

# 量子ビーム実験・構造モデリング・トポロジカル解析の 協奏による非晶質材料の構造物性研究

## Structure of Non-Crystalline Materials Revealed by a Complementary Use of Quantum Beam Experiment, Modelling, and Topological Data Analysis

小野寺 陽平<sup>1,2</sup>、小原 真司<sup>2,3,4</sup>、正井 博和<sup>5</sup>、平岡 裕章<sup>1,2</sup>、大林 一平<sup>6</sup>、  
平田 秋彦<sup>7</sup>、西山 宣正<sup>8</sup>、Philip S. Salmon<sup>9</sup>、Anita Zeidler<sup>9</sup>、増野 敦信<sup>10,2</sup>、  
井上 博之<sup>11</sup>、田原周太<sup>12,2</sup>、Henry E. Fischer<sup>13</sup>、尾原 幸治<sup>4</sup>

1 京大、2 NIMS、3 JST さきがけ、4 JASRI、5 AIST、6 RIKEN、7 早稲田大、  
8 東工大、9 Univ. Bath、10 弘前大、11 東大、12 琉球大、13 ILL

ガラス・液体・アモルファスといった非晶質材料は、結晶のような長周期的な構造秩序を持たず、回折パターンから原子の位置を一意的に決定することができない。そのため、非晶質の構造解析には古くから規格化された回折パターンのフーリエ変換によって得られる二体分布関数が用いられ、原子間距離や配位数といった平均化された短距離の構造情報の抽出や、密度が近い結晶構造を見立てた中距離秩序の推測がこれまでは行われてきた。しかし近年、J-PARC や SPring-8 といった大型量子ビーム実験施設の登場により非晶質の実験データが高いスループットで精度良く得られるようになり、また、シミュレーション技術の発達により実験データを再現する非晶質の 3 次元構造モデルが構築できるようになった。加えて、3 次元構造中のトポロジーを解析するための様々な解析ツールの登場により、これまでは非晶質の平均化された二体相関に潜んで抽出できなかつた構造秩序が解析可能になりつつある。

我々は、中性子および放射光 X 線といった量子ビームを中心とした実験データと逆モンテカルロ法<sup>1)</sup>・分子動力学計算による構造モデリングを組み合わせることで実験データを忠実に再現する非晶質材料の 3 次元構造モデルを構築し、トポロジカル解析を通してその構造と物性の相関を明らかにする研究に取り組んでいる。講演では、実用材料の母体ガラスである 2 元系の亜鉛リン酸塩ガラスが示す異常な熱膨張係数の構造的起源を見出した研究成果<sup>2)</sup>について報告する。さらに、もっとも典型的な非晶質材料であるシリカ(SiO<sub>2</sub>)ガラスの構造に対して先端数学理論を導入したパーシステントホモロジー法<sup>3,4)</sup>を適用し、非晶質構造に潜んだホモロジーを抽出し、ガラスの高密度化のメカニズムについて解析した結果を紹介する。

### 【参考文献】

- 1) R. L. McGreevy and L. Pusztai, *Mol. Simul.*, **1** (1988) 359.
- 2) Y. Onodera *et al.*, *Nat. Commun.*, **8** (2017) 15449.
- 3) Y. Hiraoka, T. Nakamura *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **133** (2016) 7035.
- 4) 平岡裕章、西浦廉政、*日本物理学会誌* **72** (2017) 632.