

リン酸塩ガラスの弾性定数予測に関する組成パラメーター

A prediction of elastic constants in phosphate glasses using compositional parameters

愛媛大工¹, 坂田 真樹¹, 富原 佑介¹, [○]斎藤 全¹

Ehime Univ.¹, Masaki Sakata¹, Yusuke Tomihara¹, [○]Akira Saitoh¹

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

高ヤング率・高剛性率なガラス材料の開発には、タフな酸化物ガラスを選択する必要がある。これら弾性定数の大きさは、酸化物ガラスを構成する多面体の配置に、あるいは多面体中の原子の結合強度の大きさに依存している。我々はこれまでに、亜鉛スズリン酸塩ガラスで、牧島－マッケンジーモデル[1]を根拠として、酸素配位数やリン酸四面体ユニットの存在割合の構造情報からイオン充填率を見積り、実測値と比較することで、弾性定数に関わる組成パラメーターを提示している[2]。そして、亜鉛スズリン酸塩ガラスに限らず、バリウムスズリン酸塩、あるいはバリウム亜鉛リン酸塩ガラスに対しても共通な組成パラメーターを求めた。これらの3元系リン酸塩ガラスの弾性定数は、含有するリン酸濃度をメタ (50 mol%) からピロ (33 mol%) の組成域で測定されている。組成パラメーターを用いると、あらかじめ、未知かつ広範なリン酸塩ガラスの弾性定数を見込むことができる。

ガラス試料は通常の溶融凝固法で、アルミナルツボを用いて作製した。SnO を含む組成では、溶融雰囲気アルゴン下で、カーボンルツボを用いて作製した。弾性定数は市販の超音波計を用いて取得した。

Fig. 1 に、実測したヤング率、剛性率と、組成パラメーターを用いて予想した値を比較して示す。4元系 BaO-SnO-ZnO-P₂O₅ ガラスについて、対象とした6組成における実測値と予想値との乖離は見られない。

計算に用いた組成パラメーターは、原子のイオン半径[3]から求めたユニット当たりのモル体積と、既報の解離エネルギー[4]から構成される。さらに広範な酸化物に関する組成パラメーターを用いることで、多成分系のリン酸塩ガラスの弾性定数の予測できると考えられる。

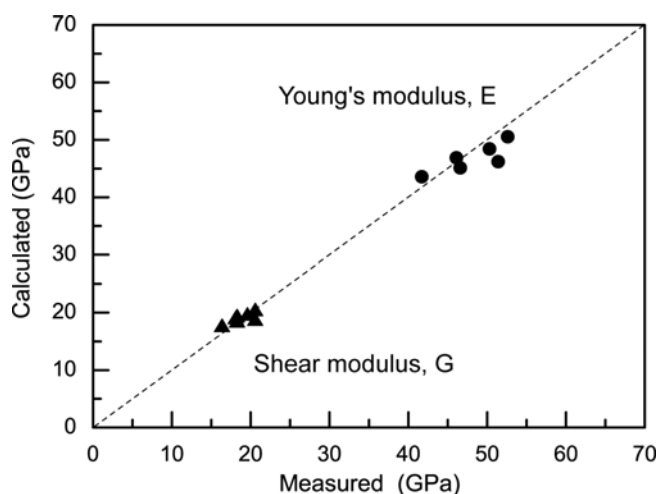


Fig. 1. Young's (circles) and shear (triangles) moduli for measured and calculated values for quaternary BaO-SnO-ZnO-P₂O₅

[参考文献] [1] Makishima and Mackenzie: J. Non-Cryst. Solids, **12**, 35 (1973). [2] Okamoto *et al.*: J. Non-Cryst. Solids, **513**, 44 (2019). [3] Shannon and Prewitt: Acta. Cryst., **B25**, 925 (1969). [4] Inaba *et al.*: J. Am. Ceram. Soc., **82**, 3501 (1999).