



AichiSR BL5S2 粉末回折測定の高度化

井田隆¹

1 名古屋工業大学先進セラミックス研究センター

1. 背景と研究目的

あいちシンクロトロンのように加速器技術の実用利用が企図された施設にあっては、ユーザのニーズに適切に対応することも、潜在的なユーザのニーズを見出すことも必要である。結晶構造解析のような従来技術を高いレベルで応用することも、最近実用的になってきた技術を他機関に先駆けて応用することも必要である。本研究では従来からの温度制御法による相転移研究、従来は困難とされていたであろうビッグデータからの情報抽出 [1] を試みた。相転移研究の題材として選んだ物質は、現在の情報通信技術を明確に支えるキャパシタ用の材料として用いられるチタン酸バリウムである。

2. 実験内容

ガス吹き付け型の昇温装置を用いて温度を擬似的に連続的に変化させながら回折像のスナップショット撮影を繰り返した。また、試料回転装置を用いて確率論的なデータの解釈を試みた。入射光強度は試料上流側に設置されたイオンチャンバによって記録した。

3. 結果および考察

イオンチャンバに記録された入射光強度は $\pm 20\%$ ほどの変動を示した。冷却水循環系の温度変動による分光器あるいは集光ミラー角度の変動によると思われる。BL5S2光学系のデザインからすれば、当然強度だけでなくビーム強度の空間分布もエネルギー分布も影響を受けることになり、この場合散乱確率の評価は割り算だけでは解決できない。そのような状況であっても、チタン酸バリウムの相転移直下でのピーク位置の変化に関しては、有意なデータは得られた。相転移直前までの回折図形の変化をムービー、鳥瞰図などに編集し、デモンストレーションをした。多大な労力を費やして巨大データを解析して初めて、温度制御ができておらず、相転移温度に至っていないことが判明した。容易で効果的な改善法を提案した。確率論的なデータの解釈については、ほぼ予想通りで、結晶粒径評価が可能であり、わかりやすくデモンストレーションをするための試料調整、最適なオペレーションの方法まで策定した。次回の実験では、トラブルがなければかなりの確率で初心者にも理解しやすい結果の得られることが見込まれる。

4. 参考文献

1. 井田隆, 名古屋工業大学先進セラミックス研究センター年報 2014, Vol. 3, 11-16 (2015).