

# X線異常散乱法を用いた機能性ガラス材料の中距離原子構造の探求

黒木元海<sup>1</sup>、細川伸也<sup>2</sup>、Jens R. Støllhorn<sup>2,3</sup>、馬込栄輔<sup>4</sup>

<sup>1</sup>熊本大学大学院自然科学教育部、<sup>2</sup>熊本大学大学院先端科学研究部、<sup>3</sup>DESY、<sup>4</sup>九州シンクロトロン光研究センター ビームライングループ

多元系非晶質物質の原子配列を観測するために最も難しい点は、元素ごとの部分構造を求めることである。これを解決するためにこれまでわれわれは、SPring-8やESRFなどの強力な放射光施設を用いてX線異常散乱（AXS）実験を行ってきた。最近われわれは、X線強度が弱い九州シンクロトロン光研究センターを用いたAXS実験法の開発を行った[1]。これは2つのSDD検出器を試料に対して光学的にほぼ等価な位置に配置し、一方を散乱X線強度の角度変化の測定に、他方を蛍光X線強度の補正のために用いた。この検出系を用いることにより、X線吸収端付近の原子形状因子の異常効果による散乱X線強度の変化を、統計精度よく測定することが可能となった。本発表では、開発した装置の概要を説明するとともに、赤外線ガラスファイバー材料の基礎物質であるAs-Seガラスの、As *K*吸収端を利用したAXS実験の成果を報告する。

[1] J. R. Støllhorn, S. Hosokawa, and E. Magome, AIP Conf. Proc. **2054**, 050012 (2019).

---

# 異常X線散乱による機能性カルコゲナイドガラスの部分構造研究



黒木元海<sup>1</sup>, 細川伸也<sup>2</sup>, Jens R. Stellhorn<sup>2,3</sup>, 馬込栄輔<sup>4</sup>,

熊本大学大学院自然科学教育部<sup>1</sup>, 熊本大学大学院先端科学研究部<sup>2</sup>, DESY<sup>3</sup>, 九州シンクロtron光研究センター<sup>4</sup>,

## 概要

ガラスや液体などの非結晶性物質の構造研究にとって、最も重要な課題は部分原子構造を明確にすることである。 $N$ 成分合金の場合、散乱断面積が異なると、全体で $N(N+1)/2$ の回折実験が必要になる。例えば、X線および中性子回折実験は二元合金の部分構造にとって十分ではない。

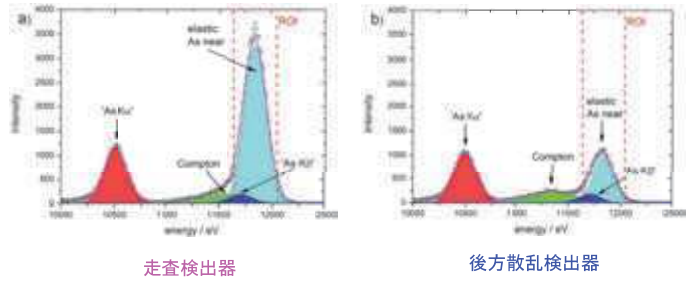
異常X線散乱 (AXS) では、構成元素の吸収端に近い原子形状因子の異常な振る舞いを利用し、元素選択的回折実験を可能にする[1]。この方法では特に、X線および中性子の散乱断面積が互いに非常に類似しているGa, Ge, As, およびSeの合金に非常に有効である。

しかしながら、吸収端に近い微分構造因子 $\Delta_k S(Q)$ を得るためには、弾性散乱信号を蛍光およびコンプトン散乱の寄与から注意深く区別しなければならない。このために、2つのシリコンドリフト検出器 (SDD) を散乱角 $2\theta$ で散乱信号を測定するため、および後方散乱で蛍光X線をモニターするために使用した[2]。そのような検出システムを使用して、我々はデータを収集し、 $\Delta_k S(Q)$ を得ることができた。

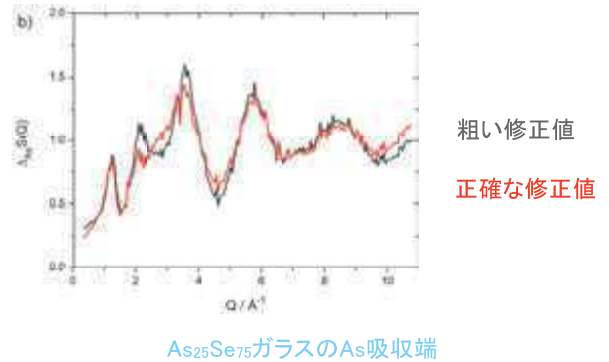
[1] Y. Waseda, Anomalous X-Ray Scattering for Materials Characterization (Berlin-Heidelberg, Springer, 2002).

[2] J. R. Stellhorn, S. Hosokawa, and E. Magome, AIP Conf. Proc., 2054, 050012 (2019).

## 実験データ



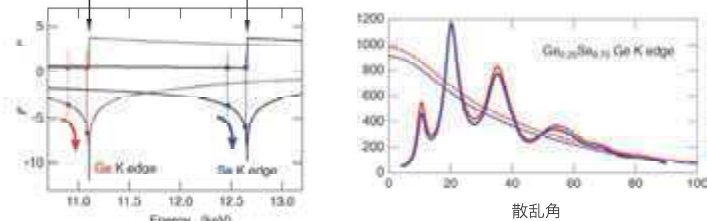
## $\Delta_k S(Q)$



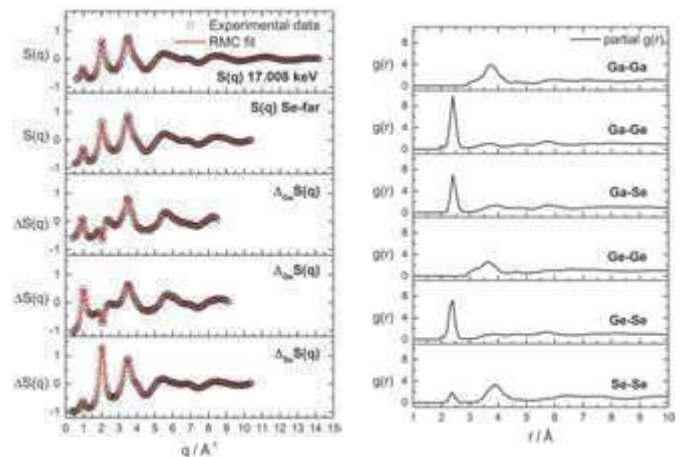
## AXSの原理

$$f(Q, E) = f_0(Q) + f'(E) + if''(E)$$

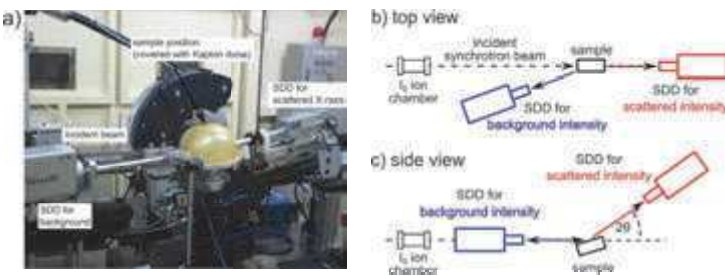
通常項                      異常項



## ESRFで測定したGa-Ge-Seガラスの実験データ



## BL15 / Saga-LSでのAXS実験



## $S_{ij}(Q)$ を得るための逆モンテカルロ(RMC)法

### アルゴリズム



プログラム  
RMC++パッケージ  
原子数  
全部で5000  
初期設定  
ランダム剛体

制約  
カットオフ長さ $\sim 0.22$ nm

## ESRFの探知システム

