

白色中性子ホログラフィーによるBドーパSiの局所構造解明

茨城大院理工¹、茨城大工¹、名工院工³、広島市大院情報⁴、熊本大院先端⁵、J-PARCセンター⁶、東工大未来研⁷
大山研司¹、青野美南²、福本陽平²、林好一³、八方直久⁴、木村耕治³、細川伸也⁵、波田拓馬⁴、原田正英⁶、稲村泰弘⁶、筒井一生⁷

機能性材料の多くはその性能を微量元素のドーパによって制御することから、構造物性の視点ではドーパント周囲での構造変化がマクロな性質に大きな影響をおよぼすことが想像できる。この局所環境を三次元的に観測できるほぼ唯一の手法が原子分解能ホログラフィー法であり、放射光X線や電子線ではすでに多くの成果が得られているが、しかし機能性材料において重要な役割をはたす軽元素には感度が低く、軽元素を含む材料での局所構造解明は進んでいない。我々はこの点を克服するため、中性子でのホログラフィーに取り組んでいる。なぜなら中性子はX線、電子線にくらべ物質中の軽元素に対し高い感度を持つからである。特に、高精度原子像を得るには多波長での測定が必要なため、我々は大強度陽子加速器施設J-PARC（茨城県東海村）の強力な白色中性子を用いた多波長中性子ホログラフィー開発をBL10において進めている。

J-PARCでの白色中性子は線源において40msec間隔でパルス状に発生する。すなわち様々なエネルギーの中性子が同時に線源から飛び出すと考えてよく、試料位置ではエネルギーの高い中性子から低い中性子へと順番に到着することになる。このため、波長を変えた測定を繰り返さなくとも、一度に非常に多数、かつ広い波長領域での中性子ホログラムを得ることができる。我々はこの点に着目しJ-PARCのBL10において開発研究と測定を開始している。図1は白色中性子ホログラフィー装置で、 ϕ - ω ゴニオと γ 線検出器からなる簡便な装置で測定可能である。これまでの実験では、一回のマシントイム（5日程度）で130波長でのホログラムを得ることに成功している。放射光施設で得られるホログラムが5~10波長であることを考えれば、J-PARCでの中性子ホログラフィーは精度において放射光を凌駕する可能性すらある。

そこで¹⁰Bを0.26mol%ドーパしたSi単結晶でのホログラフィー実験を行い、Bまわりの局所構造を観測した。BドーパSiはその応用面での重要性にもかかわらず、未だBの位置が実験的に確定しておらず、重要な基礎的課題となっているからである。図1は得られた130のホログラムのうち $\lambda=0.63\text{\AA}$ の極点図データで、[100]軸に平行または垂直な直線構造がみられた。これはB周り局所的な対称性に対応しており、この結果から原子像を再生することに成功した。発表では、実験の原理とメリット、Siでの最近の成果について詳しく報告する。

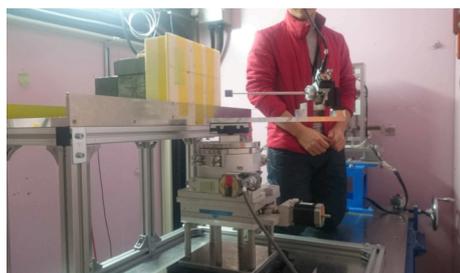


図1 白色中性子ホログラフィー装置。J-PARCのBL10に設置

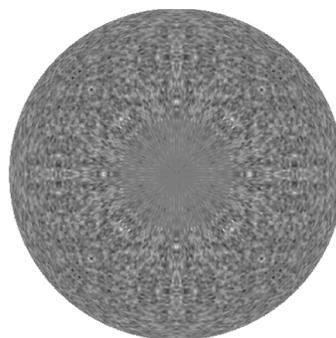


図2 ¹⁰B doped Siでのホログラム。紙面に垂直に[100]軸、水平に[010]軸がある。 $(\lambda=0.63\text{\AA})$ 。Standing waveに対応する直線構造が見えている。