

リン酸塩ガラスにおけるヤング率：最密充填モデルによる予測

A prediction of Young's modulus of phosphate glasses:

Applying the rigid unit packing fraction model

愛媛大院理工¹, °清水 達貴¹, 斎藤 全¹

Ehime Univ.¹, °Tatsuki Shimizu¹, Akira Saitoh¹

E-mail: asaito@ehime-u.ac.jp

Makishima らは、構成する配位多面体のイオン充填率と各酸化物の解離エネルギーから、ケイ酸塩ガラスのヤング率の予測式を報告している[1]。これに対して、Okamoto らは、3 元系亜鉛スズリン酸塩ガラスにおいて、X 線回折および核磁気共鳴スペクトルから得られた、酸化スズと酸化亜鉛の酸素配位数とリン酸 4 面体構造 (Q^n : n は架橋酸素数) 情報[2]を用いてヤング率を予測している[3]。2 元系スズリン酸塩ガラスは、含有する酸化スズの割合が多ければリン酸は短鎖状[4]になるのに対して、上記の亜鉛スズリン酸塩ガラスでは、リン酸の濃度を変えずに酸化スズを酸化亜鉛で置換したときに鎖状構造が短くなる[2]。置換によってカチオンに対するリン酸鎖状構造の配位様式が変わることを示唆している。

Rigid Unit Packing Fraction(RUPF)モデル[5]では、ケイ酸塩ガラスのヤング率の予測に用いるために、Makishima らの予測式のうち、イオン充填率が最密になるように取り扱っている。さらに、Network former と modifier をシミュレーションできる。

本発表では、リン酸塩ガラスのヤング率を RUPF モデルから予測した。この際、リン酸 4 面体 Q^n の割合と酸素配位数からイオン充填率を見積もった。

Fig. 1 に、 $x\text{ZnO}-(67-x)\text{SnO}-33\text{P}_2\text{O}_5$ ガラスのヤング率を、牧島-マッケンジー(M-M)モデルおよび RUPF 法から予測した値と比較している。M-M モデルはリン酸四面体の分子容を小さく、一方で酸化スズと酸化亜鉛の分子容が大きく見積もられるために、ヤング率が概ね高値になる(Simu. 1)。これに対して、RUPF モデルではリン酸四面体の分子容が大きくなる一方、酸化スズでは小さい分子容を仮定することによって実測値にフィットする(Simu. 3)。

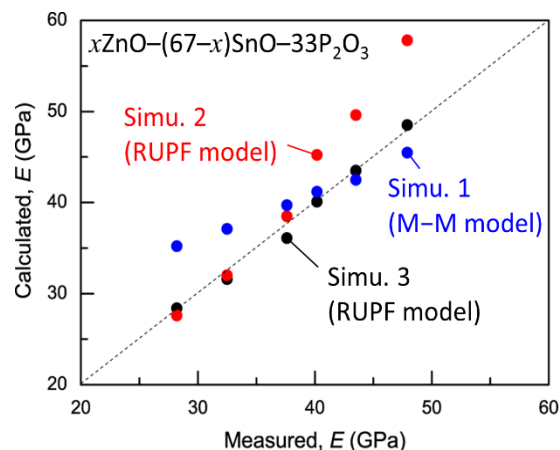


Fig. 1. Calculated and measured values of Young's modulus in M-M and RUPF models for ternary $x\text{ZnO}-(67-x)\text{SnO}-33\text{P}_2\text{O}_5$ glasses.

[参考文献] [1] A. Makishima and J. D. Mackenzie, J. Non-Cryst. Solids, **12**, 35 (1973). [2] U. Hoppe, A. Saitoh, G. Tricot, P. Freudenberger, A.C. Hannon, H. Takebe, and R. K. Brow, J. Non-Cryst. Solids, **492**, 68 (2018). [3] T. Okamoto, A. Saitoh, P. Freudenberger, H. Takebe, and R. K. Brow, J. Non-Cryst. Solids, **513**, 44 (2019). [4] U. Hoppe, G. Walter, R. Kranold, and D. Stachel, J. Non-Cryst. Solids, **263**, 29 (2000). [5] Y. Shi, A. Tandia, B. Deng, S. R. Elliott, and M. Bauchy, Acta Mater., **195**, 252 (2020).