

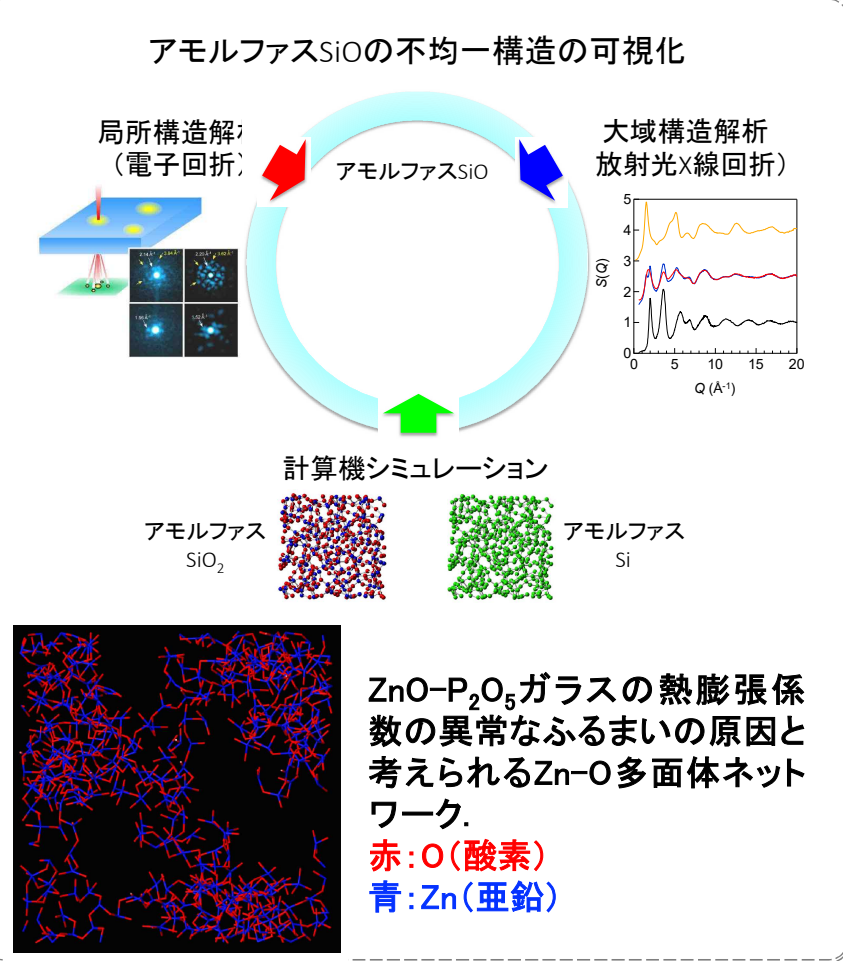
研究の概要

本研究では、ガラス・液体・アモルファスといった不規則系物質をターゲットとした。不規則系物質には、結晶が有する構造規則性が存在しないため、その構造を一意的に記述することができない。これまで、ある距離に原子が存在する確率を示す二体分布関数を回折実験により求めることが試みられてきたが、ここに留まっている限りは二体相関に潜む特異な構造を抽出することができない。そこで、ハイスループット放射光実験基盤を構築し、中性子・電子回折、計算機シミュレーション、数学的な手法を組み合わせ、リング、空隙、トポロジーに注目し、高温・高圧・微小重力下といった様々な環境下における構造・物性データから、物性や機能に資する特徴量の抽出を試みた。

研究の成果

放射光X線と電子線、分子動力学(MD)計算、逆モンテカルロ(RMC)法、第一原理計算を組み合わせ、電池材料として使われている不均一アモルファス酸化シリコン(SiO)の平均構造および界面構造の解析に成功した。ガラスのデータ駆動型モデリングに関しては、低融点実用ガラスの母体ガラスであるZnO-P₂O₅ガラスに注目し、RMCモデリングを用いて、放射光、中性子、NMRのすべての実験データを同時に再現するガラス構造の構築に成功した。また、得られた構造モデルのネットワーク構造に注目し、本ガラスの熱膨張係数の異常なふるまいをガラス構造から説明することに成功した。さらに、高圧下におけるシリカ(SiO₂)ガラスのホモロジーの変化の解析にも成功した。

研究領域「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」
(研究総括: 常行真司、H27年度発足)



参考文献・リンク

A. Hirata, S. Kohara, T. Asada, M. Arao, C. Yogi, H. Imai, Y. Tan, T. Fujita and M. W. Chen, Nat. Commun. 7, 2016, 11591.
<https://www.natureasia.com/ja-jp/ncomms/abstracts/76416>
Y. Onodera, S. Kohara, H. Masai, A. Koreeda, S. Okamura and T. Ohkubo, Nat. Commun. 8, 2017, 15449.

(注1) 募集要項第7章「戦略目標」をご参照ください。