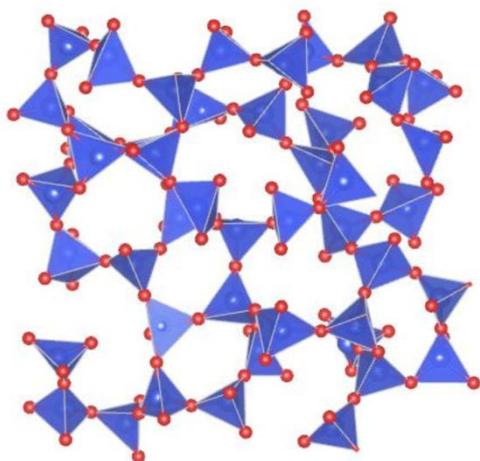


提 案 者 増野敦信（京都大学）

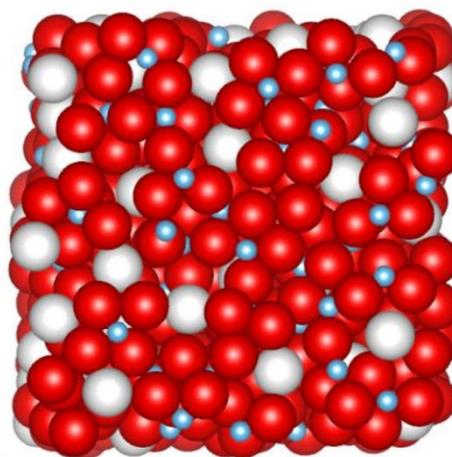
テ ー マ 名 融液の熱物性と原子配列をベースとした機能性高充填密度ガラスの設計指針の確立

○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。



ネットワーク系ガラス



高充填密度ガラス

○研究の目的

本テーマは、2023 年度採択テーマ「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」*の継続テーマに当たる。本研究は、原子配列に基づいた

「ガラス設計指針の確立」を目的とし、先行テーマの「機能発現メカニズムの解明」より踏み込んだガラス研究が行われる。

先行テーマでは、下表の各列に示す様々な機能発現の特徴を示す実験試料を利用し、宇宙実験で取得する熱物性（密度と粘性）と地上で取得する回折データをベースにして、各高充填密度ガラスの構造構築や特徴量抽出をして、機能発現メカニズムの解明を目指す（詳細は*の[研究の目的]を参照）。一方で、本研究では、さらに各機能発現を示す高充填密度ガラスの組成を下表の各行のとおり変化させて、宇宙と地上のデータを取得することでガラスの設計に必要な知見を得ることを目指す。具体的には、カチオンのサイズや修飾イオン/非修飾イオン濃度比等、構造の核となる要素を変化させることで、物性に寄与する原子配列や、ガラス化を促進するあるいは阻害する因子の特定を目指す。従って、本研究では新たにサイズや濃度比を考慮した試料を選択し、地上実験と並行しながら、宇宙実験に挑む。

* https://humans-in-space.jaxa.jp/kibouser/library/item/subject/FY2022_ELF01.pdf

表 先行及び本テーマにおける高充填密度ガラス試料

| 機能発現 | 高屈折率 | 低（負）熱膨張 | 高透過性 |
|--------|---|--|--|
| 先行実験試料 | 50La ₂ O ₃ -50B ₂ O ₃ | 25La ₂ O ₃ -75MoO ₃ | 30La ₂ O ₃ -70SiO ₂ |
| 本実験試料 | 50Y ₂ O ₃ -50B ₂ O ₃ | 25Er ₂ O ₃ -75MoO ₃ | 30Y ₂ O ₃ -70SiO ₂ |
| | 30La ₂ O ₃ -70B ₂ O ₃ | 20La ₂ O ₃ -80WO ₃ | |

○研究の意義

×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。融液の密度や粘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。