

令和元年6月5日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2016～2018

課題番号：16H04215

研究課題名（和文）超均質ガラス作製に向けてのガラス融液のソレー効果解明

研究課題名（英文）Investigation of Soret effect in glass melts for producing extremely homogeneous glass

研究代表者

平尾 一之（Hirao, Kazuyuki）

京都大学・工学研究科・名誉教授

研究者番号：90127126

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,000,000円

研究成果の概要（和文）：本研究ではガラス形成酸化物融液のソレー効果の理論モデルを初めて提案した。また、二成分ガラス融液のソレー係数を初めて測定し、理論モデルで実験値を再現することでモデルの有効性を実証した。さらに、温度勾配下に置かれた多成分ケイ酸塩融液において、主要成分であるSiO<sub>2</sub>成分が高温側に集まることを、非平衡分子動力学計算と上記モデルを用いて説明することに成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ソレー効果は温度勾配を駆動力とした物質の拡散現象であり、様々なガラス溶融プロセスにおいて融液組成の不均一を生じさせる因子であるため、その機構の解明は工業的に重要である。本研究結果は、温度勾配下における多成分ガラス融液の拡散挙動を予測・理解するための学術的な基礎であり、溶融炉内の組成分布のより精密な予測につながるため、工業的に意義がある。

研究成果の概要（英文）：A new model, called adjusted Kempers model, is proposed to quantitatively predict Soret coefficients in binary glass-forming oxide melts. We experimentally measured the Soret coefficient of binary glass-forming oxide melts. The new model can reproduce the experimental value. By using nonequilibrium molecular dynamics simulation and new model, we revealed that the partial molar enthalpy is the main factor to determine the migration direction of SiO<sub>2</sub> component.

研究分野：無機材料化学

キーワード：ガラス ガラス融液 酸化物融液 温度勾配 ソレー効果 拡散 分離

~~A7D7~~  
~~26b~~  
~~1611~~  
~~11~~  
~~61M~~  
~~81~~  
~~106~~

02  
 21811  
 □

1 □ 22

11 □  
 8 □  
 bGK #1 FLKS  
 ö (K%fi  
 GKS  
 Y bwKKS

Kempers #1

(11Na<sub>2</sub>O-89B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (mol %))  
 CaO-SiO<sub>2</sub>

#1

2 > 2BY  
 & 1WOB  
 GWS

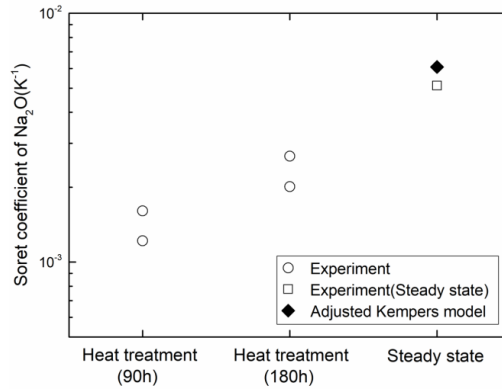
#1  
 Kempers  
 ( 1) FLKS

$$\sigma_{\text{Soret},1}^{\text{adjusted Kempers}} = \frac{v_1 v_2}{v_1 n_1 + v_2 n_2} \frac{\frac{h_2 - h_2^{\text{PL}}}{v_2} - \frac{h_1 - h_1^{\text{PL}}}{v_1}}{T n_1 \frac{\partial(\mu_1 - \mu_1^{\text{PL}})}{\partial n_1}}$$

1. G Kempers

GG[ 1 2 cB( 1B( 2 QM  
 PL c( P  
 T c)/P  
 A8:  
 (b4

& 2 > (K%fi (11Na<sub>2</sub>O-89B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (mol %))  
 bG2)/P #1  
 (W 1) #1  
 19%WS



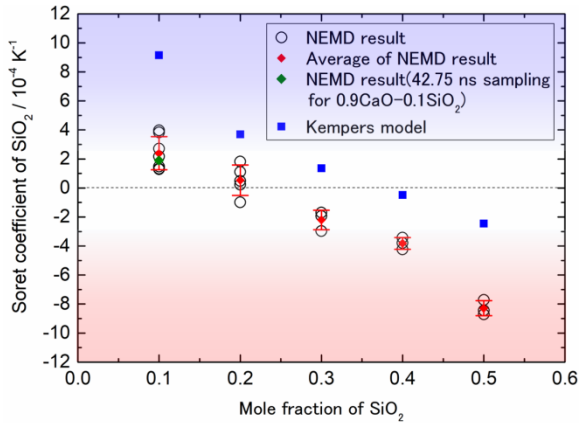
W 1. #1

rSP Sub9m28KSI v0

& 3 > CaO-SiO<sub>2</sub> (W 2) %  
 KKS (W 2) %  
 K332G

8/ fE  
 SiO<sub>2</sub>B  
 8: I [ MKS

\8 M+  
 SiO<sub>2</sub>



W 2. #1 = \ 8 / (0) " b 30

rS GbBY Sub 0128KSI v00

3 > z \$ t e ...  
7 \$ 1 0 E 5 6

□ Masahiro Shimizu, Alistair N. Cormack, Li aoyuan Wang, Masayuki Nishi, Kazuyuki Hirao, Masahiro Shimizu, Jun Matsuoka, Hiroshi Kato, Takeyuki Kato, Masayuki Nishi, Heidy Visbal, Kohji Nagashima, Masaaki Sakakura, Yasuhiro Shimotsuma, Hiroyuki Itasaka, Kazuyuki Hirao, and Kiyotaka Miura, *Ceramic Society of Japan*, 102, 4431-4439 (2019), 1w

r Masahiro Shimizu, Jun Matsuoka, Hiroshi Kato, Takeyuki Kato, Masayuki Nishi, Heidy Visbal, Kohji Nagashima, Masaaki Sakakura, Yasuhiro Shimotsuma, Hiroyuki Itasaka, Kazuyuki Hirao, and Kiyotaka Miura, *Ceramic Society of Japan*, 102, 4431-4439 (2019), 1w

s Masahiro Shimizu, Shohei Hosoya, Takeyuki Kato, Jun Matsuoka, Hiroshi Kato, Masayuki Nishi, Kazuyuki Hirao, Yasuhiro Shimotsuma, and Kiyotaka Miura, *Journal of the Ceramic Society of Japan*, 126, 997-1004 (2018), 1w

t Masahiro Shimizu, Hiroshi Kato, Masayuki Nishi, Daisuke Hanakawa, Kohji Nagashima, Heidy Visbal, Hiroyuki Itasaka, Masaaki Sakakura, Yasuhiro Shimotsuma, Kiyotaka Miura, and Kiyotaka Miura, *Ceramic Society of Japan*, 126, 997-1004 (2018), 1w

u 9 / , NEW GLASS , 2017 " 3 v , Vol. 32, pp. 19-23, 1!

□ Masahiro Shimizu, *F Molecular dynamics simulation of the Soret effect in CaO-SiO2 glass melt*, CerSJ-GOMD Joint Symposium, 2016.11.14-2016.11.14, Kyoto University  
r 7 / , 2016.12.09-2016.12.09, 1w  
s 9 / , 2017 " , 2017.03.18-2017.03.18, 1w  
t 7 / , 2017.03.20-2017.03.20, 4w  
u. (6 , 2017 " , 2016.09.08-2016.09.08, 1w  
v 9 / , CaO-SiO2 / % , 2017 " , 4w  
¥

Na<sub>2</sub>SiO<sub>3</sub> / %Si Si - O<sub>2</sub> 2018 " 2018 "  
 2018 " 2018 "  
 40% 40%  
 60Y-40In 2017 40  
 y. (20% 40%  
 7 G, 1% 20% 2017 "  
 z. (20% 40%  
 60Y-40In 2017 "  
 LiPO<sub>3</sub> 60% 70% 2018 " 2018 "  
 CaO-SiO<sub>2</sub> / %Si b (0%  
 15 G, 10% 20% 2018 "  
 Na<sub>2</sub>SiO<sub>3</sub> / %Si Si - O<sub>2</sub> 2018 " 2018 "  
 Qn (x<sub>2</sub>s b<sub>9</sub> 5 G, 1% 20% Sub 40%  
 31 G 2018 "  
 7/6 B4 10% 50% b9 (0% 1%  
 (1n ) 2018 "  
 Masahiro Shimizu, F Experimental, Molecular dynamics, theoretical approach to the  
 Soret effect in sodium borate glass meltsG , ICG Annual meeting, 2018 "

W 0 6  
 S 0 6

\$  
 \$  
 \$  
 \$  
 \$  
 \$  
 \$

N 0 6  
 \$  
 \$  
 \$  
 \$  
 \$  
 \$  
 \$

Q b U  
 D.  
<http://133.3.250.213/masahiro-shimizu>

4> %2))°  
 (1)%2(\*  
 %2( 0YG  
 8 Masayuki Nishi  
 684  
 48  
 81  
 2 8 50402962  
 28 7

Masahi ro Shi mi zu

~~0684~~

~~480~~

SM

2

8

60704757

(2)%2 \*

%2

~~8~~

~~d~~

↓

%2 c %2\* b 0 \ 2i 8Z

Mvb[QbSu

%2 b

x %2BÝ b 9t..

\_

~~8Z~~

\ b 0[3:.. \_ ö YCvbçCQb

%2BÝ \_ 6i M

0b0 x 2i

c %2¶

\_ IrM