

機能性ガラス材料の原子レベル構造解析

Keywords: ガラス・アモルファス・X線回折・中性子回折・データ駆動型構造モデリング

光・量子ビーム応用分野 シンクロtronX線グループ

小原 真司

KOHARA.Shinji@nims.go.jp | https://samurai.nims.go.jp/profiles/kohara_shinji?locale=ja



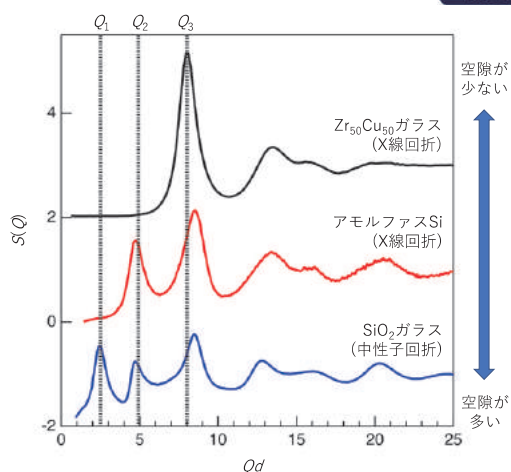
研究の背景

- 我々の生活に欠かせないガラス・アモルファス材料を研究対象とする。
- ガラスのネットワーク構造の組成による変化に注目。
- ガラス構造の可視化によりその機能発現メカニズムを明らかにする。

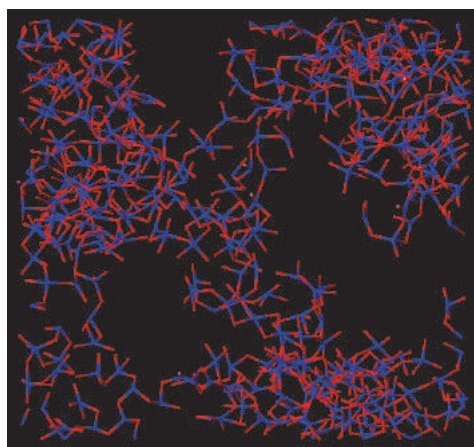
研究の狙い

- 放射光X線・中性子回折実験、データ駆動型構造モデリングの併用により実験データを忠実に再現するガラスの3次元構造モデルを構築。
- ガラスの回折データを系統的に理解することにより回折パターンから機能の予測に挑戦。

最先端研究トピックス



$Zr_{50}Cu_{50}$ ガラス、アモルファスSi、 SiO_2 ガラスの構造因子 $S(Q)$ 。横軸は $S(Q)$ をフーリエ変換することにより得られた実空間関数に現れる第一相関距離 (\AA) で規格化されている。同じ非晶質でも空隙の量にばらつきがあり、空隙越しに存在する秩序が Q_1 や Q_2 として現れている。



データ駆動型構造モデリングより得られた放射光X線・中性子、NMRの実験データを再現する $ZnO-P_2O_5$ ガラスの Zn-O 多面体ネットワーク。このネットワークが本ガラスの熱膨張係数の異常なふるまいの原因と考えられる。赤: O(酸素)、青: Zn(亜鉛)。

文献

- 小原真司他, ガラス・液体・アモルファス材料の回折パターンの理解, *New Glass*, **33**, 3-7(2018).
- Y. Onodera, S. Kohara *et al.*, Formation of metallic cation-oxygen network for anomalous thermal expansion coefficients in binary phosphate glass, *Nat. Commun.*, **8**, 15449-8 (2017).

まとめ

- ガラスの回折パターンの系統的な理解に成功。
- 低融点機能性ガラスの熱膨張係数の異常なふるまいの原因の理解に成功。

実用化への目標

- 新奇機能性ガラス創製のための設計指針の確立を試みる。
- ガラスの乱れた構造に潜んだトポロジーの抽出と制御に挑戦。