

先端量子ビーム 手法群による 超秩序構造計測

Hyperordered Structure Revealed by Advanced Quantum Beam Measurements

Key-words : Glass, Liquid, Amorphous material, Structure, X-ray diffraction, Neutron diffraction, Electron diffraction, Structural modelling

小原 真司・手跡 雄太

Shinji KOHARA^{*1} and Yuta SHUSEKI^{*2}

(^{*1}National Institute for Materials Science, ^{*2}Kyoto University)

1. はじめに

我々の学術変革研究の特徴は、結晶に比べて周期性に乏しいガラス、液体、アモルファスといった非晶質を対象としていることである。非晶質材料の構造解析にはさまざまな手法が適用されてきたが、我々が用いる手法は放射光 X 線、パルス中性子、電子線といった量子ビームを用いた回折・散乱実験である。X 線回折実験はおもに大型放射光施設 SPring-8、中性子回折実験は大強度陽子加速器施設 J-PARC と言った我が国が世界に誇る大型実験施設を利用している。また、実験データの解析には逆モンテカルロ (reverse Monte Carlo, RMC)^{1),2)}法を軸に、分子動力学 (molecular dynamics, MD) 計算や、第一原理計算も取り入れている。

我々の学術変革研究においては非晶質材料の構造計測の中でもとくに酸化物ガラスに注目している。酸化物ガラスの合成にはさまざまな方法があるが、典型的には、原料を加熱して融体にした後、急冷することによって作られる。しかし、どのような物質でも急冷によりガラスになる訳ではなく、結晶になる物質もある。このため、ガラスの合成は、多くが経験則や勘に頼って行われてきた。最近、本学術変革研究において、X 線回折、中性子回折を用いて従来の酸化物ガラス・融体からかけ離れたいくつかの超秩序構造を発見したので紹介する。

2. 非晶質物質の構造の記述法

非晶質物質の原子配列には結晶に見られるような並進対称性が存在せず、その不規則さゆえ非晶質物質の構造解析は結晶に比べると大きく立ち後れている。

古くから用いられてきた非晶質物質の構造を記述するのに適している関数である二体分布関数 (pair distribution function (PDF)) $g(r)$ は、あるひとつの原子が原点にあるときに、距離 r だけ離れたところにもうひとつの原子を見いだす確率を表す関数であり、規格化された解析パターンである構造因子 $S(Q)$ をフーリエ変換することにより得られる。詳細は文献 3)~5) を参照いただきたい。 $g(r)$ から得られる構造情報は原子間距離と平均配位数であり、これだけの構造情報から非晶質物質の 3 次元構造を構築することは不可能である。そのため、実験データに基づいた構造モデリング法として乱数を使って量子ビーム回折データを再現するように粒子を動かす逆モンテカルロ (Reverse Monte Carlo, RMC) 法が考案され、現在では MD 計算や第一原理計算との組み合わせも試みられ、実験データを再現する理論ベースのモデリングが可能となった^{6),7)}。そして 3 次元構造モデルに対してリングや空隙、パーシステントホモロジー⁸⁾ といったトポロジカル解析も盛んに行われてきた。

3. 学術変革研究での取り組み

我々の学術変革研究では、X 線の吸収端を利用した計測法である X 線異常散乱⁹⁾ と蛍光 X 線ホログラフィーを行うための複合装置の開発を行っている。蛍光 X 線ホログラフィーについては、本特集号の木村、林氏らの記事を参照いただきたい。X 線異常散乱実験では本学術変革領域の試料班が合成する試料を元素選択的に観測するため、注目原子の吸収端近傍の 2 つのエネルギーで実験を行い、そこから注目原子と他の原子との相関のみを精密にかつハイスループットで抽出することを目的としている。また、本学術変革領域では、多くの試料の X 線・中性回折・散乱・電子回折データを得ることができるため、さまざまな非晶質物質の回折ピークの系統的な理解^{10),11)} に取り組んでいる。

4. 永久高密度化シリカガラスに潜む超秩序構造

シリカ (SiO_2) ガラスは我々の生活に欠かせない大事なガラスであるが、シリカはガラス形成酸化物¹²⁾ に分類される。シリカガラス短範囲構造はクリストバライトや石英と同様に SiO_4 正四面体で、四面体の頂点に位置する酸素を頂点で共有することにより 3 次元ネットワークを形成している。結晶の場合は四面体は規則的に配列するが、ガラスの場合は規則的な配列を持たないことから回折パターンはブロードな、いわゆるハローパターンになり、比較的大きな空隙を持って

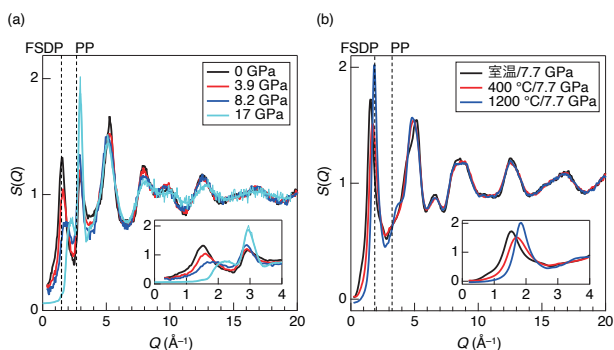


図1 SiO₂ ガラスの高圧その場中性子回折から得られた構造因子 $S(Q)$ (a)^{11), 17)~20)} および X 線回折から得られた高温圧縮から回収された高密度 SiO₂ ガラスの構造因子 $S(Q)$ (b)^{11), 17)~21)}

いる。このシリカにアルカリ・アルカリ土類酸化物のような修飾酸化物¹²⁾を加えることにより、ガラスのネットワークが切断される、あるいは空隙の中に修飾酸化物のカチオンが入ることによりガラスの構造や物性が変化する。

我々はこれまで、ガラスを高密度化することによりガラスの構造と物性を変えることに注目してきた。ガラスの高密度化に関する研究は古くから行われてきているが、量子ビームを用いた回折実験¹³⁾に関しては、高温・高圧下で行われた例は少なく¹⁴⁾、試料を常温・常圧で回収した例も少ない^{15), 16)}。

図1(a)に Zeidler らにより報告されている室温における高圧その場中性子回折から得られたシリカガラスの構造因子 $S(Q)$ ^{11), 17)~20)}を、図1(b)に小野寺らより報告されている高温・高圧状態から回収された試料の X 線回折から得られた $S(Q)$ ^{11), 17)~21)}を示す。中性子回折、X 線回折の両データにおいて常温・常圧の SiO₂ ガラスの $S(Q)$ の $Q \sim 1.5 \text{ \AA}^{-1}$ にはガラスの中距離構造の象徴とされる first sharp diffraction peak (FSDP) が観測されている。中性子回折から得られた $S(Q)$ の $Q \sim 3 \text{ \AA}^{-1}$ には principal peak (PP)²²⁾ が観測されるが、X 線回折データでは観測されない。X 線は重元素に、中性子は酸素に敏感であることから PP は O-O 相関に関するピークであることが明らかになっており、酸素原子の充填率の高さ²³⁾を示すと言われている。

5. 中間酸化物であるアルミナガラスの超秩序構造

前述のとおり、シリカはガラス形成酸化物に分類されるが、このような分類の試みは1932年に Zachariasen より提唱された¹²⁾。Zachariasen がガラス形成則を提

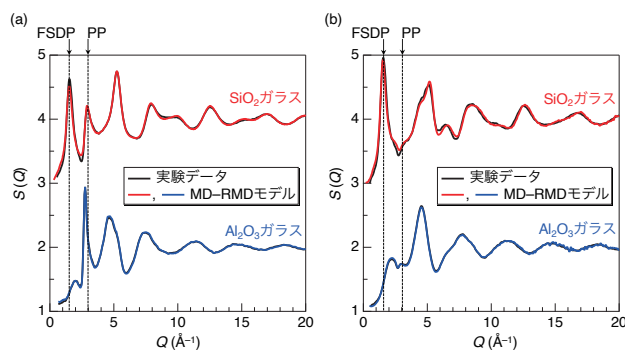


図2 中性子回折(a)および X 線回折(b)から得られた SiO₂ ガラス^{11), 17)~21), 26)}と Al₂O₃ ガラス^{11), 17)~20), 26)}の構造因子 $S(Q)$

唱した15年後の1947年に Sun は単結合強度を計算することにより単成分酸化物を3つに分類した²⁴⁾。一つは、単成分でガラスになるガラス形成酸化物、もう一つは、単成分ではガラスにならないが、ガラス形成酸化物の一部と置き換わってガラス形成酸化物を修飾する修飾酸化物である。最後の一つは、単成分ではガラスにならないものの、ガラス形成酸化物に対しては修飾酸化物のようにふるまい、さらに、修飾酸化物とガラス形成できる中間酸化物である。アルミナ (Al₂O₃) は通常は溶融急冷法を用いてガラス化させることが不可能な中間酸化物に分類される。ところが最近、アルミニウムを電気化学的に酸化させること (アノード酸化)²⁵⁾により生成したアモルファス Al₂O₃ がガラス転移を示すことが確認され、ガラスであることが明らかになった²⁶⁾。さらに X 線・中性子回折データに MD-RMC モデリングを適用し、その特異な構造が報告された²⁶⁾。

図2(a)に中性子回折、図2(b)に X 線回折から得られた SiO₂ ガラス^{11), 17)~21), 26)}と Al₂O₃ ガラス^{11), 17)~20), 26)}の構造因子 $S(Q)$ を MD-RMC モデルの結果と併せて示す。Al₂O₃ ガラスの中性子回折から得られた $S(Q)$ の $Q \sim 2.8 \text{ \AA}^{-1}$ に観測される PP は非常に鋭く、SiO₂ ガラスと比較して酸素原子の充填率が著しく上昇していることを示唆している。一方、Al₂O₃ ガラスの中性子回折、X 線回折の $S(Q)$ は共に SiO₂ ガラスのような鋭い FSDP は観測されない。SiO₂ ガラスの FSDP が鋭いのは空隙越しに原子が周期性を持って配列していることに起因する^{5), 11), 18)~20)}が、Al₂O₃ ガラスでは空隙が著しく減少し、周期性を失ったために FSDP が減衰したと考えられる。NMR および中性子回折の結果から Al の周りの O の平均配位数を求めたところ 4.7 となり、AlO₄, AlO₅, AlO₆ 多面体の形成が確認された。Al₂O₃ 結晶には存在しない AlO₅ が形成され

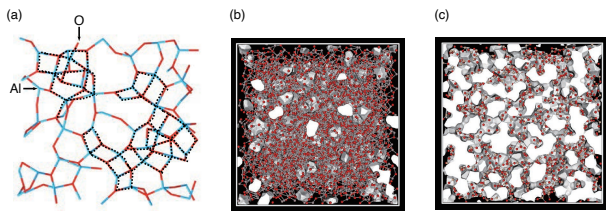


図3 MD-RMCモデリングより得られた Al_2O_3 ガラスの3次元原子配列(a), 空隙の分布(b)および SiO_2 ガラスの空隙の分布(c). ●: Al, ●: O^{(11), (17)~(20), (26)}

たのがこのガラスの大きな特徴である。多面体共有の割合を計算したところ、頂点共有と稜共有の比が4:1となり、頂点共有が100%の SiO_2 ガラスと大きく異なっていることが明らかになった。このような特徴は図3(a)に示したとおり視覚的に容易に確認できる。

図3(a)において破線部は AlO_n 多面体の稜共有を示し、この稜共有によって酸素の充填率が向上し、中性子回折の $S(Q)$ に鋭いPPを生み出している。すなわち、 Al_2O_3 ガラスはガラス形成のしやすさの特徴である頂点共有とより結晶的な稜共有成分が混在したガラスであることを明らかにした。図3(b)および図3(c)にMD-RMCモデルから抽出した Al_2O_3 ガラスおよび SiO_2 ガラスの空隙を白色で可視化した。著者らの定義によると全体積に占める空隙の割合は、 Al_2O_3 ガラスでは4.5 vol%, SiO_2 ガラスでは32 vol%となり、 Al_2O_3 ガラスの空隙の割合は SiO_2 ガラスより極めて小さい値となった。このようなガラスが電気化学的に合成出来る理由は、水溶液系のアノード酸化では Al_2O_3 結晶の骨格である密な稜共有構造だけを形成することができず、頂点共有構造を併せて形成したためと考えている。

6. ガラスにならない超高温酸化融体の超秩序構造

前述のように酸化ガラスは高温融体を急冷して合成するが、融体からのガラス形成を考える場合、ガラスにならない融体の構造や物性を知る必要がある、しかしながら、一般にガラスよりさらに構造秩序が乏しく、高融点の酸化融体の構造・物性計測は、そもそも融体を保持する容器がないことから、非常に困難な実験になる。一方、融体を容器なしで保持することができる浮遊法^{(27)~(31)}を用いれば2000℃以上の超高温酸化融体を実現することができる。

今回、ガラスにならない酸化物として Er_2O_3 (融点: 2430℃)に注目し、放射光X線回折測定をSPRING-8で行い、MD-RMCモデリングに必要な融体の密度の計測を国際宇宙ステーション (ISS) きぼうで行っ

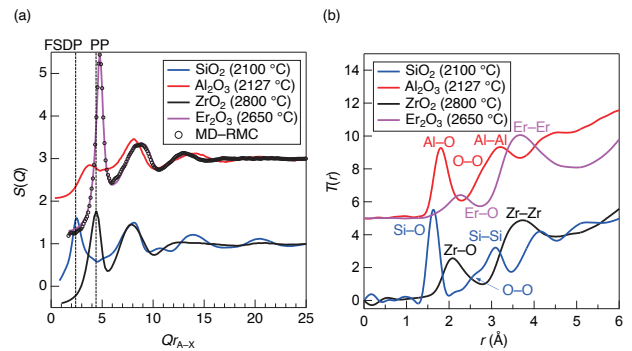


図4 X線回折から得られた SiO_2 融体、 Al_2O_3 融体、 ZrO_2 融体、 Er_2O_3 融体およびMD-RMCモデリングから得られた Er_2O_3 融体の構造因子 $S(Q)$ (a)とX線回折から得られた SiO_2 融体、 Al_2O_3 融体、 ZrO_2 融体、 Er_2O_3 融体の全相関関数 $T(r)$ (b)⁽³²⁾

た^{(31), (32)}。そしてガラスになる融体である SiO_2 ⁽³³⁾、ガラスにならない融体である Al_2O_3 ⁽³⁴⁾、 ZrO_2 ⁽³⁵⁾と比較することにより Er_2O_3 融体の特異な構造の特徴を抽出することを試みた。

放射光X線回折計測は、円錐状のノズルから出るガスで試料を浮遊させ、レーザー加熱より試料を融解させるガス浮遊炉^{(28)~(30)}を用いて行った。温度は放射光温度計で計測した。

密度測定はISSきぼうに設定されている宇宙用静電浮遊炉 (electrostatic levitation furnace, ELF)^{(28), (36)}を用いて行った。ELFは、二つの電極で静電気を発生させ、帯電させることにより試料を浮遊させることができる。試料はガス浮遊炉と同様にレーザーで加熱し、温度は放射温度計で測定した。ELFによる密度測定の詳細については、本特集号の石川氏の記事を参照いただきたい。

放射光X線回折計測から得られた Er_2O_3 、 SiO_2 、 Al_2O_3 、 ZrO_2 融体の構造因子 $S(Q)$ ⁽³²⁾と、 Er_2O_3 融体のMD-RMCシミュレーションによって得られた原子配置から計算した $S(Q)$ ⁽³²⁾を図4(a)に示す。散乱ベクトル Q は、 r_{A-X} (多面体の中心と頂点間距離) を乗じてスケーリングした。実験より得られた Er_2O_3 の $S(Q)$ は、ELFで測定された密度を用いたMD-RMCシミュレーションによってよく再現されていることが分かる。 $Qr_{A-X}=2.6$ ではガラス形成酸化物である SiO_2 のみに中距離秩序の存在を示すFSDPが観測された。また、 $Qr_{A-X}=4.5$ 付近で ZrO_2 と Er_2O_3 の両方の $S(Q)$ にPPが観測された。一方、 Al_2O_3 はFSDPとPPの間に小さなピークを生じ、中間酸化物である Al_2O_3 の構造が SiO_2 と修飾酸化物である $\text{ZrO}_2/\text{Er}_2\text{O}_3$ の間であることを示唆している。

$S(Q)$ をフーリエ変換することにより得られた全相

関関数 $T(r)^{32}$ を図 4(b) に示す。約 2.2 Å に観測された第一ピークは、Er-O 間距離に相当し、3 Å までのテールを引くピーク形状は、融体中で歪んだ ErO_n 多面体が形成されていることを示唆している。3.7 Å に観測された第二ピークは主に Er-Er 相関であり、O-O 相関のピークは軽元素であるがゆえに X 線の重みが小さいため不明瞭である。また、2.2 Å の Er-O 間距離と 2.1 Å の Zr-O 間距離は、イオン半径の違いにより、Si-O 間距離 (1.63 Å) と Al-O 間距離 (1.78 Å) よりも長い。Er-O と Zr-O の融体におけるカチオン-酸素間距離の増加は、Er-O 間距離 (2.2 Å) または Zr-O 間距離 (2.1 Å) がそれぞれ酸素のイオン半径 (1.35 Å) と 6 配位のエルビウム (0.89 Å) またはジルコニウム (0.72 Å) の和に近いこと、カチオンの周りの酸素配位数が 4 よりも大きいことを示唆している。したがって、 Er_2O_3 と ZrO_2 の骨格構造は、大きな酸素配位数を持つ多面体ユニットが連結した密な構造であり、ガラス形成酸化物である SiO_2 や電気化学的にガラスにできる中間酸化物である Al_2O_3 の構造とは大きく異なっていると言える。この特徴は、図 4(a) の $Qr_{A-X} = 4.5$ で観測されたピークが、酸化物ガラスやガラスになる融体において中距離構造の象徴である FSDP ではないという事実と矛盾がない。したがって、 Er_2O_3 と ZrO_2 は、極めて密に原子が充填された構造であるがために、 SiO_2 のような空隙越しに原子が配列することで形成される中距離秩序^{1),3)} は存在しないと考えられる。

図 5(a) に ZrO_2 融体、図 5(b) に Er_2O_3 融体の構造因子 $S(Q)^{32}$ を示す。両融体共に $Q \sim 2 \text{ \AA}^{-1}$ 付近に鋭いピークが観測されているがこれはカチオン-カチオン由来の PP である。この鋭い PP は、 Er_2O_3 においては、Er の周りの O の配位数は 6 となり SiO_2 ガラス (融体) の 4 より大きく Er 原子のパッキングが向上していることを意味する。またこの PP の full width at half maximum (FWHM) は 0.43 と同じ O の配位数が 6 である ZrO_2 融体よりもはるかに鋭いピークである。図 5(b) に 5000 粒子のシミュレーションボックスの RMC-MD モデルから計算された $S(Q)$ とベンチマーク的に粒子数を減じたいくつかの RMC モデルのデータ³²⁾ を示すが、3000 粒子以上のシミュレーションボックスを用いないとこの鋭い PP は再現しないことが明らかとなった。また、Er の周りの O の配位数が 6 から O の周りの Er の配位数は 4 となり、 OEr_4 テトラクラスターの形成が確認できた。

図 6 にテトラクラスターを可視化³²⁾ したが、図 6(a) からはクラスターネットワークが確認でき、それが

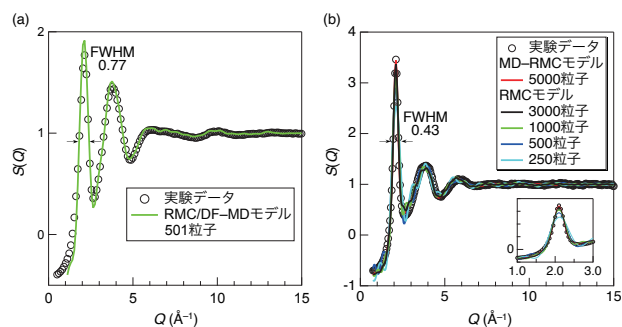


図 5 X 線回折および RMC-Density functional (DF)/MD モデリングから得られた ZrO_2 融体の構造因子 $S(Q)$ (a) と X 線回折および MD-RMC モデリング、RMC モデリングから得られた Er_2O_3 融体の構造因子 $S(Q)$ (b)³²⁾

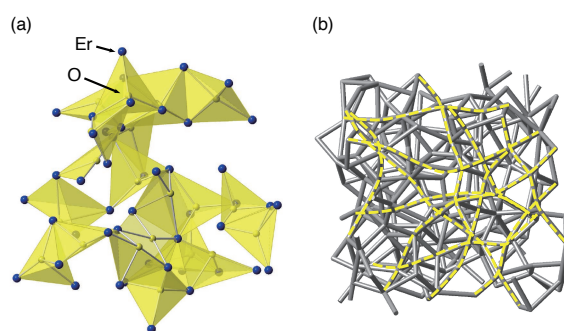


図 6 Er_2O_3 融体に形成された OEr_4 テトラクラスターネットワーク³²⁾ の (a) 多面体表示および (b) 棒表示

Er-O-Er の直線的な配列により格子状になっていることが図 6(b) で確認できる。つまりこの格子状の秩序が鋭い PP の原因となり、さらにガラスになりにくい原因であると結論づけられた。

7. おわりに

SiO_2 ガラスを高温で圧縮することにより 23% の高密度化を達成し^{15),21)}、出発物質のガラスよりも構造秩序のある超秩序構造高密度ガラスを合成できることが明らかとなった。このことは高温圧縮技術を用いればガラスの物性を中距離構造を通して自在に操れることを示している。高密度化ガラスの屈折率は通常のガラスより 6.7% 高く¹⁵⁾、新たな高屈折率ガラスが合成できる可能性を示したと言える。また、中間酸化物に分類され、従来はガラスにならないと考えられてきた Al_2O_3 が単成分でガラスになることを実証できたことから、今後、電気化学的な手法により、より結晶に近い新たな超秩序中間酸化物ガラスの創製が期待できる。さらに、ガラスにならない融体に原子が密に充填されることにより超秩序構造が生まれ、これがガラス形成を阻害していると考えられた。今後、量子ビーム実験

結果に基づき、新たな超秩序構造ガラスが我々の学術領域で創成されることを期待する。

謝辞 本記事で紹介された研究内容の一部は、JSPS 科学研究費 学術変革領域研究 (A) 「超秩序構造が創造する物性科学」20H05878, 20H05881 の支援を受けて実施された。

文 献

- 1) R. L. McGreevy and L. Pusztai, *Mol. Simulat.*, **1**, 359-367 (1988).
- 2) S. Kohara and L. Pusztai, *Atomistic Simulations of Glasses: Fundamentals and Applications*, ed. by J. Du and A. N. Cormack, *Wiley-American Ceramic Society*, 60-88 (2022).
- 3) 鈴木賢太郎, *RADIOISOTOPES*, **60**, 63-87 (2011).
- 4) K. Ohara, Y. Onodera, M. Murakami and S. Kohara, *J. Phys. Condens. Matter*, **33**, 383001 (2021).
- 5) 小原真司, 尾原幸治, *日本結晶学会*, **64**, 50-56 (2022).
- 6) S. Kohara and P. S. Salmon, *Adv. Phys.: X*, **1**, 640-660 (2016).
- 7) S. Kohara and J. Akola, *World Scientific Series in Nanoscience and Nanotechnology Advanced Characterization of Nanostructured Materials*, ed. by S. K. Sinha, M. K. Sanyal and C. K. Loong, World Scientific Co. Pte. Ltd., 247-305 (2021).
- 8) Y. Hiraoka, T. Nakamura, A. Hirata, E. G. Escobar, K. Matsue and Y. Nishiura, *P. Natl. Acad. Sci. USA*, **113**, 7035-7040 (2016).
- 9) Y. Waseda, *The Structure of Non-Crystalline Materials*, McGraw-Hill, New York, (1980).
- 10) Y. Onodera, S. Kohara, S. Tahara, A. Masuno, H. Inoue, M. Shiga, A. Hirata, K. Tsuchiya, Y. Hiraoka, I. Obayashi, K. Ohara, A. Mizuno and O. Sakata, *J. Ceram. Soc. Jpn.*, **127**, 853-863 (2019).
- 11) 小原真司, 小野寺陽平, ケモインフォマティクスにおけるデータ収集の最適化と解析手法, 技術情報協会, 東京, 407-420 (2023).
- 12) W. H. Zachariasen, *J. Am. Chem. Soc.*, **54**, 3841-3851 (1932).
- 13) 河野義生, 佐藤友子, *放射光*, **35**, 285-294 (2022).
- 14) Y. Inamura, Y. Katayama, W. Utsumi and K. Funakoshi, *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 015501 (2004).
- 15) A. Masuno, N. Nishiyama, F. Sato, N. Kitamura, T. Taniguchi and H. Inoue, *RSC Adv.*, **6**, 19144 (2016).
- 16) M. Guerette, M. R. Ackerson, J. Thomas, F. Yuan, E. B. Watson, D. Walker and L. Huang, *Sci. Rep.*, **5**, 15343 (2015).
- 17) A. Zeidler, K. Wezka, R. F. Rowlands, D. A. J. Whittaker, P. S. Salmon, A. Polidori, J. W. E. Drewitt, S. Klotz, H. E. Fischer, M. C. Wilding, C. L. Bull, M. G. Tucker and M. Wilson, *Phys. Rev. Lett.*, **113**, 135501 (2014).
- 18) 小原真司, *化学と工業*, **75**, 330-332 (2022).
- 19) S. Kohara, *J. Ceram. Soc. Jpn.*, **130**, 531-544 (2022).
- 20) 小原真司, *表面と真空*, **65**, 466-47 (2022).
- 21) Y. Onodera, S. Kohara, P. S. Salmon, A. Hirata, N. Nishiyama, S. Kitani, A. Zeidler, M. Shiga, A. Masuno, H. Inoue, S. Tahara, A. Polidori, H. E. Fischer, T. Mori, S. Kojima, H. Kawaji, A. I. Kolesnikov, M. B. Stone, M. G. Tucker, M. T. McDonnell, A. C. Hannon, Y. Hiraoka, I. Obayashi, T. Nakamura, J. Akola, Y. Fujii, K. Ohara, T. Taniguchi and O. Sakata, *NPG Asia Mater.*, **12**, 85 (2020).
- 22) P. S. Salmon, R. A. Martin, P. E. Mason and G. J. Cuello, *Nature*, **435**, 75-78 (2005).
- 23) P. S. Salmon and A. Zeidler, *J. Stat. Mech. Theory E*, **2019**, 114006 (2019).
- 24) K.-H. Sun, *J. Am. Ceram. Soc.*, **30**, 277-281 (1947).
- 25) 菊地竜也, 岩井 愛, 中島大希, 夏井俊悟, 鈴木亮輔, *表面技術*, **69**, 554-561 (2018).
- 26) H. Hashimoto, Y. Onodera, S. Tahara, S. Kohara, K. Yazawa, H. Segawa, M. Murakami and K. Ohara, *Sci. Rep.*, **12**, 516 (2022).
- 27) D. L. Price: "High-Temperature Levitated Materials", Cambridge University Press, New York, (2010).
- 28) S. Kohara, K. Ohara, T. Ishikawa, H. Tamaru and J. K. R. Weber, *Quantum Beam Sci.*, **2**, 5 (2018).
- 29) K. Ohara, Y. Onodera, S. Kohara, C. Koyama, A. Masuno, A. Mizuno, J. T. Okada, S. Tahara, Y. Watanabe, H. Oda, Y. Nakata, H. Tamaru, T. Ishikawa and O. Sakata, *Int. J. Microgravity Sci. Appl.*, **37**, 370202 (2020).
- 30) 尾原幸治, 水野章敏, 岡田純平, 小原真司, 石川毅彦, *放射光*, **33**, 112-119 (2020).
- 31) 小山千尋, 小原真司, 田原周太, 小野寺陽平, 石川毅彦, *放射光*, **34**, 30-36 (2021).
- 32) C. Koyama, S. Tahara, S. Kohara, Y. Onodera, D. R. Småbråten, S. M. Selbach, J. Akola, T. Ishikawa, A. Masuno, A. Mizuno, J. T. Okada, Y. Watanabe, Y. Nakata, K. Ohara, H. Tamaru, H. Oda, I. Obayashi, Y. Hiraoka and O. Sakata, *NPG Asia Mater.*, **12**, 43 (2020).
- 33) Q. Mei, C. J. Benmore and J. K. R. Weber, *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 057802 (2007).
- 34) L. B. Skinner, A. C. Barnes, P. S. Salmon, L. Hennem, H. E. Fischer, C. J. Benmore, S. Kohara, J. K. R. Weber, A. Bytchkov, M. C. Wilding, J. B. Parise, T. O. Farmer, I. Pozdnyakova, S. K. Tumber and K. Ohara, *Phys. Rev. B*, **87**, 024201 (2013).
- 35) S. Kohara, J. Akola, L. Patrikeev, M. Ropo, K. Ohara, M. Itou, A. Fujiwara, J. Yahiro, J. T. Okada, T. Ishikawa, A. Mizuno, A. Masuno, Y. Watanabe and T. Usuki, *Nat. Commun.*, **5**, 5892 (2014).
- 36) H. Tamaru, C. Koyama, H. Saruwatari, Y. Nakamura, T. Ishikawa and T. Takada, *Microgravity Sci. Technol.*, **30**, 643-651 (2018).

筆者紹介



小原 真司 (こはら しんじ)

最終学歴：東京理科大学, 博士 (工学) 専門分野：量子ビーム構造解析 現在の研究テーマ：非晶質材料の構造特徴量の抽出。

[連絡先] 〒305-0047 茨城県つくば市千現1-2-1 国立研究開発法人物質・材料研究機構 マテリアル基盤研究センター先端解析分野 量子ビーム回折グループ

E-mail: KOHARA.Shinji@nims.go.jp



手跡 雄太 (しゅせき ゆうた)

最終学歴：東京理科大学, 博士 (工学) 専門分野：計算科学 現在の研究テーマ：非晶質材料のシミュレーション。

[連絡先] 〒615-8520 京都府京都市西京区京都大学桂 京都大学大学院 工学研究科 材料化学専攻 ガラス基礎科学講座

E-mail: shuseki.yuta.7z@kyoto-u.ac.jp