

非周期系材料のトポロジー概念の確立とその制御

Establishment of the concept of topology and its control in disordered materials

目的 Purpose

ガラス・液体・アモルファスといった材料には結晶系材料のような周期性がない。そのため、構造を通して機能を理解することができないことから、材料設計が困難である。本研究では、新奇材料開発の知見となる非周期系材料のトポロジーという概念を確立し、その制御を行うことを試みた。

方法 Method

量子ビームを用いた回折実験、計算機シミュレーション、先端数学を組み合わせ、非周期系材料のトポロジーの概念の確立を試みた。そして、地球上でもっともありふれた物質の一つである、シリカ(SiO_2)に注目し、温度・圧力を制御することにより、非周期系材料の構造を制御することを試みた。

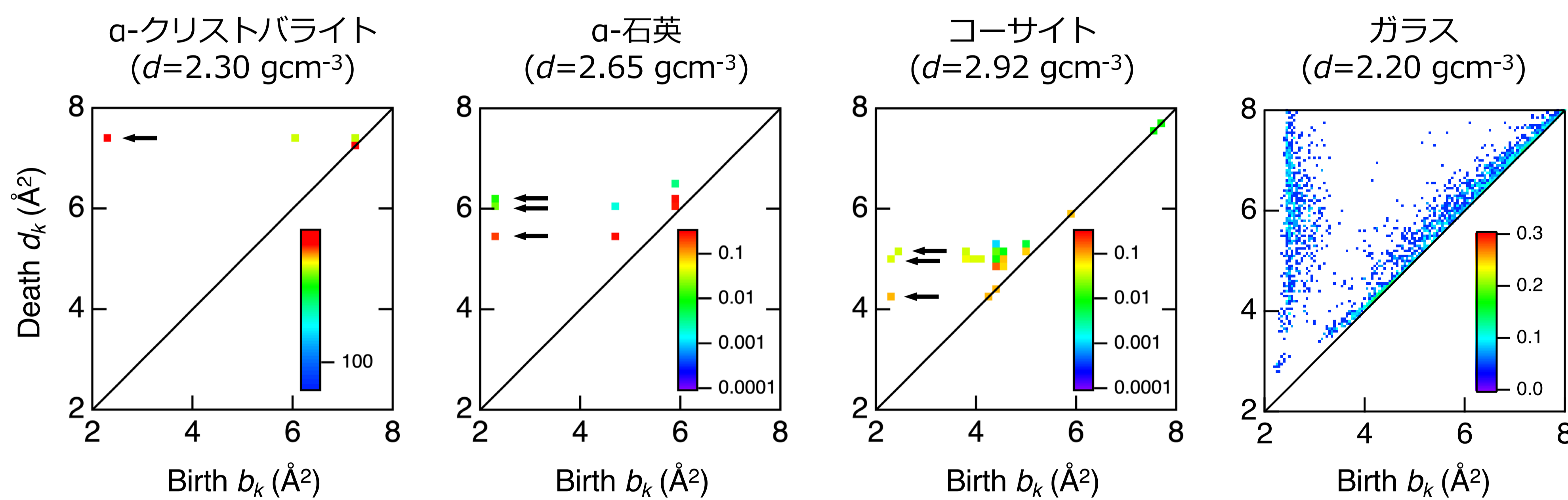
展望 Prospect

今回の研究により、温度・圧力を制御することによりシリカガラスの構造を自在に操ることができることを見出した。また、世界でもっとも結晶に近いシリカガラスを合成できることを見出した。本手法を SiO_2 以外の物質に適用すれば、割れないガラスや高性能な光ファイバーの創製が期待できる。

シリカ(SiO_2)のトポロジー

Topology in SiO_2

パーシステントホモロジー(PH)解析より抽出したシリカのSi原子のパーシステント図



シリカガラスにはdeath軸に沿った縦長のプロファイルが観測されるが、これは同じ SiO_4 四面体頂点共有を短範囲構造とする3つの結晶相のすべてのプロファイルを包括している

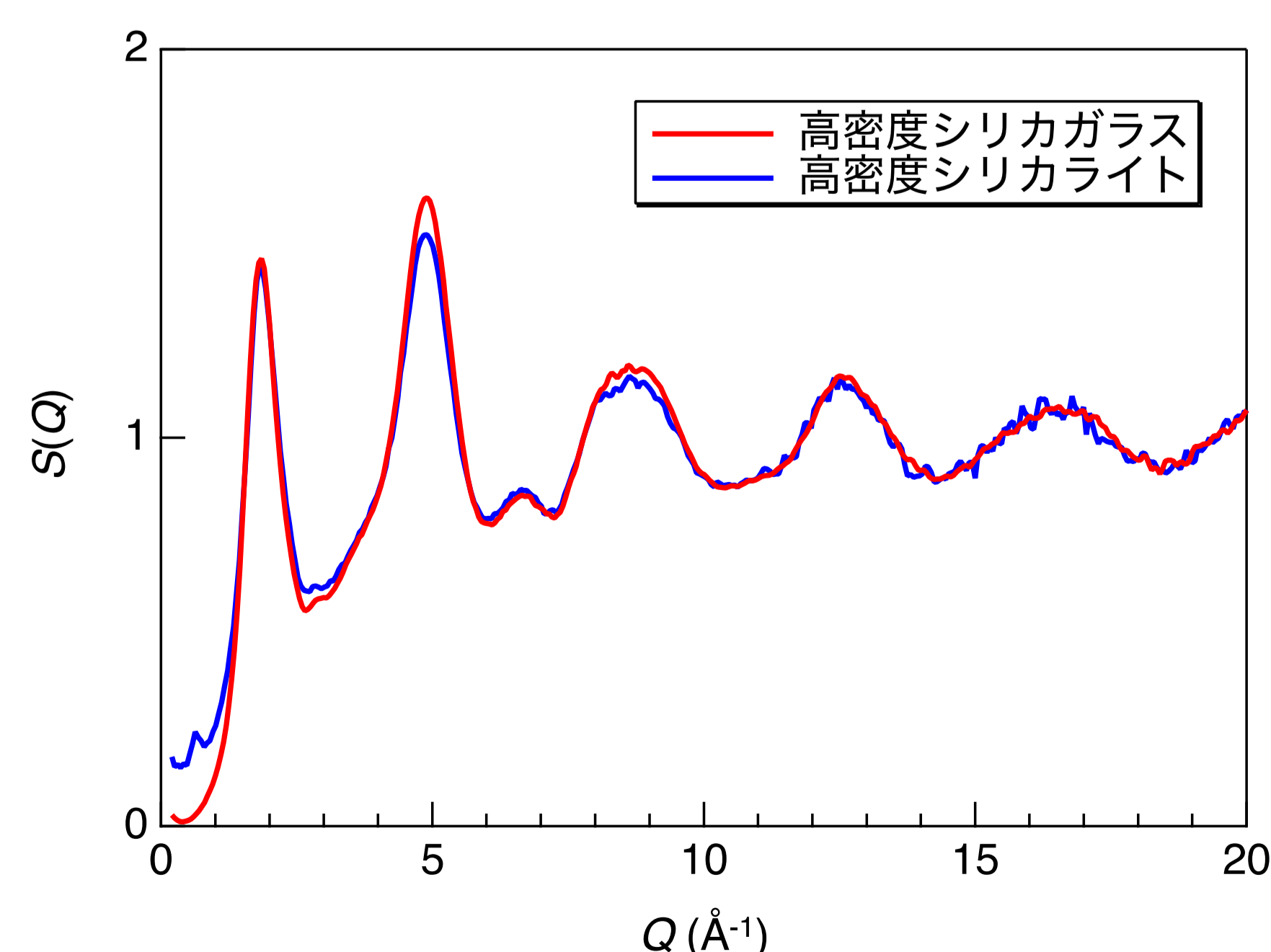
シリカのガラス形成能高さを特徴づけている

Y. Onodera et al., *J. Ceram. Soc. Jpn.*, **127**, 853 (2019).

常温・20GPaで圧縮後回収した SiO_2 ガラスと SiO_2 ゼオライト

Cold compressed SiO_2 glass and zeolite (silicalite)

X線回折から得られた構造因子 $S(Q)$



- ・シリカライトとシリカガラスを圧縮・回収したサンプルのX線回折パターンは類似
- ・シリカライトは永久高密度化しているのに対しシリカガラスの密度は時間とともに現象

両者のトポロジーは異なっている