

SuperHRPD を用いた機能性物質の構造研究と方法論の開発(2009S05) Development of methodology and structural science of functional materials using SuperHRPD (2009S05)

野田幸男¹、石川喜久²、鳥居周輝²、Junrong Zhang²、富安亮子²、神山崇²、米村雅雄²、鬼柳亮嗣³、伊藤満⁴、菅野了次⁵

1 東北大多元研、2 KEK-物構研、3 JAEA-J-PARC、4 東工大応セラ研、5 東工大総合理工

J-PARC には分解能や強度、目的の異なる6台の粉末中性子回折装置が稼働しているが、そのうち、分解能や強度の点において、超高分解能の SuperHRPD、高分解能・高強度の iMATERIA、超高強度の NOVA と棲み分けが出来ている。SHRPD の目指す分解能は放射光の超高分解能粉末回折装置と同程度の $\Delta d/d=0.03\%$ である。このような超高分解能が何故必要かという、従来の装置では分離不可能な微小歪みを伴う相転移が多数見つかっているからである。これは、物性測定の感度が年々良くなることと裏腹の関係にある。現実には、回折実験や構造研究が物性測定の精度向上に追いついていない。

SHRPD は MLF 最初の装置の1つとして2008年5月から調整を開始し、単結晶シリコンを用いて検出器サイズや配置、試料の寄与を最小とした場合の($\Delta \theta=0$)の最高分解能が $\Delta d/d=0.035\%$ 以下と世界最高を持つ事を確認した。当初は Sirius を移設していたが、2009年に SHRPD 専用の真空槽に置き換えた。2011年の震災では長尺ビームライン棟の沈下とガイド管の破損と大きな被害を受けたが、2012年4月から再調整運転を開始、2013年8月から本格復旧を実施する予定である。

現在、Sirius の検出器をリサイクルして用いているため、背面反射全てを使用すると試料サイズ $\phi 6\text{mm}$ では $\Delta d/d=0.08\%$ と目標分解能を実現できていない。現状の検出器を用いて、検出器範囲を $2\theta > 175^\circ$ として試料サイズを $\phi 6\text{mm}$ とすると $\Delta d/d=0.05\%$ を実現できることが実証できたが強度は激減する。現在、 $\phi 8\text{mm}$ の新しい検出器と交換する計画が進んでおり、交換後には $2\theta > 175^\circ$ で $\Delta d/d=0.04\%$ になると予想されるので、その時点でここ数年行ってきた STO18 の強誘電相の問題は解決できるものと思われる。一方、現状の高い分解能を利用してこれまでも幾つかの成果を上げてきた。最高のイオン導電率を持つ固体電解質 $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$ の構造解析(Nature Materials 10, 682-686 (2011))等、詳細は講演で報告する。