



## ジオポリマー中の Si の XAFS 測定

渡部 創<sup>1</sup>, 梶並 昭彦<sup>2</sup>, 上重 智瑛<sup>2</sup>

1 日本原子力開発機構, 2 神戸大学,

キーワード : アルミノケイ酸塩ガラス、Si 吸収端構造

### 1. 背景と研究目的

アルミノケイ酸塩ガラスは、ジオポリマーの一種として分類されるが、非常に化学的、熱的に安定である。しかし、その安定性について、分子レベルからの検討はあまりされていない。そこで アルミノケイ酸塩ガラスの Si K 吸収端の XAFS 測定を行い、組成による Si の電子構造、周辺構造の変化について調べた。

### 2. 実験内容

Si、Al、Na を含むアルミノケイ酸塩ガラスを合成した。(Glass1 と示す。) また、それに P を添加したガラスも作成した。(Glass2 と示す。) CEY 法 (転換電子収率法) により Glass1 および Glass2 の Si K 吸収端の XAFS 測定を行った。構造解析は、Athena および REX2000 (Rigaku) にておこなった。

### 3. 結果および考察

Fig.1 には、Glass 1 と Glass2 の Si K 吸収端 XANES を示した。また、また 比較のため  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> (石英) の XANES も示した。Glass1 も Glass2 も  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> と同様なエネルギーに吸収端があり、いずれのガラス内の Si の電子状態も、 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> と同様なネットワーク構造が存在していると考えられる。

Fig.2 には、SiK 吸収端の EXAFS から計算した動径構造関数  $\Phi(r)$  を示した。1.3 Å 付近のピークは Si-O の相関に帰属されると思われる。黄色の範囲を切り出し、 $k^3\chi(k)$  関数および  $\Phi(r)$  が再現できるように Si-O の原子間距離、配位数を求めた。(Fig.2 に、再現  $\Phi(r)$  を破線で示した。) その結果 Glass1 も Glass2 も Si-O の原子間距離は、1.6 Å 付近であり、配位数は 4 であり、組成によりあまり変化せず、 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> の Si の周辺構造と同様であることが明らかとなった

以上 本アルミノケイ酸塩ガラスは、Si-O のネットワーク構造が保持され、組成を変化させても顕著に変化しないことが明らかとなった。

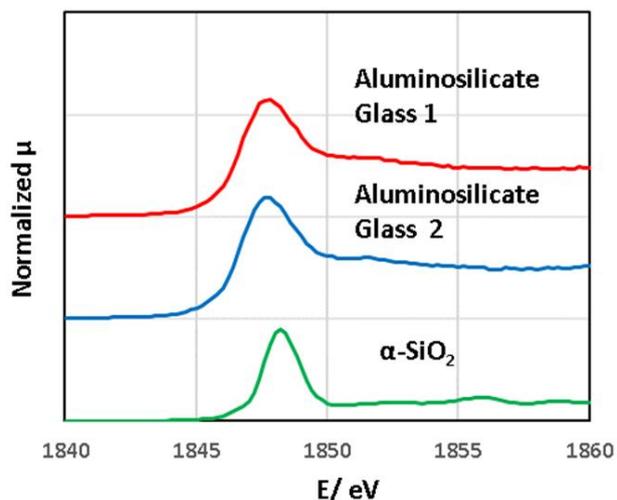


Fig.1 XANES spectra of aluminosilicate glass.

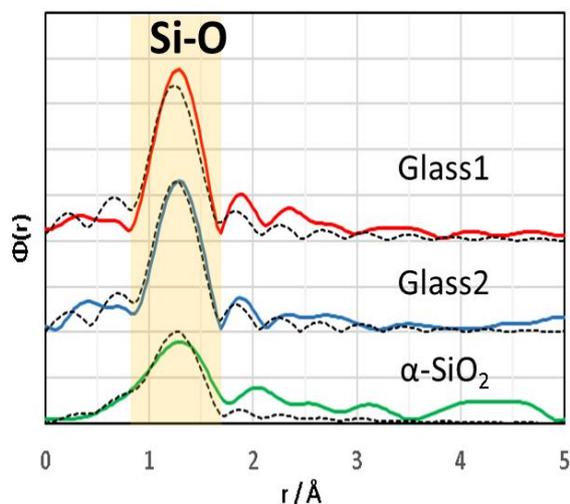


Fig.2 Radial structural functions of aluminosilicate glass.