



## 遷移金属含有テルライトガラスの構造解析 2

早川知克<sup>1,2</sup>, 細川七海<sup>1,2</sup>, 山本勝宏<sup>1,2</sup>, 林好一<sup>1</sup>  
 1 名古屋工業大学 材料科学フロンティア研究院 (FRIMS)  
 2 名古屋工業大学 生命・応用化学科

キーワード : テルライトガラス, ガラス安定性, ガリウム, 酸素配位数

### 1. 背景と研究目的

我々の研究グループでは、光を光で制御する非線形ガラスの開発を行っている。酸化テルル  $\text{TeO}_2$  を主成分とするテルライト系ガラスは化学的に安定で、線形屈折率、3次非線形光学感受率が高くかつ低融点であることから次世代光機能性ガラスとして注目を浴びている<sup>1,2</sup>。単結晶と同等の特性を有し、ファイバー化も可能なガラスの開発は困難を極めるものであるが、近年、 $\text{Ga}_2\text{O}_3$  を含むテルライト系ガラスが熱安定性を高めることが分かってきた。今回申請したビームタイムの中で1シフトを用いて Ga 元素の XAFS 実験を行ったので報告する。

### 2. 実験内容

テルライト組成のガラスの安定化させる成分として  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  がある。これはアルカリ酸化物とともに溶解することにより配位数を6から4配位に変化させることでネットワーク形成酸化物となることが期待できる。ガラス組成は  $75\text{TeO}_2\text{-}12.5\text{K}_2\text{O}\text{-}12.5\text{Ga}_2\text{O}_3$  とし、異なる坩堝 (アルミナ・Au・Pt) にてガラスを作製した (TKG- $\text{Al}_2\text{O}_3$ /Au/Pt と表記する)。驚いたことに坩堝によりガラスの安定性は大きく変化し非線形光学特性も異なることが分かってきた<sup>3</sup>。そこで、あいち SR センターの BL11S2 ラインにて Ga の K 吸収端の透過 XAFS 測定を行った。解析は Athena にて EXAFS 振動を抽出し、Artemis にて FEFF8 により位相因子・散乱振幅の補正を行い、Ga の第1近接構造及び第2近接構造について調査した。

### 3. 結果および考察

異なる坩堝で作製した TKG ガラスの EXAFS 振動データから Ga 周りの動径分布関数を評価し Fig.1 にプロットした。位相因子及び散乱振幅補正を行い、第1近接だけでなく第2近接元素についてもあらゆる組み合わせを考慮し、最適なフィッティング結果を得た。まず第1近接は Ga-O であり、Ga-O 結合距離はどのガラスも約  $1.88 \text{ \AA}$  であった (TKG- $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $1.878 \pm 0.005 \text{ \AA}$ ; TKG-Au,  $1.883 \pm 0.007 \text{ \AA}$ ; TKG-Pt,  $1.879 \pm 0.005 \text{ \AA}$ )。配位数は振幅強度の解析から4が妥当であり、標準物質  $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$  (6配位,  $1.936 \text{ \AA}$ ) とは明らかに異なる配位数・配位距離を取ることが分かった。第2配位圏にある元素として Te, K, Ga をそれぞれ検討し解析を進めた結果、第2近接元素は K が妥当で3価 Ga が酸素4配位を取ることによって生ずる負の電荷を  $\text{K}^+$  で補償していることが分かった。Ga-K 距離は TKG- $\text{Al}_2\text{O}_3$  で  $3.27 \pm 0.07 \text{ \AA}$ 、TKG-Au で  $3.26 \pm 0.07 \text{ \AA}$  と同等であったが、TKG-Pt では  $3.58 \pm 0.03 \text{ \AA}$  と比較的遠いことも分かった。

### 4. 参考文献

1. K.Kato, T.Hayakawa, Y.Kasuya, P.Thomas, *J.Non-Cryst. Solids*, 431 (1), 97-106 (2016).
2. M.Shimoda, M.Uchida, T.Hayakawa, P.Thomas, *Ceram. Int.* 43 (3), 2962-2968 (2017).
3. 細川七海、早川知克, 2018 年度日本セラミックス協会東海支部学術研究発表会 C16, 2018 年 12 月

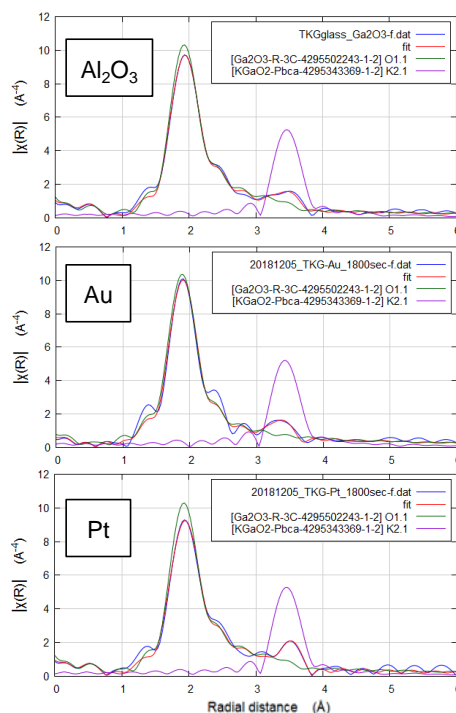


Fig.1 Radial distribution functions around Ga in TKG- $\text{Al}_2\text{O}_3$ /Au/Pt glasses.