



TeO₂-ZnO-Na₂O テルライトガラスの構造モデリング

早川知克, Jonathan de Clermont-Gallerande, 谷口大起
名古屋工業大学大学院 生命・応用化学専攻 (環境セラミックス分野)

キーワード：テルライトガラス, X線全散乱測定, ガラス構造, 光機能性

1. 背景と研究目的

テルライトガラスは高い屈折率を持ち、高効率レーザー材料として有望視されている。本研究では、イオン性酸化物 Na₂O および共有結合性酸化物 ZnO を含む TeO₂-ZnO-Na₂O(TZN)ガラス^[1]を取り上げ、Nd³⁺を添加したガラスの構造と熱/機械強度/光学的特性との関係を明らかにすることを目的としている。

2. 実験内容

試料には Nd³⁺イオンを添加した 80TeO₂-xZnO-(20-x)Na₂O 組成のガラス試料を用いた。測定では粉末状にした試料を 0.3 mm φ (マークチューブリンデマンガラス) のキャピラリーに充填し、あいちシンクロトロン光センター BL5S2 ビームラインで 20.0 keV (波長 λ = 0.62 Å) にて X線全散乱データを測定した。2q 範囲は 0.004~132.49°、散乱ベクトルの大きさ Q (= 4π sin q / λ) の範囲は 0.007~18.5 Å⁻¹で、生データはバックグラウンド、コンプトン散乱の補正を行い、組成から求められる平均原子散乱因子<f>及びその2次相関関数<f²>を用いて散乱データ S(Q)を得た^[2]。さらにフーリエ変換を施し二体間分布関数 G(r)を求めた。

3. 結果および考察

Nd³⁺添加 TeO₂-ZnO-Na₂O ガラスの S(Q)データを Fig.1 に示す。まず S(Q)データからは ZnO 濃度 x が増加するとともに Q~2 付近にある第1ピークが低 Q 側にシフトすることが分かる。また、その右側にあった肩は ZnO 濃度 x が高くなると減少し、イオン性の Na-O 結合が共有結合性の Zn-O に置き換わることにより、構造が大きく変化していることが示唆される。Fig.2 に二体間分布関数 PDF を Fig.2 に示す。どの試料でも 1.9 Å に Te-O の相関が見られ、ネットワーク構造が TeO₂ からなることが分かる。これま

で Zn-EXAFS 実験も行っており、Zn-O 距離は 1.96 Å から 1.99 Å に増加することが明らかになっている^[3]。このことを反映して、第1ピークは若干長距離側へシフトしている様子も分かる。第2ピークは 3.5~3.6 Å に存在し、ZnO 濃度増加とともに短距離側に移動している。これは Te-Te そして Te-Zn 相関に相当するものと考えられ、ZnO 濃度が増加するとともに、ZnO がガラスネットワークに組み込まれて Te-O-Zn 結合が生成したことが示唆され、構造モデリングのための基礎データが得られた。

4. 参考文献

1. J. de Clermont-Gallerande, T.Hayakawa, et al. *J.Alloys Compds.* **854** (2021) 157072.
2. U.Hoppe et al., *J.Phys:Cond.Mat.* **16** (2004) 1645-1663.
3. J. de Clermont-Gallerande, T.Hayakawa, et al. *APL Mater.* To be submitted (2021).

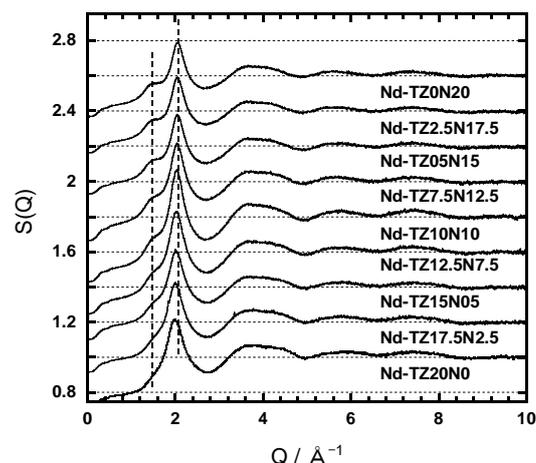


Fig.1 S(Q) data for Nd³⁺-doped TZN glasses.

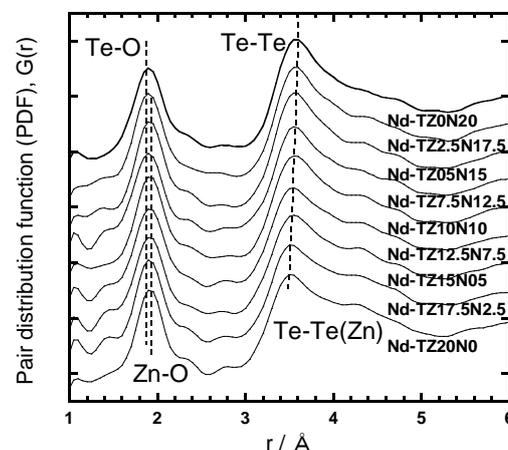


Fig.2 PDF G(r) for Nd³⁺-doped TZN glasses.