

X線異常散乱によるアモルファス相変化材料の局所及び中距離構造の研究

Local and intermediate-range structural studies on amorphous phase-change materials
by anomalous x-ray scattering

熊本大院先端 ○細川伸也, (P) Jens R. Stellhorn

Kumamoto Univ., °Shinya Hosokawa, Jens R. Stellhorn

E-mail: hosokawa@sci.kumamoto-u.ac.jp

多元化合物非結晶の構造研究を行うときの最も大きな課題は、回折実験から部分構造の情報を得ることである。 N 元化合物の構造因子 $S(Q)$ は、部分構造因子 $S_{ij}(Q)$ の一次結合で表すことができるが、その重み関数は、元素成分比と原子構造因子 f (あるいは原子散乱長) の積で表される。部分相関の数 $N(N-1)/2$ は N の増加にともなって飛躍的に増加するので、異なった f を持つ数多くの回折実験が必要となる。その困難を解決する強力な方法の一つは、同位元素置換中性子回折であるが、適切な同位体には多くの種類はない、同位元素は高価である、あるいは、同位元素によって測定試料は全て異なりそれらが同じ原子配列をしている保証はない、など大きな問題を内包する。

X線異常散乱 (AXS) は、入射 X 線エネルギーがある構成元素の吸収端に近づいたときに起こる、その元素の f の異常効果を利用する。入射 X 線エネルギーが構成する元素の一つの吸収端に近づくと、 f の実部 f' は大きな負の極小を持ち、 $S(Q)$ に変化をもたらす。そのため、同一の試料を用いて異なった f の構造情報を与えることができる。われわれは、これまで AXS 法について実験技術の改良を行った[1]。ある元素の吸収端から数 10 eV および数 100 eV 下の入射 X 線を用いた散乱の差、差構造因子 $\Delta_k S(Q)$ を求めれば、それは主として吸収端元素由来である。

Fig. 1 に、代表的な相変化材料である $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ のアモルファス相の $\Delta_k S(Q)$ の結果 (○)、および逆モンテカルロ法を用いて行なったモデル計算のフィット (実線) を、 $S(Q)$ とともに示す。Sb および Te 吸収端付近の $\Delta_k S(Q)$ は、 $S(Q)$ とよく似ているが、Ge 吸収端付近の $\Delta_k S(Q)$ は全く形状を異にしている。特に 10 nm^{-1} 付近のプレピークがはつきりとしている反面、 20 nm^{-1} 付近の第一ピークは非常に小さい。講演では、AXS と RMC を併用した、相変化材料の局所および中距離原子配列の特徴を、3 次元原子配列の結果とともに詳しい説明を行いたい。

[1] 細川伸也, Jens R. Stellhorn, 日本セラミックス協会誌「セラミックス」**52**, 341-344 (2017).

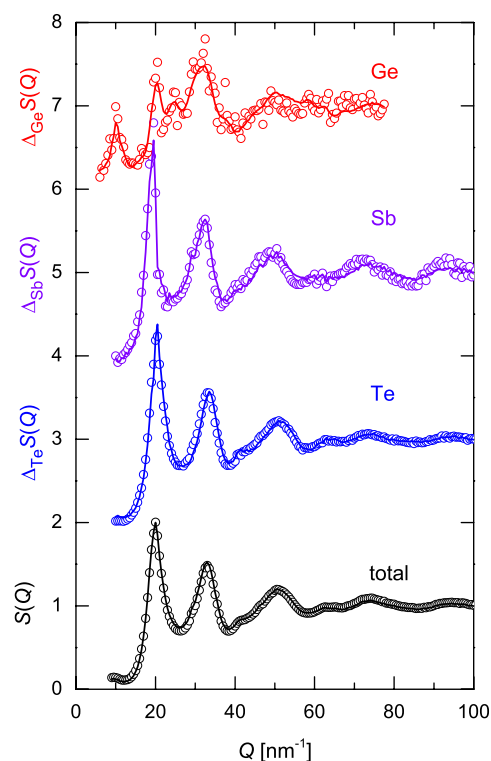


Fig. 1. $\Delta_k S(Q)$ data and the best fits of RMC modeling on amorphous $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ phase change material.