

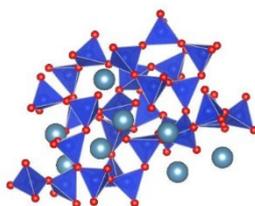
提案者 増野 敦信 (京都大学)

テーマ名 機能性高充填密度ガラスの融液物性計測による機能発現メカニズムの解明

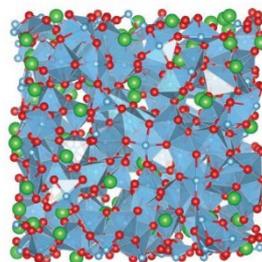
○研究の背景

酸化物ガラスとは一般に、主成分である SiO_2 や B_2O_3 , P_2O_5 などのいわゆる網目形成酸化物が頂点共有三次元ランダムネットワーク構造をとる物質であるとされている。一方で近年我々は、無容器法を用いることで、構造中に頂点共有ネットワークが形成されない高充填密度ガラスの合成に数多く成功し、それらが従来のガラスと比べて突出した物性、例えば高屈折率、強い発光、高弾性率、高破壊耐性、高誘電率、大きな磁気光学効果、低熱膨張などを発現することを見出している。これらの機能は、高い充填密度に由来して発現することはわかっているが、原子配列との相関は不明である。また高い充填密度にもかかわらずガラス化する構造学的理由もわかっていない。ガラスは融液を冷却して得られることを考えると、室温で機能発現を担う構造学的特徴を明らかにするだけでなく、そうした特徴ある原子配列がどのようなプロセスを経て形成されるのかを知ることは極めて重要である。そのためにはまず、融液や過冷却液体の構造と、粘性などの熱物性との相関を明らかにする必要があるが、しかしながら現時点でこの課題に正面から取り組んだ研究はない。

一般的なガラス



高充填密度ガラス



○研究の目的

本研究の目的は、これまでに我々が合成した機能性高充填密度ガラスについて、融液から過冷却液体を経てガラスに至る過程で物性計測と構造解析を行い、機能発現を担う構造学的特徴の形成プロセスを明らかにすることである。高屈折率、高硬度、低熱膨張などの特色ある物性を示す様々なガラス系を対象とする。最初のステップとして、国際宇宙ステーション (ISS) 実験棟「きぼう」の静電浮遊炉 ELF により融液の密度や粘度の温度依存性を計測し、熱膨張係数や Fragility Index を算出する。ガラスになる融液とならない融液に関してこれらのデータを比較し、ガラス形成能の定量化を図る。一方、融液の構造解析は地上で実施する。融液のラマン散乱分光や放射光 X 線・中性子回折実験を行い、得られたデータを再現するような構造モデルを分子動力学シミュレーションなどによって作製する。このとき宇宙実験で得られた密度を用いることで、構造モデルの信頼性の大幅な向上が可能となる。構造モデルは様々な幾何学的手法を駆使して解析し、機能発現を担うような特徴ある原子配列を抽出する。本研究で得られる物性と構造情報の相関は、高充填密度ガラスのガラス形

成過程や機能発現メカニズムの解明に利用されるだけでなく、今後の機能性高充填密度ガラスの組成設計と合成条件の最適化に繋げることができる。

○研究の意義

X線・中性子回折実験で得られる強度データを二体分布関数などの実空間データに処理する際、および計算機実験には、信頼性の高い密度の値が必要となる。また、融液から過冷却液体、そしてガラス化に至るまでの密度の温度依存性から、各状態における熱膨張係数を算出できる。さらに融液の粘度の温度依存性が計測できれば、Fragility Index を求められ、ガラス形成能の定量化が可能となる。酸化物融液の密度や粘度を、融点以上から過冷却度の大きい低温まで精度よく測定するには、ISS きぼうの ELF の利用が不可欠である。これは、放電を防ぐために高真空が必要な地上の浮遊炉では、酸化物の融液から酸素が抜けてしまい、正しいデータが得られないためである。空気中で融液の浮遊が可能な ELF は、本研究を成功させるうえで最も適している。融液の密度や年度の温度依存性に関して、これまでは推定値しか使えなかった研究の信頼性を格段に向上させられる。本研究の成果はガラス科学の発展のみならず、機能発現のメカニズム解明を通じて、新規高機能性ガラス、例えばダイヤモンドを超える超高屈折率低分散ガラス、硬くて割れないガラス、温めると縮むガラスなどの創成に繋がることから、社会に与えるインパクトや、産業創出等の波及効果は大きい。