

ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学

大項目	3. 計算化学
中項目	3-4. 材料設計
小項目	3-4-5. アモルファス・ガラス材料

概要（200字以内）	
<p>アモルファス・ガラス構造を解析・予測する手法としては主として分子動力学法・モンテカルロ法が用いられている。最近では第一原理分子動力学法を用いた精密な構造予測も可能になりつつある。また予測された構造をもとに、力学的特性、輸送的特性、光学的特性も推算されている。今後は結晶化の予測、動的緩和現象の解析、相分離・モルフォロジーの予測も徐々に可能となっていくと考えられる。</p>	<p>Table of Contents</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. シリカガラスの材料設計 2. 珪酸塩ガラスの材料設計 3. シミュレーション手法
現状と最前線	
<p>ガラス材料の材料設計を考える場合、結晶構造のような規則性がないため、ランダムな構造をいかに予測しつつ、望ましい構造に作りこめるかが重要となる。ガラスという言葉は広義には金属ガラス、高分子ガラスも含むが、本稿では代表して酸化物ガラスに限ることとする。</p> <p>1. シリカガラスの材料設計</p> <p>地球上でもっとも豊富であり重要な材料であるシリカと水はそれらの結晶が類似の構造多形を有し、また両方とも液体・ガラス状態で特異な性質を持つ点で化学的にも興味深い材料である。温度上昇とともに密度最大を示し体積弾性率が上昇する、また圧縮により体積弾性率が減少する現象は、古典分子動力学法を応用することにより始めてそのメカニズムが明らかになりつつある。シリカ、氷のような構造多形を有する材料グループはポリアモルフィズムの議論が活発に行われ、多様な構造、すなわち特性をデザインでできる可能性が示唆されている。</p> <p>工業的にはフェムト秒レーザーを照射することによりガラス内部に屈折率の異なるナノ構造を創成する、あるいは高圧力で圧縮することにより高密度のアモルファス構造が作成されている。また中性子線、レーザー照射によっても構造変化が観測されている。これらの現象は古典分子動力学法あるいは第一原理計算を用いてガラス中の構造変化、欠陥生成、光学特性の変化が解析できるようになってきている。</p> <p>2. 珪酸塩ガラスの材料設計</p> <p>このガラス系は通常、10種類以上の酸化物を含んでおり、周期律表から選ぶ組み合わせを</p>	

考えると無限の材料設計の可能性を秘めている。従来の材料設計では、組成—構造データベースを利用した線形な相関解析が主であったが、最近では非線形なニューラルネット手法も応用され、組成から物性予測する精度が向上している。一方、混合アルカリ効果のように組成・構造の関係が特異な現象については、分子動力学手法により異種のアルカリイオンが置き換わった時の相互エネルギーの違いからその原子レベルでのメカニズムが説明されている。今後実用的な多成分系を分子動力学手法で扱う場合に計算に必要なパラメータ（原子間相互作用）のデータベースの整備が望まれている。さらに構造、物性の解析手法として、フラクタル、パーコレーション、カオス解析のような数理解手法の応用も拡大していくと考えられる。

3. シミュレーション手法

ガラスの材料設計には主として古典分子動力学法が利用されてきた。現状では取り扱える原子が数十万原子程度、数ナノ秒程度の現象しか取り扱えない限界があるが、構造形成を理解し設計に応用できる点では強力なツールとなっている。それ以外に応用されている手法を以下に挙げる。実測の回折データに合うように構造モデルを計算する逆モンテカルロ法がある。X線あるいは中性子線の回折データがあれば原子間ポテンシャルが無くてもシミュレーションできる点に強みがある。欠陥構造・電子構造・反応性が重要な場合には、ab-initio法あるいは第一原理計算が有効である。分光特性の計算も可能となっている。電子構造と原子のダイナミックスを同時に扱う第一原理分子動力学法もガラスに応用されるようになってきた。取り扱える原子数が少なく、ごく短時間の現象しかまだ解析できないが、化学結合の切断・生成、電子構造変化の情報が得られる点では最も信頼性の高い手法であり、計算時間を短縮するアルゴリズムも精力的に研究されていて、応用が急速に進むと考えられる。

参考文献：平尾一之（監修）、「ナノマテリアル工学体系第1巻ニューマテリアルセラミックス・ガラス」、フジ・テクノシステム（2005）

将来予測と方向性

・5年後までに解決・実現が望まれる課題

計算できる原子数、現象の時間が限られている。数百万原子の系をマイクロ秒の時間計算できるような計算手法が望まれている。

・10年後までに解決・実現が望まれる課題

材料の合成・加工工程の予測ができる手法の整備。

キーワード

ガラス、アモルファス、分子動力学法、モンテカルロ法、第一原理分子動力学法

（執筆者： 高田 章 ）