

INTERGLAD 利用例

本項には、特性データの検索、解析、特性予測および材料設計（組成最適化）、また構造データの検索、解析の基本的かつ具体的な利用例を示します。

目次

特性データの検索と解析

1. 複雑な組成条件による検索 — リン酸塩ガラスの熱膨張係数
2. 特性の三角図解析 — $\text{SiO}_2\text{-TiO}_2\text{-Na}_2\text{O}$ 系ガラスの熱膨張係数
3. 特性間の相関の XY プロット解析 — 屈折率とアッペ数
4. 高温特性補間機能を活用した検索 — ホウケイ酸塩ガラスの高温粘度
5. 商品検索 — FRP 用高強度ガラス繊維

特性予測（特性計算式）

6. 特定組成のガラスの特性予測（特性計算式） — ホウケイ酸塩ガラス

特性予測・組成最適化（重回帰分析）

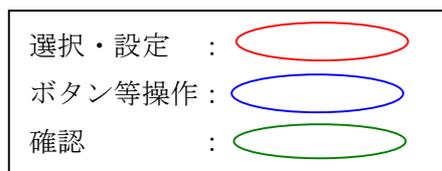
7. 特性についての予測式の導出（重回帰分析） — 亜鉛ケイ酸塩ガラスの密度
8. 特性予測（重回帰分析） — 亜鉛ケイ酸塩ガラスの密度
9. 組成最適化（重回帰分析） — 特定密度の亜鉛ケイ酸塩ガラス
10. 特性予測（重回帰分析 3 次式） — ホウケイ酸塩ガラスの屈折率
11. 材料設計（組成最適化）（重回帰分析 1 次式）
— 特性を特定したソーダアルミノケイ酸塩ガラス

構造データの検索と解析

12. 組成と構造と相関調査 — SiO_2 量と架橋酸素の割合
13. 構造因子間の相関調査 — アルカリケイ酸塩ガラスの Q^2 と非架橋酸素割合

本項の記載方法について

- 1) 各画面で操作等が必要な箇所に下記の色別の囲みマークを記しています。

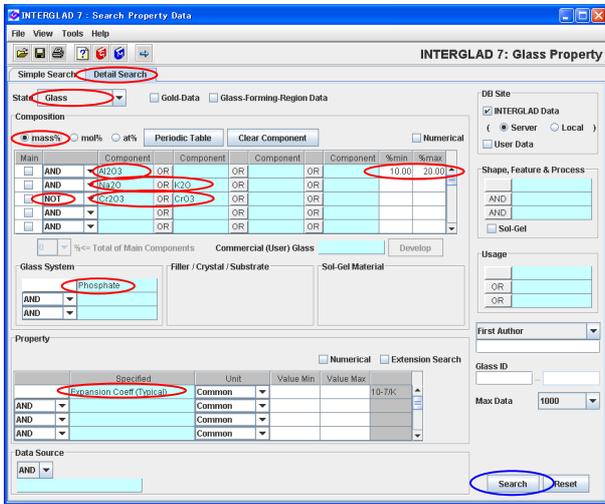


- 2) 操作方法の詳細については、各項目の冒頭に記したマニュアル参照箇所をご覧ください。
- 3) 検索結果のデータ件数およびデータ内容は INTERGLAD のバージョンにより変わりますので、本項記載データは参考としてください。
(本例では Ver.7.1.3.2.01~7.2.1.0.05 を使用しています)

1. 複雑な組成条件による検索 - リン酸塩ガラスの熱膨張係数

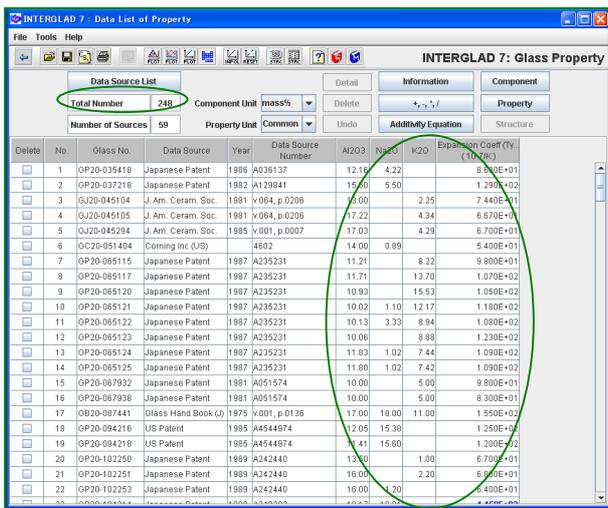
リン酸塩ガラスで Al₂O₃ を 10-20 mass% 含み、Na₂O あるいは K₂O を含み、Cr の酸化物を含まない組成の線熱膨張係数データを検索します

1) 検索条件設定 (特性(詳細)検索画面) → 検索実施



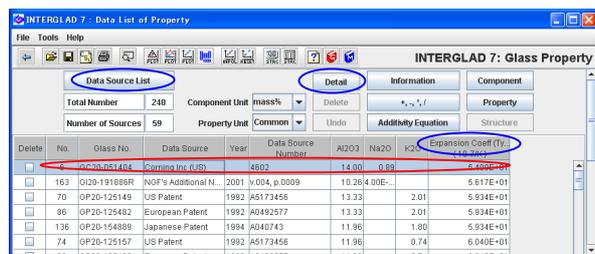
- 単位のデフォルトが mol% のため、mass% を選択します。
- Na₂O、K₂O は同一行に設定します。この場合、周期表で同時には設定できません。
- Cr₂O₃、CrO₃ は周期表での Cr 選択で一度に設定できません。
- 検索条件設定の順序は自由です。
- 検索条件が複雑になるほど検索に時間がかかります。
- 本例の場合、特性項目を Expansion Coeff (Typical) としますが、中分類 (太字) の Linear Expansion Coeff としても同じ結果となります。

2) 検索結果 (特性検索結果画面)



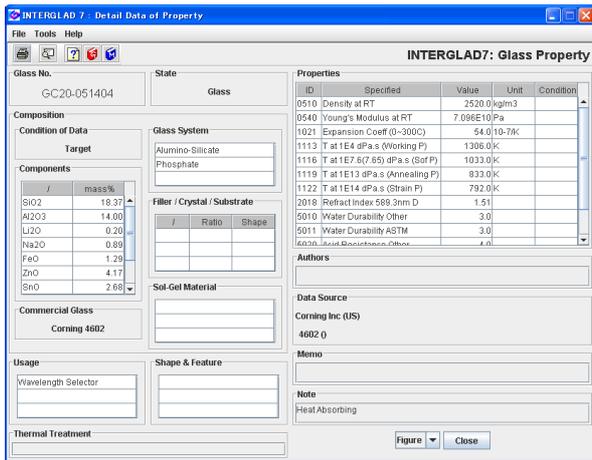
- 検索ガラス数 (Total Number) に注目します。
- 検索条件に設定した組成成分、特性データ他の表が現れます。
- 必要に応じて三角図、XYプロットなどの解析を行います。

3) 検索結果の利用

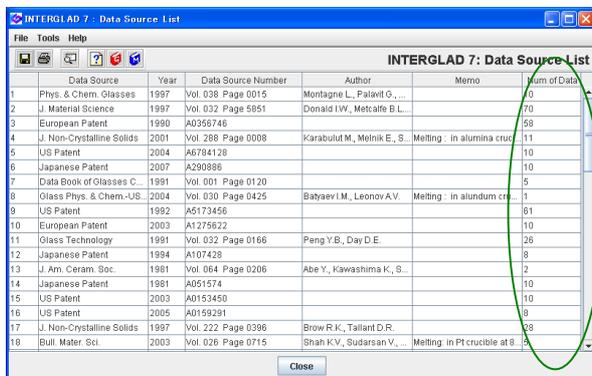


- 各項目毎にソート (並び替え) が可能です。
[Shift] キーを押しながら表の項目ラベルをクリックします。
- 本例では熱膨張係数で昇順にソートし、熱膨張係数が最小のガラスを選択し、[Detail] ボタンをクリックし、詳細データを調べます。

特性詳細画面



出典リスト画面

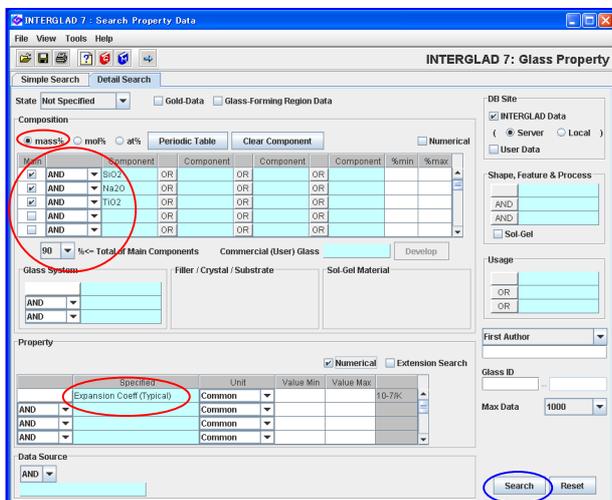


- また、検索結果画面より [Data Source List] ボタンをクリックし、出典リスト画面を開き、各出典毎のガラス数をチェックします。
- [Num of Data] 欄が各出典毎のガラス数です。

2. 三角図上に特性値をプロット - SiO₂-TiO₂-Na₂O 系ガラスの熱膨張係数

SiO₂-TiO₂-Na₂O を主成分とするガラスについて、組成と熱膨張係数との関係を調べます

1) 検索条件設定 (特性(詳細)検索画面) → 検索実施



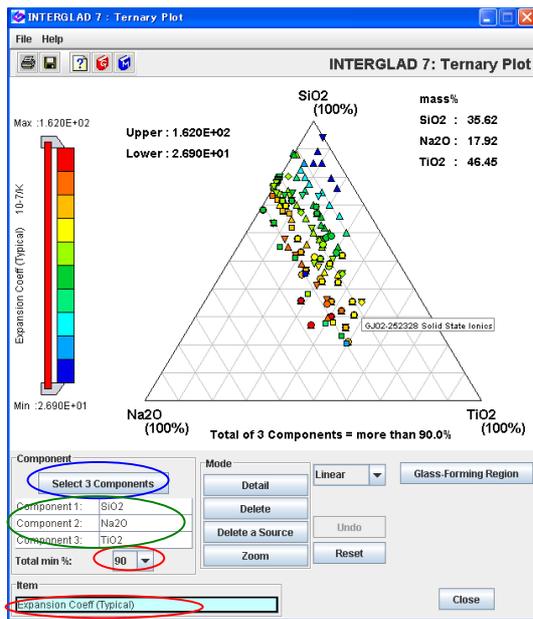
- 3成分合計を 90 mass%以上に設定します。
- 熱膨張係数はデータが集まりやすい Expansion Coeff (Typical)を選択します。

2) 検索結果 (特性検索結果画面)

No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	SiO2	Na2O	TiO2	Expansion Coeff (Typical) (10 ⁻⁷ /K)
1	OB02-006032	Handbook of Glass...	1986	v.001, p.0183	67.08	15.21	17.71	8.400E+01
2	OB02-006033	Handbook of Glass...	1986	v.001, p.0183	51.85	15.56	32.58	1.100E+02
3	OB02-006034	Handbook of Glass...	1986	v.001, p.0183	49.04	20.56	30.40	1.120E+02
4	OB02-006035	Handbook of Glass...	1986	v.001, p.0183	35.56	20.57	43.87	1.080E+02
5	OB02-006036	Handbook of Glass...	1986	v.001, p.0183	42.29	21.44	38.27	1.160E+02
6	OB02-006037	Handbook of Glass...	1986	v.001, p.0183	69.61	23.38	6.99	1.100E+02
7	OB02-006038	Handbook of Glass...	1986	v.001, p.0183	50.88	22.51	28.81	1.070E+02
8	OB02-006039	Handbook of Glass...	1986	v.001, p.0183	30.71	22.63	48.66	1.150E+02
9	OB02-006040	Handbook of Glass...	1986	v.001, p.0183	58.00	25.69	18.31	1.180E+02
10	OB02-006041	Handbook of Glass...	1986	v.001, p.0183	42.61	26.03	31.36	1.160E+02
11	OB02-006042	Handbook of Glass...	1986	v.001, p.0183	53.28	26.93	19.80	1.270E+02

• 200 件が抽出されます。

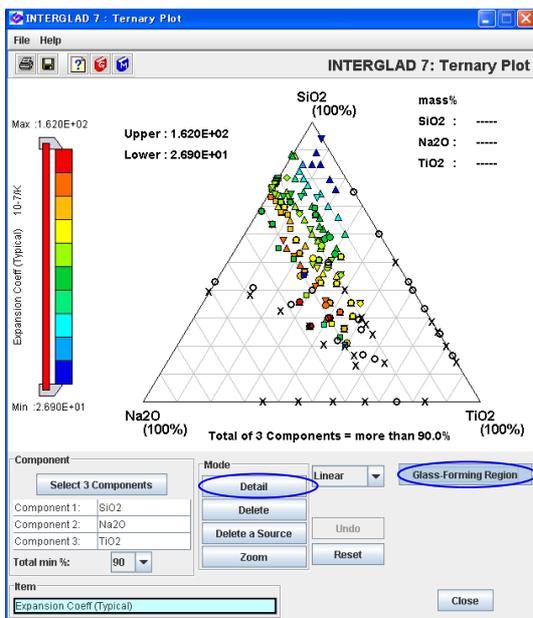
3) 三角図表示



• 三角図アイコンより三角図を表示し、[Select 3 Component]ボタンをクリックし、SiO₂、TiO₂、Na₂Oの3成分を選択し、合計量として90%、表示項目としてExpansion Coeff (Typical)を選択します。

• 各プロット点の色により熱膨張係数の高低が一覧でき、三角図の中央付近の組成のガラス(赤色)が最も熱膨張係数が高く、右上方向に行く(SiO₂ 100%に近づく)ほど低くなる傾向があることがわかります。

• 各点の出典は、各点にマウスを当てると吹き出しに現われます。また、各点の詳細画面は[Detail]ボタンをクリックしてボタンをアクティブにした上で、点をクリックすることにより開き内容を確認することができます。

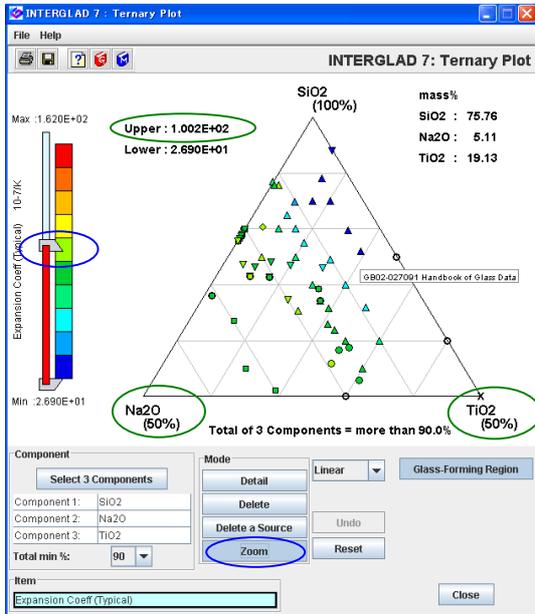


• [Glass-Forming Region]ボタンをクリックすることによりガラス化範囲データを表示することができます。

• ガラス化範囲データの○(ガラス化する)、×(ガラス化しない)の間に境界線があると考えられます。このガラス化範囲データはあくまでも3成分の和が100%の場合のデータであるため、3成分の和が90%以上としてプロットされたこの例の場合、ガラス化範囲データに当てはまらないデータもあるかもしれません。

• なお、各点がガラス化しているかどうかは詳細画面のStateで確認できます。

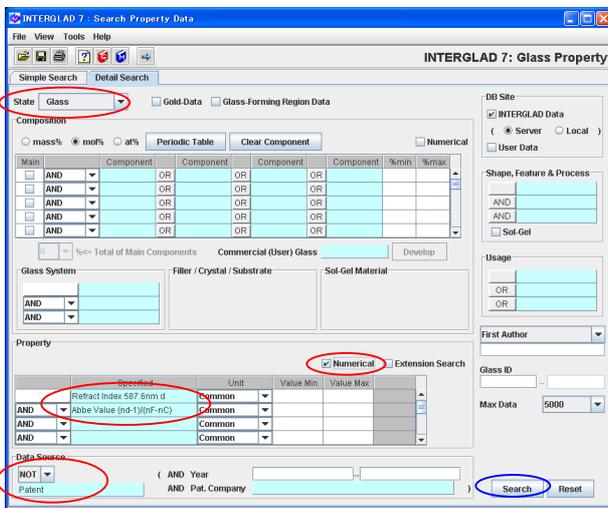
• また、ガラス化範囲データの各点の出典もプロット点と同様に[Detail]ボタンを使って確認することができます。



- また、画面左のスライダーを動かすことにより、三角図中の点の特性値範囲を変えることができます。左図の例は熱膨張係数を $100 \times 10^{-7}/K$ 以下のみとし、さらに [Zoom] ボタンにより SiO₂(100%)、Na₂O(50%)、TiO₂(50%)の三角図としたものです。

3. 特性間の相関の XY プロット解析 — 屈折率とアッペ数 ガラスの屈折率とアッペ数の関係を調査します

1) 検索条件設定 (特性(詳細)検索画面) → 検索実施



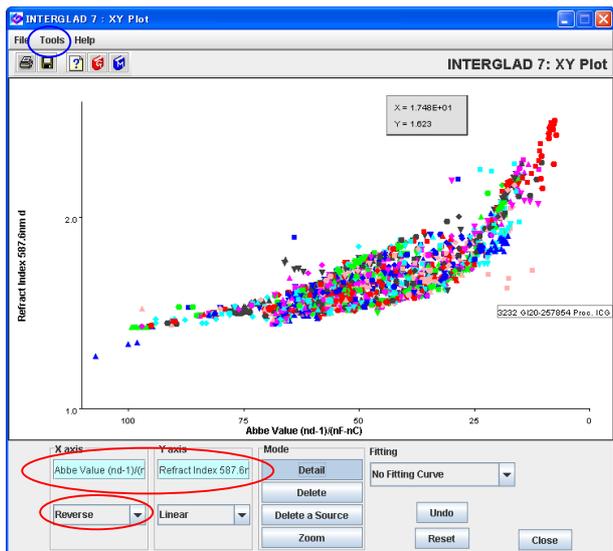
- ガラス状態として Glass を選択します。
- ガラスの屈折率には色々な波長の光によるデータがありますが、この例では代表的な He の d 線(587.6nm)のデータを抽出します。
- アッペ数の種類も複数ありますが、屈折率の N_{nd} に対応した $(n_d - 1)/(n_F - n_C)$ を選択します。
- 特性数値データのみを選択する [Numerical] チェックボックスにチェックを入れます。
- 出典としては、Patent を除きます。

2) 検索結果 (特性検索結果画面)

Delete	No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	Refract Index 587.6	Abbe Value (nd-1)
<input type="checkbox"/>	1	0J95-008826	Glastech. Ber.	1987	v.060, p.0234	1.502	6.566E+01
<input type="checkbox"/>	2	0J95-008827	Glastech. Ber.	1987	v.060, p.0234	1.502	6.630E+01
<input type="checkbox"/>	3	0J95-008828	Glastech. Ber.	1987	v.060, p.0234	1.503	6.652E+01
<input type="checkbox"/>	4	0J95-008829	Glastech. Ber.	1987	v.060, p.0234	1.502	6.685E+01
<input type="checkbox"/>	5	0J95-008830	Glastech. Ber.	1987	v.060, p.0234	1.503	6.670E+01
<input type="checkbox"/>	6	0J95-008831	Glastech. Ber.	1987	v.060, p.0234	1.503	6.659E+01
<input type="checkbox"/>	7	0J95-008832	Glastech. Ber.	1987	v.060, p.0234	1.504	6.695E+01
<input type="checkbox"/>	8	0J95-008833	Glastech. Ber.	1987	v.060, p.0234	1.504	6.722E+01
<input type="checkbox"/>	9	0J95-008834	Glastech. Ber.	1987	v.060, p.0234	1.503	6.723E+01
<input type="checkbox"/>	10	0J01-014872	J. Ceram. Soc. Japan	1985	v.093, p.0490	1.482	6.750E+01
<input type="checkbox"/>	11	0B03-017328	Handbook of Glass.	1987	v.00C, p.0910	1.611	5.350E+01
<input type="checkbox"/>	12	0B03-017330	Handbook of Glass.	1987	v.00C, p.0910	1.621	5.320E+01
<input type="checkbox"/>	13	0B03-017331	Handbook of Glass.	1987	v.00C, p.0910	1.637	5.230E+01
<input type="checkbox"/>	14	0B03-017332	Handbook of Glass.	1987	v.00C, p.0910	1.644	5.190E+01
<input type="checkbox"/>	15	0B03-017333	Handbook of Glass.	1987	v.00C, p.0910	1.663	5.030E+01
<input type="checkbox"/>	16	0B03-017334	Handbook of Glass.	1987	v.00C, p.0910	1.661	5.190E+01

- 3302 件のデータが抽出されます。

3) XY プロット解析



- [XY Plot]アイコンより、XY プロットを作成します。3302件のデータがプロットされ登録されているガラスのアッベ数 $(n_d - 1)/(n_f - n_c)$ と屈折率 n_d の分布を一覧できます。
- 本図ではX軸のアッベ数について、スケールをプルダウンメニューにより倒置形(Reverse)(左の方の数値が大きい)としています。また、Tools/Option より、横軸、縦軸の範囲、軸表示をわかりやすいよう変換しています。

4. 高温特性補間機能を活用した検索 — ホウケイ酸塩ガラスの高温粘度

ホウケイ酸塩ガラスについて、700°Cの粘度データを検索します

<マニュアル第3章 B、C.3、第4章 2、3.3 参照>

1) 検索条件設定 (特性(詳細)検索画面) → 検索実施

- 組成はガラス系の Boro-Silicate みの入力とします。
- 特性については、Viscosity 700°Cと設定し、拡張検索[Extension Search]チェックボックスにチェックを入れます。
(本例の画面図は上記の方法に対応します)
- なお、特性中分類の Viscosity(100-1000°C) (太字) を選択することでも 700°Cの粘度データを含む検索が可能となります。この場合、100-1000°Cの広い温度範囲の検索となります。

2) 検索結果 (特性検索結果画面)

Delete	No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	Viscosity at 700C (dPa.s)
<input type="checkbox"/>	1	GJ02-000026	Glastech. Ber.	1983	v056, p.0125	
<input type="checkbox"/>	2	GB04-004679	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0299	
<input type="checkbox"/>	3	GB04-004680	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0299	2.692E+01
<input type="checkbox"/>	4	GB04-004681	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0299	1.0E+01
<input type="checkbox"/>	5	GB04-004682	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0299	
<input type="checkbox"/>	6	GB04-004683	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0299	
<input type="checkbox"/>	7	GB04-004684	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0299	
<input type="checkbox"/>	8	GJ05-005435	J. Am. Ceram. Soc.	1980	v083, p.0126	2.0E+10
<input type="checkbox"/>	9	GJ05-010089	J. Am. Ceram. Soc.	1974	v057, p.0109	
<input type="checkbox"/>	10	GJ05-010070	J. Am. Ceram. Soc.	1974	v057, p.0109	
<input type="checkbox"/>	11	GB05-010245	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0243	
<input type="checkbox"/>	12	GB05-010246	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0243	
<input type="checkbox"/>	13	GB05-010247	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0243	
<input type="checkbox"/>	14	GB05-010248	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0243	
<input type="checkbox"/>	15	GB05-010249	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0244	1.622E+03
<input type="checkbox"/>	16	GB05-010250	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0244	
<input type="checkbox"/>	17	GB05-010253	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0244	3.162E+03
<input type="checkbox"/>	18	GB05-010254	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0244	
<input type="checkbox"/>	19	GB05-010255	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0244	1.514E+04
<input type="checkbox"/>	20	GB05-010256	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0244	
<input type="checkbox"/>	21	GB05-010257	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0244	2.188E+05
<input type="checkbox"/>	22	GB05-010259	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0244	2.754E+06
<input type="checkbox"/>	23	GB05-010260	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0244	2.692E+07

- 検索結果として、高温の粘度データが登録されているすべての Boro-Silicate ガラスがリストアップされます。868 件。

- Viscosity(100-1000°C)で検索した場合には、100-1000°Cの粘度データが1つ以上登録されたガラスがすべてリストアップされます。489 件。

3) データ補間

Specify interpolation method.

Property: Viscosity

Interpolation Condition

Avoid to interpolate beyond Tg: Rough Tg C

Avoid to interpolate too away: Limit = ± 200 deg

Interpolation Equation

linear interpolation

n-th order polynomial interpolation

Variable

y (property): y 1y log y

x (temperature or viscosity): x 1/x log x

use absolute temperature (K)

OK CANCEL

- データ補間[INPOL]アイコンより開かれるデータ補間条件設定画面で、補間条件を設定します。

本例では変数の温度単位以外はデフォルト条件のままとし、変数の x 軸単位については絶対温度使用[use absolute temperature]チェックボックスにチェックを入れ、[OK]ボタンをクリックします。

Delete	No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	Viscosity at 700C (dPa.s)
<input type="checkbox"/>	1	GJ02-000026	Glastech. Ber.	1983	v056, p.0125	
<input type="checkbox"/>	2	GB04-004679	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0299	
<input type="checkbox"/>	3	GB04-004680	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0299	2.692E+01
<input type="checkbox"/>	4	GB04-004681	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0299	1.0E+01
<input type="checkbox"/>	5	GB04-004682	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0299	
<input type="checkbox"/>	6	GB04-004683	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0299	1.167E+03
<input type="checkbox"/>	7	GB04-004684	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0299	
<input type="checkbox"/>	8	GJ05-005435	J. Am. Ceram. Soc.	1980	v083, p.0126	2.0E+10
<input checked="" type="checkbox"/>	9	GJ05-010089	J. Am. Ceram. Soc.	1974	v057, p.0109	7.973E+07
<input type="checkbox"/>	10	GJ05-010070	J. Am. Ceram. Soc.	1974	v057, p.0109	7.314E+09
<input type="checkbox"/>	11	GB05-010245	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0243	
<input type="checkbox"/>	12	GB05-010246	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0243	
<input type="checkbox"/>	13	GB05-010247	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0243	
<input type="checkbox"/>	14	GB05-010248	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0243	
<input type="checkbox"/>	15	GB05-010249	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0244	1.622E+03
<input type="checkbox"/>	16	GB05-010250	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0244	1.009E+03
<input type="checkbox"/>	17	GB05-010253	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0244	3.162E+03
<input type="checkbox"/>	18	GB05-010254	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0244	
<input type="checkbox"/>	19	GB05-010255	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0244	1.514E+04
<input type="checkbox"/>	20	GB05-010256	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0244	
<input type="checkbox"/>	21	GB05-010257	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0244	2.188E+05
<input type="checkbox"/>	22	GB05-010259	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0244	2.754E+06
<input type="checkbox"/>	23	GB05-010260	Handbook of Glass.	1986	v001, p.0244	2.692E+07

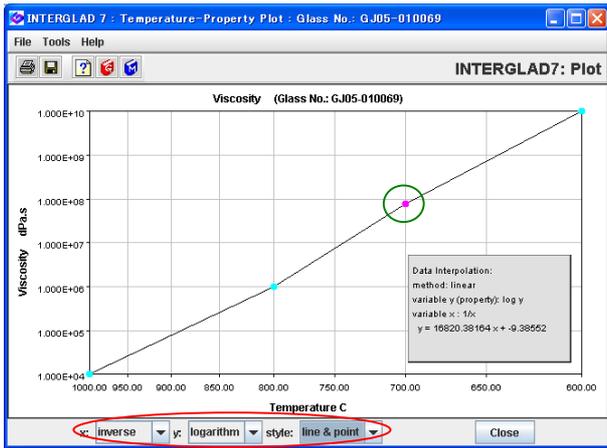
- 内挿あるいは外挿により補間計算された 700°Cのデータが検索結果画面の表にピンク色の文字で現われます。

- 補間データが現われないガラスは、データが一つしかないか、デフォルト条件である 700±200°Cの範囲に補間の元となるデータが一つもないことにより、補間計算ができないガラスです。

- Viscosity(100-1000°C)で検索した場合には、400°C以外の温度についても補間計算がされます。

- 補間計算した結果はファイル保存アイコンのクリックにより使用パソコンに保存できます(スタンダード版、CDフル機能版の場合に可能、インターネット版では不可)。

4) 温度－特性プロット



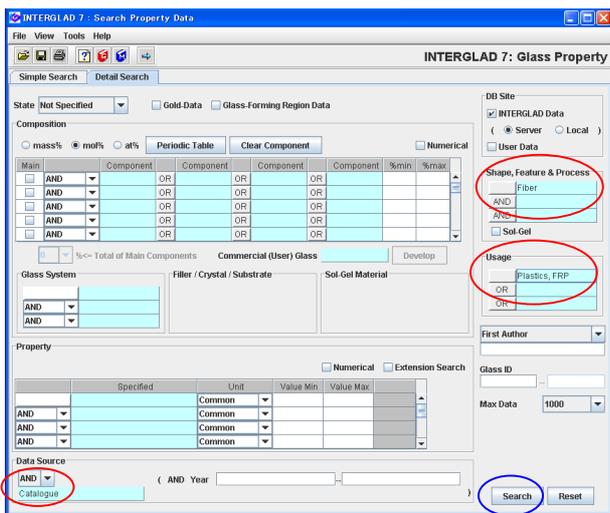
- ・検索結果画面で一つのガラスを選択し、温度－特性プロット(右の PLOT)アイコンをクリックすると、温度－特性プロットが表示されます。
- ・この XY プロットでは、補間データはピンク色の点で現われます。プロット点のスタイル、軸形式等もプルダウンメニューの指定により変えられます。
- ・粘度の場合、温度(X 軸)は逆数(1/x)、粘度(Y 軸)は対数(logy)スケールがデフォルトとなっています。(Ver. 7.2.1.0.05)

5. 商品検索 － FRP 用高強度ガラス繊維

FRP 用の高強度ガラス繊維の市販名とそのガラスの詳細調査を行います

<マニュアル第3章 B、第4章2 参照>

1) 検索条件設定 (特性(詳細)検索画面) → 検索実施



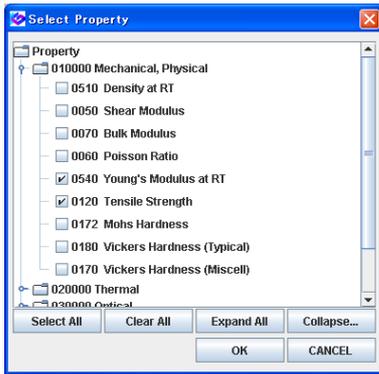
- ・外観・特徴・製法欄で Appearance/Shape/Linear と展開し、Fiber を選択します。
- ・用途欄で Material を展開し、Plastics, FRP を選択します。
- ・出典欄で Catalogue を選択します。

2) 検索結果 (特性検索結果画面)

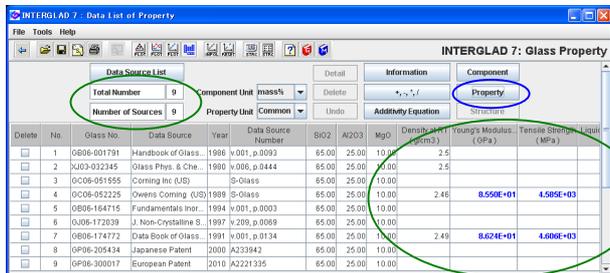
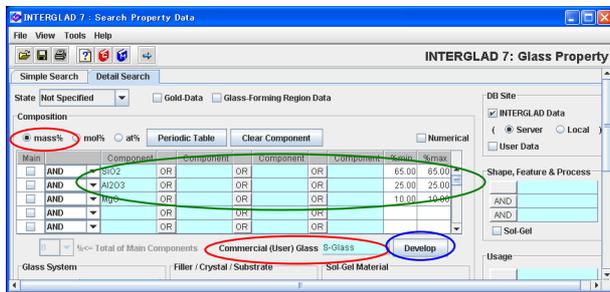
No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	Young's Modulus at RT (GPa)	Tensile Strength (MPa)
10	GC06-052346	Nitto Boseki (J)		NITTOBOT-GLASS		4.655E+03
4	GC06-052225	Owens Corning (US)	1989	E-Glass	8.550E+01	4.585E+03
3	GC03-052224	Owens Corning (US)	1989	E-Glass	7.230E+01	3.445E+03
6	GC03-052249	Asahi Fiber Glass (J)		E-Glass	7.252E+01	3.430E+03
7	GC03-052250	Asahi Fiber Glass (J)		ECR-Glass	7.223E+01	3.430E+03
9	GC03-052344	Nitto Boseki (J)		NITTOBOE-GLASS		3.430E+03
5	GC03-052226	American Biomater. (US)	1989	C-Glass	6.890E+01	3.310E+03
12	GC02-052349	Nitto Boseki (J)		NITTOBOC-GLASS		3.087E+03
11	GC05-052348	Nitto Boseki (J)		NITTOBOC-GLASS		2.254E+03
8	GC05-052262	Central Glass (J)		E-GLASSFIBER	7.252E+01	1.960E+03
13	GC03-052753	PPG Ind. (US)		FIBER GLASS		1.700E+03
2	GC03-052074	Nippon Sheet Glas. (J)		E-Glass	7.350E+01	1.470E+03
14	GC03-071205	Nippon Electric Gla. (J)	1989	EF	7.252E+01	1.470E+03
1	GC03-051554	Corning Inc. (US)		E-Glass	7.400E+01	1.470E+03
15	GC05-071206	Nippon Electric Gla. (J)	1989	D-40		
16	GC03-144895	Saint-Gobain (FR)	1983	Q3419		
17	GC06-144896	Saint-Gobain (FR)	1983	Q320180		
18	GC06-144897	Saint-Gobain (FR)	1985	Q2509		

- ・18 件のガラスがリストアップされます。また出典欄よりこれらが 10 社のデータであることがわかります。
- ・[Property]ボタンをクリックして特性選択小画面を開きます。
- ・特性項目より、高強度ガラス繊維として重要な引張強度 (Tensile Strength) とヤング率 (Young's Modulus at RT) を選択しチェックボックスにチェックを入れ、これらのデータをリストに表示させます。
- ・引張強度でソートを行い、高低順に並べると、引張強度が高いガラスがどれかがわかります (NITTOBO)

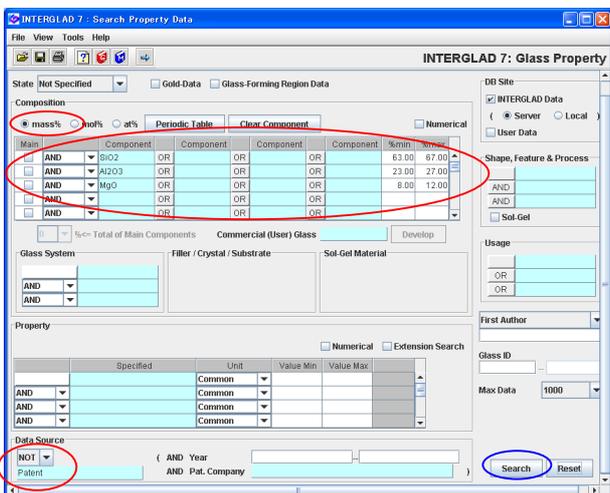
特性選択小画面



3) 抽出ガラスの調査



4) 周辺ガラスの調査



T-Glass、S-Glass 等)。

・次に引張強度、ヤング率の高い S-Glass について詳しく調べます。

・特性検索画面にもどり、[Commercial(User) Glass]欄で S/ S-Glass を選択し、組成展開[Develop]ボタンをクリックした後、検索を行います。この場合、出典欄は設定しません。

・本例の場合、組成展開により成分の最大値、最小値が同じ値になりますが、これは S-Glass として登録されたガラス組成に幅がないためです。

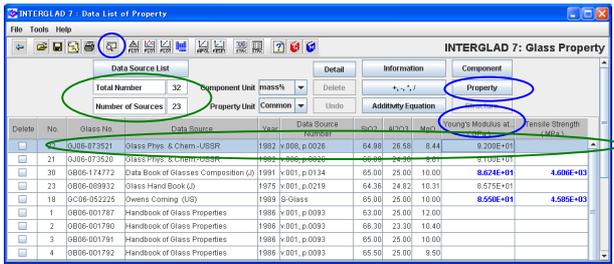
・検索結果画面に 9 ガラス(9 出典)が表示されます。組成展開をしないで検索すると 3 件のみの抽出となり、組成展開によりカタログデータ以外の雑誌等のデータも抽出されたことがわかります。

・この画面で[Property]ボタンより特性選択小画面を開き、[Select All]ボタンをクリックして[OK]ボタンをクリックすることにより、登録されているすべての特性データを表示させることができます。

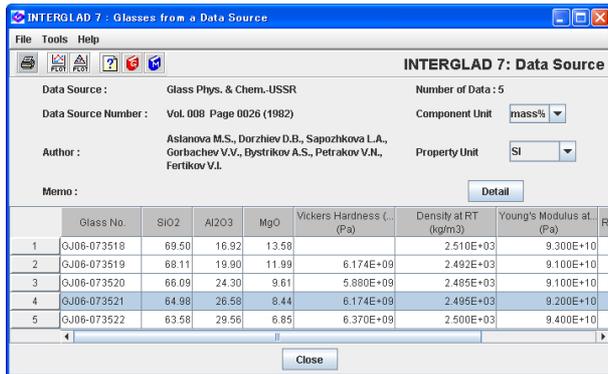
・さらに S-Glass の周辺のガラスに関する情報を集めます。

・特性検索画面で S-Glass 組成成分のそれぞれ±2%の数値を最小値、最大値に設定します。

・出典欄を NOT Patent とします。



同一出典画面



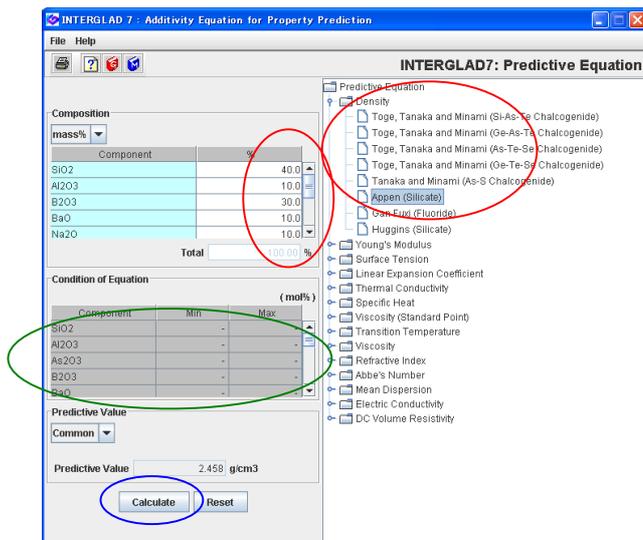
- 32 ガラス (23 出典) のデータが抽出されます。なお、出典に特許も含め、条件をつけない場合には 87 件(43 出典)となります。
- 特性検索結果画面の[Property]ボタンより引張強度とヤング率を表示し、ヤング率の値を高低順となるようソートします。これにより、S-Glass の周辺組成での機械的特性を把握することができます。
- また、最もヤング率の高い GJ06-073521 ガラスの同一出典画面を表示させ(同一出典アイコンのクリックにより)、このガラスの出典に記載されているすべてのデータを確認することができます。

6. 特定組成のガラスの特性予測 (特性計算式)ー ホウケイ酸塩ガラス

ホウケイ酸塩ガラス{SiO₂ 40 %, B₂O₃ 30%, Al₂O₃ 10%, Na₂O 10%, BaO 10% (mass%)} の密度、熱膨張係数、熱伝導率、屈折率を予測します

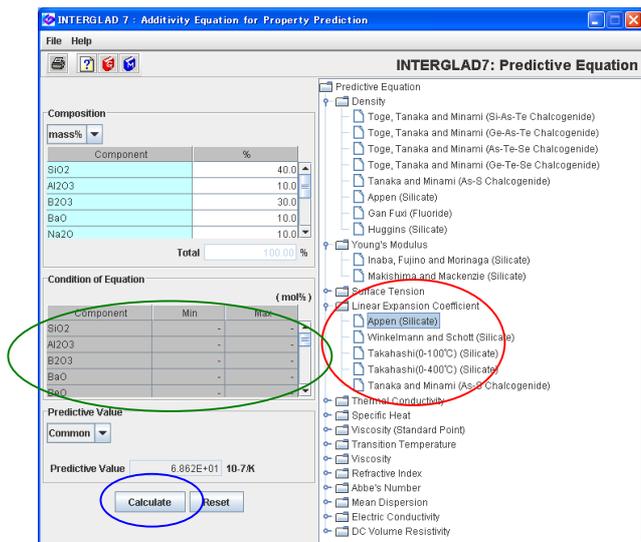
<マニュアル第3章D.1、第4章4.1、第6章1参照>

1) 密度の予測 (特性計算式による特性予測画面)



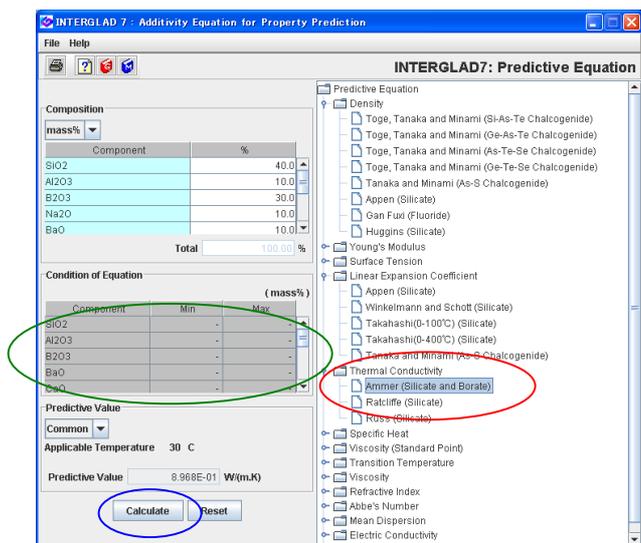
- 特性計算式による特性予測画面を開き、画面右の特性計算式選択欄で Density を展開し、Appen(Silicate)を選択します。
- 左中段の Condition of Equation に、指定した計算式の条件が現われるため、予測したい組成成分をすべて含むかどうかを確認します。
- [Composition]欄に必要な成分を選択表示し、その数値を入力します。成分名は[Ctrl]キーを使用することにより、同時に複数の選択ができます。単位は mass%とします。
- [Calculate]ボタンをクリックすると[Predictive Value]欄に予測値 2.458 g/cm³が現われます。

2) 熱膨張係数の予測



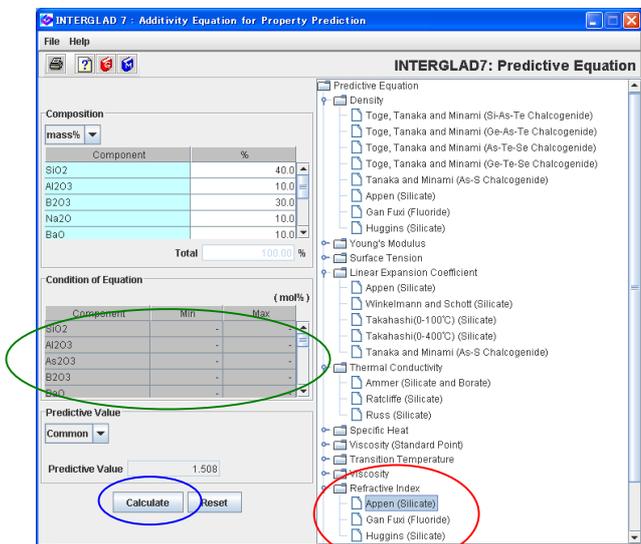
- 同組成の他特性を予測する場合、組成欄はそのままとし、特性予測式のみを変えて計算することにより、次々に特性予測ができます。
- 特性予測式欄の Linear Expansion Coefficient を展開し、Appen(Silicate)を選択します。
- [Calculate]ボタンをクリックすると[Predictive Value]欄に予測値 $6.862 \times 10^{-6} / K$ が現われます。

3) 熱伝導率の予測



- 特性予測式欄の Thermal Conductivity を展開し、Ammer(Silicate and Borate)を選択します。
- [Calculate]ボタンをクリックすると[Predictive Value]欄に予測値 $8.968 \times 10^{-1} \text{ W/(m.K)}$ (30°C)が現われます。
- 本例の場合、Ratliff(Silicate)、Russ(Silicate)の式でも計算でき、それぞれ、 $8.349 \times 10^{-1} \text{ W/(m.K)}$ (0°C)、 $9.256 \times 10^{-1} \text{ W/(m.K)}$ (0°C)の予測値が得られ、予測計算式による値の違いを比較することができます。

4) 屈折率の予測



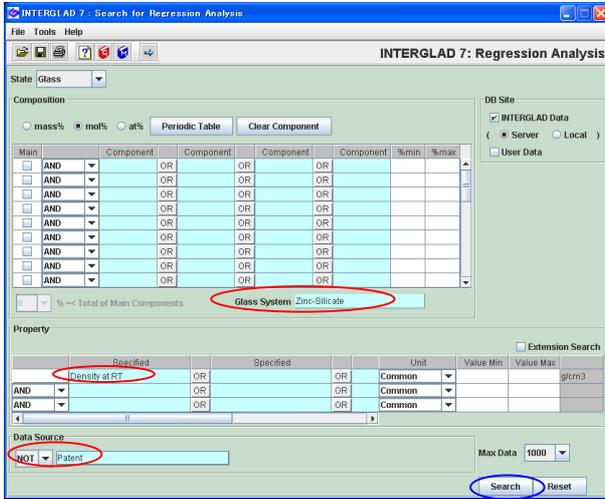
- 特性予測式欄の Refractive Index を展開し、Appen(Silicate)を選択します。
- Calculate ボタンをクリックすると[Predictive Value]欄に予測値 1.508 が現われます。
- 上記のように組成を決めれば、色々な特性について予測値を計算することができますが、式により組成等の制限があり、計算ができない場合も多々あります。

7. 特性についての予測式の導出（重回帰分析） — 亜鉛ケイ酸塩ガラスの密度

亜鉛ケイ酸塩ガラスの密度（室温）についての加成式を導出します

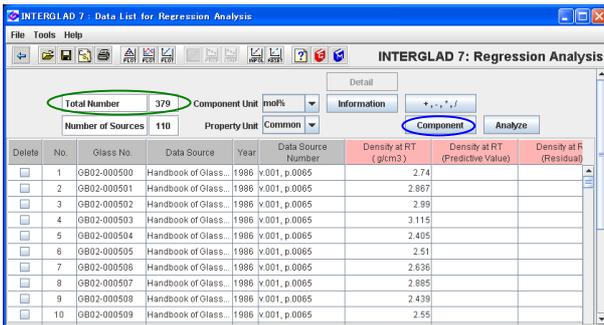
<マニュアル第3章D.2、第4章4.2-4.5 参照>

1) 重回帰分析のための検索条件設定（重回帰分析検索画面） → 検索実施

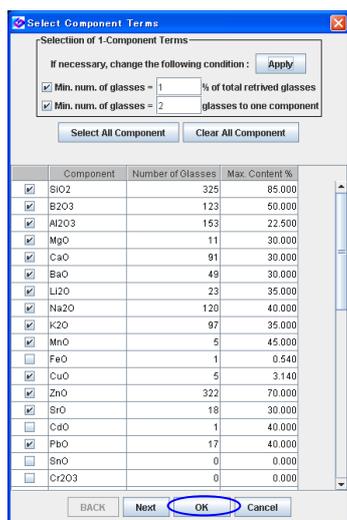


- 状態(State)はデフォルトの glass のままとします。
- ガラス系として Zinc-Silicate、特性として Density at RT を選択し、出典は NOT Patent とします。

2) 検索結果（重回帰分析検索結果画面） → 説明変数成分項選択（成分項選択小画面）

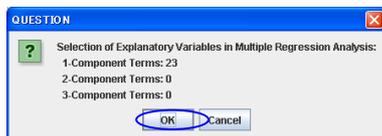


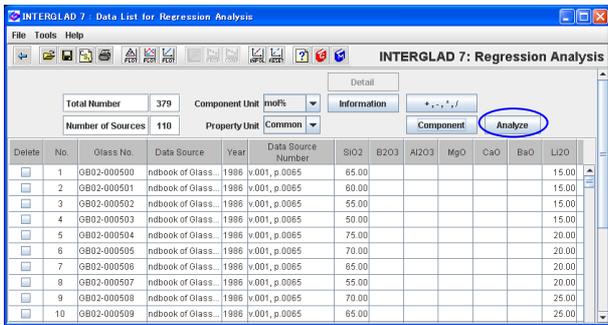
- 379 件のガラスが抽出されます。
- [Component]ボタンより説明変数成分項選択小画面を開き、重回帰式に使用する成分項を選択します。



- 本例では最初に現われる 1 成分項選択小画面においてデフォルト条件のままとし、[OK]ボタンをクリックします。
- これにより説明変数成分項は 1 成分項までとなります。現われる [Question] ダイアログで成分項数を確認し、[OK]ボタンをクリックします。

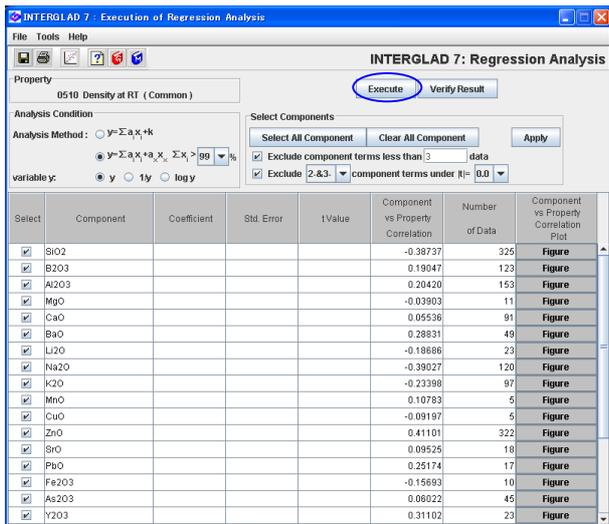
1 成分項数 : 23



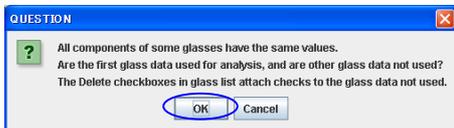


- [Analyze]ボタンをクリックし、重回帰分析実行画面へ移行します。

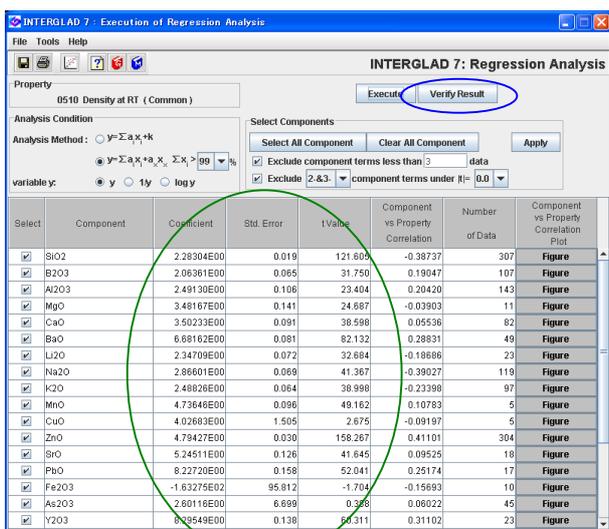
3) 重回帰分析実施（重回帰分析実行画面）



- [Execute]ボタンをクリックし、重回帰分析を実行します。



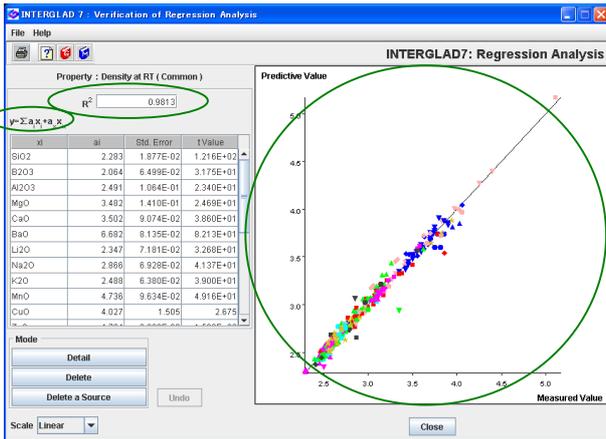
- [Question]ダイアログに「リスト中に全く同組成のガラスがある。同組成のガラスがあると重回帰計算ができないため、これらを除いてもよいか?」が現われるため、[OK]ボタンをクリックします。



- 重回帰分析実行画面に計算結果が現れることを確認します。

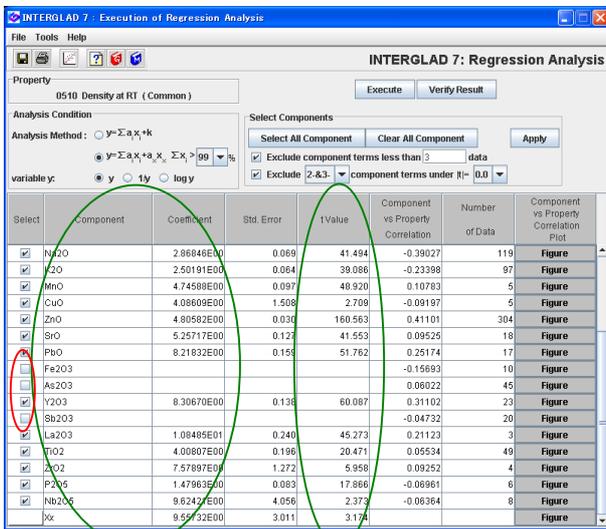
- [Verify Result]ボタンをクリックして重回帰分析検証画面に移行します。

4) 重回帰分析結果の検証 (重回帰分析検証画面)

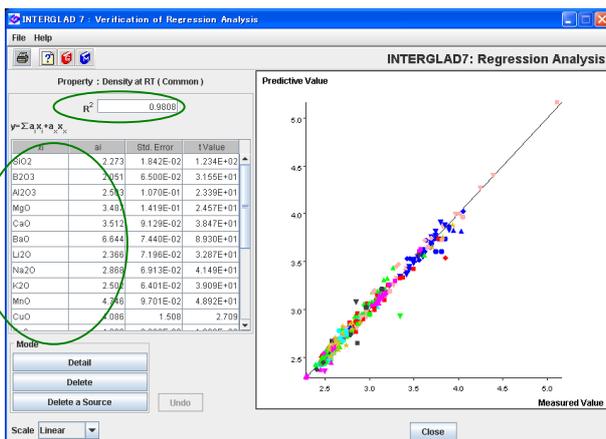


- 寄与率 R²が 0.98 と高く、実測値 (収録値) と予測値のプロットの y=x の直線よりのばらつきが小さいことを確認します。(R²を 0.8 以上とすることを推奨します)

5) t 値検定 再計算



- 重回帰実行画面に戻ってリストの t 値(絶対値)に低いもの (2 未満等) があるかどうかを調べます。
- 本例では Fe₂O₃、As₂O₃、Sb₂O₃ の t 値の絶対値が 2 未満となっています。まず 1 未満の As₂O₃ と Sb₂O₃ のチェックをはずし、[Execute] ボタンをクリックし、再計算を行います。次に 2 未満の Fe₂O₃ のチェックをはずし、もう一度再計算を行います。これらの操作により 2 未満の t 値(絶対値)を持つ説明変数成分項が重回帰式より除外されます。
- 再度、重回帰分析の検証を行います。
R²がわずかに下がりましたが、依然 0.98 と高いことを確認します。



6) 予測式 (重回帰式) 完成

重回帰分析検証画面および重回帰分析実行画面に式および各成分項の係数が表示されます。

得られた重回帰式 :

$$\text{Density at RT (g/cm}^3\text{)} = 2.273 \times (\text{SiO}_2) + 2.051 \times (\text{B}_2\text{O}_3) + 2.503 \times (\text{Al}_2\text{O}_3) + \dots$$

各成分：モル比率（その他以外、20 成分）

- ・重回帰分析検索結果画面でファイル保存アイコンにより分析結果（重回帰式を含め）を保存します。本保存はスタンダード版、CD フル機能版の場合に可能です。インターネット版ではできません。

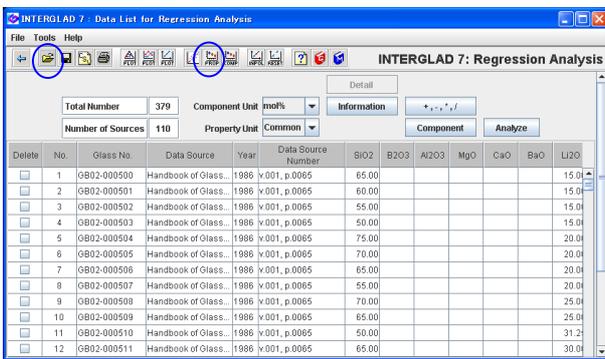
8. 特性予測（重回帰分析） — 亜鉛ケイ酸塩ガラスの密度

SiO₂ 60 mol%, Li₂O 20 mol%, ZnO 20 mol%のガラスの密度（室温）を予測します

<マニュアル第3章D.2、第4章4.6 参照>

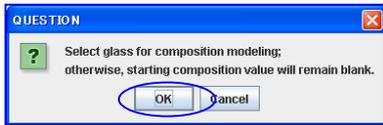
亜鉛ケイ酸塩系組成であるため、7.で導出した重回帰式を利用します

1) 検索結果画面から特性予測画面を開く

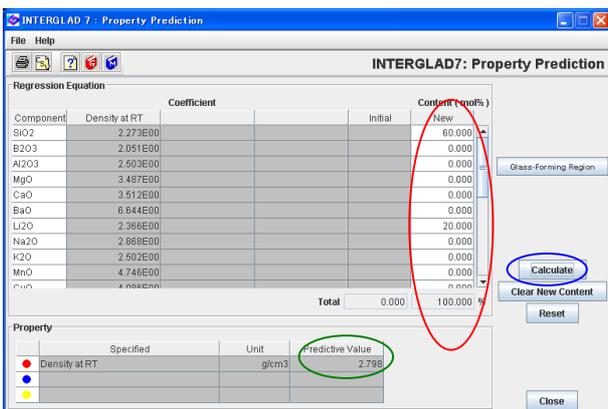


- ・任意の重回帰分析検索結果画面を開き、[Open] アイコンより、保存した 3.1 結果 (検索結果画面) を開きます。

- ・特性予測[PROP]アイコンをクリックすると、「モデル組成を選択してください。…」との [Question] ダイアログが現われます。[OK] ボタンをクリックすると特性予測画面が開きます。この画面の表でいずれかのガラスが選択された場合には{行のクリックによりその行がアクティブ(水色)となる}、[Question] ダイアログは現われず特性予測画面が開きます。



2) 特性予測画面で組成を入力し予測値を計算



- ・Content の New 欄に特性予測する組成成分値をインプットし、[Calculate] ボタンをクリックすると、特性値が計算されます。
- ・密度予測結果：2.798 g/cm³
- ・なお、重回帰分析検索結果画面でガラスが選択された場合には、[Initial] 欄および [New] 欄にそのガラスの組成が表示されます。[New] 欄を予測する組成に書き換えて計算します。

9. 組成最適化（重回帰分析） — 特定密度の亜鉛ケイ酸塩ガラス

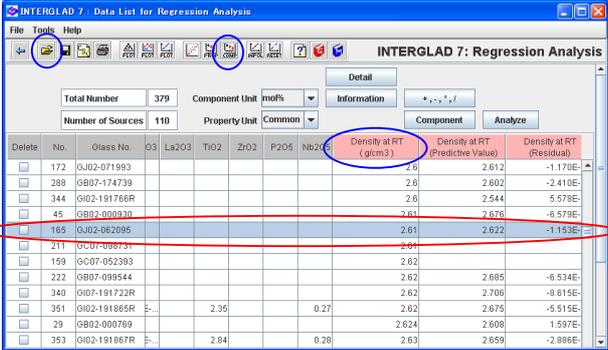
亜鉛ケイ酸塩ガラスで密度（室温）が 2.6 g/cm³ となる組成を設計します

SiO₂、B₂O₃、Na₂O、ZnO からなる組成とした場合

<マニュアル第3章D.3、第4章4.7参照>

8.と同様に亜鉛ケイ酸塩系組成であるため、7.で導出した重回帰式を利用します

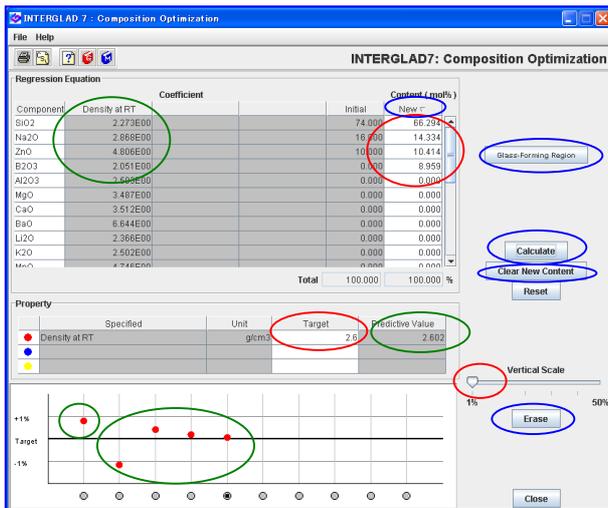
1) 検索結果画面から組成最適化画面を開く



Delete	No.	Glass No.	O3	La2O3	TiO2	ZrO2	P2O5	Nb2O5	Density at RT (g/cm3)	Density at RT (Predictive Value)	Density at RT (Residual)
<input type="checkbox"/>	172	GJ02-071993							2.61	2.612	-1.178E-
<input type="checkbox"/>	289	GB07-174739							2.6	2.602	-2.410E-
<input type="checkbox"/>	344	GB02-191768R							2.6	2.544	5.578E-
<input type="checkbox"/>	45	GB02-000930							2.61	2.676	-6.578E-
<input type="checkbox"/>	165	GJ02-062095							2.61	2.622	-1.153E-
<input type="checkbox"/>	211	GB07-098731							2.62	2.62	0.000E+
<input type="checkbox"/>	159	GB07-052393							2.62	2.62	0.000E+
<input type="checkbox"/>	222	GB07-099544							2.62	2.695	-6.534E-
<input type="checkbox"/>	340	GB07-191722R							2.62	2.706	-8.815E-
<input type="checkbox"/>	351	GB02-191865R		2.35			0.27		2.62	2.675	-5.515E-
<input type="checkbox"/>	29	GB02-000769							2.624	2.608	1.597E-
<input type="checkbox"/>	353	GB02-191867R		2.84			0.28		2.63	2.659	-2.886E-

- 重回帰分析検索結果画面を開き、[Open]アイコンより、保存した 3.1 結果（検索結果画面）を開きます。
- まずリストからモデル組成を選択します。モデル組成は特性値が目標値に近く、また組成も目標成分をできるだけ含むものとします。本例の場合には、[Density at RT] 欄をソートして密度を低高の順に並べ、密度 2.61 g/cm³ の No.165(GJ02-062095)をモデル例としてクリックし、アクティブ(水色)とします。
- 組成最適化 [COMP] アイコンをクリックすると、組成最適化画面が開きます。

2) 組成最適化画面での組成設計(最適化)試行

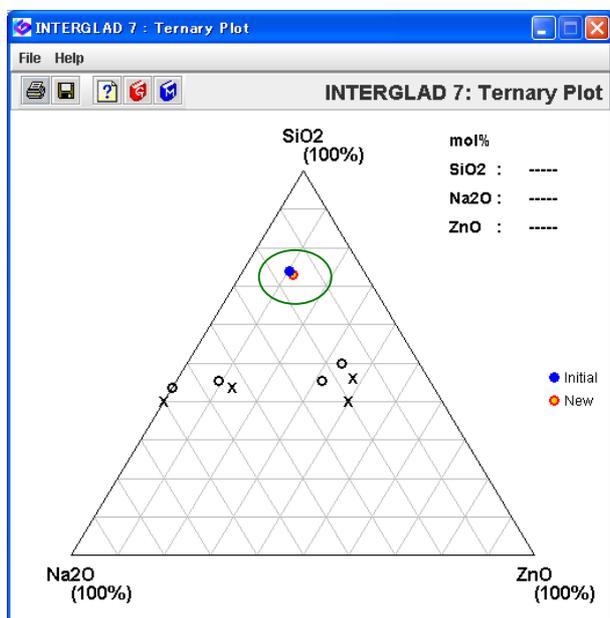


- 目標値 2.6 を Property の [Target] 欄にインプットし、[Calculate] ボタンをクリックすると、[Predictive Value] 欄にモデル組成の計算値が現われます。また、画面の下部のグラフに、選択したモデル組成の密度と目標値との違い (%) が赤色点で現われます。グラフ右の Vertical Scale の指標を左にドラッグし (左端の 1%まで)、グラフの赤色点と目標値の差を拡大し確認しやすくします。

- 次に [Clear New Content] ボタンをクリックし、Content の [New] 欄をすべて 0 にします。New 欄の SiO₂、B₂O₃、Na₂O、ZnO のセルに、左の initial(モデル組成)値を参考に成分値をインプットします。本例では SiO₂、Na₂O、ZnO については initial 値と同じ値(整数)を、B₂O₃については 10 と入れます。ここで [New] 欄をソートして数字の入っている成分を上部に並べて確認します。合計が 100%でなくても計算で 100%に按分されるため問題ありません。
- [Calculate] ボタンをクリックすると [New] 欄に記載した組成の特性値が計算され、[Predictive Value] 欄に現われます。また、グラフにも新たな赤色点が表れ、目標値との差を確認できます。

- 次に Content の [New] 欄の値を修正し、再計算します。この操作を繰り返し、特性値を目標値に近づけていきます。赤色点が目標値から逆に離れる場合には、[Erase] ボタンを押し、赤色点と New 組成を元に戻します。成分値の修正は、重回帰係数(Coefficient)の絶対値が大きい成分ほど、特性値の増減が比例して大きくなることを考慮しながら行います。本例の場合には重回帰係数の大きい ZnO を少しずつ増やしていきます。
- 最終的に本例では、下記の組成で Density at RT が 2.602 g/cm³ となります。
SiO₂ 66.3%、B₂O₃ 9.0%、Na₂O 14.3%、ZnO 10.4% (mol%)
- なお、目標特性となる組成は当然一つではないため、範囲に制限のある成分を固定し、他の成分を変えて試行し、最適化します。

3) 3成分系ガラス化範囲データとの関係調査



- また、New および Initial 組成につき、3成分のガラス化範囲データとの関係を [Glass-Forming Region] ボタンをクリックすることにより確認できます。本例では上記の最終組成(New)について SiO₂-Na₂O-ZnO の 3成分系のガラス化範囲データとの関係を三角図で示します。
- ガラス化範囲データは 3成分で 100%とした場合のデータのため、他の成分が多くなると違いが大きくなることに留意が必要です。

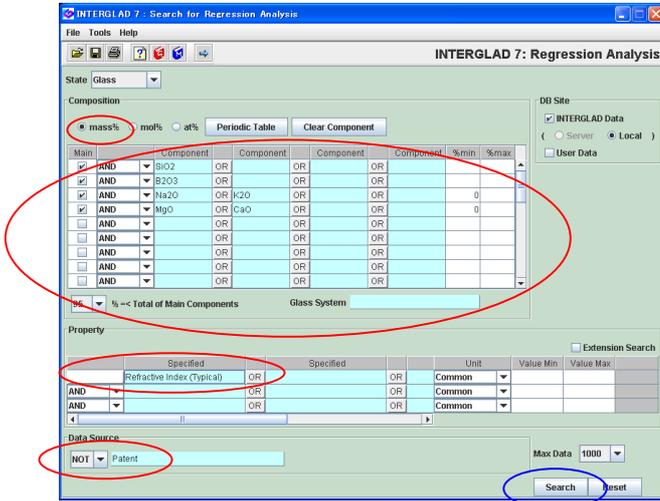
10. 特性予測（重回帰分析 3 次式）－ ホウケイ酸塩ガラスの屈折率

SiO₂-B₂O₃-R₂O-RO 系組成（下記）のガラスの屈折率を予測します

SiO₂ 65%, B₂O₃ 10%, MgO 5%, CaO 4%, Na₂O 7%, K₂O 5%, Al₂O₃ 4% (mass%)

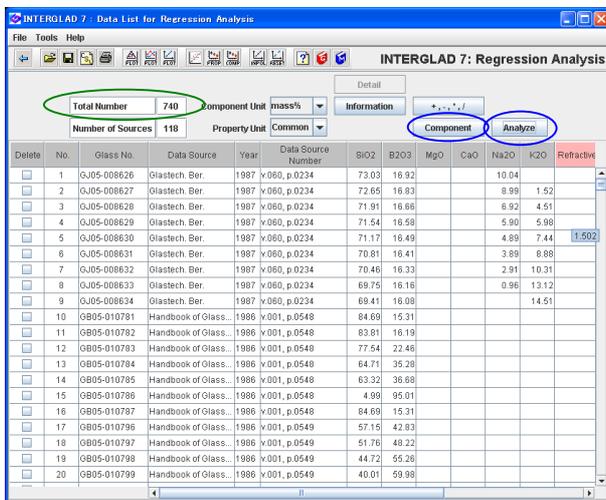
<マニュアル第3章D.2、第4章4.2-4.6 参照>

1) 重回帰分析のための検索条件設定（重回帰分析検索画面）→ 検索実施



- 組成の検索条件を以下とします。
 $SiO_2 + B_2O_3 + (Na_2O \text{ or } K_2O \geq 0)$
 $+ (MgO \text{ or } CaO \geq 0) \geq 95 \text{ mass\%}$

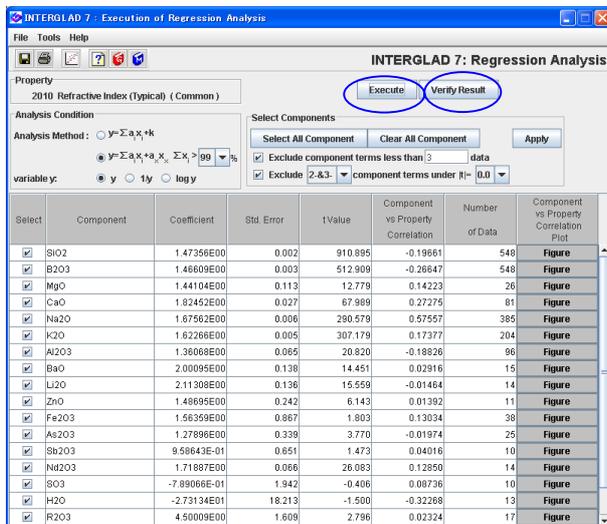
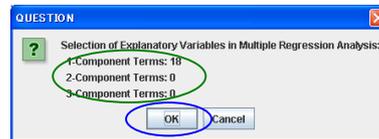
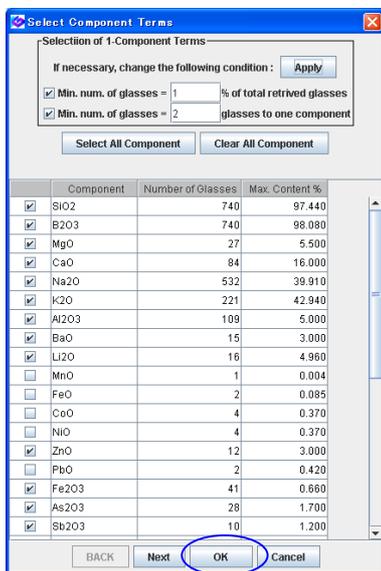
2) 検索結果



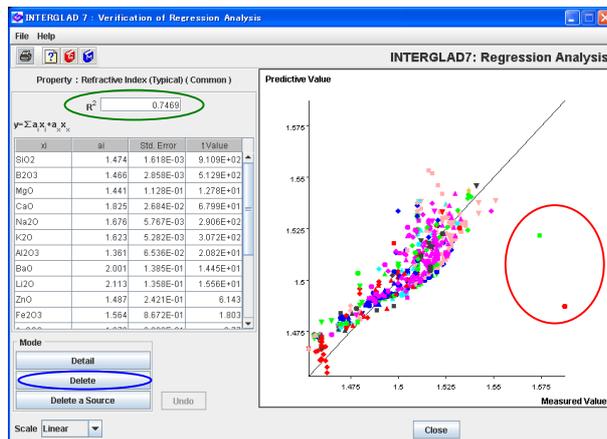
- 740 件のガラスがリストアップされます。

3) 重回帰分析（1 次式）

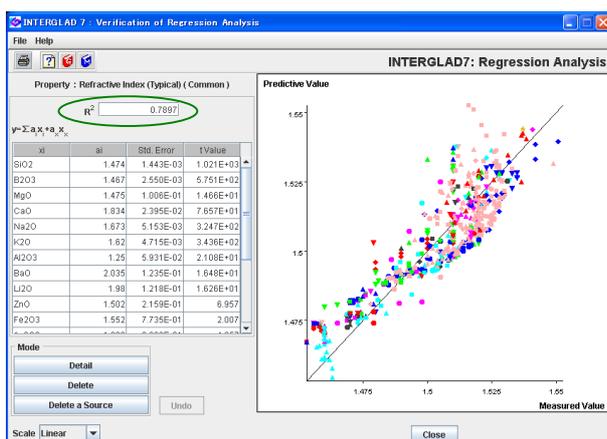
- まず比較のために 1 次式による重回帰分析を行います。
- 1 成分項の選択画面でデフォルト通りの選択条件とすると、18 個の 1 成分項が選択されます。



- 重回帰分析実行画面で重回帰分析を実行し検証画面を開くと、寄与率 R^2 は 0.7469 と低く、 $y=x$ の直線に乗っていないことがわかります。

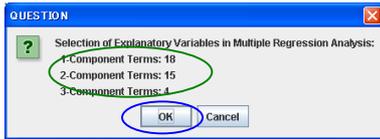


- $y=x$ から大きく離れた 2 点を除去し、重回帰分析実行画面に戻り、再度重回帰分析を行います。

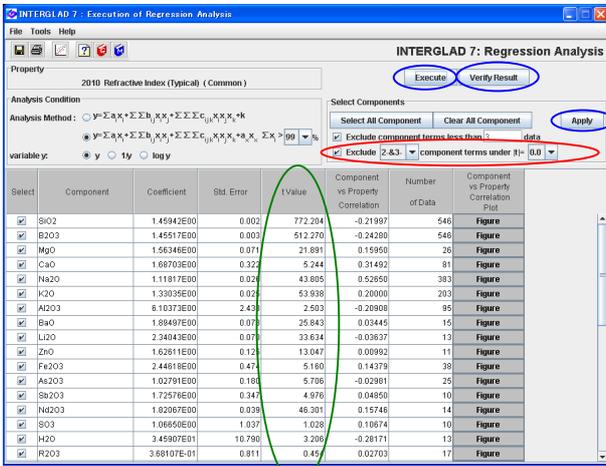


- 検証画面を開き R^2 を確認すると、0.7897 と低いままです。この例の場合、1 次の重回帰式では十分な予測ができないことがわかります。

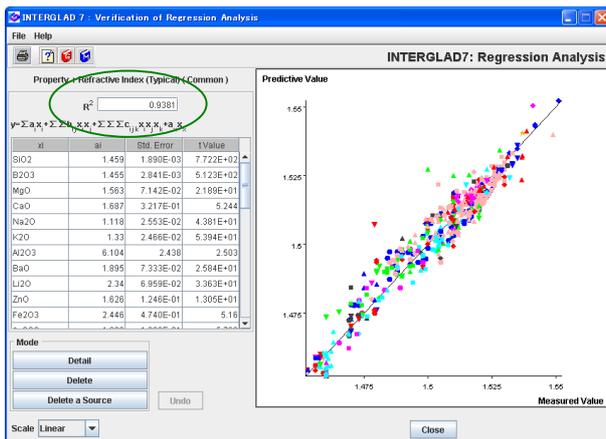
4) 重回帰分析 (3 次式)



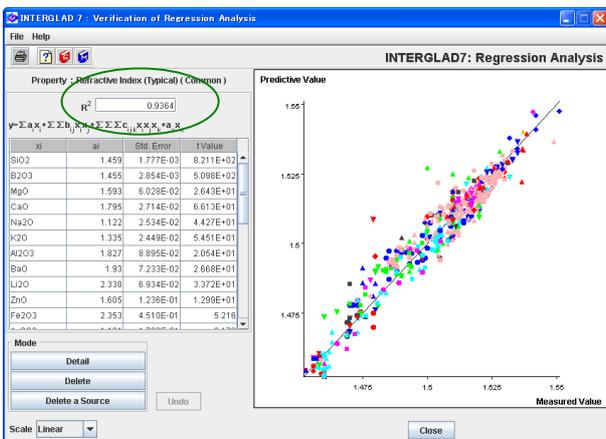
- ・検索結果画面に戻り、成分項の選択を 3 成分項までデフォルト通りの条件で選択すると、左記の成分項数となります。



- ・重回帰実行画面で重回帰分析を行い、検証画面を開くと R² が 0.9381 となっており、良好な値であることがわかります。
- ・しかし、重回帰実行画面で t 値を調べると、絶対値が 2 以下の成分項が 11 あります (1 成分項 2、2 成分項 8、3 成分項 1)。

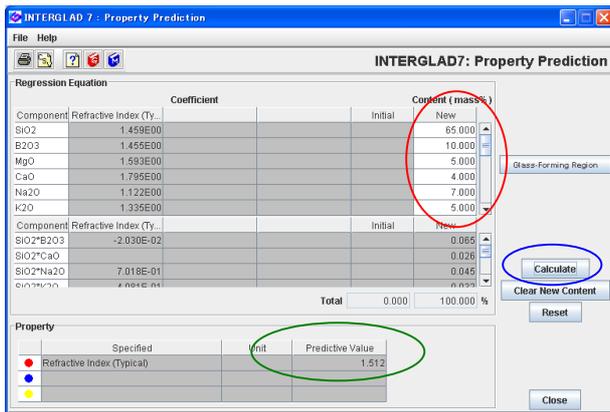


- ・次に重回帰分析画面の右上[Select Component]欄の 3 行目の |t| の最小値設定欄で、下記の手順により、|t| の小さい成分項の除去・重回帰分析実行を繰り返します。(一度に除去せず、少しづつ行います)



- ① 2,3 成分項 |t| = 1.0 より小を削除計算
(‘2-&3-’と‘1.0’を選択して[Apply]ボタンをクリックし、[Execute]ボタンをクリックします)
 - ② 2,3 成分項 |t| = 2.0 より小を削除計算
 - ③ all 成分項 |t| = 1.0 より小を削除計算
 - ④ all 成分項 |t| = 2.0 より小を削除計算
- 以上の結果、|t| はすべて 2 以上となり、R² は 0.9364 となります。これで重回帰式が完成します。

5) 特性予測 (特性予測画面)

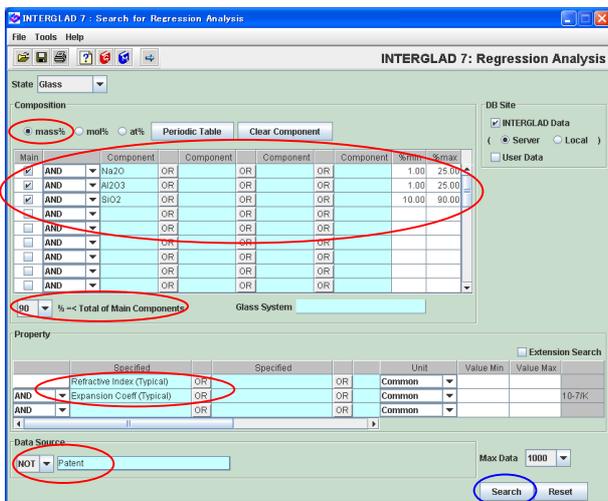


- 重回帰分析検索結果画面に戻り、特性予測[PLOP]アイコンから特性予測画面を開きます。
- [Regression Equation]欄の[Content New]欄に SiO₂ 65%, B₂O₃ 10%, MgO 5%, CaO 4%, Na₂O 7%, K₂O 5%, Al₂O₃ 4%を入力し、[Calculate]ボタンをクリックします。
- 特性欄の予測値に屈折率 1.512 が計算されて現われます。

11. 材料設計(組成最適化) (重回帰分析 1次式) – 特性を特定したソーダアルミノケイ酸塩ガラス

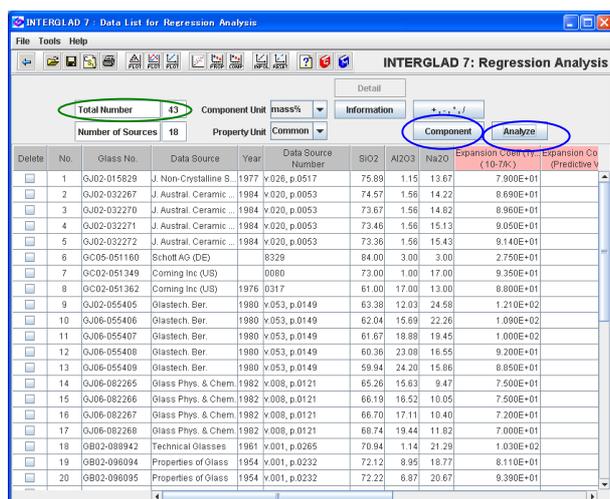
熱膨張係数が $80 \times 10^{-7}/^{\circ}\text{C}$ 、屈折率が 1.49 となるソーダアルミノ珪酸塩ガラスの組成を設計します

1) 重回帰分析のための検索条件設定 (重回帰分析検索画面) → 検索実施



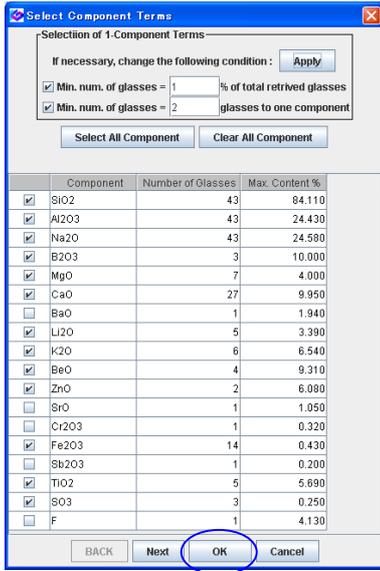
- 成分条件は目的とする組成範囲を広げたものとします。本例では成分範囲と合計成分最低量を以下のように設定します。
 $10 \leq \text{SiO}_2 \leq 90\%$ 、 $1 \leq \text{Al}_2\text{O}_3 \leq 25\%$ 、
 $1 \leq \text{Na}_2\text{O} \leq 25\%$ 、 $\text{SiO}_2 + \text{Al}_2\text{O}_3 + \text{Na}_2\text{O} \geq 90\%$
 (%は mass%)
- 特性条件は熱膨張係数、屈折率に代表値の設定があるため、共にデータの集まりやすい代表値とします。
- また出典は特に規定の必要はありませんが、本例では特許を除くとします。

2) 検索結果 (重回帰分析検索結果画面)

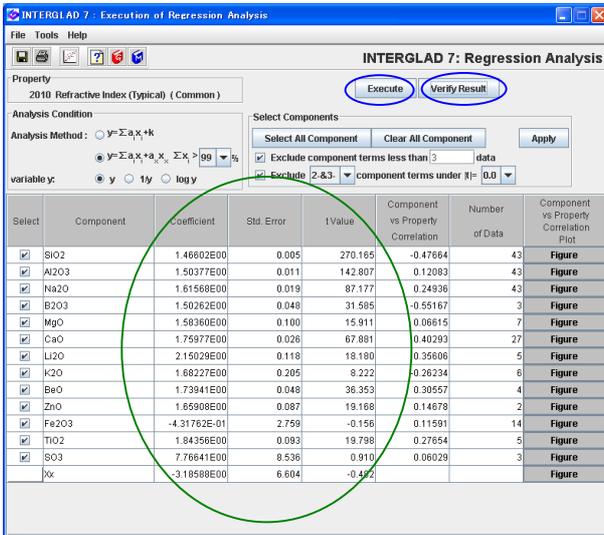
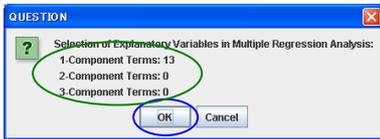


- 43 件のガラスが抽出されます。

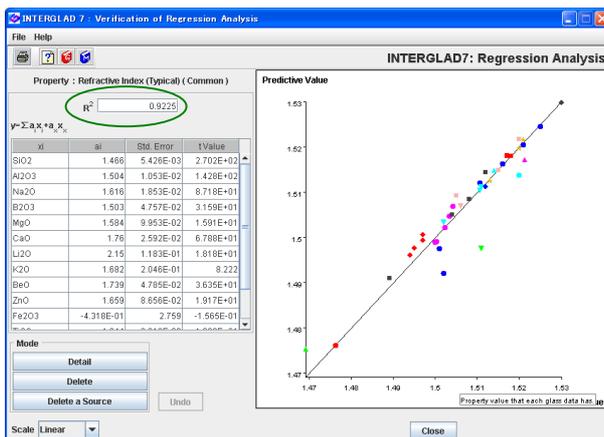
3) 重回帰分析（1次式）（成分項選択小画面 → 重回帰分析実行画面 → 重回帰分析検証画面）



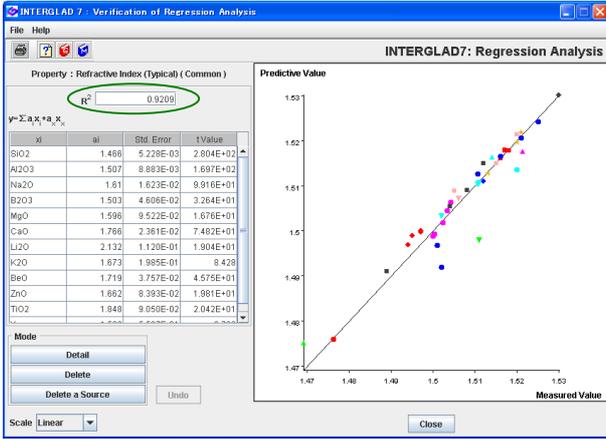
- [Component]ボタンをクリックして成分項選択（1成分項選択）画面を開き、デフォルト条件のまま[OK]ボタンをクリックします。
- 成分項選択確認ダイアログで1成分項が13であることを確認し、[OK]ボタンをクリックします。



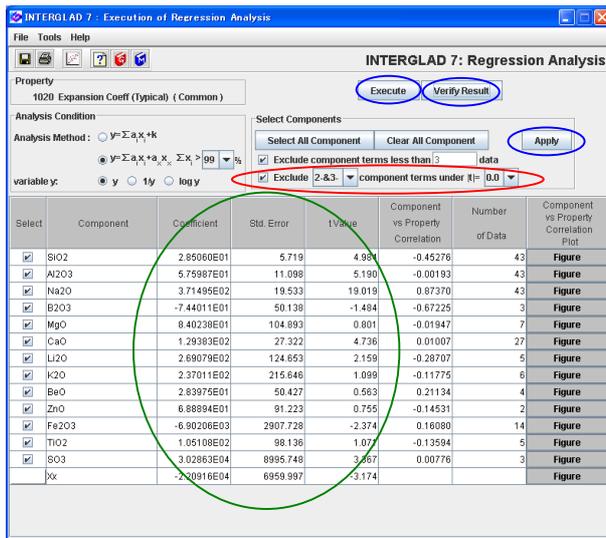
- 重回帰分析検索結果画面で[Analyze]ボタンをクリックすると、屈折率および熱膨張係数の重回帰分析画面が重なって現われます。
- まず、屈折率の画面で[Execute]ボタンをクリックします。現われる複数の[Question]ダイアログにOKすると、画面の表の Coefficient、Std. Error、t-Value に数値が現われ、重回帰計算が成功したことがわかります。



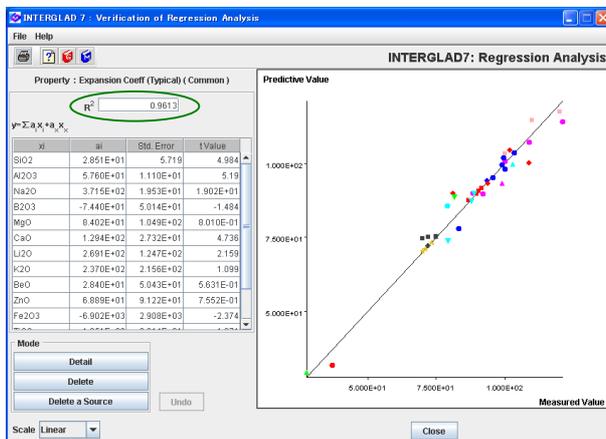
- [Verify Result]ボタンをクリックし、重回帰分析検証画面を開きます。
- 寄与率 R²が 0.9225 であり、0.9 以上と良好であることを確認します。
- 重回帰分析画面で |t| を確認すると、2 より小さい成分項があることがわかります。



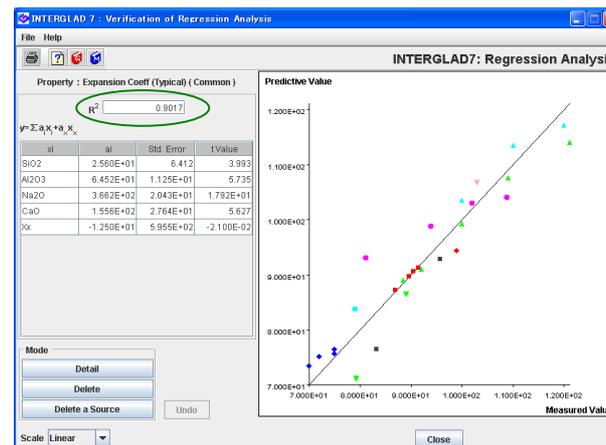
• $|t|$ の小さい $Fe_2O_3(-0.156)$ 、 $SO_3(0.910)$ のチェックをはずして除外し、再計算を行います。その結果、 R^2 は0.9209となり、 $|t|$ はすべて2以上となります。これにより、屈折率の重回帰式が完成します。



• 次に、熱膨張係数の重回帰分析画面で同様に重回帰分析を行います。



• 重回帰分析検証画面で確認すると、 R^2 が0.9613であり良好な値であることがわかります。



■ 次に重回帰分析画面の成分項選択欄最下段の $|t|$ 条件設定で、下記の手順により $|t|$ の小さい成分項を除去します。

- ① all 成分項 $|t| = 1.0$ より小を削除計算
(‘all’と‘1.0’を選択して[Apply]ボタンをクリックし、[Execute]ボタンをクリックします)
- ② all 成分項 $|t| = 1.0$ より小を削除計算

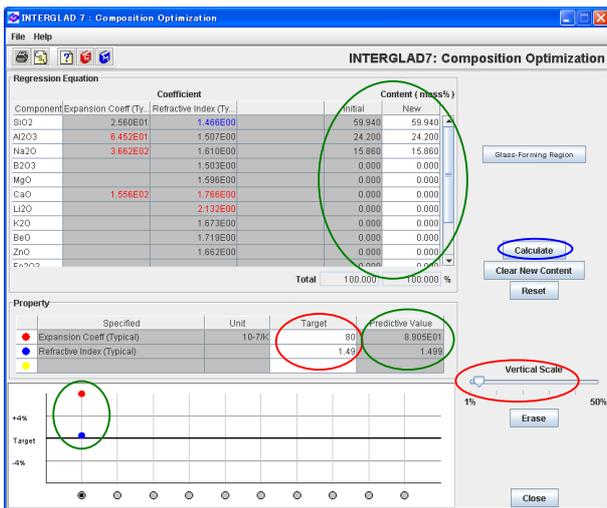
③ all 成分項 $|t| = 1.5$ より小を削除計算

以上の結果、 t 値の絶対値はすべて 2 以上となり、 R^2 は 0.9017 となります。これで重回帰式が完成します。

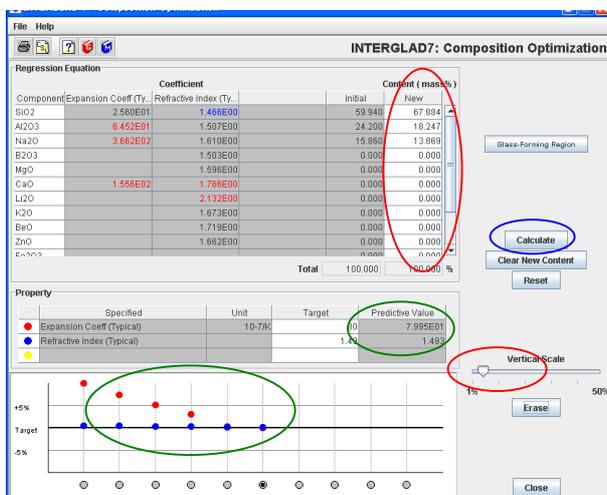
4) 組成最適化 (重回帰分析検索結果画面 → 組成最適化画面)

Delete	No.	Glass No.	Expansion Coeff (Ty) (10 ⁻⁷ /K)	Expansion Coeff (Ty) (Predictive Value)	Expansion Coeff (Ty) (Residual)	Refractive Index (Ty)	Refractive Index (Ty) (Predictive Value)	Refractive Index (Ty) (Residual)
	8	0C05-051160	2.750E+01			1.489	1.476	-0.253E-0
	43	0B05-245444	3.690E+01			1.476	1.476	2.228E-0
	42	0B02-245443	7.370E+01			1.483	1.483	
	17	0J06-082268	7.000E+01	7.343E+01	-3.434	1.489	1.491	-2.015E-0
	38	0B02-215714	8.000E+01			1.489		
	19	0B02-098094	8.110E+01	9.310E+01	-1.200E+01	1.494	1.497	-2.948E-0
	20	0B02-098095	9.390E+01	9.880E+01	-4.899	1.495	1.499	-3.958E-0
	21	0B02-098098	1.000E+02	1.031E+02	-1.073	1.497	1.5	-2.791E-0
	22	0B02-098097	1.085E+02	1.041E+02	4.704	1.497		-0.002E-0
	13	0J06-055409	8.890E+01	8.905E+01	-5.488E-01	1.5	1.499	1.204E-0
	42	0J06-055408	8.200E+01	9.095E+01	1.041	1.5	1.499	8.706E-0
	28	0B02-098904	9.570E+01	9.280E+01	2.889	1.501	1.497	4.288E-0
	39	0B02-245348	7.930E+01	7.106E+01	8.241	1.502	1.503	-1.252E-0
	29	0B02-098905	8.320E+01	7.643E+01	6.769	1.502	1.492	1.009E-0
	11	0J06-055407	1.000E+02	9.821E+01	7.830E-01	1.502	1.502	5.474E-0
	10	0J06-055406	1.090E+02	1.075E+02	1.486	1.503	1.504	-1.178E-0
	18	0J06-082267	7.200E+01	7.521E+01	-3.215	1.504	1.506	-1.390E-0
	9	0J06-055405	1.210E+02	1.140E+02	6.989	1.504	1.506	-2.095E-0
	32	0J06-116081	1.100E+02	1.135E+02	-3.47	1.505	1.508	-3.773E-0
	8	0C02-051362	8.880E+01			1.506	1.507	-1.033E-0

・重回帰分析検索結果画面に戻り、まず、目標特性に近いガラスを選択します。本例では熱膨張係数の予測値が目標値に最も近い ID 55409 の行をクリックして選択します。次に組成最適化[COMP]アイコンをクリックすると、組成最適化画面が開きます。



・重回帰式の Content の [Initial] および [New] 欄に選択したガラス(55409)の組成が現われています。
 ・Property の [Target] 欄に目標値をインプットします(熱膨張係数 $80 \times 10^{-7}/^{\circ}\text{C}$ 、屈折率 1.49)。
 ・[Calculate] ボタンをクリックすると、[Predictive Value] 欄に選択組成の予測値 1.499 が現われ、画面下部のグラフに予測値と目標値の差が%でプロットされます。

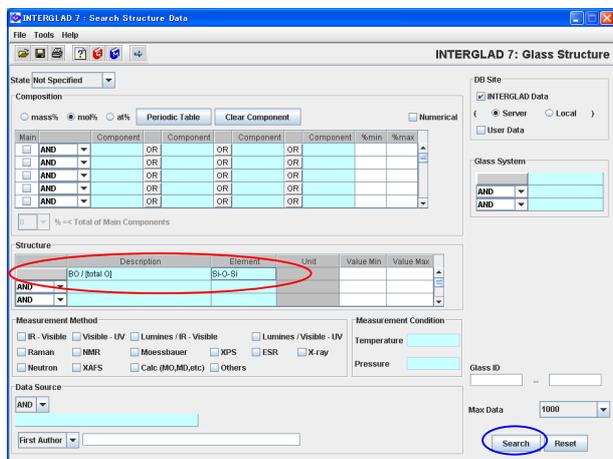


・Vertical Scale を左にスライドし、グラフのスケールを拡大し、目標値(Target)と予測値の差を見やすくします。
 ・[New] 欄に選択組成の成分値を少し変えてをインプットし、[Calculate] ボタンをクリックし、両特性値ができるだけ目標値に近づくように試行を繰り返します。
 ・本例では、主に SiO₂ 量を増やし重回帰係数の大きい Na₂O、Al₂O₃ 量を相対的に減らしていくことにより最適化を図ります。
 ・最終的に以下の結果が 1 例として得られます。SiO₂ 67.88%、Al₂O₃ 18.25%、Na₂O 13.87%の組成で熱膨張係数 $79.95 \times 10^{-7}/^{\circ}\text{C}$ 、屈折率 1.493 となります。

12. 組成と構造の相関調査 – SiO₂ 量と架橋酸素(BO)の割合

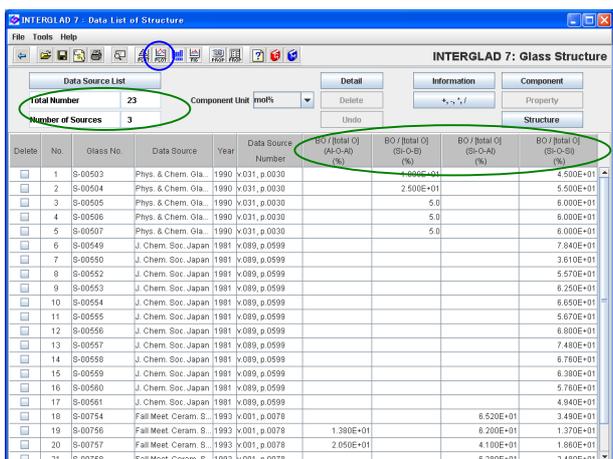
<マニュアル第3章E、第4章5参照>

1) 検索条件設定（構造検索画面） → 検索実施



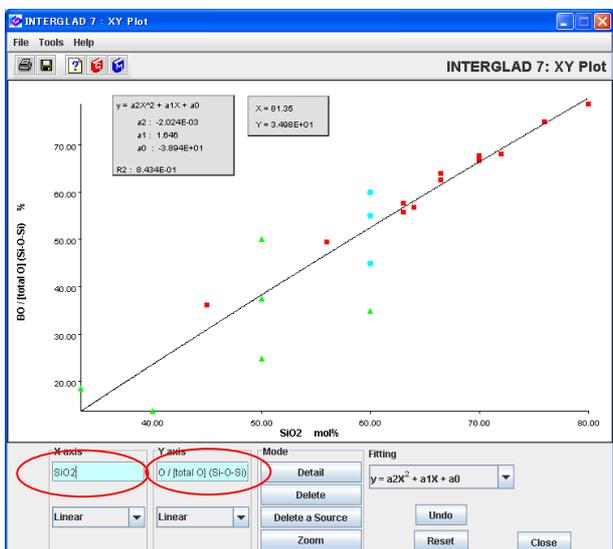
- 構造の [Description] 欄に BO/[totalO] を指定し、[Element] 欄に Si-O-Si を指定します。

2) 検索結果（構造検索結果画面）



- 23 件のガラス（出典 3 件）がリストアップされます。
- Si-O-Si のみでなく、Al-O-Al、Si-O-B、Si-O-Al のデータもリストに現われます。

3) 検索結果の利用（XY プロット画面）

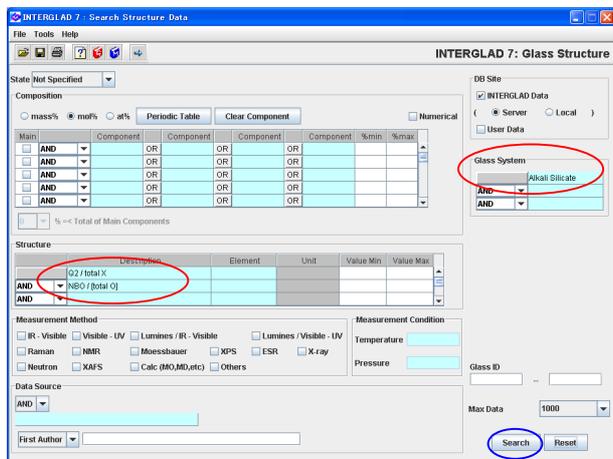


- SiO₂ 量 – BO/[total O](Si-O-Si) の XY プロットを表示します。
- 組成を指定していないため、各種の成分を含みますが、SiO₂ 量の増加により、架橋酸素量が増える傾向がわかります。

13. 構造因子間の相関調査 – アルカリケイ酸塩ガラスの Q^2 と非架橋酸素(NBO)割合

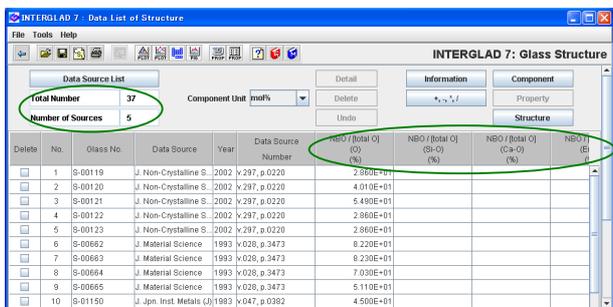
<マニュアル第3章E、第4章5参照>

1) 検索条件設定 (構造検索画面) → 検索実施



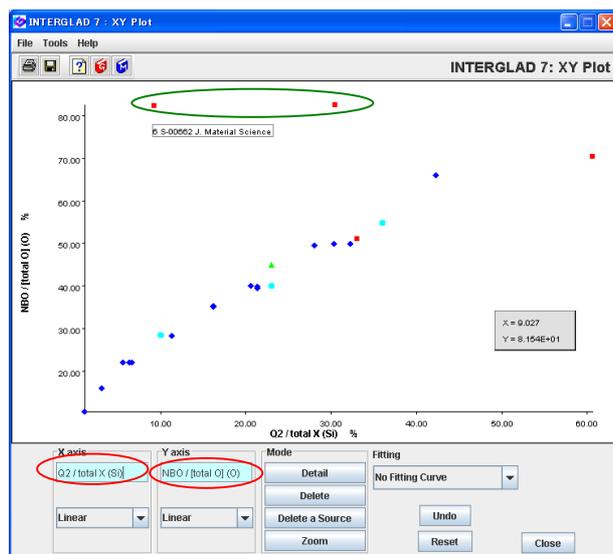
- ・ガラス系を Alkali Silicate に指定します。
- ・構造情報として Bridging Oxygen Information の Q_n Distribution 中の Q^2 /totalX、および Bridging Oxygen 中の NBO / [totalO]を指定します。

2) 検索結果 (構造検索結果画面)

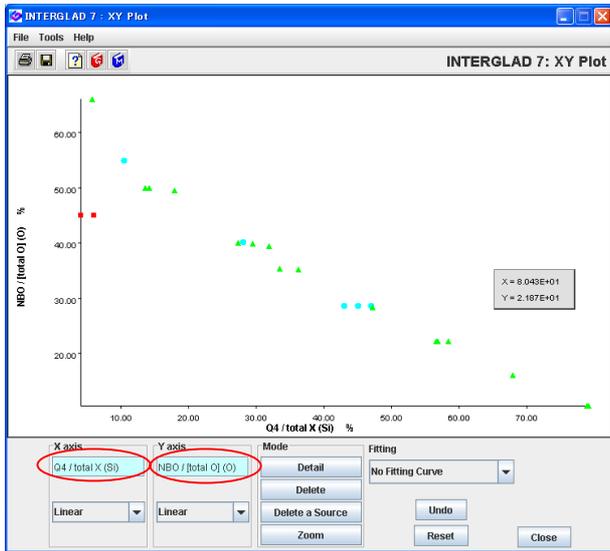


- ・37件のガラス (出典5件) がリストアップされます。
- ・ NBO / [totalO]については、Oとの結合原子を Si、Ca 等に規定した(Si-O)、(Ca-O)等もリストに現われます。 Q^2 /totalXもSiだけでなくAlについてのデータも現われます。

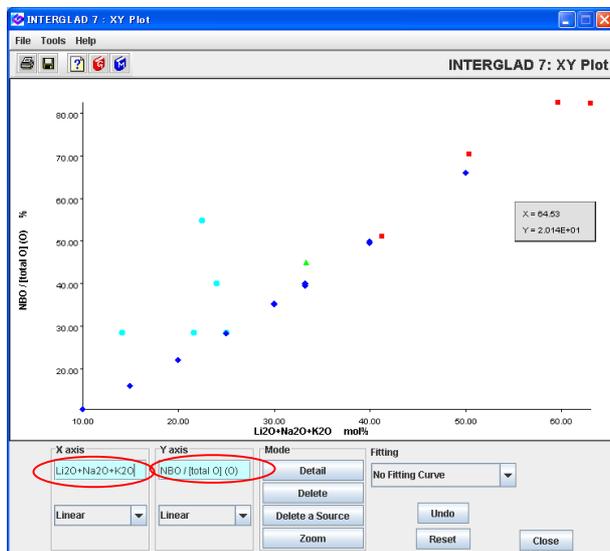
3) Q^2 と NBO の相関 (XYプロット画面)



- ・ Q^2 /totalX(Si)– NBO / [totalO](O)のXYプロットを表示します。
- ・ Q^2 の増加と共に NBO 割合も増加しており、ほぼ比例関係にあることがわかります。なお、この関係からはずれた位置にある2点のガラスは詳細画面 (特性) を調べると、いずれも急冷したガラスであることがわかり、これが他のガラスと同じカーブに乗らない原因と考えられます。



- 比較として $Q4 / \text{total X (Si)} - \text{NBO} / [\text{total O}] (\text{O})$ の XY プロットを表示します。
- この図より、 Q^2 の場合とは異なり、 Q^4 が増加すると当然ですが NBO 割合が減少する様子が示されます。



- また、本例で抽出されたガラスはいずれもアルカリを含むため、 Li_2O 、 Na_2O 、 K_2O の合計量(mol%)と NBO 割合との関係を調べると、左図のようになります。これにより、アルカリ量と NBO 割合がほぼ比例し、アルカリ量の増加により非架橋酸素が増加することが示されます。