



TeO₂-Ag₂O-Bi₂O₃ テルライトガラスの構造モデリング

早川知克, 岡亮平, 大塚喬仁, 大脇寛哉
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

重金属酸化物からなるテルライトガラスは高い屈折率、高い非線形光学感受率を持ち、光情報通信の高速スイッチングを実現させるための基盤材料として期待されている^[1-4]。本研究では高屈折率を実現するTeO₂-Ag₂O-Bi₂O₃に着目しており^[1]、熔融時間の調整やBi₂O₃濃度により光学的バンドギャップを低下させることでさらに屈折率を高くすることができることが分かっている。そこで光学特性を理解するために、X線全散乱データを取得し二体間分布関数からガラス構造についての知見を得ることを目的とした。

2. 実験内容

ガラス組成は(80-x)TeO₂-20Ag₂O-xBi₂O₃(TAB)で、熔融温度は800°Cとした。熔融時間の違いにより光学的バンドギャップE_gを変化させることができることから、熔融時間を30min及び1hに設定し、Bi₂O₃濃度xを変化させた試料を準備した。試料名をTAB-x-30min及びTAB-x-1hとした。測定では粉末状にした試料を0.3mmφ(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、あいしンクロトロン光センターBL5S2ビームラインで20.0keV(波長λ=0.62Å)にてX線全散乱データを測定した。2θ範囲は0.1~120°、散乱ベクトルの大きさQ(=4πsinθ/λ)の範囲は0.018~17.55Å⁻¹で、生データは必要に応じてバックグラウンド処理を行い、python3.8にてコードを作成して、コンプトン散乱の補正、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>^[3]を用いて散乱データS(Q)を得た。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

Fig.1にTeO₂-Ag₂O-Bi₂O₃ガラスの二体間分布関数を示す。x=0試料(80TeO₂-20Ag₂O)ではTe-Oに帰属される1.88Å付近の相関と、第2ピークとして3.55Åに幅広い相関が観測された。後者はTe-Ag, Ag-Ag等に関するものである。Ag-O相関は弱いながら2.4Åに観測された。Bi₂O₃添加による構造変化は第2ピーク位置に明確に現れ、ピーク位置はx=5で3.59Åに、x=10では3.69Åにまで移動する。これはBi-Te(Ag)相関が加わったことによるものと考えられる。Bi-O相関は低濃度では明確には得られないが、x=5以上で2.2Å付近に観測された。連動してTe-O相関が短距離側に移動する傾向が見られ、本解析では1.66Åにピークを形成するという結果となった。このことからBi₂O₃添加がTeO₂のネットワーク構造に影響を与えることが示唆された。熔融時間の影響としては、x=5でBi-O相関は30min熔融ではより幅広く、Te-O相関も明確でないこと、第1,2ピークともに幅広いことからよりイオン結合的な構造を持つと考えられる。

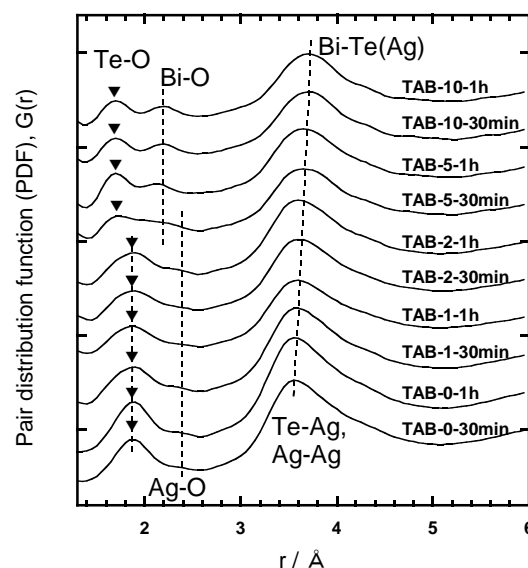


Fig.1 Pair distribution function (PDF), G(r) for (80-x)TeO₂-20Ag₂O-xBi₂O₃(TAB-x) glasses synthesized with different melting times.

4. 参考文献

- [1] K.Kato, T.Hayakawa, Y.Kasuya, P. Thomas, *J.Non-Cryst.Solids* **431** (2016) 97. [2] J. de Clermont-Gallerande, T.Hayakawa, et al. *J.Alloys Compds.* **854** (2021) 157072. [3] U.Hoppe et al., *J.Phys: Cond.Mat.* **16** (2004) 1645. [4] J. de Clermont- Gallerande, T.Hayakawa, et al. *APL Mater.* **9** (2021) 111111.