

# 水平型 4 軸 X 線回折計と APD 検出器による精密構造解析

坂倉 輝俊

東北大学多元物質科学研究所

結晶の単位胞内の波動関数を二乗してフーリエ変換すると、これは X 線の回折振幅を与える式となる。すなわち、X 線回折法は軌道波動関数を計測できる手法である。しかしながら、これまでの技術水準では 1) 統計誤差の低減、2) 系統誤差の低減、3) 計測データから軌道波動関数の情報を抽出する技術（解析ソフトウェア）が未洗練であるために、このような技術は実現していなかった。我々は世代を超えた 20 年余りに亘る研究により、これらの課題を着実に克服してきた[1]。

統計誤差の低減に資する技術としては、高輝度光源、それを活かす複数素子積層型の APD 検出器[2]、および、縦偏光ビームラインならではの高精度かつ高速な水平型 4 軸回折計が挙げられる。系統誤差の低減に寄与する技術としては、結晶回転に 3 軸以上の回転機構を持つ 4 軸回折計のような回折計でのみ実現可能な多重散乱回避測定法[3]が挙げられる。これは結晶構造の情報と入射 X 線との位置関係とから多重散乱の混入率を予測し、悪条件での測定を極力回避するインテリジェントな計測法である。図 1 に異なる計測条件の下で得られる軌道整列化合物  $\text{YTiO}_3$  の電子密度分布を示す。APD 検出器と多重散乱回避を共に利用した(a)でのみ  $\text{Ti-3d}^d$  の軌道秩序の観測に成功しており、多重散乱回避を用いなかった(b)および、検出器に Scintillation Counter (SC)を用いた(c)では失敗している。また、今年度になって 40 年来の課題であった波動関数を用いたモデリングを可能とする解析ソフトウェアも実現した結果[4]、高精度かつ高確度な計測データから軌道波動関数の動径分布、線形結合係数を求める事も可能となった。講演では軌道波動関数計測装置開発の取り組みと成果について紹介する。

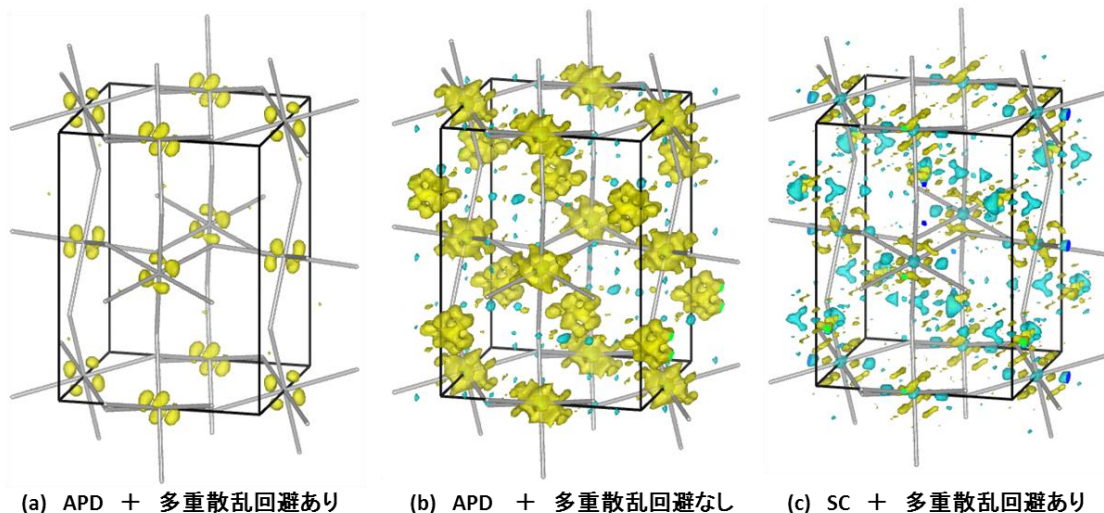


図2 測定法の違いによる $\text{YTiO}_3$ における $\text{Ti-3d}^d$ の観測電子密度

[1] T. Sakakura, The 14<sup>th</sup> K-J Meeting on Neutron Science 国際会議招待講演, (2015. 1.9), 他

[2] S. Kishimoto *et al.*, Rev. Sci. Instrum. 69, 384-391, (1998).

[3] K. Tanaka *et al.*, Acta Cryst. A 50, 246-252, (1994).

[4] 坂倉輝俊、日本物理学会シンポジウム講演 15pAH-4、(2016.9.15)、 他