



SPring-8の産業利用とガラス・セラミックス材料への適用

(財) 高輝度光科学研究センター・産業利用推進室 梅咲 則正

- SPring-8の紹介
- SPring-8における産業利用の状況 ➡ 産業利用事例集
- SPring-8放射光を用いたガラス・セラミックスの研究方法
 - XAFS分光法 ➡ 第1回研究会
 - 高エネルギーX線を利用したXRD法 ➡ 第2回研究会予定
 - シミュレーション技術を用いた構造モデルの最適化
- SPring-8を使うための利用制度

SPring-8キャンパスと放射光の発生

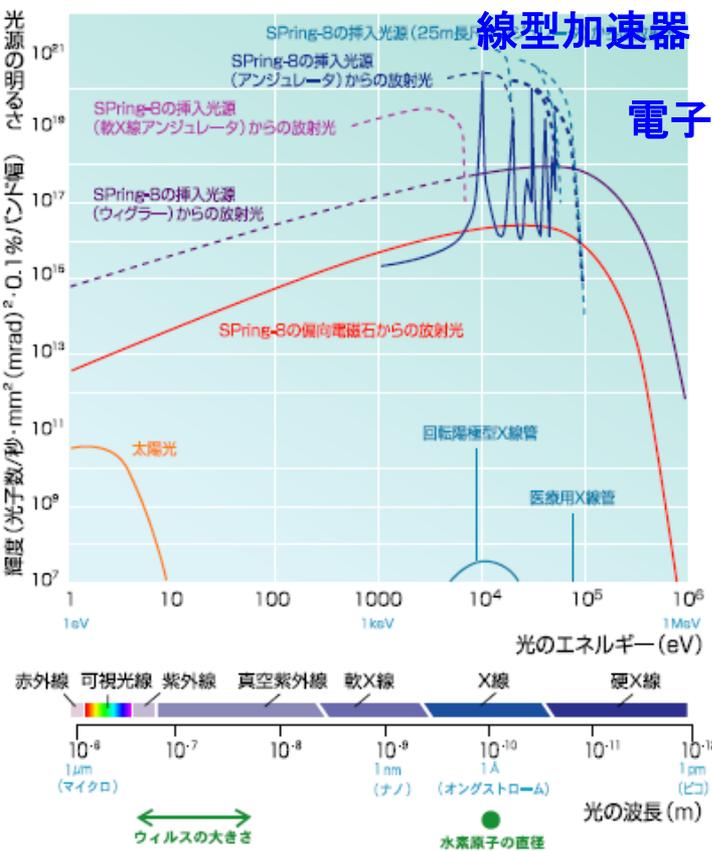


JASRI

理研

原子力機構

兵庫県



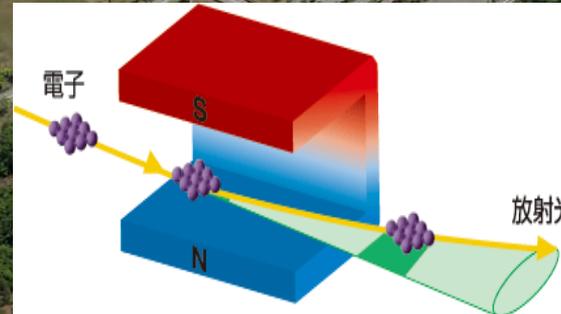
シンクロトロン

発生した放射光

1秒間に20万回

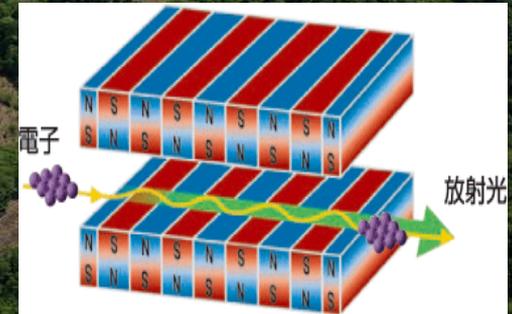
一周1436mを周回しても同じ位置に戻る。

蓄積リング



偏向電磁石

- 偏光電磁石
- 垂直方向に指向性大
- 強力X線
- 白色光

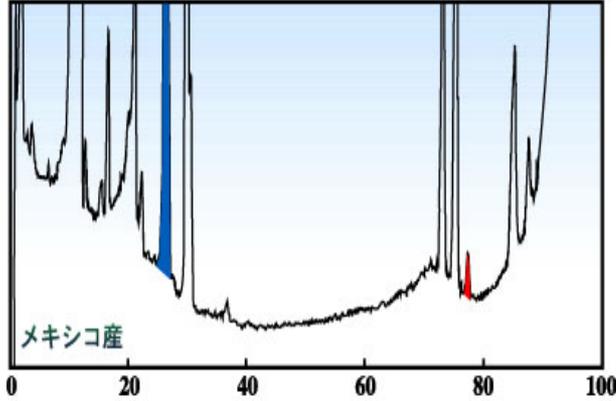


アンジュレータ

- アンジュレータ
- 垂直水平方向に指向性大
- 強力X線 (1000倍)
- 準単色

放射光を利用するための研究手法

極微量試料の微量元素分析が可能



III. 超高精密分析器
(極微量成分の検出、
状態分析ができる)

蛍光 X 線放出
光電子放出

蛍光 X 線分析
光電子分光

X A F S
(X 線吸収微細構造)

スタッドレスタイヤの X 線
屈折
コントラスト法による画像



透過 X 線

イメージング

I. 超高性能透視カメラ
(ゴムとガラスファイバ
を識別できる)

物質と X 線の相互作用
物質

吸収

照射効果

新材料の創製

入射 X 線

回折・散乱 X 線

II. 超微細顕微鏡 (構造解析)
(原子構造まで見える)

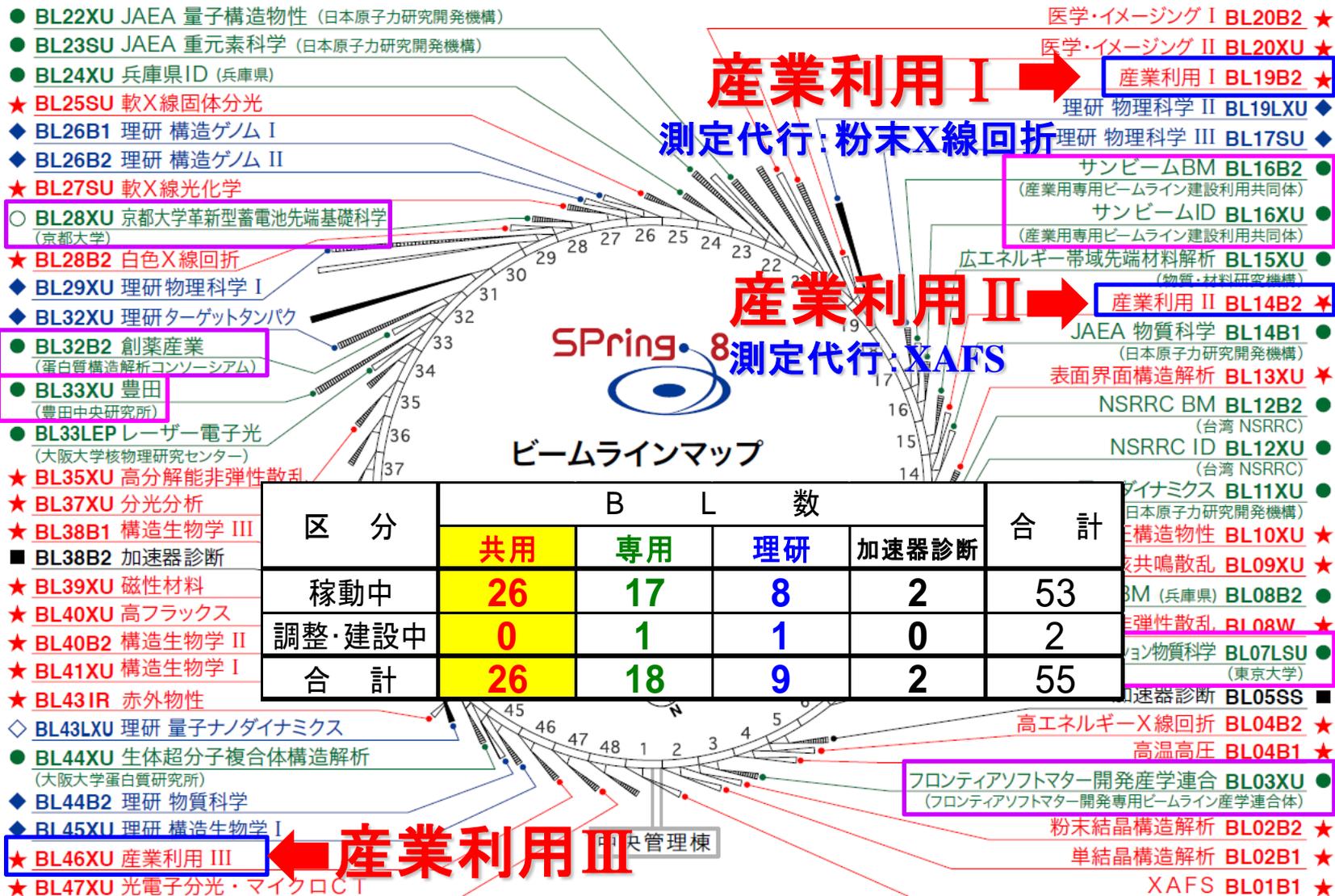
タンパク質の立体構造



回折・散乱

SPring-8 ビームラインマップ

2010.5.17 現在



共用及び専用BL利用数の推移

供用開始から約11年間(1997B~2009B)

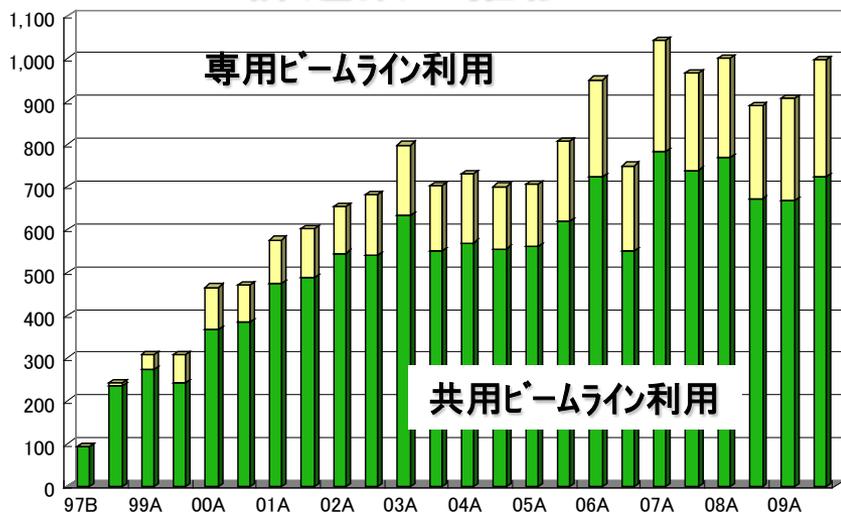
○実施課題数	共用:12,752件、	専用:3,592件	合計 16,344件
○利用者数	共用:81,521人、	専用:28,702人	合計 110,223人

1年あたり(2009A、B)

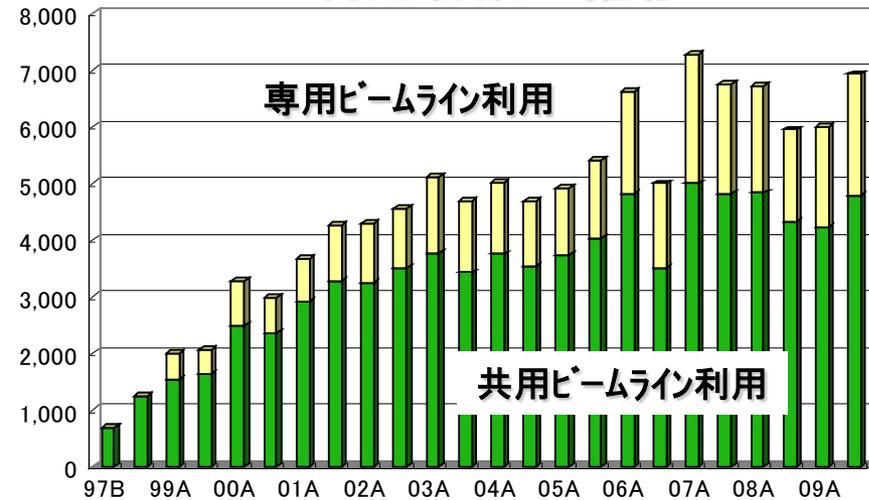
2010年3月までに延べ11万人の研究者が利用！

○実施課題数	共用:1,391件、	専用:513件	合計 1,904件
○利用者数	共用:9,033人、	専用:3,905人	合計 12,938人

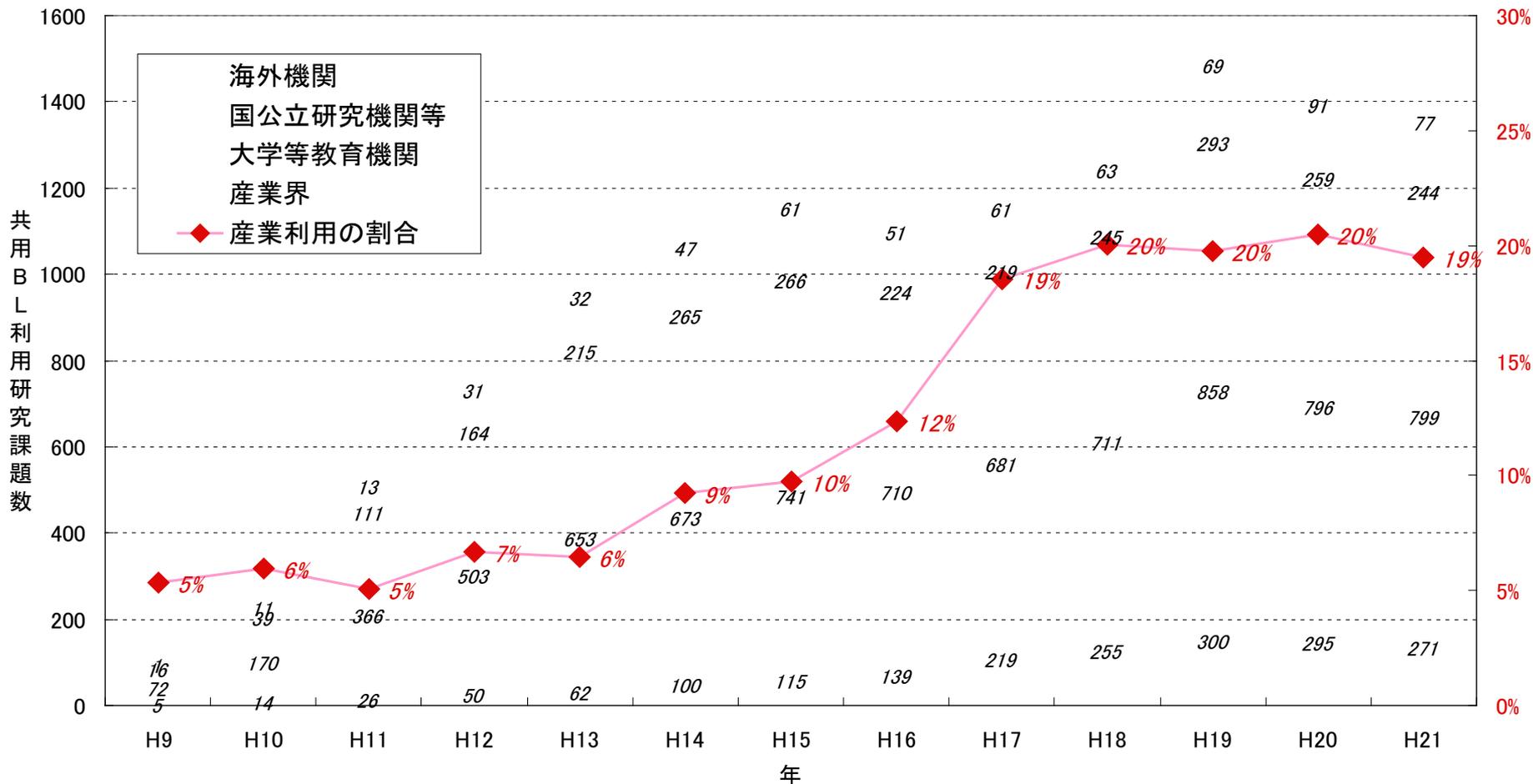
課題数の推移



利用者数の推移



共用BLにおける所属機関別利用研究課題数



※所属機関分類

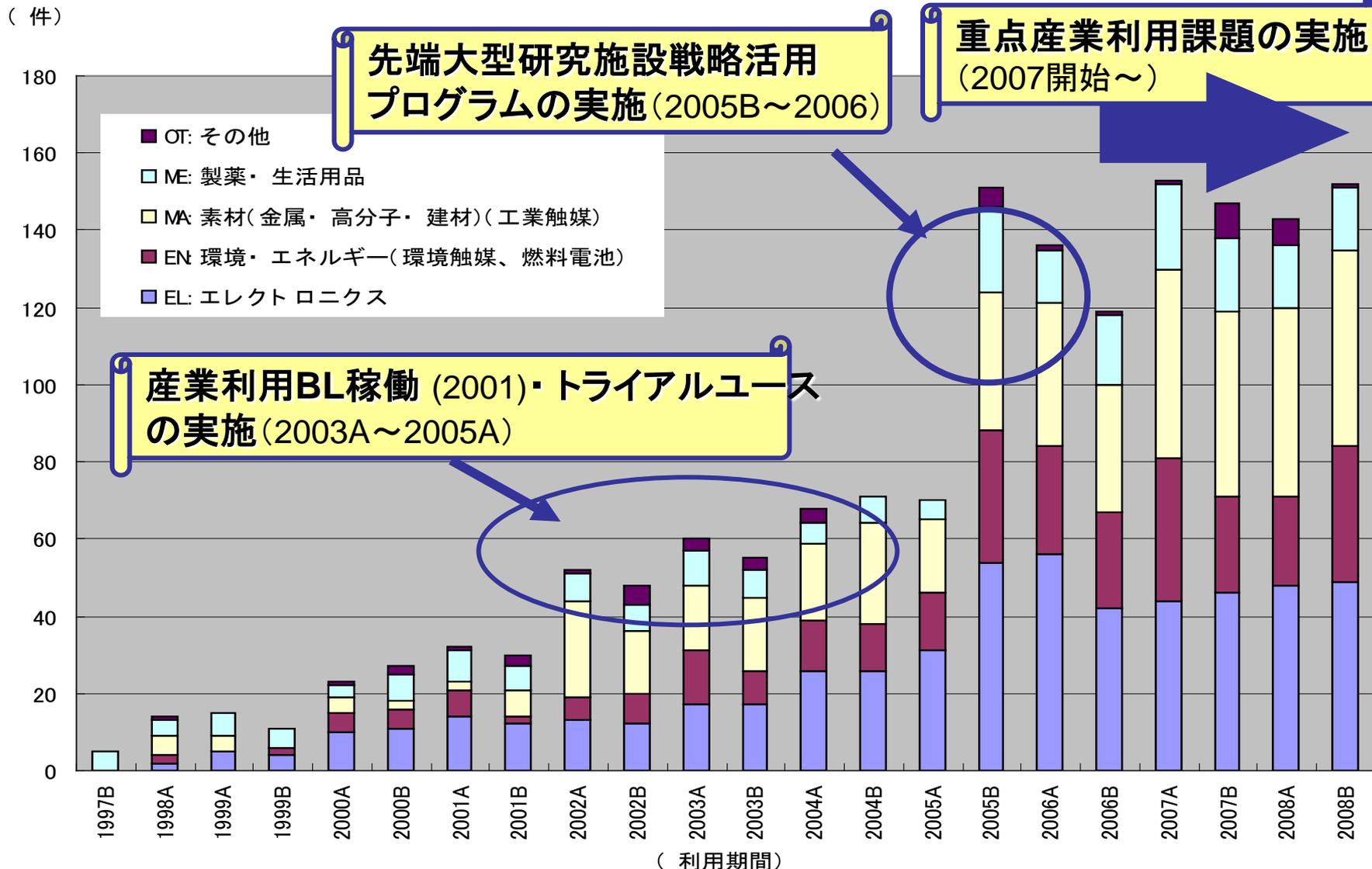
●大学等教育機関：国公立大学、私立大学、高等専門学校等

●産業界：民間企業(海外企業の日本法人を含む)

●国公立研究機関等：独立行政法人、大学等共同研究機関、公益法人、特殊法人等

●海外：海外の全ての機関・法人等

民間企業による産業分野別実施課題（共用ビームライン分）



民間企業の利用が順調に増加 全体の20%に。

(不採択課題も依然として約30%あり ⇒ 利用希望者も増え続けている)

産業界における利用企業及び利用分野

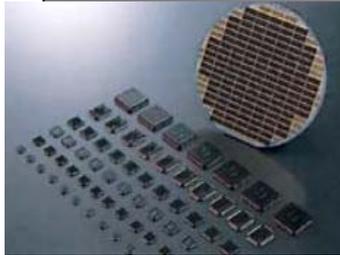


三洋電機、住友電工、ソニー、東芝、NEC、日立、富士通研、富士電機総研、松下電器、三菱電機、NTT、キャノン、リコー、など

川崎重工、神戸製鋼、新日鉄、住友金属、住友電工、ダイソー、三菱マテリアル、など

- 半導体
- ストレージ

エレクトロニクス



旭化成、クラレ、住友ゴム工業、帝人、東洋紡、三菱レイヨン、三菱化学、ユニチカ

- 繊維
- ゴム

素材
金属・高分子

- 鋼材
- 耐熱被膜
- メッキ



- 二次電池
- 燃料電池
- 環境分析
- 触媒

環境
エネルギー



深層水、建材、殺虫剤

赤穂化成、旭化成、アース製薬、大関化学

創薬・ヘルスケア



武田薬品工業

第一三共、大塚製薬、塩野義製薬、アステラス

帝人、中外、大正

持田製薬、明治製菓、大日本住友、味の素など

豊田中研、ダイハツ、関西電力、ソニー、東京ガス、松下電池、東邦ガス、NKK三洋電機、

自動車関連

蛋白コンソーシアム:20社
キリンビール、日本ロシユ、花王、資生堂、P&G、カネボウ、サンスター

SPring-8の産業利用とガラス・セラミックス材料への適用

(財) 高輝度光科学研究センター・産業利用推進室 梅咲 則正

- SPring-8の紹介
- SPring-8における産業利用の状況 ⇨ 産業利用事例集
- SPring-8放射光を用いたガラス・セラミックスの研究方法
 - XAFS分光法 ⇨ 第1回研究会
 - 高エネルギーX線を利用したXRD法 ⇨ 第2回研究会予定
 - シミュレーション技術を用いた構造モデルの最適化
- SPring-8を使うための利用制度

なぜガラス構造を調べるのか？

- 酸化物ガラスの機能発現と構造 -

- 酸化物の機能特性の発現の理由（構造単位および長距離構造）ならびにガラスにおける発現の有無

特性	ガラスの例	発現の理由		ガラスにおける発現の様子
		構造単位	長距離構造	
[光物性]				
透明性	酸化物ガラス	○		結晶と同様に透明
光吸収	遷移金属着色ガラス	○		結晶と同様着色
蛍光	希土類含有ガラス	○		結晶中と同様
レーザー	Nd ³⁺ 含有ガラス	○		結晶中と同様
[電子物性]				
アルカリイオン伝導	Na ₂ O-CaO-SiO ₂ ガラス	○		結晶と同様に空孔を経てイオンが拡散
超イオン伝導	AgI-Ag ₂ O-MoO ₂ ガラス	○	○	結合の弱いAg ⁺ が伝導に寄与。拡散経路有り。

- 光ファイバー、光導波路ガラス、ガラスレーザー、フォトクロミックガラス、非線形光学ガラス、アップコンバージョン蛍光ガラス、光化学ホールバーニングガラス、生体医療用ガラス、マシナブルガラス、
- オキシナイトライドガラス、ハライド化合物ガラス、カルコゲナイド化合物ガラス
- 超急冷法、気相経由法、ゾル・ゲル法、イオン注入法

石英ガラスの構造を調べる。

SiO₂ガラスの動径分布関数

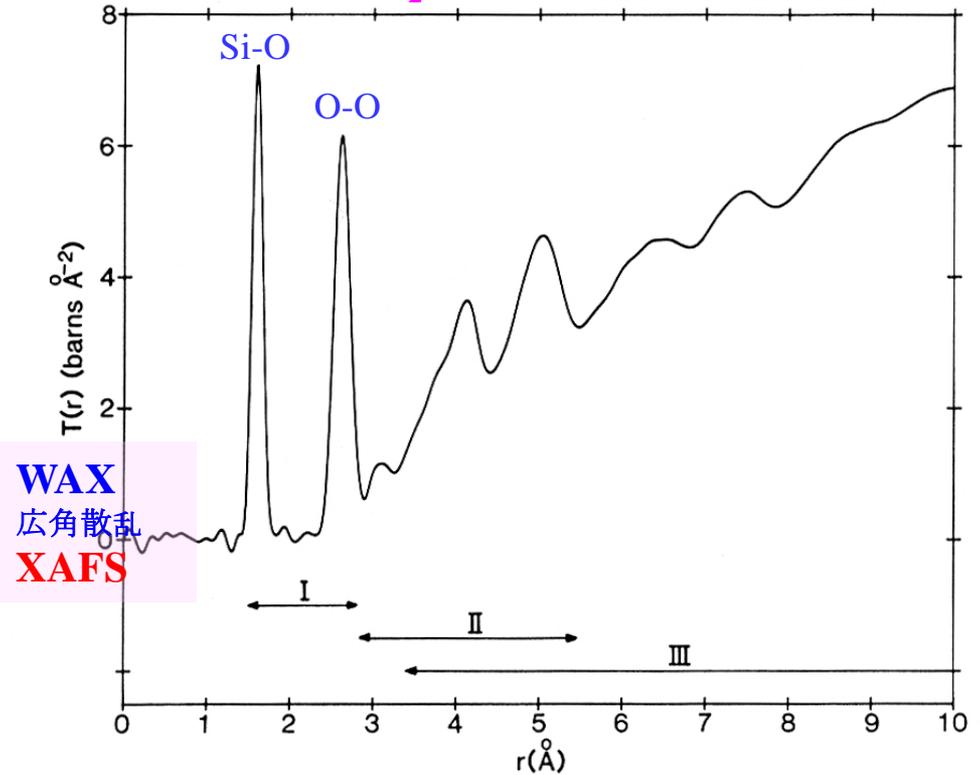
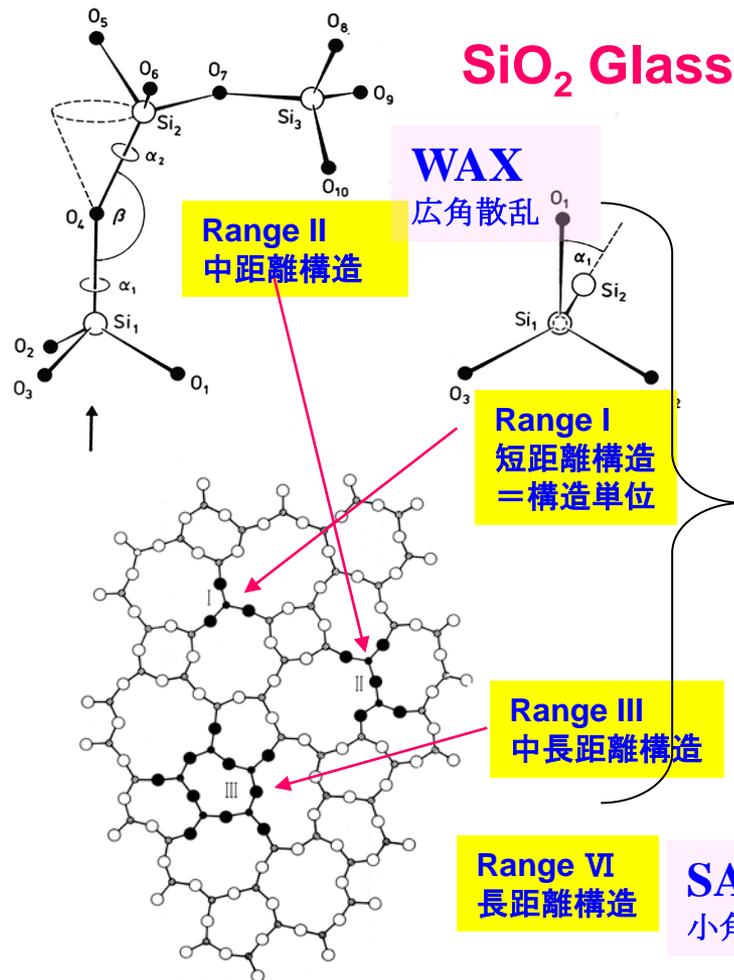
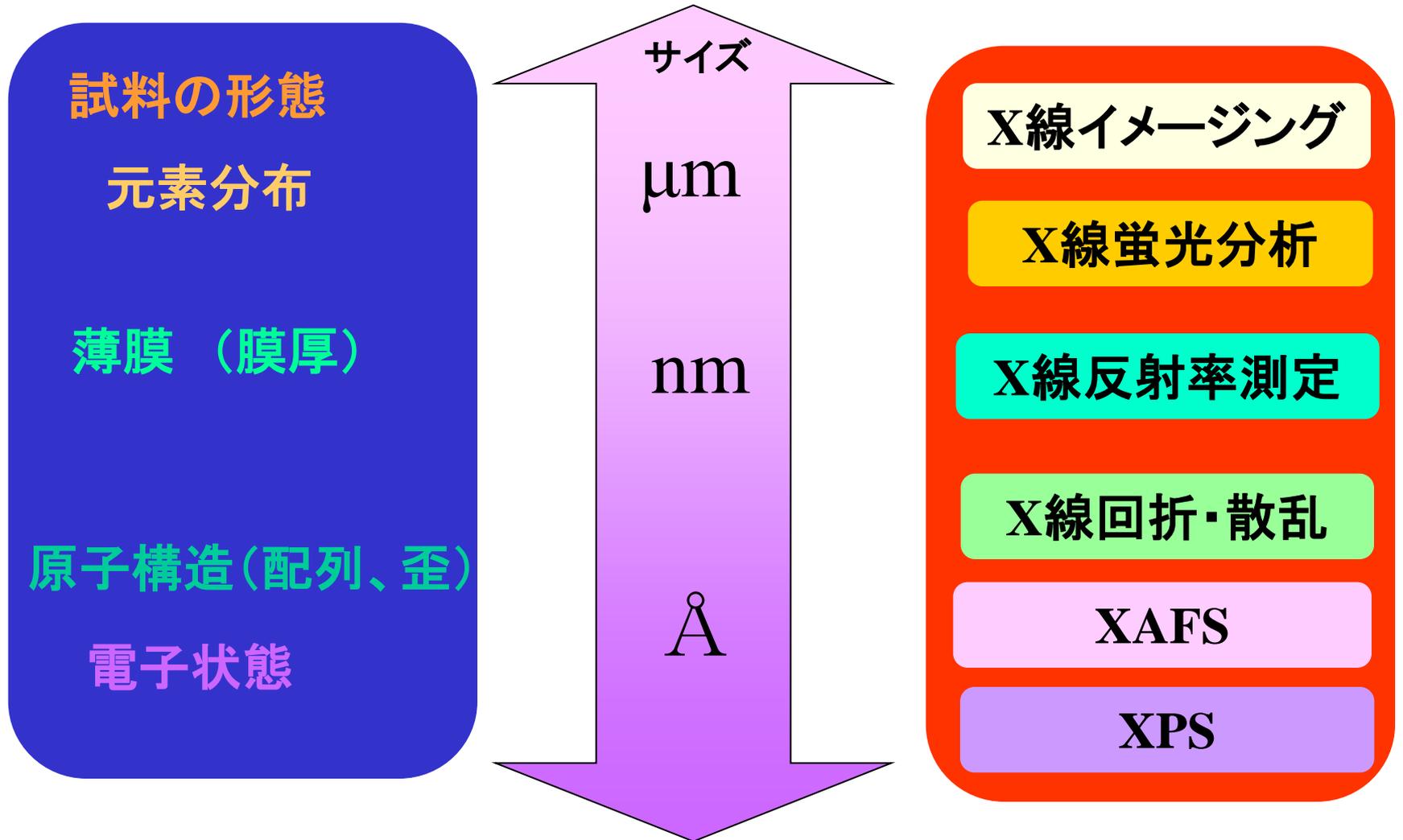


Figure 29 The correlation function for vitreous silica [57]. The roman numerals indicate the extent of the ranges of order defined in table 2.

分析対象

と

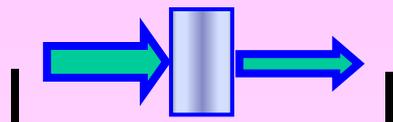
SPring-8の分析手段



ガラス物質の実験的な構造解析手法

Experimental techniques

- **X-ray diffraction** → SPring-8
 - Wide-range X-ray diffraction (WAXD)
 - Energy dispersion X-ray Diffraction (EDXD)
- **Neutron diffraction** → J-PARC
 - Time-of-flight (TOF) neutron scattering
 - Isotopic substitution
- **X-ray absorption fine structure (XAFS)** → SPring-8
 - Extended X-ray absorption fine structure (EXAFS)
 - X-ray absorption near edge structure (XANES)
- **Anomalous X-ray scattering (AXS)** → SPring-8
- **Solid state NMR spectroscopy**
- **Raman and Infrared spectroscopy**



0 I_0 : 入射X線の強度
 I_1 : 透過X線の強度
 x : 物質の厚み
 μ : 物質の吸収係数

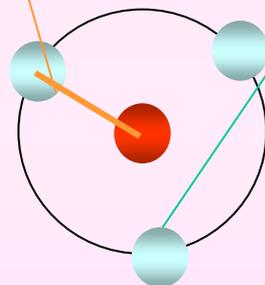
$$I_1 = I_0 \exp(-\mu x)$$

X線吸収微細構造 (XAFS)

EXAFS (広域X線吸収微細構造)

ターゲット元素近傍の原子の動径分布関数のフーリエ変換

- 振動周期
: 近接原子までの距離
- 振動振幅
: 近接原子の配位数



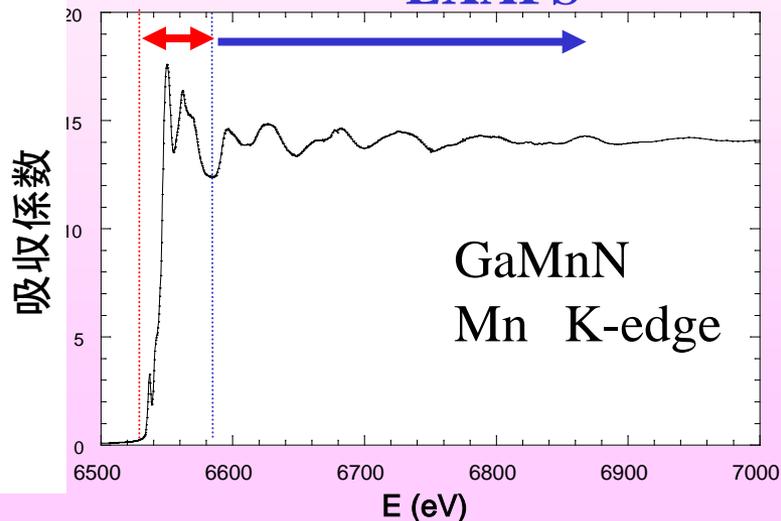
— 周りの局所構造

XANES (X線吸収端近傍構造)

ターゲット元素の電子情報を反映

— 化学状態 (価数等)

XANES EXAFS



XAFS分析の対象は？

- 非結晶物質の局所構造解析に必須の分析ツール
 - ▶ XAFSでないと情報が得られない系が多数存在

- 広範な測定対象

- ▶ 触媒

- 光触媒、排ガス処理触媒、水素吸蔵・放出に関わる触媒

- ▶ 材料

- 発光材料、電池の電極材料、機能性ガラス材料、高耐久性鋼材

- ▶ デバイス

- 透明導電膜、絶縁膜、光記録デバイス材料

- ▶ 環境関連物質

- 焼却炉焼却灰、汚泥・汚水・土壌処理、生体内蓄積物質

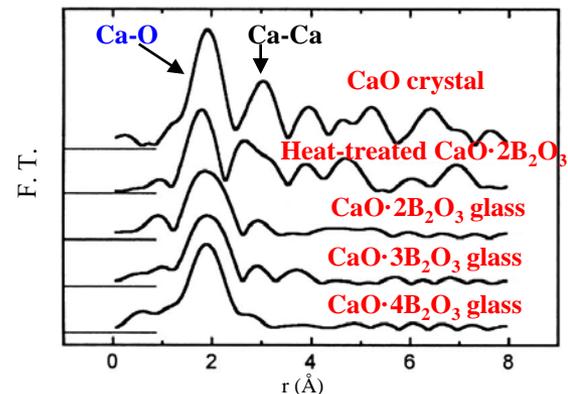
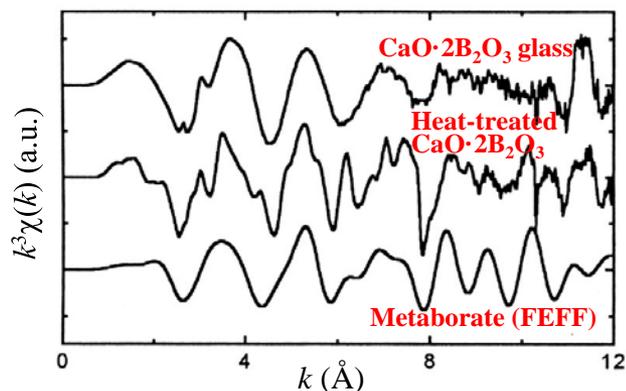
- ▶ ヘルスケア関連

- 歯磨き粉

- 反応下の状態のin-situ計測

- ▶ 触媒、燃料電池電極、焼却炉燃焼
 - ▶ 反応速度論

- a) K. Handa, N. Ohtori, Y. Iwadate, N. Umesaki and H. Iwasaki: “XAFS Studies of Alkaline-Earth Borate Glasses”, Jpn. J. Appl. Phys., **38** (1999) Suppl. 38-1, 148-151.
- b) N. Ohtori, K. Takase, I. Akiyama, K. Handa, Y. Iwadate and N. Umesaki: “An MD Study of the Short Range Structure of RO·xB₂O₃ Glasses: R=Mg, Ca, Sr and Ba; x=1, 2, 3 and 4”, Third International Conference on “BORATE GLASSES, CRYSTALS & MELTS”, 4-9 July, 1999, Sofia, Bulgaria p. 468-473.



Ca K-XAFS
(4.038keV)

Ba LIII-XAFS
(5.247keV)

Glass	<i>i-j</i>	<i>r_{ij}</i> (Å)	<i>N_{ij}</i> (atoms)	(<i>σ_{ij}</i>) ^{1/2} (Å)	Method
CaO·2B ₂ O ₃ <i>r_{Ca}</i> ²⁺ + <i>r_O</i> ²⁻ =2.39Å	B-O	1.39/1.38	3.21/3.29	-	ND/MD ^{a)}
	Ca-O	2.40±0.01/2.34	6.0±0.2/6.64	0.105±0.01/-	EXAFS^{a)/MD^{b)}}
	O-O	2.41/2.40	4.2/4.1	-	ND/ MD ^{a)}
	B-B	2.74	3.5	-	MD ^{a)}
CaO·4B ₂ O ₃	B-O	1.38/1.38	3.11/3.11	-	MD ^{a)}
	Ca-O	2.41±0.01/2.35	6.0±0.2/6.66	0.106±0.01/-	EXAFS^{a)/MD^{b)}}
	O-O	2.40/2.39	4.4/4.0	-	MD ^{a)}
	B-B	2.72	3.8	-	MD ^{a)}

Local Atomic Structure around Ni, Nb, and Zr Atoms in Ni-Nb-Zr-H Glassy Alloys Studied by XAFS Method

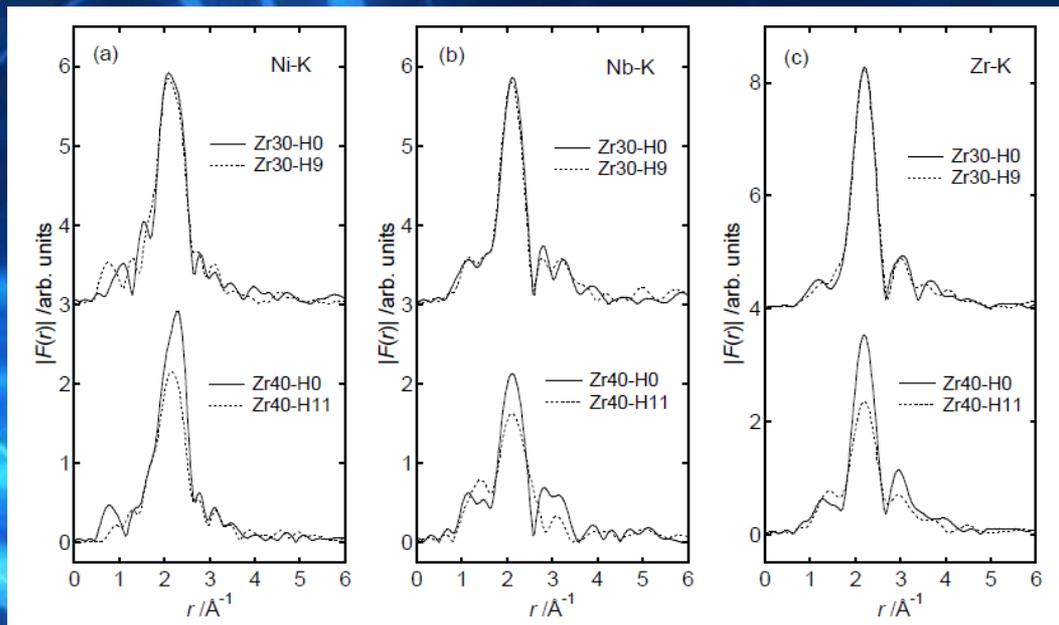


FIG. 2. The absolute values of Fourier transforms (FTs) of k^3 -weighted XAFS oscillations ($|F(r)|$) of Zr30-H0 (upper solid lines), Zr30-H11 (upper dotted lines), Zr40-H0 (lower solid lines), and Zr40-H11 (lower dotted lines) at the (a) Ni, (b) Nb, and (c) Zr K-edges. The FT ranges analyzed are 2.7 - 13.3 \AA^{-1} , 3.0 - 12.0 \AA^{-1} , and 2.9 - 13.5 \AA^{-1} , for Ni, Nb, and Zr K-edges, respectively.

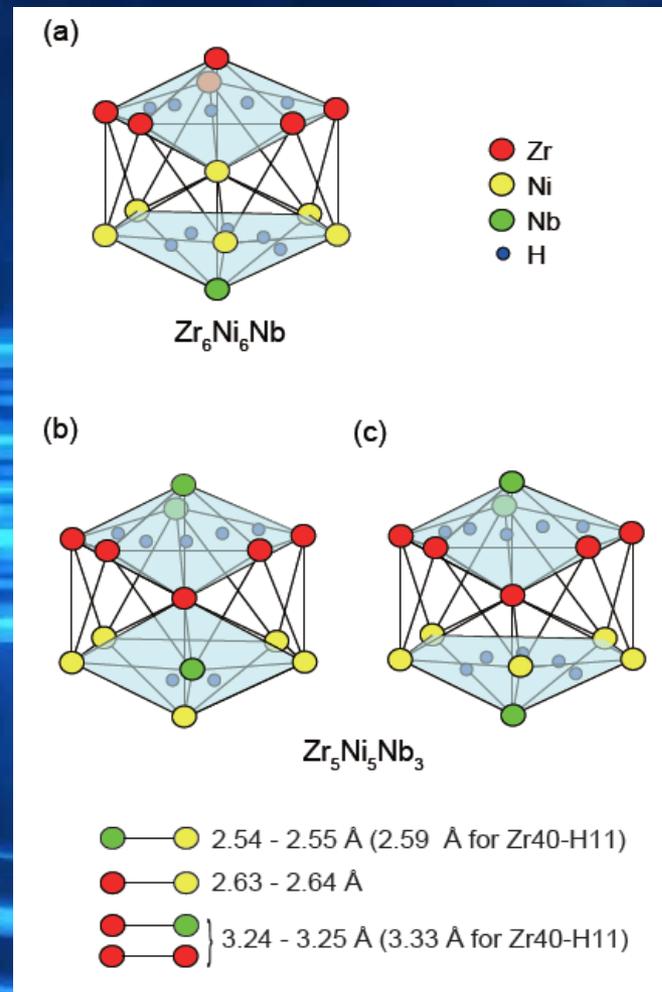
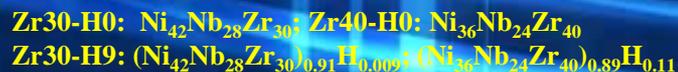
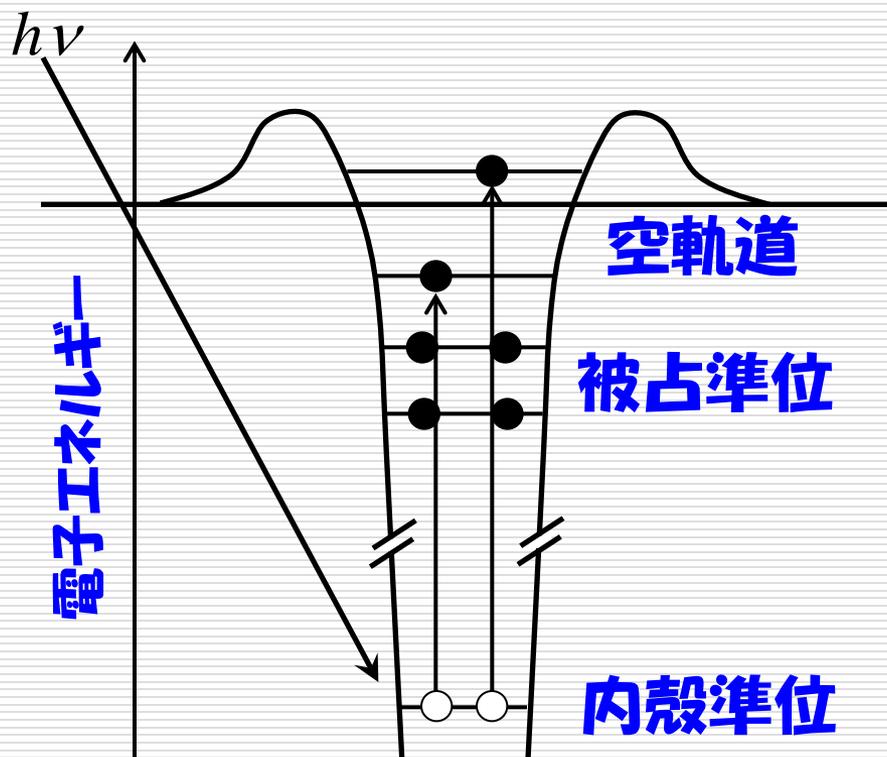


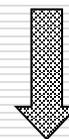
FIG. 3. Cluster models having the icosahedral structure with the chemical compositions of $\text{Zr}_6\text{Ni}_6\text{Nb}$ (a), and $\text{Zr}_5\text{Ni}_5\text{Nb}_3$ (b, c). The sites which can be occupied by hydrogen atoms are also indicated by small blue circles. The bond-lengths obtained by the XAFS analysis are indicated in the bottom part.

XANESの特徴

内殻軌道から色々な空軌道への遷移に対応



空軌道は原子配置やポテンシヤルの変化に敏感

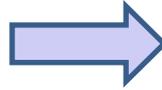


電子状態や対称性等周囲の局所状態を反映する

- ・価数
- ・結合角度
- ・

リチウムイオン電池の正極材料

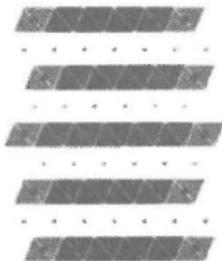
- ① 高電圧発生（高酸化力）
- ② 高重量エネルギー密度
- ③ リチウム含有
- ④ 高体積エネルギー密度
- ⑤ 優れた可逆性（リチウム脱挿入と酸化還元）



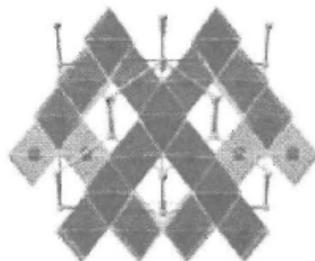
- リチウムイオン
- 後期3d遷移金属イオン：軽量で有り、より深い準位での酸化還元反応による強い酸化力
- これらのカチオンを固体とするためのカウンターアニオン：酸素

Electrode	Average Voltage	Density [g/cc]	Theoretical Capacity	
	[V]		[Ah/kg]	[Ah/l]
Li_xCoO_2 ($0.5 < x < 1$)	3.7	5.1	137	699
$\text{Li}_x\text{Mn}_2\text{O}_4$ ($0 < x < 1$)	4.0	4.2	148	622
Li_xFePO_4 ($0 < x < 1$)	3.4	3.6	169	608
$\text{Li}_x\text{FeSiO}_4$	($1 < x < 2$)	3.2	166	531
	($0 < x < 2$)	2.8	332	1062
Li_xFeBO_3 ($0 < x < 1$)	2.6	3.5	220	770
$\text{Li}_x\text{C}_6\text{O}_8$ ($2 < x < 6$)	2.5	1.8	589	1060
Air	3.3	N.A.	∞	∞

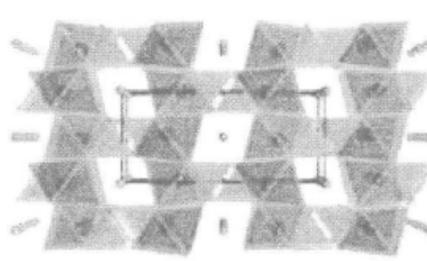
(a) LiCoO_2



(b) LiMn_2O_4



(c) LiFePO_4



XANESスペクトルの解析法

□ 電子状態計算法

- 第一原理計算: 様々な手法
 - OLCAO法(DV-X α 法), FLAPW+lo法(WIEN2k)
- 物性との対応が直接的
- 高エネルギー側(吸収端より上50eV)の計算が困難

□ 多重散乱法

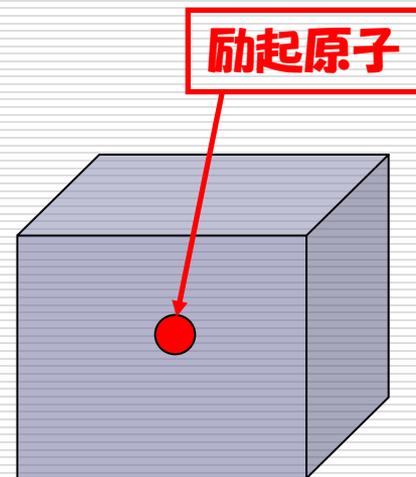
- FEFF8コードなど: 原子を球形ポテンシャルで近似
- 高エネルギー側のEXAFS領域との対応が明瞭
- 低エネルギー領域の精度に少々難あり。

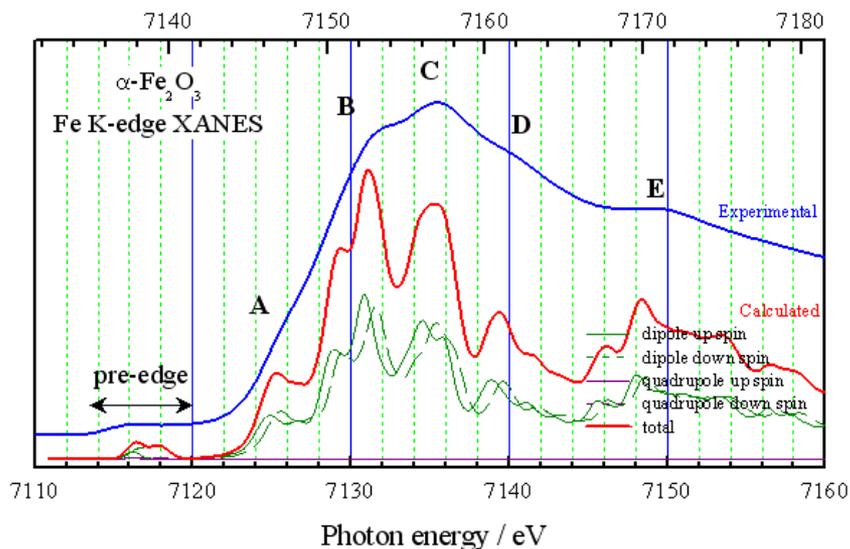
OLCAO : orthogonalized linear combination of atomic orbital

FLAPW+lo : full-potential linearized augmented plane-wave + local orbital

第一原理バンド計算法による XANESスペクトルの解析

- **第一原理バンド計算法**
(WIEN2K)
- **100原子程度のスーパーセルを使用**
(励起原子が十分に希薄であるように)
- **始状態と終状態をそれぞれ計算**
(内殻空孔効果を取り入れる)
- **始状態と終状態の波動関数で挟んで遷移確率を計算**
- **遷移エネルギーは、始状態と終状態の全エネルギー差から求める**





Comparison of Fe K-edge XANES spectra of $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ (a) experiment and (b) calculation.

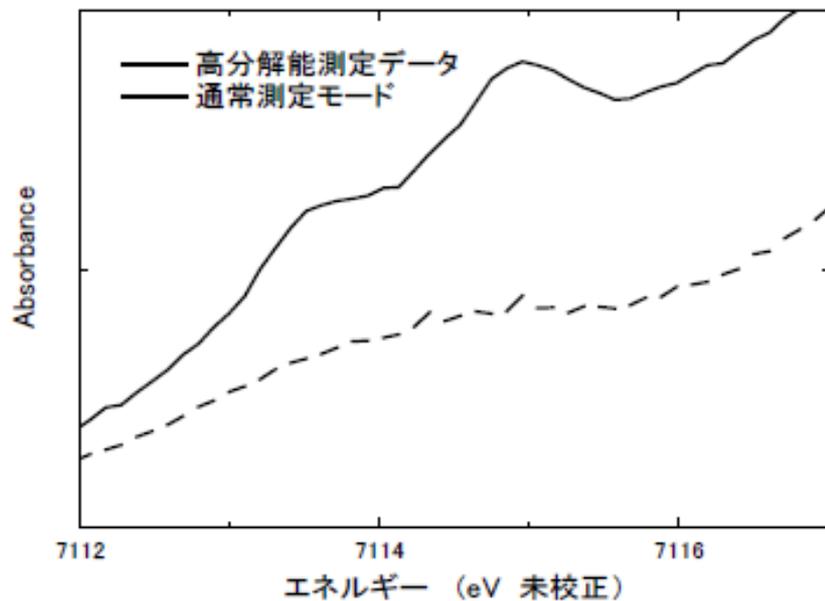


図1 $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ のK吸収端前のプレエッジピーク

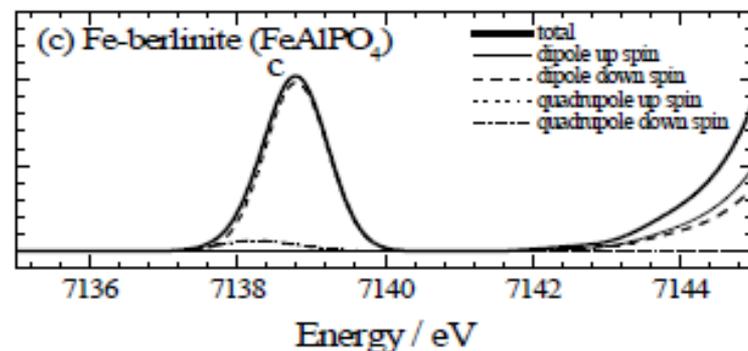
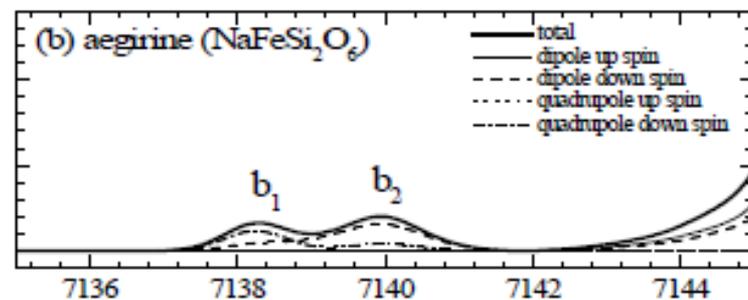
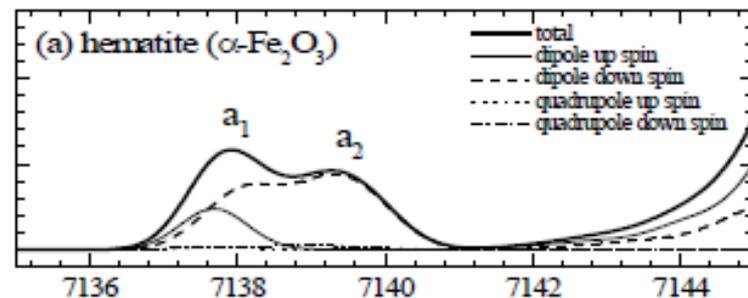
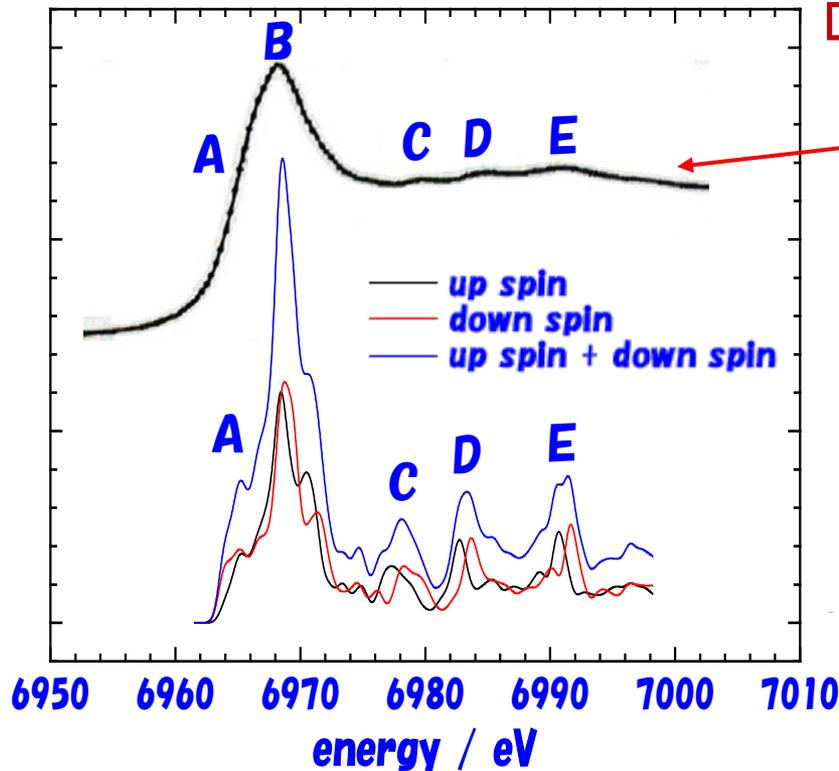


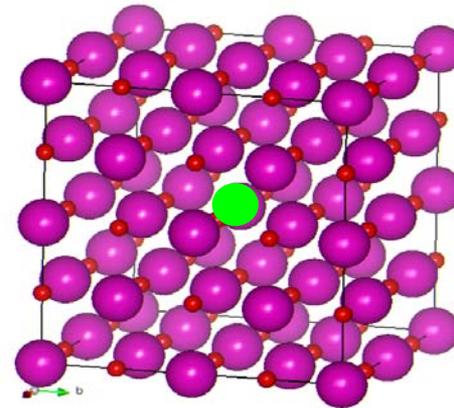
図2 バンド計算から求めたK吸収端前のプレエッジピーク(a) $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ (hematite), (b) $\text{NaFeSi}_2\text{O}_6$ (aegirine), (c) FeAlPO_4 (Fe-berlinite)

EuOのXANESスペクトル

- 空間群: $Fm-3m$ (225)
- 格子定数 $a = 0.49841\text{nm}$



実験で得られたスペクトル

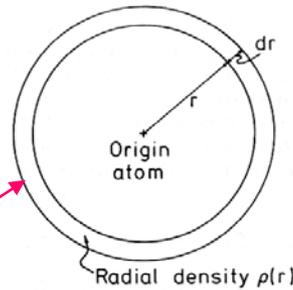


EuO $2 \times 2 \times 2$ super cell

● : core holeを
考慮したEu原子

ガラス構造を調べる手段は、動径分布関数が最適 (radial distribution function, *r. d. f.*)

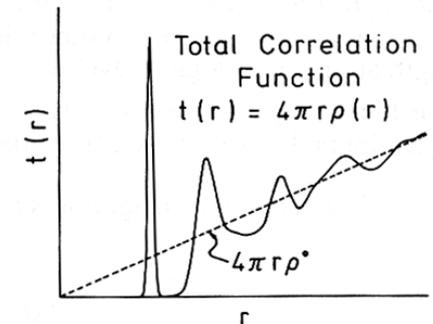
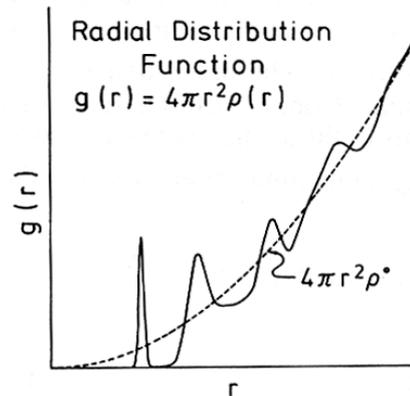
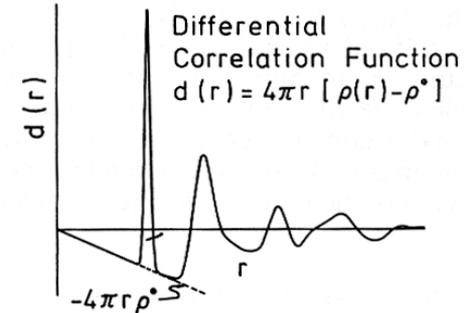
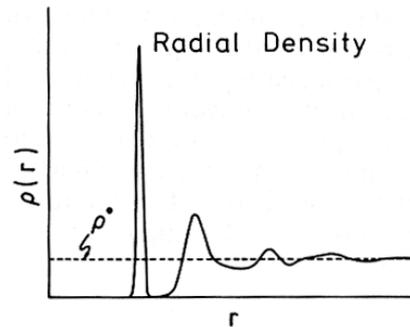
Real Space Correlation Functions



The number of neighbours between r and $r+dr$ is given by $g(r)dr = 4\pi r^2 \rho(r)$.

$$4\pi r^2 \rho(r) = 4\pi r^2 \rho_0 + \frac{2r}{\pi} \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} Q \cdot i(Q) \sin rQ dQ$$

Fig. 8 Real space correlation function for a monatomic amorphous solids.



SiO₂ガラスの構造

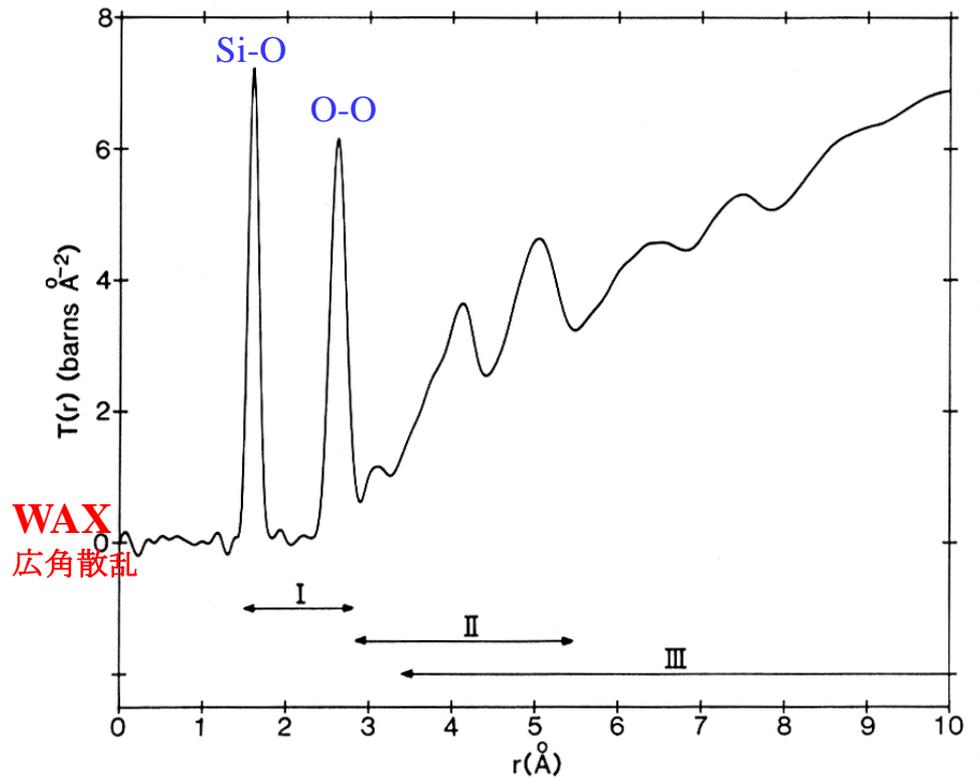
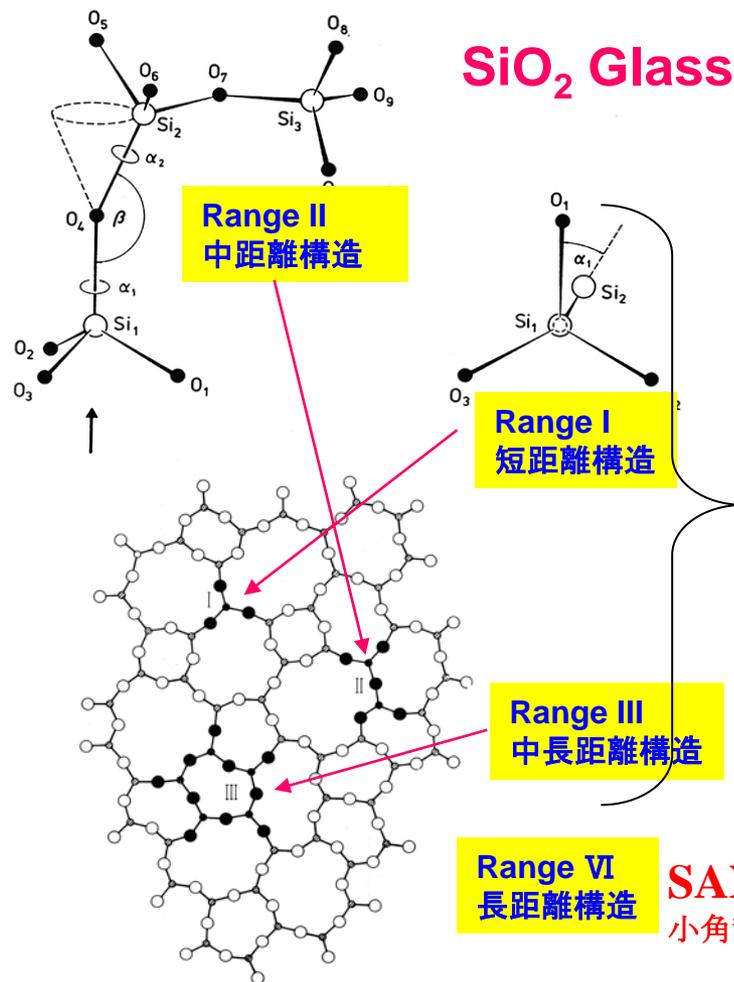


Figure 29 The correlation function for vitreous silica [57]. The roman numerals indicate the extent of the ranges of order defined in table 2.

SAX
小角散乱

SiO₂ガラスにおけるX線回折とパルス中性子回折から得られる干渉関数 (*interference function*) $Q \cdot i(Q)$ の比較

$$4\pi r^2 \rho(r) = 4\pi r^2 \rho_0 + \frac{2r}{\pi} \int_0^\infty Q \cdot i(Q) \sin(Qr) dQ$$

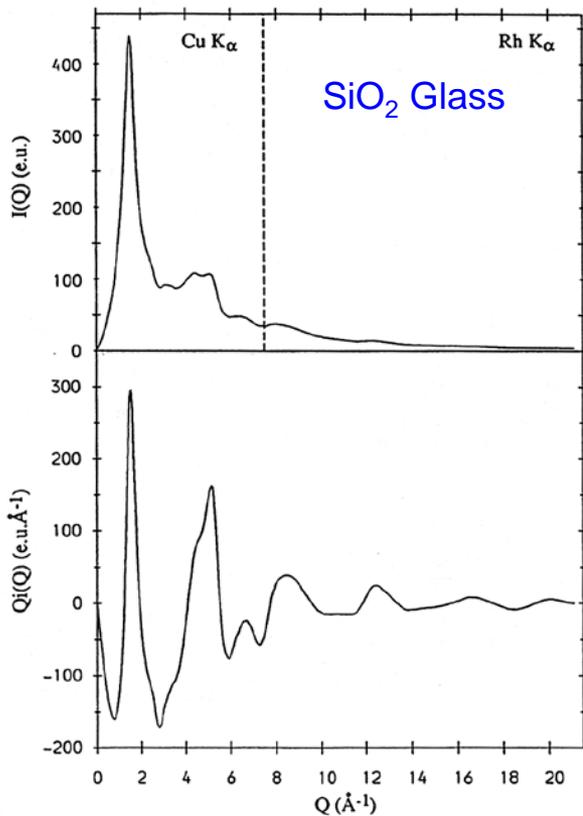


Figure 23 Mozzi and Warren's [55] X-ray data for vitreous silica. The vertical dashed line indicates the change from Cu K_α to Rh K_α radiation.

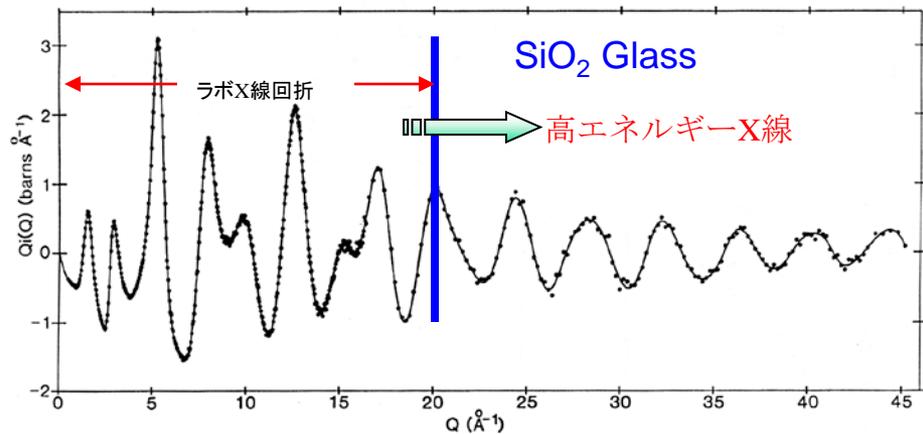


Figure 20 The neutron interference function for vitreous silica [47].

• experimental points; —, cubic spline fit.

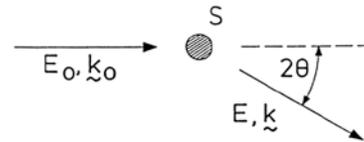


Figure 9 A scattering event. S is the sample, 2θ the scattering angle, E_0 and E the incident and final energies and k_0 and k the corresponding wavevectors.

$$hQ = hk_0 - hk$$

$$h\omega = E_0 - E$$

$$Q = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta$$

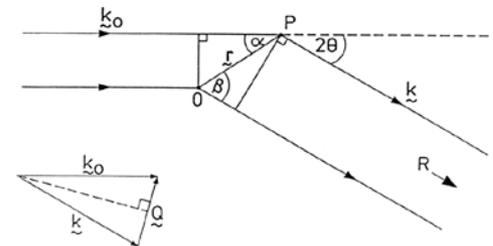


Figure 10 Scattering geometry. See text for a definition of the various symbols.

シンクロトロン放射光を用いた 高エネルギーX線回折

高エネルギーX線を用いる事により、ランダム系物質の回折パターンを高い Q 値まで統計精度良く測定が可能になる。



実空間での分解能の向上

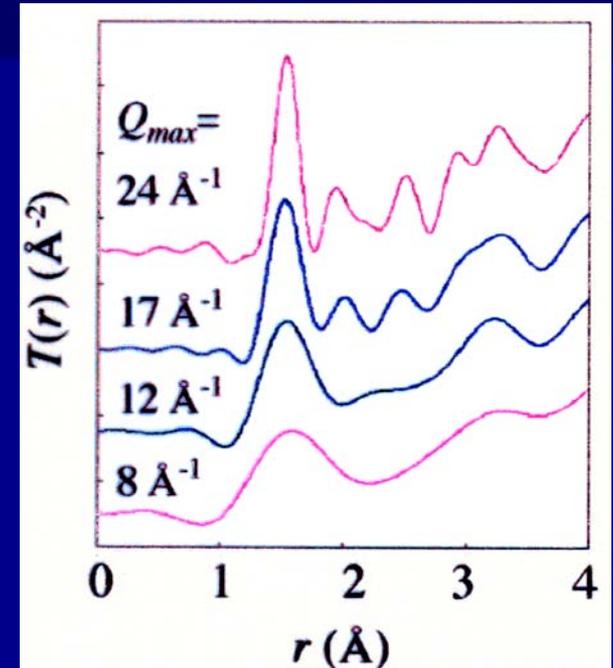
高い Q をどうやって実現するか？

$$Q = \frac{4\pi \sin \theta}{\lambda}$$

Q : 散乱ベクトル (\AA^{-1})
 θ : 回折角 ($^\circ$)
 λ : X線の波長 (\AA)



波長の短いX線 → 高エネルギーX線が必要



$$4\pi r^2 \rho(r) = 4\pi r r^2 \rho_0 + \frac{2r}{\pi} \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} Q \cdot i(Q) \sin rQ dQ$$

Structure of Alkaline-Earth Borate Glasses

Motives of research

- A) Network structure of B₂O₃ glass
- B) Structural relationship between borate glass and melt
- C) Structure of alkali/alkaline earth borate glasses
- D) Effect of the alkali/alkaline earth oxides on the short-range order structure of borate networks

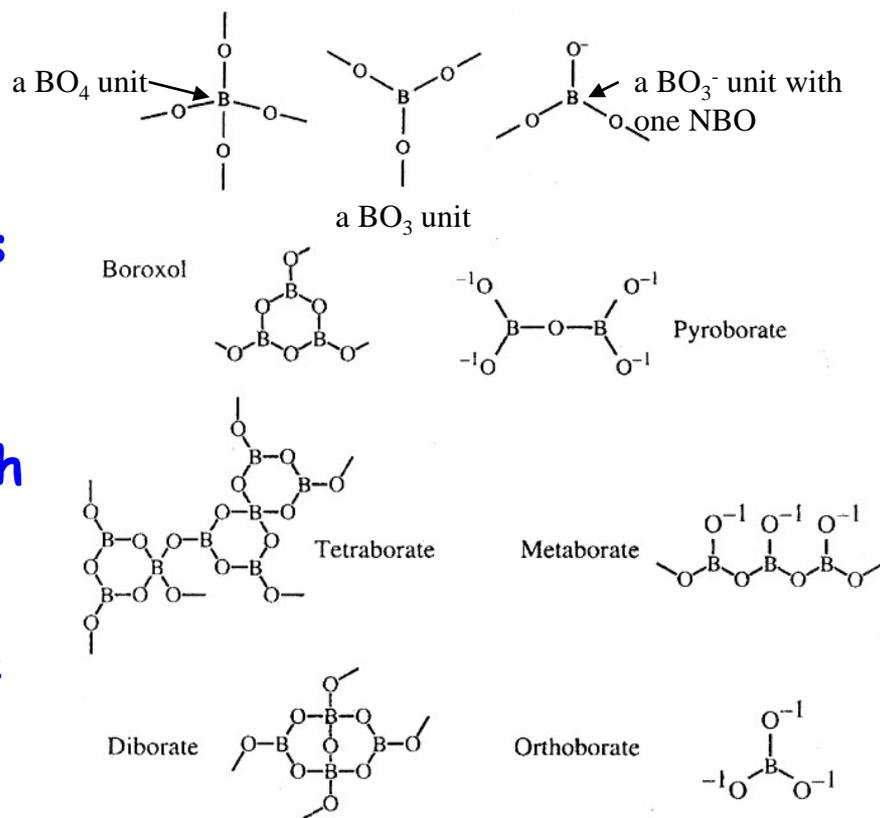


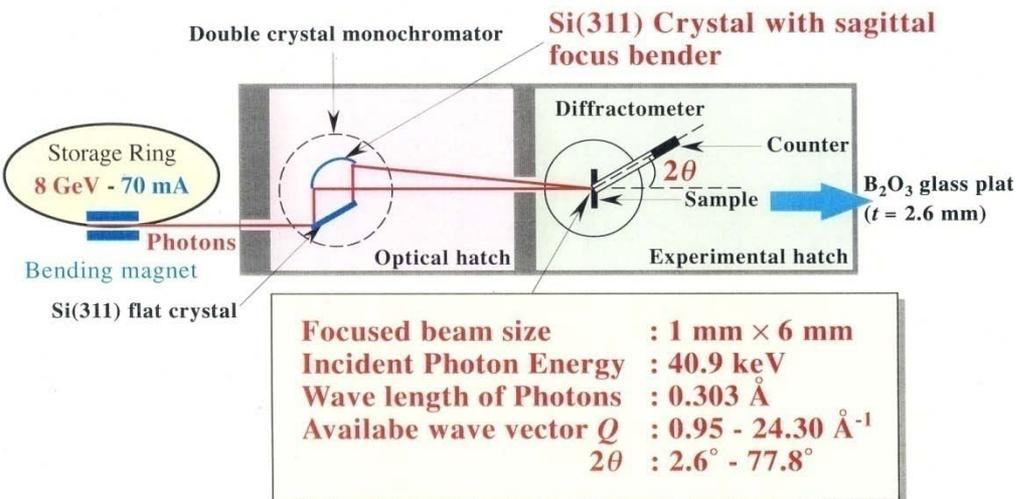
Fig. 9 Superstructural units occurring in anhydrous binary crystalline borates.

HIGH ENERGY X-RAY STUDY ON THE STRUCTURE OF VITREOUS B₂O₃

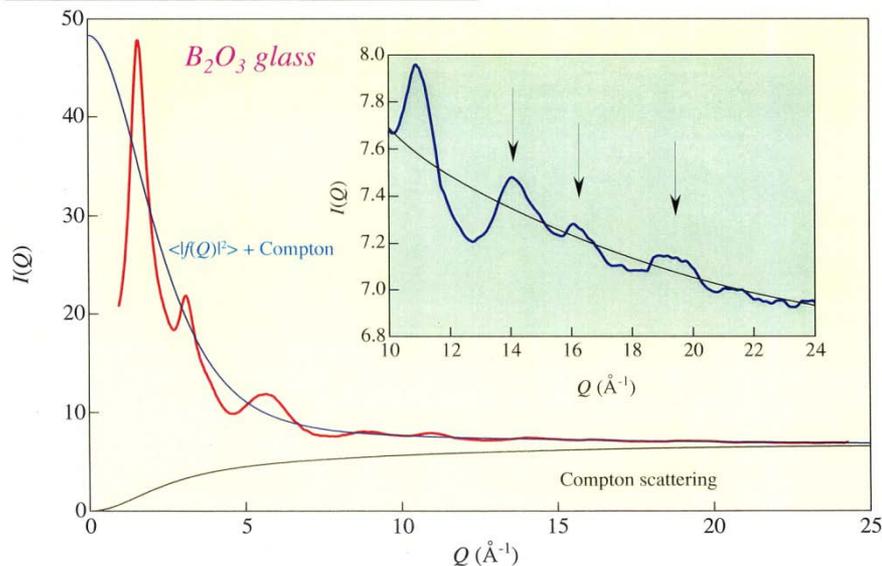
K. Suzuya, S. Kohara, Y. Yoneda and N. Umesaki: Phys. Chem. Glasses, **41** (2000), 282.

The **High energy X-ray (40-300keV) diffraction (HEXRD)** measurement on the B₂O₃ glass has been carried out at 41keV, using a bend magnet beam at **SPring-8** and a plate sample, 2.6mm in thickness. The sample is investigated in transmission geometry. Thus, **the accurate structure factor $S(Q)$ of B₂O₃ glass in the Q range of $0.9 \text{ \AA}^{-1} - 24.3 \text{ \AA}^{-1}$** is obtained with very systematic corrections, especially for very small absorption correction for the sample.

*SPring-8 Bending Magnet Beamline BL14B1
JAERI Material Science Beamline*



Fully corrected and normalized data



HIGH ENERGY X-RAY STUDY ON THE STRUCTURE OF VITREOUS B₂O₃

K. Suzuya, S. Kohara, Y. Yoneda and N. Umesaki: Phys. Chem. Glasses, **41** (2000), 282.

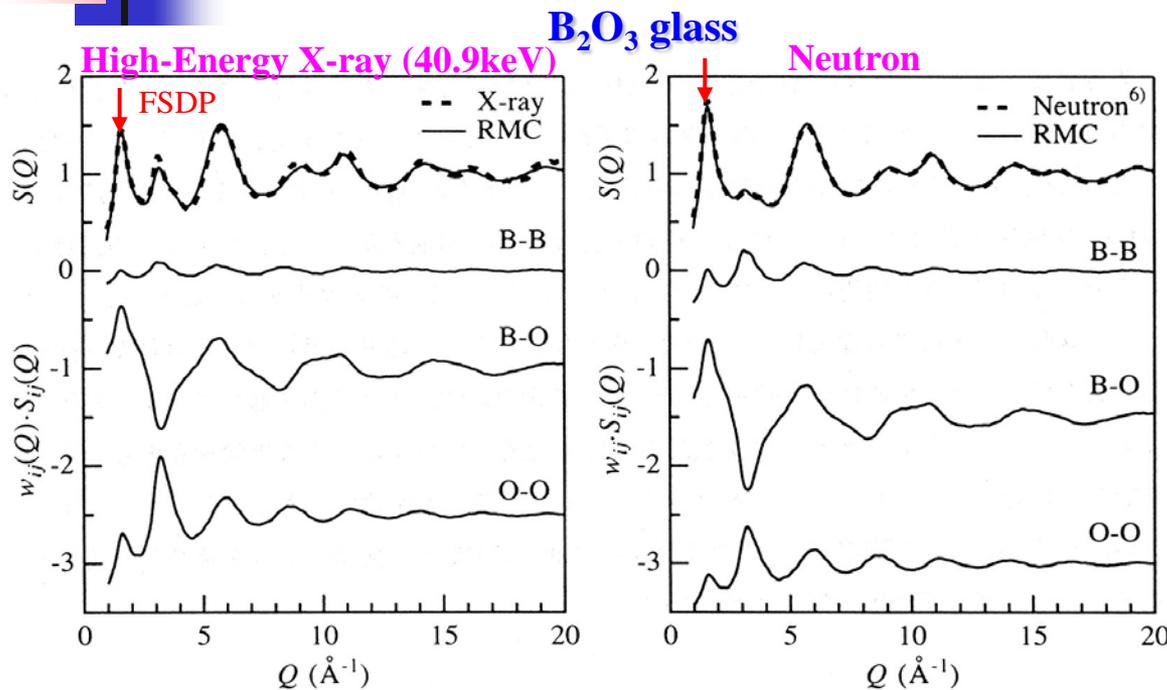
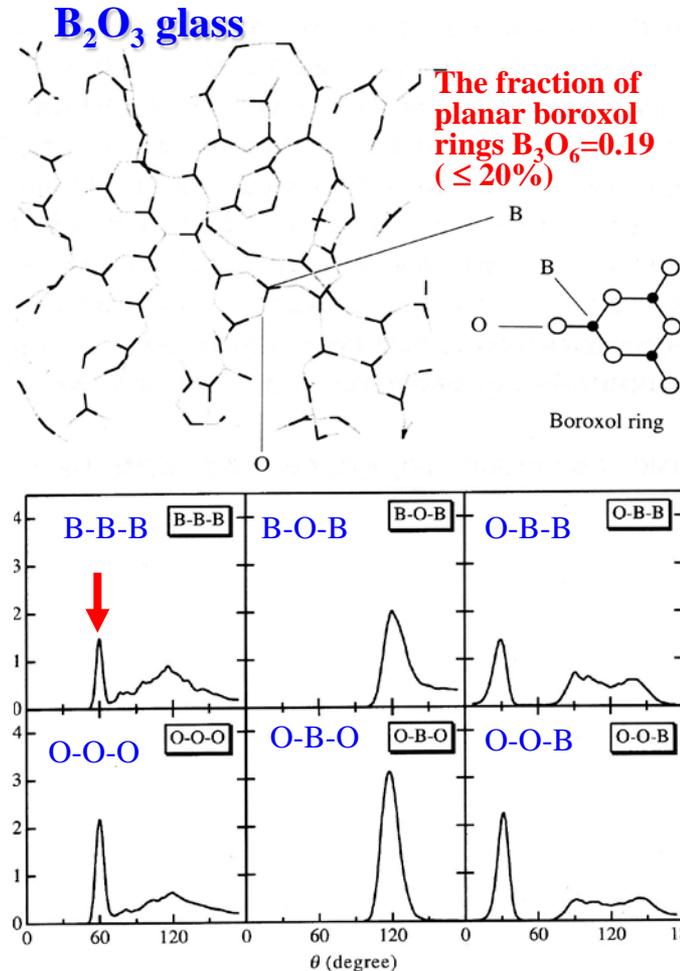


Fig. 7 Total and partial structure factors $S(Q)$ of vitreous B₂O₃. w_{ij} : neutron weighted partial coefficient, $w_{ij}(Q)$: X-ray weighted partial coefficient

● Neutron data from A. C. Hannon, D. I. Grimley, R. A. Hulme, A. C. Wright and R. N. Sinclair: J. Non-Cryst. Solids, **177** (1994) 299.

Fig. 8 Slice through a RMC configuration (10Å × 10Å × 10Å) of vitreous B₂O₃.

Fig. 6 Bond angle distribution for B₂O₃ glass



FSDP: First Sharp Diffraction Peak

Short- vs. long-range correlations: molecular solids

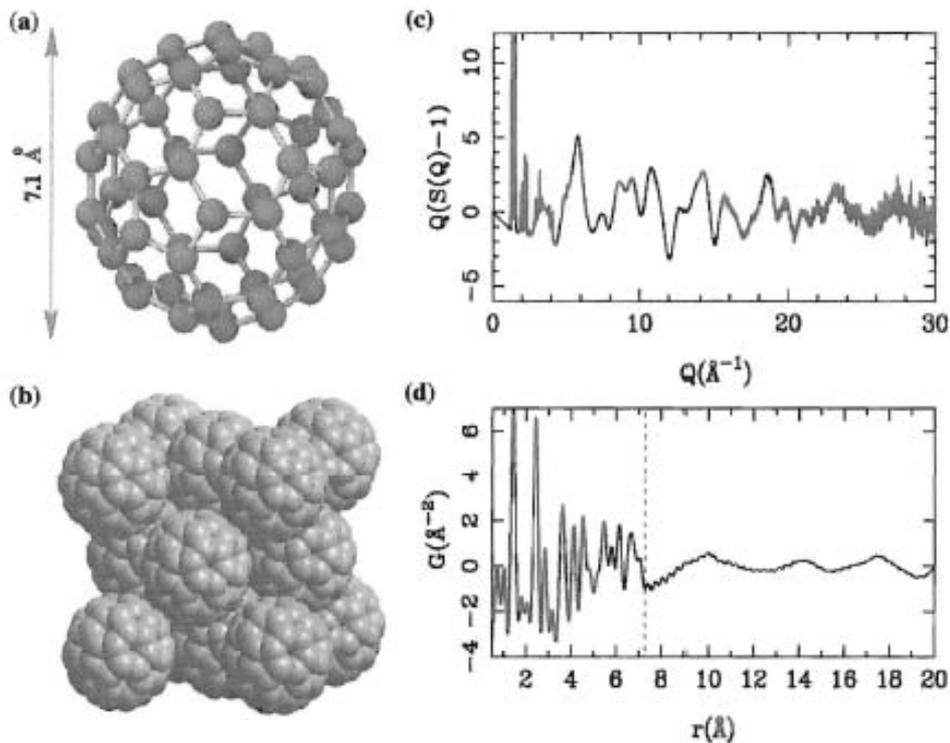


Figure 1.4. (a) The structure of a single C_{60} molecule. (b) The f.c.c. arrangement of C_{60} balls in solid C_{60} . (c) Room temperature neutron powder diffraction data from a sample of solid C_{60} at room temperature. Note the pronounced diffuse scattering. The Bragg peaks from the f.c.c. arrangement of the balls are evident at very low Q . (d) Fourier transform of the data in (c) showing the PDF, $G(r)$, of solid C_{60} . The sharp features at low- r are the intra-ball C-C correlations. Above 7.1 Å only inter-ball correlations are present which are very weak because the balls are spinning.

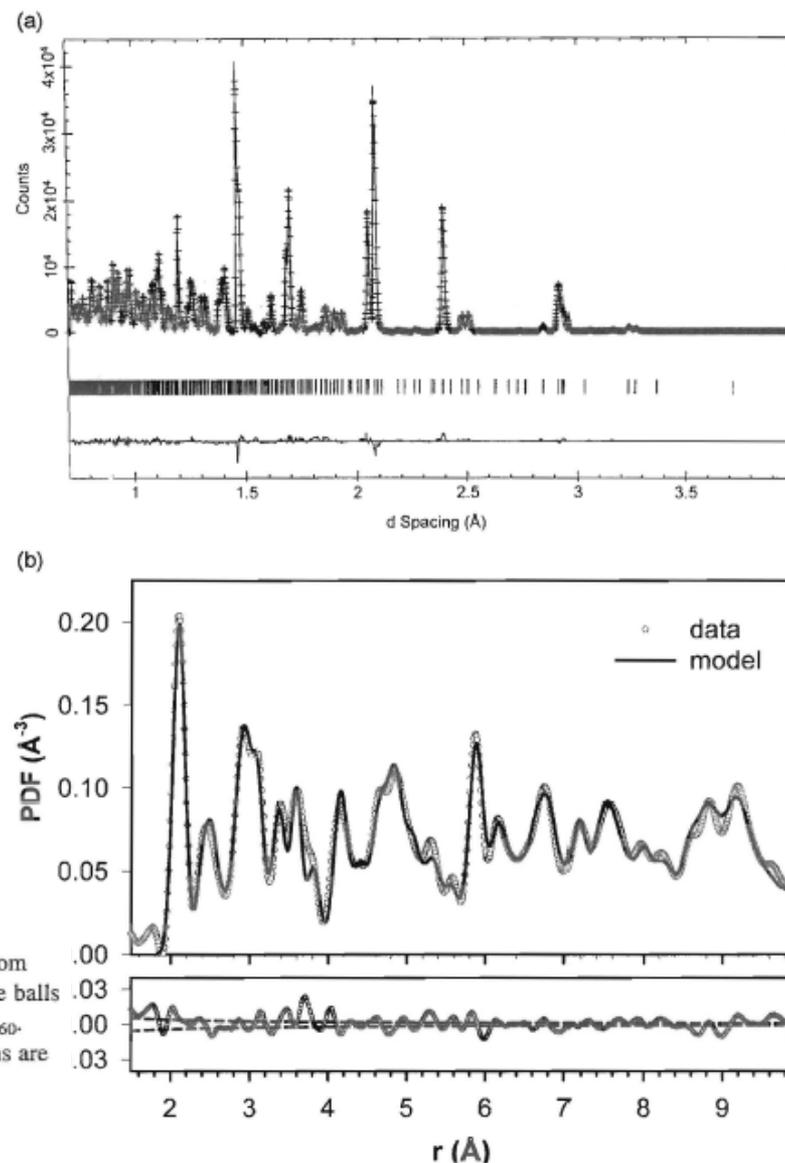


Figure 6.5. Fits of structural models of $PbZrO_3$ to neutron powder diffraction data taken at SEPD at $T = 10$ K model. (a) Rietveld refinement carried out in Q -space. (b) Real-space fit to the PDF from the same data (Teslic and Egami, 1998).

Structural Models of Oxide Glasses

- Modeling of oxide glasses

- Debye scattering equation

$$Q \cdot i(Q) = \sum_{i=1}^m \sum N_{ij} \exp(-b_{ij} Q^2) f_i(Q) f_j(Q) \frac{\sin(Qr)}{r_{ij}}$$

- Molecular dynamics (MD) simulation

$$u_{ij} = \frac{Z_i Z_j}{r_{ij}} + f_0(b_i + b_j) \exp\left[\frac{a_i + a_j - r_{ij}}{b_i + b_j}\right]$$

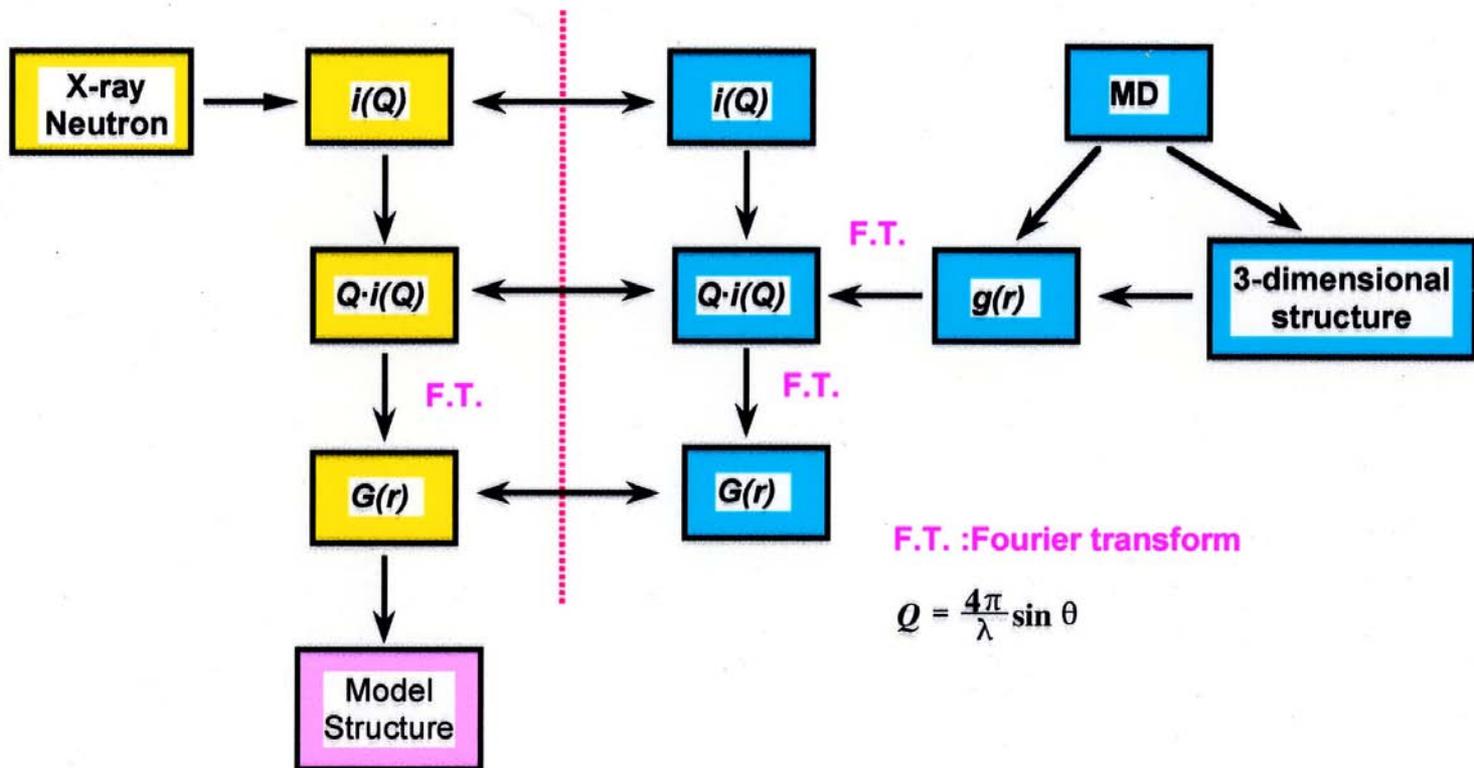
- Reverse Monte Carlo technique

$$\chi_n^2 = \frac{\sum_{i=1}^m [A_n^C(Q_i) - A^E(Q_i)]^2}{\sigma^2(Q_i)}$$

Structural Models of Oxide Glasses by MD Method

X-ray and Neutron Diffraction Methods

Computer Simulation with MD simulation



STRUCTURAL STUDIES OF $x\text{mol}\% \text{K}_2\text{O}-\text{B}_2\text{O}_3$ ($x=0, 10$ and 30) GLASSES AND MELTS

N. Umesaki, D. A. H. Cunningham, K. Handa and Y. Iwadata: "Cation and Network Structure in Binary Potassium Borate Glasses", Borate Glasses, Crystals & Melts, ed. By A. C. Wright, S. A. Feller and A. C. Hannon, The Society of Glass Technology, Sheffield, (1997), p. 99-106.

Table 2 Short-range order (SRO) parameters for $\text{K}_2\text{O}-\text{B}_2\text{O}_3$ glasses and melts obtained from neutron/X-ray diffraction, EXAFS and MD results.

Glass/Melt	$i-j$	$r_{i-j}/\text{\AA}$	N_{i-j}/atoms	$(\sigma_{i-j}^2)^{1/2}/\text{\AA}$	Method	
[B₂O₃]	B-O	1.38/1.37	3.0/3.0	0.14/0.18	ND [10]	
		1.37	3.0	0.126	XRD	
		1.36	3.0	–	MD	
	O-O	2.40/2.38	–	–	ND [10]	
		2.38	4.0	–	MD	
	B-B	2.64	3.0	–	MD	
		$\langle r_{B-O} \rangle = 119.32 \pm 4.34 \text{\AA}$	$\langle r_{O-O} \rangle = 151.07 \pm 13.52 \text{\AA}$			
[10%K₂O-B₂O₃]	B-O	1.39/1/39	3.1/3.1	–	ND	
	O-O	2.40/2.39	–	–	ND	
[K₂O-4B₂O₃]	B-O	1.37 (1.48)	3.0 (4.0)	0.143 (0.155)	XRD	
		1.38	3.2	–	MD	
			$\langle r_{B-O} \rangle = 118.92 \pm 5.07 \text{\AA}$	$\langle r_{O-O} \rangle = 150.15 \pm 14.47 \text{\AA}$		
	O-O	2.36	4.0	0.15	XRD	
		2.40	4.2	–	MD	
			K-O 2.86±0.02	6.8±0.5	0.153±0.02	EXAFS
		K-O: $r_{K^+} + r_{O^{2-}} = 2.73 \text{\AA}$	2.83	6.0	0.182	
			2.74	6.1	–	
[30%K₂O-B₂O₃]	B-O	1.42/1.40	3.4/3.4	0.23/0.23	ND	
[K₂O-2B₂O₃]	B-O	1.38	3.3	–	MD	
	O-O	2.40	4.6	–	MD	
		$\langle r_{B-O} \rangle = 115.23 \pm 6.41 \text{\AA}$	$\langle r_{O-O} \rangle = 148.70 \pm 14.52 \text{\AA}$			
		K-O 2.83±0.04	5.9±0.4	0.100±0.02	EXAFS	
			2.74	6.6	–	

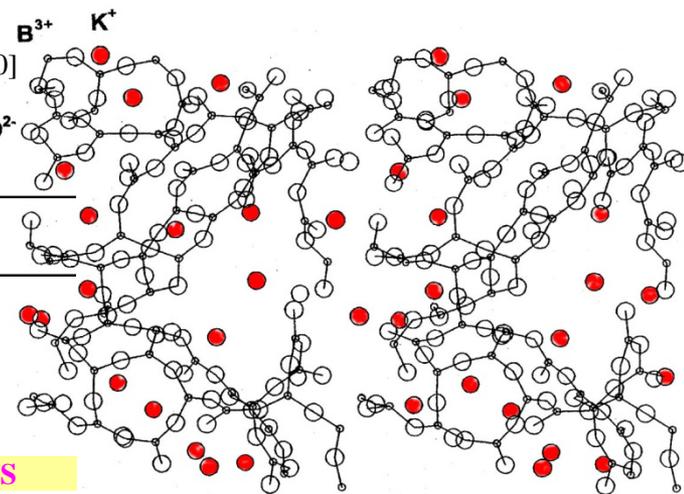


Fig. 3 Stereoscopic snapshot of the ions in $\text{K}_2\text{O} \cdot 2\text{B}_2\text{O}_3$ glass at 298K.

粉末XRDとEXAFSを用いたRMC法による構造モデルの最適化

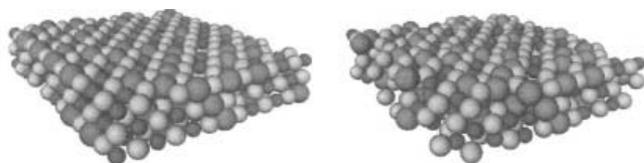


Fig. 2 Three-dimensional atomic view of the initial NaCl type structure (left-hand side) and relaxed structure by RMC moves (right-hand side).

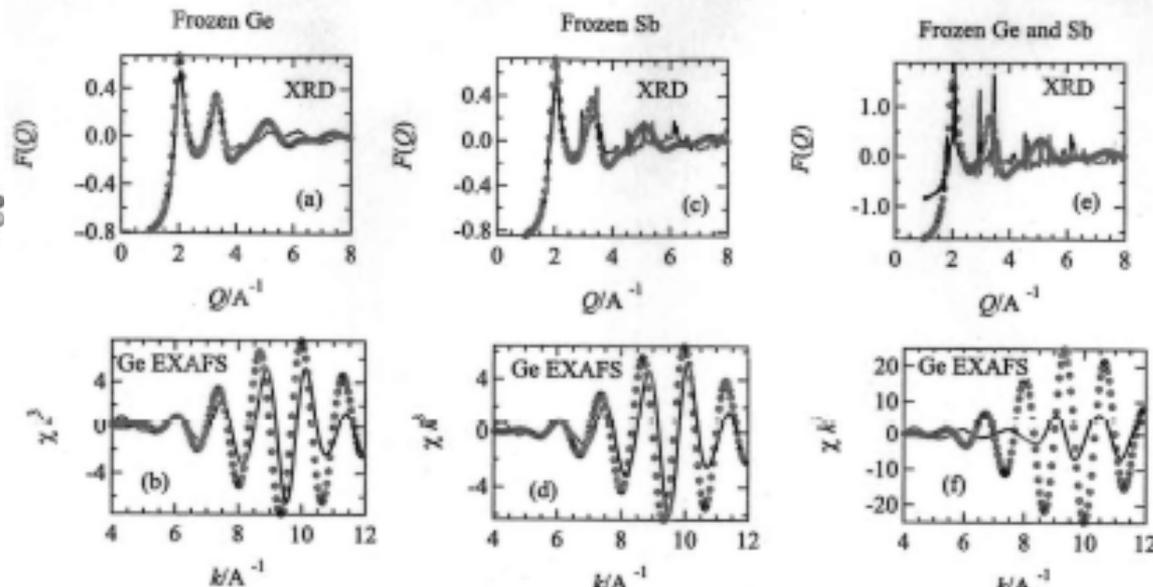


Figure 5. The RMC results (XRD and Ge EXAFS) for sample no.7 with the addition of the conditions of *frozen Ge*, *frozen Sb* and *frozen Ge and Sb* for a-GST. The symbols represent experimental data and the lines are for the RMC model.

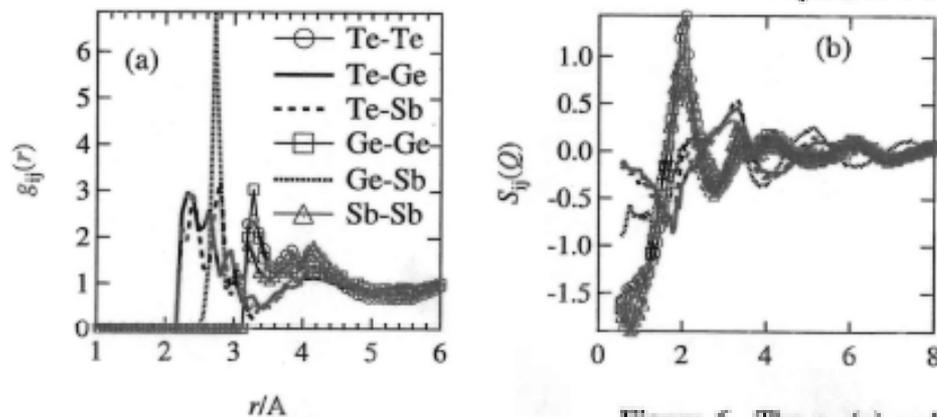


Figure 6. The $g_{ij}(r)$ and $S_{ij}(Q)$ obtained from the result for sample no. 7. The corresponding $F^M(Q)$ and $\chi^M(k)k^{-3}$ s are shown in figure 4.

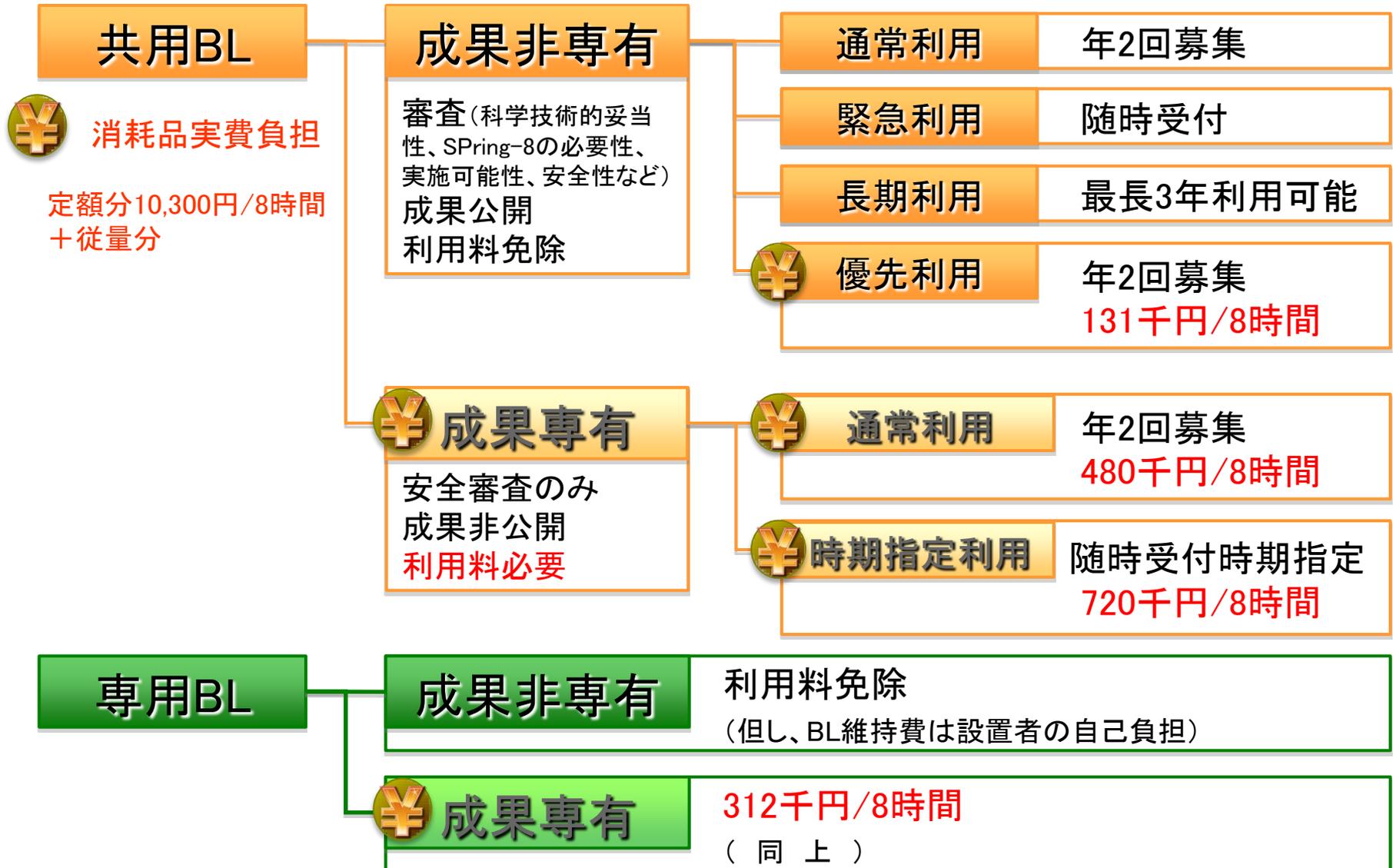
T. Arai, M. Sato and N. Umesaki: "Structural change of crystalline and amorphous $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ by reverse Monte Carlo analysis of x-ray diffraction data and extended x-ray absorption fine structure data" *J. Phys.: Condens. Matter* **19** (2007) 335213 (11pp).

SPring-8の産業利用とガラス・セラミックス材料への適用

(財) 高輝度光科学研究センター・産業利用推進室 梅咲 則正

- SPring-8の紹介
- SPring-8における産業利用の状況 ⇨ 産業利用事例集
- SPring-8放射光を用いたガラス・セラミックスの研究手法
 - XAFS分光法 ⇨ 第1回研究会
 - 高エネルギーX線を利用したXRD法 ⇨ 第2回研究会
 - シミュレーション技術を用いた構造モデルの最適化
- SPring-8を使うための利用制度

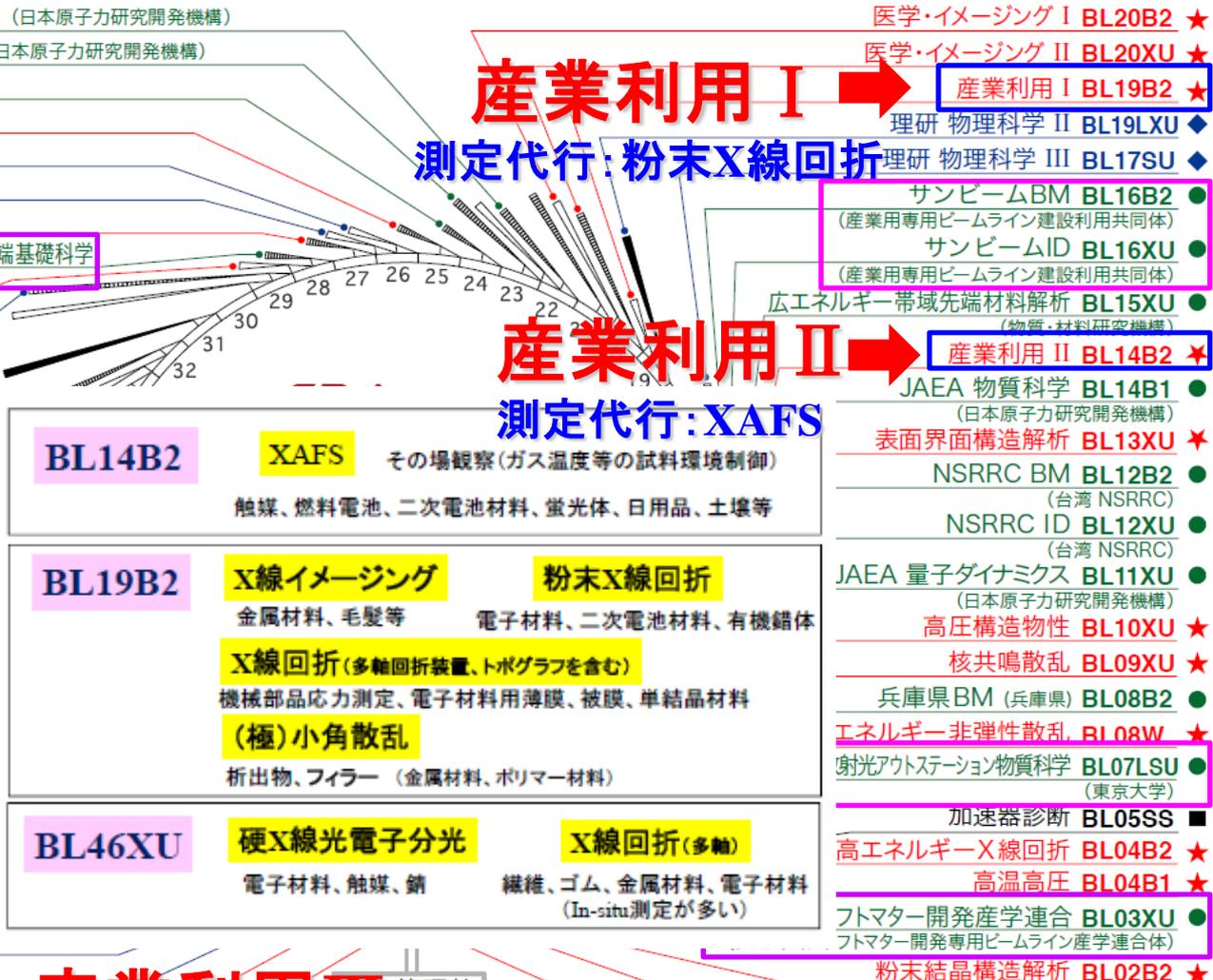
共用BL及び専用BLの利用制度(概要)



SPring-8 ビームラインマップ

2010.5.17 現在

- BL22XU JAEA 量子構造物性 (日本原子力研究開発機構)
- BL23SU JAEA 重元素科学 (日本原子力研究開発機構)
- BL24XU 兵庫県ID (兵庫県)
- ★ BL25SU 軟X線固体分光
- ◆ BL26B1 理研 構造ゲノム I
- ◆ BL26B2 理研 構造ゲノム II
- ★ BL27SU 軟X線光化学
- BL28XU 京都大学革新型蓄電池先端基礎科学 (京都大学)
- ★ BL28B2 白色X線回折
- ◆ BL29XU 理研 物理科学 I
- ◆ BL32XU 理研 ターゲットタンク
- BL32B2 創薬産業 (蛋白質構造解析コンソーシアム)
- BL33XU 豊田 (豊田中央研究所)
- BL33LEP レーザー電子光 (大阪大学核物理研究センター)
- ★ BL35XU 高分解能非弾性散
- ★ BL37XU 分光分析
- ★ BL38B1 構造生物学 III
- BL38B2 加速器診断
- ★ BL39XU 磁性材料
- ★ BL40XU 高フラックス
- ★ BL40B2 構造生物学 II
- ★ BL41XU 構造生物学 I
- ★ BL43IR 赤外物性
- ◇ BL43LXU 理研 量子ナノダイ
- BL44XU 生体超分子複合体 (大阪大学蛋白質研究所)
- ◆ BL44B2 理研 物質科学
- ◆ BL45XU 理研 構造生物学 I
- ★ BL46XU 産業利用 III
- ★ BL47XU 光電子分光・マイクロCT

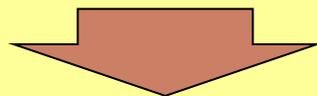


区分	B L 数				合計
	共用	専用	理研	加速器診断	
稼動中	26	17	8	2	53
調整・建設中	0	1	1	0	2
合計	26	18	9	2	55

利用制度の具体化

◆ 産業利用に向けた**制度**の構築

⇒ 適時, 計画性, 継続性, 即時性を満たす **柔軟な利用形態**へ



◆ 具体的内容 ← **「重点産業利用課題」**

➤ **年4回公募** … 2007B期から運用開始 (07年9月 第2期募集, 12月BT配分)

⇒ 3本の産業利用ビームラインに適用

➤ **通年課題** … 2007B期の第2期公募から

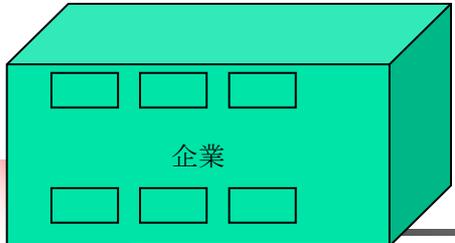
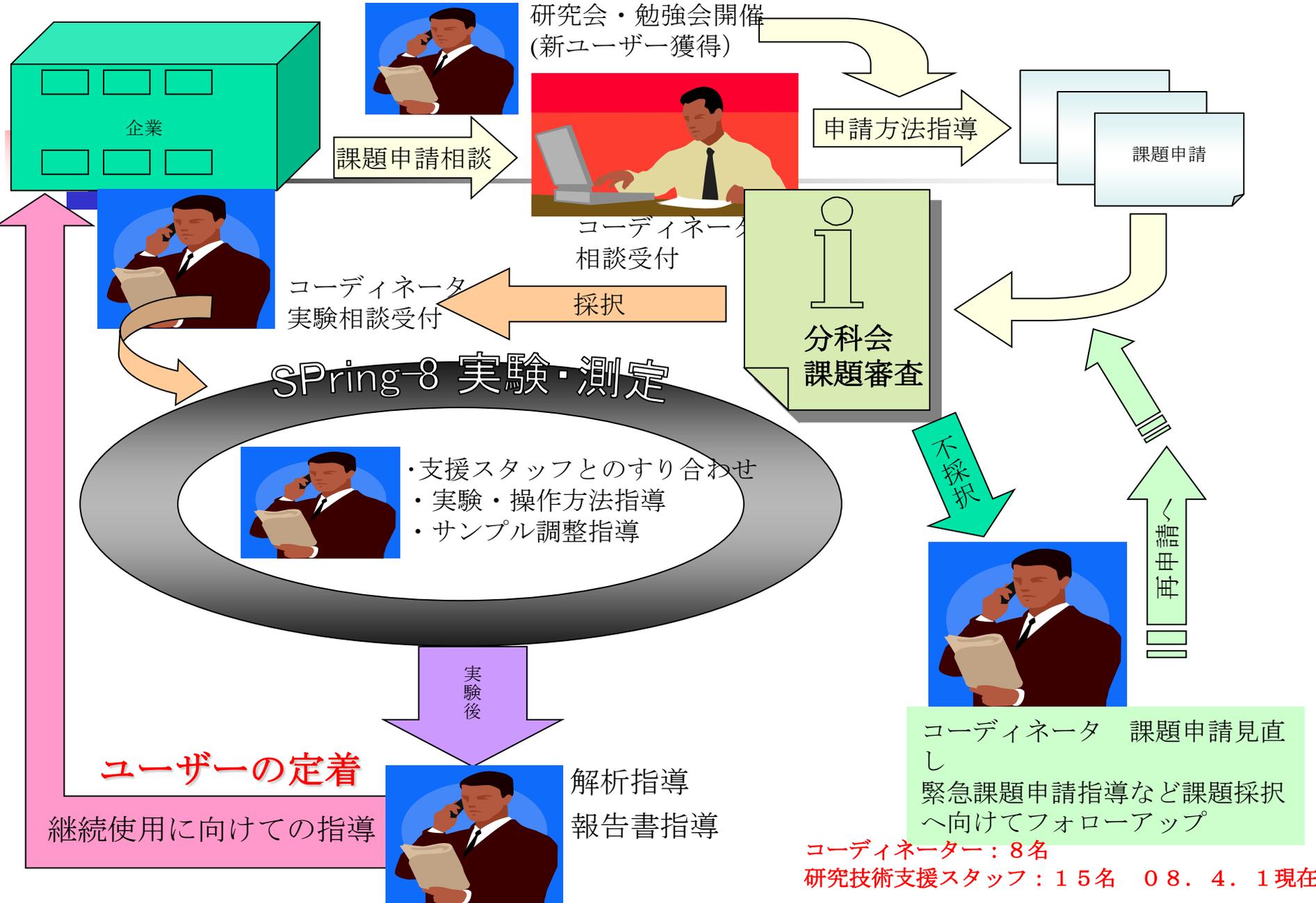
➤ **成果公開延期** … 最大2年間の報告書公開を延期

⇒ 延期終了時点での報告で明確化

➤ **測定代行** … 2007B期の第2期公募時期に合わせて開始

⇒ 手法: **XAFS (産業利用 II ビームライン BL14B2)** 本格実施中

粉末X線回折 (産業利用 I ビームライン BL19B2) 本格実施中



研究会・勉強会開催
(新ユーザー獲得)

課題申請相談



申請方法指導



コーディネーター
実験相談受付

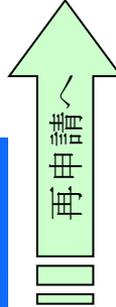
採択



Spring-8 実験・測定



- ・支援スタッフとのすり合わせ
- ・実験・操作方法指導
- ・サンプル調整指導



コーディネーター 課題申請見直し
緊急課題申請指導など課題採択
へ向けてフォローアップ

実験後

ユーザーの定着

継続使用に向けての指導



解析指導
報告書指導

コーディネーター：8名
研究技術支援スタッフ：15名 08. 4. 1現在



ご清聴ありがとうございます。

質問や相談がございましたら、気軽にお聞きください。