

湾曲型位置敏感X線検出器を用いたX線回折系の
開発とその物性研究への応用

栗 濱 忠 司

目 次

第 1 章 序章	1
第 1.1 節 本研究の意義と目的	1
第 2 章 湾曲型位置敏感 X 線検出器を用いた X 線回折系	3
第 2.1 節 概説	3
第 2.2 節 湾曲型位置敏感 X 線検出器を用いた X 線回折系	7
2.2.1 湾曲型位置敏感 X 線検出器の動作原理と構造	7
2.2.2 X 線回折信号処理系	12
2.2.3 湾曲型位置敏感 X 線検出装置の感度一様性	17
第 3 章 ミニコンピュータによる回折データ処理	20
第 3.1 節 ミニコンピュータによる	
X 線回折データ収集及び出力	20
第 3.2 節 ワイセンベルグ法の応用	24
第 3.3 節 統計処理による積分強度計算	27
第 4 章 物性研究への応用	35
第 4.1 節 概説	35
4.1.1 強誘電性及び強弾性について	35
第 4.2 節 LiRbSO_4 の相転移と	
転移点における DSC 測定	41
第 4.3 節 湾曲型位置敏感 X 線検出系の	
結晶構造解析への応用	
— LiRbSO_4 の室温相の構造解析 —	48
第 4.4 節 LiRbSO_4 の室温における電場誘起双晶	55

第4.5節	LiRbSO_4 の第Ⅵ相－第Ⅳ相間相転移 －時分割X線回折の可能性の追究－	65
4.5.1	LiRbSO_4 の電場誘起相（第Ⅵ相） の構造解析	65
4.5.2	LiRbSO_4 の第Ⅵ相－第Ⅳ相間相転移の 時分割X線回折の追究	70
第5章	終章	76
第5.1節	結言・将来への展望	76
謝辞		77
参考文献		78

図・表 目次

－ 図 －

第 2 章

図 2 . 1 - 1	ワイセンベルグカメラの原理	4
図 2 . 1 - 2	4 軸型 X 線回折系の原理	6
図 2 . 2 - 1	陽極電圧の大きさと電荷の大きさの関係	8
図 2 . 2 - 2	湾曲型位置敏感 X 線検出器の断面図	9
図 2 . 2 - 3	湾曲型位置敏感 X 線検出器の外観	1 0
図 2 . 2 - 4	湾曲型位置敏感 X 線検出器の動作原理と カソード上の誘導電荷	1 1
図 2 . 2 - 5	湾曲型 X 線検出器を用いた X 線回折系の システムブロックダイアグラム	1 3
図 2 . 2 - 6	時分割 X 線回折の原理	1 5
図 2 . 2 - 7	信号処理系の外観	1 6
図 2 . 2 - 8	直線型 X 線検出器の斜め入射による 検出器の応答	1 8
図 2 . 2 - 9	湾曲型位置敏感 X 線検出器の感度一様性	1 9

第 3 章

図 3 . 1 - 1	強度データ収集のソフトウェアの流れ図	2 1
図 3 . 2 - 1	エワルド球と逆格子の関係	2 6
図 3 . 3 - 1	統計処理を用いた積分強度計算の ソフトウェアの流れ図	2 8
図 3 . 3 - 2	積分強度計算中のグラフィック ディスプレイ上の様子	3 1

第 4 章

図 4 . 1 - 1	強誘電体の分域構造 (模図的)	3 6
図 4 . 1 - 2	強誘電体の自発分極と P - E 履歴曲線	3 7

図 4 . 1 - 3	強弾性体の歪-応力履歴曲線	4 0
図 4 . 2 - 1	LiRbSO_4 の相転移図 ¹⁵⁾	4 2
図 4 . 2 - 2	水溶液蒸発法で作成した LiRbSO_4 の外観 (模図的)	4 4
図 4 . 2 - 3	LiRbSO_4 の DSC チャート	4 5
図 4 . 2 - 4	LiRbSO_4 の第 VI 相の 吟味のための DSC チャート	4 6
図 4 . 3 - 1	LiRbSO_4 の室温における ワイセンベルグパターン	4 9
図 4 . 3 - 2	指数付けのためにチャートをのせた ワイセンベルグパターン	5 0
図 4 . 3 - 3	LiRbSO_4 第 V 相 等価反射の積分強度の一致度	5 1
図 4 . 4 - 1	電極付き試料をゴニオメータヘッド に装着した様子	5 6
図 4 . 4 - 2	LiRbSO_4 の電場誘起双晶を示す ワイセンベルグパターン	5 7
図 4 . 4 - 3	LiRbSO_4 の電場誘起双晶の 逆格子でみたモデル	5 8
図 4 . 4 - 4	LiRbSO_4 の特異なブラッグ反射 の温度依存性	5 9
図 4 . 4 - 5	$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ の双晶の電場に 対する応答	6 1
図 4 . 4 - 6	LiRbSO_4 の外部応力に対する応答	6 2
図 4 . 5 - 1	LiRbSO_4 の第 VI 相の ワイセンベルグパターン	6 7
図 4 . 5 - 2	LiRbSO_4 第 VI 相 等価反射の積分強度の一致度	6 8
図 4 . 5 - 3	$(31\frac{2}{3})$ 反射の出現及び消滅時間	7 2

図 4 . 5 - 4	時分割ワイセンベルグパターン	7 3
図 4 . 5 - 5	第Ⅳ相－第Ⅵ相間相転移の繰り返し により起こるポテンシャルの変形 (予想図)	7 5

－ 表 －

第 3 章

表 3 . 3 - I	反射のプロファイルを 決定するデータ (1)	3 3
表 3 . 3 - II	反射のプロファイルを 決定するデータ (2)	3 4

第 4 章

表 4 . 2 - I	LiRbSO_4 の各転移点 T_c における 転移エンタルピー ΔH と 転移エントロピー ΔS	4 7
表 4 . 3 - I	LiRbSO_4 の第Ⅴ相の原子位置と 等方性温度因子	5 3
表 4 . 3 - II	LiRbSO_4 の第Ⅴ相の原子間距離と 原子結合角	5 4
表 4 . 5 - I	LiRbSO_4 の第Ⅵ相の原子位置と 等方性温度因子	6 9