

広角 X 線回折 Wide-angle X-ray Diffraction (WXR)

- 試料の原子配列に対応した X 線回折パターンから、原子レベルの構造情報を得る
- 未知試料の同定、定量分析や三次元原子配列の決定に有効
- 薄膜試料の構造評価や残留応力の測定等、応用は広範囲に渡る

測定原理 物質に X 線を入射すると、物質中の原子により X 線が散乱される。各原子によって散乱された X 線は干渉し、原子配列および回折角に関するブラッグの回折条件を満たす角度に強く観察される。これを利用して、散乱 X 線の角度分布を測定することにより、物質中の原子配列に関する情報を得る。

得られる情報 分子の三次元構造の決定(単結晶 X 線回折)、構成成分の同定や定量、結晶子サイズや結晶化度の測定(粉末 X 線回折)を行うことができる。薄膜解析では基盤上に蒸着した薄膜の密度や結晶性、結晶軸の方向や周期を調べることができる。

特徴 原子・分子スケールの構造情報を得るために一般に広く用いられる手法である。対象物質の応用範囲が広く、有機・無機材料、結晶および非晶質を問わず有効である。

応用例 高エネルギー放射光を用いた溶接部表面内部残留応力測定 (SPring-8) : 鉄鋼材料の溶接時、表面および内部に生じる残留応力を X 線回折ピーク位置の変化から解析

http://www.spring8.or.jp/ext/ja/iuss/htm/text/06file/eval_stre-17_fatig_dam-6/kurimura.pdf

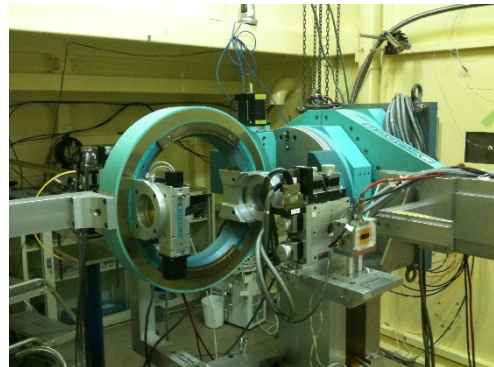


図 1. 四軸回折計 (KEK, BL-3A)*1

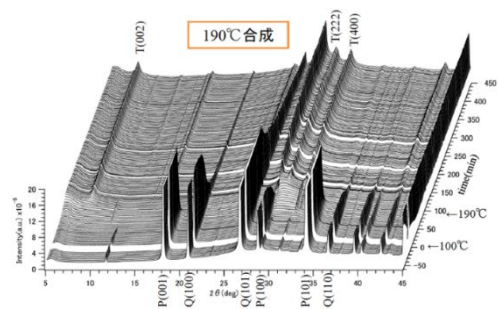


図 2. 軽量気泡コンクリート形成過程の in-situ XRD 測定*2

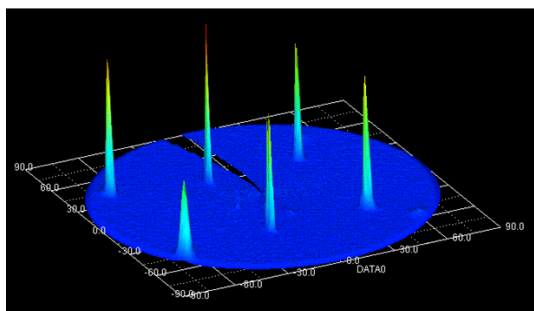


図 3. アルミナ薄膜の配向性評価(極点図)*3

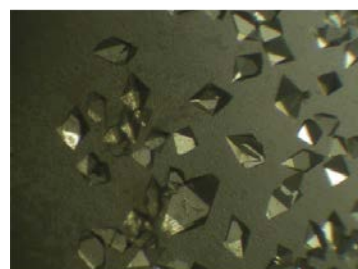


図 4. 単結晶 XRD によるタンパク質の三次元構造解析*4

東北放射光施設における展開 軟 X 線を利用した高精度のタンパク質構造解析、高輝度マイクロビームを利用した微小部 XRD、時分割測定による化学反応・変形の in-situ 観察への応用が期待できる。