


(※本報告書は英語で記述してください。ただし、産業利用課題として採択されている方は日本語で記述していただいても結構です。)

 MLF Experimental Report	提出日 Date of Report 2013年5月29日
課題番号 Project No. 2012B0066 実験課題名 Title of experiment 中性子回折を用いた $V_2O_5-P_2O_5-M_xO_y$ 系ガラスの物性予測のための構造解析 実験責任者名 Name of principal investigator 青柳拓也 所属 Affiliation 株式会社 日立製作所	装置責任者 Name of responsible person 鈴谷 賢太郎 装置名 Name of Instrument/(BL No.) BL-21 実施日 Date of Experiment 2012年1月30日～2月2日

試料、実験方法、利用の結果得られた主なデータ、考察、結論等を、記述して下さい。(適宜、図表添付のこと)
 Please report your samples, experimental method and results, discussion and conclusions. Please add figures and tables for better explanation.

1. 試料 Name of sample(s) and chemical formula, or compositions including physical form. ■測定試料: $(100-x)V_2O_5-xP_2O_5$ $x=0,10,30,50$ ガラス。 ■試料形状: 粉末。10φ バナジウムセルに試料を充填。
--

2. 実験方法及び結果 (実験がうまくいかなかった場合、その理由を記述してください。) Experimental method and results. If you failed to conduct experiment as planned, please describe reasons. ■実験方法および解析方法 ・中性子源の運転: 300kW ・中性子のビームサイズ: 2cm × 2cm ・測定時間: 1.5 時間/サンプル ・測定Q範囲: 0.3 - 60 Å ⁻¹ ・使用したエネルギーの波長: 0.12 - 7 Å ・測定した中性子回折データと Spring-8 にて測定した XRD のデータを元にしてリバースモンテカルロシミュレーションを使ってガラス構造解析を実施中。 ■実験結果 ・作製した $V_2O_5-P_2O_5$ 系ガラスの構造因子 $S(Q)$ を Fig. 1 に、Fig. 2 にこの $S(Q)$ をフーリエ変換することにより得られた全相関関数 $T(r)$ を示す。Fig. 2 より、1.5 Å 付近のピークは、 P_2O_5 量の増加に伴って大きくなっていることと、PO4 多面体の結合距離を考慮すると、P-O 間の結合であると帰属できた。また、同様に、2.5 Å 付近のピ
--

2. 実験方法及び結果(つづき) Experimental method and results (continued)

ークは、 PO_4 四面体中のO-O間の結合であると考えられる。一方で、 2.8 \AA 付近のピークは、 P_2O_5 量の増加に伴って小さくなっていることから、バナジウムが形成する多面体中のO-O間の結合であると推察された。

結晶の V_2O_5 とアモルファスの V_2O_5 を比較すると、 2.4 \AA 付近、 3.6 \AA 付近等に結晶だけに特徴的なピークが観察された。

現在は、本実験で得られた中性子回折のデータに加えてSpring-8でのX線回折のデータを使用して、リバースモンテカルロシミュレーションを用いた解析を進めている。

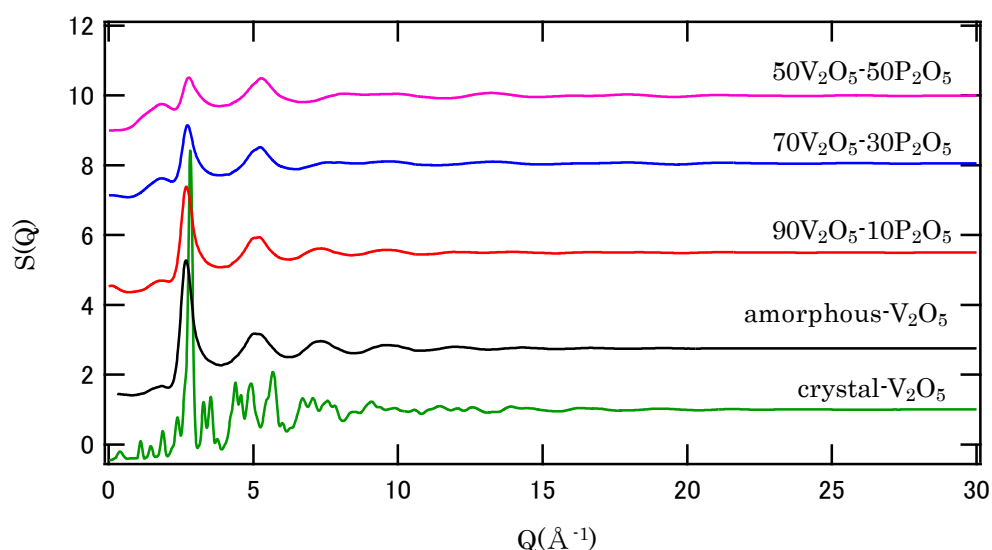


Fig. 1 測定した試料の構造因子 $S(Q)$

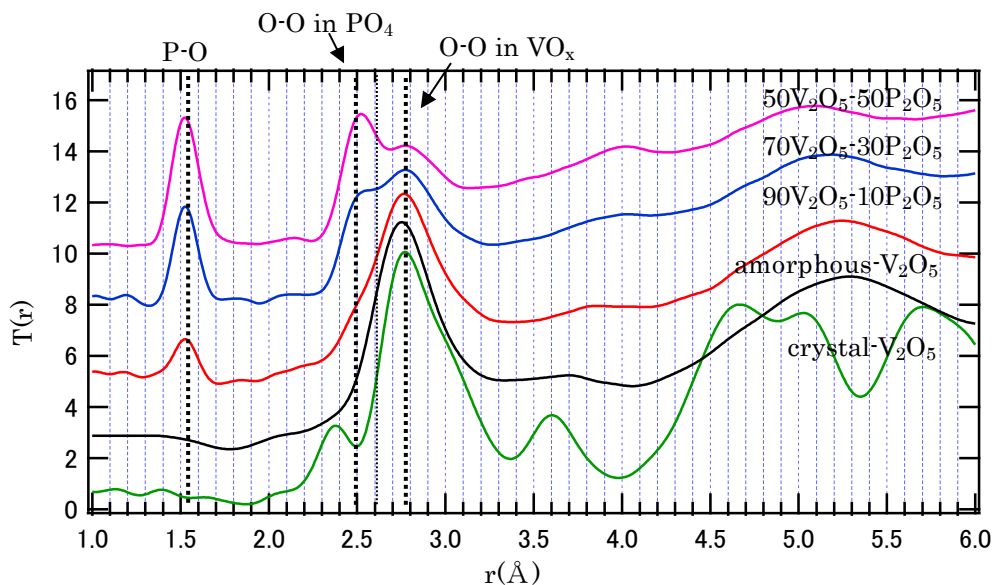


Fig. 2 測定した試料の全相関関数 $T(r)$