

氏名	パベル カリモフ Pavel KARIMOV
学位(専攻分野)	博士(工学)
学位記番号	論工博第3805号
学位授与の日付	平成16年7月23日
学位授与の要件	学位規則第4条第2項該当
学位論文題目	Characterization and design of advanced stratified materials using X-ray spectroscopy (X線分光法を用いた先進多層材料のキャラクタリゼーション及び設計)
論文調査委員	(主査) 教授 河合 潤 教授 長村 光造 教授 田中 功

### 論文内容の要旨

本論文は、高分解能蛍光 X 線分光法、X 線吸収分光法、共鳴 X 線散乱分光法、及び X 線反射率分光法を用いて、先進材料の表面及び多層膜構造の電子状態・密度・構造に関するキャラクタリゼーションを行い、それを基に、X 線導波路の設計指針の提案を行ったものであって本文 6 章と 3 章の補足章からなっている。得られた研究成果の概要は、次のようにまとめられる。

第 1 章は序論であり、歴史的記述及び一般論、次章以降の要約が述べられている。

第 2 章では、高分解能蛍光 X 線分光法と X 線吸収分光法を用いて HgSe 半導体にドーブされた鉄の原子価状態に関する研究について述べている。HgSe 半導体結晶表面に不純物元素としてドーブされた鉄原子は、磁性半導体としての性質を示し、結晶中で鉄は 2 価と 3 価の混合原子価状態をとっていると考えられている。鉄の X 線スペクトルの測定により、鉄濃度の増加につれて 3 価の割合が減少するとともに 2 価の割合が増加することを見出した。

第 3 章では共鳴 X 線散乱分光法を用いて LiBC 結晶の電子状態に関する研究を述べている。LiBC 結晶は、高温超伝導を示すホウ化マグネシウムにおいて、マグネシウムをリチウムに置換するとともにホウ素と炭素が交互にホウ素位置を占める結晶と考えることができる。ホウ素の共鳴非弾性 X 線散乱スペクトルの測定結果を密度汎関数計算と比較することにより、非化学量論比の LiBC が超伝導性を示さない原因として、(1)ホウ素と炭素の軌道混成が小さい、(2)リチウムがインターカレーション位置から離れないために空孔が十分に生成されない、という 2 つの理由が複合したものであることを述べている。

第 4 章では、材料データベースを基礎として汎用的な X 線反射率計算プログラムを製作したことに関して述べている。計算の原理及び従来からある計算プログラムとの比較に関して述べている。

第 5 章では、多層薄膜に白色 X 線を照射したときの反射 X 線エネルギースペクトルの測定結果と第 4 章のプログラムによる計算結果とを比較することによって、多層薄膜の新しいキャラクタリゼーション方法を提案し、実際的な多層薄膜のキャラクタリゼーションへ応用した点に関して述べている。

第 6 章では多層薄膜を用いた平板 X 線導波路の設計に関して述べている。多層薄膜を用いた平板 X 線導波路は、X 線マイクロビーム生成のための光学素子として期待されている。遺伝学的アルゴリズムを用いて多層薄膜構造を突然変異させ、さまざまな多層薄膜構造に対して、X 線反射率計算プログラムを適用したところ、従来は物理的直感から、軽元素を重元素で挟んだ構造が導波路として適していると信じられていたのに対して、軽元素を軽元素で挟む構造の方が干渉効果を用いた X 線導波路としてより優れていることを理論計算によって示したことにに関して述べている。

最後に結論の章があり、本論文で得られた成果について要約している。

補足章 A では界面における X 線の屈折と反射について、第 4 章のプログラミングに用いた物理的な式を要約して述べている。

補足章 B では遺伝的計算アルゴリズムについて、本論文で用いた方法の詳細について述べている。

補足章 C では第 4 章で述べたデータベースプログラムの詳細について述べている。

## 論文審査の結果の要旨

本論文は、高分解能蛍光 X 線分光法、X 線吸収分光法、共鳴 X 線散乱分光法、及び X 線反射率分光法を用いて、先進材料の表面及び多層膜構造の電子状態・密度・構造に関するキャラクタリゼーションを行い、それを基に、X 線導波路の設計指針の提案を行ったものである。得られた研究成果の概要は、次のようにまとめられる。

- (1) 半導体結晶表面に不純物元素としてドーパされた鉄原子は、磁性半導体としての性質を示し、結晶中で鉄は 2 価と 3 価の混合原子価状態をとっていると考えられている。鉄の X 線スペクトルの測定により、鉄濃度の増加につれて 3 価の割合が減少するとともに 2 価の割合が増加することを見出した。
- (2) LiBC 結晶は、高温超伝導を示すホウ化マグネシウムのマグネシウムをリチウムに置換するとともにホウ素と炭素が交互にホウ素位置を占める結晶と考えることができる。ホウ素の共鳴非弾性 X 線散乱スペクトルの測定結果を密度汎関数計算と比較することにより、非化学量論比の LiBC が超伝導性を示さない原因として、(1)ホウ素と炭素の軌道混成が小さい、(2)リチウムがインターカレーション位置から離れないために空孔が十分に生成されない、という 2 つの理由が複合したものであることを示した。
- (3) 材料データベースを基礎として汎用的な X 線反射率計算プログラムを製作しインターネット上に公開した。多層薄膜に白色 X 線を照射したときの反射 X 線エネルギースペクトルの測定結果とこのプログラムによる計算結果を比較することによって、多層薄膜の新しいキャラクタリゼーション方法を提案し、実際の多層薄膜のキャラクタリゼーションへ応用した。
- (4) 多層薄膜を用いた平板 X 線導波路は、X 線マイクロビーム生成のための光学素子として期待されている。遺伝学的アルゴリズムを用いて多層薄膜構造を突然変異させ、さまざまな多層薄膜構造に対して、X 線反射率計算プログラムを適用したところ、従来は物理的直感から、軽元素を重元素で挟んだ構造が導波路として適していると信じられていたのに対して、軽元素を軽元素で挟む構造の方が干渉効果を用いた X 線導波路としてより優れていることを理論計算によって示した。

以上、要するに、本論文は、X 線分光法を用いて、先進材料多層膜構造のキャラクタリゼーションを行い、それを基に、X 線導波路の設計指針の提案を行ったものであり、学術上、実際上寄与するところが少なくない。よって、本論文は博士(工学)の学位論文として価値あるものと認める。また、平成16年5月19日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行った結果、合格と認めた。