 MLF Experimental Report	提出日 Date of Report 2017.5.15
課題番号 Project No. 2017A0146 実験課題名 Title of experiment 中性子回折法によるアルカリアルミノケイ酸塩ガラスの構造解析 Structural investigation of alkali aluminosilicate glasses by neutron diffraction technique 実験責任者名 Name of principal investigator 滝本 康幸 所属 Affiliation 旭硝子株式会社 技術本部先端技術研究所	装置責任者 Name of responsible person 大友 季哉 装置名 Name of Instrument/(BL No.) 高強度全散乱装置 NOVA/BL21 実施日 Date of Experiment 2017.4.6~4.8

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.																																
<p>作製したアルカリケイ酸塩ガラスおよびアルカリアルミノケイ酸塩ガラスを表1に示す。原料としてSiO₂、Al₂O₃、Na₂CO₃、K₂CO₃を用いて、1650 °C大気雰囲気中で溶解し、急冷した。得られたガラスをそれぞれのガラスのT_gで1 h保持後、1 °C/minで徐冷した。これらのガラスを粉碎し、中性子回折測定用試料とした。また、参照試料としてSiO₂ガラスの測定も実施した。</p>																																
<p style="text-align: center;">表 1. 作製したアルカリケイ酸塩ガラスおよびアルカリアルミノケイ酸塩ガラス</p> <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th style="text-align: center;">試料名</th> <th style="text-align: center;">ガラスの種類</th> <th style="text-align: center;">組成 (R=Na,K)</th> <th style="text-align: center;">Na : K モル比率</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td style="text-align: center;">RS Na100</td> <td></td> <td></td> <td style="text-align: center;">100 : 0</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">RS Na50K50</td> <td style="text-align: center;">アルカリケイ酸塩</td> <td style="text-align: center;">22.7R₂O - 77.3SiO₂</td> <td style="text-align: center;">50 : 50</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">RS K100</td> <td></td> <td></td> <td style="text-align: center;">0 : 100</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">RAS Na100</td> <td></td> <td></td> <td style="text-align: center;">100 : 0</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">RAS Na83K17</td> <td></td> <td></td> <td style="text-align: center;">83 : 17</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">RAS Na50K50</td> <td style="text-align: center;">アルカリアルミノケイ酸塩</td> <td style="text-align: center;">25R₂O - 10Al₂O₃ - 65SiO₂</td> <td style="text-align: center;">50 : 50</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">RAS K100</td> <td></td> <td></td> <td style="text-align: center;">0 : 100</td> </tr> </tbody> </table>	試料名	ガラスの種類	組成 (R=Na,K)	Na : K モル比率	RS Na100			100 : 0	RS Na50K50	アルカリケイ酸塩	22.7R ₂ O - 77.3SiO ₂	50 : 50	RS K100			0 : 100	RAS Na100			100 : 0	RAS Na83K17			83 : 17	RAS Na50K50	アルカリアルミノケイ酸塩	25R ₂ O - 10Al ₂ O ₃ - 65SiO ₂	50 : 50	RAS K100			0 : 100
試料名	ガラスの種類	組成 (R=Na,K)	Na : K モル比率																													
RS Na100			100 : 0																													
RS Na50K50	アルカリケイ酸塩	22.7R ₂ O - 77.3SiO ₂	50 : 50																													
RS K100			0 : 100																													
RAS Na100			100 : 0																													
RAS Na83K17			83 : 17																													
RAS Na50K50	アルカリアルミノケイ酸塩	25R ₂ O - 10Al ₂ O ₃ - 65SiO ₂	50 : 50																													
RAS K100			0 : 100																													

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.

試料をバナジウム試料管に詰めて中性子回折実験を行った。

アルカリケイ酸塩ガラスおよびアルカリアルミノケイ酸塩ガラスの中性子構造因子を図 1 に示す。各試料とも酸化物ガラス特有の周期的散乱を示しているが、Na、K 混合比率によって、散乱パターンの変化が認められる。広範囲の Q にわたる周期的散乱は、主に Si-O、Al-O などの短距離構造に起因するものである。ガラス間の違いは、これに加えて Na-O や K-O など Na、K に基づく短距離構造の違いに起因すると考えられる。

$1 < Q < 7 \text{ \AA}^{-1}$ の範囲を拡大したものを図 2 に示す。SiO₂ ガラスと比較して最も大きな違いは、

$1 < Q < 2.4 \text{ \AA}^{-1}$ 付近の First Sharp Diffraction Peak (FSDP) の形状である。本ガラスの組成および各元素の干渉性散乱長を考慮すると、中性子構造因子は O-O および Si-O (および Al-O) による散乱の影響が主であり、アルカリ金属イオンが関わる散乱の影響は相対的に小さいと考えられる。また Na と K の中性子に対する干渉性散乱長の違いはほとんどない。以上から、FSDP の形状の違いは、主に SiO₄ や AlO₄ の四面体により形成されるガラスの中距離構造の違いに起因すると考えられる。

得られた実験結果に対する解釈は、MD 計算による部分構造因子との対比により明確にしていく予定である。また、X 線回折データや K の K 吸収端 XAFS データと合わせて、RMC による解析も予定している。

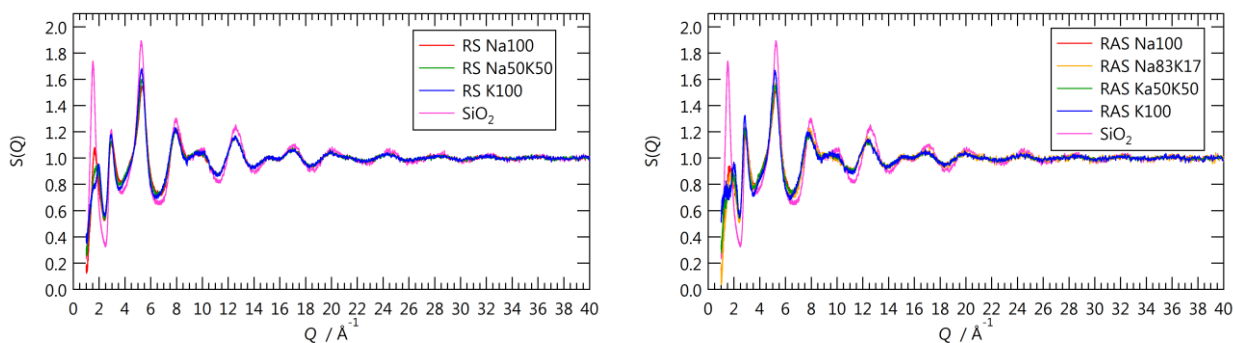


図 1. 測定により得られたガラスの中性子構造因子

(左; アルカリケイ酸塩ガラスと SiO₂ ガラスの比較、右; アルカリアルミノケイ酸塩ガラスと SiO₂ ガラスの比較)

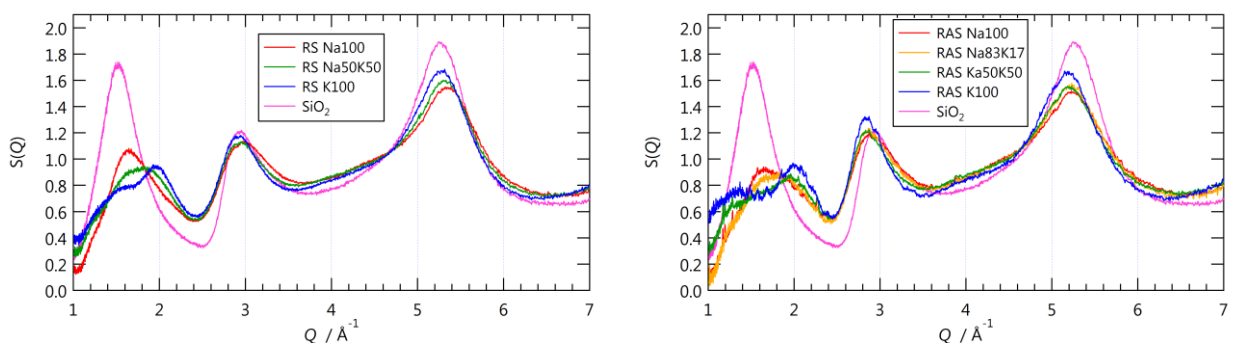


図 2. 図 1 の $1 < Q < 7 \text{ \AA}^{-1}$ の部分を拡大したもの