

【技術資料】非晶質シリカの構造解析

概要

物質の構造を解析する手法として、結晶試料には XRD 測定による Rietveld 解析がよく利用されますが、非晶質や結晶性の悪い試料に対しては適用出来ません。そのような材料には、X 線全散乱測定からの二体分布関数の導出(PDF 解析)が有用であり、局所的な構造情報を抽出することが可能です。

分析方法・分析装置

非晶質のシリカ粉末をキャピラリーに詰めて X 線全散乱測定を行い、二体分布関数を導出しました。

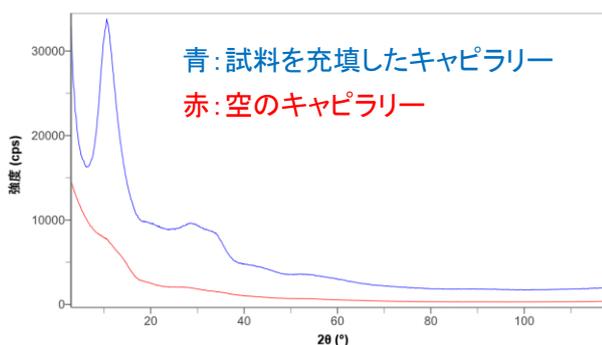
装置	: リガク社製 SmartLab
X 線源	: Mo(0.709 Å) 出力 9kW(60kV、150mA)
測定法	: 円筒透過法(キャピラリー法)
測定範囲	: $2\theta = 3 \sim 160^\circ$



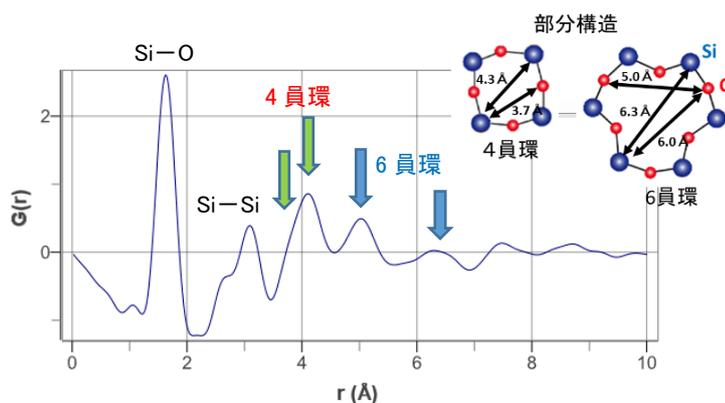
【図 1】キャピラリー測定

結果

X 線全散乱測定の結果を【図 2】に示します。試料(シリカ粉末)由来の散乱を得るため、ブランクの差引きや吸収補正、非干渉性散乱(コンプトン散乱)の除去¹⁾等の各種補正を行い、逆 FT 変換することで試料の二体分布関数(還元 PDF、Pair Distribution Function G(r))を取得できます。【図 3】



【図 2】X 線全散乱測定結果



【図 3】シリカ粉末の二体分布関数 G(r)

G(r)はある原子から距離 r の位置に別の原子が存在する確率の程度を表しています。Si-O 結合に対応する 1.6 Å のピークの外、非晶質シリカの部分構造である 4 員環や 6 員環由来のピークが確認出来ました。



まとめ

半導体や電池関連分野で注目が高まっている非晶質材料は、原子が不規則に配列して長周期構造が見られないため、構造解析が困難な物質の一つです。X線全散乱測定により、通常のX線回折で捉えられない非晶質の短距離構造に関する情報が得られ、物質特性を理解する一助となることが期待されます。

参考文献

- 1) B. J. Thijsse: *J. Appl. Crystallogr.*, 17(1984), 61.

適用分野：無機材料、ガラス、その他無機製品、電池、半導体

キーワード：アモルファス、非晶質、粉末、X線全散乱測定、PDF解析、動径分布関数、二体分布関数