

二結晶 X 線トポグラフィによる転位評価 Dislocation contrast in double-crystal X-ray topography

山口博隆
産総研

X 線トポグラフィにおいて、バーガスベクトル \vec{b} のらせん転位が回折ベクトル \vec{g} と直交するとき、そのコントラストは消失する ($\vec{g} \cdot \vec{b} = 0$)。しかし、その転位が結晶表面に到達する場合、表面近傍のひずみ場は表面の影響を受けるために必ずしも消失しない。4H-SiC の c 軸方向に延びるらせん転位 ($\vec{b} = [0001]$, $|\vec{b}| = 1.005 \text{ nm}$) はバーガスベクトルが大きいことを反映して、 $11\bar{2}0$ 反射など、 $\vec{g} \cdot \vec{b} = 0$ の条件下においても結晶表面で非常に強いコントラストを示す。第 1 結晶で発散角を小さく調整した X 線を使った、二結晶法 X 線トポグラフィによる観察では、らせん転位が表面近傍で強いコントラストを示すが、内部では消失しており、 $\vec{g} \cdot \vec{b} = 0$ が成り立っていることがわかる。また、らせん転位の中には刃状転位成分 ($\vec{b} = (1/3)\langle 11\bar{2}0 \rangle$) を併せ持つ混合転位となっているものがあることがわかる。通常は強いらせん転位のコントラストのために刃状転位成分が識別できない。

これらの転位コントラストを理解するために、表面効果を考慮した転位コントラストのシミュレーションを進めている。結晶表面が自由表面 (応力ゼロ) となるように結晶外部に変位を仮定した鏡像法を用いる。転位は $[0001]$ にのびるらせん転位 (貫通らせん転位) であり、表面方位を (0001) としたときに表面に直交する場合のほか、表面方位が 4° あるいは 8° 傾斜している場合について考察する。