

量子ビーム実験・構造モデリング・現代数学の融合による 乱れた構造に潜んだ秩序の抽出:宇宙実験との協奏へ向けて

小原真司: NIMS、小野寺陽平: 京都大/NIMS、大林一平: 東北大、増野敦信: 弘前大/NIMS
田原周太: 琉球大/NIMS、平岡裕章: 東北大・NIMS、石川毅彦・田丸晴香: JAXA

われわれはガラス・液体・アモルファスといった「乱れた構造」を持つ材料に注目し、この構造に潜んだ秩序の抽出を行い、最終的には構造と物性の相関を解明することを目的とする。そのために、大型量子ビーム施設である SPring-8 と J-PARC を横断的に利用することにより、様々な非晶質材料の放射光 X 線・中性子回折データの取得を試みる。そして、「京」をはじめとする大型計算機を利用するグループとの連携により、実験データを忠実に再現する構造モデルを理論計算とデータ科学を組み合わせる「究極のデータ駆動型構造モデリング」に取り組む。さらに、得られた構造モデルに対して、現代数学に基づいたトポロジー解析[1]を適用し、非晶質の乱れた構造に潜んだトポロジーを特徴量として抽出し、これに基づいて回折パターンに現れるピークの意味を理解する。図 1 にアモルファス Si とシリカ(SiO₂)ガラスの回折パターンを示す。両材料はネットワーク構造を作ることが知られている。黒矢印で示したシリカガラスに観測される鋭い回折ピークはアモルファス Si には存在しないことが分かるが、この差をトポロジーから説明する。試験的に行った解析結果[2]を当日報告する。

ここで得られた手法を用いて、困難とされる液体の構造・物性研究に挑戦するのが次のステップである。液体(流体)固有の物性として粘性があげられるが、その起源は詳しくは知られていない。それは、とくに工業的に重要なガラスになる高温酸化物液体の粘性の計測そのものが困難であることに他ならない。こういった状況を打破するため、JAXA では、2,000°C以上の高温融体を容器なしで静電気によって保持する国際宇宙ステーション(ISS)用静電浮遊炉(ELF)を開発した。図 2 に ELF の外観と超高温で浮遊する酸化物液体の様子を示す。この液体を強制的に振動させて減衰する時間を計測することにより粘性の測定が行える。一方、地上では、量子ビーム実験を行い、データ駆動型構造モデリング、トポロジカル解析から液体の粘性の起源を明らかにする。

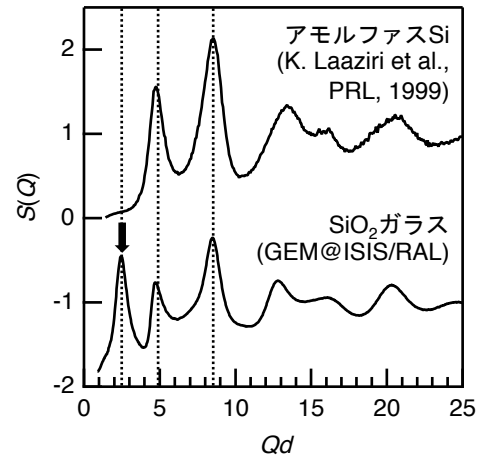


図 1 アモルファス Si と SiO₂ ガラスの回折データ

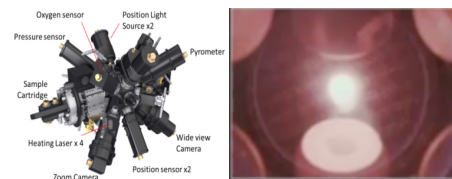


図 2 ELF の外観図(左)と 2100°Cで浮遊する酸化物融体(右)

参考文献

- [1] Y. Hiraoka et al.; PNAS, **113**, 7035 (2016).
- [2] Y. Onodera et al.; Nat. Commun., **8**, 15449 (2017).

関連 web

<http://ishikawa.isas.jaxa.jp/index.html>