

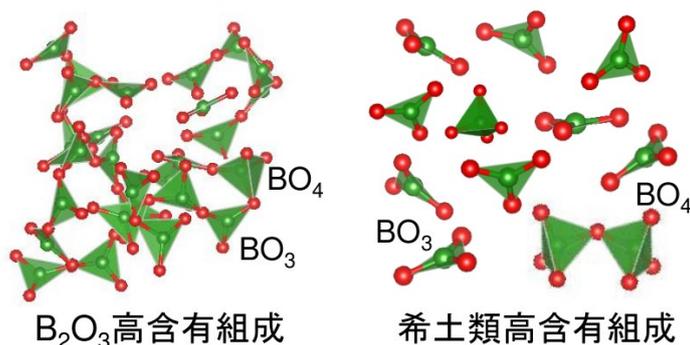
提 案 者 増野敦信（京都大学）  
テ ー マ 名 機能性高充填密度ホウ酸塩ガラスのガラス形成メカニズムの解明

#### ○研究の背景

本研究テーマは、先行する 2 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」および「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」を継承するものである。高充填密度ガラスの生成機構の解明を加速するために実施するこれら 2 テーマの研究が進展するのに伴い、希土類ホウ酸塩ガラスの物性計測の必要性が新たに認識されたことから、本研究は提案された。

希土類ホウ酸塩ガラスは、レンズ用光学材料の基盤となる基本的なガラス系であるが、通常のとつぽを用いた熔融急冷法ではホウ酸が主成分となる組成でしかガラス化しない。一方で近年提案者らは無容器法を用いることで、希土類酸化物を主成分とする組成域において新たなガラス化範囲を見出した。希土類酸化物を主成分とするガラスは、高屈折率、高硬度、巨大磁気光学効果など、従来のガラスとは一線を画する優れた機能性を有している。そしてこれまでのガラス構造研究から、ホウ酸を主成分とするガラスは、網目形成酸化物である  $B_2O_3$  が  $BO_3$  や  $BO_4$  ユニットを形成し、それらが頂点で連結することで三次元ランダムネットワークを構築している、いわゆる従来型ガラスであるが、希土類を主成分とするガラスにはそうした頂点共有ネットワークは存在しておらず、かつ非常に原子充填密度が高いことが明らかになっている。このような希土類高含有ガラスを合成できること自体、従来のガラス科学の常識に反しており、応用面だけでなく学術的にも大きな関心を集めている。

#### 希土類ホウ酸塩ガラス



#### ○研究の目的

本研究の目的は、これまでに提案者らが合成した、高屈折率、高硬度、巨大磁気光学効果を示す高充填密度希土類ホウ酸塩ガラスについて、融液から過冷却液体を経てガラスに至る、あるいは結晶化してしまう過程で物性計測と構造

解析を行い、機能発現やガラス形成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。

本研究では、 $\text{La}_2\text{O}_3\text{-B}_2\text{O}_3$  二元系において、 $\text{B}_2\text{O}_3$  を主成分とする組成から  $\text{La}_2\text{O}_3$  を主成分とする組成まで、広範な範囲を対象とする。まず、国際宇宙ステーション (ISS) 実験棟「きぼう」の静電浮遊炉 ELF (ISS-ELF) を用いて、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。さらに、ガラスになる融液とならない融液のデータを比較することで、ガラス形成能を定量的に評価する。一方、融液の構造解析は地上実験として実施する。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を大幅に向上させることが可能となる。様々な幾何学的手法を駆使して構造モデルを解析し、機能発現やガラス形成に関与する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関係は、希土類ホウ酸塩ガラスのガラス形成メカニズムの解明に貢献するだけでなく、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もつながると期待される。

#### ○研究の意義

希土類高含有ガラスは、網目形成酸化物の頂点共有ネットワークが存在しない点で、従来のガラス科学を覆す新しい材料であり、そのガラス形成メカニズムを解明することは、今後の新規機能性ガラスの開発において極めて重要である。本研究では、希土類ホウ酸二元系の幅広い組成範囲において、融液から過冷却液体を経て凝固する間に生じる構造や粘度などの変化を詳細に追跡し、ガラス化する組成と結晶化する組成の比較を行うことで、ガラス形成を支配する要因を抽出する。

特に宇宙実験の活用は、本研究の大きな特色の一つである。地上の静電浮遊炉では高真空環境が必要となるため、酸化物融液から酸素が抜けてしまい、正確なデータの取得が困難である。しかし ISS-ELF では、空気中で融液の浮遊が可能であるため、融液の密度や粘度の温度依存性についてより信頼性の高いデータを収集することができる。

また本研究の成果は、ガラス科学の発展に貢献するだけでなく、機能発現のメカニズム解明を通じて、希土類を高含有する新規高機能性ガラスの開発にもつながる。例えば温めると縮むガラスや、赤外域で強く発光するガラスなど、新しい材料の創出が期待される。このような新規材料の開発は、産業創出や技術革新に寄与し、社会的にも大きなインパクトをもたらすものである。

本研究では宇宙実験と地上実験を組み合わせた多角的なアプローチを用いることで、希土類高含有ホウ酸塩ガラスの形成機構と機能発現メカニズムを解明する。組成と温度において広い範囲に及ぶ研究は、ガラス形成というガラス科学における根源的問題の解決には不可欠であり、本研究の推進が大きな役割を果たすと期待される。