

# BL04B2 高エネルギーX線回折ビームライン

## 1. 概要

高エネルギーX線回折ビームラインBL04B2では、37 keV以上の高エネルギーX線を用いて、ガラス・液体・アモルファスといった非晶質物質の広い $Q (=4\pi \sin \theta / \lambda, 2\theta$ : 回折角,  $\lambda$ : X線の波長) 範囲データによる高実空間分解能構造解析 (ランダム系ステーション)、ダイヤモンドアンビルセルを用いた高圧下における結晶・非晶質物質の広角回折実験、高温・高圧下における重元素液体・超臨界液体の小角散乱実験 (高圧ステーション) が行われている。近年では非晶質物質の研究を行う研究者の数も増えてきており、それに伴い非晶質物質の構造解析を専門としないユーザーが増えてきた。

このような背景のもと、測定系に関しては、装置の立ち上げから10年になる二軸回折計の制御系のアップグレードを制御・情報部門の協力を得て行った。その結果、GUIに優れた新しいシステムにより操作性が向上し、かつユーザーフレンドリーになり、最低限のBLスタッフの支援で利用者が自主的に操作できるシステムとなった。また、解析系に関しては、昨年度に引き続き、PDF (pair distribution function) 解析ソフトのアップグレードを行い、無容器実験試料加熱用CO<sub>2</sub>ガスレーザーのビームラインへの導入を行った。

## 2. PDF解析ソフトのアップグレード

ランダム系ステーションでは非晶質物質の高精度の回折データを高い散乱ベクトル $Q$ まで取得するために、高エネルギーX線を用いた透過法での測定が行われている。得られた回折データは、吸収、偏光、バックグラウンドの補正を施した後、原子1個あたりの散乱強度に規格化し、コンプトン散乱成分を差し引いて、構造因子 $S(Q)$ に規格化する。さらに、得られた構造因子 $S(Q)$ をフーリエ変換して、実空間関数 (たとえば二体分布関数 $g(r)$ ) を求める。これら一連のデータ解析を行うためのWaveMetrics社のigor上で動作する解析ソフトがユーザーの協力のもと2004年に作成された。本年度は、操作性を向上するとともに、フーリエ変換後の実空間関数から原子数密度 (単位体積あたりの原子の個数) の推定を可能にし、一連の解析が可能なPDF解析ソフトへと改良した (図1)。エネルギー可変でX線異常散乱実験が可能であるBL02B1は、BL04B2と相補的な実験が行えるが、本解析ソフトはこれらのBLの解析に利用できるような汎用的なものとした。なお、本ソフトの高度化はJASRI外来研究員である、László Temleitnerが主体となって行った。

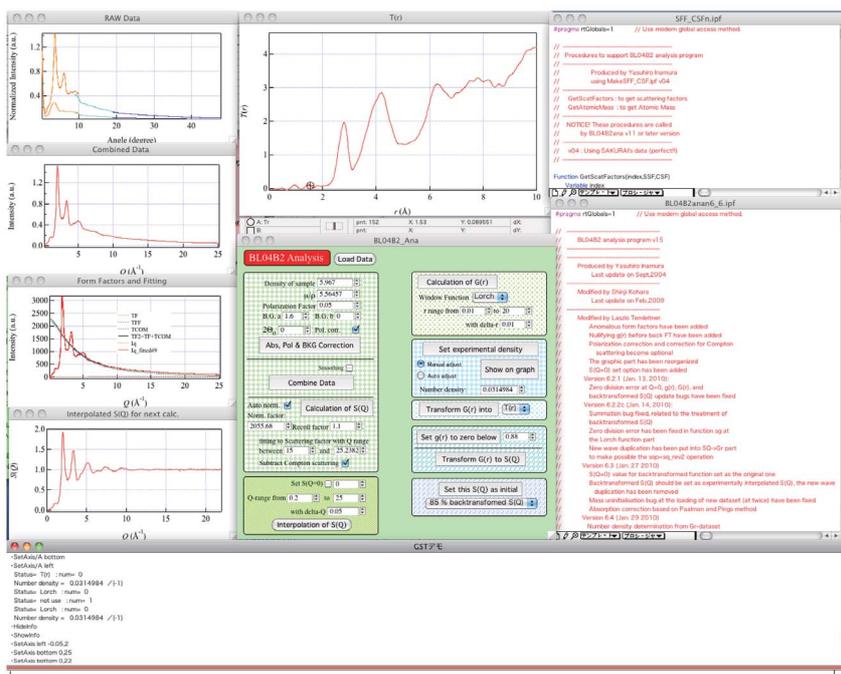


図1 新しいPDF解析ソフトのGUI

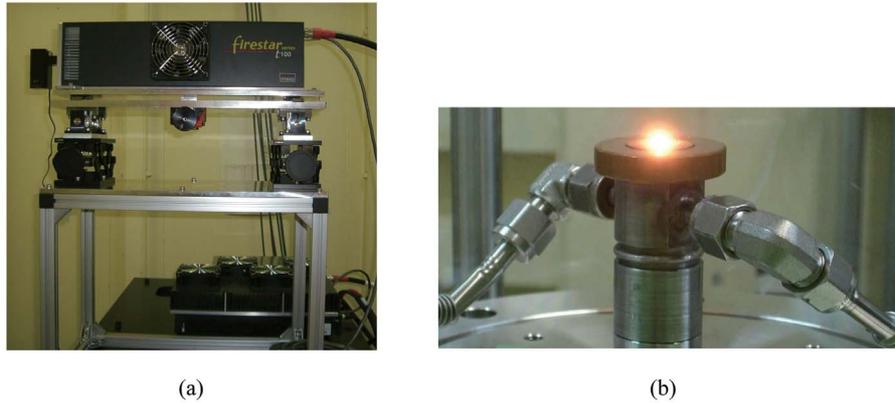


図2 BL04B2実験ハッチにインストールされた100W空冷CO<sub>2</sub>ガスレーザー (a) と不活性ガスで浮遊する高温 (1700℃) 融体 (b)

### 3. 無容器実験試料加熱用CO<sub>2</sub>ガスレーザーのビームラインへの導入

近年、超高温融体および過冷却液体の構造物性研究が盛んになり、無容器で試料を浮遊させる技術が確立した。無容器で2000℃以上の高温で試料を安定に浮遊させる理想的な球形試料サイズは直径2 mm程度であり、放射光高エネルギーX線を用いれば透過法で容易に高精度の実験が可能である。このような実験を行う2種類の電気炉—ガスジェット浮遊炉および静電浮遊炉—が、それぞれ、学習院大水野、JAXA 正木（現芝浦工大）らにより開発されており、超高温および過冷却液体の実験ができるようになった。しかしながら、これらの装置はBL04B2の共用の装置として設置されておらず、その設置および調整に時間を有することが問題となっていた。このため、潜在的な需要が高いにもかかわらず、共用装置としての利用は少なく、その成果も限られていた。そこで、CO<sub>2</sub>ガスレーザーおよびガスジェット浮遊炉（融体を不活性ガスで浮遊させる）の恒久的設置を学習院大 水野、JAXA 余野、東大 増野らのグループと共同で行った。図2にBL04B2の実験ハッチにインストールされた100 W空冷CO<sub>2</sub>ガスレーザーおよび酸素ガスで浮遊している酸化物融体を示す。現在、ガスジェット浮遊装置の立ち上げを行っており、本装置が完成すれば、ユーザーが容易に2000℃以上の超高温での回折実験を行うことが可能となる。

利用研究促進部門

構造物性 I グループ 極限構造チーム

小原 真司、大石 泰生