
# 結晶のX線回折写真とコンピューターシミュレーション

## 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

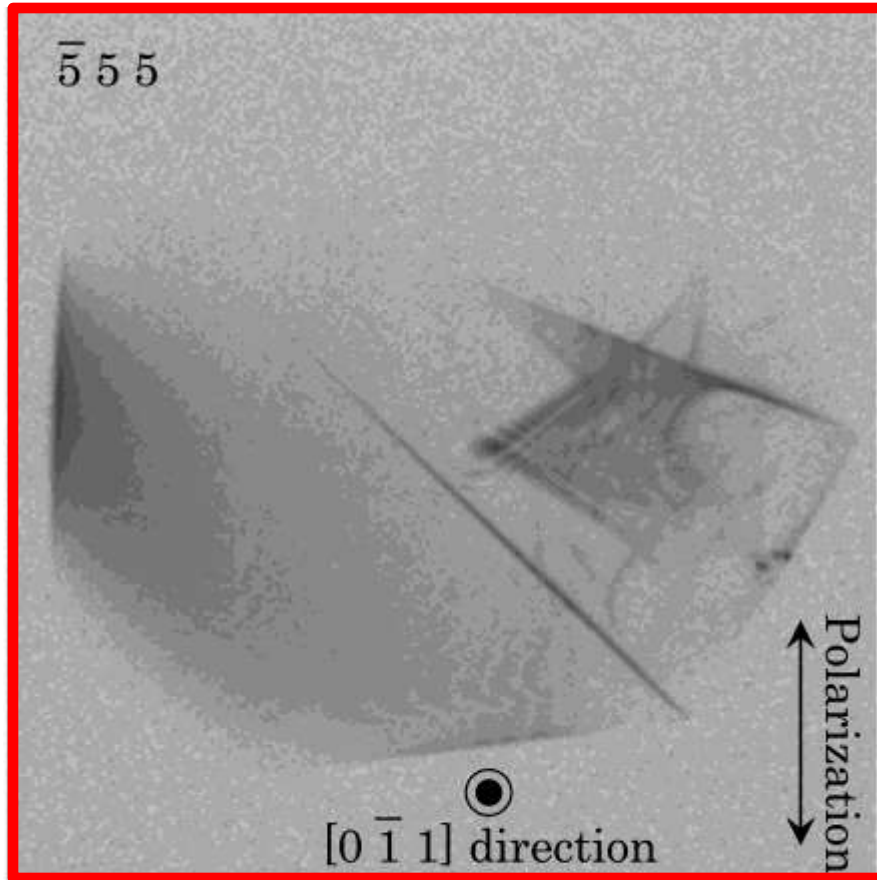


### コンピューターで計算した写真

著者による  
Hitachi SR-11000スーパーコンピュータにて

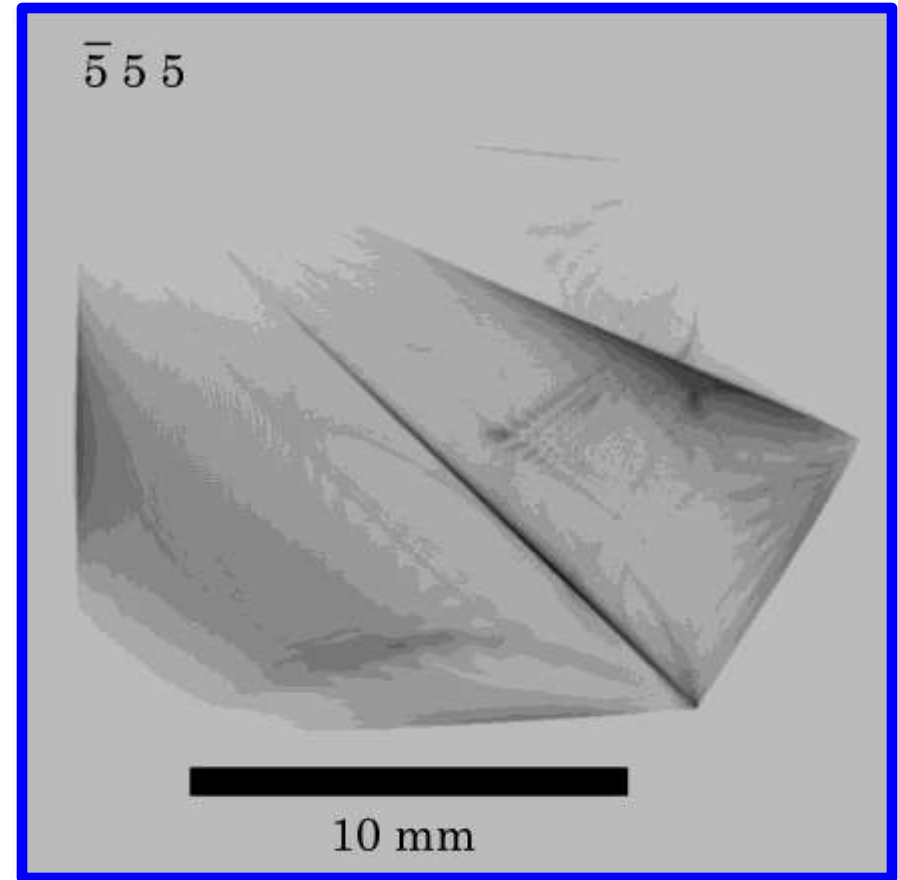
# 結晶のX線回折写真とコンピューターシミュレーション

## 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

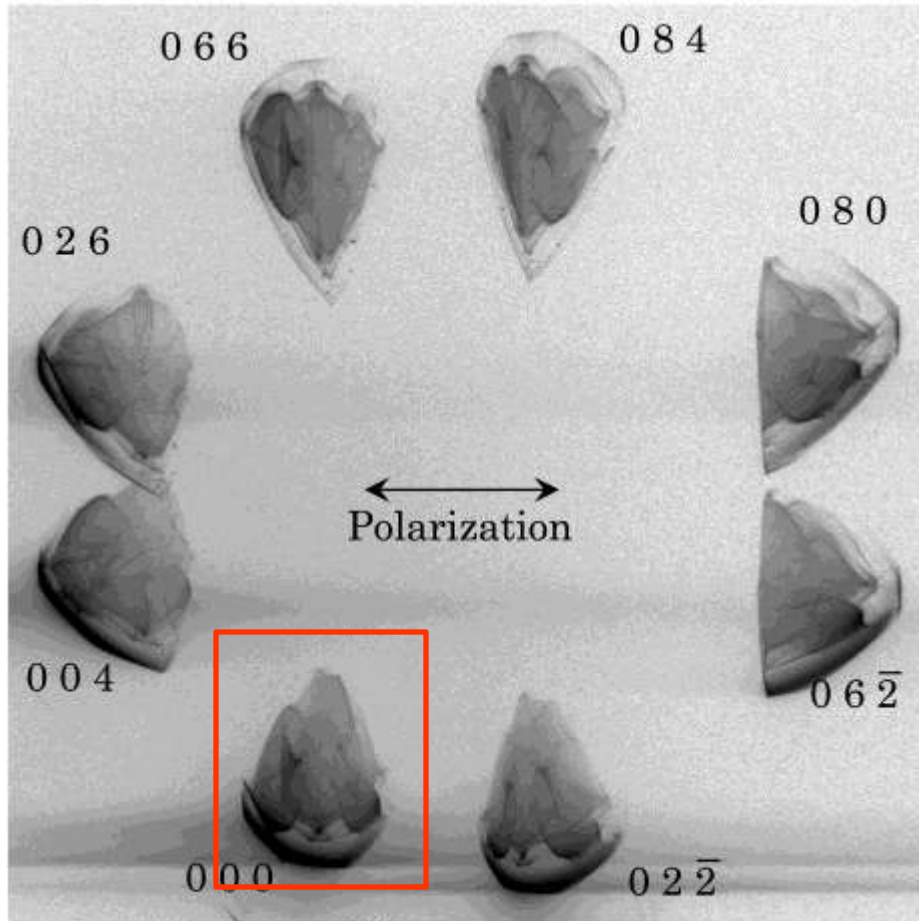


### コンピューターで計算した写真

著者による  
Hitachi SR-11000スーパーコンピュータにて

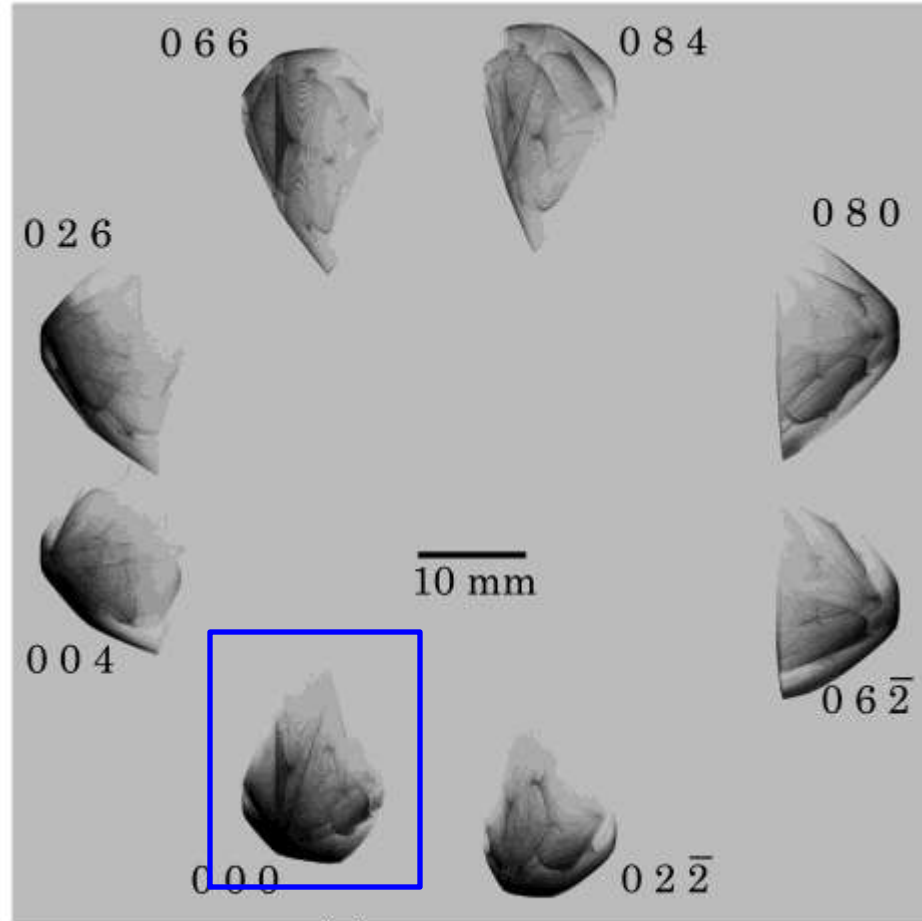
# 結晶のX線回折写真とコンピューターシミュレーション

## 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

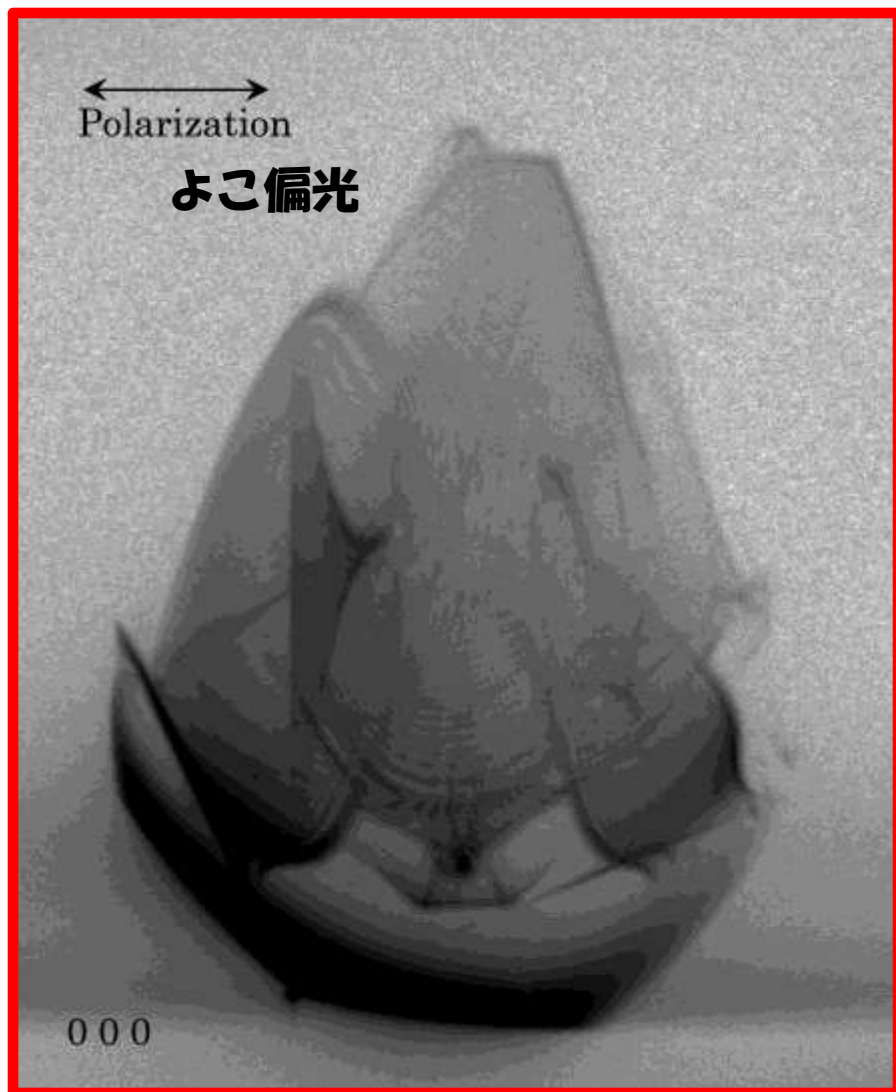


### コンピューターで計算した写真

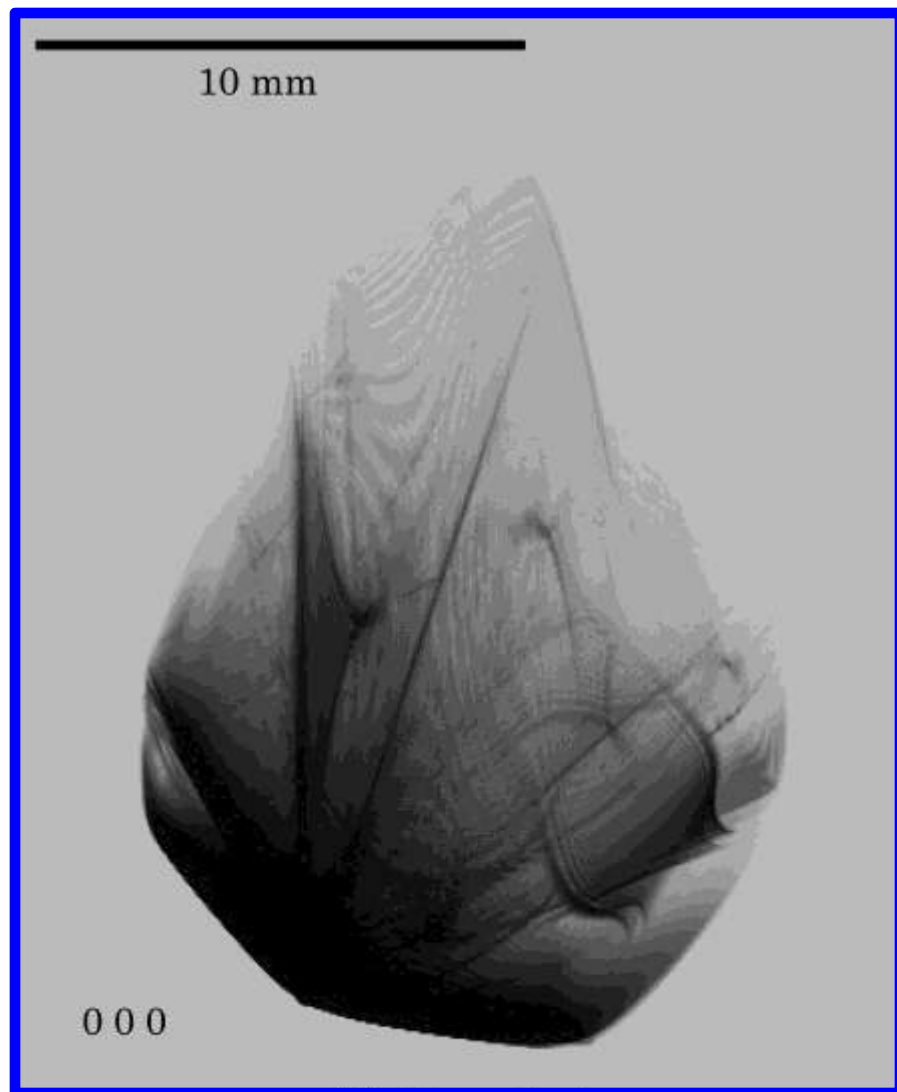
著者による  
Hitachi SR-11000スーパーコンピュータにて

# 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

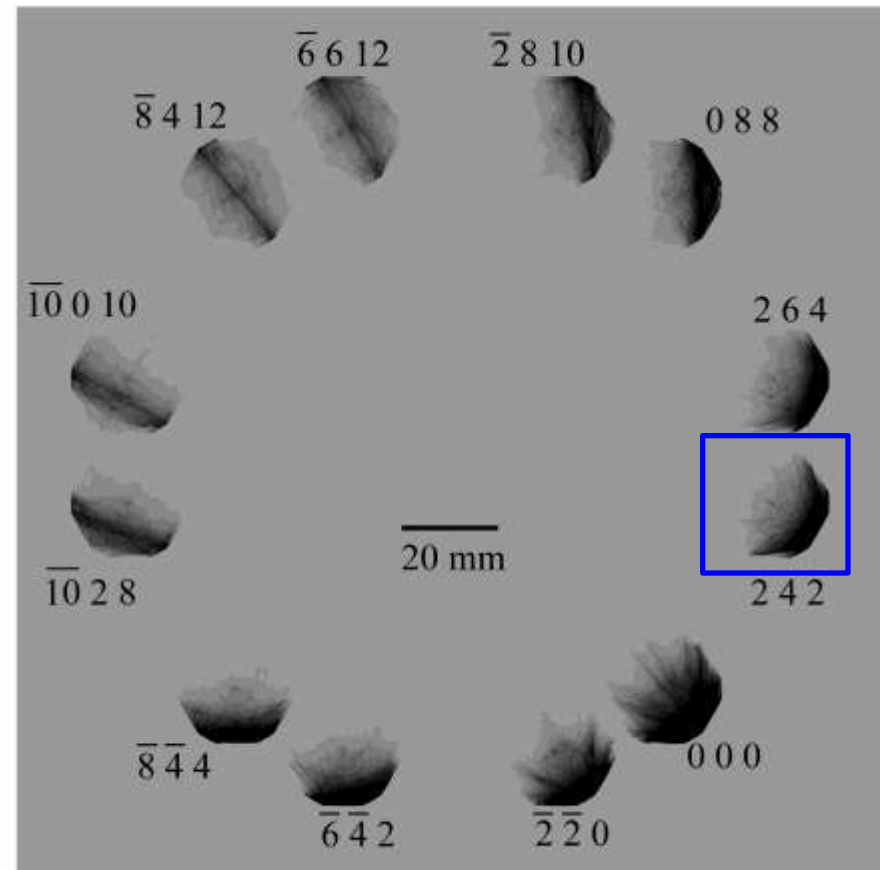
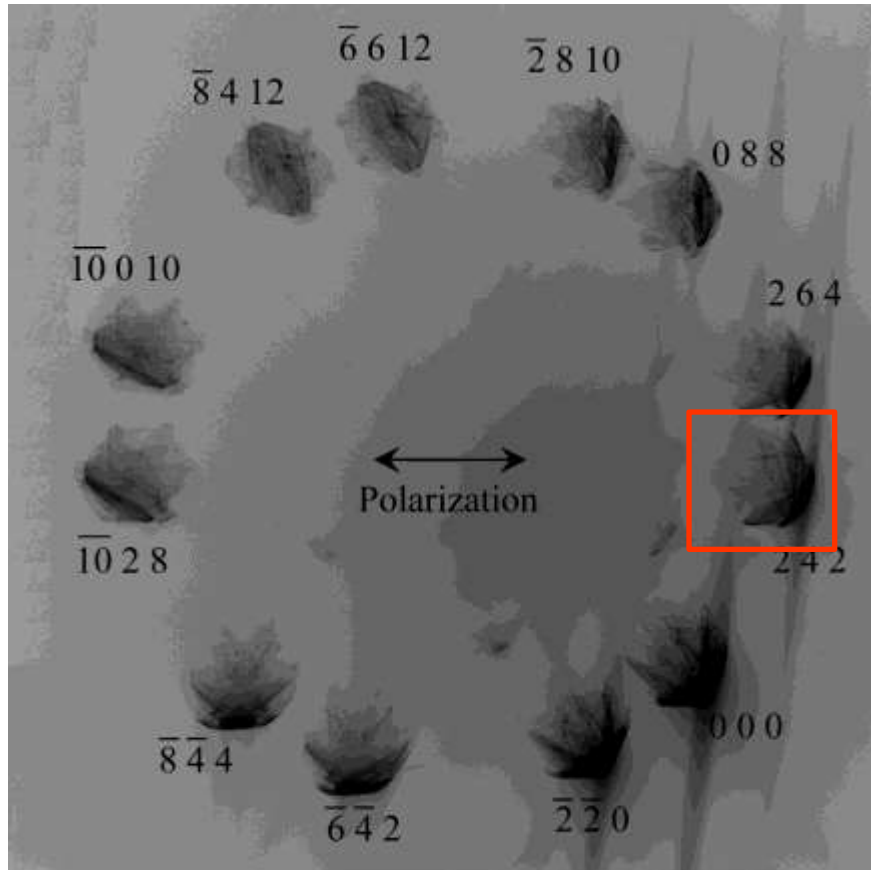


コンピューターで計算した写真



# 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

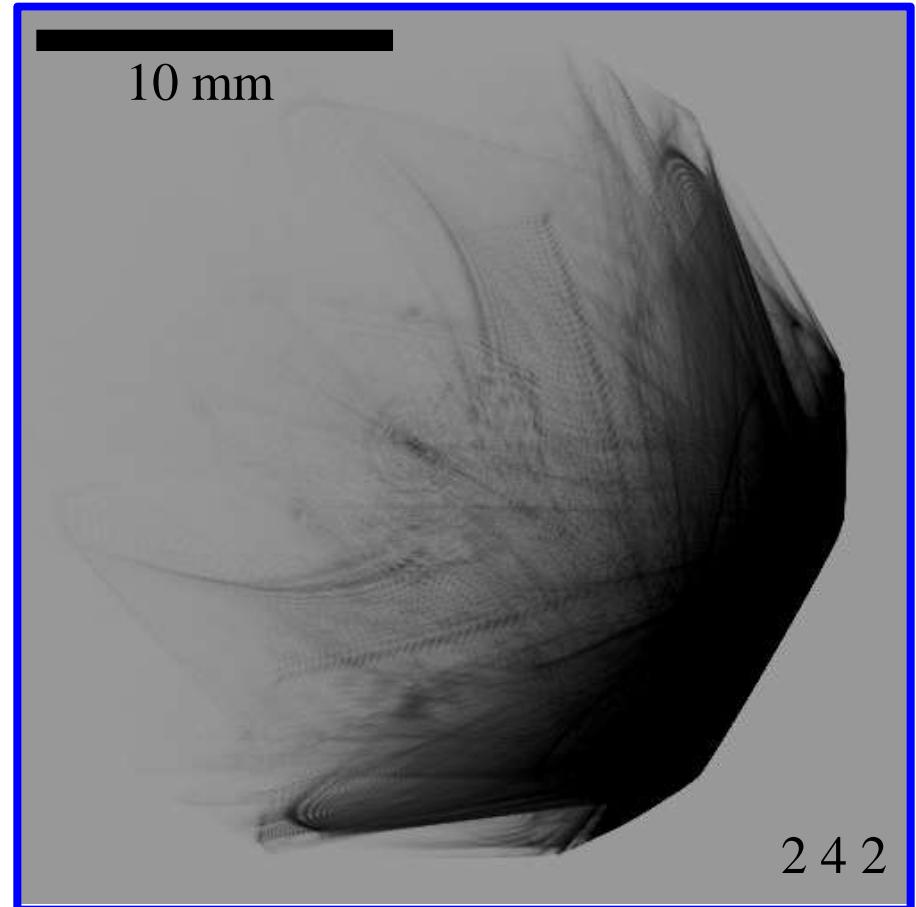
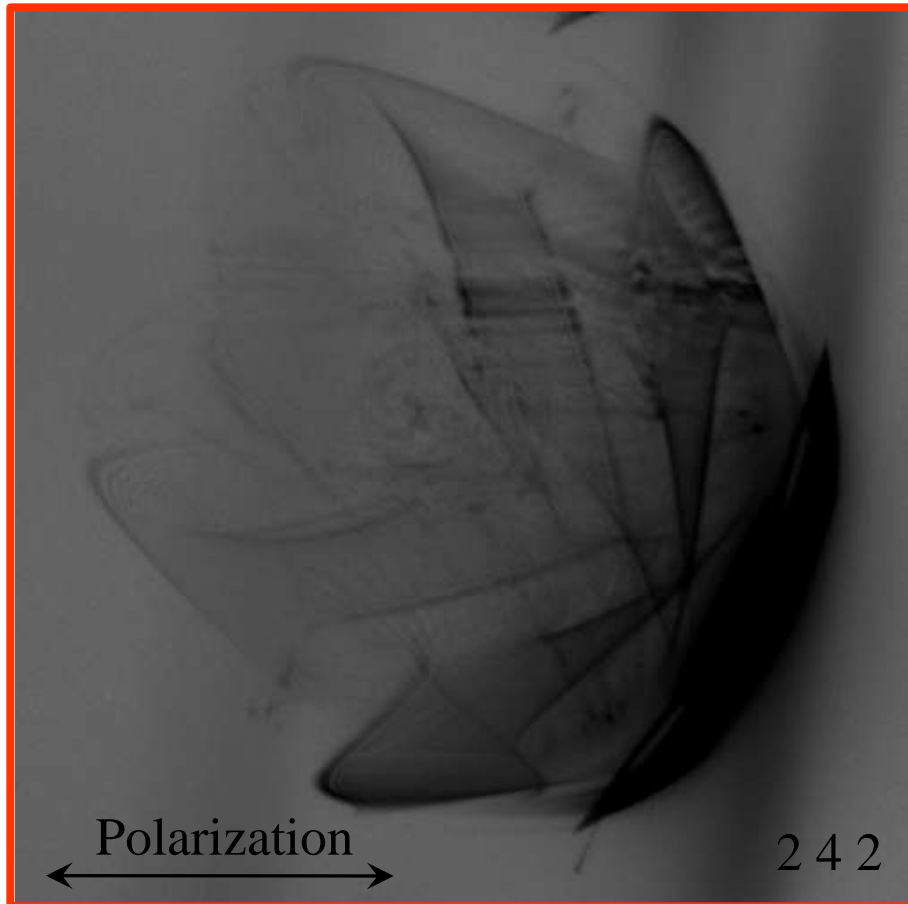
著者 (沖津), 石綿, 今井, 依田 撮影  
SPring-8 BL09XU にて

### 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

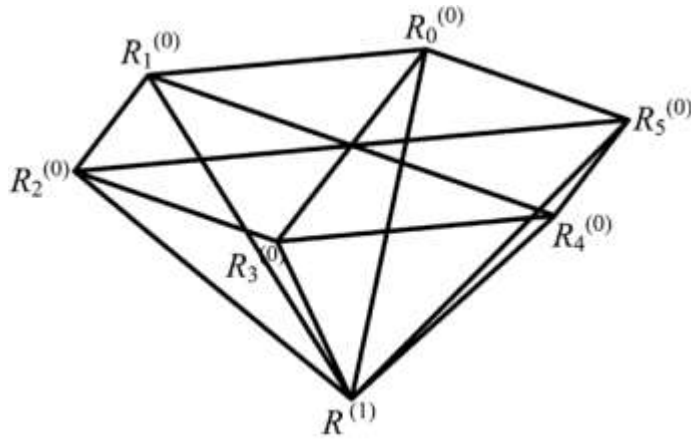
### コンピューターで計算した写真

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**