

ランダム系フォトエレクトロニクス研究会企画 「非晶質スペクトロスコピーの最近の進展」

首都大 梶原浩一

非晶質は、研究会のタイトルである「ランダム系」を具現する典型的物質群である。非晶質は結晶と対比されることが多いが、分光学(スペクトロスコピー)の立場からみると、一般に次のような特徴がある。

(1)原子配列が不規則なためサイトごとに構造が少しずつ異なっており、この構造分布を反映して得られるスペクトルに広がりが生じてしまうこと

(2)巨視的に等方であるため、着目している原子・構造の間の距離が離れるにつれて、それらの相対方位に関する情報を得るのが格段に難しくなること(構造情報の一次元化)すなわち、非晶質のスペクトロスコピーでは、この欠落した情報をいかに補うかが鍵となる。一方で、スペクトロスコピーを支える光源、測定手法と装置、解析技術、さらにこれらすべての基盤である計算機の性能は着実に進歩しており、さらに極限環境・その場測定といった、「生」の状態にある物質・材料を測定する手法も活発に開発されている。

今回のシンポジウムでは、このような背景のもと、近年のスペクトロスコピー技術の進展によって、何がどこまでできるようになったのかについて議論した。最終日である 17 日の午前に開催されたにもかかわらず、天候にも恵まれ、最大時で約 80 名の参加があり、活発な討論が行われた。座長は前半 4 件を藤原巧(東北大)、後半 3 件を内野隆司(神戸大)が担当した。

前半は、梶原によるイントロダクトリートーク(企画の趣旨説明)の後、まず川北至信氏(原子力機構)から、非晶質の構造解析法の王道である回折法とその進展について講演があった。続いて鈴谷賢太郎氏(原子力機構)によって、近年供用が開始されつつある中性子施設 J-PARC の現状を踏まえ中性子線回折法を中心とした講演がなされた。両氏によって、回折法では全散乱の測定によって構造因子を正確に決定することが本質であり、このアプローチは非晶質の解析にとどまらず結晶に対しても有用であること、回折による光源のエネルギー変化を測定することで動的挙動が測定できること、逆モンテカルロ法による構造モデリングが欠かせない技術となっていること、などが分かりやすく解説された。杉山和正氏(東北大)の講演は、元素固有の X 線吸収端付近の波長で X 線が異常散乱することを利用した回折法に関するもので、測定したい元素の X 線吸収端波長近くの X 線を用いることで、その元素同士の相関を選択的に抽出できる手法であることが紹介された。中性子線回折法と類似の元素選択性があり、また XAFS のような X 線を用いる他の分光法とも併用しやすい点は魅力的である。

後半最初の藤野茂氏(九大)の講演は、従来約 200g の試料を用いて一日掛かりの測定が必要であった融液の密度、粘度、表面張力といった基本物性を、わずか数十 mg の試料量で、空調の効いた部屋で短時間に測定できる新開発の装置に関するものであり、測定技術の進

歩が印象的であった。石川健治氏(名大)からは、エッチング過程という、観察の難しい動的過程を電子スピン共鳴(ESR)を使って調べる手法について講演があった。フッ素系ガスを用いたシリコンデバイスのエッチングにおいて、なぜ絶縁膜である SiO_2 のみがエッチングされ、Si 表面でエッチングが止まるのかについて明快な説明がなされた。梶弘典氏(京大)は、多次元核磁気共鳴(NMR)を駆使した EL 用有機材料の構造解析について講演を行った。迅速な構造解析には向かないものの、選択的な同位体置換を併用することでわずかな構造の違いを正確に見分けることのできる手法であり、今後有用性が高まるものと期待される。

いずれの講演も講演時間が足りなくなるほどに充実した内容であり、内容の濃いシンポジウムとなったのではないかと思う。講演者の皆様方、また参加頂いた皆様方に、改めて御礼申し上げたい。