

原子対（部分）動径分布法による 非晶質物質の構造解析

無機材質研究所 貫井 昭彦

Structural analysis of non-crystalline materials by atomic pair (partial) radial distribution function

Akihiko Nukui

National Institute for Research in Inorganic Materials

1. はじめに

ガラス・アモルファスなどの非晶質物質（非晶体）は結晶と違い長周期性がなく、全体の構造を一義的に構築するのは困難である。その様な原子配置とともに化学結合の多様性のため種々の物理的・化学的性質が結晶のように定まらずある幅を持って存在している場合が多い。言い替えれば非晶質物質にとって、それだけ正確な短・中距離秩序内での構造の解明が要求され、同時に組成や物性との関連においても正確な構造を知る必要がある。ここでは非晶質物質の局所構造を従来の解析法に比べ、より高度で、より正確に解析し得る可能性がある異常散乱を考慮した原子対（部分）動径分布法について示す。

2. 原子対（部分）動径分布解析

非晶質物質の構造を調べる X 線手法として、これまでの特性 X 線を使った単一波長での、いわゆる動径分布解析が一般的であった。これは無秩序系における中距離範囲（例えば第二、第三隣接原子間程度の原子配置）の情報を含んでいるが、反面多成分系に適用した場合、結果として構成原子種の各々のペア相関が混然一体となった情報であり、解釈に曖昧さが残る。一方超強力連続 X 線源である軌道放射光が出現し、非晶質物質に対する新たな構造解析手段が可能となった。それは構成原子種の吸収端近傍での異常を考慮したもので二つの異なった方法がある。一つは吸収端近傍の

吸収スペクトルの微細変化を観察する、いわゆる EXAFS 法であり、他は吸収端波長の共鳴に基づく異常散乱を考慮した原子対（部分）動径分布解析法である。前者は従来の動径分布に対し、多成分系においても吸収中心となる構成原子種毎の周囲の局所構造が得られるが、主に最近原子間の情報に限られている。後者、即ち異常散乱を考慮した原子対動径分布解析は構成原子種の“ペア”毎の構造情報に分離することが可能であり、しかも散乱に基づく手法であり、最近傍より更に広範囲な局所構造を議論できる。従ってこの手法により多成分系の非晶体の構造に関し、より詳細でしかも広範囲な局所構造の正確な解明が期待できる。尚、この手法の解説が早稲田^{1a)}や Bienenstock^{1b)}により成されており、その中で EXAFS 法との比較が記載されており参照されたい。

3. 解析の基礎

実験から得られる動径分布における構成原子の原子間距離の重なりは異常散乱を考慮すると以下の Krogh-Moe²⁾の強度式に基づいて原理的に分離が可能となる。

$$I(s, \lambda) = \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^J C_{jk} [f_j^0(s) + f_j'(\lambda)] * [f_k^0(s) + f_k'(\lambda)] X_{jk}(s) \quad (1)$$

ここで f^0 は原子散乱因子、 f' ；異常散乱項、 X_{jk} ；部分干渉関数、 C_{jk} ；構成原子比である。また $s =$

$4\pi \sin \theta/\lambda$ である。

異常分散は原子内電子の固有振動数に近い振動数を持つ X 線が入射すると電子との間で生ずる共鳴効果であり、その効果は以下の様に表現される。

$$f(s, \lambda) = f^0(s) + \Delta f'(\lambda) + \Delta f''(\lambda)$$

$\Delta f''$ の項の寄与は小さく無視できるものとしているが、ここでは $f' = \Delta f' + \Delta f''$ として取り扱っている。

(1) 式を AB 二元系ガラスについて具体的に展開する。構成原子の吸収端より離れた波長での測定では通常異常分散項を無視して取り扱え、以下の式が得られる。尚、式が煩雑となるので散乱ベクトル、 (s) 及び波長或はエネルギー、 (λ) 依存を示す表現部分は省略してある。

$$I_0 = C_A^2 (f_A^0)^2 X_{AA} + C_B^2 (f_B^0)^2 X_{BB} + 2C_A C_B \{(f_A^0)(f_B^0)\} X_{AB} \quad (2)$$

構成原子種の吸収端近傍での波長で測定した場合、異常分散項が加わることになり以下のように展開できる。

$$I_{abs} = C_A^2 (f_A^0 + f_A')^2 X_{AA} + C_B^2 (f_B^0 + f_B')^2 X_{BB} + 2C_A C_B \{(f_A^0 + f_A')(f_B^0 + f_B')\} X_{AB} \quad (3)$$

また全干渉関数、 $i(s)$ は以下のように表される。

$$i(s)_T = I_{abs} / \{\bar{I}(s)\}^2$$

ここで $\bar{I}(s) = C_A f_A(s) + C_B f_B(s)$ である。この全干渉関数、 $i(s)_T$ を (4) 式に従ってフーリエ変換すると通常の動径分布関数が得られ、また以下に述べる部分干渉関数 $X_{jk}(s)$ からは原子対動径分布、差干渉関数 $\Delta i_{j(k)}(s)$ からは部分動径分布関数が得られる。

$$G(r)_{T/jk/j(k)} = 4\pi r^2 [\rho(r) - \rho_0]_{T/jk/j(k)} \\ = \frac{2}{\pi} \int_{s_{min}}^{s_{max}} s \cdot Y(s) \cdot \sin(sr) ds \quad (4)$$

ここで $Y(s)$ は $i(s)_T$, $X_{jk}(s)$, $\Delta i_{j(k)}(s)$ が適用出来る。式中の ρ_0 はガラスの平均原子密度である。

(3) の強度式から実験条件に応じて二つの解析方法がある。一つは部分動径分布関数であり、他は原子対動径分布関数である。

3.1 部分動径分布解析

A 原子の吸収端波長で測定した場合、(3) 式において A 原子に関する異常分散項、 f_A' が残り、B

原子に係わる異常分散項、 f_B' は無視できる。A 原子の吸収端波長での強度式を書き改めると以下の式となる。

$$I_{abs} = I_0 + C_A^2 [2f_A^0 * f_A' + f_A'^2] X_{AA} + 2C_A C_B [2f_A^0 * f_B'] X_{AB} \quad (5)$$

(5) 式から判るように A 原子の吸収端波長での測定強度は吸収端から離れた波長、言い替えれば異常散乱項が無視できる強度と新たに吸収端波長との共鳴により出現した異常散乱効果が足し合わされた形になる。この強度は (5) 式より何等かの方法により、 I_0 の項を分離すれば A 原子の周りの局所構造が記載できる。すなわち構成原子種の各々の吸収端波長で測定した強度と両者の吸収端から離れた波長で測定した強度との各々の差強度により以下の (6) 式で表される ΔI_A (ΔI_B) が得られ、しかも (6) 式から判るように部分干渉関数 X_{BB} (或は X_{AA}) の寄与が分離している。

$$\Delta I_A = C_A^2 [2f_A^0 * f_A' + f_A'^2] X_{AA} + 2C_A C_B [2f_A^0 * f_B'] X_{BA} \quad (6)$$

$$\Delta I_B = C_B^2 [2f_B^0 * f_B' + f_B'^2] X_{BB} + 2C_A C_B [2f_B^0 * f_A'] X_{AB}$$

この場合の差干渉関数はまだ検討を要するところであるが以下のように定義されたとする。

$$\Delta i_{A(B)abs} = \Delta I_{A(B)} / 2C_{A(B)} f_{A(B)} f_{AB}$$

ここでは f_{AB} に対しては Westwood ら³⁾ の近似を用いている。この差干渉関数を (4) 式に従いフーリエ変換すると A または B 原子の周りの局所構造情報が得られる。

3.2 原子対動径分布解析

二成分系の場合構成原子種の吸収端波長を含む三つ以上の異なった波長で各々測定すると、(3) 式に基づき三つの異なった強度式が得られる。従って原理的には X_{jk} を未知数とする 3 元連立 1 次方程式を解くことにより各々の部分干渉関数 X_{jk} が求まる。また

$$sX_{jk}(s) = \int_0^\infty G_{jk}(r) \sin(sr) / r dr$$

の関係から (4) に従いフーリエ変換すると各々の原子対の動径分布； $G(r)_{AA}$, $G(r)_{AB}$, $G(r)_{BB}$ が得られることになる。一般に J 成分系のガラスにおいて (J+1)/2 個の異なった波長で測定すると原子対動径分布が得られる。しかし各々の吸収端波

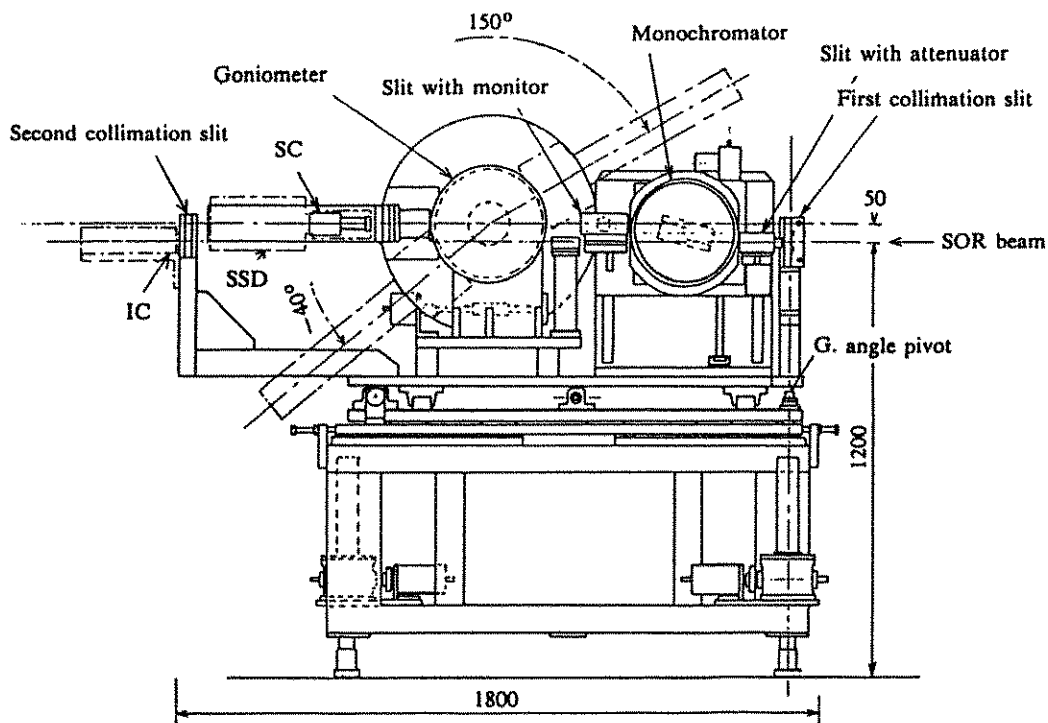


Fig. 1 Side view of the new powder diffractometer for the Photon Factory.

長で測定した強度と各々の吸収端から離れた波長で測定した強度との強度差は最大 20% 以下 (K 吸収端波長を使用の場合) であり、特に原子対動径分布関数を求めるには SN 比の良い実験データが必要である。

4. 非晶質物質の解析例

初期においては波長の違いを X 線、電子線、中性子線や同位体を用いて測定が行われていた。しかし測定環境の違いが大きく異常散乱の効果が定かでなかった。限定した適用であるが早稲田⁹⁾は NiP 合金に対し、同一の測定環境、即ち Cu や Ni などの X 線管球を用いた実験により異常分散効果の有効性を示した。現在では既に述べたように放射光の発展もあり、非晶質の構造解析ばかりでなく異常散乱を利用した解析が主要な課題となっている。以下いくつかの解析例を紹介し、原子対(部分)動径分布解析における特徴や有用性を簡単に示す。詳しくは個々の論文を参照されたい。

4.1 装置の概要

装置の詳細は省略するが、Fig. 1 に高エネルギー物理学研究所軌道放射光施設に設置した粉末 X 線回折計⁹⁾の概要を示す。本質的には実験室系の粉末 X 線回折計と同じ機構であるが、放射光の特殊性に対応して、例えば放射光の変動に対する定位置確保のビーム追随装置や任意の波長選択に係わる再現性の良い光学系が考えられている。

4.2 強度測定及び異常分散効果

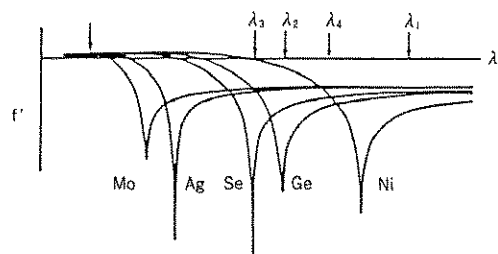


Fig. 2 Anomalous dispersion term, f' at absorption edges of several atoms.

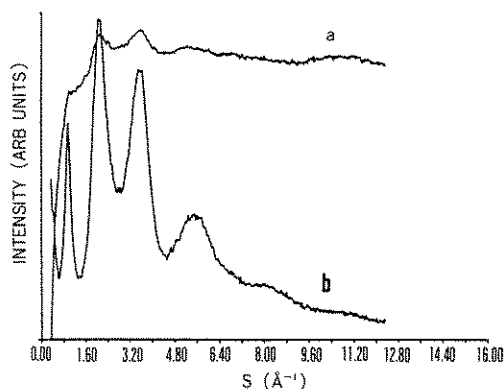


Fig. 3 Measurements of the X-ray diffraction intensities of $\text{Ge}_{30}\text{As}_{30}\text{Se}_{40}$ glass by Sinteration Counter (a) and Solid State Detector (b).

Fig. 2 にいくつかの原子の f' の波長依存性の様子を示す。部分動径分布解析に際しては、異常分散効果を最大限に発揮させるため、各々の構成原子種の吸収端波長で、もう一つはそれらから離れた、異常分散が無視出来る波長での測定が主要である。例えば GeSe 系の場合は $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ が使われる。原子対動径分布解析では、さらに異なった

波長が必要であり、構成原子種に応じた確かな波長選択が必要である。

得られた強度の解析において正確な異常分散項が必要である。測定対象の特有な物質状態を考慮すると実験的に求めた異常分散値の使用が良いが、一定の精度内で理論により計算された値、例えば Sasaki⁹⁾ の表や Kramers-Kronig 関係式からの計算値を用いる場合もある。 f' の値の小数点以下のゆらぎに対し配位数の変動は $\pm 5\%$ 以内である。

4.3 蛍光 X 線の除去

測定には構成原子種の吸収端波長を使用するため蛍光 X 線が生ずる。しかも測定対象が非晶質物質のため全体的に散乱強度が弱く、目的の散乱強度を抽出するためには蛍光 X 線の正確な除去並びに Compton 散乱も取り除く必要がある。そのためにいくつかの方法、スリットの選択や、その他、例えばアナライザー（検出器の前にグラファイト分光結晶を設置した分光系）や半導体検出器 (SSD) の使用する。ここでは通常のシンチレーション検出器 (SC) と SSD の使用例を示す。Fig. 3

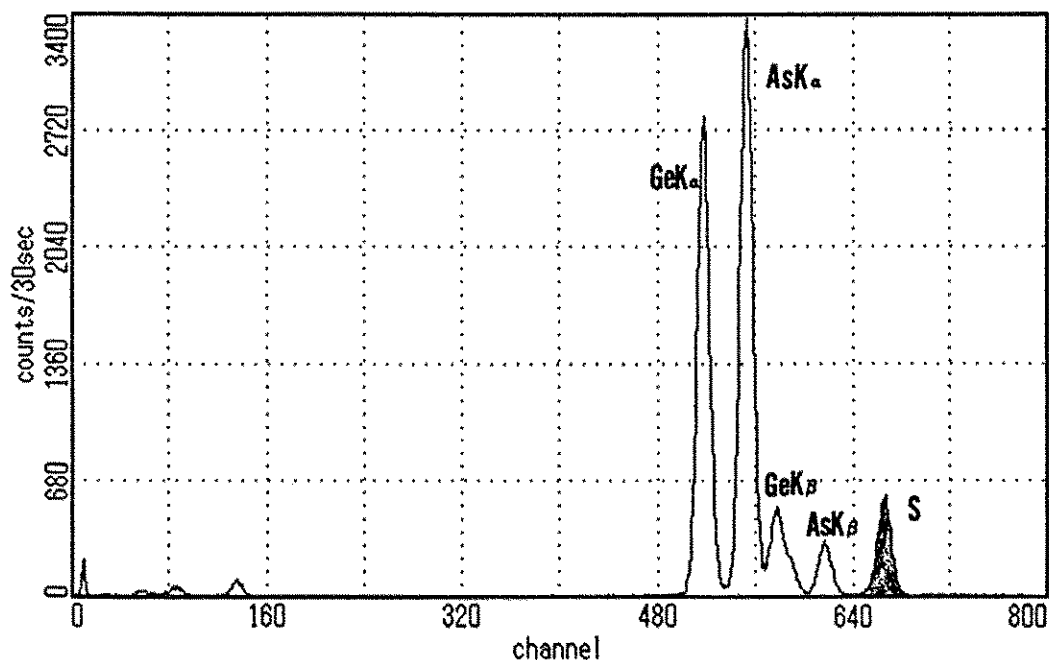


Fig. 4 Energy resolution of the X-ray diffraction intensity of $\text{Ge}_{30}\text{As}_{30}\text{Se}_{40}$ glass by SSD. S indicates the real intensity of the glass.

に GeAsSe 系ガラスについて Se 吸収端波長による散乱 X 線を両者の検出器で強度収集したスペクトルを示す。SC で測定した場合、SN 比は極めて悪い。Fig. 4 に SSD による散乱 X 線のエネルギー分解の様子を示す。SC の測定強度はほとんど蛍光 X 線であることが判る。ガラスの散乱強度、S だけを取り出したのが Fig. 3b であり、SN 比は極めて高くなっている。アナライザー使用の場合も一定の精度内で蛍光 X 線の除去が可能である。

4.4 二成分系の部分動径分布解析例

a) GeSe 系ガラス⁷⁾

Fig. 5 に $\text{Ge}_{25}\text{Se}_{75}$ ガラスについて三つの異なった X 線波長で測定した散乱強度分布を示す。三つの異なった波長で測定した散乱強度を観察すると

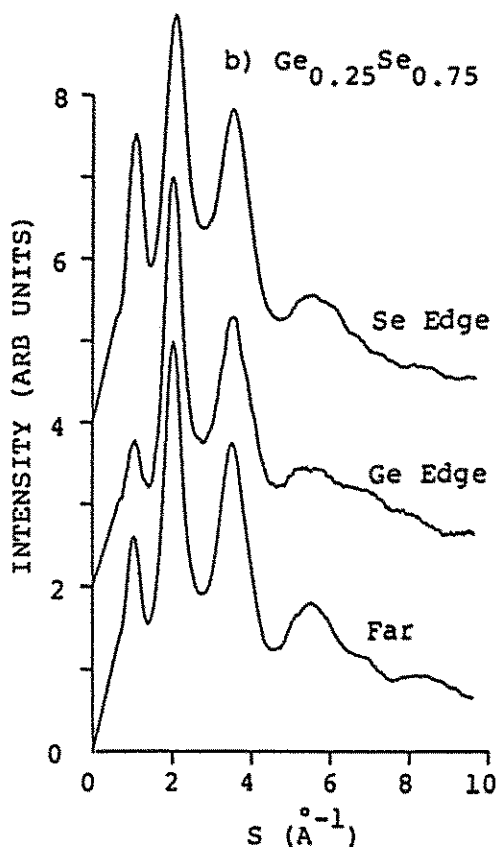


Fig. 5 The X-ray diffraction intensities of $\text{Ge}_{25}\text{Se}_{75}$ glass taken at the three different wavelengths; 1.1917 (Far), 1.1170 (Ge Edge) and 0.9807 Å (Se Edge).

互いに似かよって見えるが詳細に見るとハローの高さ及びプロファイルに差異がある。三者の差に異常分散効果が寄与していることになる。

Fig. 6 に Ge, Se 各々の局所構造を表す部分動径分布曲線を示す。部分動径分布解析の結果を論議する前、前段階として通常の動径分布で比較を試みる。Table 1 に $\text{Ge}_{25}\text{Se}_{75}$ ガラスについて Malaurent の結果 (MoK α 単一波長使用)⁸⁾ と $\lambda_1 = 1.1917$ Å の単一波長から得られた動径分布結果並びに部分動径分布解析の結果を示す。Table 1 から判るように両者のガラスの平均構造は殆ど一致している事が判る。ここでは更に進んだ本質的な結果が部分動径分布解析により得られている。

GeSe 系の非晶質の構造に関し幾つかの単一波長での動径分布解析があるが、構成原子種の原子対相関の分離が難しいこともあり二つの違った構造モデル (3-3 配位と 4-2 配位モデル) が各々の Ge/Se 比に応じ提唱された⁹⁾。それらに対し、部分動径分布関数から $\text{Ge}_{25}\text{Se}_{75}$ ガラスにおいて Ge の周りに 3.8 個、Se の周りに 2.2 個の原子が存在することが導き出されている。一連の $\text{Ge}_x\text{Se}_{100-x}$ ($0 \leq x \leq 40$) ガラスの部分動径分布解析から、通常の

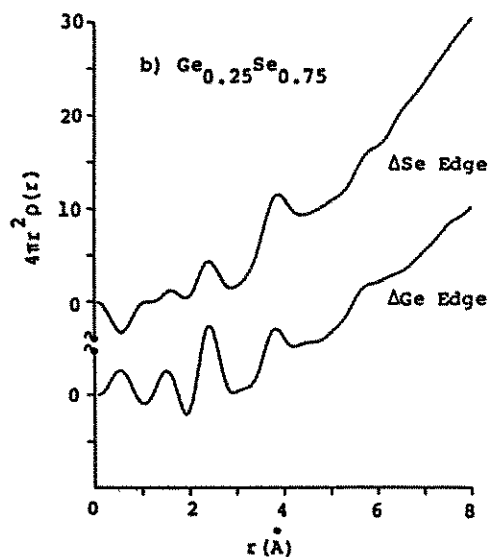


Fig. 6 Partial radial distribution functions of $\text{Ge}_{25}\text{Se}_{75}$ glass. The upper curve includes the local arrangement around Se atoms, while the lower curve, those around Ge atoms.

Table 1 Comparison of distances and coordination numbers of $\text{Ge}_{25}\text{Se}_{75}$ glass by the partial distribution Function with those obtained by sinble wavelength (1. 1917Å) measurement and with those of ordinary RDF by Malaurent.

	Atomic Distances		Coordination Numbers
	1 st Peak	2 nd Peak	
RDF_{far}	2.36 Å* (2.36)	3.74 Å* (3.77)	2.4* (2.35)
RDF_{Se}	2.36	3.75	2.1
SDF_{Ge}	2.36	3.71	3.9

*Average Values and () ; Malaurent et al.

ガラス化範囲にある Se リッチな組成の GeSe ガラスは基本的には Ge は 4 配位で, Se は 2 配位であり, いわゆる 4-2 配位構造モデルを実験結果として結論づけられる. また Fuoss ら¹⁰⁾ は非晶質薄膜状の $\text{Ge}_{50}\text{Se}_{50}$ とガラス状 GeSe の二つの試料について部分動径分布解析で検討した結果, 前者は 3-3 配位, 後者は基本的には 4-2 配位である事を報告している.

b) 非晶質 Ni_2Zr ¹¹⁾

Fig. 7 に Ni と Zr のまわりの局所構造を表す部分動径分布曲線を示す. Zr の部分動径分布曲線において最初のピークが 2.75 と 3.34 Å にスプリットしているが, これは Zr-Ni, Zr-Zr の原子対が各々寄与している. それらの対応するピークより, Zr の周りには 9.7 個の Ni が, また Zr の周りに 6 個の Zr が配位している. この結果は, 従来の平均配位数に対し, 個々の原子の配位数が導き出されるものである. Ni の部分動径分布曲線からは, Ni-Ni の寄与を直接抽出できないが, Zr の部分動径分布による結果と併せて, Ni-Ni 距離が 2.56 Å であり, 5.9 個の原子対が第一ピークに寄与していることが推測できる. この報告の中で Ni-Ni, Ni-Zr 及び Zr-Zr の原子動径分布曲線が与えられている. 配位数などの構造情報が記載されていないが, 各々の原子対動径分布の精度が述べられており, Ni-Ni, Ni-Zr 原子対に対しては $\pm 5\%$ であり, Zr-Zr に対しては $\pm 10\%$ としている.

c) GeO_2 ガラス¹²⁾

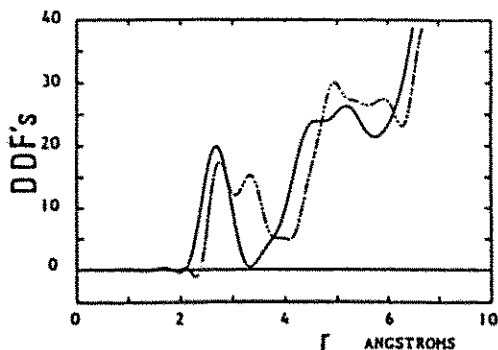


Fig. 7 Partial radial distribution functions of amorphous Ni_2Zr . The solid curve includes the local arrangement around Ni atoms, while the broken curve, those around Zr atoms. (Larindjani et al.¹¹⁾, 1987)

Fig. 8 に GeO_2 ガラスに対する通常の動径分布曲線と部分動径分布曲線を示す. Table 2 にそれらの結果を示す. 部分動径分布曲線において特徴的なのは O-O の原子対の寄与によるピークが観測されないことである. これは (6) 式において明かなように X_{00} の寄与が分離していることに依るものである. また部分動径分布曲線における Ge-O 原子対の寄与による第一ピークから Ge の配位数は 4.09 と求められ, Table 2 から判るように他の測定結果ともよく一致している. 原子間距離においても同様である. さらに Ge-O-Ge 結合角との結果から, GeO_4 四面体の充填様式は α 石英型の結晶相と非常によく似ているとしている. しかも部分動径分布解析における結果は定量的な取扱いを可能にしているとも示唆している.

4.5 二成分系の原子対動径分布解析例

a) GeSe 系ガラス¹³⁾

Fig. 9 に見られる 2.38 Å のピークは, Ge-Ge 原子対のみからなり, 3.80 Å のピークは Ge-Ge 原子対及び Se-Se 原子対からなる. 言い替えれば $\text{Ge}_{25}\text{Se}_{75}$ ガラスは最近接原子対が異なる原子であることを意味している. 4-2 配位をとるための理想的な化学組成は $\text{Ge}_{33}\text{Se}_{67}$ 組成であり, $\text{Ge}_{25}\text{Se}_{75}$ ガラスは構造中に必ず Se 同士が隣接している箇所がなければならないが, この原子対は 2 配位の Se の結合に関与していない孤立原子対同士の反発によって最近接原子対になれないと指摘してい

Table 2 Comparison of distances r_{ij} in nm and coordination numbers N_{ij} of GeO_2 glass in the present work; Matubara et al. with those determined with neutrons, with X-ray and neutrons, and with EXAFS. (Matubara et al.^[12], 1988).

	Ge-O		O-O		Ge-Ge	
	r_{ij}	N_{ij}	r_{ij}	N_{ij}	r_{ij}	N_{ij}
Present Work	0.173	3.95	0.275	6.4	0.316	4.4
MoK α						
Present Work	0.175	4.09			0.320	4.33
AXS _{Ge}		(0.42)				(0.20)
Neutrons [1]	0.172	3.8	0.285	—	0.345	—
CuK α +AgK α	0.16	—	0.28	—	0.31	—
+Neutrons [3]						
EXAFS _{Ge} [20]	0.174	4			0.315	—

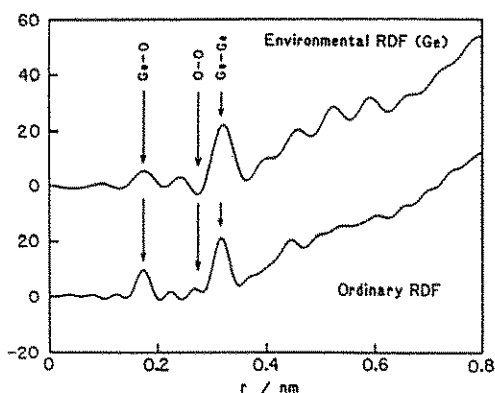


Fig. 8 Partial radial distribution function (RDF) and ordinary RDF of Ge_2O glass. The upper curve includes the local arrangement around Ge atoms. (Matsubara et al.^[12], 1988)

る。この議論は各々の原子対に分離した動径分布関数により直接なされ得るものである。

b) 非晶質 $\text{Cu}_5\text{Y}^{[14]}$

Fig. 10 に Cu-Cu, Cu-Y に関する原子対動径分布, G_{CuCu} と G_{CuY} を示す。また Table 3 に理論と実験から得られた配位数の結果を示す。これまで求められなかった個々の構成原子の周りの配位数が求まっている。また Cu-Y 原子対動径分布関数から Cu-Y 距離は 3.0 Å, 一方 Cu-Cu 動径分布から Cu-Cu の距離は 2.50 Å と求められた。これらの結果は通常の原子半径 (Cu ; 1.28 Å, Y ; 1.78 Å) より小さい値であるが、結晶質の Cu_5Y と似た原

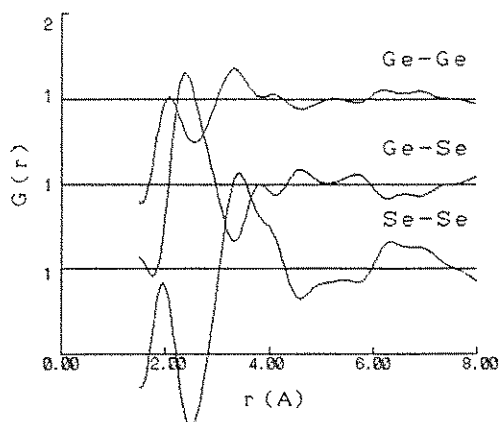


Fig. 9 Atomic pair radial distribution functions consisted of each pair: Ge-Ge, Ge-Se and Se-Se of $\text{Ge}_{25}\text{Se}_{75}$ glass. (清水川^[13], 1989)

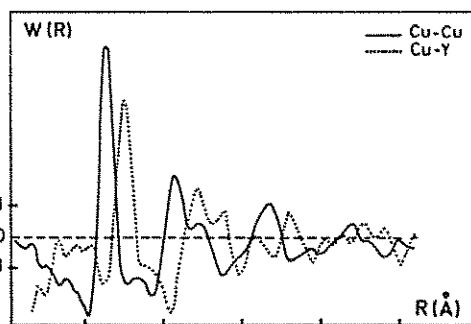


Fig. 10 Atomic pair radial distribution functions consisted of each pair: Cu-Cu and Cu-Y of amorphous Cu_5Y . (Tonnerre et al.^[14], 1989)

子間距離である。また原子間距離に関連して、非晶質 Cu_5Y において二つの Cu サイト、即ち二つの Cu-Cu 距離があると推測している。そればかりでなく複雑な結晶相との比較が重要であり、原子対動径分布解析より得られる Cu や Y の周りの配位数のより正確な情報から結晶構造中多くの種類を持つ多面体配位に関する詳細な対比も可能であると指摘している。

5. 終わりに

これまで異常分散効果を加味した非晶質物質の

Table 3 The theoretical and experimental coordination number in Cu_5Y alloys
(Tonnerre et al.¹⁴⁾, 1989)

	Atom taken as origin	Number of Cu atoms around it	Number of Y atoms around it	Total (Z)	Mean coordination number ($\bar{Z}$)
Amorphous Cu_5Y	Cu	7.4+3=10.4	2.8	13.2 (± 0.5)	13.75
	Y	14.39	2 ^{a)}	16.5 (± 0.5)	
Crystalline Cu_5Y	Cu	8 or 9 (8.33)	4 or 3 (3.66)	12	13.33
	Y	18	2	20	

^{a)} Hypothetical, as in the crystal

新しい構造解析の基礎と実例を概説してきた。いわゆる原子対（部分）動径分布解析の基本的概念は随分古い時期から提唱されていた。現実の解析法になったのは各々の構成原子の吸収端波長を適宜選択できる放射光の出現に依るものである。実例で記載された内容のほとんどは通常の動径分布法解析—構造の平均的描写—では得られない、特定原子の周りの局所構造或は原子対単位の構造情報であり、詳細で正確な構造解明の可能性を示している。

原理的にはほとんど全ての吸収端波長の使用が可能であるが、実際には構成原子種の一方の成分の吸収端での測定が無理な場合が生じる。例えば a) 構成原子種の吸収端波長が長波長（約 1.5 Å 以上）のとき、散乱ベクトル, s が 8 Å^{-1} 以下になり、フーリエ変換の際いわゆる打ち切り効果が顕著になる。b) 上記以上の長波長ではさらに光学系のパスを全て真空にしないと吸収が大きく、散乱強度が極めて弱くなってしまふ。c) 一つの分光結晶でカバー出来る波長範囲に限界がある等、実際上問題はあふ。それらの問題に対し二成分系非晶質合金の場合、測定した部分干渉関数から、測定出来ない片方の部分干渉関数を推測することが可能であることを早稲田¹⁴⁾ が指摘しており、さらに進んで酸化物系や多成分系などへの適用が期待される。一方現在の使用できる放射光は約 0.5 Å 以下で強度が急激に落ちる。そのため 0.5 Å 以下に吸

収端を持つ物質は測定が難しいが、その場合適当な L 吸収端波長があれば解析は可能である。

紙面の都合で三成分系の取扱いは割愛してあふ。三成分系の原子対（部分）動径分布解析も基本的には二成分系での取扱いと同じである。三成分系のガラスの部分動径分布解析はまだ例が少なく、GeAsSe 系ガラス¹⁵⁾、非晶質 $\text{NiMoS}^{14)}$ や $\text{Al}_{60}\text{Ge}_{30}\text{Ni}^{16)}$ などで、酸化物系では $\text{Y}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2^{17)}$ が報告されている。

将来は多成分系の非晶質物質や液体などを含む無秩序系の構造解明に対するこの手法の適用が期待されるが、上記の実際的な適用限界を考慮した上でもこれまで限定された非晶質物質の構造解析法に対し新たな有効な手法となり得るものである。

最後にこの解説の基礎となった研究の遂行にあたり、お世話になりました故森川日出貴氏、宇野良精氏を始めとする共同研究者の皆様と大隅一政氏を始めとする高工研のスタッフの皆様深く感謝を申し上げます。

参考文献

- 1 a) 早稲田嘉夫, 固体物理, **19**, 1 (1984);
- 1 b) A. Bienenstock, The Structure of Non-Crystalline Materials, ed. P. H. Gaskell pp. 5 (Taylor & Francis, London, 1977).

- 2) J. Krogh-moe, Acta Chem. Scand. **20**, 2890 (1966).
- 3) J. D. Westwood, P. Georgopoulos and D. H. Whitmore, J. Non-Cryst. Solids, **107**, 88 (1979).
- 4) Y. Waseda and S. Tamaki, Z. Phys. **B23**, 315 (1976).
- 5) H. Ozawa et al., Rev. Sci. Instrum. **60**(7) 2382 (1989).
- 6) S. Sasaki, KEK Reports, KEK 83-22, 1 (1984).
- 7) A. Nukui et al., J. Non-Cryst. Solids, **95 & 96**, 433 (1987).
- 8) J. C. Malaurent and J. Dixmiere, J. Non-Cryst Solids, **35 & 36**, 1277 (1980).
- 9) A. Bienenstock, J. Non-Cryst. Solids, **11**, 447 (1977).
- 10) P. H. Fuss et al., Phy. Rev. Let., **46**, 1537 (1981).
- 11) M. Larindjani, J. F. Sadoc and D. Raoux, J. Non-Cryst. Solids, **91**, 217 (1987).
- 12) E. Matsubara et al., Z. Naturforschung Sect A Phys. Sci., **43**, 181 (1988).
- 13) 清水川豊, 博士論文 141 (東工大, 1989).
- 14) J. M. Tonnerre, J. C. Lima and D. Raoux, J. Chimie. Phys., **86**, 1509 (1989).
- 15) A. Nukui et al., Acta Cryst. **A43** Supplement C262 (1987).
- 16) E. Matsubara et al., J. Mater. Sci., **23**, 3485 (1988).
- 17) 貫井昭彦他, 日本結晶学会年会(横浜, 1988).

[筆者紹介]



貫井 昭彦 (ぬくい あきひこ)
 昭和48年 東工大大学院博士過程
 終了。
 同年 無機材質研究所入所,
 研究員, 主任研究官を
 経て
 平成2年 同所総合研究官 (第9
 研究グループ) 工学博
 士

[連絡先]

〒305 茨城県つくば市並木 1-1
 無機材質研究所 第9研究グループ
 TEL 0298-51-3351

Abstract

Synchrotron radiation has made possible the development of X-ray diffraction method employing anomalous scattering near each absorption edge of constituent atoms in order to derive atomic pair (partial) distribution functions for structural studies of non-crystalline materials. The fundamentals of this method is presented, and discussed its possibilities and limitations through introducing several structural studies of non-crystalline solids by applying this method.