

量子ビームを用いた機能性非晶質材料の構造—機能相関に関する研究

Correlation between Structures and Properties of Functional Disordered Materials
Revealed by Quantum Beam Measurements京大複合研¹, 物材機構² ○小野寺 陽平^{1,2}Kyoto Univ.¹, NIMS², °Yohei Onodera^{1,2}

E-mail: y-onodera@rri.kyoto-u.ac.jp

ガラス・液体・アモルファスといった非晶質材料は結晶のような規則正しい構造周期性を持たないため回折パターンはブロードとなり、実験的に得られる構造情報が限定されるため、構造と機能の間の相関を理解するためには大きな困難が伴う。近年、SPring-8 や J-PARC といった大型量子ビーム実験施設の建設により、高精度の回折データが高いスループットで測定できるようになり、非晶質の乱れた構造と物性・機能の相関を考えるのに十分な質と量のデータが揃いつつある[1]。本研究では、量子ビーム実験データと構造モデリングを併用して構築した種々の非晶質材料の3次元構造モデルに先端数学を応用したパーシステントホモロジー解析[2]を中心としたトポロジカル解析を適用し、非晶質材料の機能の発現に資する構造の抽出に取り組んできた。

図1に中性子回折(ND)および放射光X線回折(XRD)によって得られた代表的な非晶質材料の規格化された回折パターンである構造因子 $S(Q)$ を示す。これらの材料の短距離構造は、 $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ ガラスは配位数が約12のdense random packing構造、アモルファスSiは SiSi_4 四面体、 SiO_2 ガラスは SiO_4 四面体である。 $S(Q)$ をフーリエ変換することによって得られる実空間関数に観測される最近接原子間距離で散乱ベクトル Q を規格化すると、3つの非晶質材料の回折ピークを系統的に理解することができ、散乱ベクトル Q の小さい領域に観測される Q_1 (FSDP)、 Q_2 (PP)、 Q_3 の3つのピークはそれぞれ四面体ネットワークが作るリング構造、四面体の頂点同士の相関、二体相関が連続的に存在することにより形成される相関に帰属することができる[3]。講演ではこれらの特徴を有する非晶質材料の量子ビーム実験データを忠実に再現する3次元構造モデルを解析して抽出された機能の発現に資する構造について報告する。

【参考文献】

- [1] S. Kohara, J. Ceram. Soc. Jpn., 125, 799 (2017).
 [2] Y. Hiraoka *et al.*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 113, 7035 (2016).
 [3] Y. Onodera *et al.*, J. Ceram. Soc. Jpn., 127, 853 (2019).

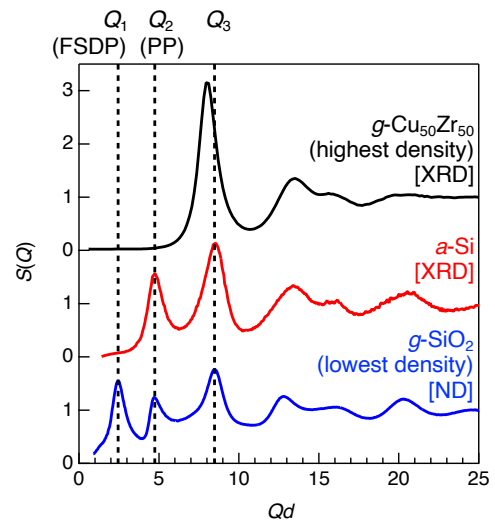


Fig. 1 Total structure factors, $S(Q)$, for disordered materials [3]. The scattering vector Q is scaled by multiplying by d (first distance in real space function).

