

17a-A13-2

表面 X 線回折における位相問題解決の現状と展望**Present status and prospects of solving the phase problem in surface X-ray diffraction****東大物性研 高橋敏男****Institute for Solid State Physics, Univ. of Tokyo Toshio Takahashi****E-mail: ttaka@issp.u-tokyo.ac.jp**

X 線の散乱回折現象の観測において、測定されるのは散乱波の強度である。したがって、散乱波のもつ位相情報は観測過程において消失してしまう。散乱過程を一回散乱で近似できる場合には、散乱波と散乱体の電子密度とはフーリエ変換の関係にある。このため、散乱波の位相情報を何らかの方法で取得回復することができれば、測定データから直接的に散乱体の電子密度を求められることになる。これがいわゆる散乱回折現象における位相問題である。

X 線では、多くの場合一回散乱の近似がよく成り立つので、3 次元周期性のあるバルク結晶の場合には位相問題はほぼ解決しており、4 軸 X 線回折計による積分回折強度測定から単結晶の構造を解くことはルーチン化している。これに対して、基板結晶上に成長させた薄膜試料で代表されるように、高々 2 次元周期性しかないような試料では、位相問題を解決する方法は確立しているとは言い難い。

我々は、これまで表面 X 線回折法を主な測定法として、表面界面の構造に関する研究を行ってきた。これまでの経験を通して、直接にモデルフリーに構造を解くことの必要性・重要性を痛感している。本講演では、表面 X 線回折における位相問題解決への取り組みの現状を概観し、問題点を指摘することを通して今後を展望したい。