

## 演習課題 M02：非晶質の構造を調べよう

担当教員：京都大学 小野寺 陽平 KEK 物質構造科学研究所 本田 孝志

私たちの身の回りには様々な物質、物性の基礎となる結晶構造。その構造に含まれる原子位置や規則性は回折実験を用いることで調べることができる。回折実験には量子ビーム（X線、中性子線等）を用いることで、元素選択的な情報から軽元素の情報まで各ビームの特色を生かした観測が可能となる。

しかし、結晶ではなくガラス等の非晶質や液体といった原子が不規則的に配列した物質群の場合、一般的な量子ビーム回折実験では構造を調べることは不可能である（それぞれの構造は図1(a,b)を参照）。図2に結晶と非晶質のX線回折プロファイルを示すが、規則的な原子配列を反映した sharp なピークを示す結晶（Crystal）とは異なり、不規則な原子配列を持つ非晶質（Amorphous）では broad かつ非常に弱い回折プロファイルになってしまう（挿入図参照）。

そこで全散乱法といった広いQ範囲（ $Q = 2\pi/d$ 、Braggの法則より）の回折プロファイルを測定・解析する手法によって、非晶質の不規則な構造を原子レベル～ナノスケールまで調べることが可能となる。全散乱法は、相転移（液相-固相等）やガラス転移の描像など、局所的な変化を調べる時に非常に有益な手法である。

本演習では、まず実験室X線を用いて同じ組成を持つが物性の異なる石英とシリカガラスを測定し、結晶と非晶質の違いを体験してもらう。さらに測定済みの量子ビーム回折データを用いて、従来の結晶構造解析から全散乱法による非晶質の構造解析までの実演を通してX線及び中性子線の特色を学びながらその違いを体験してもらう。

秋の演習では最先端の研究例を解析を踏まえて紹介し、演習終了後には自分の興味のある試料に置き換えるだけで自ら解析できるくらいの技術を習得してもらう予定です。

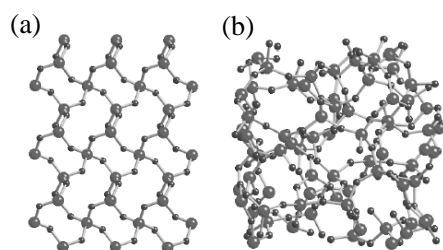


図1 結晶(a)と非晶質(b)の構造

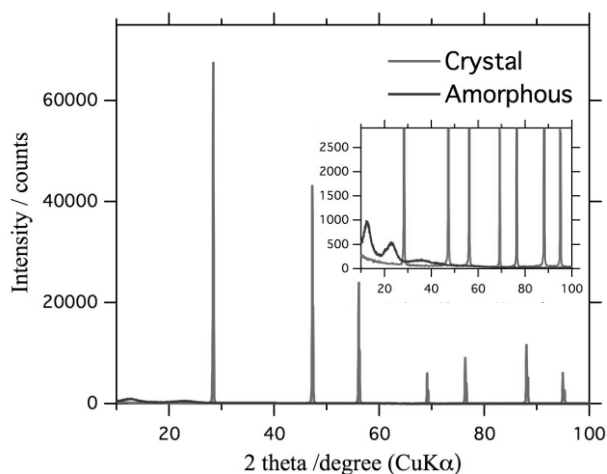


図2 結晶と非晶質のX線回折プロファイル