

中性子の新しい使い方：中性子ホログラフィーによるドーパント周りの原子配置の観測

Local Structure Investigations around Dopants by Neutron Holography in J-PARC

大山研司^{1,2}, 福本陽平¹, 上地昇一², 金澤雄輝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, B. Paulus^c, J. Stellhorn^c, M. Lederer^a, 原田正英⁶, 稲村泰弘⁶, 松浦航¹, 伊賀文俊^{1,2}, 筒井一生⁷, P. Wellmann⁸

1 茨城大院理工, 2 茨城大工, 3 名工大院工, 4 広島市大院情報, 5 熊本大院先端, 6 J-PARCセンター, 7 東工大未来研, 8 Erlangen大学

材料科学や固体物理学においては、異種元素ドーピングで物性を制御する事が多い。従って、構造物性の視点からはドーパント周りでの結晶構造の変化（局所構造）が重要なのは明らかだが、局所構造に並進対称性がなく通常の回折法で観測できないことからその理解は十分ではない。我々は、原子局所構造を可視化する手法として、また J-PARC での新しい測定原理として、白色中性子ホログラフィーを開発している。ホログラフィー

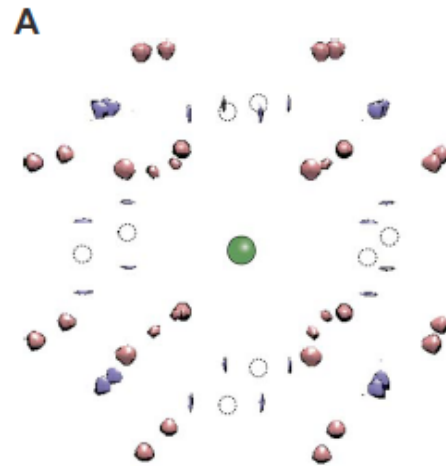


図 1 1% Eu ドープ CaF₂ の Eu (中心) まわりの原子配置 [Hayashi et al., Sci. Adv., 2017]。

は、原子局所構造を可視化する手法として、また J-PARC での新しい測定原理として、白色中性子ホログラフィーを開発している。ホログラフィーは、すでに X 線と光電子線で実用化されており、次の特色がある。1) 特定の元素近傍の原子構造を 3 次元的に観測可能。2) 中心元素から 10-20Å の広い範囲を観測可能。3) 回折実験と異なり、モデルなしで原子像が得られる。一方、機能性材料において軽元素の役割は重要であり、中性子への展開は材料科学に大きなインパクトがある。J-PARC の MLF の BL10 で実験を行い、代表的シンチレーション結晶である Eu ドープ CaF₂ において、図 1 に示すような Eu 周りの 3D 局所構造の可視化に成功し、Eu ドープにより Ca 位置に異常が起きること、Eu 周りに過剰 F が存在し系ており、これが電気的中性を維持していることを示した。[Hayashi et al., Sci. Adv., 2017]。現在、B ドープ Si、Sm ドープ LaB₆ の局所構造観測を進めている。講演では、局所構造理解の重要性、ホログラフィーの原理、最近の成果について報告する。