

JAERI-M

5441

MSCOPE - I

結晶格子欠陥・電子顕微鏡像解析
プログラム・システム

1973年11月

西田 雄彦・出井 数彦

日本原子力研究所
Japan Atomic Energy Research Institute

この報告書は、日本原子力研究所が JAERI-M レポートとして、不定期に刊行している研究報告書です。入手、複製などのお問い合わせは、日本原子力研究所技術情報部（茨城県那珂郡東海村）あて、お申しこしてください。

JAERI-M reports, issued irregularly, describe the results of research works carried out in JAERI. Inquiries about the availability of reports and their reproduction should be addressed to Division of Technical Information, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken, Japan.

JAERI-M 5441

M S C O P E - I

結晶格子欠陥・電子顕微鏡像解析プログラム・システム

日本原子力研究所 東海研究所

原子炉工学部 西田 雄彦

原子炉化学部 出井 数彦

(1973年10月18日受理)

電子回折動力学理論による多波近似で、格子欠陥をもつ結晶の電顕像の計算結果のデータ処理を行うプログラム・システムを開発した。マトリックス法で固有値問題を数値的に解くことによって、完全結晶や格子欠陥（球対称歪や積層欠陥など）をもつ結晶内部での各電子波の強度分布（波の進行方向に沿った分布と結晶下面での分布をプロッター表示する）や明暗像のシミュレーションをすることが出来る。又、ビームの入射条件を変えた時の分散面や吸収係数、励起振巾の変化もオプションとして求められる。プログラム・システムの構造はモジュール化され、将来にわたって種々の改良や発展を必要に応じて速かに組込めるように考慮されている。

JAERI-M 5441

MSCOPE-I : A Program System for Analyzing the Electron-
microscope Images of Crystal Lattice Defects

Takahiko NISHIDA

Division of Reactor Engineering, Tokai, JAERI

Kazuhiko IZUI

Division of Chemistry, Tokai, JAERI

(Received October 18, 1973)

Developed on the basis of the multi-beam dynamical theory of electron diffraction, the program system is for computing the electron-microscope images of crystal lattice defects and processing the data. With the code system, the eigenvalue problems can be solved numerically by a matrix method and the intensity profiles of electron beams obtained (along the incident direction and on the bottom surface of a crystal) for perfect crystals and lattice defects such as a spherically symmetric deformation and a stacking fault. The profiles can be plotted in a figure. The program can also give a figure which simulates the diffraction contrast. Optional calculations give the changes in the dispersion surface, absorption coefficient and excitation amplitude corresponding to the characteristics of the incident beam. The code is programmed in a modular system, so the modification for improvement is easy.

目 次

1	まえがき	1
2	理 論	2
2.1	電子回折動力学理論	2
2.2	電子波吸収の現象論的扱い	5
2.3	結晶の構造因子と温度因子	6
2.4	不完全結晶の取扱い	8
2.5	格子欠陥の例	10
3	プログラム・システム	15
3.1	全体的流れ	15
3.2	入力形式	18
3.3	出力形式	23
3.4	サブルーチンとフロー・チャート	24
4	数値計算例	27
4.1	完全結晶	27
4.2	不完全結晶	28
5	あとがき	30
	引用文献	30
	付 録	31

C O N T E N T S

1	Introduction	1
2	Theory	2
2.1	Dynamical theory of electron diffraction	2
2.2	Phenomenological treatment of electron absorption	5
2.3	Structure factor and temperature factor	6
2.4	Formulation for a deformed crystal	8
2.5	Examples of lattice defects	10
3	Program System	15
3.1	General description	15
3.2	Input	18
3.3	Output	23
3.4	Subroutines and flow charts	24
4	Numerical Examples	27
4.1	Perfect crystal	27
4.2	Deformed crystal	28
5	Conclusions	30
	References	30
	Appendices	31

1 ま え が き

固体の構造および格子欠陥の研究に電子顕微鏡の果たして来た役割は極めて大きく、今後も益々大きな期待がかけられている。この分野の研究が大きな成果を挙げているのは、一つには電子顕微鏡自体のハードな面での性能（例えば超高分解能，超高压）の驚異的な進歩によるものであるが，他方観察された電顕像の解析法というソフトな面での研究の着実な進展¹⁾が大きな支えになっていることを忘れてはならない。

電顕像解析法研究の基礎となる各種の電顕像コントラストの計算は多くの場合，電子回折動力学理論を用いて行われる。その中でも100KV級の普及型電顕の場合には2波近似が有効に適用される場合が多いが，1MV級の超高压電顕になると励起される回折波の数が多くなり従って結像の問題も多波近似で取扱わなければならない。

多波近似を用いて実用的な電顕像コントラストを数値的に求めるためには大型電子計算機の助けをかりなければならないが，この種の計算の先駆的なものとして，1966年の日立中研の福原氏²⁾の仕事があり，その後主として英国(Oxford大学とU.S.Steelのグループによって盛んに多波計算が行われ始めた。^{3)~6)}最近では国内でも京都工芸繊維大，東北大，原研および佐賀大等において夫々特色のあるプログラムが作られている。しかし現在迄の所，完全結晶に関する計算が大部分で，実用的に重要な格子欠陥への適用例は極めて少く今後の重要な課題と考えられている。

MSCOPE-Iは一昨年来，我々が開発してきた多波理論による格子欠陥の電顕像の計算のプログラムをまとめたシステムであり，今後多岐にわたる応用面の研究を効率よく進めていく基盤となるものである。具体的にえられた格子欠陥像の解析の結果は，今迄機会ある毎に発表して来たり別途に報告書をまとめるので，こゝではシステムの内容説明，利用の仕方を中心として報告する。

2 理 論

2.1 電子回折動力学理論

理論的には電子回折の分野で10年位前からいくつかの夫々特長のある多波近以の理論形式が展開されて来た。例えば藤原⁷⁾の高次のBorn展開形式、藤本⁸⁾、Sturky⁹⁾¹⁰⁾の散乱マトリックス理論、CowleyとMoodie¹¹⁾¹²⁾の“phase grating” theoryおよび福原²⁾のexactな解法等があるがこれらは何れも完全結晶に対する理論である。不完全結晶にも適用出来るような形式にまとめられたものとしては、高木¹³⁾の微分方程式形式、HowieとWhelan¹⁴⁾のマトリックス形式がある。

この章では今回我々が作成した機能的なプログラム・システムの基礎となっているマトリックス理論を説明し、併せて不完全結晶における変位の表現についての例を述べる。

結晶中のポテンシャル $V(r)$ の中で、エネルギー eE' をもつ電子の状態を記述する波動関数 $\psi(r)$ は、シュレディンガー方程式に従う¹⁴⁾。

$$\nabla^2 \psi(r) + \frac{8\pi^2 me}{h^2} [E' + V(r)] \psi(r) = 0 \quad (1)$$

ここで m 、 e は電子の質量及び電荷、 h はプランクの定数である。よく知られている様に、結晶内の原子配列は、格子状に周期性をもっているから、結晶のポテンシャル $V(r)$ も同じ周期を持ち、逆格子点 g' に関して次のようにフーリエ展開が出来る。

$$V(r) = \sum_{g'}^{+\infty} V_{g'} \exp\{2\pi i g' \cdot r\} \quad (2)$$

又 $\psi(r)$ はブロッホの関数として展開できる。

$$\psi(r) = \sum_g \psi_g \exp\{2\pi i K_g \cdot r\} \quad (3)$$

ここで、 g は逆格子ベクトル、 K_g は g で回折される波の波動ベクトル($K_g = K_0 + g$)で、 ψ_g はその波の振幅である。なお K_0 は結晶中の零次の波動ベクトルである。

(1)式に(2)、(3)式を代入して、整理すると、次のような連立一次方程式に変換される。

$$(K^2 - K_g^2) \psi_g + \sum_{(h \neq 0)} U_h \psi_{g-h} = 0 \quad (4)$$

ここで加速電圧を E とし、相対論を考慮に入れると

$$\left. \begin{aligned} K^2 &= \frac{2m_0 e}{h^2} \left(1 + \frac{eE}{2m_0 c^2}\right) E + U \\ U_g &= \frac{2m_0 e}{h^2} \left(1 + \frac{eE}{m_0 c^2}\right) V_g \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

となる。 m_0 は電子の静止質量、 c は光の速度、 K は結晶内の平均ポテンシャル U_0 で屈折を受けた入射電子の波動ベクトルである。

(4)式は“動力学・マトリックス理論”の基本となる式であり、 g を n 点とる時“ n 波近以”という。又(4)式は後述のように固有値問題として解けるが以下に“2波近以”の場合を例にとっ

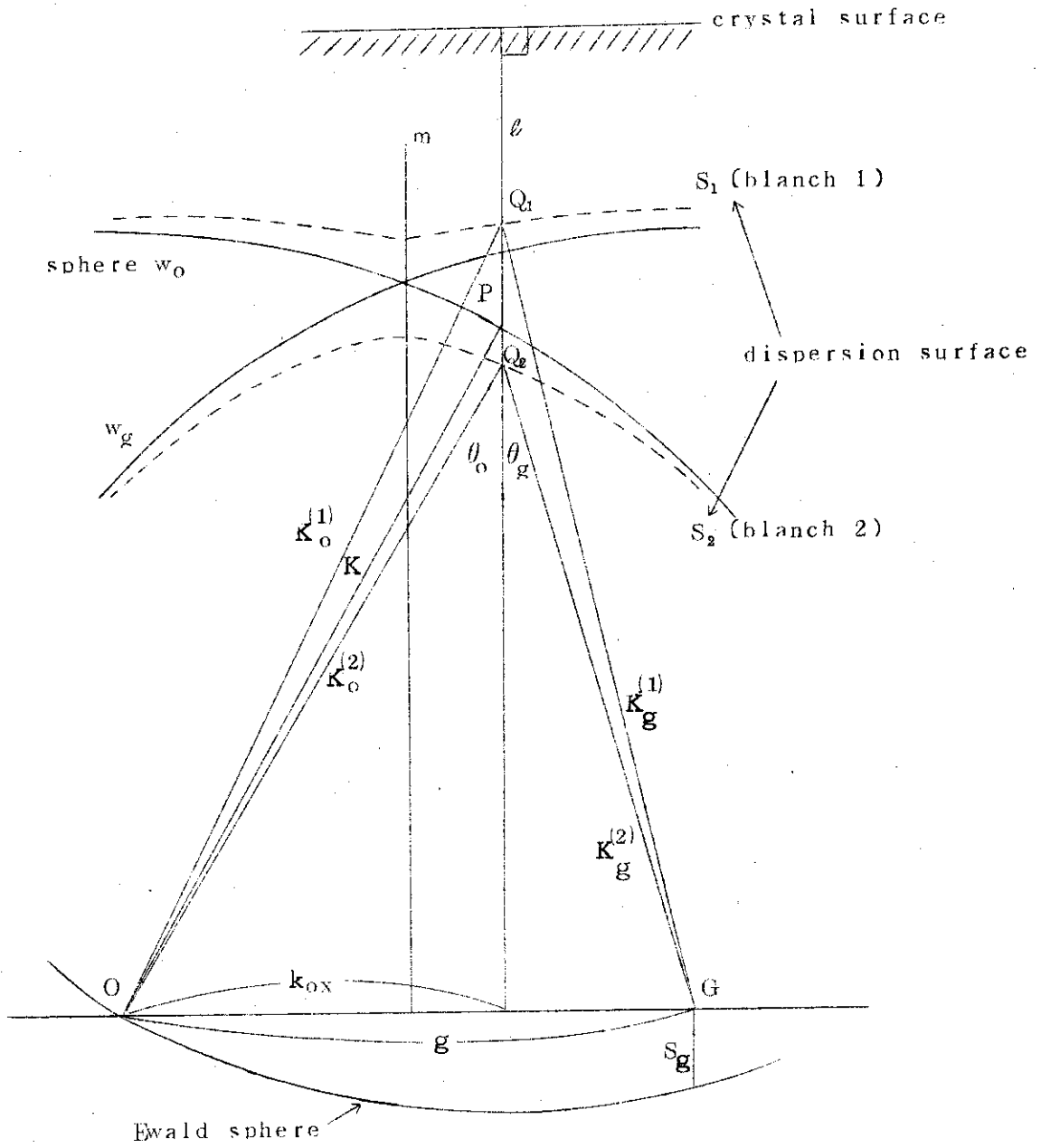


Fig. 1 Dispersion surface

て説明する。

一般に結晶による電子回折では、Fig.1のように、逆格子空間内に各波の波動ベクトルを画いて議論するのが便利である。今Oを逆格子の原点、GをBragg条件に近い方位の格子面に対応する逆格子点とする ($\vec{OG} = \mathbf{g}$)。曲面 W_0 及び W_g は、O及びGを中心とした半径 $|K|$ で画いた球面である。 W_0 上の点Pを入射条件に対応するように、即ちPからOへ引いた直線がKになるようにPを決める。曲面 S_1, S_2 は“分散面”と呼ばれ、電子エネルギーが一定の時、(4)式から決まる永年方程式を満足するような K_0 によって、K-空間内で画かれた曲面である。

Fig.1で直線 l はPから結晶表面に下した垂線で (Fig.1では、 \vec{OG} が結晶の表面と平行にとってある)、 l と上下の分散面 S_1 と S_2 の交点をそれぞれ Q_1, Q_2 とすると

$$\begin{aligned} \vec{PO} &= \mathbf{K} : V_0 \text{で屈折された電子の波動ベクトル} \\ \vec{Q_1O} &= \mathbf{K}_0^{(1)} : \text{ブランチ(1)に属する結晶内電子波の波動ベクトル} \\ \vec{Q_2O} &= \mathbf{K}_0^{(2)} : \text{ " (2) " " } \\ \vec{Q_1G} &= \mathbf{K}^{(1)} : \text{ブランチ(1)に属する回折波の波動ベクトル} \\ \vec{Q_2G} &= \mathbf{K}^{(2)} : \text{ " (2) " " } \end{aligned}$$

で、 \mathbf{K} と $\mathbf{K}_0^{(1)}, \mathbf{K}_0^{(2)}$ は波の境界における連続条件から、それらの \vec{OG} 方向の成分が等しくなるようにとられている。

点Pが W_0 面と W_g 面の交線上に来たとき、Gは正確にブラッグ条件を充し強い反射を示す。エワルドの反射球 (Pを中心とする半径 $|K|$ の球) とGとの距離 S_g は、ブラッグ条件からの外れの度合いを表わす。又距離 $\overline{PQ_1}, \overline{PQ_2}$ を夫々 $r^{(1)}, r^{(2)}$ とおくと、次の式が与えられる。

$$r^{(1)} = |K - K_0^{(1)}|, \quad r^{(2)} = |K - K_0^{(2)}| \quad (6)$$

入射電子のエネルギーが高い時には、エワルド球は大きな半径 $|K|$ をもつので、Fig.1から明らかのように、 r や S_g は二次微小量と近以してさしつかえない。

$$K^2 - K_0^2 \simeq K^2 - (|K| + r \cos \theta_0)^2 \simeq -2|K|r \cos \theta_0 \quad (7)$$

$$K^2 - K^2 \simeq K_g^2 - (|K| + (r - S_g) \cos \theta_g)^2 \simeq 2|K|(S_g - r) \cos \theta_g \quad (8)$$

更に θ_0, θ_g を微小量として近以すると $\cos \theta_0 \simeq \cos \theta_g \simeq 1$ で(7)式、(8)式を(4)式に代入すると2波近以の場合

$$\left. \begin{aligned} -2|K|r\psi_0 + U_1\psi_g &= 0 \\ U_1\psi_0 + 2|K|(S_g - r)\psi_g &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

これを、整理しマトリックス形で書き直すと

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{U_1}{2|K|} \\ \frac{U_1}{2|K|} & S_g \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_g \end{pmatrix} = r \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_g \end{pmatrix} \quad (10)$$

即ちこのような高エネルギーの領域では(4)式は r に関する固有値問題に交換される。又以上の議論は、一般に“ n 波近以”についても成り立つ。

入射電子エネルギーが高くなるに従って、エワルド球の球面近くに存在する(つまり、“Braggの回折条件”に近い)逆格子点がかさらに多くなり、“多波近以”で扱う必要がある。この場合、固有値方程式は次のようにかかる。

$$A \cdot \vec{\psi}^{(j)} = \gamma^{(j)} \vec{\psi}^{(j)} \quad (j=1, 2, \dots, n) \quad (11)$$

ここで、Aはマトリックスで、 $K=|K|$ とおくと

$$\begin{aligned} \text{対角要素は } A_{00} &= 0 \\ A_{gg} &= -\frac{1}{2K} (2K_0 \cdot g + g^2) \\ &\approx -\frac{1}{2K} (2K \cdot g + g^2) \equiv S_g \end{aligned} \quad (12)$$

非対角要素は

$$A_{gh} = U_{g-h} / (2K) \quad (13)$$

j番目の固有値 $\gamma^{(j)}$ は、

$$\gamma^{(j)} = \frac{1}{2K} (K_0^{(j)2} - K^2) \approx K_0^{(j)} - K \quad (14)$$

$\vec{\psi}^{(j)}$ は、固有値 $\gamma^{(j)}$ に対応する固有ベクトルで、その成分は $\psi_g^{(j)}$ ($g=0, 1, 2, \dots, n-1$) である。したがって(3)式は

$$\vec{\psi}^{(j)}(r) = \sum_g \psi_g^{(j)} e^{2\pi i k_g \cdot r} \text{ となる。}$$

ここでは $n \geq 3$ の場合が多くあつかわれるが、いずれも数値解法（ハウスホルダー法、QR法等）によって(11)式を解き、固有値 $\gamma^{(j)}$ 、固有ベクトル $\vec{\psi}^{(j)}$ の値を求める。

電子が入射する結晶表面 ($z=0$) で境界条件は、入射波の各振巾成分を u_g とすると、次式で与えられる。

$$u_g = \sum_j \phi^{(j)} \psi_g^{(j)} = \delta_{g0} \quad (g=0, 1, 2, \dots, n-1) \quad (15)$$

$\phi^{(j)}$ は j番目の固有値に属するブロッホ波の励起振巾を与えるもので、 $\psi_g^{(j)}$ の正規直交性と(15)の条件から

$$\phi^{(j)} = \psi_0^{(j)*} \quad (16)$$

結局、厚さ z の結晶の下面から出てくる電子波の振巾は

$$u'_g(z) = \sum_j \psi_0^{(j)*} \psi_g^{(j)} e^{2\pi i \gamma^{(j)} z} \quad (g=0, 1, 2, \dots, n-1) \quad (17)$$

強度は

$$I_g(z) = u_g'^*(z) \cdot u'_g(z) \quad (18)$$

で与えられる。

2.2 電子波吸収の現象論的扱い

電子波は、結晶を通り抜けていく間に散乱によって、絞りの外に逃げてしまう部分がある。この効果を現象論的に扱うために、(1)式の結晶のポテンシャル $V(r)$ に、虚数部分 $iV'(r)$ (やはり周期関係とする)を加える。

(2)式と同じくフーリエ展開すると、

$$\begin{aligned}
 V'(K) &= \sum_{-\infty}^{+\infty} V'_h \exp(2\pi i h \cdot r) \\
 &= \frac{h^2}{2me} \sum_g U' \exp(2\pi i \cdot g \cdot r)
 \end{aligned}
 \tag{19}$$

となる。この $V(K) + iV'(K)$ について、固有値問題として解き、複素数の $\gamma^{(j)}$ を求めてもよいが、実際には面倒な問題が起きる。しかし V'_g/V_g が極めて小さい場合には、摂動論で近以しても差し支えない。ここでは波動ベクトル $k^{(j)}$ の Z 成分 (ビームの進行方向) の $k_z^{(j)}$ の第一次摂動をとる。即ち $\Delta k_z^{(j)} = i\alpha^{(j)}$ なる $\alpha^{(j)}$ を考えると、各ブロッホ波の振巾 $\psi^{(j)}(r)$ は、それぞれ $\exp(-2\pi\alpha^{(j)} \cdot Z)$ で減衰していく。

$$\alpha^{(j)} = \frac{me}{h^2 |K|} \int |\psi^{(j)}(r)|^2 V'(r) dr
 \tag{20}$$

(20)式に(19)式を代入し整理すると

$$\alpha^{(j)} = \frac{1}{2K} \sum_{g \cdot g'} \psi_g^{(j)*} \cdot \psi_{g'}^{(j)} U'_{g-g'}
 \tag{21}$$

$\alpha^{(j)}$ を吸収係数と呼び、実際の強度計算で使われている。 U'_g は一般には g の関数であるが、便宜上 U_g に比例する小さい量として与える場合が多い。

2.3 結晶の構造因子と温度因子

(11)式の A の非対角要素 U_g は、(5)式で与えられるが他方、温度因子を入れて次のようにも書ける。

$$U_g = \frac{m}{m_0} \frac{e^{-M}}{\pi v_c} F_g
 \tag{22}$$

ここで、 v_c は単位胞の体積、 $m/m_0 = \{1 + eE/(m_0 C^2)\}$ 、 F_g は結晶構造因子で次式で与えられる。

$$F_g = \sum_{j=1}^n f_j^e e^{2\pi i g \cdot r_j}
 \tag{23}$$

r_j は単位胞中の j 番目の原子の位置座標、 f_j^e はその原子に対する電子線の原子散乱因子で、 X 線に対する原子散乱因子 f^X と次のような関係がある。(λ = 電子波の波長)

$$f = \frac{8\pi^2 m_0 e^2}{h^2} \frac{(z - f^X)}{(4\pi \sin\theta/\lambda)^2}
 \tag{24}$$

f^X の値は International Table¹⁵⁾ に載っているが、実用的には、 f^e を散乱角 θ の解析的な関数として与えてある方が便利である。例えば Smith と Burge¹⁶⁾ の方法によると (a = 結晶格子間隔, h, k, ℓ = 整数)

$$f^e(\chi_{hkl}) = \sum_{j=1}^3 A_j e^{-B_j \chi_{hkl}^2}
 \tag{25}$$

$$\text{但し } \chi_{hkl} = \frac{\sin \theta_{hkl}}{\lambda} = \frac{\sqrt{h^2 + k^2 + \ell^2}}{2a}
 \tag{26}$$

Table 1 Cell Constants

Case No. n_R	1	2	3	4	5
Cell diameter S_a (Å)	5.43	3.147	3.615	4.21	4.079
element	Si	Mo	Cu	Mg, O	Au
No. of atoms n_V	8	(b, c, c) 2	(f, c, c) 4	4, 4	(f, c, c) 4
relative Coordinates of atoms in the cell (P_x, P_y, P_z)	Si (0, 0, 0) ($\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$) ($\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$) ($0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$) ($\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$) ($\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}$) ($\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$) ($\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}$)	Mo (0, 0, 0) ($\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$)	Cu (0, 0, 0) ($\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$) ($\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$) ($0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$)	Mg (0, 0, 0) ($\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$) ($\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$) ($0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$) O ($\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$) ($0, 0, \frac{1}{2}$) ($0, \frac{1}{2}, 0$) ($\frac{1}{2}, 0, 0$)	Au (0, 0, 0) ($\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$) ($\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$) ($0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$)

Table 2 Scattering Coefficients $f(X) = \sum_{i=1}^3 A_i e^{-B_i X^2}$

element \ A_i, B_i	A_1	A_2	A_3	B_1	B_2	B_3
Si	2.447	2.359	0.848	4.3317	13.290	1.204
Mo	4.294	3.162	1.263	2.7501	5.103	0.593
Cu	3.535	2.396	0.900	2.6480	4.963	0.590
Mg	2.578	1.599	0.837	6.2166	13.634	1.313
O	0.331	1.359	0.498	5.2839	9.817	1.319
Au	5.849	4.906	2.143	2.9096	5.130	0.571

で、 A_j 、 B_j は各元素に対して値が与えられている。(23)式のMは温度因子 (Debye-Waller 因子) で原子の熱振動により、電子の散乱能が実効的に減少する項を意味している。一般に温度、物質、散乱角に依存し次式で表わされる。

$$M_{hkl} = B_0 \frac{\sin^2 \theta_{hkl}}{\lambda^2} = B_0 \frac{h^2 + k^2 + l^2}{(2a)^2} \quad (27)$$

B_0 の値は各元素に対して International Table に与えられている。

ここで(5)に戻ってこれをマトリックスで表わすと

$$u = \vec{\psi} \cdot \vec{\varphi} \rightarrow \vec{\psi}^{-1} \cdot u = \vec{\varphi} \quad (28)$$

又(7)を同じように表わすと

$$u' = \vec{\psi} \cdot \left\{ e^{2\pi i r^{(j)} z} \right\}_{\text{diagonal}} \cdot \vec{\varphi} \quad (29)$$

従って(28)式より

$$u' = \vec{\psi} \cdot \left\{ e^{2\pi i r^{(j)} z} \right\}_{\text{diagonal}} \cdot \vec{\psi}^{-1} u \quad (30)$$

ここで

$$P = \vec{\psi} \cdot \left\{ e^{2\pi i r^{(j)} z} \right\}_{\text{diagonal}} \cdot \vec{\psi}^{-1} \quad (31)$$

とおくと

$$u' = P \cdot u \quad (32)$$

となる。Pは散乱行列と呼ばれ吸収のない場合には、そのユニタリ性が示されている。これ以降の計算は(11)~(32)式を基本式とし、変位 $R(r)$ を含む不完全結晶の場合を扱うため、これらの式を拡張・変形していく。

2.4 不完全結晶の取扱¹⁴⁾

不完全結晶は、Fig.2のように表面に平行な厚さ δ_z のスライス (薄層) の積み重ねとし、一つのスライスの中での変位は一定と考えて、透過波及び回折波が細い柱状部分に限られている“コラム近以”で扱う。表面よりの深さ z のところの変位 (Displacement すなわちセル内の正常な原子配置よりのずれ) を $R(r)$ とすると、これは(11)式の固有マトリックスAの非対角要素 U_g の構造因子に位相変化をもたらす。

$$U_{g-g'} \rightarrow U_{g-g'} \cdot e^{-2\pi i \cdot \beta_{g-g'}} \quad (g \neq g')$$

ただし、 $\beta_g = g \cdot R(r)$ なので

$$\beta_{g-g'} = (g-g') \cdot R = g \cdot R - g' \cdot R = \beta_g - \beta_{g'} \quad (33)$$

ここで、対角マトリックス Q_m を次のように定義すると

$$Q_m = \left[\exp(2\pi i \beta_g^m) \right]_{\text{diagonal}} \quad (34)$$

Aは $A' = Q_m^{-1} \cdot A \cdot Q_m$ となる。変形された固有マトリックス A' を第 m 番目の薄層について完全結晶の場合のように解いていけばよいが、必要なのは結晶下面での各波の振巾 u'_g であるので、

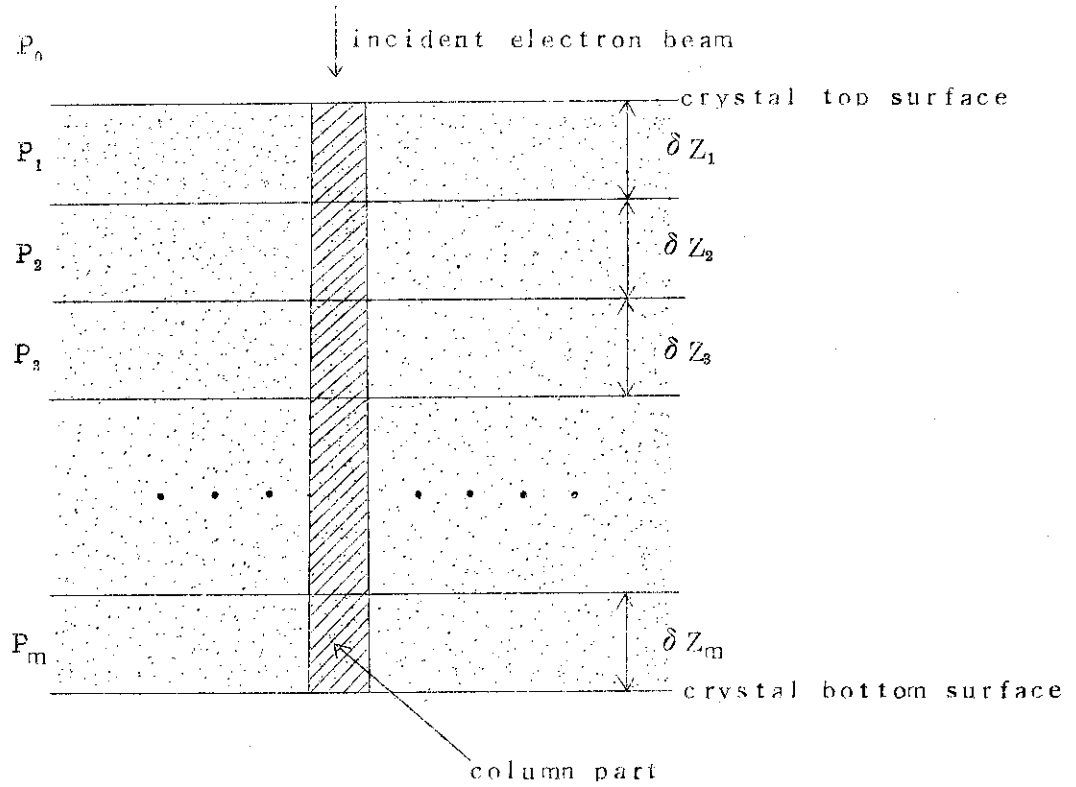


Fig. 2 Column approximation

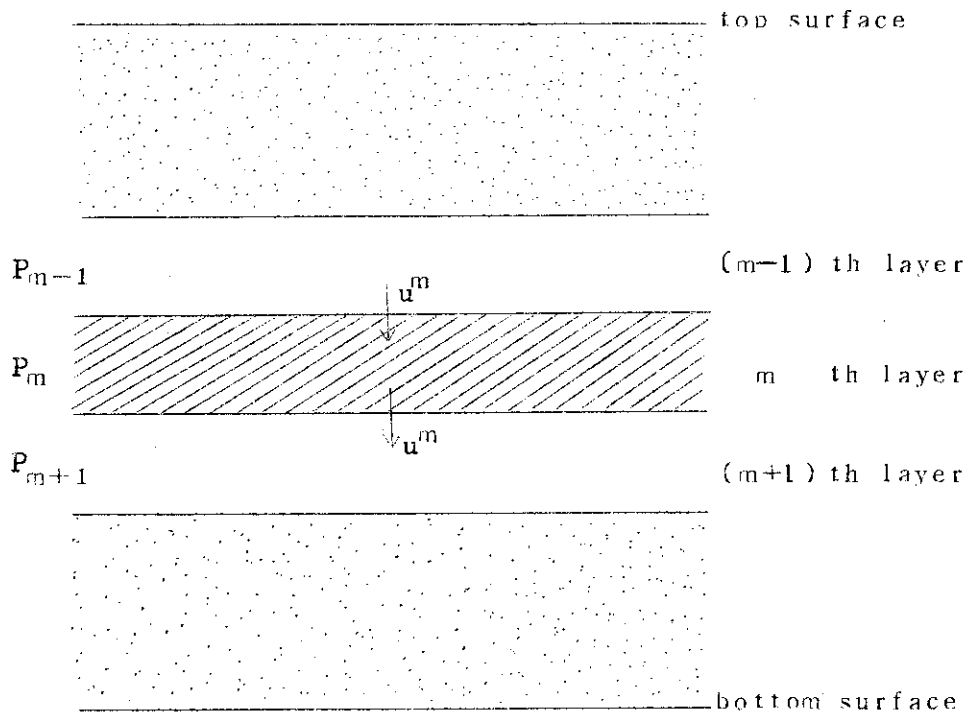


Fig. 3 Approximation of scattering matrix

より簡単な便法がある。(11)式にもどって、左から Q_m^{-1} をかけると

$$Q_m^{-1} \cdot A Q_m \cdot Q_m^{-1} \vec{\psi}^{(j)} = r^{(j)} Q_m^{-1} \cdot \vec{\psi}^{(j)} \quad (j=1, 2, \dots, n)$$

すなわち

$$A' \cdot (Q_m^{-1} \vec{\psi}^{(j)}) = r^{(j)} (Q_m^{-1} \cdot \vec{\psi}^{(j)}) \quad (35)$$

となる。(35)式は、 A' の固有値方程式であるが完全結晶の場合と同じ固有値を持ち、又完全結晶の固有ベクトルに Q_m^{-1} を乗じたものが固有ベクトルとなることを意味している。結晶内の仮想的な薄層(この層内では $R(z)$ は定数とみなされる)の第 $(m-1)$ 層から、第 m 層へ入る波の振巾を要素とするとベクトルを $u_m^{(j)}$ 、第 m 層より第 $(m+1)$ 層へ出ていくそれを u'_{m+1} 、第 m 層の散乱マトリックスを P_m とする(Fig.3参照)。(35)の結果を使って P_m を書くと(31)式より

$$\begin{aligned} P_m &= Q_m^{-1} \vec{\psi}^{(j)} \cdot [e^{2\pi i r^{(j)} \delta z}] \cdot \{Q_m^{-1} \vec{\psi}^{(j)}\}^{-1} \\ &= Q_m^{-1} \cdot \{ \vec{\psi}^{(j)} [e^{2\pi i r^{(j)} \delta z}] \}_{diag} \cdot \vec{\psi}^{(j)} \cdot Q_m \end{aligned}$$

$$P_m = Q_m^{-1} \cdot P_0 \cdot Q_m \quad (36)$$

P_0 は δz の厚さの完全結晶の散乱行列である。従って変位 $R^m(z)$ に対して(35)を一々解く必要はなく、完全結晶について求めた P_0 に、深さ z に応じて変形マトリックス Q_m^{-1} 、 Q_m を両側からかけた散乱行列を使って、強度計算していけばよい。

$$u'_m = P_m \cdot u_m \quad (37)$$

実際の、多様な変位表現も(36)の P_m に変換できるものとして、計算を進める。

2.5 格子欠陥の例

$R(z)$ で表わされる歪みは、現在のプログラムには四つの場合のオプションが準備されている。一般に

$$g_{hkl} = h a_1^* + k a_2^* + l a_3^* \quad (\text{逆格子系表現})$$

$$R(z) = u a_1 + v a_2 + w a_3 \quad (\text{格子系表現})$$

$$\beta = g \cdot R = \frac{1}{2} (u h + v k + w l) \quad (38)$$

$$\text{ただし } a = |a_1| = |a_2| = |a_3|$$

ゆえに u, v, w がそれぞれの歪みに対して与えられねばならない。又歪みの方向や、形状からこれを記述する座標系 (a'_1, a'_2, a'_3) が、通常の格子系 (a_1, a_2, a_3) より回転している方が便利なことがある。この場合三次元の回転 R_{ot} (a_i 系 $\rightarrow a'_i$ 系)を

$$R_{ot} = \begin{pmatrix} \text{Cos}(a_1 a'_1) & \text{Cos}(a_2 a'_1) & \text{Cos}(a_3 a'_1) \\ \text{Cos}(a_1 a'_2) & \text{Cos}(a_2 a'_2) & \text{Cos}(a_3 a'_2) \\ \text{Cos}(a_1 a'_3) & \text{Cos}(a_2 a'_3) & \text{Cos}(a_3 a'_3) \end{pmatrix}$$

とすると、 R_{ot}^{-1} によって a_i 系に戻してから β を計算せねばならない。

(a) 球対称歪

結晶内の一点 $P_0(0, 0, z_0)$ から等距離 $|r_p|$ にある点 $P(x, y, z)$ の変位 $R(z-z_0)$ が等しい場合である(Fig.4参照)。歪の領域を P_0 よりの半径 r_0 と P_0 を原点とす

るベクトル r_p で次のように表わされる。

$$\left. \begin{aligned} |r_p| \geq r_0, \quad R &= \varepsilon \frac{r_0^3 r_p}{|r_p|^3} \\ |r_p| < r_0, \quad R &= \varepsilon r_p \end{aligned} \right\} \quad (40)$$

ε は定数で正の時歪の中心から外へ、負の時逆に外から中心へ向う変位の度合いを表わす。

この場合歪の形状から a_i 系と a'_i 系は常に一致していると考えてよい。 r_p を a_i 系で表現すると

$$r_p = \frac{1}{a} \{ x a_1 + y a_2 + (z - z_0) a_3 \} \quad (41)$$

となり、 β は次のようになる。

$$\left. \begin{aligned} |r_p| \geq r_0 \quad \beta &= \frac{1}{a} \frac{\varepsilon r_0^3}{D^3} \{ h x + k y + l (z - z_0) \} \\ |r_p| < r_0 \quad \beta &= \frac{1}{a} \varepsilon \{ h x + k y + l (z - z_0) \} \end{aligned} \right\} \quad (42)$$

ただし $D = \sqrt{x^2 + y^2 + (z - z_0)^2}$

(b) 積層欠陥 (Stacking fault)

これは、Fig.5 に示したようにある面を境にして結晶が一樣にずれている場合である。すなわち変位を R とし、 $z = p x$ を不連続面とすると (b = バーガース、ベクトル)

$$\left. \begin{aligned} z \leq p x, \quad R &= 0 \\ z > p x, \quad R &= b \end{aligned} \right\} \quad (43)$$

(a) の場合と同じく b および g を格子空間および逆格子空間で表わすと (h, k, l, h', k', l' , は整数, $0 \leq \alpha \leq 1$)

$$\begin{aligned} b &= \alpha (h' a_1 + k' a_2 + l' a_3) \\ g &= h a_1^* + k a_2^* + l a_3^* \end{aligned}$$

となり $\beta (= g \cdot R)$ は次のようになる。

$$\left. \begin{aligned} z \leq p x, \quad \beta &= 0 \\ z > p x, \quad \beta &= \alpha (h h' + k k' + l l') \end{aligned} \right\} \quad (44)$$

(c) ラセン状転位 (Screw dislocation)

バーガース・ベクトル b の方向 (結晶のすべりの方向) と転位線方向が平行な場合で、この転位線のまわりの原子はラセン状に配列している (Fig.6 参照)。

L 系で記述した変位ベクトル R の各成分は

$$\left. \begin{aligned} R_X &= \frac{b}{2\pi} \tan^{-1} \left(\frac{Z}{Y} \right) \\ R_Y &= 0 \\ R_Z &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (45)$$

となる。ここで $b = |b|$ で転位線方向を X 軸としている。

(d) 刃状転位 (Edge dislocation)

b と転位線方向が垂直な場合で、丁度格子点の間に上半分の余分な原子面を一枚入れたよ

うな状況となり、その下端に転位線がつくられる (Fig.7 参照)。

NabarroによるとRの成分は次のように表わされる。

$$R_X = 0$$

$$R_Y = \frac{b}{2\pi} \left[\tan^{-1} \left(\frac{Z}{Y} \right) + \frac{Y \cdot Z}{2(1-\nu)(Y^2+Z^2)} \right] \quad (45)$$

$$R_Z = -\frac{(1-2\nu)b}{8\pi(1-\nu)} \ln \left(\frac{Y^2+Z^2}{b^2} \right) + \frac{b}{4\pi(1-\nu)} \frac{Z}{Y^2+Z^2}$$

ただし転位線の方法はX軸方向としており、 $\nu = \frac{1}{3}$ である。

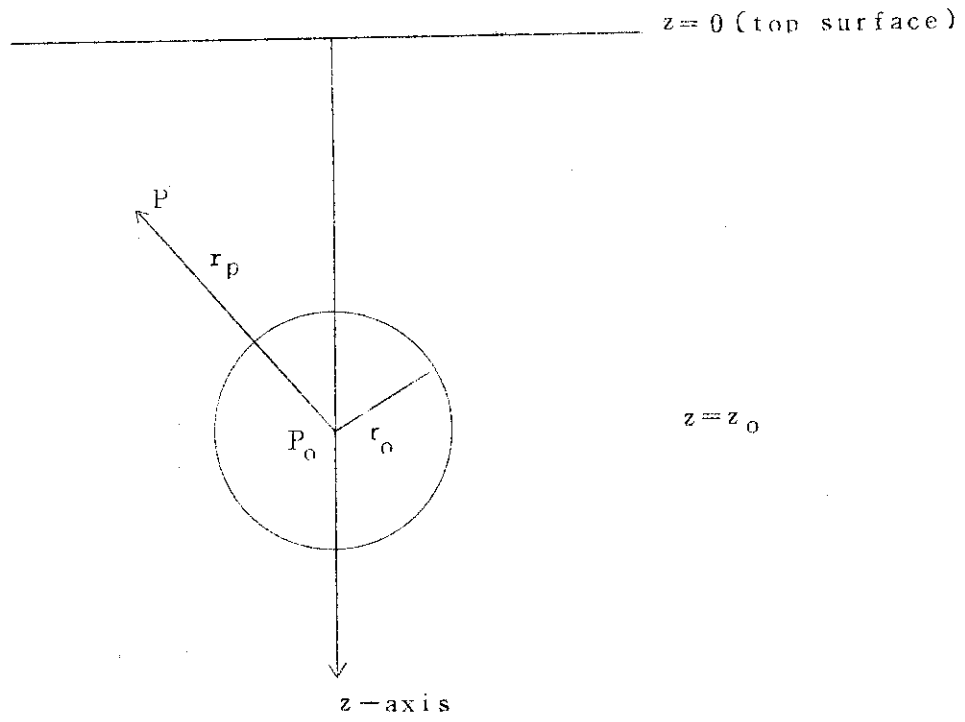


Fig. 4 Spherical symmetric deformation

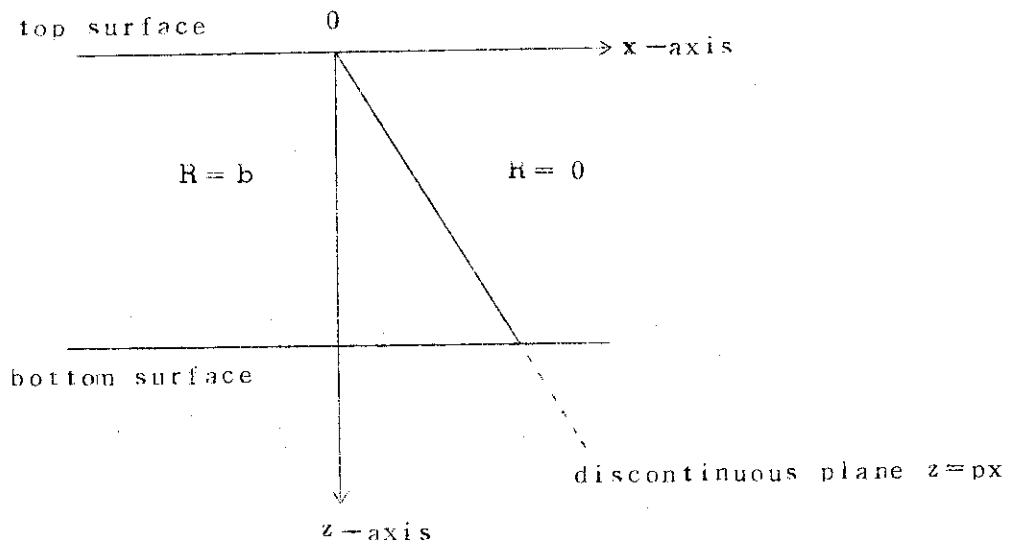


Fig. 5 Stacking fault

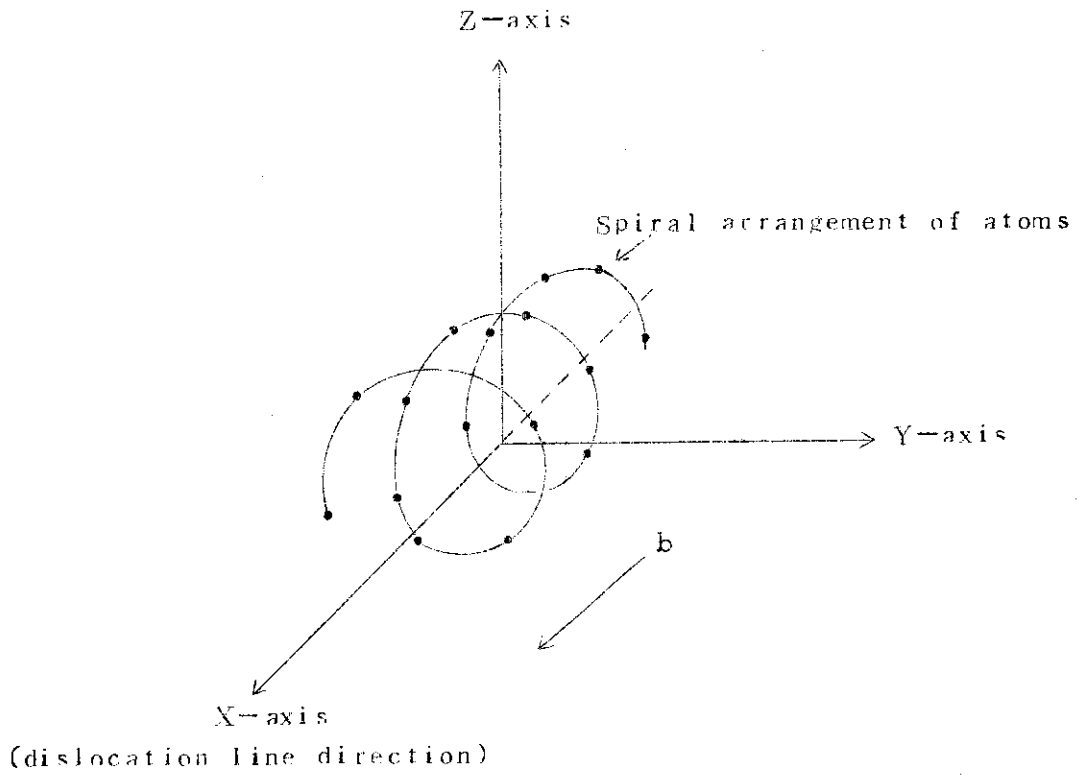


Fig. 6 Screw dis location

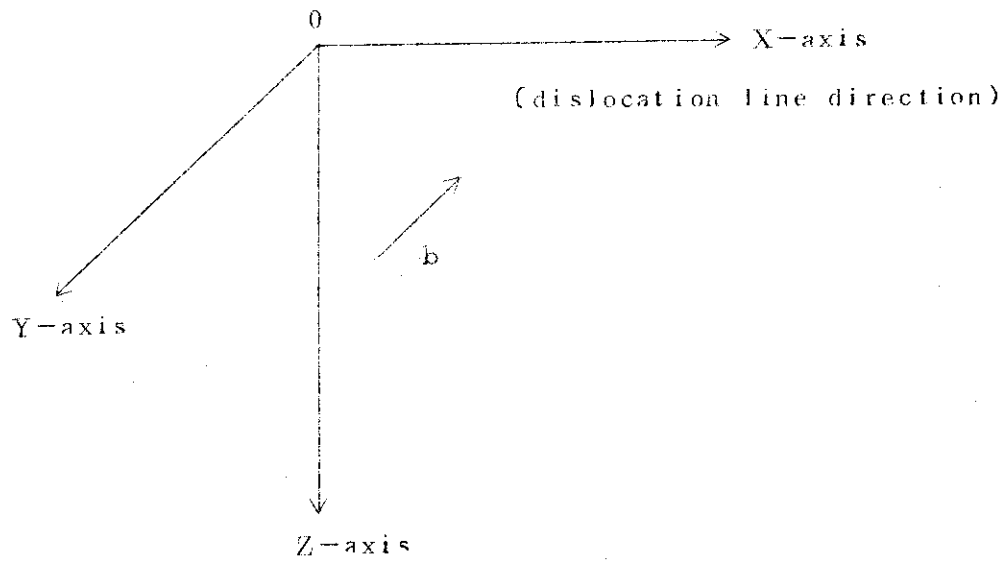


Fig. 7 Edge dislocation

3 プログラム・システム

3.1 全体的流れ

ここでは、前章で述べた“マトリックス理論を主軸にした各種の計算とデータ処理を効率よく行うために開発したプログラム・システム(MSCOPE-I)”について述べる。このシステムは、多くのサブルーチンに分類されているが、それは問題の内容や計算方法の関連をプログラミングの表現上で、より適確に把握するための機能的な分類であり、一種のモジュラー・システム¹⁷⁾といえよう。それ故実際の計算で、いくつかのサブ・ルーチンを選んで計算に入った時、その計算Pathの内容が容易に見通せる。又このようにモジュール化することによって、将来色々なケースの計算や、部分的な計算方法の改良を必要とする場合に速かに組込めるようになっている。更にこのシステムは、観察像の画像処理からパターン認識へ発展させるような場合も有効に利用出来るよう考慮されている。なおこのシステムは、FACOM230-60及びCALCOMPプロッターを対象として作られている。

Fig.8は、MSCOPE-Iに含まれる全ルーチンとその関連を示したもので、サブルーチンにはその内容を表わすような名前をつけてある。点線で結びついているのは、そのルーチンだけで使われる衛星ルーチンであるが、内容が細分化されているので、逆に汎用性の大きいものがある(例えば、“ARRANG”はあるデータの集合を大小順に再配列する)。システム全体で利用される汎用ルーチンは、“MAIN”ルーチンの衛星ルーチンとする。ここで“CHSQRS”と“HESQRS”はQR法による固有値問題の数値解法ルーチンで、FACOMのS.S.L.(科学用サブルーチン・ライブラリー)に登録されたものを使っている。

実際の計算では、次の二つのPath(a), (b)が主に使われる。

(a) データの読み込み → 固有行列を求める → 固有値, 固有ベクトルを求める →
→ 結晶下面の強度分布 → プロッター表示

例えば (MAIN)-(DATAIN)-(MATRIX)-(EIGENS)-(BCFIT)-
-(ABSORP)-(DEFORM)-(DSET2)-(GRAPH)

ここで強度分布は座標のとり方によっては多量のデータとなるので、プロット以前に一旦テンポラリー・ディスクにしまってからFig.8に示してあるようにlocal loop (I)で必要なデータを読み出してプロットする。一回の計算で色々な厚さに対応した出力面上の強度分布を求めることも可能である。又変位Rは、格子欠陥の構造によって多様な表現が考えられるので、今後も新たな“欠陥の表現”をオプションとして付け加え易いよう、独立のルーチン“INCLUDE”にまとめてある。

(II)

(b) データの読み込み → 固有行列を求める → 固有値を求める →
→ 分散面等をプロットする

例えば (MAIN)-(DATAIN)-(MATRIX)-(EIGENS)-(BCFIT)-
-(ABSORP)-(PERFCT)-(DATAST)-(DISPRS)

これは、電子の入射条件に応じて固有行列をパラメトリックに変え、loop (II)によって

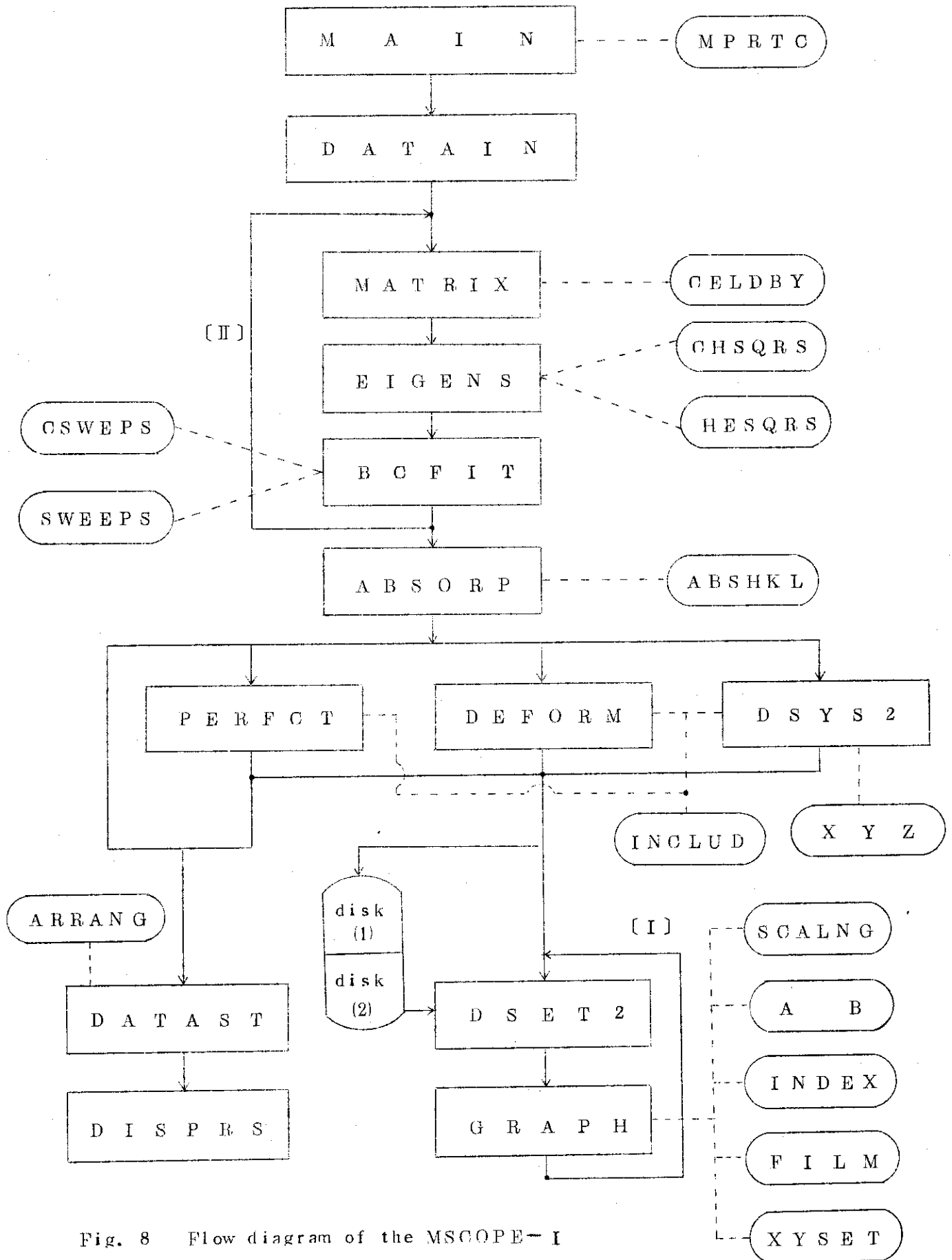


Fig. 8 Flow diagram of the MSCOPE-I

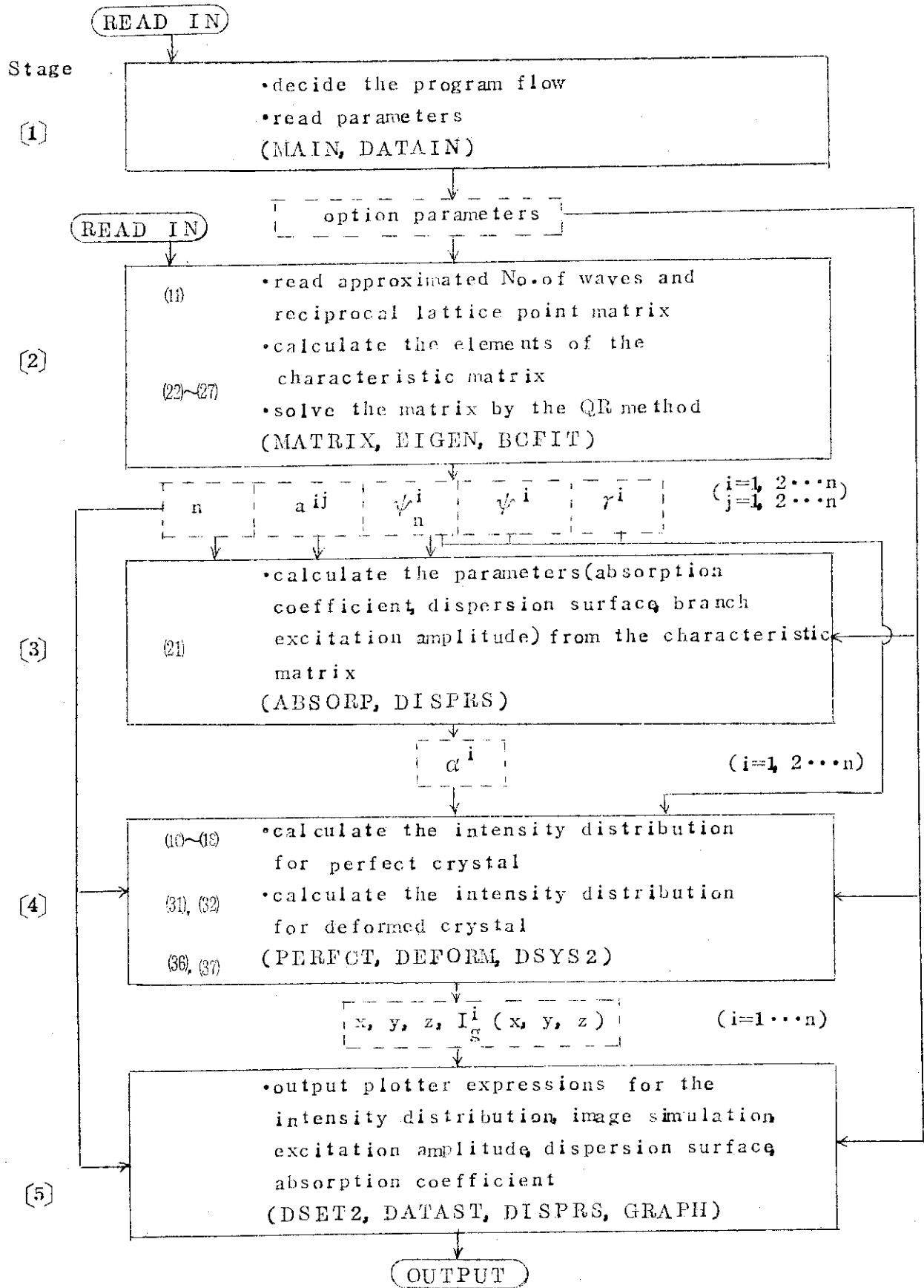


Fig.9 Classification of subprograms and flow of main data

くりかえし固有値を求めて、分散面、吸収係数及び励起振巾の変化などを求める (Fig. 8 参照)。

又このシステムを前に述べたような“プログラムの機能”によって大分類し、その間の主なデータのやりとりを示したのが、Fig. 9である。データのやりとりは原則として、バス全体に関連するものは、メインプログラムにおける実引数によって、ローカルなものは、labeled COMMONで行われる。なお、Fig. 9に書かれているデータの記号は以下のようになっている。

- n : 近以した波の数
- a_{ij} : 固有行列 ($i=1, 2, \dots, n$, $j=1, 2, \dots, n$)
- γ^i : 固有値
- ψ_n^i : 正規化された固有ベクトル
- ψ^i : 境界条件に合わせた固有ベクトル
- α^i : 吸収係数

(x, y, z) : 結晶内の点の座標

$I_j^i(x, y, z)$: その点の i 番目の波の強度

3.2 入力形式

MSCOPE-Iで使われる入力データは、次の3種類に分けられる。

- (i) サブ・ルーチン“DATAIN”で読み込まれるカード・データで、計算バスやオプションを設定するパラメータや結晶内の座標系の定義メンションを決める量である。
- (ii) 対象となる系の固有マトリックスを求める際に必要な、近以の度合に従って回折に関与する逆格子点の情報、及び結晶セル内の原子配置のオプション、ドブラー効果のための温度などで、サブ・ルーチン“MATRIX”で読まれる。
- (iii) 各種の定数や、ケースのパターンなどでDATA文の形で内蔵されており、パラメータの指定によって、簡単に呼びだせる。例えば上述の“MATRIX”は“CELDBY”というデータ・ルーチンを持っている。

(i) の場合

<CARD 1> FORMAT (20I3)

IPATH バスの設定

- = 1 不完全結晶で球型歪及び積層欠陥の場合
- = 2 分散面、吸収率、励起振巾の計算
- = 3 完全結晶の場合
- = 4 不完全結晶で歪の記述に座標変換を要する場合
- = 5 完全結晶の下面 $z=z_0$ での強度 $I_G(z_0)$ の k_{0x} 依存性

IOPT バス内オプションの決定

IPATH = 1 の時

- = 1 球対称歪のオプション
- = 2 積層欠陥のオプション

IPATH = 2 の時

- = 1 係数 S_g を横軸座標として入力する。
- = 2 加速電圧 E を横軸座標として入力する。
- = 3 係数 S_g を最小値 S_{g0} と増分 ΔS_g を入力して、プログラム内で計算させる。
(後述のカード E-3 参照)。

IPATH = 3, 4 の時

= 1

IPATH = 5 の時

= 3

ICASE 計算ケースの数

IPATH = 1 の時 : 球型歪の中心の結晶表面よりの距離の場合数

IPATH = 2 の時 IOPT = 1 : 係数 S_g の点の数

IOPT = 2 : 加速電圧 E の点の数

上記以外は ICASE = 1

IRCOT

= 1 固有マトリックスが複素マトリックス

= 2 " が実数マトリックス

IAB

= 0 吸収を考慮しない場合

≠ 0 擾動法によって吸収を考慮する場合

IPOUT

= 1 分散面と同時に完全結晶における $I(z)$ の k_{0x} 依存性を計算する。

≠ 1 上記の $I(z)$ を計算しない。

IPF

= 1 完全結晶及びスタッキング・フォールトでの電子波強度分布を求める。

= 2 球対称の歪みを持つ結晶内での電子波強度分布を求める。

= 3 結晶内に固定された座標系と歪みを記述する系の間座標変換が必要な格子欠陥の場合を扱う。

IPLOT プロットングのオプション

IPATH = 1, 3 の時のみ有効

= 0 プロットせず

= 1 結晶表面に垂直な z 軸上の電子波強度分布をグラフに画く。

= 2 結晶上面に平行な結晶内の面内の x 軸に沿って、電子波強度分布をグラフにプロットする。

= 3 同じく y 軸に沿ってプロットする。

= 4 この面上の強度の二次元分布をコントラスト像にシミュレートする。

= 6 1, 2, 3, 4 の場合を同時に行う。

(強度分布のグラフは透過波、反射波のうち二つずつ一つのグラフにプロットしている。)

INCOPT 格子欠陥のオプション

- = 1 球対称歪み
- = 2 スクリュー・ディスロケーション
- = 3 エッジ・ディスロケーション
- = 4 スタッキング・フォールト

IFF 吸収係数のオプション

- = 1 吸収係数を求める際固有マトリックスのエンメントにかかる比率が定数の場合
- = 2 比率が逆格子点の座標の関数である場合

これより後のカード群 A, B, C, D, E は IPATH, IOPT, IPLOT の値に対応したもののだけを選べばよい。

(カード群-A) IPATH=1に対応する

(A-1) FORMAT(20I3)

- n_x x軸上のメッシュ点数 (≤ 70)
- n_y y軸上のメッシュ点数 (≤ 70)
- n_z z軸上のメッシュ点数 (≤ 120)

(A-2) FORMAT(6E12.5)

- x_{min} x軸の最小値
- Δx x軸のメッシュ巾
- y_{min} y軸の最小値
- Δy y軸のメッシュ巾
- Δz z軸のメッシュ巾
- z_{out} 結晶の厚さ

(A-3) FORMAT(6E12.5)

E (1) 加速電圧 (MV単位)

C_{input} 入射波動ベクトルの入射条件を示すパラメータ (Fig.10 参照)

I_n (1) $-\vec{g}$ の第 1 成分

I_n (2) $-\vec{g}$ の第 2 成分

I_n (3) $-\vec{g}$ の第 3 成分

(後述の (E-3) の項を参照)

IOPT=1で球対称歪の場合

(A-4-1) FORMAT(6E12.5)

ϵ 球対称歪みの定数

r_0 " の半径

$v(I)$ " の中心から結晶表面までの距離

($I=1, 2 \dots ICASE$)

IOPT=2でINCOPT=4(スタッキング・フォールト)の場合

(A-4-1) FORMAT(6E12.5)

Bagas(1) バーガース・ベクトルの X成分

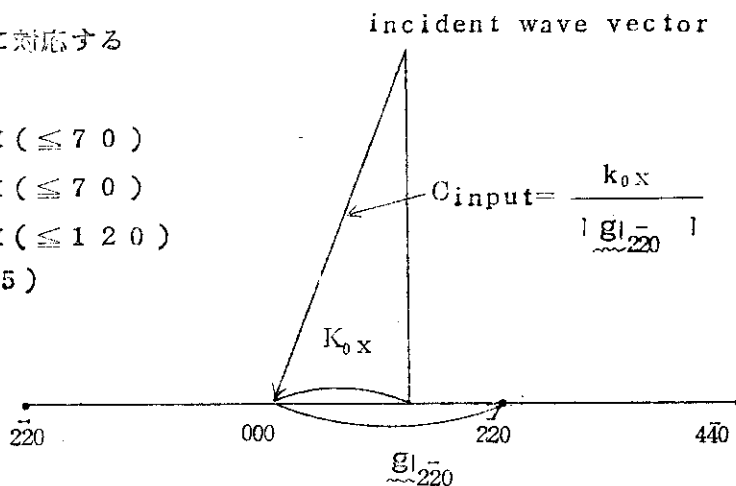


Fig.10 Incident wave vector and reciprocal lattice points

Bagas (2)	バーガス・ベクトルの Y 成分
Bagas (3)	" Z 成分
(カード群-B)	IPATH = 3 に対応
(B-1)	FORMAT(20I3)
n_z	Z 軸のメッシュ点の数
(B-2)	FORMAT(6E12.5)
ΔZ	Z 軸のメッシュ間隔
(カード群-C)	IPATH = 4 に対応
(C-1)	FORMAT(20I3)
K_{max}	L系 Y 軸のメッシュ点の数
n_z	S系 z 軸の "
(C-2)	FORMAT(6E12.5)
Y_{min}	L系 Y 軸の最小値
ΔY	L系 Y 軸のメッシュ巾
Z_{out}	S系 z 軸の最大値 (結晶の厚さ)
Δz	S系 z 軸のメッシュ巾
(C-3, 4)	FORMAT(6E12.5)
Rot(i, j) ((i=1, 3), j=1, 3)	S系→L系の回転マトリックス
(C-5)	
x_{to}	L系における " Deform " の中心の x 座標
y_{to}	L系における " Deform " の中心の y 座標
z_{to}	L系における " Deform " の中心の z 座標

ここで、S系は結晶上面に固定された逆格子系で、L系は、記述の簡便上欠陥の中心に固定されたデカルト座標系である。S系とL系の原点は一致しているが、座標軸は一般に三次元的に回転しており、(9)式に示したように、回転マトリックス " Rot " の要素 $\cos(\theta_{ij})$ は、一般にS系の i 軸とL系の j 軸の間の方向余弦である。

(カード群-D) プロットングを行う時必要な入力

IPLOT = 1 の時

(D-1) FORMAT(6E12.5)

$\left. \begin{matrix} x_z \\ y_z \end{matrix} \right\}$ S系の点 $(x_z, y_z, 0)$ を通り z 軸に平行な線上の強度分布をプロットする。

IPLOT = 2 の時

(D-2) FORMAT(6E12.5)

y_{line} $z = z_{out}, y = y_{line}$ の時の x 方向分布をプロットする。

IPLOT = 3 FORMAT(6E12.5)

x_{line} $z = z_{out}, x = x_{line}$ の時の y 方向分布をプロットする。

IPLOT = 4 の時

(D-4-1) FORMAT(2GI3)
 IFIL コントラスト像の明暗段階の区切り方のオプションを表わす。
 NN 明暗段階のメッシュのすべてに 10^{NN} 倍する。

(D-4-2) FORMAT(6E12.5)

このカードは IFIL=4 の時のみ必要

UPCUT 明暗の上限
 UNCUT 明暗の下限

ここで、IPLOT=6 の場合は、IPLOT=1, 2, 3, 4 を同時にプロットする場合で、D-1, 2, 3, 4 のすべてのカードが必要である。

(D-5-1) FORMAT(2OI3)

IGT1 = 7
 IGT2 1つの図にプロットしたい波の数(但し、今のところ IGT2=2)

(D-5-2~8) FORMAT(2OI3)

IGT1枚 { IGT(i, j) (j=1, IGT2)

 各オプション毎にプロットする波の組合せ表

例として4波近以て IPLOT=6 の時の IGT を以下に示す。

IGT2ケース

IGT1枚	1	3	} z 分布組合わせ
	2	4	
	1	3	} x 分布組合わせ
	2	4	
	3	1	} y 分布組合わせ
	4	2	
	1	4	} コントラスト像指示

I3 I3

第1ケース 第2ケース

この例では、z 分布は第1波と第2波、x 分布は第1波と第2波、y 分布は第3波と第4波、コントラスト像は第1波と計4図を第1ケースとしてプロットする。続いて第2ケースも同じように3と4、3と4、1と2、4の組合せで出力する。IPLOT=1, 2, 3, 4 の時には、該当の所にデータをパンチする以外はダミーとして0をパンチする必要がある。

(カード群-E) IPATH=2 に相当

IOPT=1の時分散面、吸収係数、励起振巾などを求める。

(E-1-1~) FORMAT(6E12.5)

E_c ビームの加速電圧固定値
 $S_g(I)$, (I=1, ICASE) $k_{ex} / |n|$ の比率メッシュ点

(E-2-1~) FORMAT(6E12.5)

IOPT=2の時分散面、吸収係数、励起振巾の加速電圧分布を求める。

K_{oc} $k_{ox} / |l_n|$ の固定値

$E(I), (I=1, ICASE)$ 加速電圧メッシュ

$I OPT = 3$ の時, $Z = z_{out}$ の電子波強度の k_{ox} 依存性を求める。

(E-3) FORMAT(6E12.5)

E_c 加速電圧固定値

S_{go} $k_{ox} / |l_n|$ の最小値

ΔS_g $k_{ox} / |l_n|$ のメッシュ巾

例として Fig.10 の場合を考えると, $l_n = -g_{z0}$, $s_{go} = k_{ox} / |l_n| = 0.5$ である。又 S_{go} はカード(A-3)の $Cinqt$ と同じ値である。

(カード群-F) これは固有行列に関するデータでどのオプションでも必要である。

(F-1) FORMAT(20I3)

n 近以する波の数

(F-2) FORMAT(20I3)

n_R 単位セル内の原子配列ケース・ナンバー (Tabbl 1参照)

n_v 単位セル内の原子総数

(F-3) FORMAT(8F10.5)

T_{DBY} デバイ効果のパラメータ (温度)

(F-4 ~ (3+n)) FORMAT(8(3I3, 2X))

$n_{PL}(IQ, JQ, NQ)$

(IQ=1, 3), (JQ=1, n), (NQ=1, n)

: 逆格子点マトリックス入力

2波近以の場合は $n = 2$ で以下のようなになる (Fig.10参照)。

	第 1 列	第 2 列
第 1 行 カード 1	0 0 0 -2 2 0	
第 2 行 カード 2	2 -2 0 2 -2 0	
	3 I 3 2 X	3 I 3 2 X

ここで $n_{PL}(1, 2, 2) = 2$, $n_{PL}(2, 2, 2) = -2$

$n_{PL}(3, 2, 2) = 0$ の様にストアされていく。

3.3 出力形式

(i) 入力データ及びパラメータのリスト・アウト

- (a) 結晶格子の単位セルを構成する原子の種類と座標
- (b) 固有値マトリックスを作るための逆格子点マトリックス
- (c) 各種のパラメータ (順不同で随時リストされる)

GNUMBER : 近以する波の数

PATH : 計算パス

OPTION : 計算パス内オプション番号

CASE : 計算ケース数

IN-VECTOR RATIO	:	$k_{ox} / k_n $
$M(E) / M_0$:	加速電圧 E の時の電子の質量と静止質量の比
ACCELERATE VOLTAGE	:	電子の加速電圧
WAVE VECTOR	:	結晶に入射した電子の波数
EPSILON	:	球対称の歪の比例係数
V	:	球対称の歪の中心の表面よりの距離
R_0	:	球対称の歪の半径

(ii) 出力データのリスト・アウト

- (a) 実際に解かれる固有マトリックス
- (b) 固有値, 固有ベクトルのマトリックス (各列が固有ベクトル)
- (c) 各ブランチへの励起振巾と各波の吸収係数
- (d) プロットされる曲線のバック・データ

(iii) 結晶内電子波の強度分布のプロット

第 n 波の強度を $I_g^{(n)}$, 結晶の表面に固定された座標系を (X, Y, Z) とすると, $(I_g^{(n)} - Z)$ 分布, $(I_g^{(n)} - X)$ 分布, $(I_g^{(n)} - Y)$ 分布がプロットされる。又 $Z = Z_{out}$ のコントラスト像の模倣図もオプションにかける (計算例の項参照)。

(a) オプション・パラメータの出力

(b) 電子波の強度の結晶内分布の出力

- ・ 出力面とその上の座標の最小値, メッシュ間隔, メッシュ数, 電子の入射条件, 加速電圧
- ・ 球型歪の場合 …… ひずみ定数, 球の半径, 球の中心の座標
- ・ `stackug fault`, その他の格子欠陥の場合
 …… `バーガース・ベクトル`, 回転マトリックス

(c)(b) のプロットイング (球型歪と `stacking fault` の場合のみ)

- ・ プロットする波の組合わせ表 (1つのグラフに2曲線しか書けない)
- ・ z 方向 (進行方向) の分布 …… z - 直線の $x-y$ 平面上の位置
- ・ x 方向 (出力面上) の分布 …… x - 直線の y 座標
- ・ y 方向 (出力面上) の分布 …… y - 直線の x 座標
- ・ $x-y$ 面 (出力面) のコントラスト像 …… `コントラスト・メジャー` のパラメータ

(d) 分散面, 吸収係数, ブランチ励起振巾の計算とプロット

- ・ 定加速電圧の場合 …… 加速電圧, S_g (任意のメッシュ点の場合)
 …… 加速電圧, S_g (等間隔のメッシュ点の場合)
- ・ 定入射条件の場合 …… S_{gc} , 加速電圧のメッシュ点
- ・ アウトプットの場合を決めるパラメータ

3.4 サブルーチンとフロー・チャート

この節では, 各ルーチンの内容及び機能について簡単に説明する。詳しいフロー・チャートは付録に載せてあるが変数名は第2章で述べた変数及び前述の入出力形式の項で説明した変数名と一致させてある。それ以外のものについては必要に応じて説明する。

※ MAIN ※

計算には dummy で, CALL文, IF文, DO文などによって計算の流れを決め, 同時に実引数によってデータの対応をつける。これによって計算のパス全体が見通せる。

※ DATAIN ※ (付録1参照)

入力データはほとんどここで集中的に読込まれるが, パス全体を制御するパラメータの値は仮引数によって" MAIN "へ, それ以外のデータは必要に応じて各ルーチンへ, ラベル付の COMMONで送られる。詳しいデータの読み込ませ方は入出力の項で述べたが, 計算の出来るケースの内容とそれに必要なインプットとの対応を概略まとめる。

なお, このルーチンには, 加速電圧を波数に変換する式を内蔵している。

$$K = Q \cdot \sqrt{2m_0 e E (1 + eE / (2m_0 c^2))}$$

ここで, Eは加速電圧, Qは e.s.u 単位系からの換算係数である。

※ MATRIX ※ (付録2参照)

まず, 次のデータを入力する

- (i) 波の数 ... 対象とする回折波に対応する逆格子点の数
- (ii) セル因子のオプションを決めるパラメータ
- (iii) 固有マトリックスに対応する逆格子点の座標の行列

{ $n_{PL}^{i,j,k}$ } 逆格子点を $\vec{g}_j (h_j, k_j, l_j) (j = 1 \dots n)$ とすると

・ 対角要素 $\dots i = j = 1$: 原点, $n_{PL}^{i,j,k}(1) = n_{PL}^{i,j,k}(2) = n_{PL}^{i,j,k}(3) = 0$

$i = j \neq 1$: 対象とする逆格子点 \vec{g}_j

$n_{PL}^{i,j,k}(1) = h_j, n_{PL}^{i,j,k}(2) = k_j, n_{PL}^{i,j,k}(3) = l_j$

・ 非対角要素 $\dots i \neq j$: ベクトル $(\vec{g}_i - \vec{g}_j)$ の成分

$n_{PL}^{i,j,k}(1) = h_i - h_j, n_{PL}^{i,j,k}(2) = k_i - k_j, n_{PL}^{i,j,k}(3) = l_i - l_j$

例えば, Fig.10 で 2 波近以の場合 ($i, j = 1, 2$)

$$(n_{PL}^{i,j,k})^{i,j} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -2 & 2 & 0 \\ 2 & -2 & 0 & 2 & -2 & 0 \end{bmatrix}$$

以上のデータから第2章(2), (3)式に従って対角要素及び非対角要素を夫々計算し, 固有行列を求める。前述の DATAIN の項の (iv) の場合のように, 入射条件をパラメトリックに与える時には対角要素のみが変えられるように工夫されている。同様に加速電圧依存性を求める場合も各加速電圧点 E_i で, base となる固有行列の各要素に夫々電子の質量比 $m(E_i)/m_0$ を乗ずるようになっている。

$$m(E)/m_0 = 1 + 1.9576 \times E \quad (E: \text{Mev})$$

※ CELDBY ※ (付録3参照)

MATRIX の附属サブルーチンであり, (2), (3), (5), (7)式によって, セルの構造因子や温度因子から非対角要素を計算する。Table 1 および Table 2 に内蔵するデータを示す。

※ EIGENS ※ (付録4参照)

固有行列の要素が実数と複素数の場合に分けて夫々セットし, S.S.L(QR法)を呼んで固有値 $\gamma^{(j)}$ 及び固有ベクトル $\vec{v}^{(j)}$ を求める。

※ BCFIT ※ (付録5参照)

固有ベクトル $\vec{\psi}^{(j)}$ の規格化を行う。又完全結晶の場合の境界条件($z=0, u_1=1, u_2=u_3=\dots=u_n=0$)を充す固有ベクトルと各ブランチの励起振巾を求める。

※ ABSORP ※ (付録6参照)

摂動近以によって吸収係数 $\alpha^{(j)}$ を計算する(21式参照)。

※ ABSHKL ※ (付録7参照)

ABSORPの附属サブルーチンで、 U'_g を一般に逆格子点の座標(h', k', l')の関数として与えるためのルーチンである。今の所は U_g に比例する小さな量にとつてある。

※ DEFORM ※ (付録8参照)

これは、球対称歪みのある結晶の下面での電子波の強度を求める場合に使うサブルーチンで、その手順は概略以下の通りである。

- (i) 空間座標の三重ループ設定((z ・ループ), x ・ループ), y ループ)。
- (ii) 歪の中心から遠い所と近い所で z 方向のメッシュを自動的に切り換える。
- (iii) 完全結晶の散乱行列 P を求める。
- (iv) Q, Q^{-1} によって変位を持った仮想的なSlab m の散乱行列 P'_m を求める。
- (v) 同時に吸収も考慮して各点での強度を計算する。
- (vi) 必要に応じて、強度分布をディスクにしまう。

なお同じような機能をもつルーチンとして“PERFECT”(完全結晶とスタッキング・フォールト)及び“DSYS2”(その他の転位の場合)があるが、これらは内容が似ているので、説明とフローチャートは省略する。

※ INCLUD ※ (付録9参照)

格子欠陥はある広がりや方向性を持ったことが多いが一般的な表現はなく、個々のケースに応じた表現の方が便利である。このサブルーチンは(3)式に従い、各変位に応じて結晶内の点(x, y, z)での $\beta^{(j)}$ を計算する。球型歪み、スタッキング・フォールト、screw dislocation, edge dislocationの4種類について準備されている。なお欠陥は単独のもののみ対象とし複合事象は扱えない。

最終的には $Q = \{ e^{2\pi i \beta^{(j)}} \}, Q^{-1} = \{ e^{-2\pi i \beta^{(j)}} \}$ を出力する。

※ DSET2 ※ (付録10参照)

これは、ディスク [1] 及び [2] にしまわれている強度分布のデータを読んで、プロット専用のarrayに必要なデータだけを並べる。 z 方向、 x 方向、 y 方向、 $x-y$ 面の4種類にセットできて“GRAPH”に送られる。ただし1つのグラフには2つの波($x-y$ 面では1つの波)しか書けないので多くの波を扱う場合、又は別の方向や面も続いてプロットしたい時には、くりかえしディスクを読んでデータをセットしなければならない。なお、DATASTはディスクを使わないが、やはりプロッター・ルーチンの前処理でほとんど内容は同じなので説明を省略する。

※ GRAPH ※

付録11に示したフロー・チャートに詳しく説明してあるので省略する(DISPRSも省略)。

4 数 値 計 算 例

4.1 完 全 結 晶

(a) 珪素の完全結晶の $(\bar{2}20)$ 系統反射で4波近似, 電子の加速電圧 1 MV (入射波の波数であらわすと $K=114.7$) の場合

(インプット)

IPATH=2, IOPT=3, ICASE=21

IRCOT=1, IAB=0, IPOUT=0,

IPF=0, IPLOT=0, INCOPT=0, IFF=1, $E_c=1.0$, $S_{g0}=0$,

$\Delta S_g=0.05$

$n=4$, $n_R=1$, $n_V=8$ (Table 1 参照), $T_{DBY}=293$, (n_{PL} は略す)

(アウトプット)

(1) 単位胞中の原子の座標, 逆格子点行列, 固有行列, 固有値, 固有ベクトル, 吸収係数などのリスト

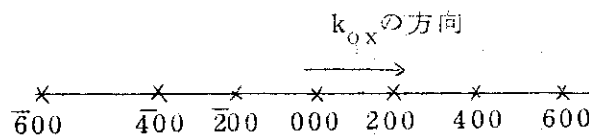
(2) 分散面の断面図 ($\gamma^{(i)}$ の k_{OX} 分布) (Fig. 11)

(3) 吸収係数 ($\alpha^{(j)}$ の k_{OX} 分布) (Fig. 12)

(4) 励起振巾 ($\psi_n^{(j)}$ の k_{OX} 分布) (Fig. 13)

添字 j の番号は各波が属している分散面の各枝 (branch) に対応してつけられたものである。

(b) 銅の完全結晶の (200) 系統反射で7波近似, 加速電圧 1 MV ($K=114.7$) の場合



(インプット)

IPATH=5, IOPT=3, ICASE=101, IRCOT=1, IAB=1, IPOUT=1,

IPF=1, IPLOT=0, INCOPT=0, IFF=1, $E_c=1.0$, $S_{g0}=0$, $\Delta S_g=0.02$,

NPOUT=1, IPOUT=1, $n_z \left\{ \begin{matrix} 2 \\ 0 \\ 4 \end{matrix} \right\}$, $\Delta z=50$

$n=7$, $n_R=3$, $n_V=4$ (Table 1 参照), $T_{DBY}=293$, (n_{PL} は省略)

(アウトプット)

(1) (a-1) と同じ

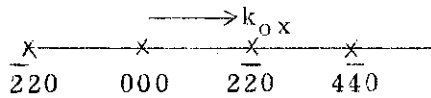
(2) 厚さ $Z=1000 \text{ \AA}$ の結晶からの I_{000} と I_{200} の k_{OX} 依存性

(等傾角干渉縞の強度分布) (Fig. 14)

(3) 厚さ $Z=2000 \text{ \AA}$ の結晶からの I_{000} と I_{200} の k_{OX} 依存性 (Fig. 15)

4.2 不完全結晶

(a) モリブデンの結晶に球対称の歪み(歪みの中心 $Z=600\text{\AA}$)があり、 $(2\bar{2}0)$ 系統反射、4波近似、加速電圧1MVで解いた場合



(インプット)

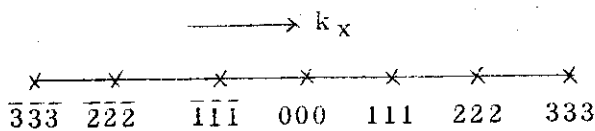
IPATH=1, IOPT=1, ICASE=1, IRCOT=2, IAB=1, IPOUT=0,
 IPF=2, IPLOT=6, INCOPT=1, IFF=1, $n_x=20$, $n_y=20$, $n_z=50$,
 $x_{min}=-100$, $\Delta x=10$, $y_{min}=-100$, $\Delta y=10$, $\Delta z=50$, $z_{out}=2500.$,
 $E(1)=1$, $C_{input}=0.5$, $I_n(1)=-2$, $I_n(2)=0$, $I_n(3)=0$, $\epsilon=0.05$, $r_0=50$, $v(1)=600.$,
 $x_z=10$, $y_z=0$, $y_{line}=0$, $x_{line}=0$, IFIL=3, NN=0, IGT1=7, IGT2=2
 IGT(1,1)=1, IGT(1,2)=3, IGT(2,1)=2, IGT(2,2)=4,
 IGT(3,1)=1, IGT(3,2)=3, IGT(4,1)=2, IGT(4,2)=4,
 IGT(5,1)=1, IGT(5,2)=3, IGT(6,1)=2, IGT(6,2)=4,
 IGT(7,1)=1, IGT(7,2)=2

$n=4$, $n_R=1$, $n_V=8$ (Table 1 参照), $T_{DBY}=293$ (n_{PL} は略す)

(アウトプット)

- (1) (4.1-a-1)と同じ
- (2) 結晶の厚さ方向(z軸)の I_{000} , $I_{2\bar{2}0}$ の分布 [Fig.16-(i)]
 結晶の厚さ方向(z軸)の $I_{2\bar{2}0}$, $I_{4\bar{4}0}$ の分布 [Fig.17-(i)]
- (3) 厚さ $Z=2500\text{\AA}$ の結晶下面での I_{000} , $I_{2\bar{2}0}$ の x 軸及び y 軸上の分布 [Fig.16(IV) 及び (V)]
 厚さ $Z=2500\text{\AA}$ の結晶下面での $I_{2\bar{2}0}$, $I_{4\bar{4}0}$ の x 軸及び y 軸上の分布 [Fig.17(II) 及び (III)]
- (4) $Z=2500\text{\AA}$ における x-y 面上の I_{000} 及び $I_{2\bar{2}0}$ のコントラスト・シミュレーション図 [Fig.16(II) 及び (III)]

(b) 厚さ $Z=2000\text{\AA}$ の銅の結晶に積層欠陥(Stacking faults)があり、 (111) 系統反射で2波及び7波近似、加速電圧1MV ($K=114.7$), バーガース・ベクトル $\vec{b}=\frac{a}{6}[2\bar{1}\bar{1}]$, $P=\sqrt{2}$ [(43)式参照] の場合の比較計算



(インプット)

IPATH=1, IOPT=2, ICASE=1, IRCOT=2, IAB=1, IPOUT=0,
 IPF=1, IPLOT=2, INCOPT=4, IFF=1, $n_x=60$, $n_y=0$, $n_z=200$
 $x_{min}=0.$, $\Delta x=10.$, $y_{min}=0.$, $\Delta y=0.$, $\Delta z=10.$, $Z_{out}=2000.$, $E(1)=1.$,
 $C_{input}=\begin{Bmatrix} 0. \\ 0.5 \end{Bmatrix}$, $I_n(1)=-1.$, $I_n(2)=-1.$, $I_n(3)=-1.$, $Bagas(1)=2$, $Bagas(2)=1.$,
 $Bagas(3)=-1.$, $y_{line}=0.$, IGT1=7, IGT2=1.....<2波の場合>.....

$IGT(1, 1)=0, IGT(2, 1)=0, IGT(3, 1)=1, IGT(4, 1)=2,$
 $IGT(5, 1)=0, IGT(6, 1)=0, IGT(7, 1)=0, \dots \langle 7 \text{波場合略} \rangle$
 $n = \left\{ \frac{2}{7} \right\}, n_R=3, n_V=4$ (Table 1 参照), $T_{DBY}=293$, (n_{PL} は略す)
 (アウトプット)

- (1) (4.1-a-(1))と同じ。
- (2) 2波近似で入射条件が $k_{OX}=0$ の時の I_{000}, I_{111} 分布
 [Fig. 18-(i)]
- (3) 2波近似で入射条件が $k_{OX}=0.5$ [$\overline{111}$] の時の I_{000}, I_{111} 分布
 [Fig. 18-(ii)]
- (4) 7波近似で入射条件が $k_{OX}=0$
 I_{000} 及び I_{111} の分布 [Fig. 19-(i)]
 $I_{\dot{1}\dot{1}\dot{1}}$ 及び I_{222} の分布 [Fig. 19-(ii)]
- (5) 7波近似で入射条件が $k_{OX}=0.5$ [$\overline{111}$]
 I_{000} 及び I_{111} の分布 [Fig. 20-(i)]
 $I_{\dot{1}\dot{1}\dot{1}}$ 及び I_{222} の分布 [Fig. 20-(ii)]

5 あ と が き

本報では、電子回折動力学マトリックス理論の多波近似にもとづいて開発した、格子欠陥結晶電子顕微鏡像の解析のプログラム・システム・MSCOPE-Iについて詳細に説明した。本報には2,3の計算例しかあげなかったが、このシステムはすでに種々の格子欠陥像の解析に使用されその有用性が実証されている。それについては、別途報告書にまとめている。

MSCOPE-IのVersion Upは、将来にわたって充分使用実績をつみ、種々のケースについてデータを蓄積した上で行う予定である。その際には更に必要な転位表現の追加とか、その他のオプションの追加、あるいはプロッター像の改良、像の凶形処理などが考えられるであろう。本システムが今後の効率よい電顕像解析の基礎となり、計算センターおよび電顕室に常備されるソフトウェアのような働きをすれば幸いである。

最後に、適切な助言をいただいた元計算センター第1係諸氏に感謝したい。

<文 献>

- (1) Hirsch P.B., Howie A., Nicholson R.B. and Pashly D.W.: "Electron Microscopy of thin Crystals", Butterworths, London, (1965)
- (2) Fukuhara A.: J. Phys. Soc. Japan, 21, 2645 (1966)
- (3) Humphreys G.J. and Lally J.S.: J. Appl. Phys., 41, 232 (1970)
- (4) Thomas L.E.: Radiation Effects, 5, 183 (1970)
- (5) Humphreys G.J., Thomas L.E., Lally J.E. and Fisher R.M.: Phil. Mag., 23, 87 (1971)
- (6) Humphreys G.J.: Phil. Mag., 25, 1459 (1972)
- (7) Fujiwara K.: J. Phys. Soc. Japan, 14, 1513 (1959)
- (8) Fujimoto F.: J. Phys. Soc. Japan, 14, 1558 (1959); 15, 859 (1960); 15, 1022 (1960)
- (9) Sturkey L.: J. Phys. Soc. Japan, 17, Suppl. B-II, 92 (1962)
- (10) Sturkey L.: Proc. Phys. Soc., 80, 321 (1962)
- (11) Cowley J.M., Moodie A.F.: Acta Cryst., 10, 609 (1957)
- (12) Cowley J.M., Moodie A.F.: J. Phys. Soc. Japan, 17, Suppl. B-II, 86 (1962)
- (13) Takagi S.: Acta Cryst., 15, 1311 (1962)
- (14) Howie A., Whelan M.J.: Proc. Roy. Soc., A263, 217 (1961)
- (15) Macgillivray G.H. et al. (Ed.): "International Tables for X-Ray Crystallography, Vol III", The Kynoch Press, 201 (1968)
- (16) Smith G.H. and Burge R.E.: Acta Cryst., 15, 182 (1962)
- (17) Nishida T., Tomiyama M., Yasumura M.: JAERI-memo 4685 (1972)

5 あ と が き

本報では、電子回折動力学マトリックス理論の多波近似にもとづいて開発した、格子欠陥結晶電子顕微鏡像の解析のプログラム・システム・MSCOPE-Iについて詳細に説明した。本報には2,3の計算例しかあげなかったが、このシステムはすでに種々の格子欠陥像の解析に使用されその有用性が実証されている。それについては、別途報告書にまとめている。

MSCOPE-IのVersion Upは、将来にわたって充分使用実績をつみ、種々のケースについてデータを蓄積した上で行う予定である。その際には更に必要な転位表現の追加とか、その他のオプションの追加、あるいはプロッター像の改良、像の図形処理などが考えられるであろう。本システムが今後の効率よい電顕像解析の基礎となり、計算センターおよび電顕室に常備されるソフトウェアのような働きをすれば幸いである。

最後に、適切な助言をいただいた元計算センター第1係諸氏に感謝したい。

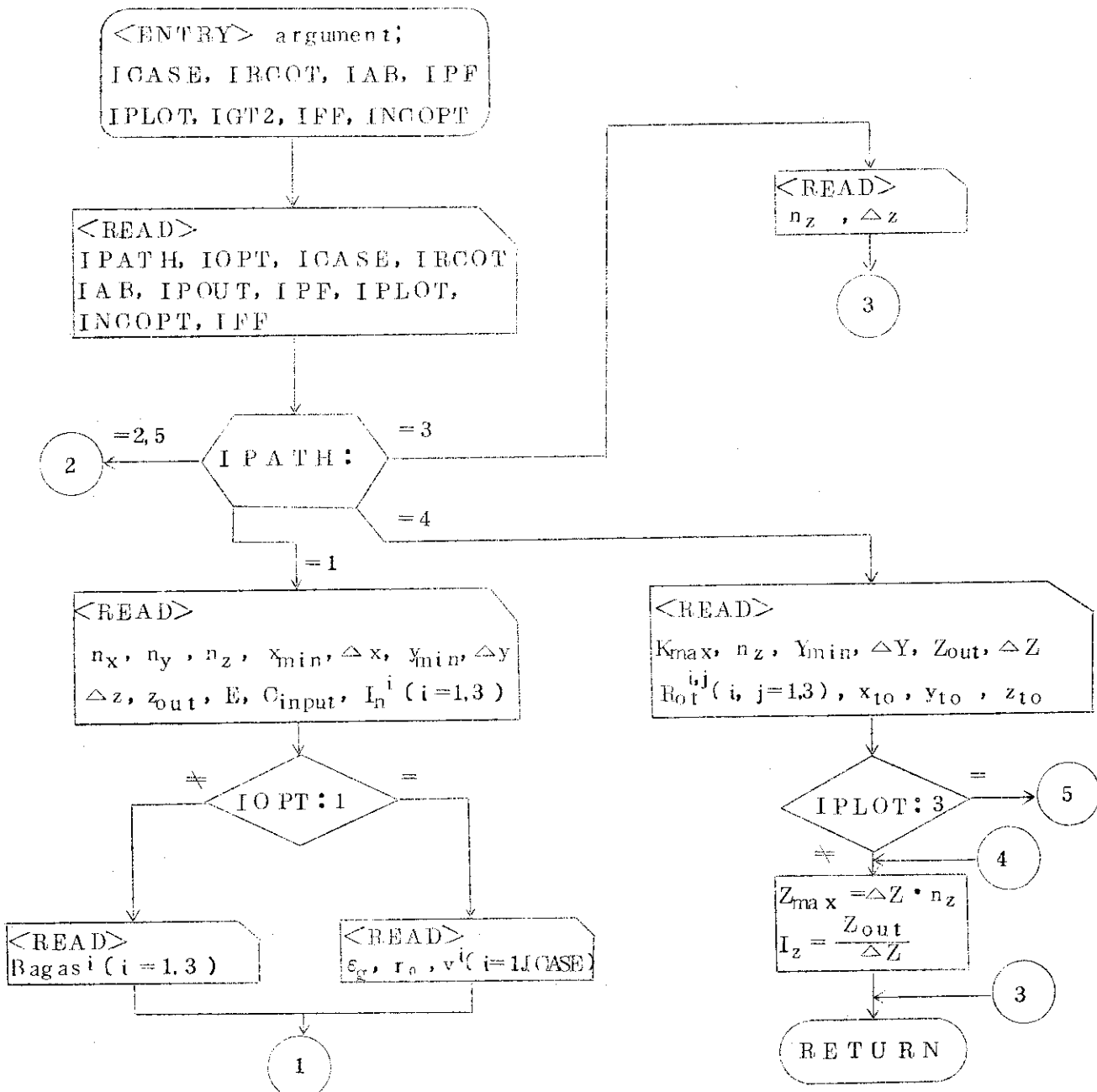
<文 献>

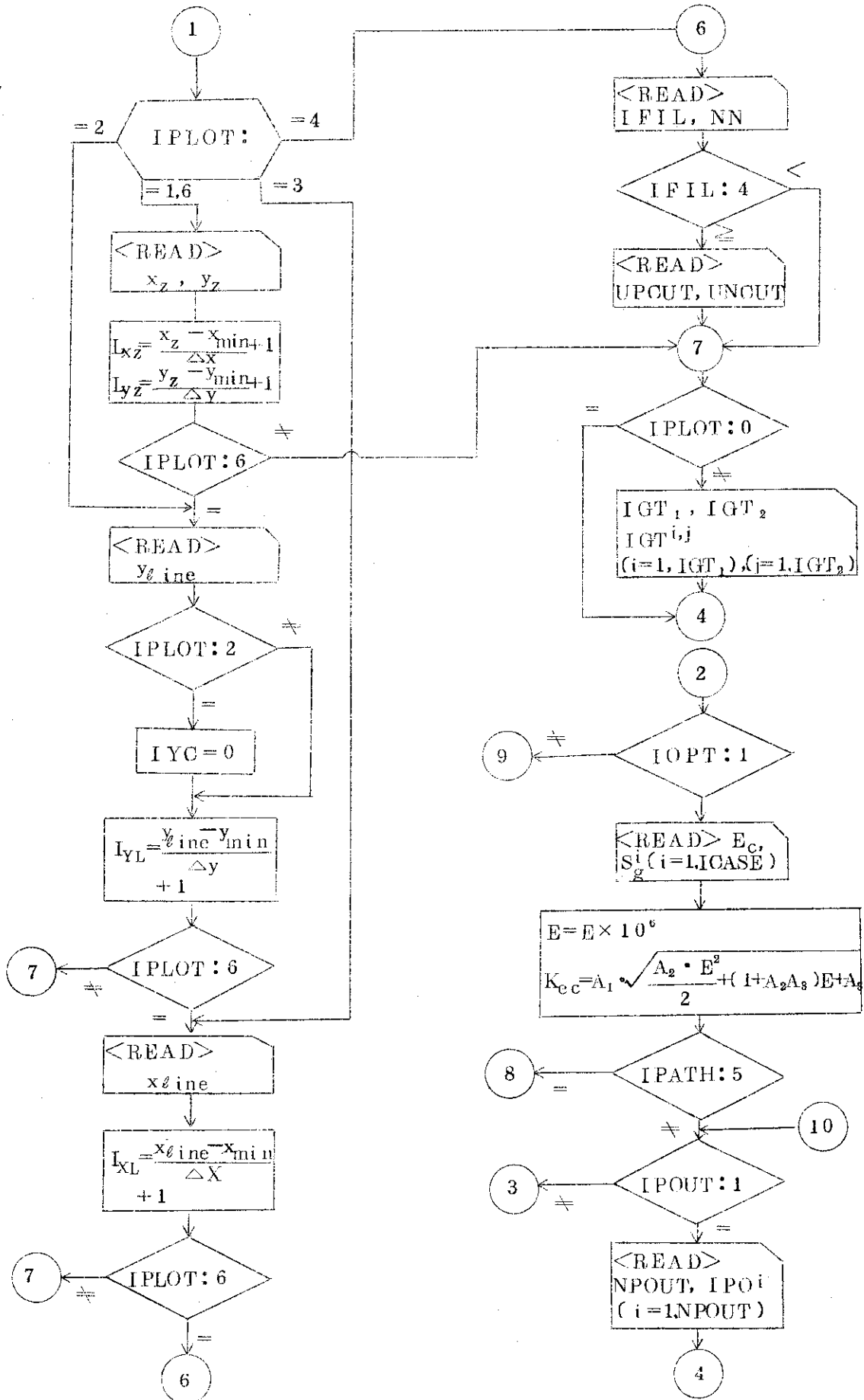
- (1) Hirsch P.B., Howie A., Nicholson R.B. and Pashly D.W.: "Electron Microscopy of thin Crystals", Butterworths, London, (1965)
- (2) Fukuhara A.: J. Phys. Soc. Japan, 21, 2645 (1966)
- (3) Humphreys G.J. and Lally J.S.: J. Appl. Phys., 41, 232 (1970)
- (4) Thomas L.E.: Radiation Effects, 5, 183 (1970)
- (5) Humphreys G.J., Thomas L.E., Lally J.E. and Fisher R.M.: Phil. Mag., 23, 87 (1971)
- (6) Humphreys G.J.: Phil. Mag., 25, 1459 (1972)
- (7) Fujiwara K.: J. Phys. Soc. Japan, 14, 1513 (1959)
- (8) Fujimoto F.: J. Phys. Soc. Japan, 14, 1558 (1959); 15, 859 (1960); 15, 1022 (1960)
- (9) Sturkey L.: J. Phys. Soc. Japan, 17, Suppl. B-II, 92 (1962)
- (10) Sturkey L.: Proc. Phys. Soc., 80, 321 (1962)
- (11) Cowley J.M., Moodie A.F.: Acta Cryst., 10, 609 (1957)
- (12) Cowley J.M., Moodie A.F.: J. Phys. Soc. Japan, 17, Suppl. B-II, 86 (1962)
- (13) Takagi S.: Acta Cryst., 15, 1311 (1962)
- (14) Howie A., Whelan M.J.: Proc. Roy. Soc., A263, 217 (1961)
- (15) Macgillivray C.H. et al. (Ed.): "International Tables for X-Ray Crystallography, Vol III", The Kynoch Press, 201 (1968)
- (16) Smith G.H. and Burge R.E.: Acta Cryst., 15, 182 (1962)
- (17) Nishida T., Tomiyama M., Yasumura M.: JAERI-memo 4685 (1972)

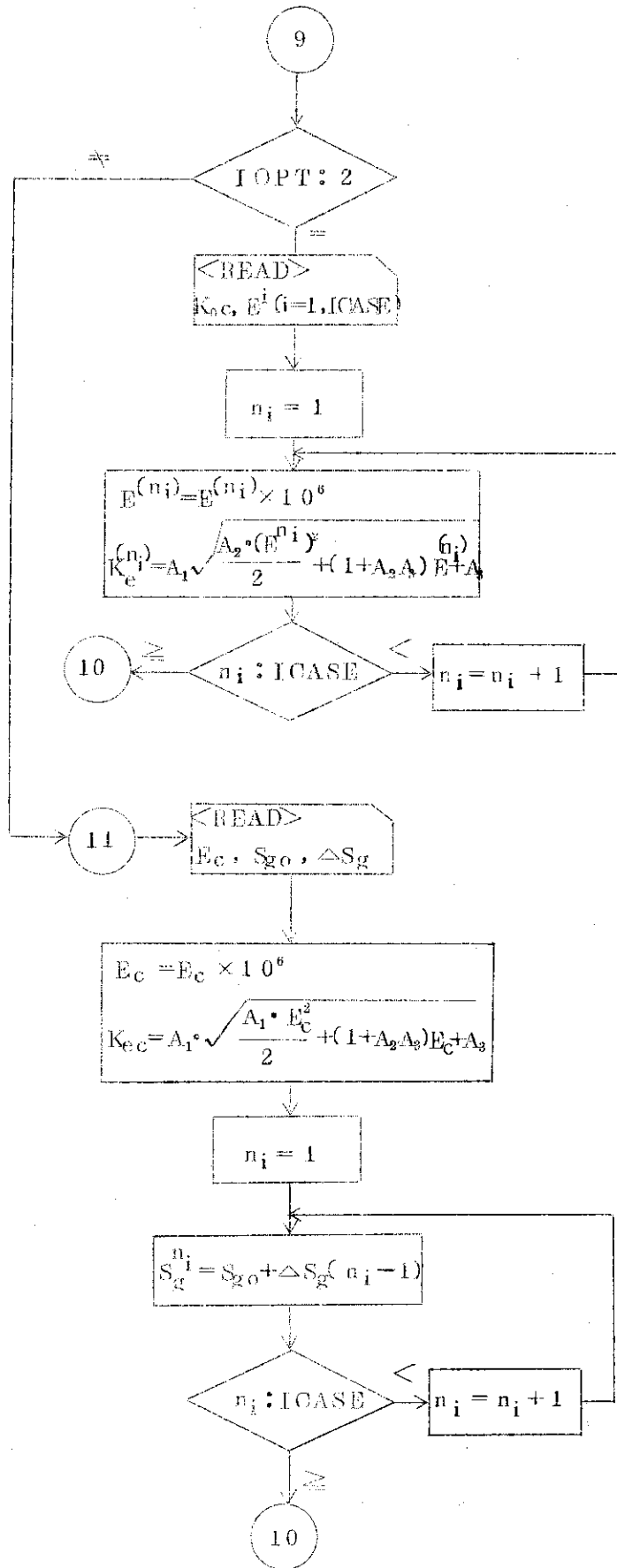
付録1 DATA INの流れ図

COMMON : IPATH, IOPT, K_{oc} , K_e^i , S_g^i , E^i , E_c , IGT^{ij} , C_{input} , I_n^i
 : n_x , n_y , n_z , x_{min} , Δx , Δz , y_{min} , Δy , ϵ_g , r_0 , v^i , x_{t0} , y_{t0} ,
 z_{t0} , Rot^{ij} , Y_{min} , ΔY , K_{max} , $Bagas^i$
 : x_z , y_z , I_{xz} , I_{yz} , y_{line} , I_{YL} , x_{line} , I_{XL} , Z_{out} , I_z ,
 I_{const} , Z_{max} , $IFIL$, NN , IYC
 : dx_n^i , $UPOUT$, $UNCUT$
 : $IPOUT$, $NPOUT$, $IPOI$

DATA : A_1 , A_2 , A_3

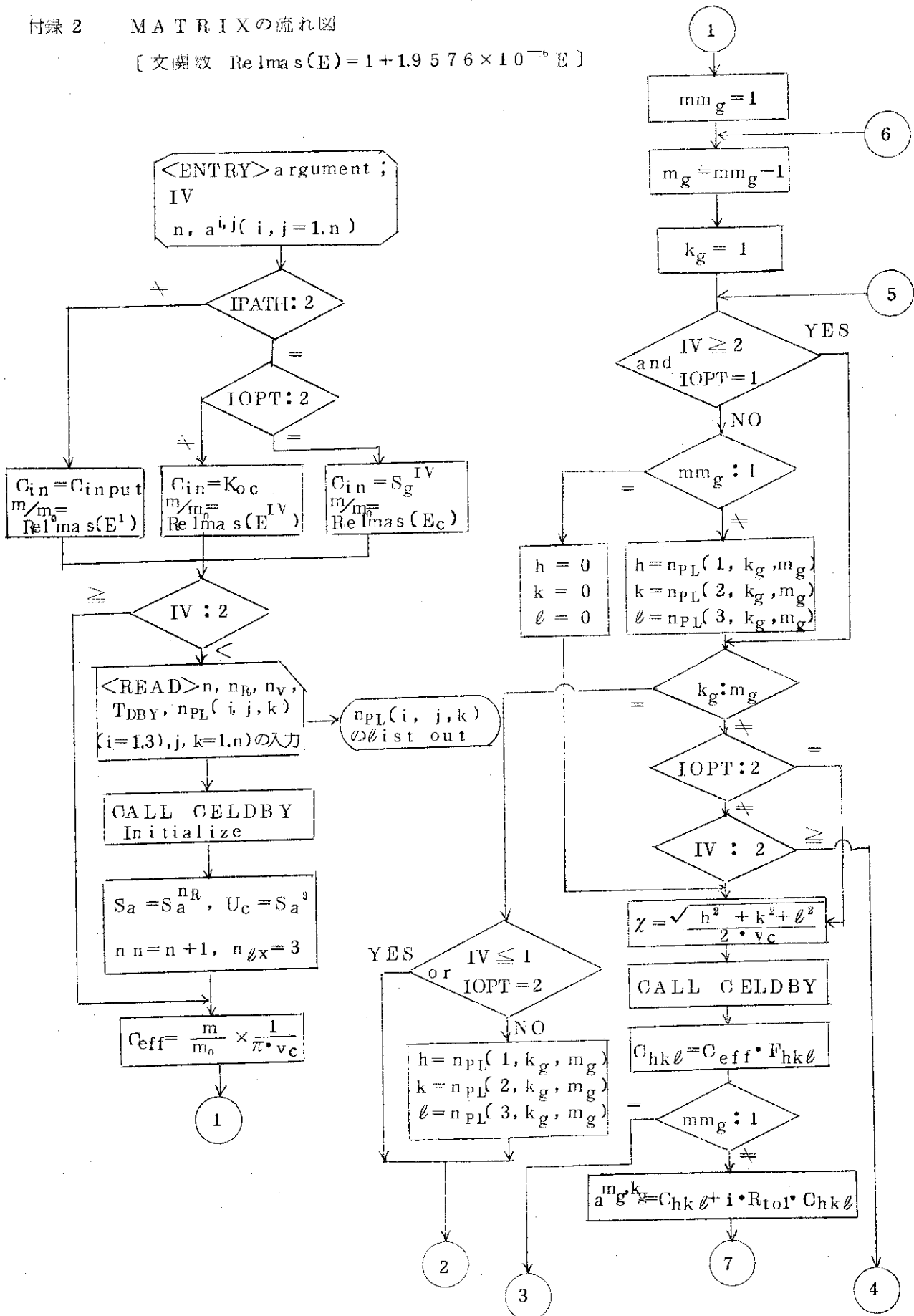


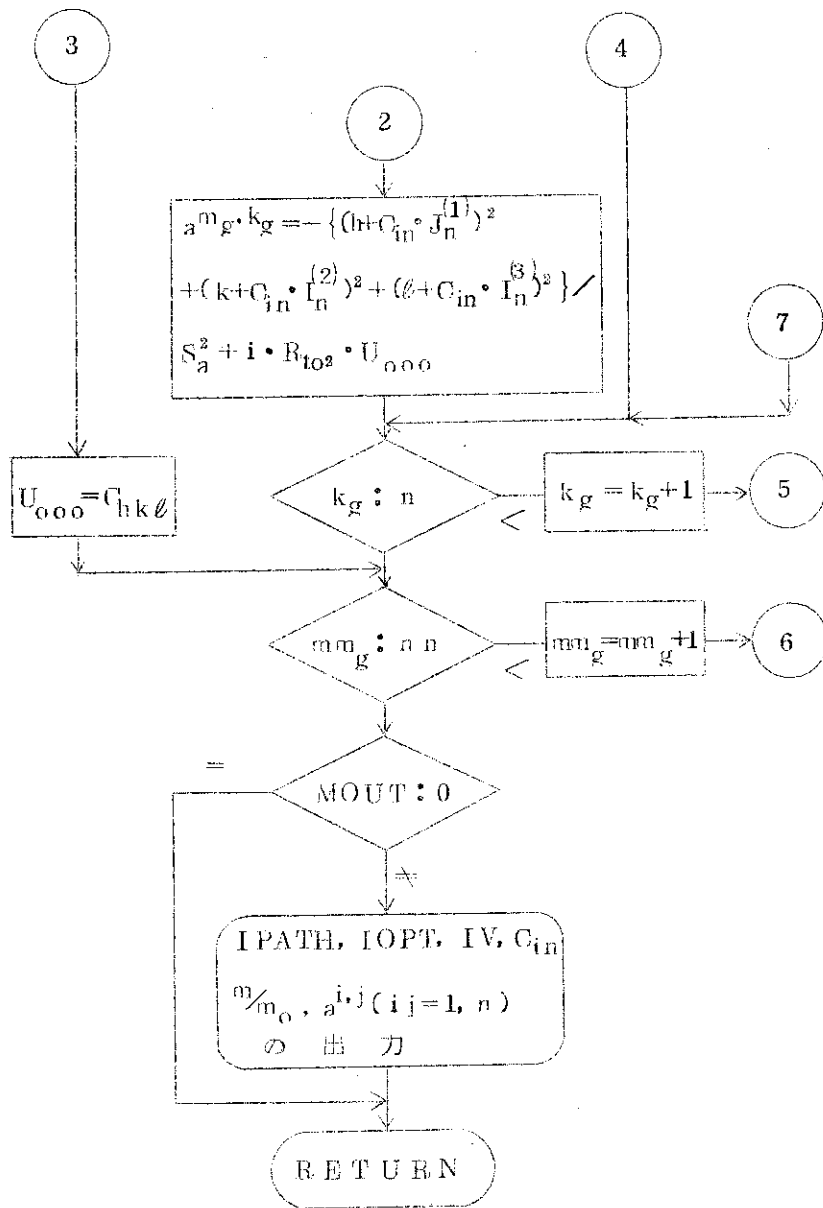




付録 2 MATRIXの流れ図

[文関数 $\text{ReImas}(E) = 1 + 1.9576 \times 10^{-6} E$]





COMMON : IPATH, IOPT, K_{oc}ⁱ, K_{ec}ⁱ, S_gⁱ, Eⁱ, E_cⁱ, IGT^{i,j}, C_{input}ⁱ, I_nⁱ
 : n_{PL}^{i,j,k}, U_{ooo}
 : S_aⁱ
 : n_R, n_v, T_{DBY}

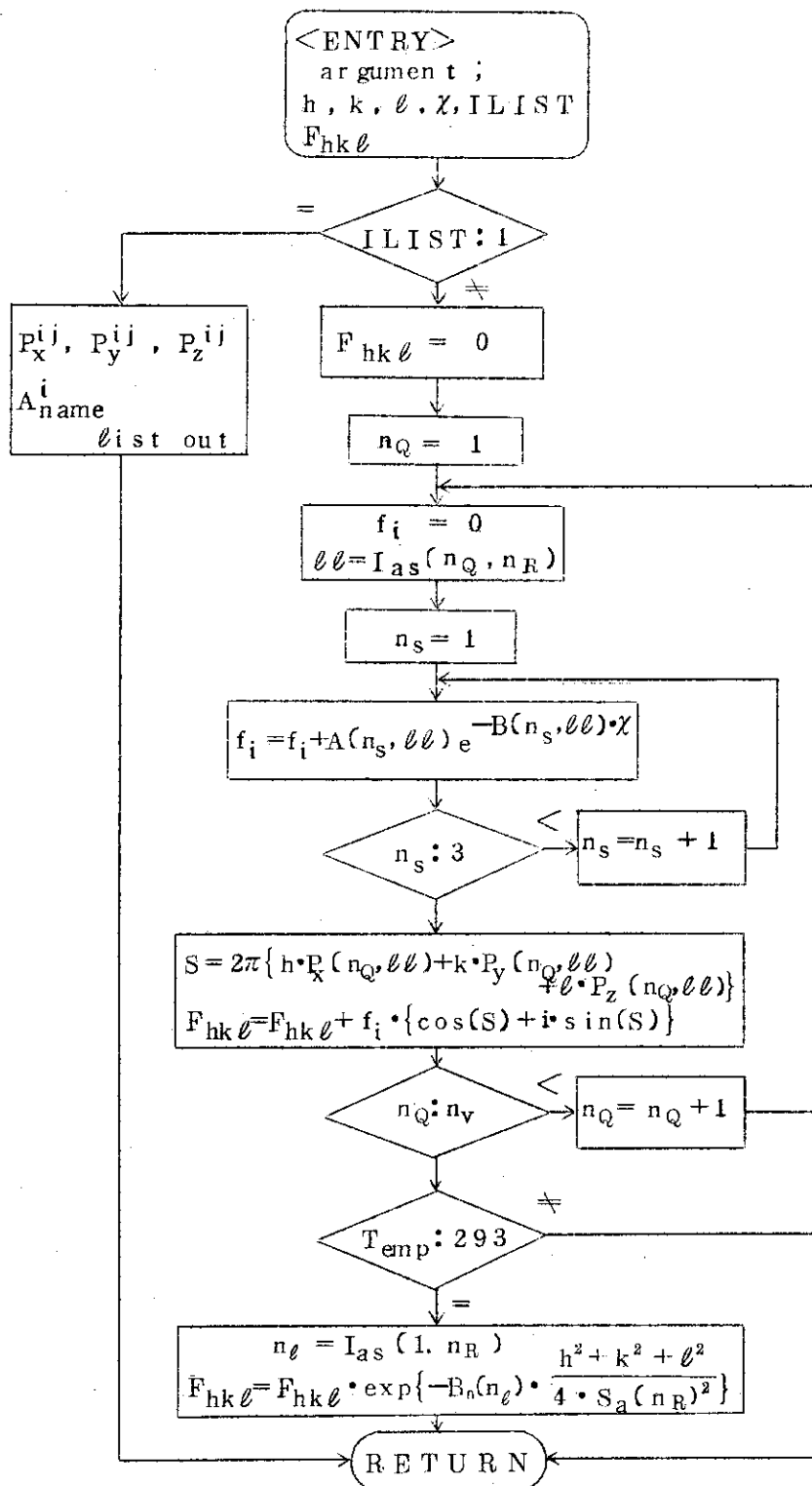
DATA : π, ($\frac{m}{m_0}$)_{1MeV}, S_aⁱ, i (虚数単位), R_{to1}, R_{to2}

付録3 CELDBYの流れ図

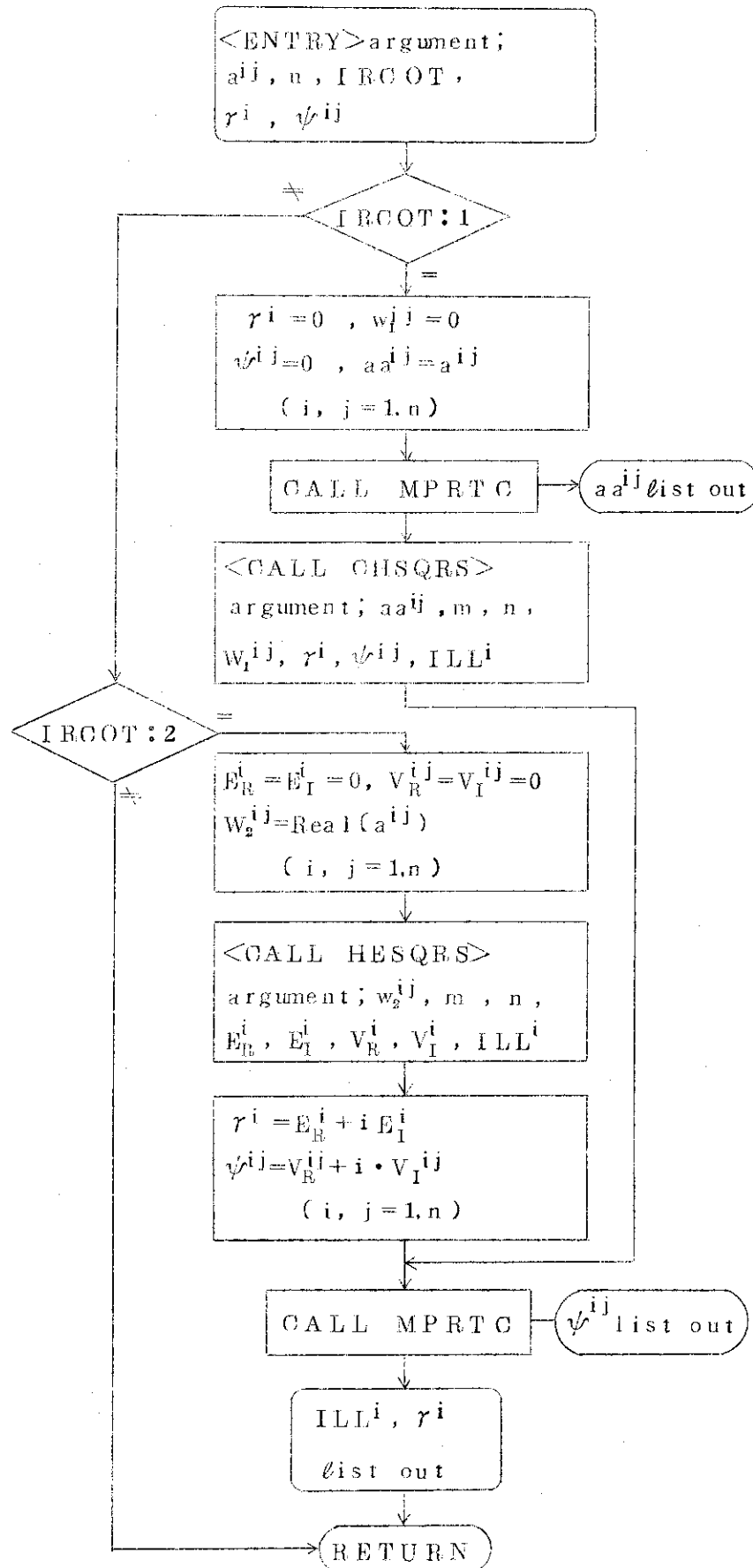
$[(P_x^i, P_y^i, P_z^i)]^j$ は j 番目のケースのセル内の i 番目の原子の相対座標

COMMON: S_a^i, n_R, n_V, T_{DBY}

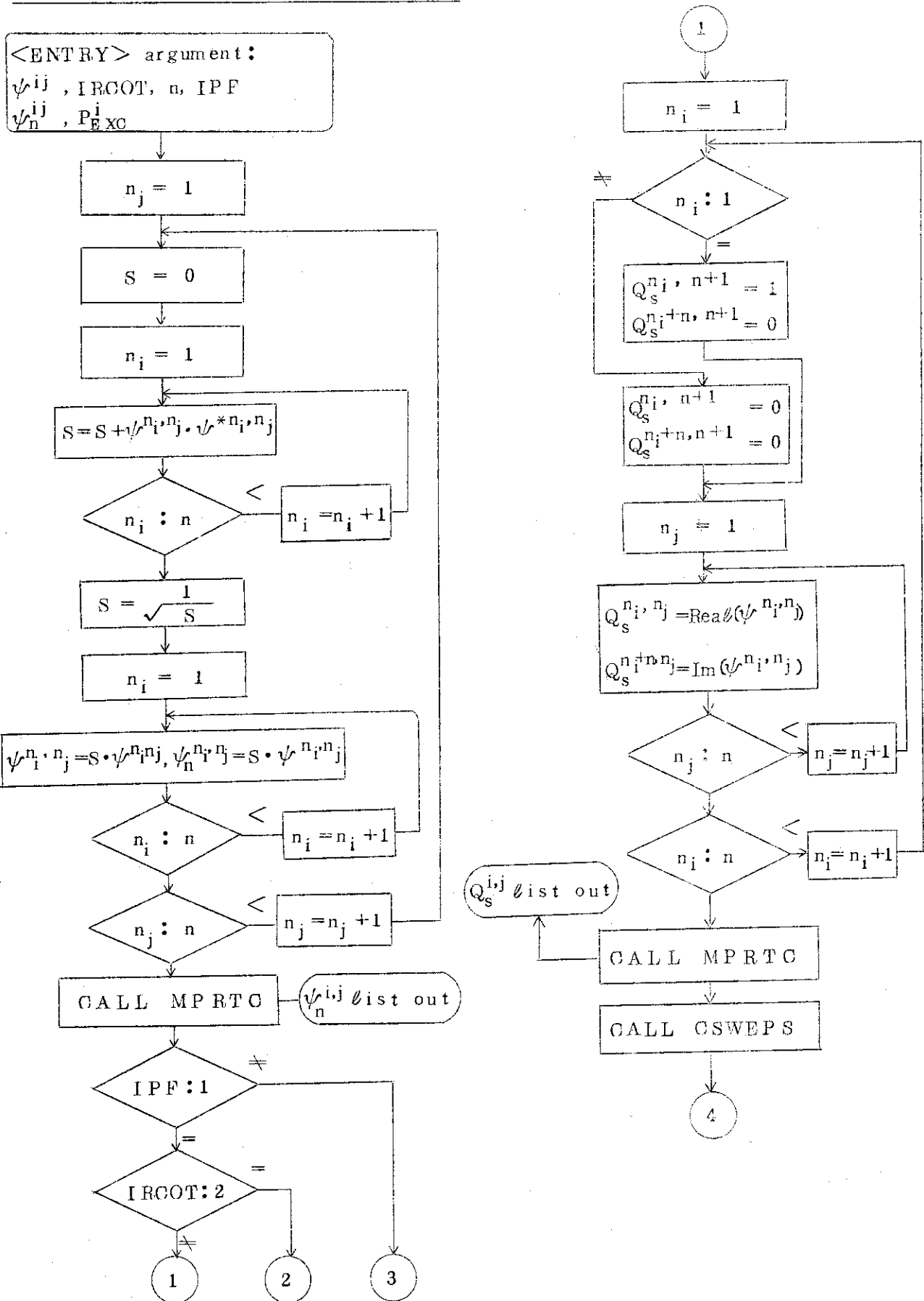
DATA: $P_x^{ij}, P_y^{ij}, P_z^{ij}, A_{name}^i$
 $I_{as}^{ij}, A^{ij}, B^{ij}, \pi, i, B_0^i$

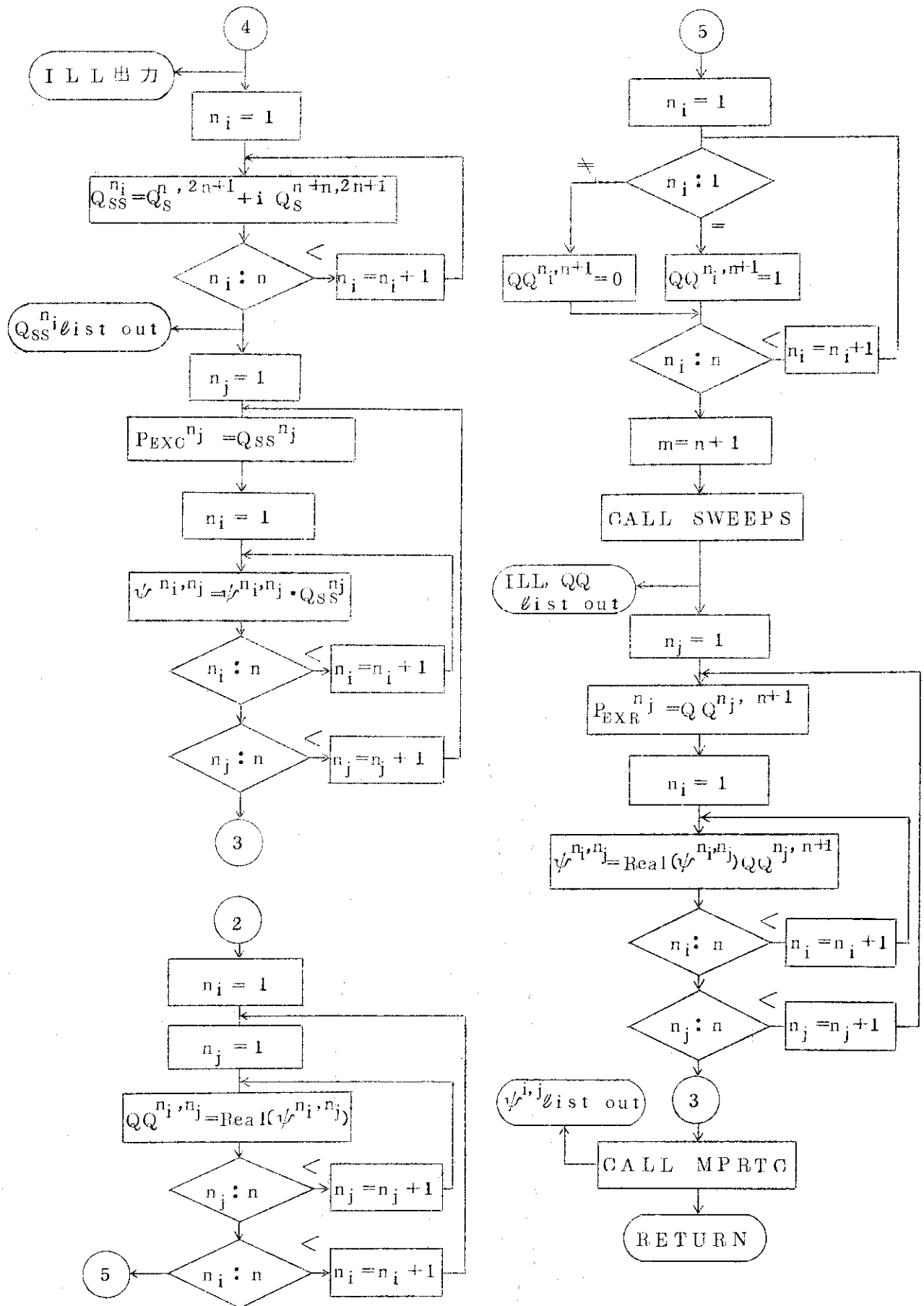


付録4 EIGENSの流れ図

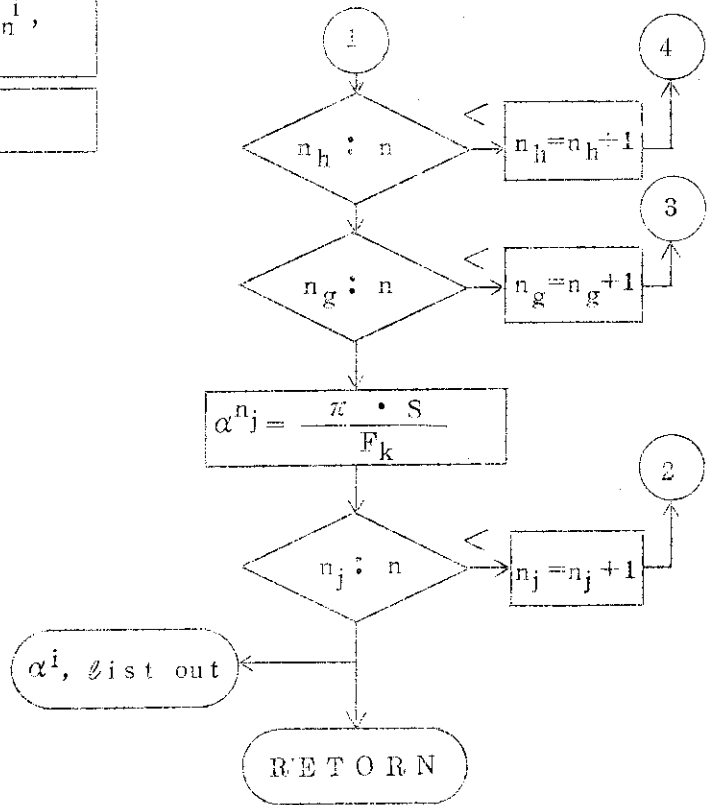
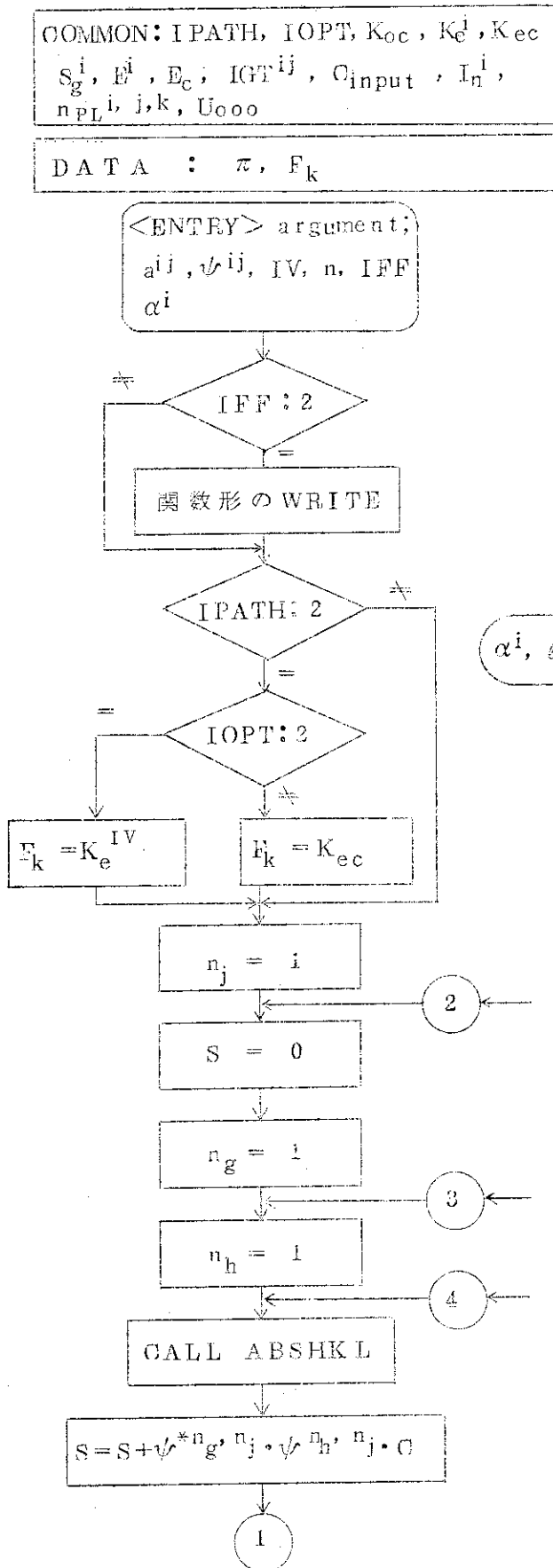


付録5 BCFITの流れ図





付録6 ABSORPの流れ図

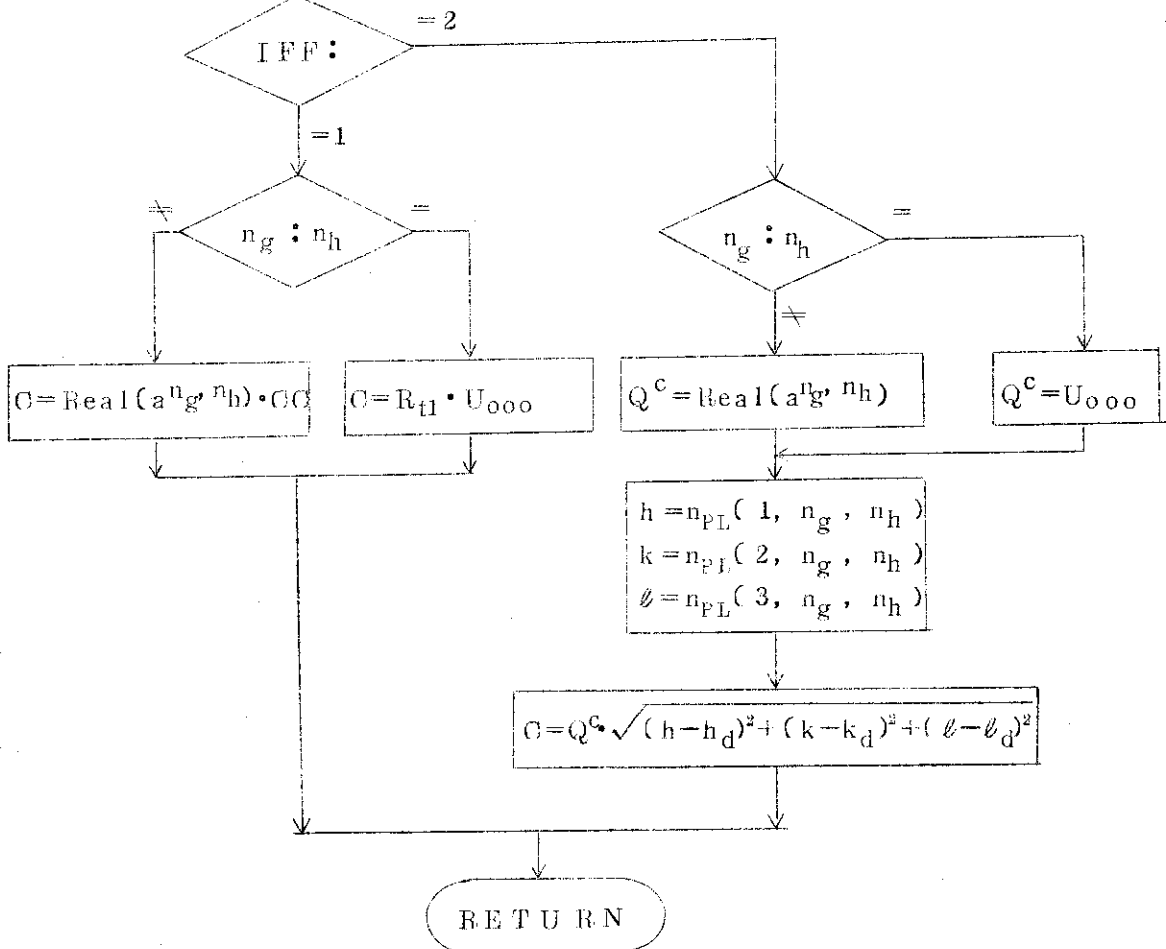


付録7 AB SHKLの流れ図

COMMON : n_{PL}, i, j, k, U_{000}

DATA : $R_{t1}, CC, h_d, k_d, \ell_d$

ENTRY : argument
 $a^{ij}, n_g, n_h, IFF,$
 C

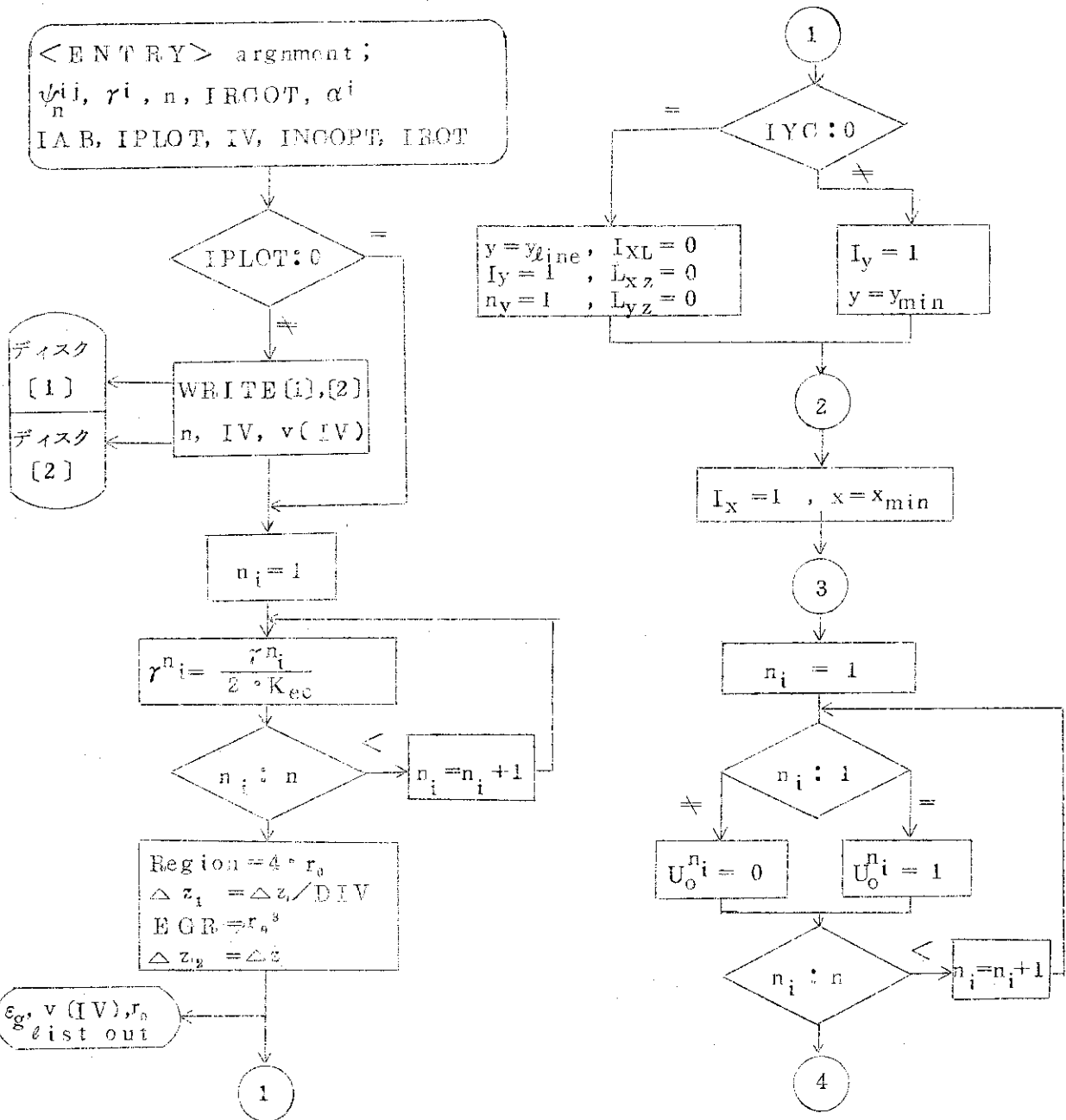


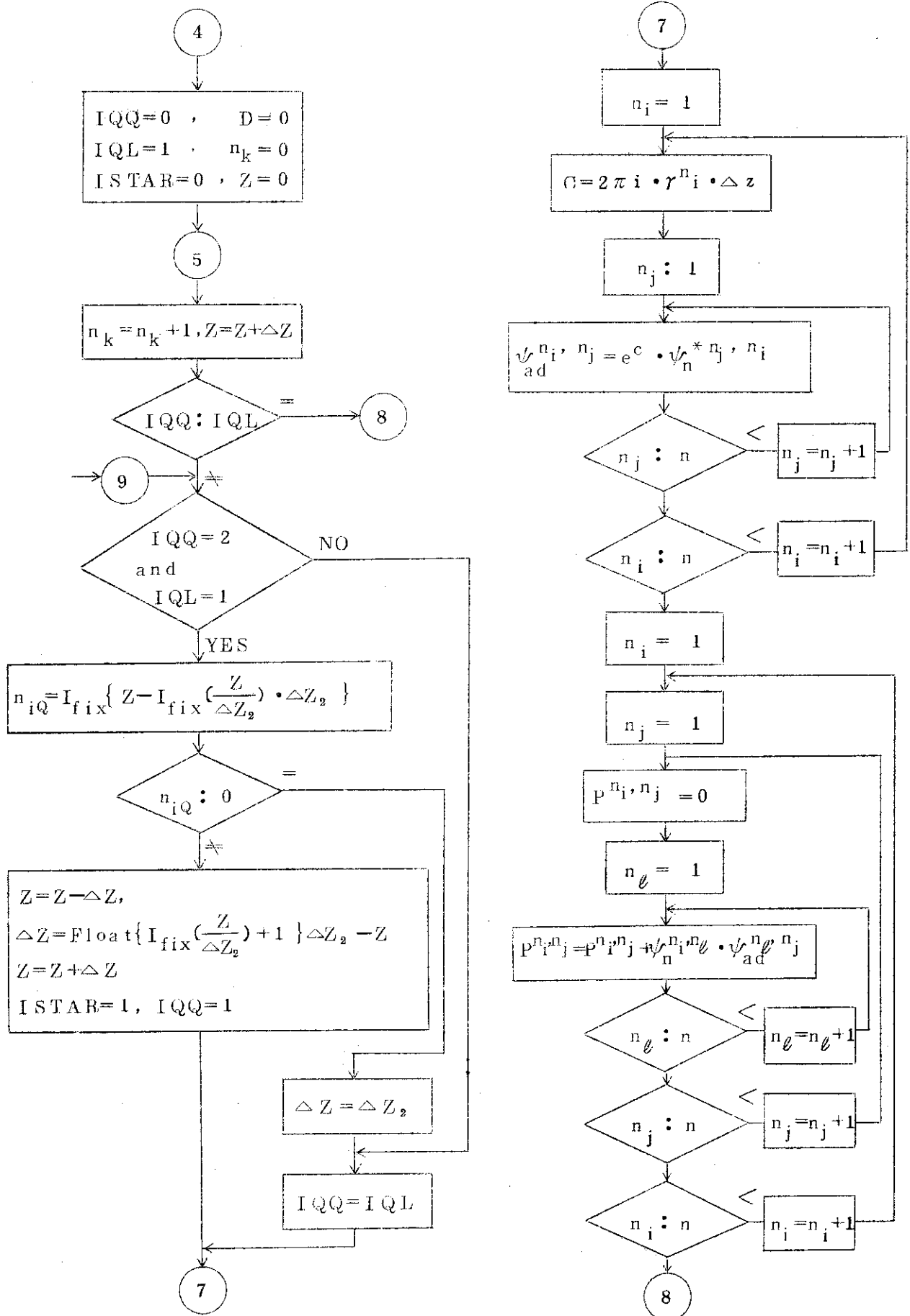
付録8 DEFORMの流れ図

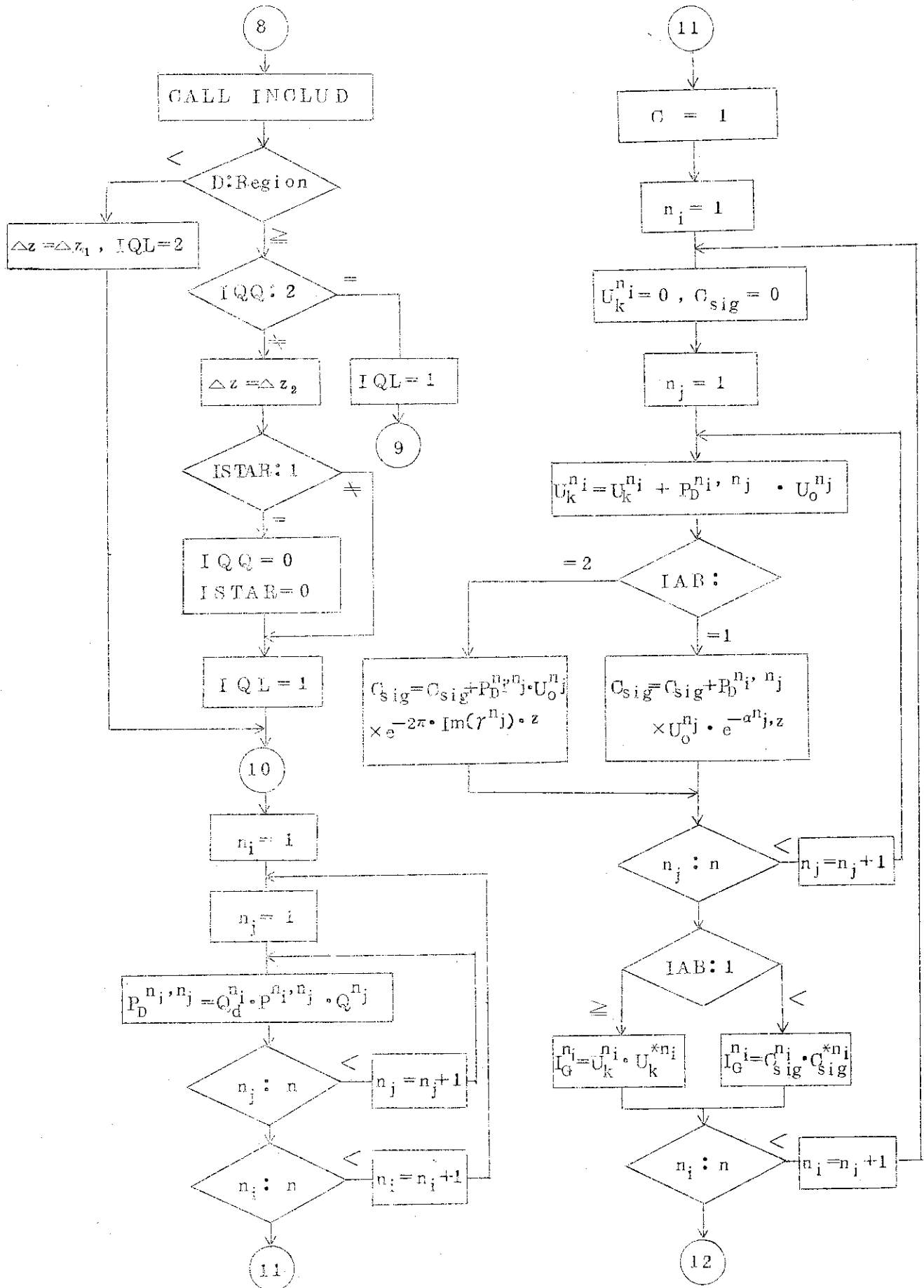
COMMON : IPATH, IOPT, K_{oc}, K_eⁱ, K_{ec}, S_gⁱ, Eⁱ, E_c, IGT^{ij}, Q_{input}, I_nⁱ
 : n_x, n_y, n_z, x_{min}, Δx, Δz, y_{min}, Δy, ε_g, r₀, vⁱ, x_{to}, y_{to}, z_{to},
 Rot^{ij}, y_{line}, ΔY, K_{max}, Bagasi
 : x_z, y_z, L_{xz}, L_{yz}, y_{line}, I_{YL}, x_{line}, I_{XL}, Z_{out}, I_z, I_{const},
 Z_{max}, IFIL, NN, IYC

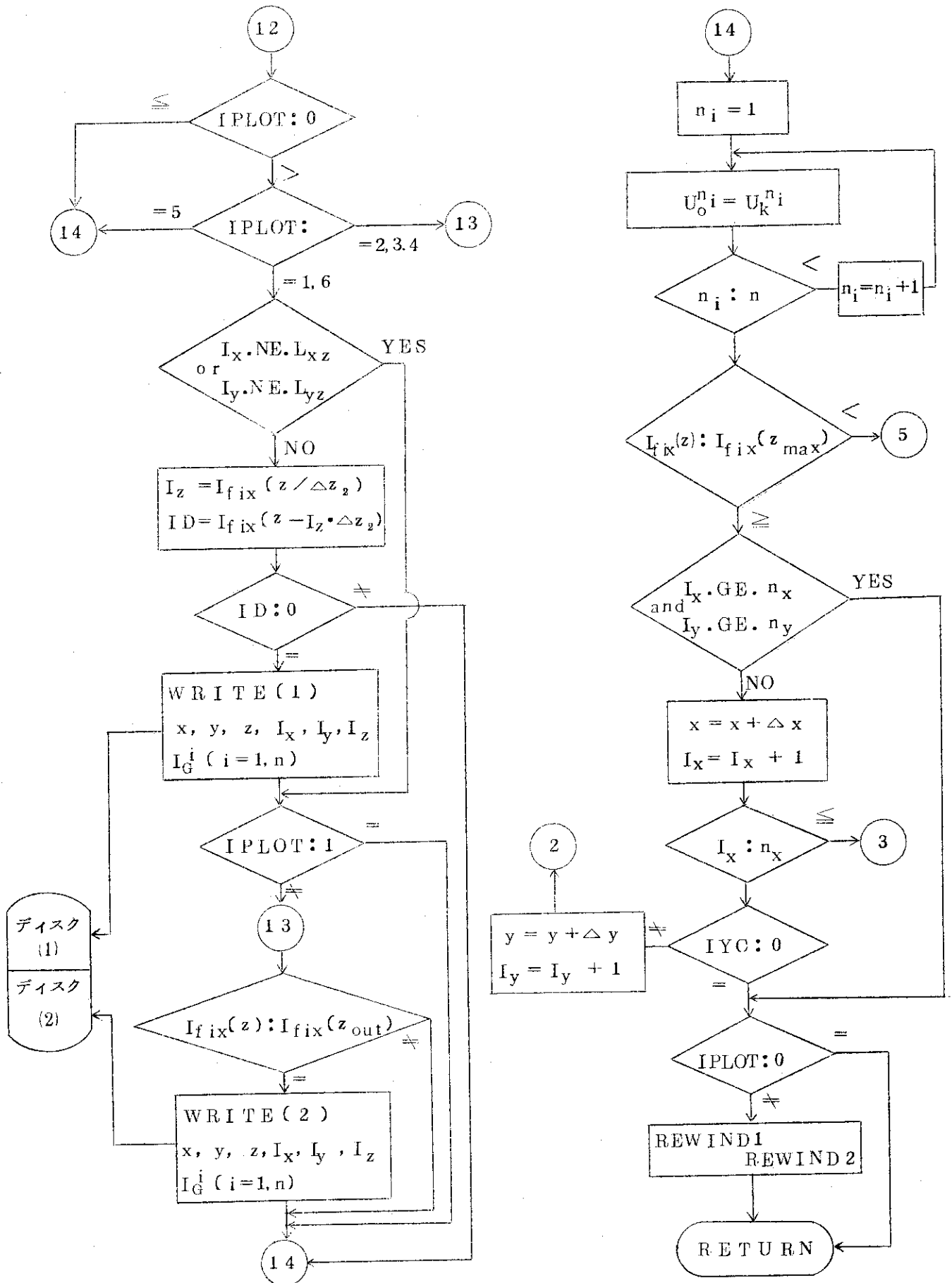
DATA : ε, i, π, DIV

<ENTRY> argument;
 ψ_nⁱ, rⁱ, n, IRCOT, αⁱ
 IAB, IPLOT, IV, INCOPT, IROT







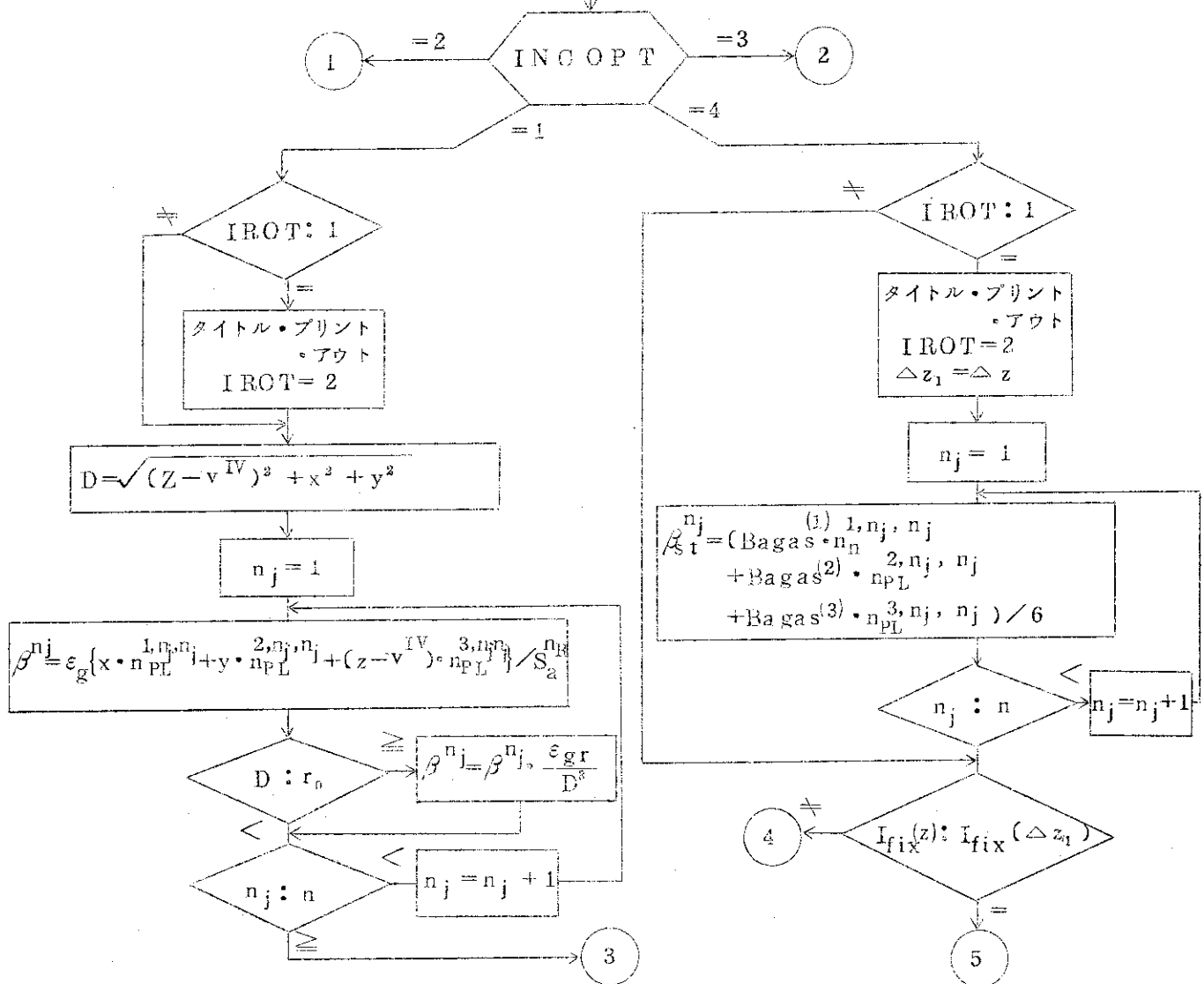


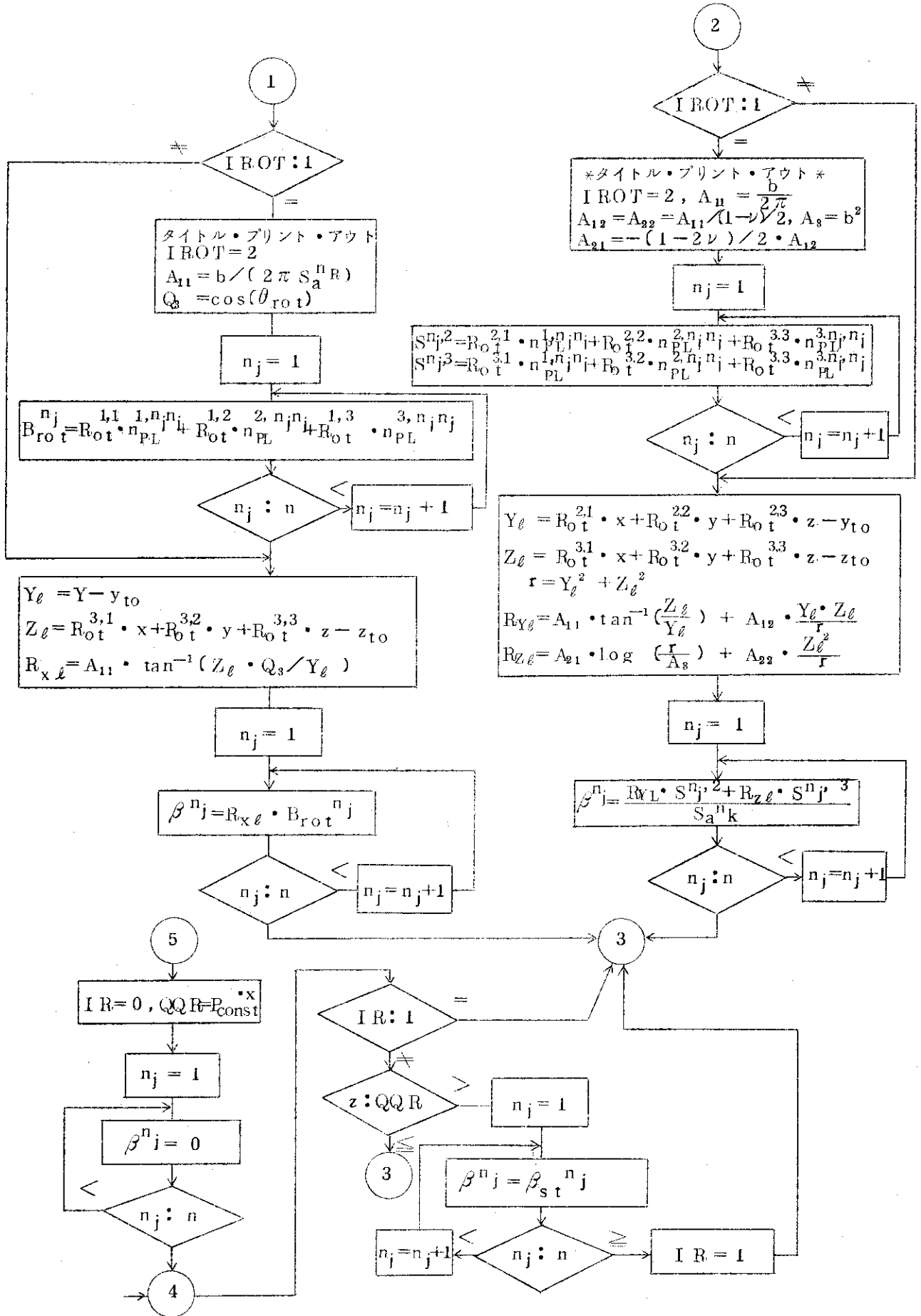
付録9 INCLUDの流れ図

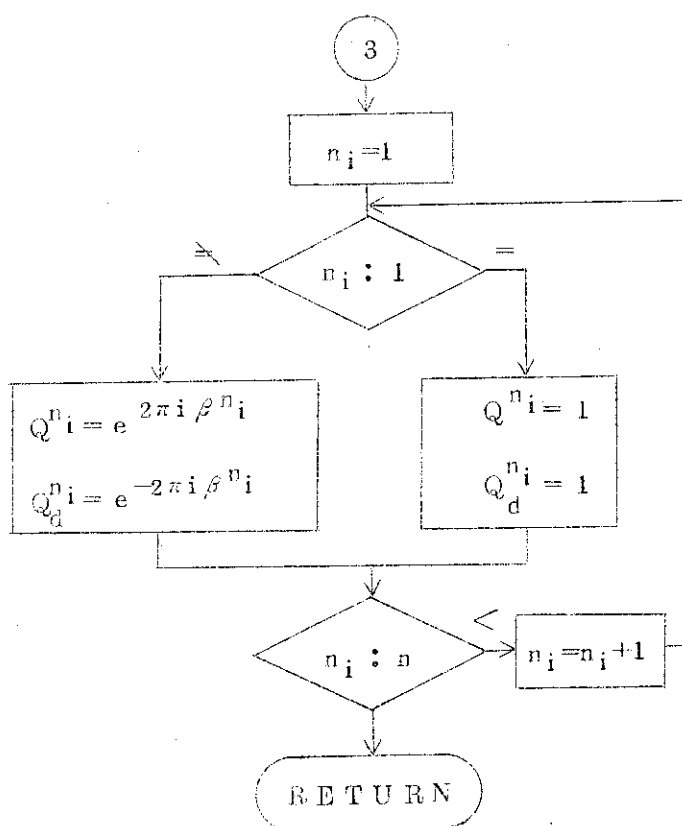
COMMON : $n_x, n_y, n_z, x_{min}, \Delta x, \Delta z, y_{min}, \Delta y, \epsilon_{gr}, r_0, v^i, x_{to},$
 $y_{to}, z_{to}, R_{ot}^{ij}, Y_{min}, \Delta Y, K_{max}, Bagas^i$
 : n_{PL}^i, i, k, U_{000}
 : S_a^i
 : n_R, n_v, T_{DBY}

DATA : $\pi, P_{const}, i, b, \theta_{rot}, \nu$

<ENTRY> argument ;
 $x, y, z, IV, \epsilon_{gr}, n, INCOPT$
 $IROT, Y$
 D, Q^i, Q_d^i



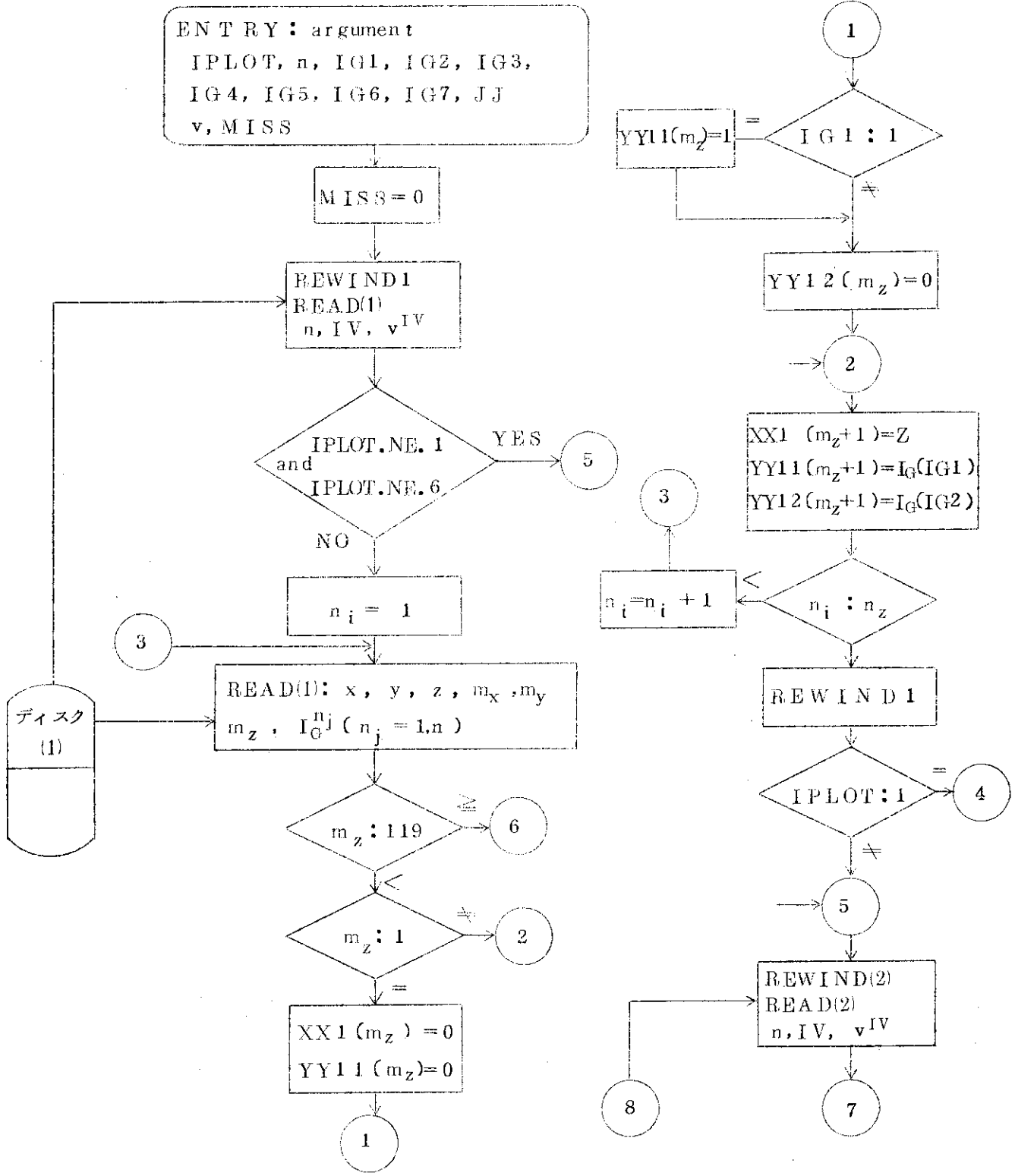


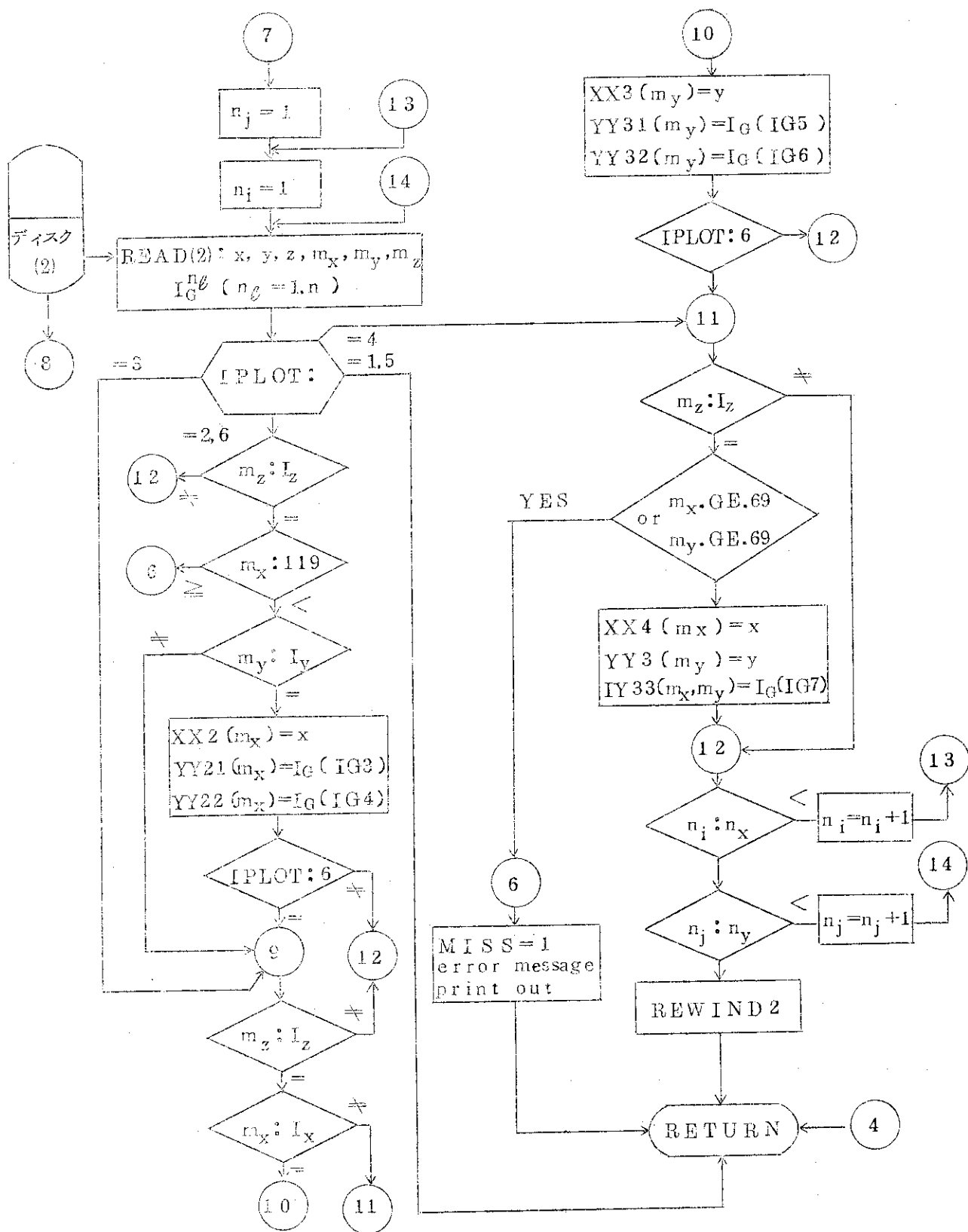


付録10 DSET2の流れ図

COMMON : $n_x, n_y, n_z, x_{min}, \Delta x, \Delta z, y_{min}, \Delta y, \epsilon_g, r_0, v^i, x_{to}, y_{to}, z_{to}, Rot^j, Y_{min}, \Delta Y, K_{max}, Bagasi$
 : $x_z, y_z, L_{xz}, L_{yz}, y_{line}, I_{YL}, x_{line}, I_{XL}, Z_{out}, I_z, I_{const}, Z_{max}, IFIL, NN, IYC$
 : $XX1^i, YY11^i, YY12^i, XX2^i, YY21^i, YY22^i, YY3^i, IY33^j, XX3^i, YY31^i, YY32^i, XX4^i$

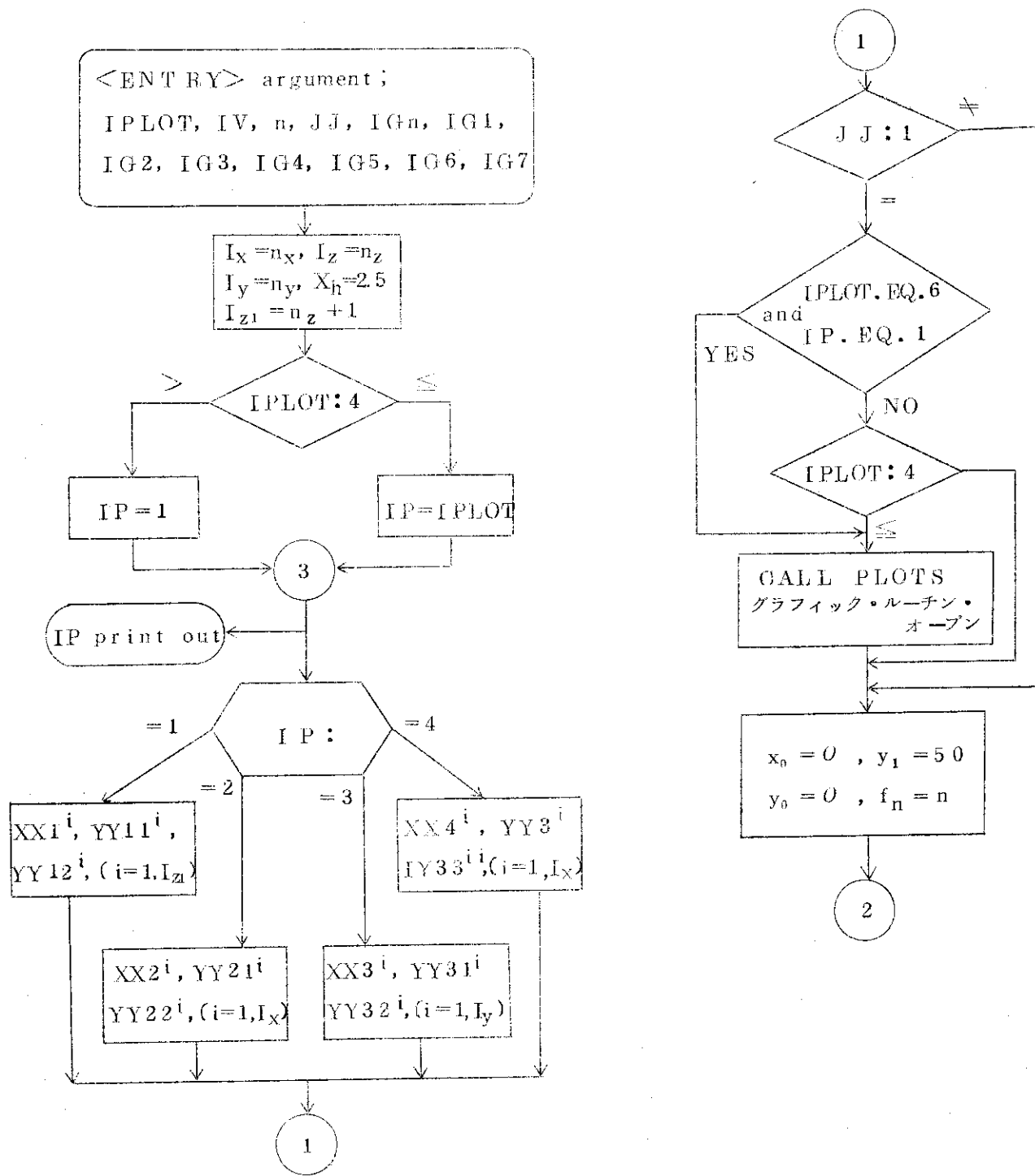
ENTRY : argument
 IPLOT, n, IG1, IG2, IG3,
 IG4, IG5, IG6, IG7, JJ
 v, MISS

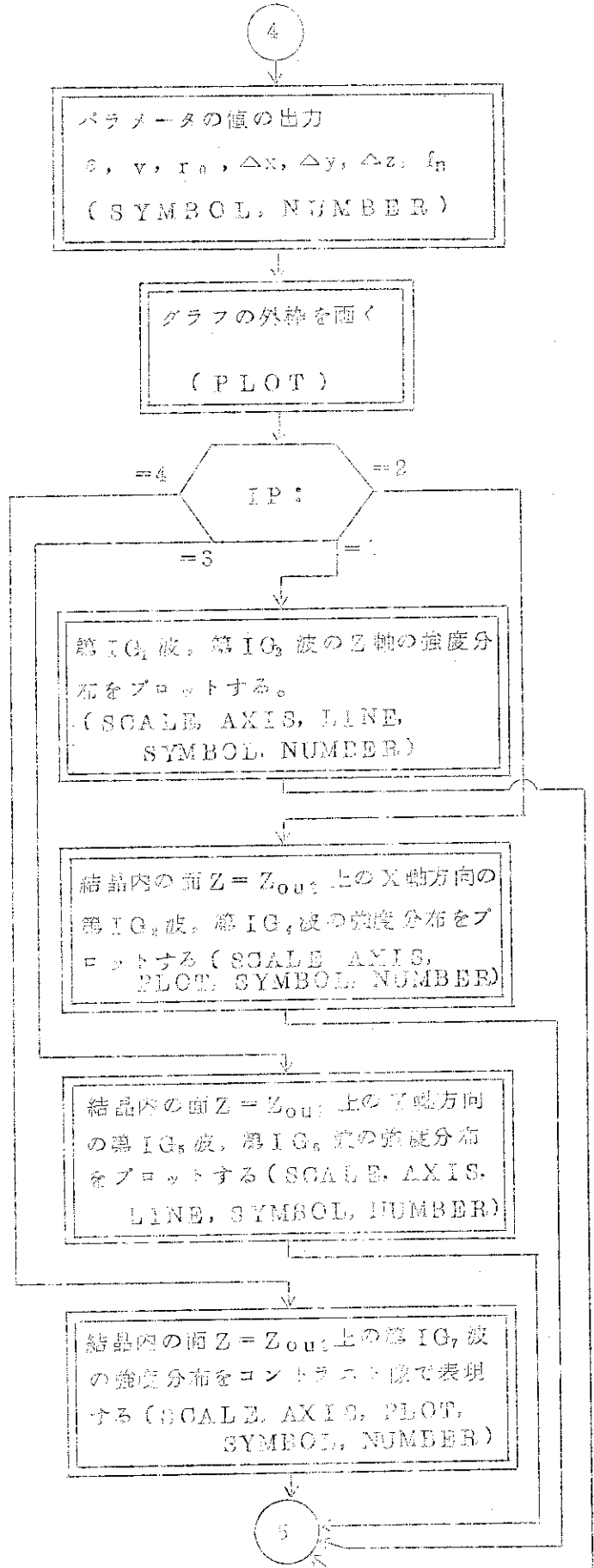
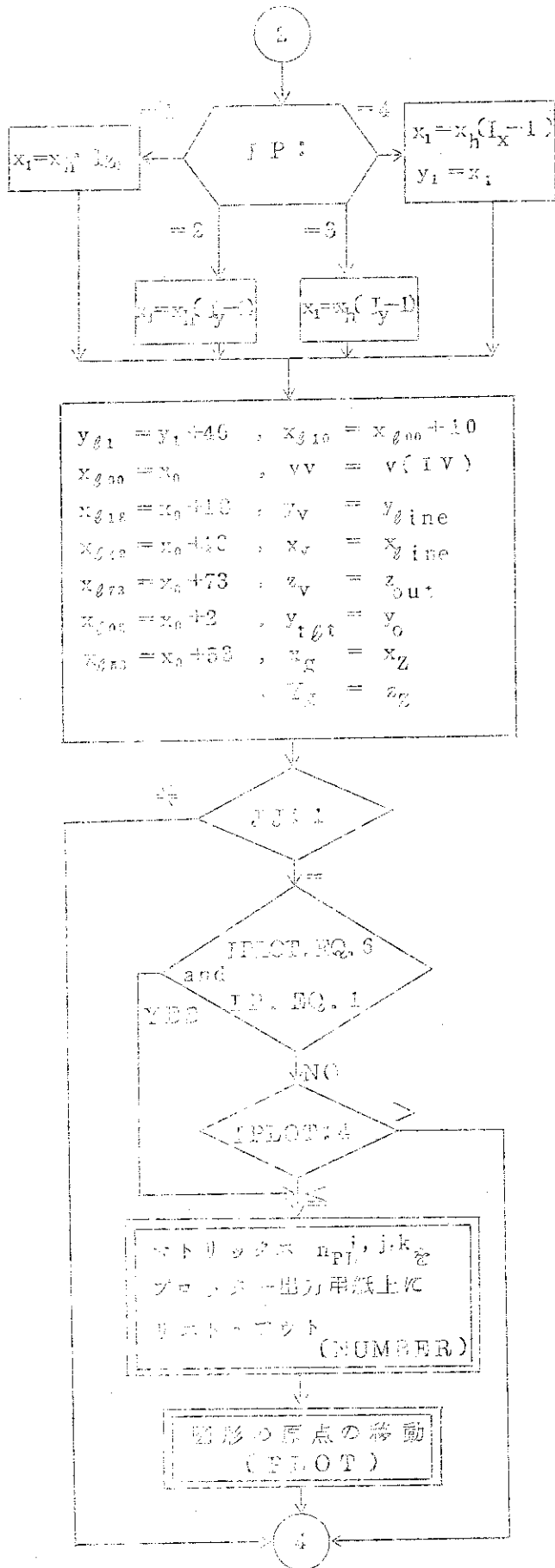


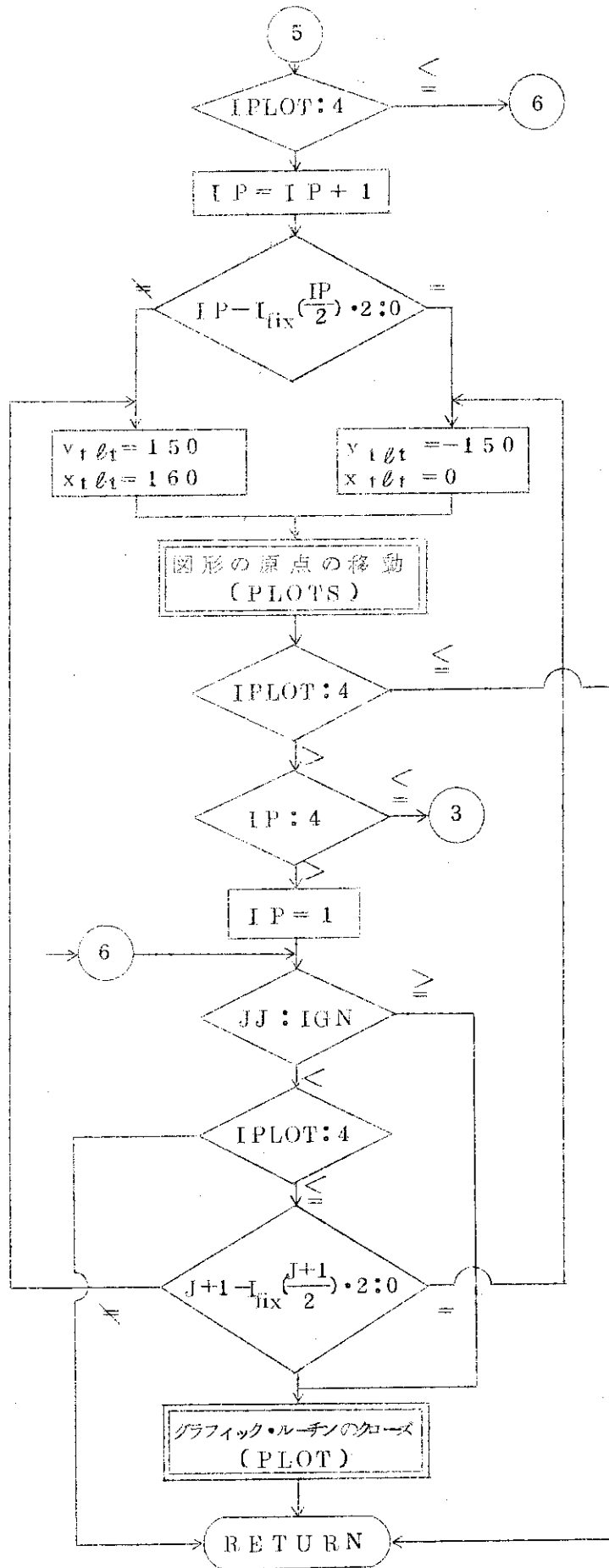


付録 1 1 GRAPH の流れ図

COMMON : $n_x, n_y, n_z, x_{min}, \Delta x, \Delta z, y_{min}, \Delta y, \varepsilon_g, r_0, v^i, x_{to}, y_{to}, z_{to}, Rot^{ij}, Y_{min}, \Delta Y, K_{max}, Bagas^i$
 : $x_z, y_z, L_{xz}, L_{yz}, y_{line}, I_{YL}, x_{line}, K_{XL}, Z_{out}, I_z, I_{const}, Z_{max}, IFILL, NN, IYC$
 : $XX1^i, YY11^i, YY12^i, XX2^i, YY21^i, YY22^i, YY3^i, IY33^{ij}, XX3^i, YY31^i, YY32^i, XX4^i$
 : n_{PL}^i, i, k, U_{000}







プロットイングの部分は、特定のサブ・ルーチンを使っており複雑になるので二重四角にその機能をまとめた。小カッコの中は、使用したプロッター・ルーチン名である。

その他に準備したサブルーチンがいくつがあるが名前と簡単な内容説明に留める。

- (1) SCALNG : ある並びのデータを、ある長さYにスケーリングするサブ・ルーチン。
- (2) AB : オプションによって夫々のデータを、スケーリング・バッファーにセットする関数副プログラム。
- (3) INDEX : グラフ中の曲線に波の番号を書き加える。
- (4) FILM : 適当なメジャーによって強度を濃度に変換して図上に画く。
- (5) XYSET : 濃度の文字表現の与え方をセットする。
- (6) MAXMIN : ある二次元並びのデータの最大値および最小値を求める。
- (7) MPBTC : 複素マトリックスの内容を複素数値表現でリストアウトする。

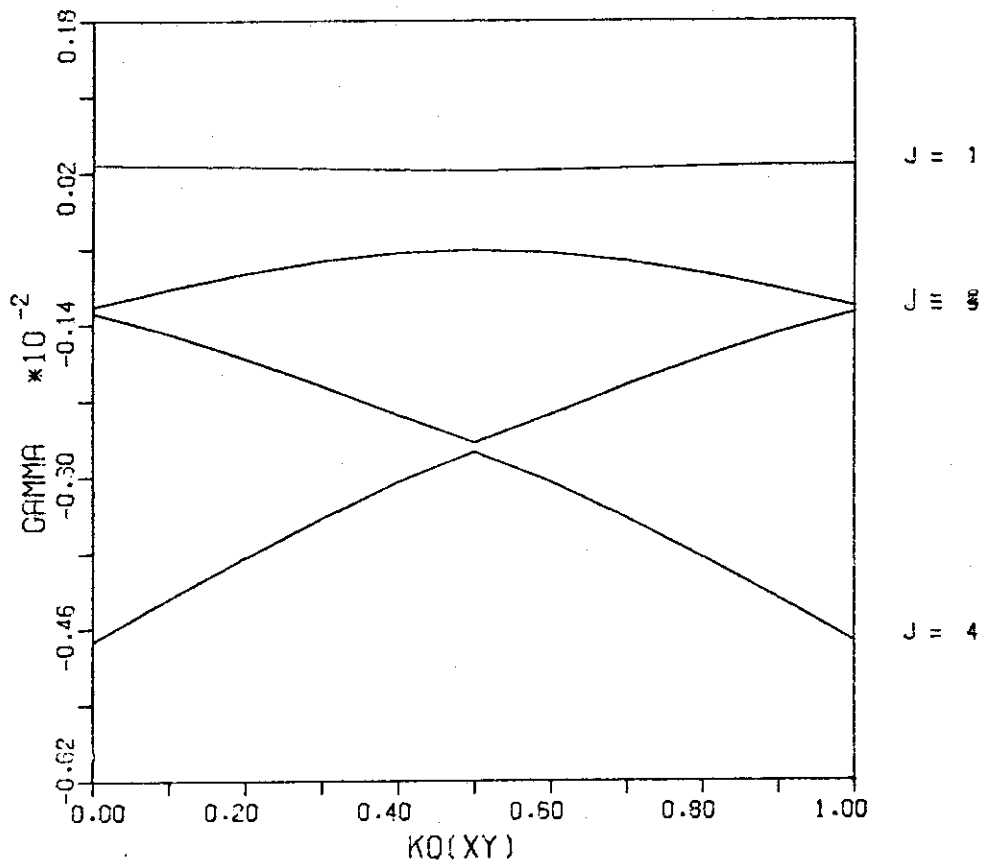


Fig. 11 A section of the dispersion surface in a Si crystal

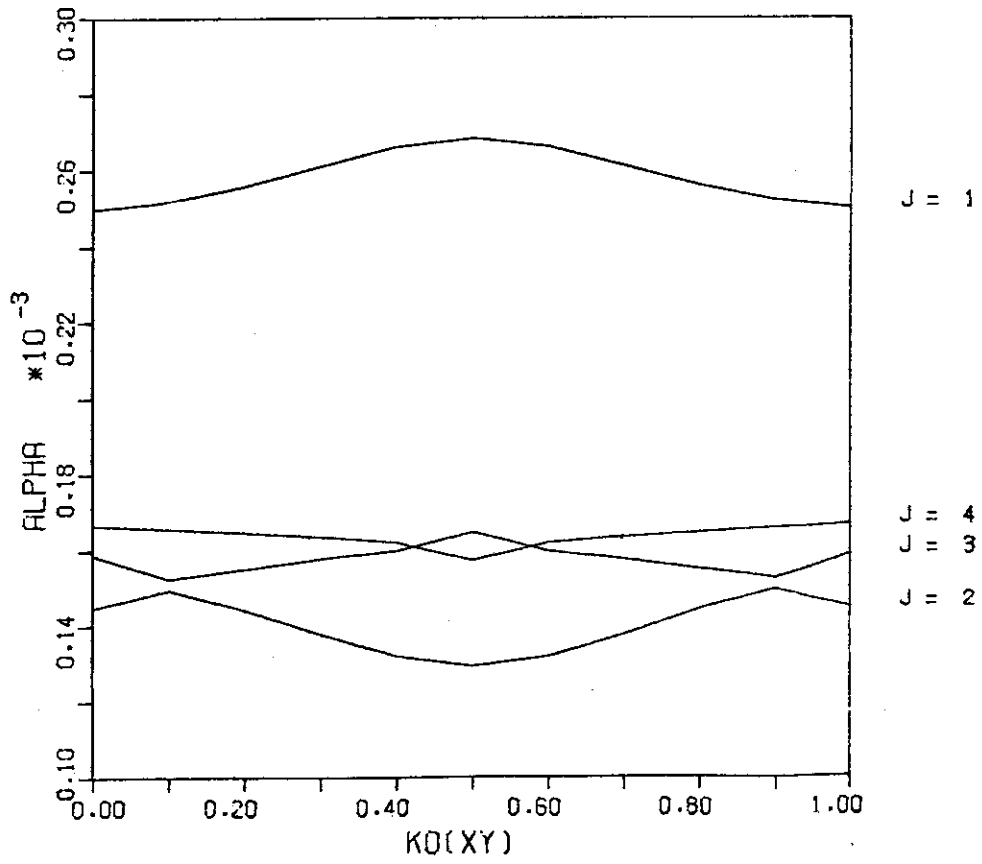


Fig. 12 Absorption coefficient in a Si crystal

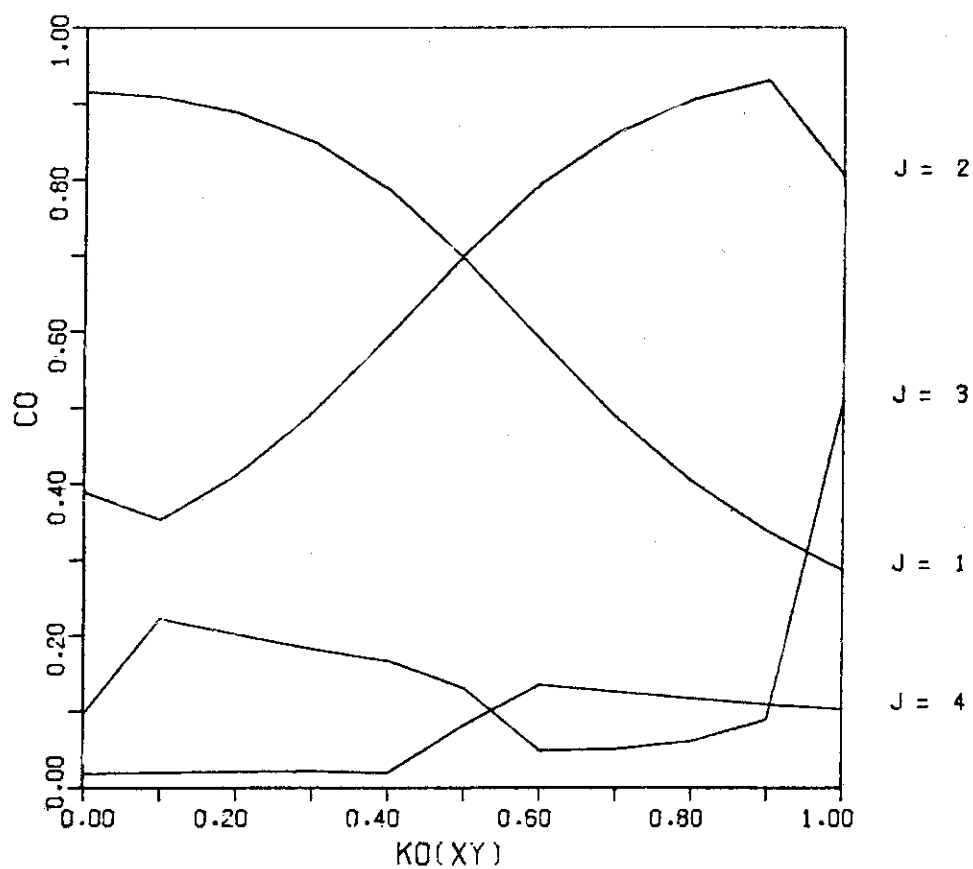


Fig. 13 Excitation amplitude in a Si crystal

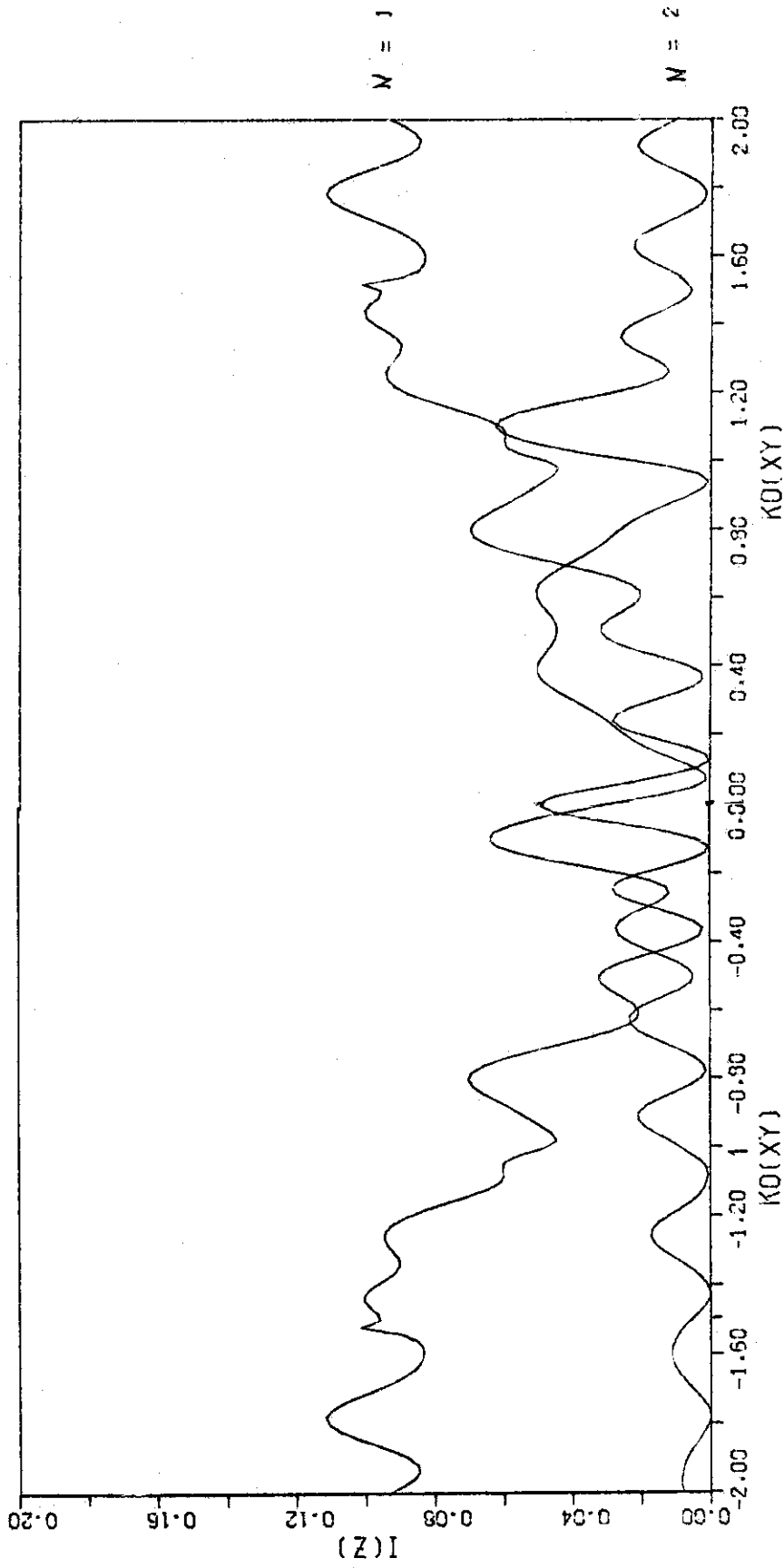


Fig. 14 The k_{0x} dependence of I_{000} ($N=1$) and I_{200} ($N=2$) at $z = 1000\text{\AA}$ of a Cu crystal in a 7-wave approximation

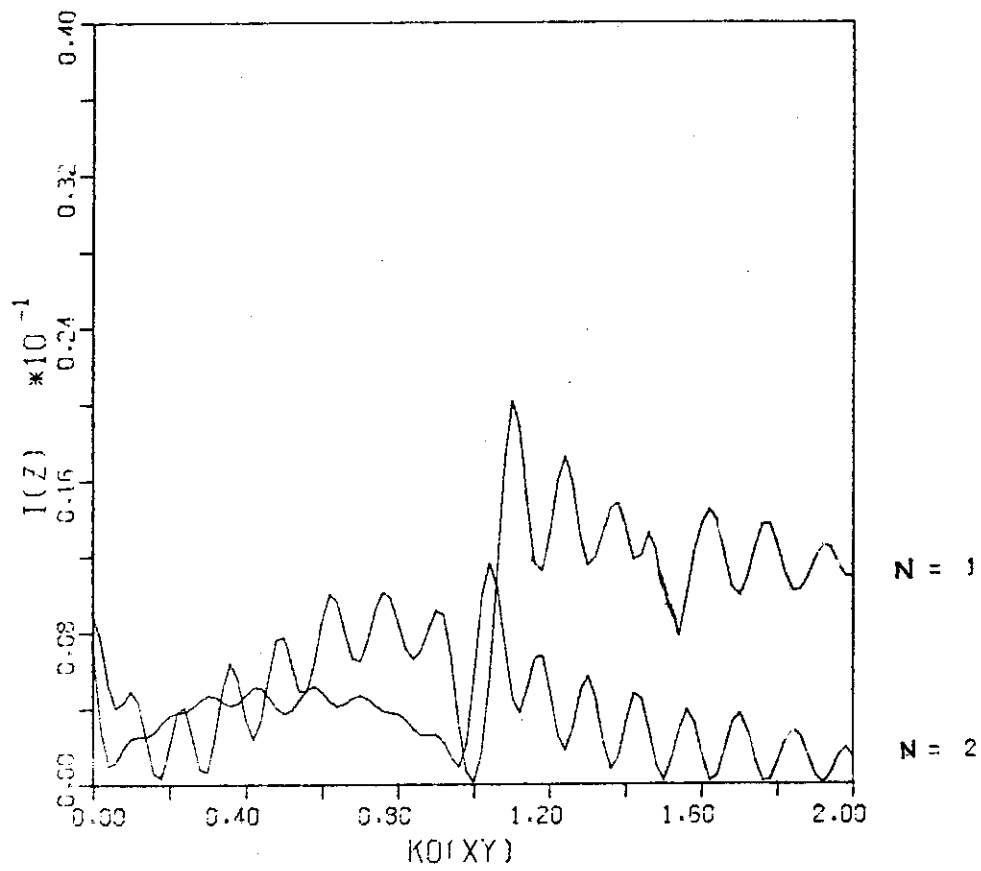
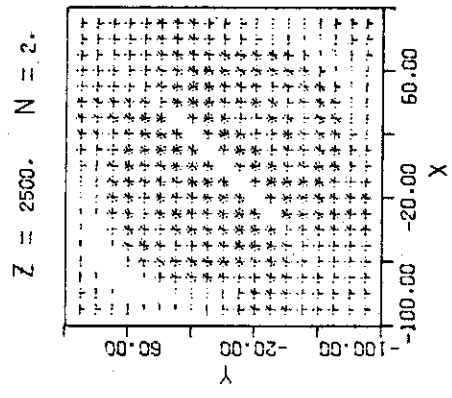
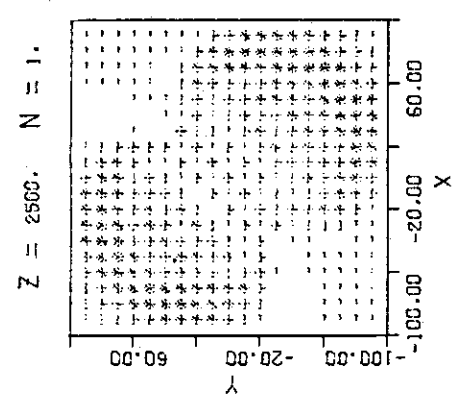


Fig. 15 The k_{0x} dependence of I_{000} ($N=1$) and I_{200} ($N=2$) at $z = 2000\text{\AA}$ of a Cu crystal in a 7-wave approximation

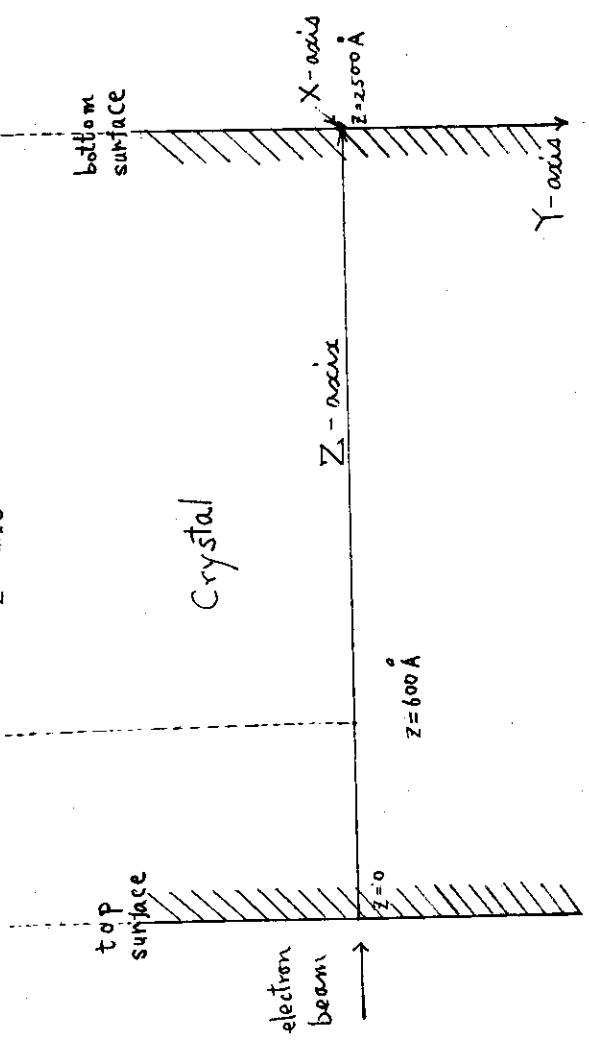
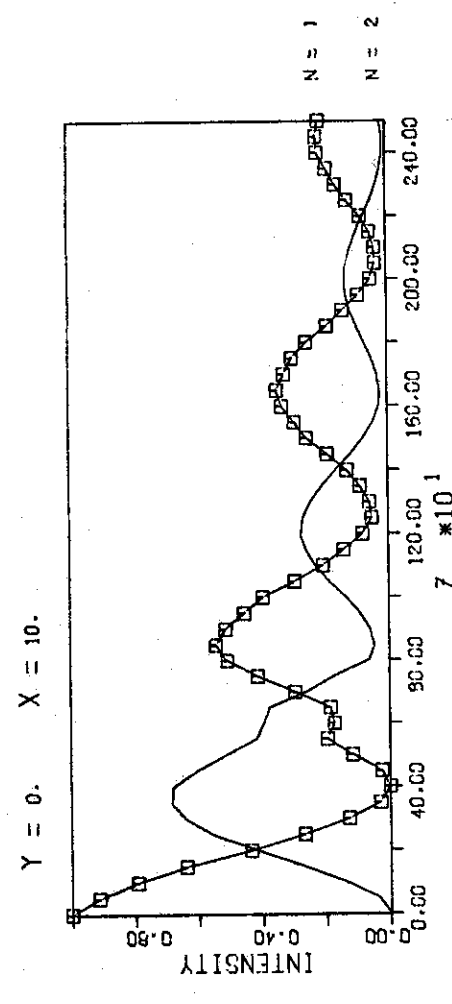
(i) X - Y CONTRAST
Z = 2500. N = 2.



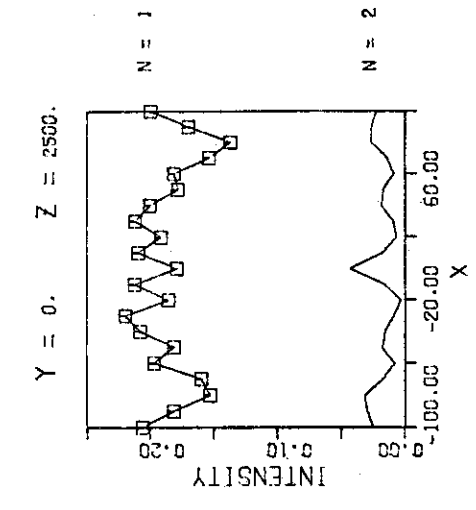
(ii) X - Y CONTRAST
Z = 2500. N = 1.



(iii) I(G) ON Z-AXIS
Y = 0. X = 10.



(iv) I(G) ON X-AXIS
Y = 0. Z = 2500.



(v) I(G) ON Y-AXIS
X = 0. Z = 2500.

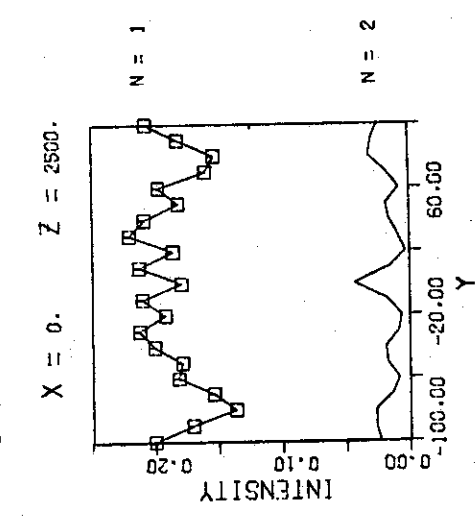


Fig. 16 The intensity profiles and contrast simulation for a Mo crystal with a 2500Å thickness and with symmetry strain in a 4-wave approximation
 (i) I_{000} (N=1) and I_{220} (N=2) profiles along Z-axis
 (ii) The contrast simulation of I_{000} (N=1) at the bottom surface
 (iii) The contrast simulation of I_{220} (N=2) at the bottom surface
 (iv) I_{000} (N=1) and I_{220} (N=2) profiles along x-axis on the bottom surface
 (v) I_{000} (N=1) and I_{220} (N=2) profiles along y-axis on the bottom surface

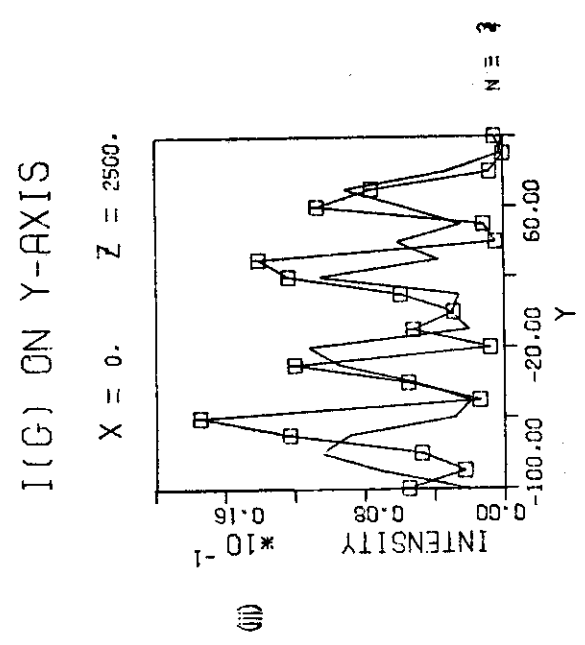
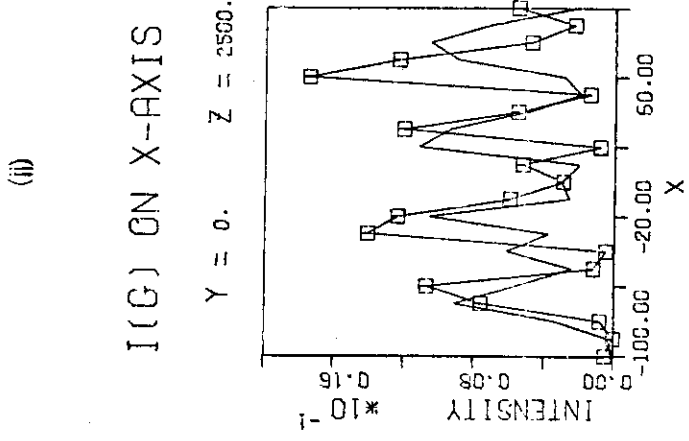
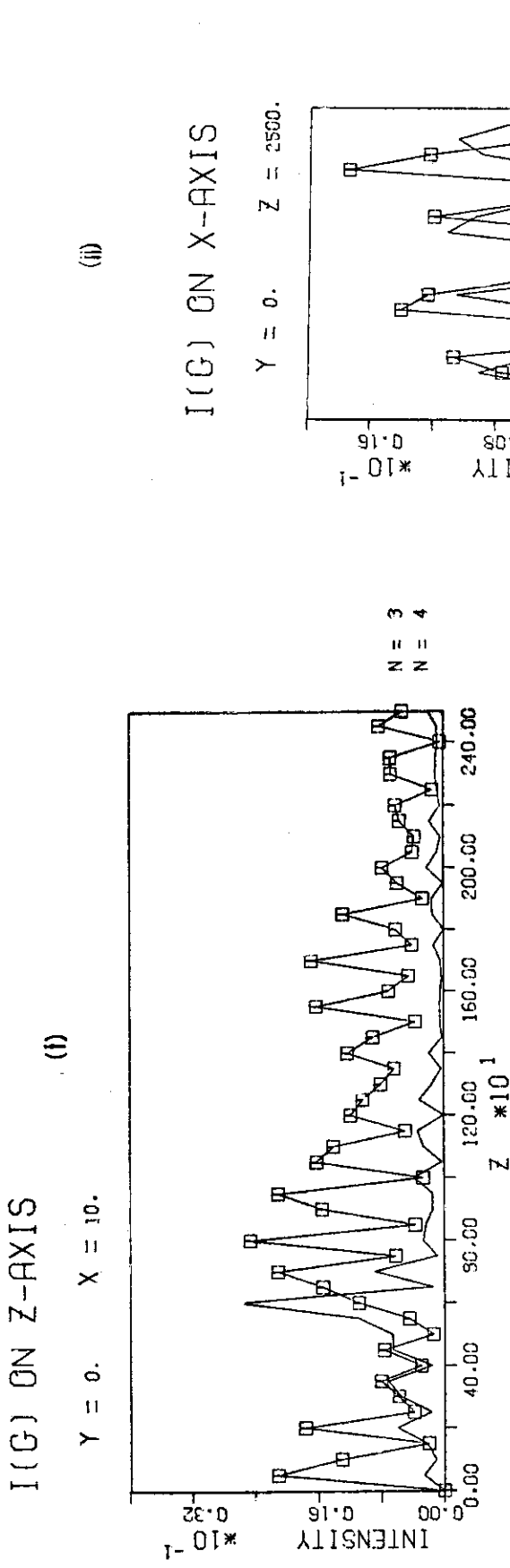


Fig. 17

The intensity profiles for a Mo crystal with a spherical symmetry strain in a 4-wave approximation

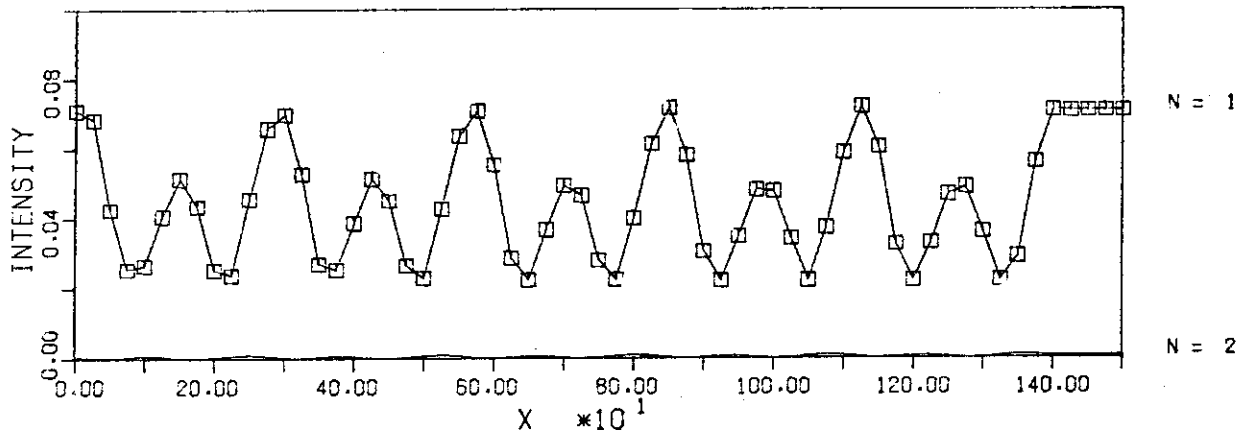
(i) I_{220} (N=3) and I_{470} (N=4) profiles along z-axis

(ii) I_{220} (N=3) and I_{470} (N=4) profiles along x-axis on the bottom surface

(iii) I_{220} (N=3) and I_{470} (N=4) profiles along y-axis on the bottom surface

(i)

Y = 0. Z = 2000.



(ii)

Y = 0. Z = 2000.

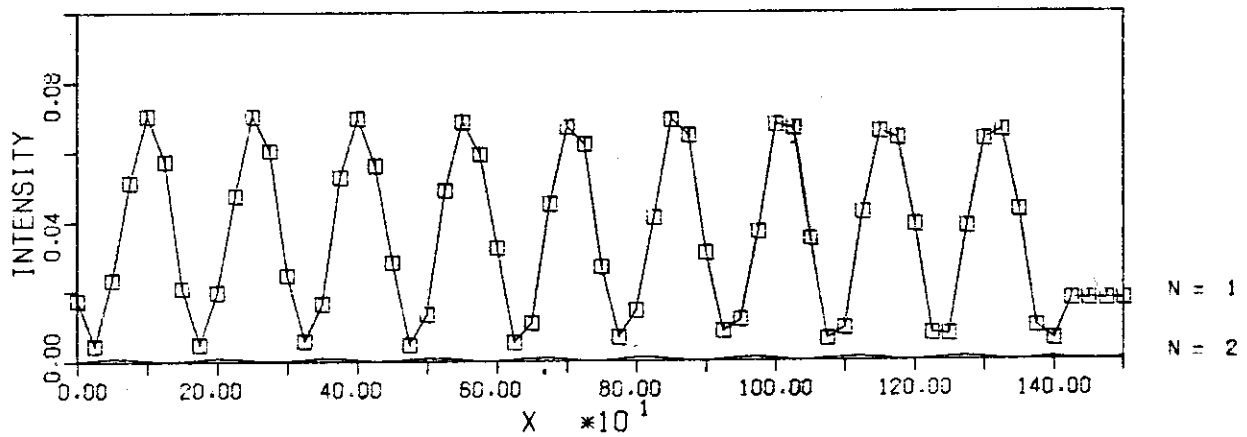


Fig. 18 The intensity profiles for a Cu crystal with a 2000^o thickness and with a stacking fault in 2-wave approximation
 (i) I_{000} (N=1) and I_{111} (N=2) profiles at $k_{0x}=0$.
 (ii) I_{000} (N=1) and I_{111} (N=2) profiles at $k_{0x}=0.5[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$

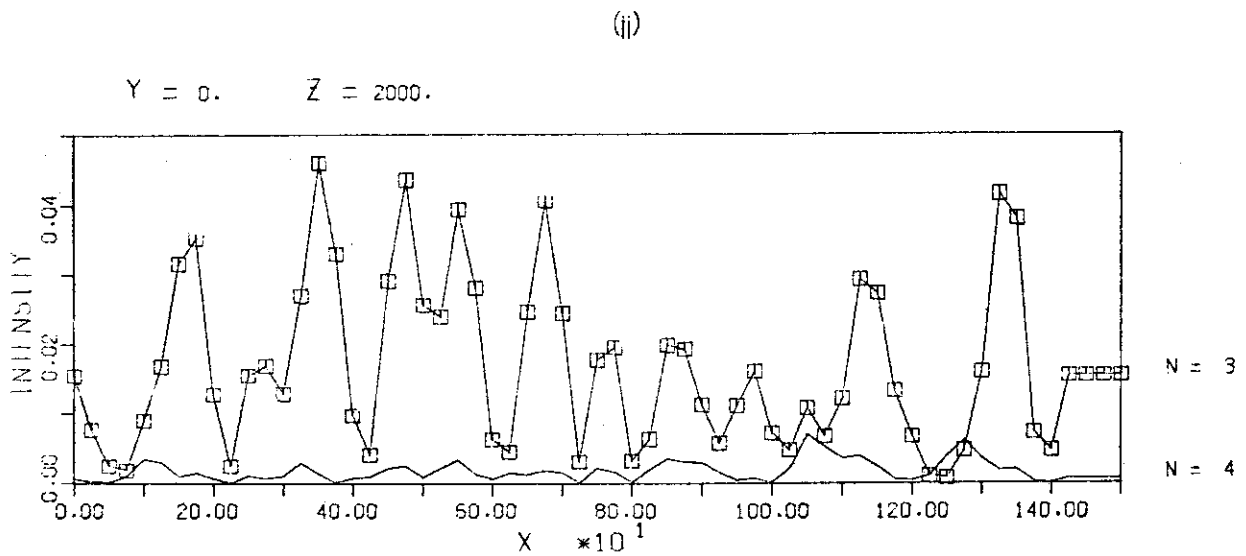
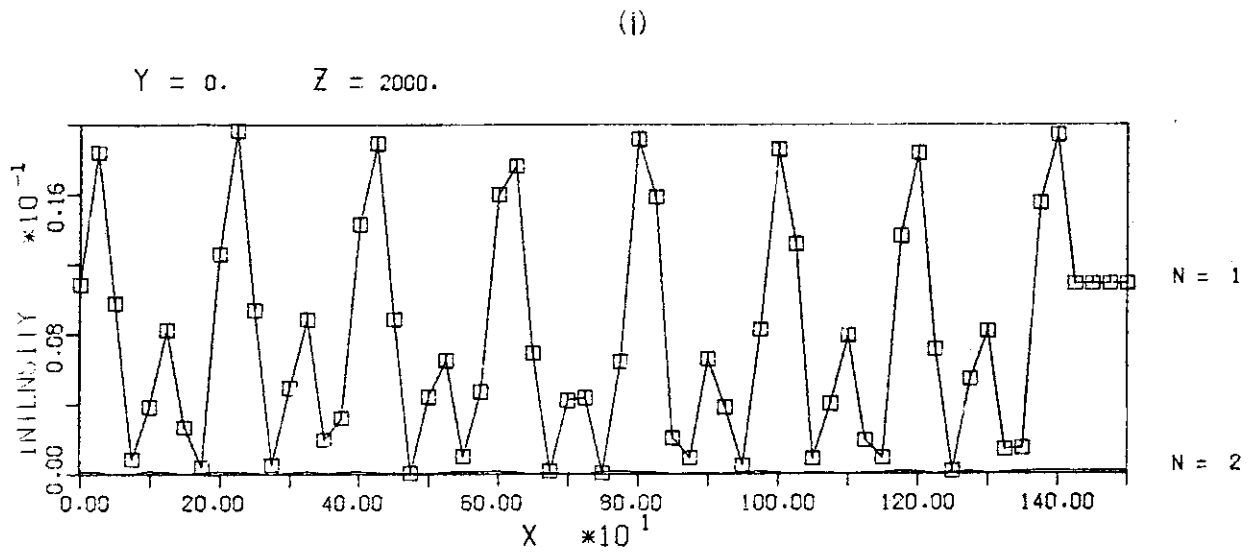
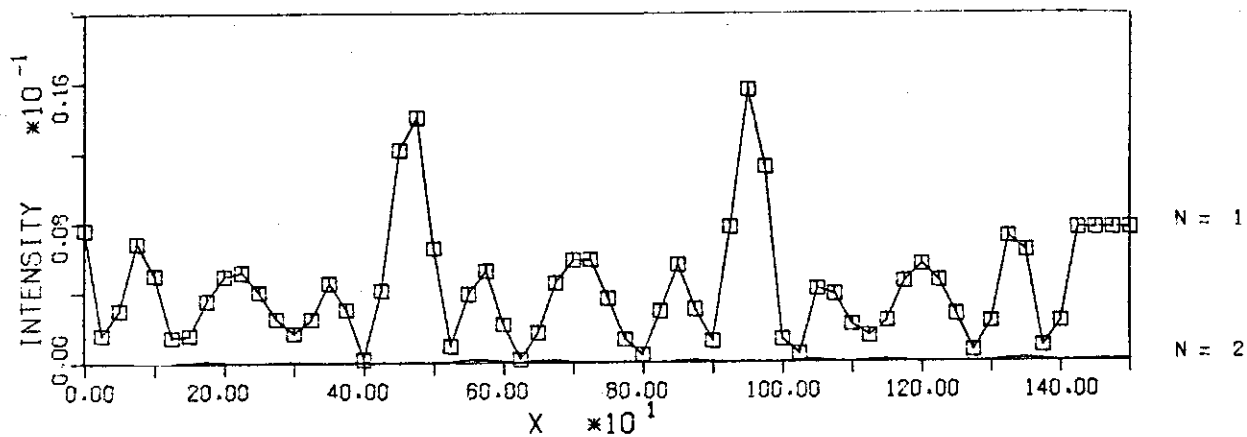


Fig. 19 The intensity profiles for a Cu Crystal with a 2000\AA thickness and with a stacking fault, for $k_{OX} = 0$ in a 7-wave approximation
 (i) I_{000} ($N=1$) and I_{111} ($N=2$) profiles
 (ii) I_{111} ($N=3$) and I_{222} ($N=4$) profiles.

(i)

Y = 0. Z = 2000.



(ii)

Y = 0. Z = 2000.

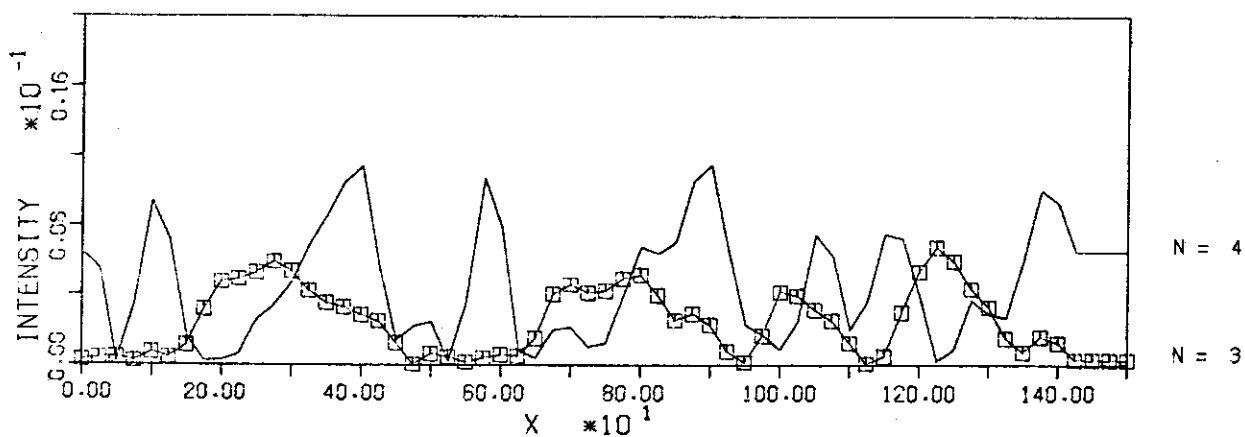


Fig. 20 The intensity profiles for a Cu crystal with a 2000\AA thickness and with a stacking fault for $k_{ox}=0.5[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ in a 7-wave approximation
 (i) I_{000} ($N=1$) and I_{111} ($N=2$) profiles
 (ii) $I_{\bar{1}\bar{1}\bar{1}}$ ($N=3$) and I_{222} ($N=4$) profiles