

多重散乱回避技術の開発と構造物性研究への応用

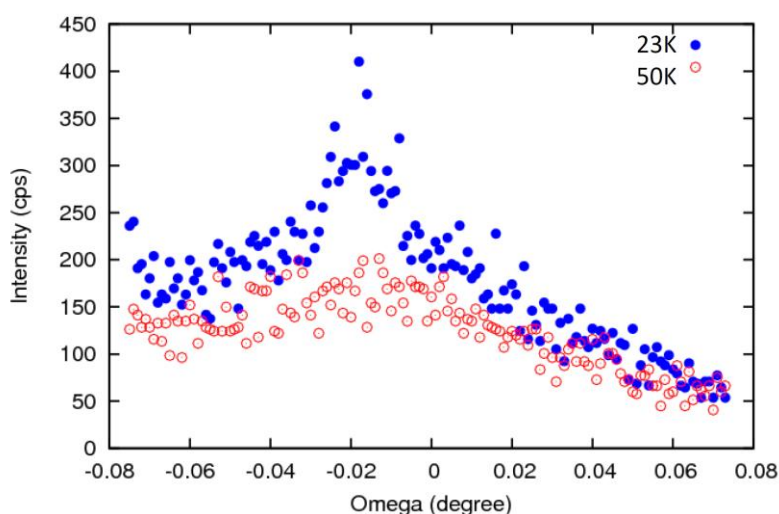
Multiple Diffraction Avoidance Techniques and Its Application to Crystal Structure Science

坂倉輝俊、木村宏之、石川喜久、中野隆裕、野田幸男
東北大学多元研

結晶構造解析とは「回折強度を標本とした統計推量」である。従って標本の S/N 比の改善と、短波長利用による標本規模の拡大とが精度向上の鍵である。短波長高輝度放射光が利用可能である今日、この2つの課題は共に解決を見るべきである。しかしながら、前者の課題は未だ解決を見ていない。その主要因は、運動学理論値と実際の回折強度との間には多重散乱に由来の強度ずれがあるためである。多重散乱を回避する技術の開発は前者の課題に対する克服法であり、開発が必要である。

多重散乱を回避するには、目的反射のみを回折球上に載せ、他の反射を回折球上から外す必要がある。放射光は実験室光源に比べ回折球の厚みが薄い事から、このような研究に適する。回折球と逆格子点との最適な位置関係を探る多重散乱回避ソフトウェア MDC++ を作成し、マルチフェロイック結晶 YMn_2O_5 について、多重散乱回避測定を試みた。回折計には垂直偏光ビームライン BL-14A の水平型 4 軸回折計を用い、検出器には APD 検出器を使用した。

YMn_2O_5 は 40.7K 以下の強誘電相で b 軸に垂直な a 映進面が消失する事が、Spring8 での測定^[1]により確認されていたが、多重散乱回避を行う事で、より



精密にこれを測定する事に成功した。しかしながら、多重散乱の可能性が示唆されるプロファイルも複数観測された事から、ソフトウェアの信頼性の検証と、今後の強度補正理論の確立を目的に、より基礎的な研究を進める予定である。

[1] 野田ら, 日本放射光学会年会講演概要集, p53,(2007)

図1: 700 反射の強誘電相(23K)及び常誘電相(50K)におけるピークプロファイル。 $\lambda = 0.85 \text{ \AA}$ 。