

# 透過型 off-Bragg 条件における X線回折強度とビーム軌道

X-ray intensity and beam trajectory for the Laue-case off-Bragg conditions

東大物性研 高橋敏男

我々は、X線回折法による表面・界面の構造に関する研究を進めてきた。その中でも、とくに、CTR(Crystal Truncation Rod) 散乱法と呼ばれる方法にいち早く着目し研究してきた。CTR 散乱は、通常、運動学的回折理論により説明され、ブラッグ反射のテールに相当する反射として位置づけられている。

並行して、我々は Darwin 流の動力的回折理論に着目し、ブラッグ角付近だけではなく、任意の入射角にも適用できるように Darwin 理論を拡張し一般化した[1-4]。その結果、反射型の配置においては、運動学的な C T R 散乱は、動力的な回折強度曲線のテールとして完全に説明できることを明らかにした。同様に、透過型の配置についても、任意の入射角に適用できるように一般化した。その結果は、ブラッグ点付近では従来の動力的回折理論と完全に一致する。その式に基づいて、振動に対して平均操作を行い、吸収が少ない場合に相当する近似を用いると

$$\left\langle \frac{P_H}{P_0} \right\rangle = 2 \cdot \exp \left[ -\frac{1}{2} \mu_0 t \left( \frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_H} \right) \right] \times \frac{\lambda^2 C^2 d^2 r_e^2}{\gamma_0 \gamma_H V^2} \left| \frac{F_H}{1 - \exp(-i2\pi l)} \right|^2 \quad (1)$$

が導かれることが分かった[2]。この式は、一見して吸収補正をした C T R 散乱を表現していることが分かる。しかし、よく見ると 2 という因子があり、これは表面および裏面における C T R 散乱の寄与を表しているとして解釈することが妥当なように思われる。

この結果を従来の透過型で振動を平均化した動力的回折強度曲線のテールと数値計算により比較すると、曲線の形はほぼ一致するが強度で約 2 倍だけ異なることが分かった。この 2 倍の違いを実験的に確かめるために、最近、Si の平板単結晶を使い、PF-BL4C で CTR 散乱の反射率測定を行った[5]。その結果は、従来の動力的回折理論の式よりもむしろ (1) 式に一致することが分かった。このことから、このときの X線ビームの軌道については、X線ビームは表面および裏面の境界面で回折される軌道をとるものと解釈される。これは、透過型の動力的回折における margin effect の極限として捕らえることができる。

[1] S. Nakatani and T. Takahashi, Surf. Sci., **311**, 433-439 (1994).

[2] T. Takahashi and S. Nakatani, Surf. Sci., **326**, 347-360 (1995).

[3] W. Yashiro and T. Takahashi, Acta Cryst. A **56** (2000) 163-167.

[4] W. Yashiro, Y. Itoh, M. Takahashi, T. Takahashi, Surf. Sci. **490** (2001) 394-408.

[5] 高橋敏男、白澤徹郎、Wolfgang Voegeli, 荒川悦雄、松下正、物理学会 2011 年 9 月秋季大会(富山大学) 23aJA-7