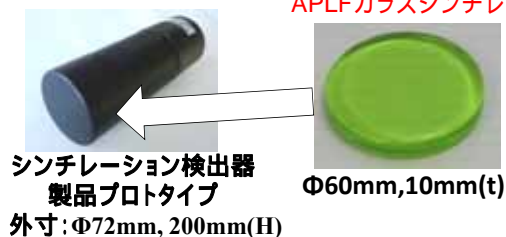


川嶋 利幸¹、渡利 威士¹、佐藤 仲弘¹、
清水 俊彦²、福田 一仁²、猿倉 信彦²
1浜松ホトニクス株式会社大出力レーザー開発部
2大阪大学レーザーエネルギー学研究中心

背景・経緯

近年、産業利用において中性子プローブが注目されている。
その中性子検出に有用な中性子用Liガラスシンチレータを
共同研究者と共に開発。

発光核にPrを用いた事で高速応答(<10ns)を実現



中性子捕獲率向上のためのLi6濃縮材料を用いると
ガラス形成の条件が変わり結晶が析出するなど、その
構造には不明な点も多い

光学設計へ向けたガラスのバンド計算

- ・材料の光学特性は構造で決まる
構造からバンド計算
周期性(ユニットセル)仮定
- ・ガラス構造は周期性がない
バンド計算が不可能?
- ・スーパーコンピュータの発展に伴い、
多数の原子からなる系のバンド計算が可能に
千個を超える原子の位置を選びだし、
これをユニットセルと見なしてバンド計算

ガラスの構造が分かればバンド計算も可能

高機能化(高速応答、高検出効率)

結果

本日発表

ビームライン	構造解析手法	本実験での測定サンプル(測定吸収端)
BL5S1	硬X線XAFS	Pr-APLF glass (Pr L-edge)
BL6N1	軟X線XAFS	Pr-APLF glass, APLF glass (P K-edge)
BL1N2	超軟X線XAFS	Pr-APLF glass, APLF glass, Al(PO ₃) ₃ (Al K-edge)
BL8S3	SAXS	Pr-APLF glass, APLF glass

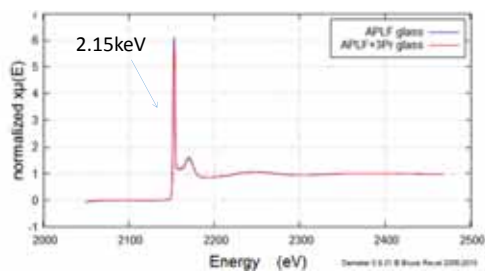


Fig.1 BL6N1を用いたPのK吸収端付近のXAFS測定

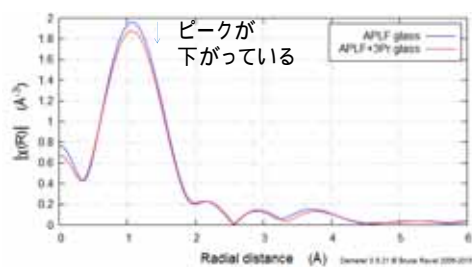


Fig.2 BL6N1を用いたPのK吸収端付近のXAFS測定(フーリエ変換)

Fig.1は、Pr-APLFとPrを含まないAPLFのPのK吸収端(2.14keV)付近のXAFS測定結果である。どちらも、先行研究により報告されているAl(PO₃)₃の吸収端(2.15 keV)と一致していた。このことより、Pの化学状態は、Al(PO₃)₃と一致していると思われる。

また、EXAFS領域のスペクトルより局所構造解析を行った結果、Fig.2に示すように、1Åのピークの大きさがPrを含まないAPLFよりも小さく、Prの存在によりP原子から1Å離れた位置に配位される原子数が少なくなったことが示された。先行研究によりPrをドープしていないAPLF中でPはPO_xの形で存在していると知られているが、上述の配位数の違いにより、PrがOと結合を形成していることが予測される。Prの酸化物としてPr₆O₁₁が存在するが、この化合物中ではPrは3価と4価のイオンで存在するのでPr-APLF中でも同様に3価と4価のイオンで存在すると予想される。

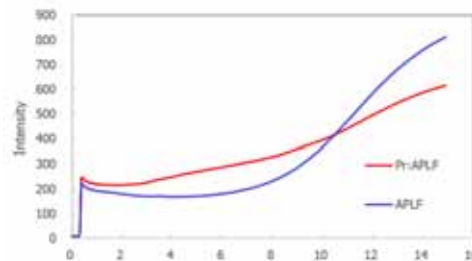


Fig.3 BL8S3を用いたSAXS測定の結果

Fig.3はPr-APLFとPrを含まないAPLFのX線小角散乱測定結果である。Pr-APLFでは $Q=6 \text{ nm}^{-1}$ 付近に構造を有しており、Prを含まないAPLFでは $Q=13 \text{ nm}^{-1}$ 付近に構造を有していることがわかった。以上の結果より、Prを添加することによりAl,Pの化学状態は大きくは変化していなかったが、Pr周辺に存在するO,Fの電子構造がドープしていないAPLFガラスのそれと変わることが推察される。

今後は軽元素側のデータを取得してゆく必要がある。特に陰イオンのF、Oの測定をすれば今回測定したAl、Prとの位置関係がより明確になると考えられる。これらの測定はBL7Uで可能である。

期待される効果

本研究により、Pr-APLFガラスのP、Al、Pr周りの原子構造など、これまで明らかにならなかった本ガラスの構造への理解を深める知見を得た。近年のスーパーコンピュータの発展によりガラスのような周期性の無い多数の原子からなる系のバンド計算も可能であり、ガラスの構造が明らかになればそれを設計に生かす事ができるようになっている。これにより高性能な中性子シンチレータを安定に安価で供給できるようになり、中性子の産業利用(イメージング、電池材料の開発、医療応用等)に貢献することが期待される。