

ガラスの複雑な原子構造を高速・高精度な原子シミュレーションで再現

ガラスの「秩序のある構造」を解明

課題 ガラスは液体の原子配列の状態に凍結されるので、構造は無秩序になると考えられていたが、原子配列の繰り返しパターンを示す実験データは、秩序のある構造の存在を示唆している。原子配列の立体的配置を中性子やX線の回折では得られないため、原子レベルの構造解明は困難

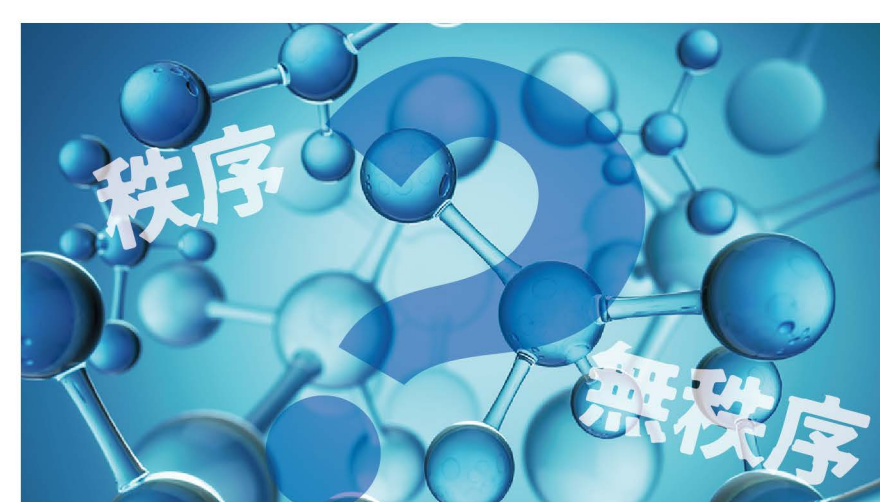
成果 機械学習で高精度な原子シミュレーションを可能にする「機械学習分子動力学法」を適用。コンピュータ上でガラスの高精度シミュレーションで、ガラスの構造の詳細な調査が可能に。ガラスの原子構造中の原子のネットワーク構造が、材料の圧縮に伴って変化する機構を解明

想定される活用例 機械学習分子動力学法で、ガラス材料の特性を原子レベルから解析することが可能に。新しいガラス材料を用いた機能性ガラスの研究開発の進展に大いに貢献

ガラスについて



ガラス：
スマートフォンやタブレット、各種実験機器
車のウィンドウや光ファイバーなど
現代の社会基盤を支える素材として
様々な分野で重要な役割を果たしている

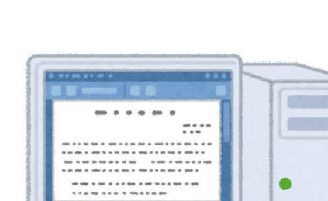


ガラスの構造：
液体の原子配列の状態に凍結
→構造は無秩序、と考えられていた
シリカガラスの実験データでは、
一定の秩序のある構造の存在が示唆されている

ガラスの構造を解明し、秩序構造を制御できれば
新しい機能性ガラスの開発への道が開ける

ガラスの構造を実験で直接観察することは困難

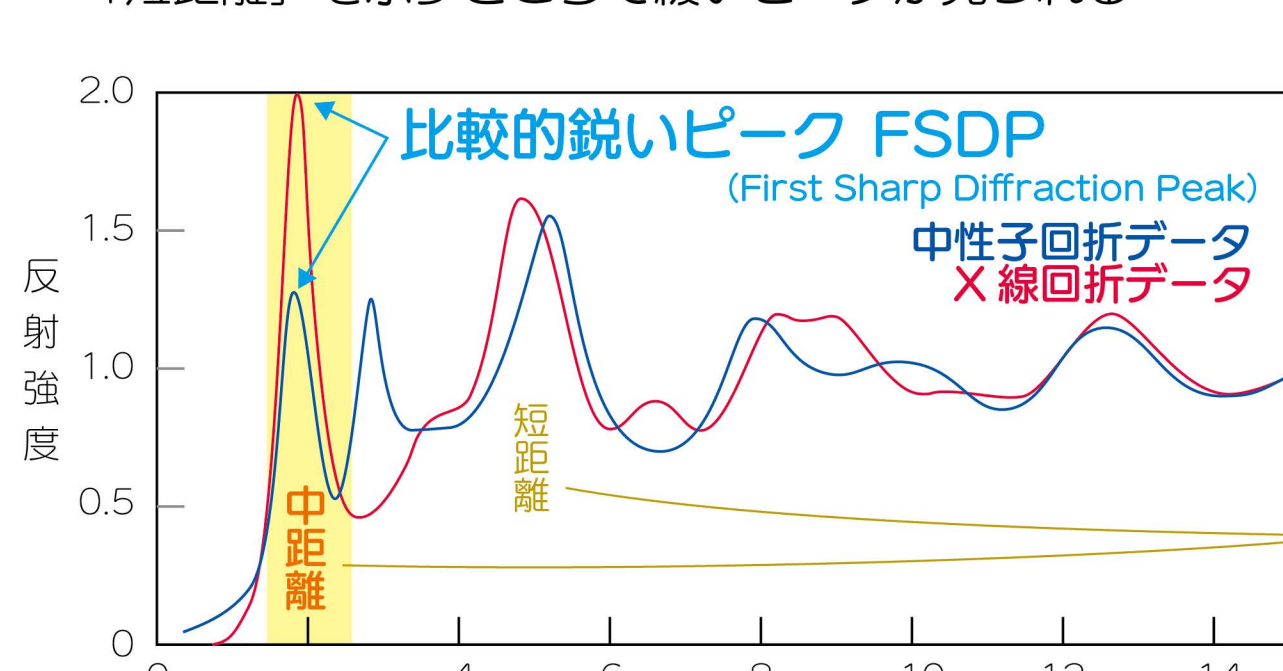
高精度な原子シミュレーションを駆使し、
ガラスの原子配列をコンピュータ上でそっくり再現すれば、
ガラスの秩序構造を丹念に調べることが可能



ガラスの構造：分かっていること 分かっていること

中性子回折実験やX線回折実験では、
原子がきちんと並んでいる場合、
原子間の間隔と波長が合うところで、強く反射される

▶ これまでのX線や中性子線による回折では
「中距離」を示すところで比較的鋭いピークが、
「短距離」を示すところで緩いピークが見られる



結晶よりも少しゆるく、
とらえどころのない
「中距離の秩序」があるっぽい

「中距離の秩序」が発達すると
ガラスの透明度が上がり、光をよく通す

「中距離の秩序」を生み出している、
シリカガラスの構造を明らかにしたい！ ▶ 実験での実現は困難
新しいガラス材料の開発に直結する重要課題

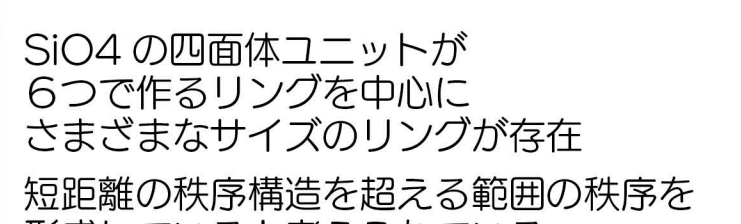
○短距離の秩序構造と中距離の秩序構造

ガラスはある程度、原子が詰まっているので、
最隣接の原子間距離の範囲では規則ができる
=短距離秩序

シリカガラス(SiO₂)の場合は、
SiO₄の四面体ユニットが
短距離の秩序構造

この四面体ユニットは、頂点の酸素原子を
周囲のユニットと共有することで
3次元的なネットワークを作る性質がある

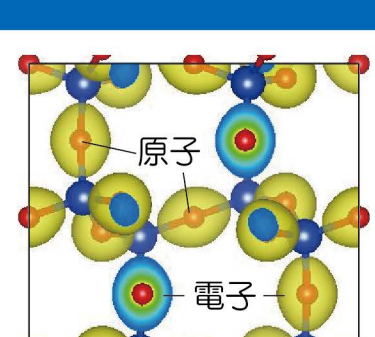
共有
SiO₄の四面体ユニットが
6つで作るリングを中心に
さまざまなサイズのリングが存在
短距離の秩序構造を超える範囲の秩序を
形成していると考えられている
=中距離の秩序構造
(数ある仮説のうちの一つ)



例：SiO₄四面体ユニット
6つで作るリング

コンピュータ上で、高精度な原子シミュレーションにより
原子構造をそっくり再現することを目指す

ガラスのシミュレーション あげようレゾリューション



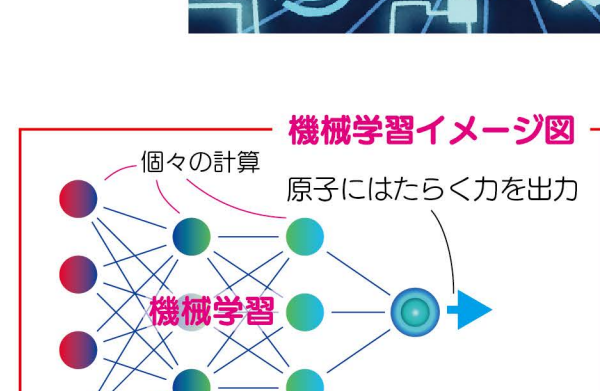
原子配列を再現するためには、
量子力学に基づいた「第一原理計算」が必要

従来の第一原理計算では
計算できる原子数に上限あり
(数100原子程度)

本研究

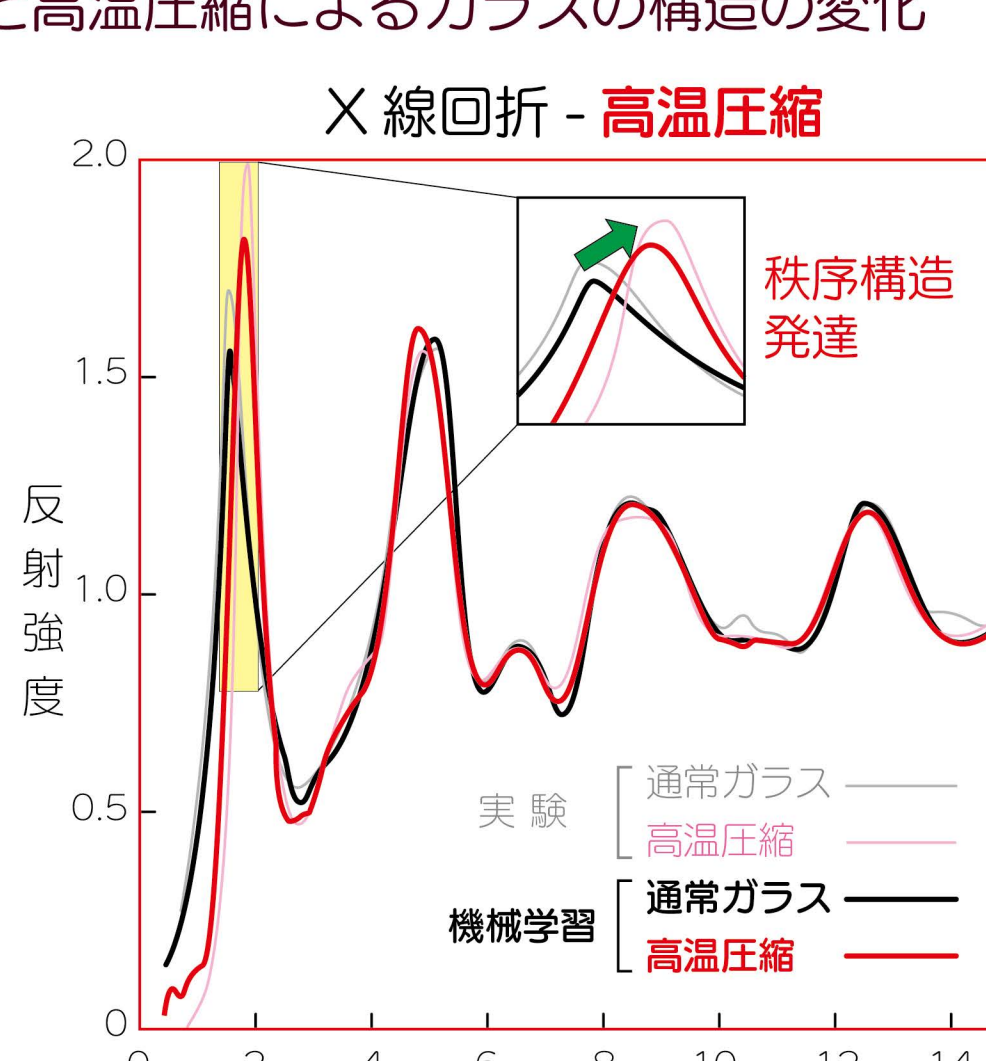
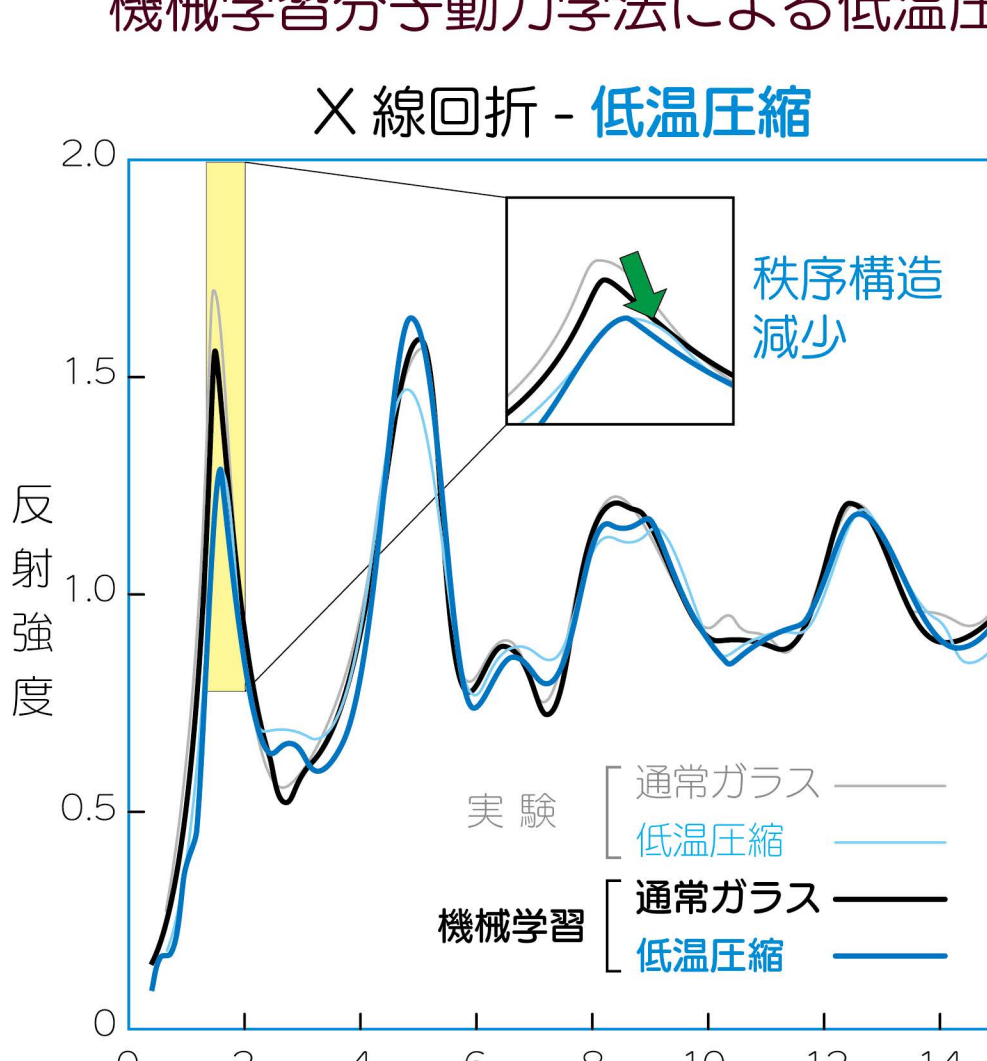
機械学習分子動力学法を適用
第一原理計算の結果を、機械学習を用いて学習
高精度な原子シミュレーションが可能に！

第一原理計算の原子数の限界を容易に超越
コンピュータ上でシリカガラスの構造を詳細に調査！



シミュレーションによる実験データの再現

ガラスの製造時に
数万気圧でガラスを圧縮・高密度化 ▶ 高密度シリカガラス
機能性の向上 (高屈折率 etc.)
機械学習分子動力学法による低温圧縮と高温圧縮によるガラスの構造の変化



機械学習分子動力学法は実験データを高精度に再現している
ピークの形状や位置だけでなく、圧縮の違いによる変化も再現

低温圧縮：秩序構造が減少
高温圧縮：秩序構造が発達

秩序構造の減少・発達と構造への影響

中距離の秩序構造の正体として
さまざまな仮説がある
「リング構造の繰り返し」の
その仮説の一つ

リング構造に着目して
解析したところ、
非常に確からしい確度で
ガラスの中距離秩序の
構造の説明が可能に！

低温圧縮
圧縮 圧縮
すべてのリングが
ゆがんで変形
リング間の周期性が乱れる
秩序が減少

高温圧縮
圧縮 圧縮
高温圧縮では大きいリングほど
形がつぶれて幅が均一化
大きなリングが
優先的に細長く変形
異なった大きさのリング間で
短い辺の長さがそろう
パターンがより明確に
秩序が発達

中距離の秩序構造の
とらえどころのない「秩序」の正体 = 「リング構造の幅」

今後の展開

今回解明したシリカガラスの
秩序構造の知見を活用

- ・秩序をもっと発達させる
方法の手がかりの探索
- ・光損失の少ない
光ファイバー素材の開発

大容量通信へ！

今回開発した
シミュレーション技術を活用

- ・複雑な原子構造を
コンピュータ上に再現
- ・温度・圧力等の条件を変えて
材料の機能をコンピュータ上で計算

より高機能な材料の開発を支援！

