

第5章 利用例

1. 特性データの検索と解析	3
1.1 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	3
1.2 複雑な組成・特性条件による検索 — 歪点を特定した無アルカリガラスの調査	5
1.3 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	7
1.4 擬似三元系の三角図解析 — SiO_2 、 P_2O_5 、 MgO+CaO 系 特許調査	9
1.5 特性間の相関の XY プロット解析 — 屈折率とアッペ数	11
1.6 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	12
1.7 高温特性の温度-特性プロット解析 — シリカガラスの粘度の温度依存性	14
1.8 図データの利用 — 鉛ケイ酸塩ガラスの屈折率の波長分散	16
1.9 特許検索 — 低屈折率ガラス	18
1.10 商品検索 — FRP 用高強度ガラス繊維	20
1.11 市販ガラスの組成推定	23
1.12 用途からの検索 — 半導体パッケージ用シールガラス	25
2. 特性予測（特性計算式）	28
2.1 特定組成のガラスの特性予測 — ホウケイ酸塩ガラス	28
2.2 ファクトデータと特性計算式による予測値の比較 — フッ化物ガラスの屈折率	30
3. 特性予測・組成最適化（重回帰分析）	32
3.1 特性についての予測式の導出 — 亜鉛ケイ酸塩ガラスの密度	32
3.2 特性予測 — 亜鉛ケイ酸塩ガラスの密度	35
3.3 組成最適化 — 特定密度の亜鉛ケイ酸塩ガラス	36
3.4 特性予測（1次式） — アルカリ土類ケイ酸塩ガラスのヤング率	38
3.5 特性予測（3次式） — ホウケイ酸塩ガラスの屈折率	41
3.6 材料設計（組成最適化）（1次式） — 特性を特定したソーダアルミノケイ酸塩ガラス	44
3.7 材料設計（組成最適化）（3次式） — 特性を特定したホウケイ酸塩ガラス	49

	組成系・特性 →重回帰式の導出	組成→特性予測	組成系・特性 →組成設計（最適化）
重回帰式：1次式 加成性が認められる場合	3.1	3.2 3.4	3.3 3.6（2特性）
重回帰式：多次式（3次式） 加成性が認められない 組成範囲を含む場合		3.5	3.7（2特性）

4. 構造データの検索と解析	55
4.1 構造情報調査 — ゲルマン酸塩ガラス	55
4.2 組成と構造と相関調査 — SiO ₂ 量と架橋酸素の割合	57
4.3 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	58
4.4 構造と特性の相関調査 — Al-O 配位数と特性	60
4.5 解析方法を特定した構造データの調査 — NMR による 4 配位ホウ素量	62

本章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。

選択・設定	:	
ボタン等操作	:	
確認	:	

- 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、参考と見てください。
- （本例では Ver.7.1.3.2.01～7.2.1.0.05 を使用しています）

1. 特性データの検索と解析

1.1 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 Al_2O_3 を 10-20 mass% 含み、 Na_2O あるいは K_2O 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

＜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

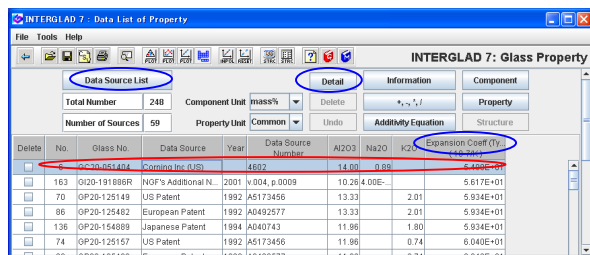
- 単位のデフォルトが mol% のため、mass% を選択します。
- Na_2O 、 K_2O は同一行に設定します。この場合、周期表で同時には設定できません。
- Cr_2O_3 、 CrO_3 は周期表での Cr 選択で一度に設定できます。
- 検索条件設定の順序は自由です。
- 検索条件が複雑になるほど検索に時間がかかります。
- 本例の場合、特性項目を Expansion Coeff (Typical) としますが、中分類（太字）の Linear Expansion Coeff としても同じ結果となります。

2) 検索結果（特性検索結果画面）

No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	Al2O3	Na2O	K2O	Expansion Coeff (Typical)
1	0P20-035418	Japanese Patent	1988	A036137	12.11	4.22		6.80E+01
2	0P20-037218	Japanese Patent	1992	A128841	15.80	5.50		1.20E+02
3	0J20-045104	J. Am. Ceram. Soc.	1981	v084, p.0208	6.00		2.25	7.44E+01
4	0J20-045105	J. Am. Ceram. Soc.	1981	v084, p.0208	7.22		4.34	6.87E+01
5	0J20-045284	J. Am. Ceram. Soc.	1985	v001, p.0007	17.03	4.29		6.70E+01
6	0C20-051404	Corning Inc. (US)		4602	14.00	0.89		5.40E+01
7	0P20-065115	Japanese Patent	1987	A235231	11.21	8.22		9.80E+01
8	0P20-065117	Japanese Patent	1987	A235231	11.71	13.70		1.07E+02
9	0P20-065120	Japanese Patent	1987	A235231	10.93	15.53		1.05E+02
10	0P20-065121	Japanese Patent	1987	A235231	10.02	1.10	12.17	1.18E+02
11	0P20-065122	Japanese Patent	1987	A235231	10.13	3.33	8.94	1.08E+02
12	0P20-065123	Japanese Patent	1987	A235231	10.06		8.88	1.23E+02
13	0P20-065124	Japanese Patent	1987	A235231	11.83	1.02	7.44	1.09E+02
14	0P20-065125	Japanese Patent	1987	A235231	11.80	1.02	7.42	1.09E+02
15	0P20-067932	Japanese Patent	1981	A051574	10.00	5.00		9.80E+01
16	0P20-067938	Japanese Patent	1981	A051574	10.00	5.00		8.30E+01
17	0B20-087441	Glass Hand Book (J)	1975	v001, p.0136	17.00	18.00	11.00	1.55E+02
18	0P20-084216	US Patent	1985	A4544974	2.05	15.38		1.25E+02
19	0P20-084218	US Patent	1985	A4544974	7.41	15.60		1.20E+02
20	0P20-102250	Japanese Patent	1989	A242440	13.00		1.00	6.70E+01
21	0P20-102251	Japanese Patent	1989	A242440	16.00		2.20	6.90E+01
22	0P20-102253	Japanese Patent	1989	A242440	16.00		2.20	6.40E+01

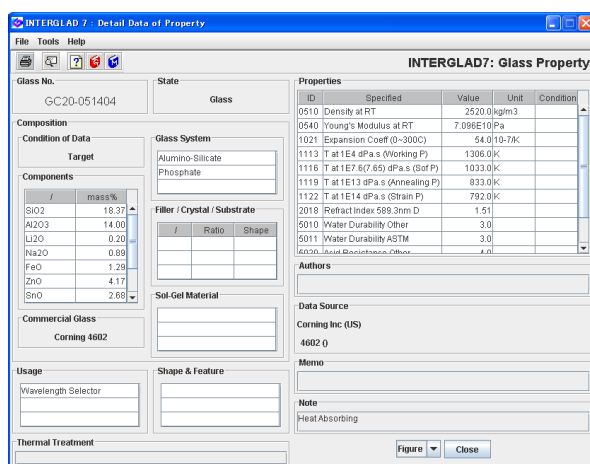
- 検索ガラス数(Total Number)に注目します。
- 検索条件に設定した組成成分、特性データ他の表が現れます。
- 必要に応じて三角図、XYプロットなどの解析を行います。

3) 検索結果の利用

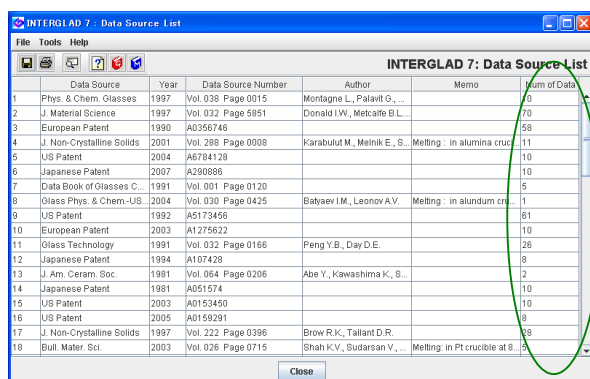


- ・各項目毎にソート（並び替え）が可能です。
[Shift] キーを押しながら表の項目ラベルをクリックします。
- ・本例では熱膨張係数で昇順にソートし、熱膨張係数が最小のガラスを選択し、[Detail] ボタンをクリックし、詳細データを調べます。

特性詳細画面



出典リスト画面

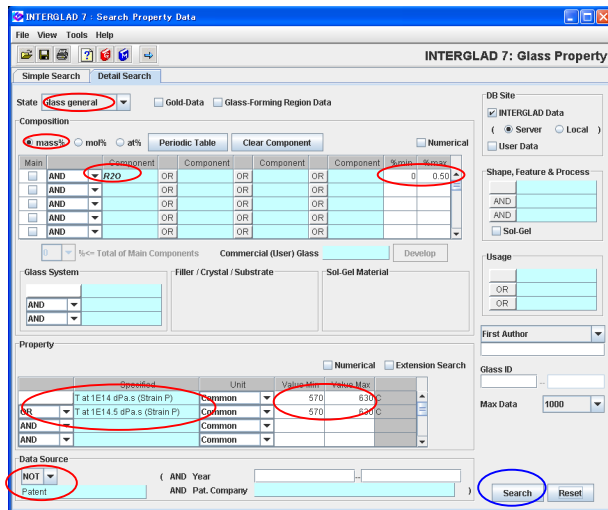


- ・また、検索結果画面より[Data Source List] ボタンをクリックし、出典リスト画面を開き、各出典毎のガラス数をチェックします。
- ・[Num of Data] 欄が各出典毎のガラス数です。

1.2 複雑な組成・特性条件による検索 — 歪点を特定した無アルカリガラスの調査

歪点(strain point)が $600 \pm 30^\circ\text{C}$ の無アルカリガラス（アルカリ酸化物含有量 0.5 mass%以下、特許以外の出典）の調査を行います
 <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



- State は Glass General（結晶化ガラス、変性ガラス等も含む）とします。Glass とすることもできます。
- アルカリはアルカリを一括検索できるイタリック体の R2O とします。
- アルカリ成分量は Max 値を 0.5 mass% とします。これにより Min 値を 0% としても、何も設定しなくてもアルカリを含まないガラスも検索対象となります。
- 特性の Strain Point には 2 つの粘度についての ID があるため、2 つを OR で結んで検索条件とします(必要により一つの設定とします)。
 Strain Point の設定は[Select Component]小画面でのキーワード検索による方法が便利です。

2) 検索結果（特性検索結果画面）

No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	Na2O	K2O	R2O	T at 1E14 dPa.s (Str.)	T at 1E14.5 dPa.s (C.)
1	9509-010267	Handbook of Glass Pr.	1998	v.001, p.0246					
2	MC05-051260	Schott AG (DE)		AF-45				6.270E+02	6.280E+02
3	OC05-051368	Corning Inc (US)	1976	1415				6.200E+02	
4	OC05-051408	Corning Inc (US)	1981	9700				5.750E+02	
5	OC03-051416	Corning Inc (US)	2003	7059		0.30		5.930E+02	
6	OC05-051488	Corning Inc (US)		8410				5.930E+02	
7	OC40-051489	Corning Inc (US)		8445				6.230E+02	
8	OC05-051915	Hoya Corp (J)		NA-45					6.100E+02
9	OC06-051918	Hoya Corp (J)	1989	LE-30					6.250E+02
10	OC03-052344	Nitto Boseki (J)		NITTOBOE-OLAS			0.50	6.100E+02	
11	GU05-056013	J. Am. Ceram. Soc.	1975	v.058, p.0300				5.870E+02	
12	OC03-066057	Hoya Corp (J)		BaCD5-589-613					6.000E+02
13	OC03-066089	Hoya Corp (J)		BaCD19-639-555					6.050E+02
14	OC05-066091	Hoya Corp (J)		LaC9-691-547					6.170E+02
15	OC05-066092	Hoya Corp (J)		LaC10-720-503					6.110E+02
16	OC05-066094	Hoya Corp (J)		LaC12-678-555					6.240E+02
17	OC05-066095	Hoya Corp (J)		LaC13-694-533					6.300E+02
18	9509-078435	Handbook of Glass D.	1983	v.00A, p.0586				6.280E+02	
19	GU03-078651	J. Non-Crystalline Sol.	1986	v.080, p.0141				6.290E+02	
20	OC03-088665	Schott Glas (Jena) (DE)		D187				6.150E+02	
21	OC03-088666	Schott Glas (Jena) (DE)		D189				6.100E+02	
22	OC03-088667	Schott Glas (Jena) (DE)		D189				6.200E+02	
23	OC03-088668	Schott Glas (Jena) (DE)		D263				6.150E+02	

- 検索結果として 74 件のデータが得られました。
- 本画面には、検索されたガラスに含まれるアルカリ酸化物成分がすべて表示されます。表中のイタリックではない R2O は出典に R₂O として記載のあるものです。

3) 検索結果の利用

INTERGLAD 7: Data List of Property

File Tools Help

INTERGLAD 7: Glass Property

Data Source List

Total Number: 74

Component Unit: [v001, p.0134]

Number of Sources: 63

Property Unit: Common

Detail Information Component

Undo Delete

Structure

Delete	No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	Na2O+K2O+R2O	T at 1E14 dPa.s (St)	T at 1E14.5 dPa.s (C)	Na2
	5	OC03-051416	Corning Inc (US)	2003	7059	0.30	5.930E+02		
	58	OB03-174769	Data Book of Glass...	1991	v001, p.0134	0.40		6.200E+02	0
	10	OC03-052344	Nitto Boseki (J)		NITTOBOE-GLASS	0.50	6.100E+02		
	1	OB09-010267	Handbook of Glass...	1986	v001, p.0248			6.260E+02	
	2	MC05-051260	Schott AG (DE)		AF-45		6.270E+02		
	3	OC05-051368	Corning Inc (US)	1976	1415		6.200E+02		
	4	OC05-051408	Corning Inc (US)	1981	6700		5.750E+02		
	6	OC05-051498	Corning Inc (US)		9410		6.930E+02		
	7	OC05-051489	Hoya Corp (J)		9445		6.230E+02		
	8	OC05-051915	Hoya Corp (J)		NA-45			6.100E+02	
	9	OC06-051918	Hoya Corp (J)	1989	LE-30			6.290E+02	
	11	OC05-056913	J. Am. Ceram. Soc.	1975	v058, p.0300		5.870E+02		
	12	OC03-066057	Hoya Corp (J)		BaCD5-599-113			6.000E+02	
	13	OC03-066089	Hoya Corp (J)		BaCD18-639-555			6.050E+02	
	14	OC05-066091	Hoya Corp (J)		LaC9-691-547			6.170E+02	
	15	OC05-066092	Hoya Corp (J)		LaC10-728-507			6.110E+02	
	16	OC05-066094	Hoya Corp (J)		LaC12-678-555			6.240E+02	
	17	OC05-066095	Hoya Corp (J)		LaC13-694-533			6.300E+02	
	18	OB09-078435	Handbook of Glass...	1983	v00A, p.0586			6.260E+02	
	19	OC03-079851	J. Non-Crystalline S...	1986	v080, p.0141			6.290E+02	
	20	OC03-088865	Schott Glas (Jena) (C...		D187			6.150E+02	
	21	OC03-088866	Schott Glas (Jena) (C...		D188			6.100E+02	

- ・アルカリ量の合計値を表記しアルカリ量の少ないものから順に並べることもできます。合計値の表記には四則演算(加減乗除)ボタンを使用し、まず $\text{Na}_2\text{O}+\text{K}_2\text{O}$ を計算し、これに R_2O を加える操作を行います。
(第4章 2.2 (2) (C) ⑩参照)
- ・本例の場合、カタログデータが多いため、組成数値の多くが不明です。

四則演算設定小画面

Select Arithmetic Operation Condition

Na2O+K2O + R2O

New Column Name: Na2O+K2O+R2O

Calculate Cancel

4) データの詳細 (特性詳細画面)

INTERGLAD 7: Detail Data of Property

File Tools Help

INTERGLAD7: Glass Property

Glass No. GC03-051416

State Glass

Properties

ID	Specified	Value	Unit	Condition
0050	Shear Modulus	2.617E10	Pa	
0060	Poisson Ratio	0.25		
0160	Fracture Toughness	0.8	MPa.m ^{1/2}	
0215	Stress Corrosion Resist	18.4		stress c...
0510	Density at RT	2753.0	kg/m ³	
0540	Young's Modulus at RT	6890.0	kgf/mm ²	
1021	Expansion Coeff (0-200C)	46.6	10 ⁻⁷ /K	
1113	T at 1E4 dPa.s (Working P)	1433.0	K	
1116	T at 1E7.6(7.65) dPa.s (Sof P)	1117.0	K	
1119	T at 1E13 dPa.s (Annealing P)	912.0	K	
1123	T at 1E14.5 dPa.s (Structure D)	668.0	K	

Authors

Data Source

Corning Inc (US)

7059 (2003)

Memo

Note

Fusion Glass Substrate

Figure Close

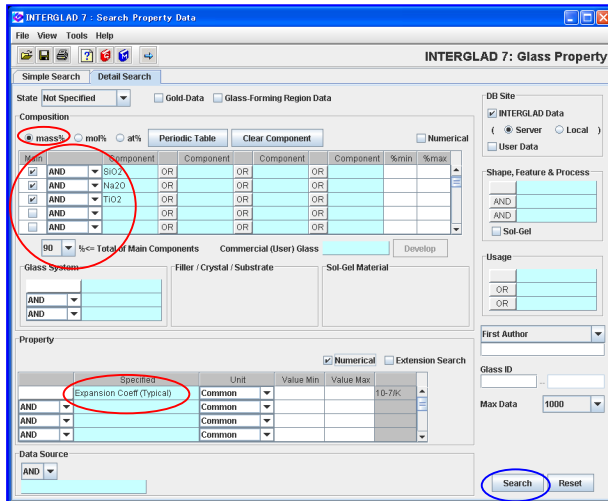
- ・また、検索結果画面より、詳細を知りたいガラスのデータを、[Detail]ボタンから特性詳細画面を開いて確認することができます。

1.3 三角図上に特性値をプロット – $\text{SiO}_2\text{-TiO}_2\text{-Na}_2\text{O}$ 系ガラスの熱膨張係数

$\text{SiO}_2\text{-TiO}_2\text{-Na}_2\text{O}$ 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

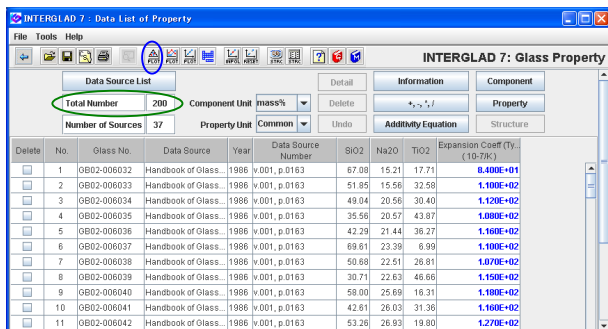
＜マニュアル第 3 章 B、C.1、第 4 章 2、3.1 参照＞

1) 検索条件設定（特性(詳細)検索画面） → 検索実施



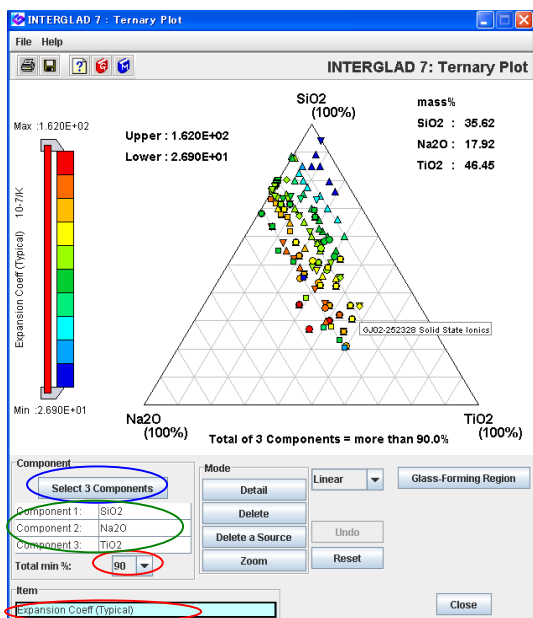
- ・ 3 成分合計を 90 mass%以上に設定します。
- ・ 熱膨張係数はデータが集まりやすい Expansion Coeff (Typical)を選択します。

2) 検索結果（特性検索結果画面）

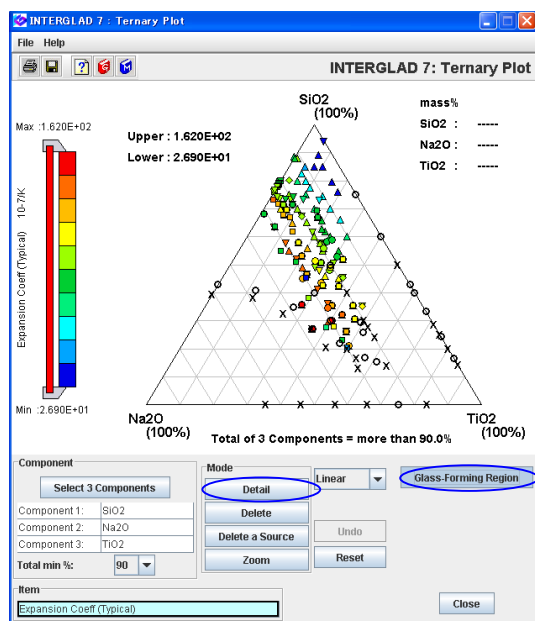


- ・ 200 件が抽出されます。

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、 SiO_2 、 TiO_2 、 Na_2O 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（ SiO_2 100%に近づく）ほど低くなる傾向があることがわかります。



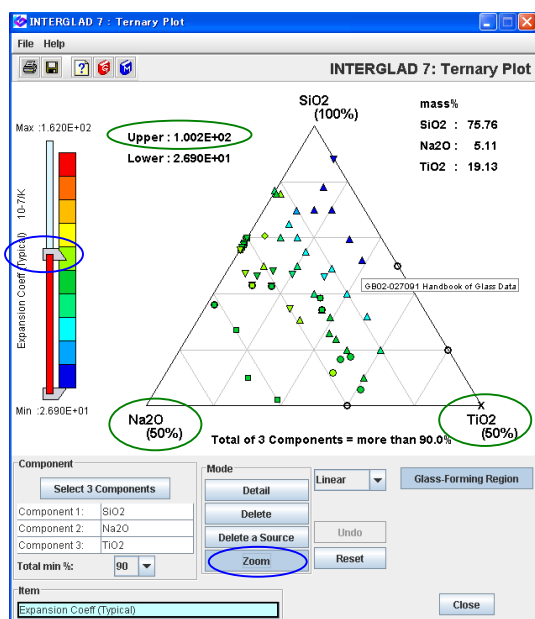
• 各点の出典は、各点にマウスを当てると吹き出しに現われます。また、各点の詳細画面は[Detail]ボタンをクリックしてボタンをアクティブにした上で、点をクリックすることにより開き内容を確認することができます。

• [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。



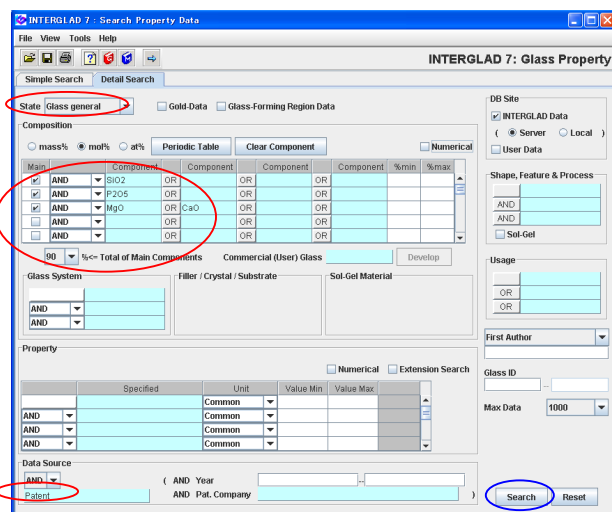
• また、画面左のスライダーを動かすことにより、三角図中の点の特性値範囲を変えることができます。左図の例は熱膨張係数を $100 \times 10^{-7}/K$ 以下のみとし、さらに[Zoom]ボタンにより SiO₂(100%)、Na₂O(50%)、TiO₂(50%)の三角図としたものです。

1.4 擬似三元系の三角図解析 — SiO_2 、 P_2O_5 、 $\text{MgO}+\text{CaO}$ 系 特許調査

SiO_2 、 P_2O_5 、 $\text{MgO}+\text{CaO}$ からなる擬似三元系について三角図を作成し、特許状況を調査します

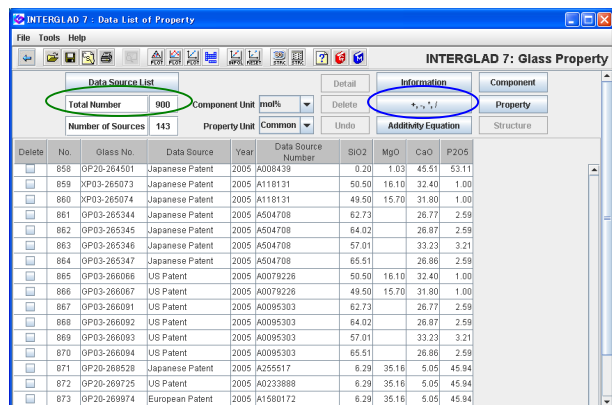
＜マニュアル第 3 章 B、C.1、第 4 章 2、3.1 参照＞

1) 検索条件設定（特性(詳細)検索画面） → 検索実施



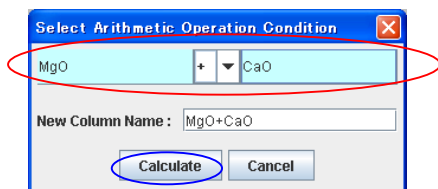
- State で Glass General を選択します。
- MgO と CaO は OR で結ばれるよう同じ行に並べて設定します。
- 成分合計を 90%とします。[Numerical]チェックボックスにチェックを入れ、数値のあるデータのみを検索します。
- 特許状況の調査のため出典欄で Patent を選択します。

2) 検索結果（特性検索結果画面）



- 900 件のガラスが抽出されます。
- 四則演算ボタンをクリックし、四則演算条件設定小画面で $\text{MgO}+\text{CaO}$ と設定すると、 $\text{MgO}+\text{CaO}$ の数値が特性検索結果画面にリストアップされます。

四則演算条件設定小画面



INTERGLAD 7: Data List of Property

File Tools Help

INTERGLAD 7: Glass Property

Data Source List

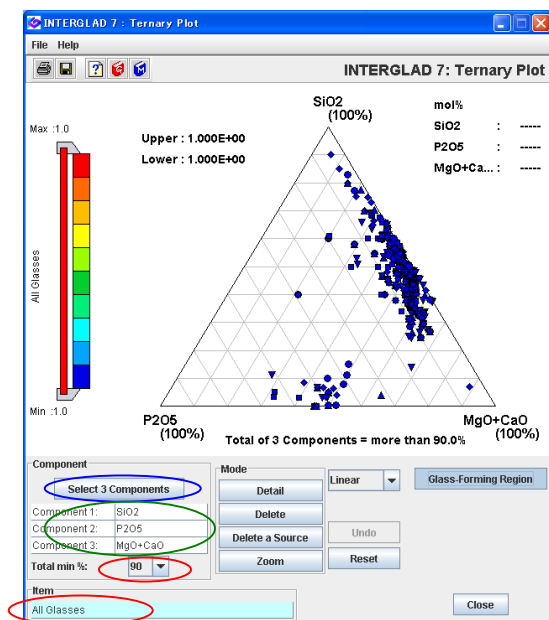
Total Number: 900
Number of Sources: 143

Component Unit: mol%
Property Unit: Common

Buttons: Detail, Information, Component, Delete, Undo, Additivity Equation, Property, Structure

Delete	No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	MgO+CaO	SiO ₂	MgO	CaO	P2O ₅
☐	858	JP20-264501	Japanese Patent	2005	A008439	46.54	0.2	1.03	45.51	53.11
☐	859	JP20-265073	Japanese Patent	2005	A118131	48.50	50.50	16.10	32.40	1.00
☐	860	JP20-265074	Japanese Patent	2005	A118131	47.50	49.50	15.70	31.80	1.00
☐	861	JP20-265344	Japanese Patent	2005	A504708	26.77	62.73		26.77	2.59
☐	862	JP20-265345	Japanese Patent	2005	A504708	26.87	64.02		26.87	2.59
☐	863	JP20-265346	Japanese Patent	2005	A504708	33.23	57.01		33.23	3.21
☐	864	JP20-265347	Japanese Patent	2005	A504708	26.86	65.51		26.86	2.59
☐	865	JP20-266066	US Patent	2005	A0079226	48.50	50.50	16.10	32.40	1.00
☐	866	JP20-266067	US Patent	2005	A0079226	47.50	49.50	15.70	31.80	1.00
☐	867	JP20-266091	US Patent	2005	A0095303	26.77	62.73		26.77	2.59
☐	868	JP20-266092	US Patent	2005	A0095303	26.87	64.02		26.87	2.59
☐	869	JP20-266093	US Patent	2005	A0095303	33.23	57.01		33.23	3.21
☐	870	JP20-266094	US Patent	2005	A0095303	26.86	65.51		26.86	2.59
☐	871	JP20-268528	Japanese Patent	2005	A255517	40.21	8.29	35.16	5.05	45.94
☐	872	JP20-269725	US Patent	2005	A0233888	40.21	8.29	35.16	5.05	45.94
☐	873	JP20-269874	European Patent	2005	A1580172	40.21	8.29	35.16	5.05	45.94

3) 三角図解析



- 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、3成分選択小画面で SiO₂、P₂O₅、MgO+CaO を選択し、合計量として 90 %、表示項目として All glasses を選択します (All Glasses がデフォルトとなっています)。
- SiO₂、P₂O₅、MgO+CaO の擬似三成分系の三角図が表示されます。
- この三角図により特許出願のある組成を可視化することができます。

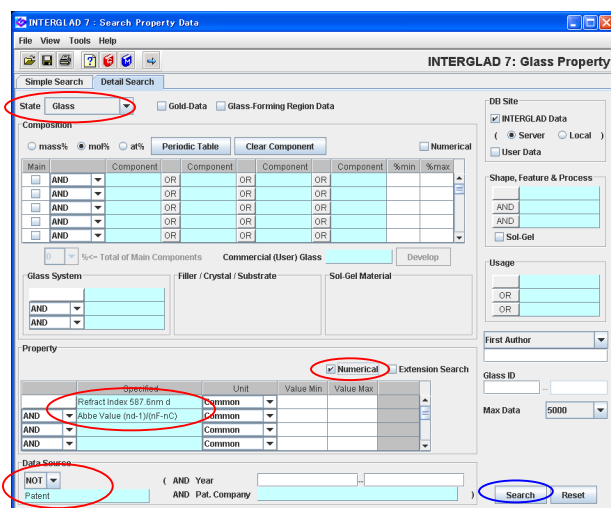
なお、本結果には三角図の周囲の線上 {SiO₂-P₂O₅、P₂O₅-(MgO+CaO)、(MgO+CaO)-SiO₂} のデータは基本的に含まれません。これは検索条件として 3 成分を必須としたためです (1 成分は MgO or CaO)。

1.5 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

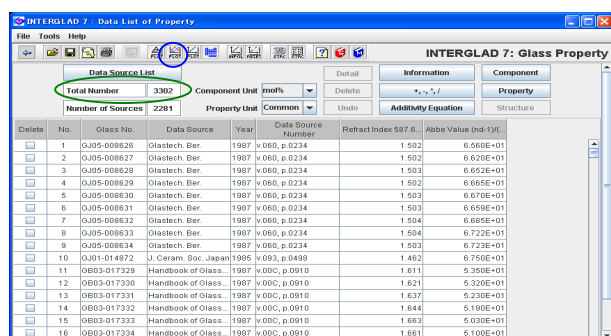
＜マニュアル第 3 章 B、C.2、第 4 章 2、3.2 参照＞

1) 検索条件設定（特性(詳細)検索画面） → 検索実施



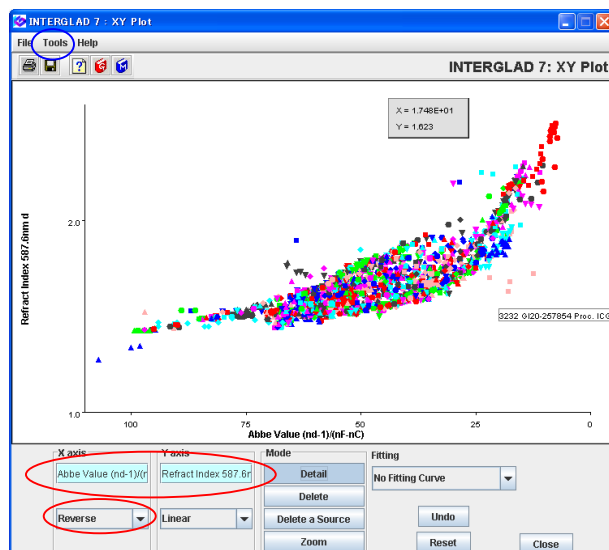
- ガラス状態として Glass を選択します。
- ガラスの屈折率には色々な波長の光によるデータがありますが、この例では代表的な He の d 線(587.6nm)のデータを抽出します。
- アッペ数の種類も複数ありますが、屈折率の n_d に対応した $(n_d - 1)/(n_F - n_C)$ を選択します。
- 特性数値データのみを選択する [Numerical] チェックボックスにチェックを入れます。
- 出典としては、Patent を除きます。

2) 検索結果（特性検索結果画面）



- 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ペ数 $(n_d - 1)/(n_F - n_C)$ と屈折率 n_d の分布を一覧できます。
- 本図では X 軸のアッペ数について、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。

1.6 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℃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

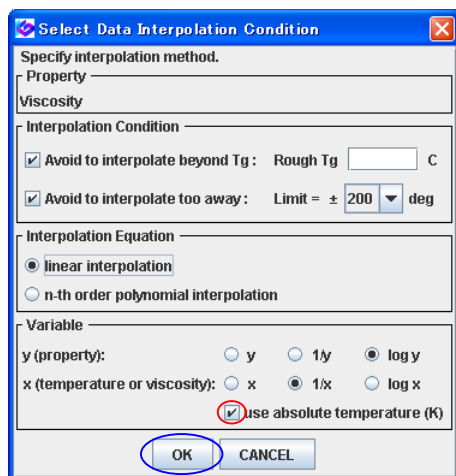
- ・組成はガラス系の Boro-Silicate みの入力とします。
- ・特性については、Viscosity 700℃と設定し、拡張検索[Extension Search]チェックボックスにチェックを入れます。
(本例の画面図は上記の方法に対応します)
- ・なお、特性中分類の Viscosity(100-1000℃) (太字) を選択することでも 700℃の粘度データを含む検索が可能となります。この場合、100-1000℃の広い温度範囲の検索となります。

2) 検索結果（特性検索結果画面）

No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	Viscosity at 700C (dPa.s)
1	0J02-000026	Glastech. Ber.	1983	v056, p.0125	
2	0B04-004679	Handbook of Glass...	1986	v001, p.0299	
3	0B04-004680	Handbook of Glass...	1986	v001, p.0299	2.692E+01
4	0B04-004681	Handbook of Glass...	1986	v001, p.0299	1.0E+01
5	0B04-004682	Handbook of Glass...	1986	v001, p.0299	
6	0B04-004683	Handbook of Glass...	1986	v001, p.0299	
7	0B04-004684	Handbook of Glass...	1986	v001, p.0299	
8	0J05-005435	J. Am. Ceram. Soc.	1980	v063, p.0136	2.0E+10
9	0J05-010969	J. Am. Ceram. Soc.	1974	v057, p.0109	
10	0J05-010970	J. Am. Ceram. Soc.	1974	v057, p.0109	
11	0B05-010245	Handbook of Glass...	1986	v001, p.0243	
12	0B05-010246	Handbook of Glass...	1986	v001, p.0243	
13	0B05-010247	Handbook of Glass...	1986	v001, p.0243	
14	0B05-010248	Handbook of Glass...	1986	v001, p.0243	
15	0B05-010249	Handbook of Glass...	1986	v001, p.0244	1.622E+03
16	0B05-010250	Handbook of Glass...	1986	v001, p.0244	
17	0B05-010253	Handbook of Glass...	1986	v001, p.0244	3.162E+03
18	0B05-010254	Handbook of Glass...	1986	v001, p.0244	
19	0B05-010255	Handbook of Glass...	1986	v001, p.0244	1.514E+04
20	0B05-010256	Handbook of Glass...	1986	v001, p.0244	
21	0B05-010257	Handbook of Glass...	1986	v001, p.0244	2.188E+05
22	0B05-010259	Handbook of Glass...	1986	v001, p.0244	2.754E+06
23	0B05-010260	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℃)で検索した場合には、100-1000℃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



・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。

・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。

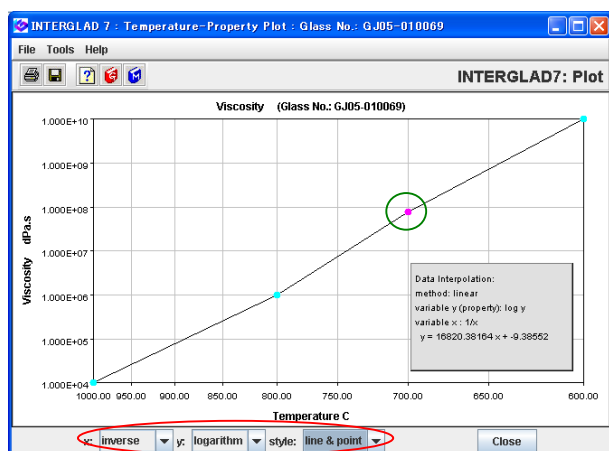
・補間データが現われないガラスは、データが一つしかないか、デフォルト条件である 700±200°Cの範囲に補間の元となるデータが一つもないことにより、補間計算ができないガラスです。

・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)。

No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	Viscosity at 700C (dPa.s)
1	GJ02-000026	Glastech. Ber.	1983	v.056, p.0125	
2	GB04-004679	Handbook of Glass.	1986	v.001, p.0299	2.692E+01
3	GB04-004680	Handbook of Glass.	1986	v.001, p.0299	1.0E+01
4	GB04-004681	Handbook of Glass.	1986	v.001, p.0299	
5	GB04-004682	Handbook of Glass.	1986	v.001, p.0299	1.167E+03
6	GB04-004683	Handbook of Glass.	1986	v.001, p.0299	3.162E+03
7	GB04-004684	Handbook of Glass.	1986	v.001, p.0299	
8	GJ05-005435	J. Am. Ceram. Soc.	1980	v.063, p.0126	2.0E+10
9	GJ05-010069	J. Am. Ceram. Soc.	1974	v.057, p.0109	2.973E+07
10	GJ05-010070	J. Am. Ceram. Soc.	1974	v.057, p.0109	7.311E+09
11	GB05-010245	Handbook of Glass.	1986	v.001, p.0243	
12	GB05-010246	Handbook of Glass.	1986	v.001, p.0243	
13	GB05-010247	Handbook of Glass.	1986	v.001, p.0243	
14	GB05-010248	Handbook of Glass.	1986	v.001, p.0243	
15	GB05-010249	Handbook of Glass.	1986	v.001, p.0244	1.622E+03
16	GB05-010250	Handbook of Glass.	1986	v.001, p.0244	1.005E+03
17	GB05-010253	Handbook of Glass.	1986	v.001, p.0244	
18	GB05-010254	Handbook of Glass.	1986	v.001, p.0244	
19	GB05-010255	Handbook of Glass.	1986	v.001, p.0244	1.514E+04
20	GB05-010256	Handbook of Glass.	1986	v.001, p.0244	
21	GB05-010257	Handbook of Glass.	1986	v.001, p.0244	2.198E+05
22	GB05-010259	Handbook of Glass.	1986	v.001, p.0244	2.754E+06
23	GB05-010260	Handbook of Glass.	1986	v.001, p.0244	2.692E+07

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。

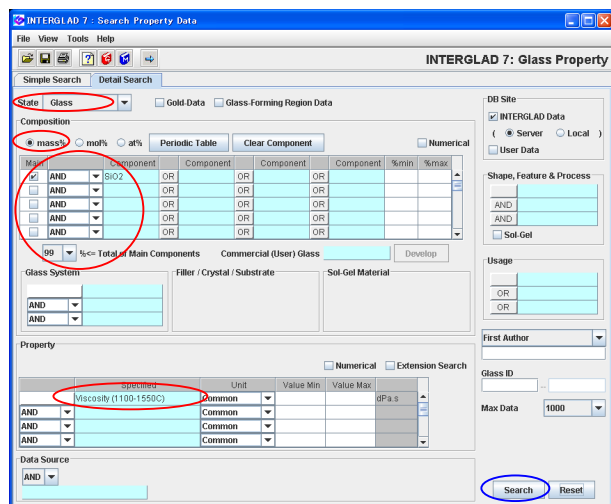
・粘度の場合、温度(X 軸)は逆数(1/x)、粘度(Y 軸)は対数(logy)スケールがデフォルトとなっています。(Ver. 7.2.1.0.05)

1.7 高温特性の温度-特性プロット解析 – シリカガラスの粘度の温度依存性

シリカガラスの高温粘度(1100℃以上)の温度依存性を調査します

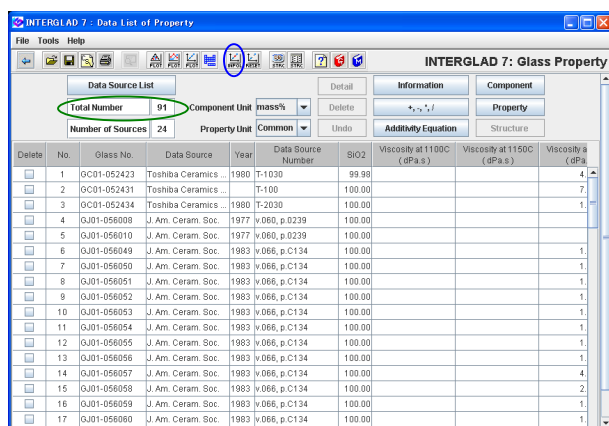
<マニュアル第3章B、C.3、第4章2、3.3 参照>

1) 検索条件設定 (特性(詳細)検索画面) → 検索実施



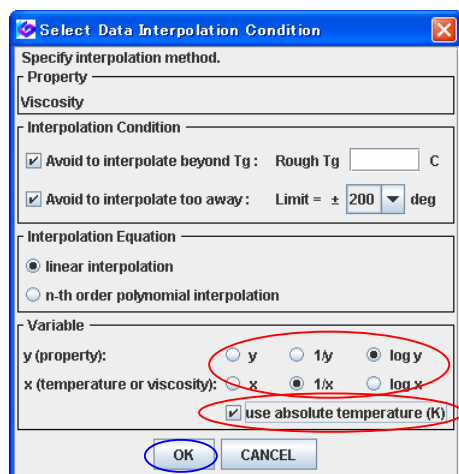
- 本例ではシリカガラスとして SiO₂ 99 mass% 以上の組成を抽出します。
- 粘度については Viscosity(1100-1550C)を選択します。

2) 検索結果 (特性検索結果画面)



- 91 ガラスが抽出されます。

データ補間条件選択小画面



- 検索結果画面の補間アイコンをクリックするとデータ補間条件選択小画面が開きます。
- 変数について、粘度のため y 軸(logy)、x 軸(逆数の 1/x)はデフォルトのままとしますが、温度については逆数の場合、通常、絶対温度Kを使用しますので、[use absolute temperature]チェックボックスをチェックします。他の条件はデフォルトのままとします。

INTERGLAD 7: Data List of Property

File Tools Help

INTERGLAD 7: Glass Property

Data Source List

Total Number: 91
Number of Sources: 24

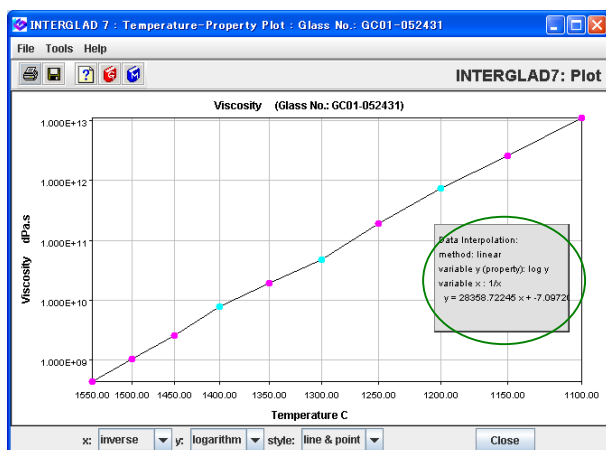
Component Unit: mass%
Property Unit: Common

Details: Information: Component: Additivity Equation: Structure

No.	Glass No.	Viscosity at 1100C (dPa.s)	Viscosity at 1150C (dPa.s)	Viscosity at 1200C (dPa.s)	Viscosity at 1250C (dPa.s)	Viscosity at 1300C (dPa.s)	Viscosity at 1350C (dPa.s)
1	GC01-052423	1.220E+14	2.178E+13	4.000E+12	8.491E+11	2.700E+11	6.088E+10
2	GC01-052431	1.084E+13	2.582E+12	7.400E+11	1.812E+11	4.800E+10	1.951E+10
3	GC01-052434	5.193E+14	7.887E+13	1.300E+13	2.730E+12	6.800E+11	1.417E+11
4	QJ01-056008						1.417E+11
5	QJ01-056010						
6	QJ01-056049			1.349E+09			
7	QJ01-056050			1.778E+09			
8	QJ01-056051			1.047E+09			
9	QJ01-056052			1.905E+09			
10	QJ01-056053			1.995E+09			
11	QJ01-056054			1.259E+09			
12	QJ01-056055			1.202E+09			
13	QJ01-056056			1.000E+09			
14	QJ01-056057			4.266E+08			
15	QJ01-056058			2.630E+08			
16	QJ01-056059			1.302E+08			
17	QJ01-056060			1.122E+08			

- 補間計算された数値がピンク色の字で表示されます。

3) 温度－特性プロット解析



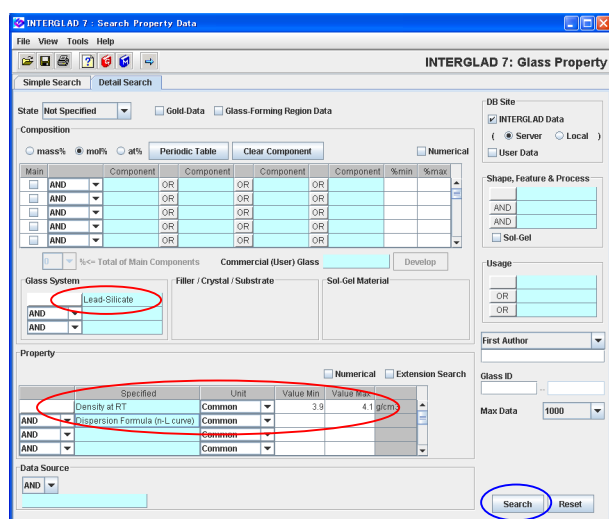
- 補間データのあるガラスを選択し(例では052431)、補間グラフアイコンをクリックすると、温度－特性プロットが現われます。登録(測定)データが水色、補間データがピンク色となっています。
- 本例の場合、補間範囲を実測値(1200,1300,1400℃)の±200℃(デフォルト)としたため、検索指定範囲の1100-1550℃全範囲のデータが補間されました。また補間式は直線(デフォルト)としたため、 $\log y = a(1/x) + b$ (ここでxは絶対温度)となり図中に式と係数が現われます。
- 温度－特性プロットは各ガラス毎となるため、複数のガラスの温度－特性プロットを比較して表示したい場合には、特性検索結果画面の[CSV]アイコンから表をCSV保存し、excel等の表計算ソフトにより、XYプロットを作成してください。

1.8 図データの利用 — 鉛ケイ酸塩ガラスの屈折率の波長分散

密度 4 g/cm³ の鉛ケイ酸塩ガラスについて、屈折率の波長分散性を調査します

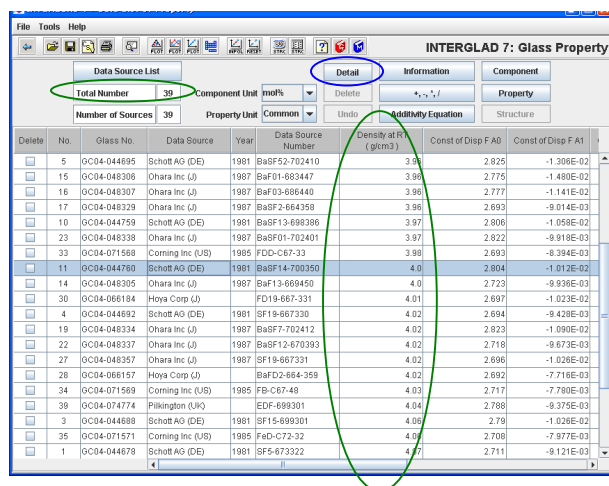
<マニュアル第 3 章 B、第 4 章 2.3、第 6 章 3 参照>

1) 検索条件設定（特性(詳細)検索画面） → 検索実施



- 組成としてガラス系の Lead-Silicate を選択します。
- 特性条件として密度 3.9–4.1g/cm³ 及び屈折率の分散式（太字の中分類 Dispersion Formula (n-L curve)）を設定します。

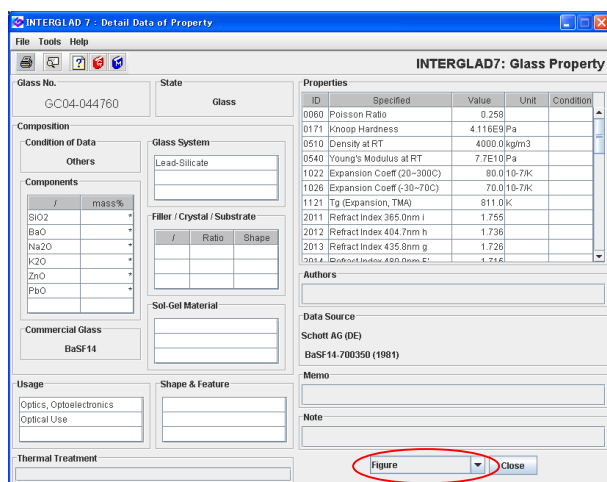
2) 検索結果（特性検索結果画面）



- 検索結果として 39 件がリストアップされ、分散式の係数値が表示されます。
- 密度をソート(低高順)すると、密度が 4.0 g/cm³ のガラスが 2 つあることがわかります。
- なお、分散式には、Sellmeier の式もありますが、Sellmeier の式で検索すると、検索結果は 0 となりますので、本例では上記の式の結果のみとなります。本例の場合、二つの式を OR で結んで同時に検索することはできません。

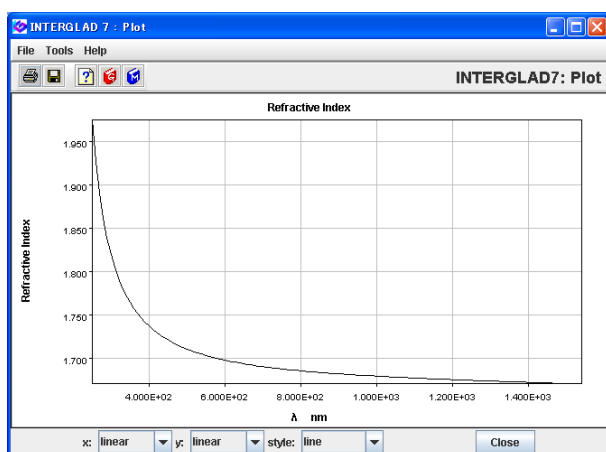
3) 波長分散図の表示

特性詳細画面



- 密度が 4.0 g/cm^3 のガラスの内、一つ (44760) の詳細画面を開きます。画面下部の Figure プルダウンメニューから CONST.DISP FORMULA をクリックすると、屈折率の波長分散を表すグラフが表示されます。

波長分散図



- リスト中の他のガラスについても同様に波長分散カーブを確認することにより、密度が 4.0 g/cm^3 の鉛ガラスの波長による屈折率の変化の傾向を知ることができます。
- 本例の場合、検索されたガラスはすべてカタログデータであり、組成の数値データがありませんが、同等特性を持つ Lead-Silicate 系ガラスのカタログ以外の出典での検索を別途行うことにより、組成を推定することができます。

1.9 特許検索 — 低屈折率ガラス

低屈折率ガラス（屈折率 1.4 以下）について、組成の特許調査をします

＜マニュアル第 3 章 B、C.5、第 4 章 2、3.4 参照＞

1) 検索条件設定（特性(詳細)検索画面） → 検索実施

INTERGLAD 7: Search Property Data

File View Tools Help

INTERGLAD 7: Glass Property

Simple Search Detail Search

State: Not Specified

Gold Data Glass-Forming Region Data

Composition

mass% mol% at% Periodic Table Clear Component Numerical

Main AND OR Component OR Component OR Component OR %min %max

Commercial (User) Glass Develop

Glass System AND OR

Filler / Crystal / Substrate Sol-Gel Material

Property

Specified OR Value Min Value Max

Refractive Index (Typical) Common 1.4

AND OR Common Common Common

Data Source AND Year AND Pat. Company

Patent Search Reset

- ・特性の屈折率はデータの多く集まる代表値 (Typical) を選択します。
- ・出典は中分類の特許 (Patent) を選択します。

2) 検索結果（特性検索結果画面）

INTERGLAD 7: Glass Property

File Tools Help

Data Source List

Total Number 17

Component Unit mol%

Property Unit Common

Number of Sources 6

Detail Information Component

Delete Additivity Equation Property Structure

Delete	No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	Refractive Index (Ty.)
☐	1	JP25-048746	Japanese Patent	1979	A139817	1.355
☐	2	JP25-048747	Japanese Patent	1979	A139817	1.394
☐	3	JP25-048748	Japanese Patent	1979	A139817	1.355
☐	4	JP25-048749	Japanese Patent	1979	A139817	1.343
☐	5	JP20-056965	US Patent Owens	1979	A4142986	1.355
☐	6	JP20-056966	US Patent Owens	1979	A4142986	1.394
☐	7	JP20-056967	US Patent Owens	1979	A4142986	1.355
☐	8	JP20-056968	US Patent Owens	1979	A4142986	1.343
☐	9	TP01-061054	US Patent Battelle	1987	A4704299	1.4
☐	10	JP60-070409	Japanese Patent	1983	A135152	1.383
☐	11	JP60-070410	Japanese Patent	1983	A135152	1.377
☐	12	JP60-070412	Japanese Patent	1983	A135152	1.394
☐	13	JP60-095243	European Patent	1987	A0234455	1.337
☐	14	JP60-095244	European Patent	1987	A0234455	1.332
☐	15	JP60-190181	European Patent	1999	A0912453	1.4
☐	16	JP60-190182	European Patent	1999	A0912453	1.4
☐	17	JP60-190183	European Patent	1999	A0912453	1.39

- ・17 件のデータがリストアップされます。

3) 検索結果の利用

INTERGLAD 7: Glass Property

File Tools Help

Data Source List

Total Number 17

Component Unit mol%

Property Unit Common

Number of Sources 6

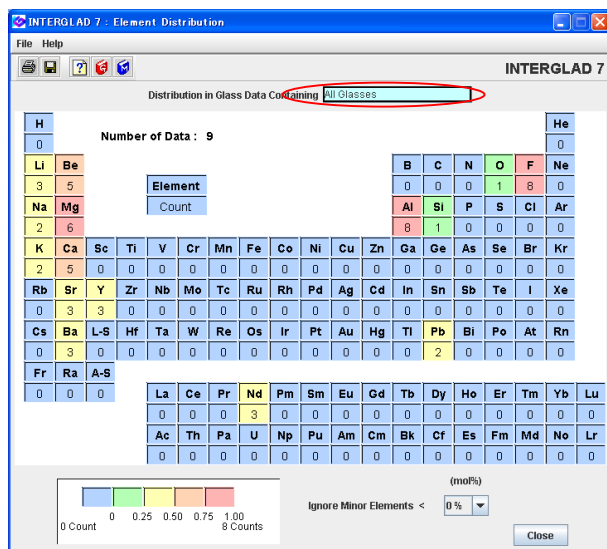
Detail Information Component

Delete Additivity Equation Property Structure

Delete	No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	Glass System 1	Glass System 2	SiO ₂	Na ₂ O	P ₂ O ₅	LiF	NaF
☐	1	JP25-048746	Japanese Patent	1979	A139817	Fluoro-Phosphate						24.5
☐	2	JP25-048747	Japanese Patent	1979	A139817	Fluoro-Phosphate						15.0
☐	3	JP25-048748	Japanese Patent	1979	A139817	Fluoro-Phosphate						25.0
☐	4	JP25-048749	Japanese Patent	1979	A139817	Fluoro-Phosphate						16.0
☐	5	JP20-056965	US Patent Owens	1979	A4142986	Phosphate	Fluoride					24.5
☐	6	JP20-056966	US Patent Owens	1979	A4142986	Phosphate	Fluoride					15.0
☐	7	JP20-056967	US Patent Owens	1979	A4142986	Phosphate	Fluoride					25.0
☐	8	JP20-056968	US Patent Owens	1979	A4142986	Phosphate	Fluoride					16.0
☐	9	TP01-061054	US Patent Battelle	1987	A4704299	Silica		100.00				
☐	10	JP60-070409	Japanese Patent	1983	A135152	Fluoride						
☐	11	JP60-070410	Japanese Patent	1983	A135152	Fluoride						
☐	12	JP60-070412	Japanese Patent	1983	A135152	Fluoride						
☐	13	JP60-095243	European Patent	1987	A0234455	Fluoride						
☐	14	JP60-095244	European Patent	1987	A0234455	Fluoride						
☐	15	JP60-190181	European Patent	1999	A0912453	Fluoride					9.00	8.0
☐	16	JP60-190182	European Patent	1999	A0912453	Fluoride					8.00	8.0
☐	17	JP60-190183	European Patent	1999	A0912453	Fluoride					12.00	12.0

- ・検索結果画面において、[Information] ボタンより Glass System を選択し、ガラス系を表示させます。また [Component] ボタンより、成分選択小画面で [Select All] ボタンをクリックすることにより、リストのガラスの組成全成分をリスト上に表示することができます。

4) 元素分析



- また、検索されたガラスの成分(元素)について解析をすることができます。
- 検索結果画面の元素解析アイコンから元素解析画面を表示させ、元素解析項目欄で element の All Glasses を選択することにより、リストアップされた全ガラスの成分分布を一覧することができます。
- この元素分析より、本例の場合、フッ化物系が主であり、Al を含む組成が多いことがわかります。なお、下記の注意が必要です。
- 検索結果画面の Glass System では、約半分のガラスに Phosphate あるいは Fluoro-Phosphate が現われていますが、元素解析画面では P が 0 となっています。これは、これらの場合、いずれも NaPO_3 として数値が登録されており、このような複酸化物の場合 P_2O_5 の数値は登録されず、*のみの表示となるためです。*の成分がある場合、そのガラスは元素分析画面に表れません。

5) 特許以外の低屈折率ガラスの検索 (参考)

INTERGLAD 7 - Data List of Property

File Tools Help

INTERGLAD 7: Glass Property

Data Source List

Total Number: 54

Number of Sources: 23

Property Unit: Common

Delete	No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	Refractive Index	Glass System 1	Glass System 2
	32	QJ80-145421	Phys. & Chem. Gla.	1991	x032, p.0231	1.34	Fluoride	
	33	QJ01-148561	J. Non-Crystalline S.	1991	x128, p.0069	1.34	Silica	
	34	QJ80-152063	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0210	1.2	Fluoride	
	35	QJ10-157838	J. Non-Crystalline S.	1994	x167, p.0180	1.339	Borate	Other Oxide
	36	QJ10-157837	J. Non-Crystalline S.	1994	x167, p.0180	1.339	Borate	Other Oxide
	37	QJ02-165498	Glastech. Ber.	1996	x069, p.0216	1.387	Alkali Silicate	Other Oxide
	38	QJ02-165499	Glastech. Ber.	1996	x069, p.0216	1.387	Alkali Silicate	Other Oxide
	39	QJ02-165500	Glastech. Ber.	1996	x069, p.0216	1.389	Alkali Silicate	Other Oxide
	40	QJ03-172323	J. Non-Crystalline S.	1997	x212, p.0055	1.14	Alkaline-earth Silicate	Alumino-Silicate
	41	QJ03-172324	J. Non-Crystalline S.	1997	x212, p.0055	1.22	Alkaline-earth Silicate	Alumino-Silicate
	42	QJ03-172325	J. Non-Crystalline S.	1997	x212, p.0055	1.39	Alkaline-earth Silicate	Alumino-Silicate
	43	QJ03-172325	J. Non-Crystalline S.	1997	x212, p.0055	1.39	Alkaline-earth Silicate	Alumino-Silicate
	44	QJ10-207463	Glastech. Ber.	2001	x074, p.0039	1.27	Fluoride	
	45	QJ80-235308	Materials Science F.	1995	x005, p.0149	1.35	Borate	
	46	QJ10-239888	Bull. Mater. Sci.	1999	x022, p.1055	1.25	Borate	Halide (Except Fluoride)
	47	QJ27-239845	Bull. Mater. Sci.	2003	x026, p.0639	1.3	Lead	Other Oxide
	48	QJ27-239847	Bull. Mater. Sci.	2003	x026, p.0639	1.39	Lead	Other Oxide
	49	MJ02-268029	Glass Phys. & Chem.	2005	x031, p.0602	1.4	Alkali Silicate	
	50	MJ02-268030	Glass Phys. & Chem.	2005	x031, p.0602	1.3	Alkali Silicate	
	51	MJ02-268031	Glass Phys. & Chem.	2005	x031, p.0602	1.3	Alkali Silicate	
	52	QJ28-292232	J. Material Science	2009	x044, p.5800	1.303	Tellurite	Other Oxide
	53	QJ28-292230	J. Material Science	2009	x044, p.5800	1.35	Tellurite	Other Oxide

- 上記では特許検索数が少ないため、参考までに出典を特許以外 (Not Patent) として検索すると、48 件が得られます。
- 検索結果画面でガラス系を表示させると、F を含む系以外で Fluoride、Alkali-Silicate、Alkaline-earth Silicate、Tellurite 系等にも 1.4 以下の屈折率のガラスがあることがわかります。これらのガラスの特許は INTERGLAD に登録されていないため、別途特許調査が必要となります。

1.10 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）

Delete	No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	Young's Modulus at (GBa)	Tensile Strength (MPa)
☐	10	GC08-052348	Nitto Boseki (J)				
☐	4	GC08-052325	Owens Corning (US)	1989			
☐	3	GC03-052324	Owens Corning (US)	1989			
☐	6	GC03-052349	Asahi Fiber Glass (J)				
☐	7	GC03-052350	Asahi Fiber Glass (J)				
☐	9	GC03-052344	Nitto Boseki (J)				
☐	5	GC03-052326	American Biomaterials	1989			
☐	12	GC02-052349	Nitto Boseki (J)				
☐	11	GC05-052348	Nitto Boseki (J)				
☐	8	GC05-052382	Central Glass (J)				
☐	13	GC03-052753	PPO Ind. (US)				
☐	2	GC03-052074	Nippon Sheet Glass				
☐	14	GC03-071205	Nippon Electric Glass	1989			
☐	1	GC03-051554	Coming Inc (US)				
☐	15	GC05-071206	Nippon Electric Glass	1989			
☐	16	GC03-144895	Saint-Gobain (FR)	1983			
☐	17	GC08-144896	Saint-Gobain (FR)	1983			
☐	18	GC08-144897	Saint-Gobain (FR)	1985			

・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。

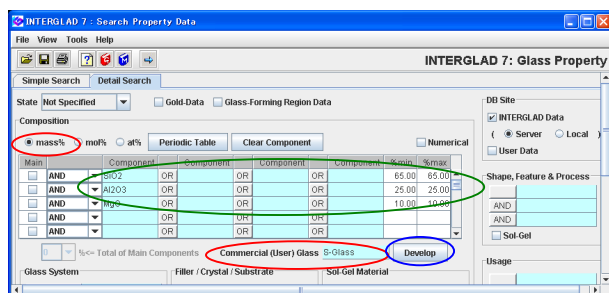
・特性項目より、高強度ガラス繊維として重要な引張強度 (Tensile Strength) とヤング率 (Young's Modulus at RT) を選択しチェックボックスにチェックを入れ、これらのデータをリストに表示させます。

・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 T-Glass、S-Glass 等)。

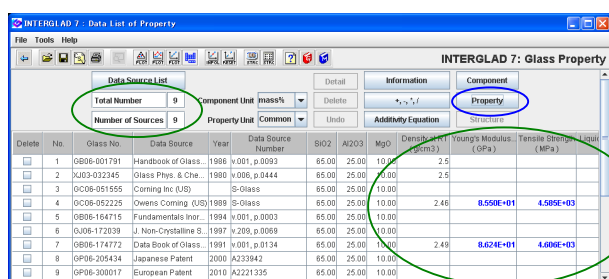
特性選択小画面

3) 抽出ガラスの調査

- 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。



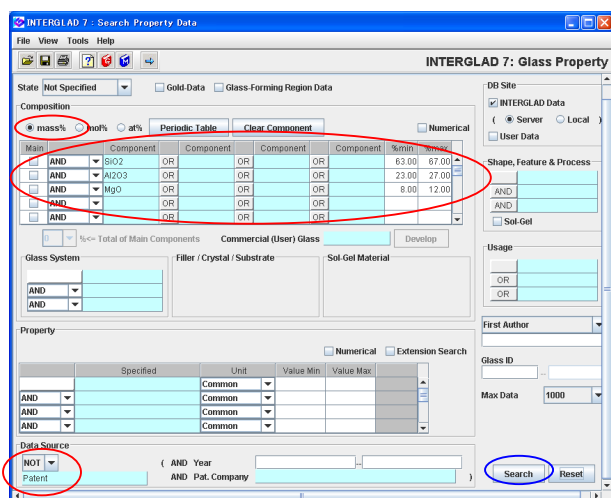
- 特性検索画面にもどり、[Commercial(User) Glass]欄で S/ S-Glass を選択し、組成展開 [Develop]ボタンをクリックした後、検索を行います。この場合、出典欄は設定しません。
- 本例の場合、組成展開により成分の最大値、最小値が同じ値になりますが、これは S-Glass として登録されたガラス組成に幅がないためです。



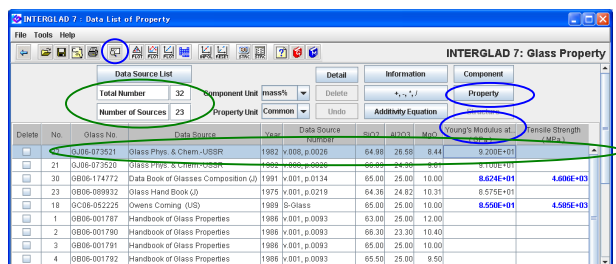
- 検索結果画面に 9 ガラス(9 出典)が表示されます。組成展開をしないで検索すると 3 件のみの抽出となり、組成展開によりカタログデータ以外の雑誌等のデータも抽出されたことがわかります。
- この画面で[Property]ボタンより特性選択小画面を開き、[Select All]ボタンをクリックして [OK]ボタンをクリックすることにより、登録されているすべての特性データを表示させることができます。

4) 周辺ガラスの調査

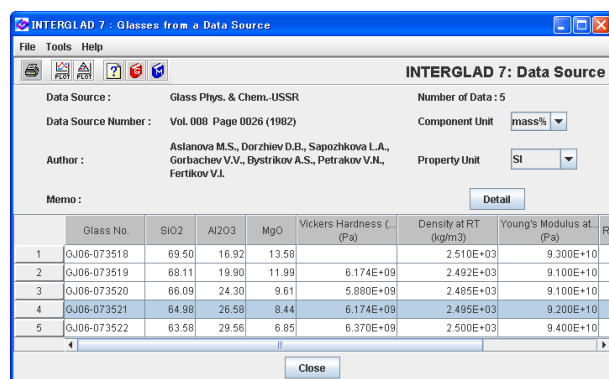
- さらに S-Glass の周辺のガラスに関する情報を集めます。



- 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



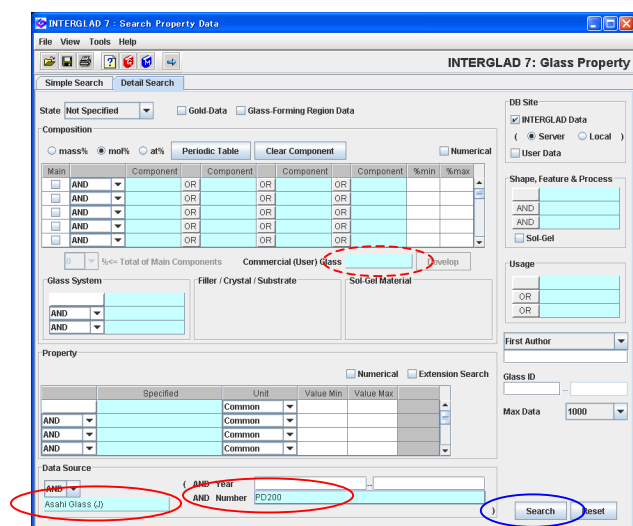
- 32 ガラス (23 出典) のデータが抽出されます。
 なお、出典に特許も含め、条件をつけない場合には 87 件(43 出典)となります。
- 特性検索結果画面の[Property]ボタンより引張強度とヤング率を表示し、ヤング率の値を高低順となるようソートします。これにより、S-Glass の周辺組成での機械的特性を把握することができます。
- また、最もヤング率の高い GJ06-073521 ガラスの同一出典画面を表示させ(同一出典アイコンのクリックにより)、このガラスの出典に記載されているすべてのデータを確認することができます。

1.11 市販ガラスの組成推定

市販ガラスの多くには組成が登録されていませんが、特許データを活用すると、その組成を推定できる場合があります。ここでは旭硝子(株)の PD200 を例に、組成の推定を行います。

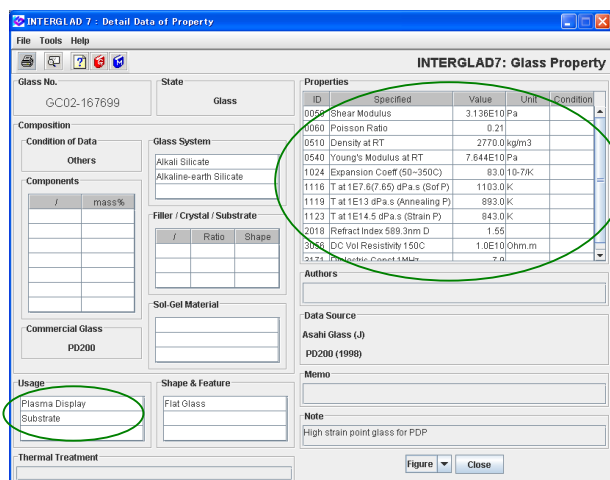
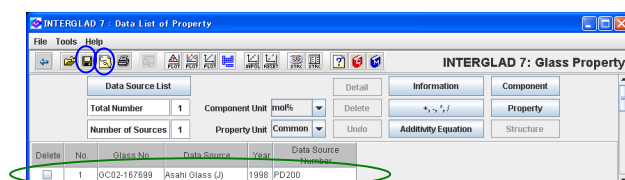
＜マニュアル第3章B、第4章2参照＞

1) 検索条件設定（特性(詳細)検索画面） → 検索実施



- ・ 出典欄で Catalogue より Asahi Glass(J)を選択します。右に現われる[AND Number]欄で PD200 を選択します。
- ・ 上記の代わりに、市販ガラス欄より P/PD200 を選択しても同じです。

2) 検索結果（特性検索結果画面 → 詳細画面）



- ・ PD200 のガラスが抽出されます。
- ・ 詳細画面で特性、用途等を確認します。この画面を印刷します。
- ・ あるいは、特性検索結果画面で[Property]ボタンをクリックし、[Select Property]小画面で[Select All]ボタンを選択することにより、登録特性すべてをリストに表示させます。この画面の表を CSV 保存アイコンより保存します。また、ファイル保存アイコンより検索結果画面を保存することもできます。

3) 組成の推定のための検索 (特性検索画面 → 検索結果画面 → 詳細画面)

INTERGLAD 7: Search Property Data

File View Tools Help

INTERGLAD 7: Glass Property

Simple Search Detail Search

State: Not Specified Gold-Data Glass-Forming Region Data

Composition: mass% mol% at% Periodic Table Clear Component Numerical

DB Site: INTERGLAD Data (Server Local) User Data

Shape, Feature & Process: AND AND Sol-Gel

Usage: OR OR

First Author: Glass ID: Max Data: 1000

Property: Specified Unit Value Min Value Max

AND Density at RT Common 2.7 2.9 g/cm³

AND Expansion Coeff (Typical) Common 81 85 10⁻⁷/K

Data Source: (AND Year) Patent AND Pat. Company Asahi Glass (J) Search Reset

- 特性検索画面に戻り、[Reset]ボタンをクリックしてから、特性名欄に上記の PD200 検索結果の特性の内から、代表的な Density at RT および Thermal Coeff を選択します。Thermal Coeff についてはデータの集まりやすい Typical とします。
- 特性値として PD200 の数値に±の幅を付けた範囲（最大値、最小値）を設定します。
Density 2.7~2.9 g/cm³
Thermal Coeff 81~85 ×10⁻⁷/K
- 出典欄に Patent、AND Pat. Company 欄に Asahi Glass(J)を選択します。

INTERGLAD 7: Data List of Property

File Tools Help

INTERGLAD 7: Glass Property

Data Source List

Total Number: 46 Number of Sources: 19

Component Unit: mol% Delete Undo Additivity Equation

No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	Density at RT (g/cm ³)	Expansion Coeff (Typ.) (10 ⁻⁷ /K)	Young's Modulus at RT (GPa)	T at 1E14.5 dPa.s (°C)
22	OP03-274360	Japanese Patent	2006	A188406	2.76	8.400E+01		4.620E+01
23	OP03-274362	Japanese Patent	2006	A188406	2.77	8.500E+01		4.990E+01
4	OP03-190520	Japanese Patent	1997	A6500778	2.77	8.300E+01		5.700E+01
12	OP03-225008	US Patent	2002	A6500778	2.77	8.300E+01		5.700E+01
11	OP03-225008	US Patent	2002	A6500778	2.76	8.300E+01		6.090E+01
1	OP03-179363	Japanese Patent	1997	A255354	2.89	8.400E+01		
2	OP03-179365	Japanese Patent	1997	A255354	2.84	8.300E+01		
3	OP03-179367	Japanese Patent	1997	A255354	2.89	8.500E+01		
5	OP02-205408	Japanese Patent	2000	A226233	2.77	8.300E+01		

- 44 件が検索結果に現われ、Density と Thermal Coeff が PD200 に一致するガラスが 4 件見られます。
- さらにガラスを絞るために、[Property]ボタンより Young's Modulus at RT と T at 1E14.5 dPa.s(Strain P)を選択し、リストに追加します。
- Strain P も一致するガラスが 2 件 (190520、225008) 見つかります(C と K の単位の違いに注意)。2 件の組成はほとんど同じです。225008 の詳細画面を見ると、用途に Display、Substrate と記載があり、PD200 の用途とも一致していることが確認できます。
- 上記のような方法で市販ガラス PD200 の組成を推定できます。

INTERGLAD 7: Detail Data of Property

File Tools Help

INTERGLAD7: Glass Property

Glass No.: GP03-225008 State: Glass

Properties: ID Specified Value Unit Condition

0160 Fracture Toughness 0.95 MPa m^{1/2}

0510 Density at RT 2.77 g/cm³

1024 Expansion Coeff (50~350C) 83.0 10⁻⁷/K

1123 T at 1E14.5 dPa.s (Strain P) 570.0 °C

Authors: Data Source: US Patent A6500778 (2002) Asahi Glass (J)

Memo: Note:

Figure Close

Composition: Condition of Data Target

Components: mass% SiO₂ 57.60 Al₂O₃ 7.00 MgO 2.00 CaO 5.00 BaO 8.00 Na₂O 4.10 K₂O 6.30

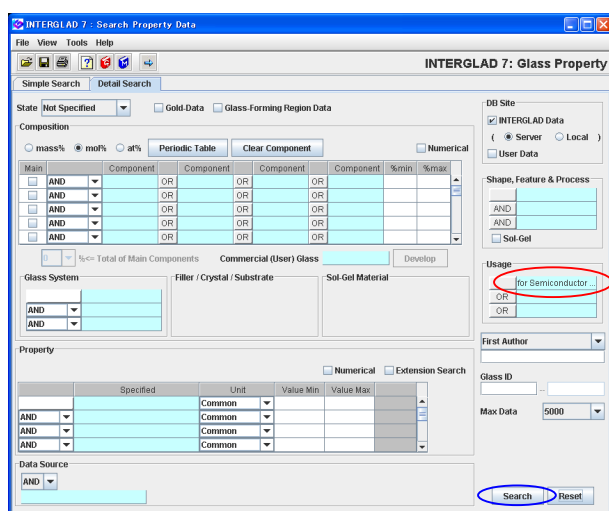
Commercial Glass: Filler / Crystal / Substrate Ratio Shape Sol-Gel Material Usage: Display Substrate Thermal Treatment

1.12 用途からの検索 — 半導体パッケージ用シールガラス

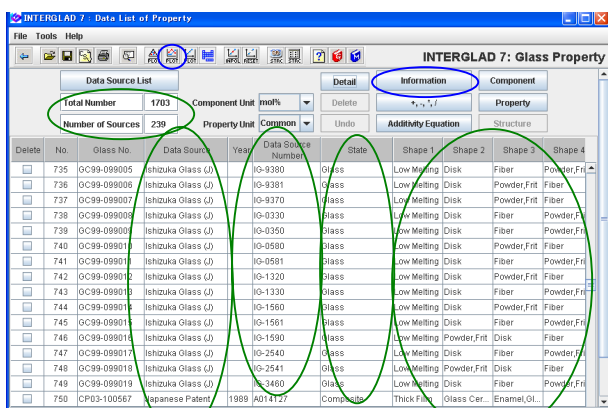
半導体パッケージ用シールガラスについて調査します

＜マニュアル第3章 B, C.2, C.5, 第4章 2, 3.2, 3.4 参照＞

1) 検索条件設定(特性検索画面) → 検索実施 → 検索結果(特性検索結果画面)

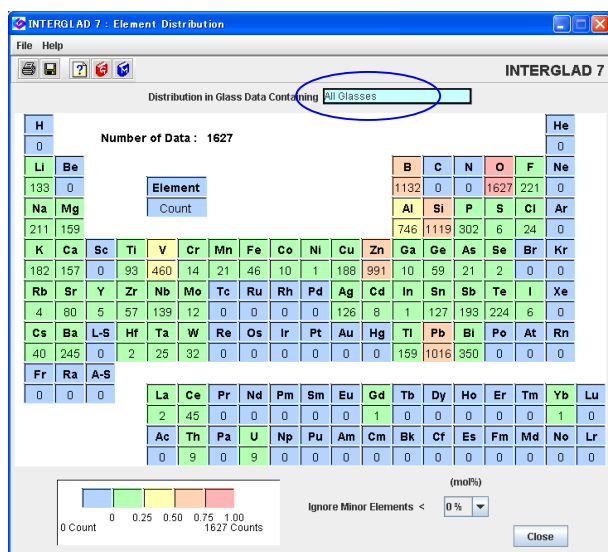


- ・用途欄に Electronics, Electrical/ Solder Glass, Sealing Glass/ for Semiconductor Package を選択します。



- ・1703 件が抽出されます。Data Source より大部分が特許であり、Catalogue が 59 件(5 社)、Journal が 35 件あることがわかります。Catalogue の場合、Data Source Number より市販品名(商品 No.等)を知ることができます。
- ・[Information]ボタンより State をクリックすることにより状態をリストに加えることができます、ガラスの他、結晶化ガラス、複合材、変性ガラス(8 件)があることがわかります。
- ・また、[Information]ボタンから、外観・特徴・製法をリストに加えることにより、形状については Powder、Frit、組成については Non Lead、Non Alkali、特性については Low Melting など様々な情報を一覧することができます。

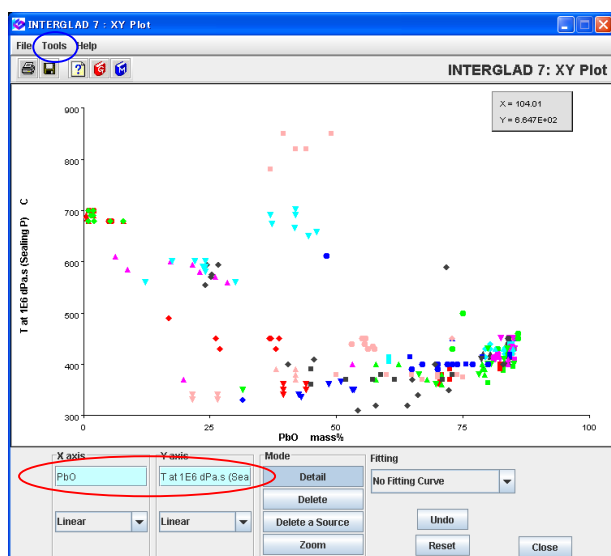
2) 解析実施（元素解析画面、XYプロット画面）



・さらに成分に関する情報を得るために、元素解析アイコンをクリックし、元素解析画面を表示し、元素解析項目として All Glasses を選択します。

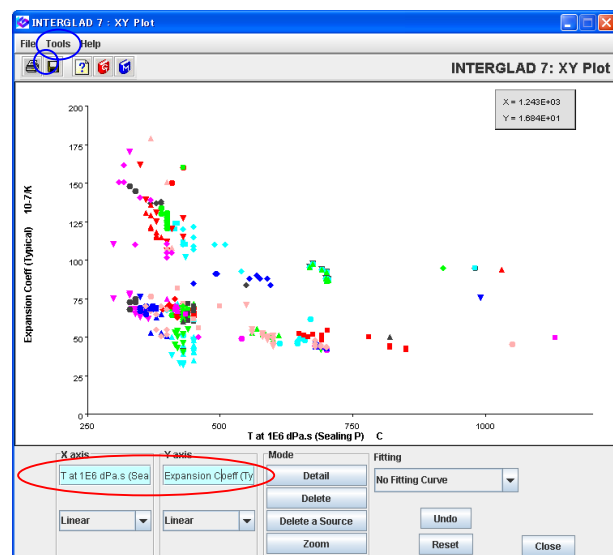
・これにより B、Si、Pb、Zn、Al、V 等(O 以外)を含む組成が多いことがわかります。

・特性検索結果画面に戻り、[Property]ボタンより T at 1E6 dPa-s (Sealing P)をクリックすることによりシーリング点 (Sealing P:粘度が 10^6 dPa-s とする温度と定義) をリストに加えることができます。Sealing P は 280-1130℃であり、幅が大きいことがわかります。



・PbO 量と Sealing P の XY プロットを作成します。PbO 量が多い場合、Sealing P は低温に集中していますが、全般的に広い温度範囲に分布していることがわかります。

・また、Sealing P と熱膨張係数(Expansion Coeff (Typical))との XY プロットを作成すると、Sealing P が低い領域では熱膨張係数に幅があり、使用目的に応じてシール材を選択できることがわかります。

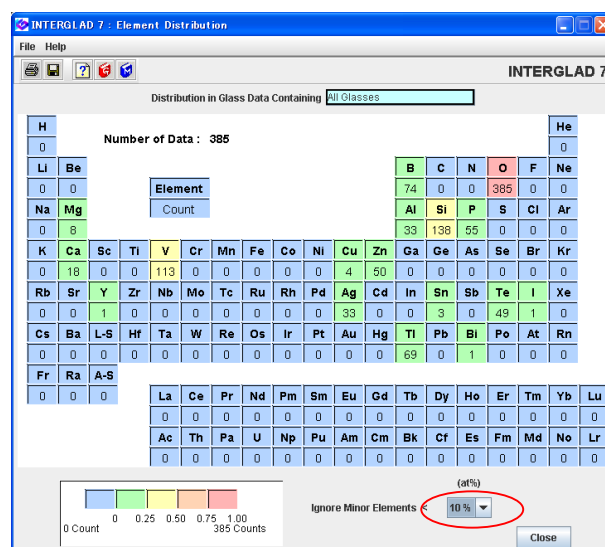
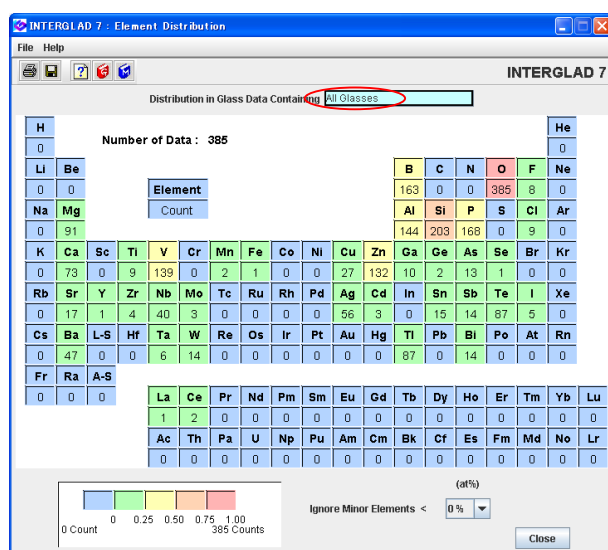
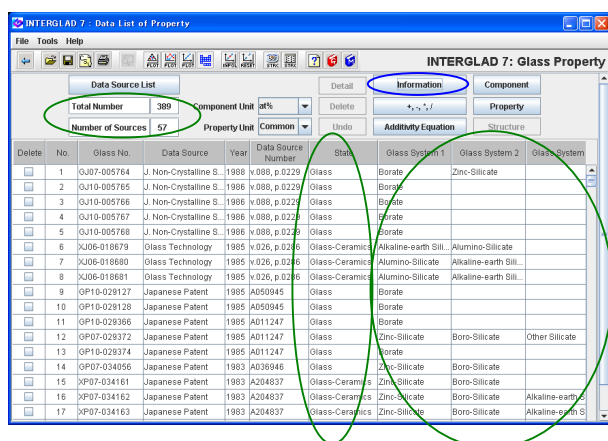
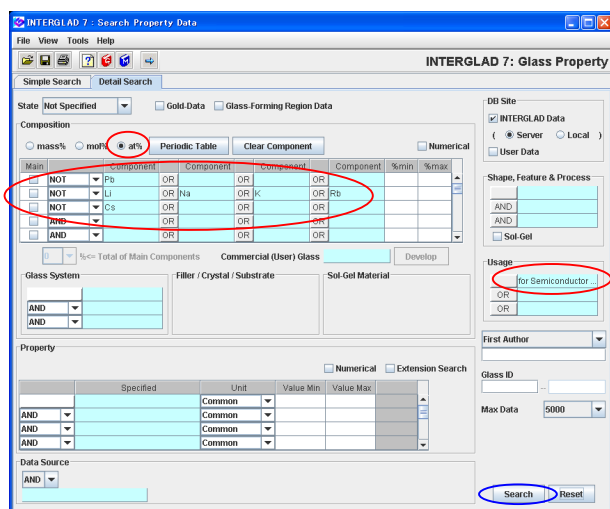


・両 XY プロットでは、XY プロットオプション (Tools/Option)により、各軸の数値範囲、数値表示方式をわかりやすく変えています (指数表示等より小数点以下なしの数値表示に変換)。

・XY プロット等の図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画像(jpg)保存できます。

3) 鉛、アルカリを含まないシールガラスの調査（特性検索画面、検索結果画面、元素解析画面）

- ここでさらに成分として鉛、アルカリを含まない(Non Lead、Non Alkali の)半導体パッケージ用シール材について調べてみます。
- 特性検索画面で[Composition]欄の単位を at% とします。アルカリについてはまとめて設定できないため、先の元素解析画面に表示のある Li、Na、K、Rb、Cs につき、成分欄の行(横)方向に選択するか列(縦)方向に選択し、左端のプルダウンメニューを NOT とします。
- CD フル機能版では検索に時間がかかります。
- 389 件がリストアップされます。
- State, Glass System をリストに追加すると、状態はガラス、複合材、結晶化ガラスであり、ガラス系には Borate、Boro-Silicate、Alumino-Silicate、Phosphate、Zinc-Silicate、Tellulite など各種の系があることがわかります。
- また、元素解析画面を表示させると、Si、P、B、Al、V、Zn を含む (O 以外) 組成が多いことがわかります(Pb、アルカリはいずれも 0)。
- 次に[Ignore Minor Elements]プルダウンメニューを 10% に設定すると、10 at% 以下の元素を含むガラスが除かれ、主要成分元素のみを表示することができます。



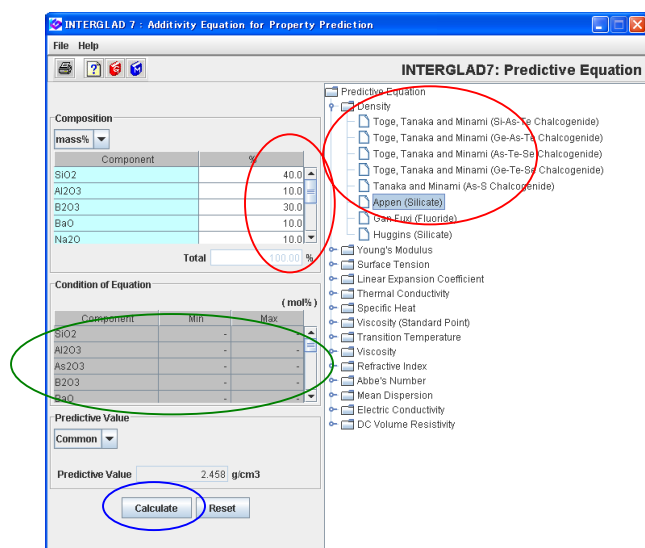
2. 特性予測（特性計算式）

2.1 特定組成のガラスの特性予測 — 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

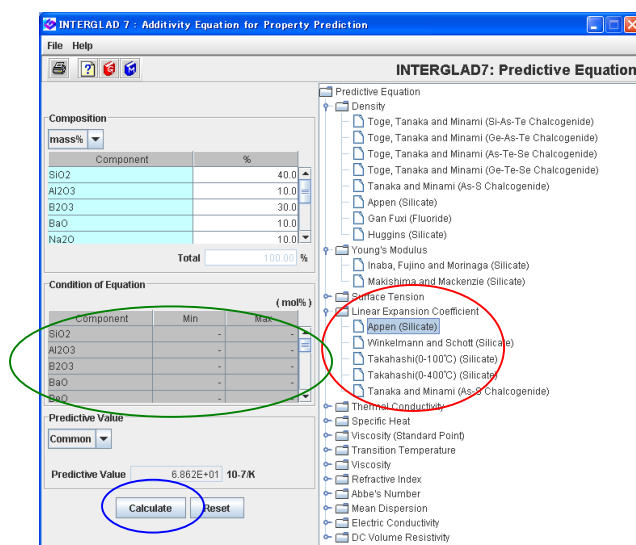
＜マニュアル第3章D.1、第4章4.1、第6章1参照＞

1) 密度の予測（特性計算式による特性予測画面）



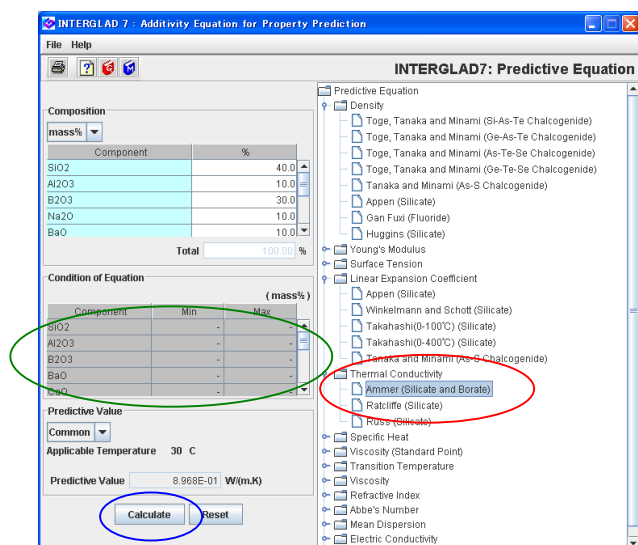
- ・特性計算式による特性予測画面を開き、画面右の特性計算式選択欄で Density を展開し、Appen(Silicate)を選択します。
- ・左中段の Condition of Equation に、指定した計算式の条件が現われるため、予測したい組成成分をすべて含むかどうかを確認します。
- ・[Composition]欄に必要成分を選択表示し、その数値を入力します。成分名は[Ctrl]キーを使用することにより、同時に複数の選択ができます。単位は mass%とします。
- ・[Calculate] ボタンをクリックすると [Predictive Value]欄に予測値 2.458 g/cm³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

2) 熱膨張係数の予測



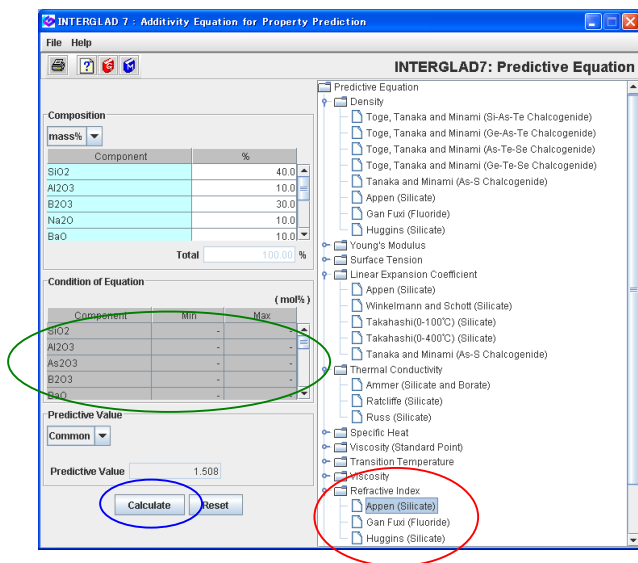
- ・同組成の他特性を予測する場合、組成欄はそのままとし、特性予測式のみを変えて計算することにより、次々に特性予測ができます。
- ・特性予測式欄の Linear Expansion Coefficient を展開し、Appen(Silicate)を選択します。
- ・[Calculate] ボタンをクリックすると [Predictive Value]欄に予測値 6.862×10⁻⁶ /K が現われます。

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 8.968×10^{-1} W/(mK) (30℃)が現われます。
- 本例の場合、Ratliffe(Silicate)、Russ(Silicate)の式でも計算でき、それぞれ、 8.349×10^{-1} W/(mK) (0℃)、 9.256×10^{-1} W/(mK) (0℃)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。

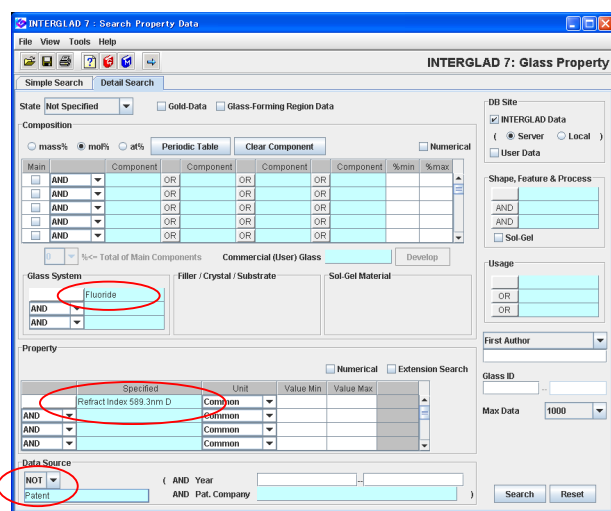
(第 6 章 1.特性計算式参照)

2.2 ファクトデータと特性計算式による予測値の比較 — フッ化物ガラスの屈折率

フッ化物ガラスの屈折率について、実測値と特性計算式(Gan Fuxi 式)による予測値を比較します

＜マニュアル第3章B、D.1、第4章2、4.1、第6章1参照＞

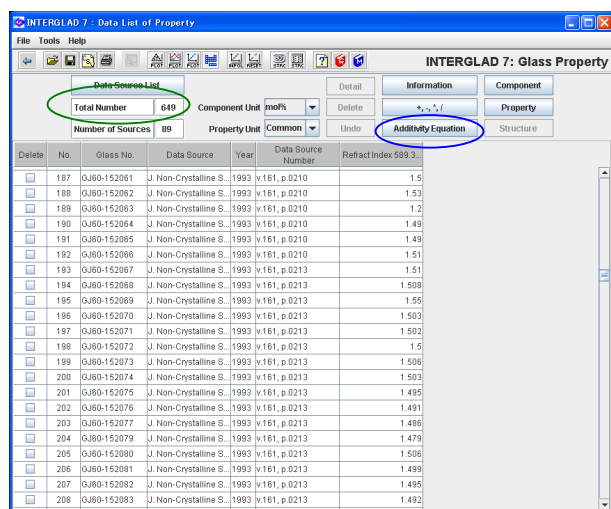
1) 検索条件設定（特性(詳細)検索画面） → 検索実施



・ガラス系に Fluoride、特性に Refractive Index 589.3nm D-line を選択し、出典については特許を除外して検索します。

・ここで Refractive Index 589.3nm D-line としたのは、Gan Fuxi 式が D-line の屈折率の計算式であるためです。

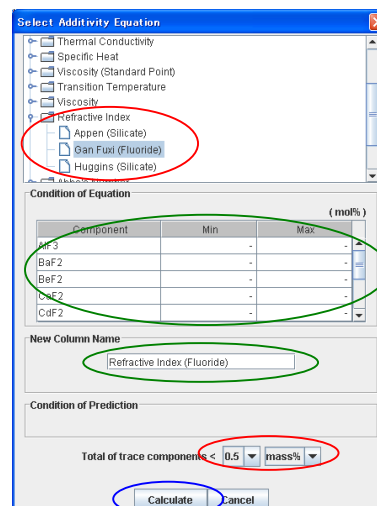
2) 検索結果（特性検索結果画面）

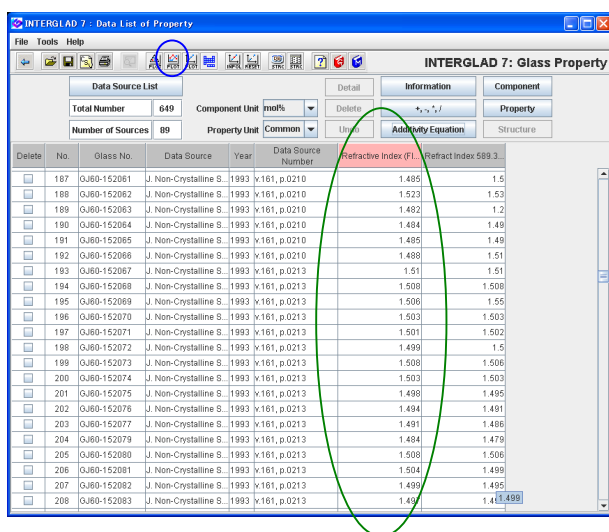


・ 649 件のガラスが抽出されます。

・ [Additives Equation]ボタンから特性計算式選択小画面を表示し、Refractive Index の Gan Fuxi(Fluoride)式を選択し、[Calculate]ボタンをクリックします。本例では不純物の合計最大値を 0.5 mass% に設定します。

特性計算式選択小画面





INTERGLAD 7: Data List of Property

File Tools Help

INTERGLAD 7: Glass Property

Data Source List

Total Number: 649
Number of Sources: 89

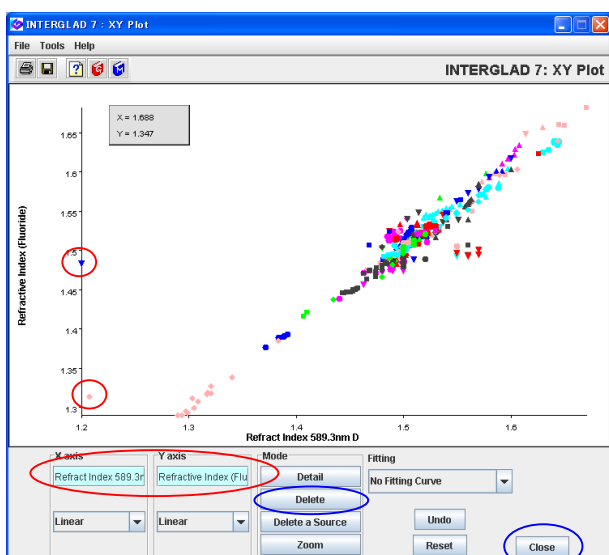
Component Unit: mol%
Property Unit: Common

Buttons: Delete, Information, Component, Property, Structure

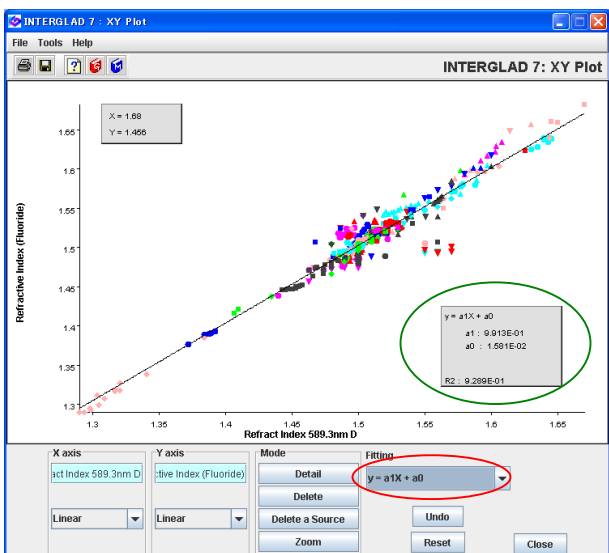
Delete	No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	Refractive Index (Fluoride)	Refractive Index 589.3nm D
☐	187	QJ80-152061	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0210	1.485	1.5
☐	188	QJ80-152062	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0210	1.523	1.53
☐	189	QJ80-152063	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0210	1.482	1.2
☐	190	QJ80-152064	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0210	1.484	1.48
☐	191	QJ80-152065	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0210	1.485	1.48
☐	192	QJ80-152066	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0210	1.486	1.51
☐	193	QJ80-152067	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0213	1.51	1.51
☐	194	QJ80-152068	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0213	1.508	1.508
☐	195	QJ80-152069	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0213	1.506	1.55
☐	196	QJ80-152070	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0213	1.503	1.503
☐	197	QJ80-152071	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0213	1.501	1.502
☐	198	QJ80-152072	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0213	1.499	1.5
☐	199	QJ80-152073	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0213	1.508	1.506
☐	200	QJ80-152074	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0213	1.503	1.503
☐	201	QJ80-152075	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0213	1.498	1.495
☐	202	QJ80-152076	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0213	1.494	1.481
☐	203	QJ80-152077	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0213	1.491	1.486
☐	204	QJ80-152079	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0213	1.484	1.478
☐	205	QJ80-152080	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0213	1.508	1.506
☐	206	QJ80-152081	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0213	1.504	1.489
☐	207	QJ80-152082	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0213	1.499	1.495
☐	208	QJ80-152083	J. Non-Crystalline S.	1993	x161, p.0213	1.49	1.48489

- 特性検索結果リストに特性計算式で計算された数値が表示されます（ラベルがピンク色）。

3) 実測値と予測値の比較 XY プロット表示 (XY プロット画面)



- 特性検索結果画面の[XY Plot]アイコンから XY プロット画面を開き、X 軸として実測値の Refract Index 589.3nm D、Y 軸として予測値の Refractive Index(Fluoride)を選択します。
- 実測値が 1.2 に近く、全体のカーブから離れた 2 点を、[Delete]ボタンをクリックした後、クリックして削除します。
- [Fitting] プルダウンメニューを一次式とすると、Fitting カーブを表示させることができ、実測値と予測値の関係を数式で把握することができます。本例の場合、実測値と予測値がかなりよく一致していることがわかります。



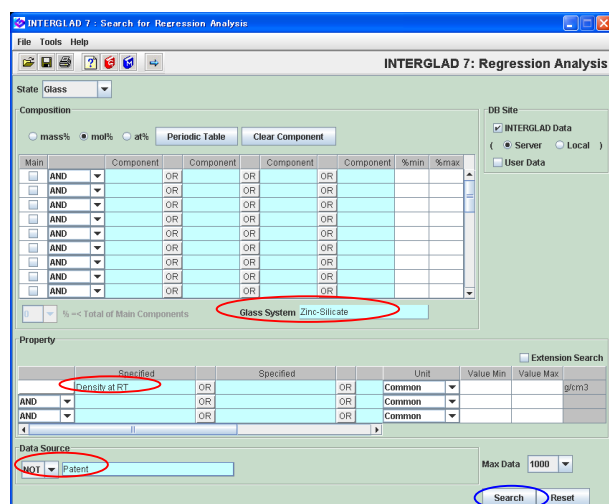
3. 特性予測・組成最適化（重回帰分析）

3.1 特性についての予測式の導出 — 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

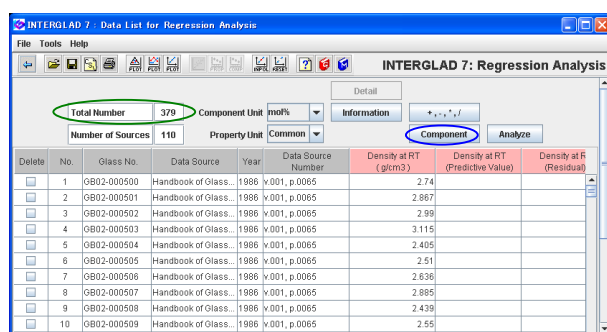
<マニュアル第3章D.2、第4章4.2-4.5 参照>

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

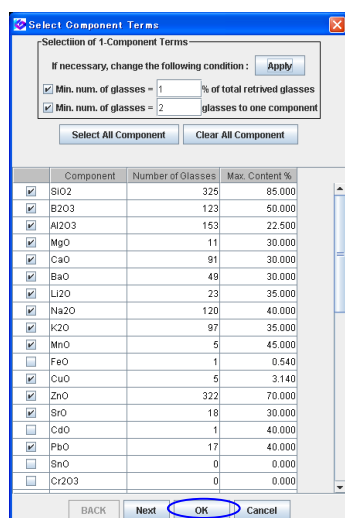


- ・状態(State)はデフォルトの glass のままとします。
- ・ガラス系として Zinc-Silicate、特性として Density at RT を選択し、出典は NOT Patent とします。

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）

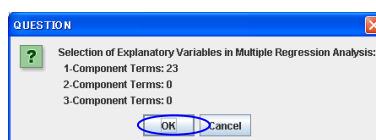


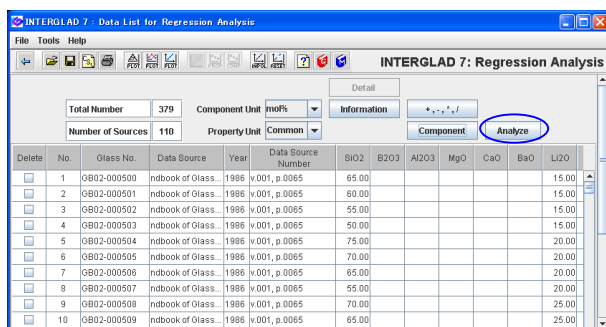
- ・379 件のガラスが抽出されます。
- ・[Component]ボタンより説明変数成分項選択小画面を開き、重回帰式に使用する成分項を選択します。



- ・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。

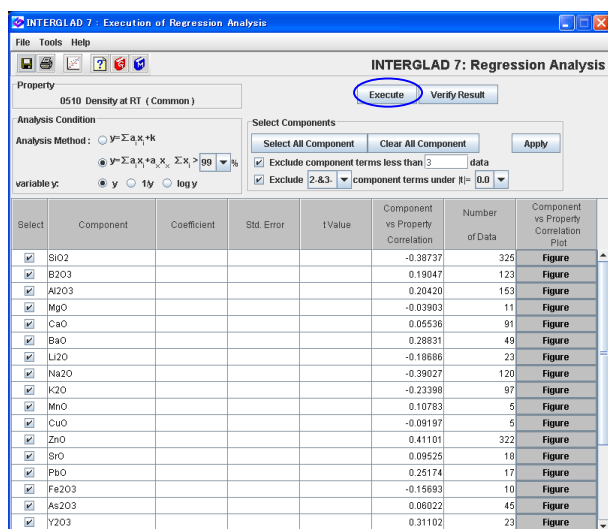
1 成分項数：23



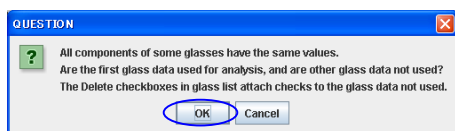


- ・[Analyze]ボタンをクリックし、重回帰分析実行画面へ移行します。

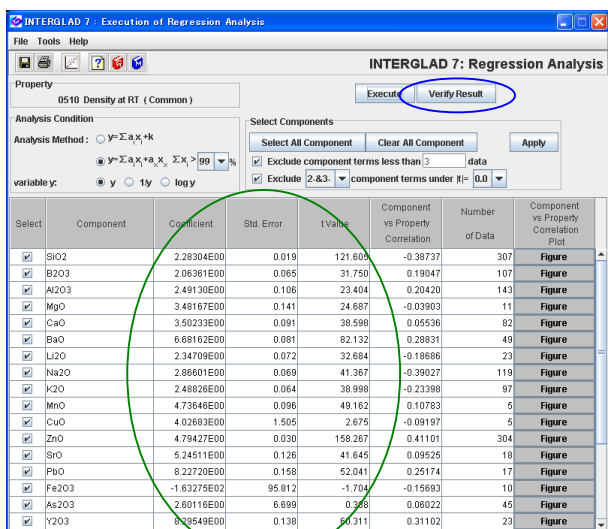
3) 重回帰分析実施（重回帰分析実行画面）



- ・[Execute]ボタンをクリックし、重回帰分析を実行します。

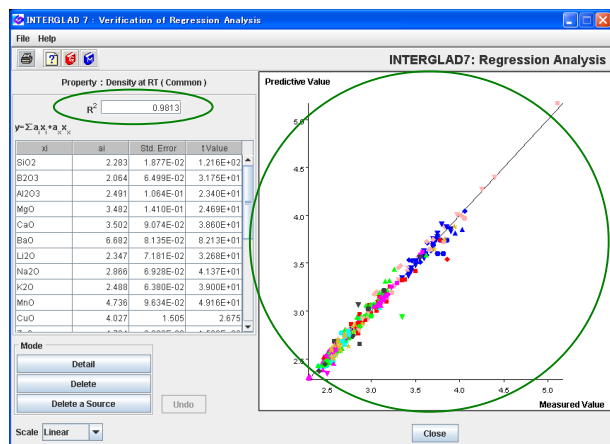


- ・[Question]ダイアログに「リスト中に全く同組成のガラスがある。同組成のガラスがあると重回帰計算ができないため、これらを除いてもよいか？」が現われるため、[OK]ボタンをクリックします。



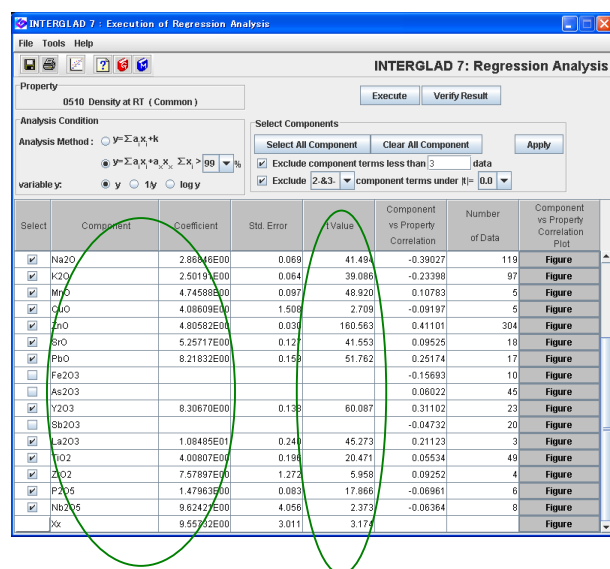
- ・重回帰分析実行画面に計算結果が現れることを確認します。
- ・[Verify Result]ボタンをクリックして重回帰分析検証画面に移行します。

4) 重回帰分析結果の検証（重回帰分析検証画面）

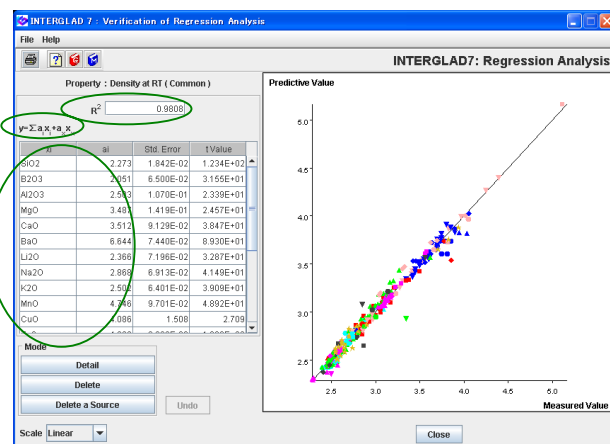


- 寄与率 R^2 が 0.98 と高く、実測値（収録値）と予測値のプロットの $y=x$ の直線よりのばらつきが小さいことを確認します。（ R^2 を 0.8 以上とすることを推奨します）

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 Fe_2O_3 、 As_2O_3 、 Sb_2O_3 の t 値の絶対値が 2 未満となっています。まず 1 未満の As_2O_3 と Sb_2O_3 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 Fe_2O_3 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。 R^2 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：

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

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。

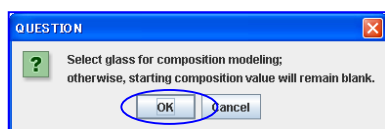
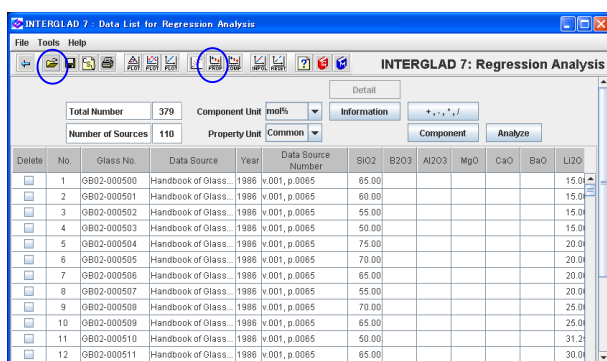
3.2 特性予測 — 亜鉛ケイ酸塩ガラスの密度

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、3.1 で導出した重回帰式を利用します

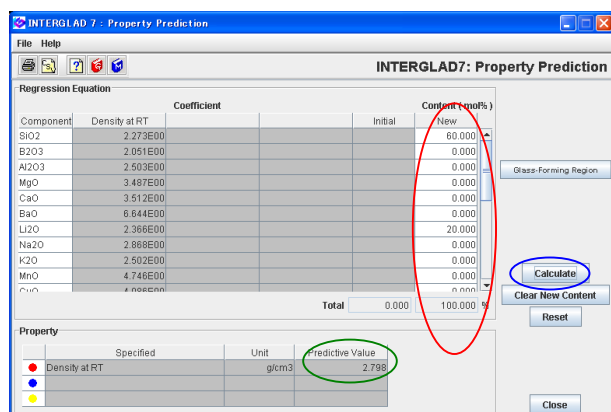
1) 検索結果画面から特性予測画面を開く



- ・ 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。

3.3 組成最適化 — ある密度の亜鉛ケイ酸塩ガラス

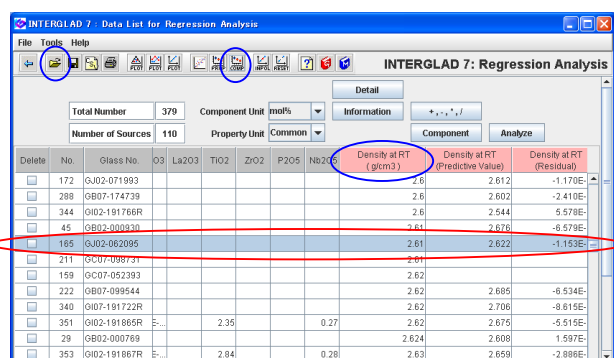
亜鉛ケイ酸塩ガラスで密度（室温）が 2.6 g/cm^3 となる組成を設計します

SiO_2 、 B_2O_3 、 Na_2O 、 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>

3.2 と同様に亜鉛ケイ酸塩系組成であるため、3.1 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

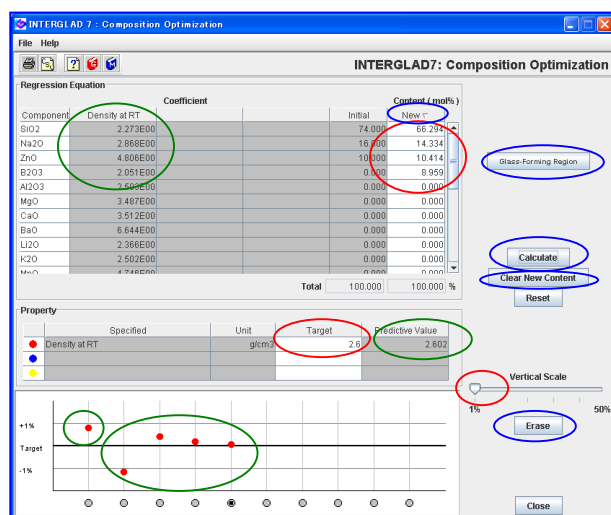


・重回帰分析検索結果画面を開き、[Open] アイコンより、保存した 3.1 結果（検索結果画面）を開きます。

・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/cm^3 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

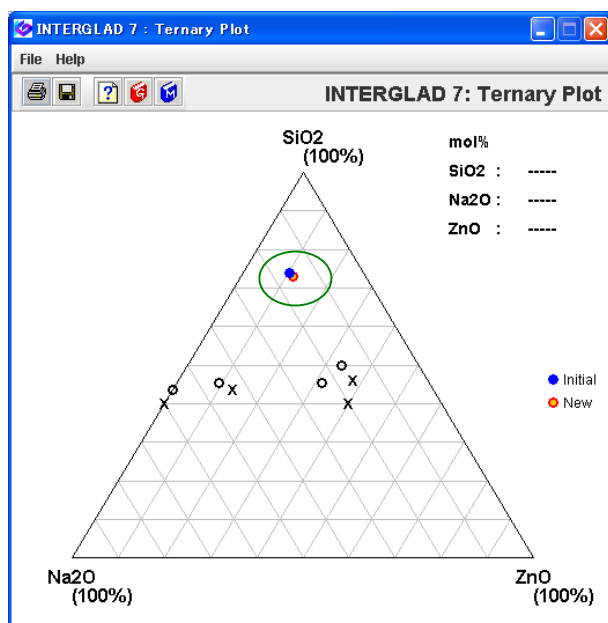


・目標値 2.6 を Property の [Target] 欄にインプットし、[Calculate] ボタンをクリックすると、[Predictive Value] 欄にモデル組成の計算値が現われます。また、画面の下部のグラフに、選択したモデル組成の密度と目標値との違い（%）が赤色点で現われます。グラフ右の Vertical Scale の指標を左にドラッグし（左端の 1%まで）、グラフの赤色点と目標値の差を拡大し確認しやすくします。

・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 SiO_2 、 B_2O_3 、 Na_2O 、 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 SiO_2 、 Na_2O 、 ZnO については initial 値と同じ値(整数)を、 B_2O_3 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/cm^3 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。

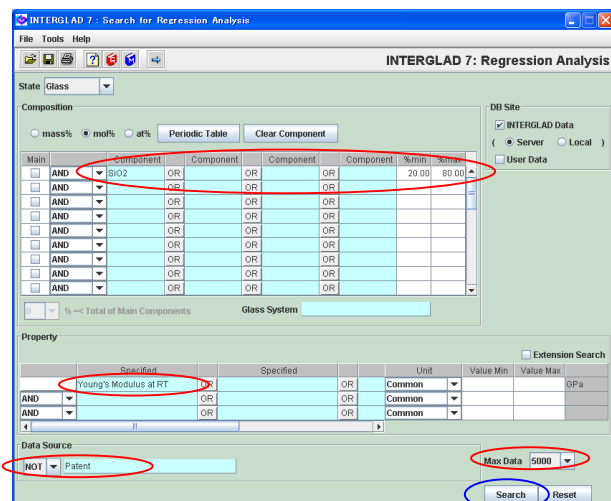
3.4 特性予測（1次式）－ アルカリ土類ケイ酸塩ガラスのヤング率

下記の組成のアルカリ土類ケイ酸塩ガラスのヤング率（室温）を予測します

SiO_2 45%, Al_2O_3 12%, MgO 13%, CaO 20%, Y_2O_3 7%, TiO_2 3% (mol%)

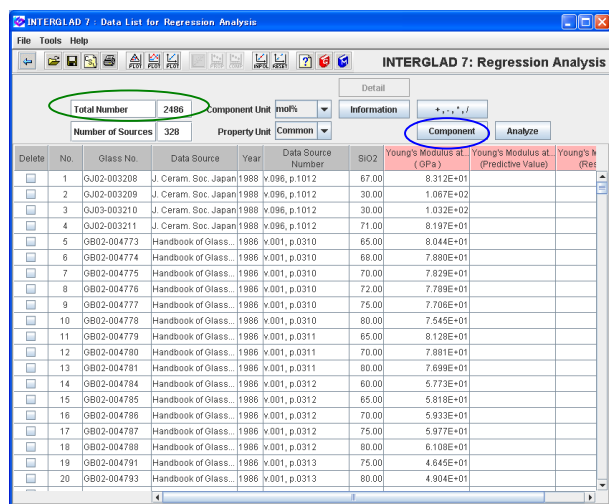
<マニュアル第3章D.2、第4章4.2-4.6 参照>

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

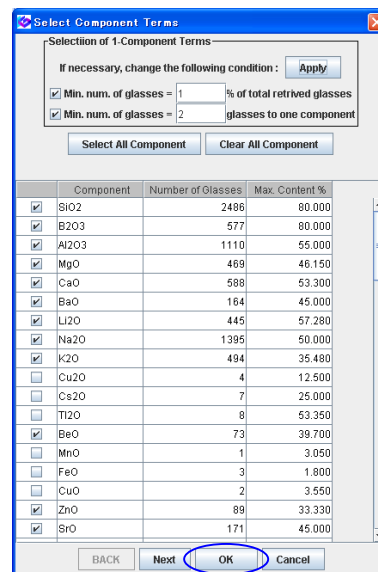
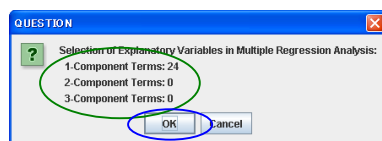


- 検索条件を $20 \leq \text{SiO}_2 \leq 80 \text{ mol\%}$ とします。
- 組成条件の設定には色々なケースが考えられますが、本例では単純でデータが多く集まる条件としています。

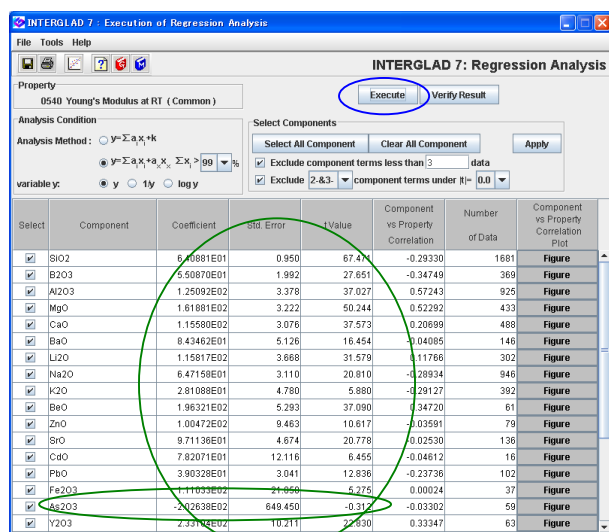
2) 検索結果（重回帰分析検索結果画面）→ 説明変数成分項選択（成分項選択小画面）



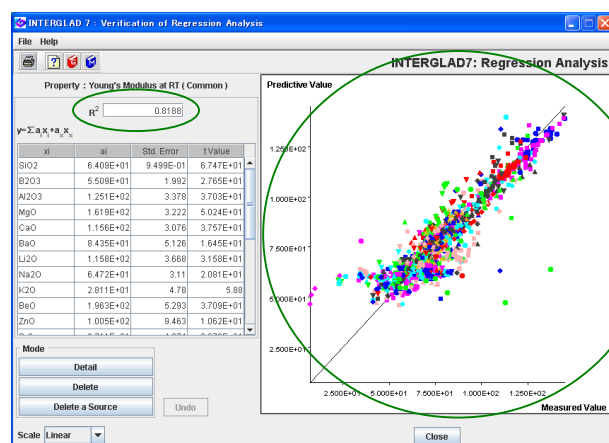
- 2486 件がリストアップされます。
- 説明変数となる成分項は 1 成分項のみとします。デフォルト条件により 24 成分が成分項となります。



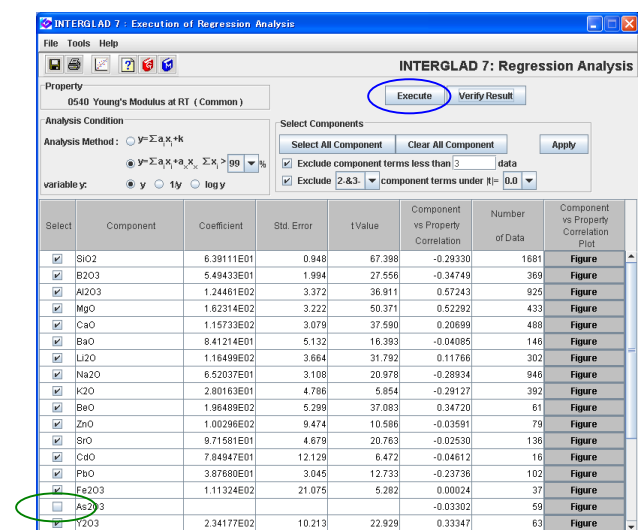
3) 重回帰分析実施（重回帰分析実行画面 → 重回帰分析検証画面）



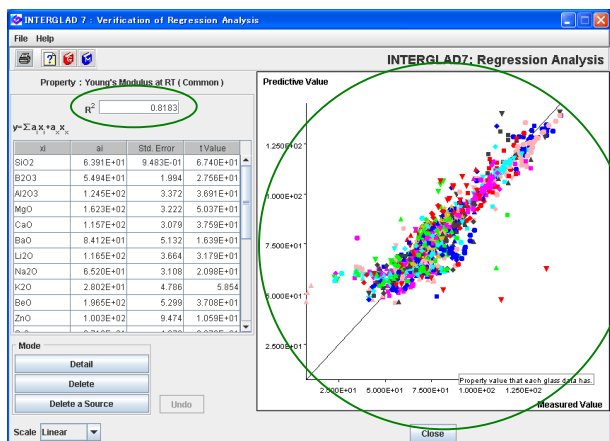
- 次の重回帰分析実行画面で[Execute]ボタンをクリックして重回帰分析を実行します。[Question]ダイアログ（複数）が現われ、[OK]ボタンをクリックしていくと、重回帰係数等が計算されます。



- [Verify Result]ボタンをクリックして検証画面を開きます。寄与率 R^2 は 0.8188 となります。
- データに直線 $y=x$ より離れた点もみられますが、多数の点が $y=x$ に沿って太い幅となっており、離れた点の影響は小さいと考えられます。なお、離れた点を除去して再計算することにより R^2 は向上しますが、本例ではまずはできるだけ単純な予測に予測を行うこととします。

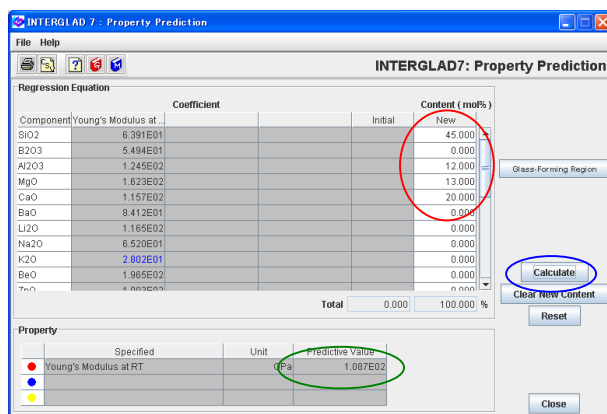


- t 値を調べると、 As_2O_3 のみが -0.312 と絶対値が 2 より小さい値となっています。 As_2O_3 左の選択チェックボックスのチェックをはずし、再度[Execute]ボタンをクリックして重回帰分析を行います。



- 検証画面を開いて寄与率 R^2 を確認すると 0.8183 となっています。(0.8 以上が推奨値)
- t 値の絶対値がすべて 2 以上の値となっているため、この重回帰式を使って特性を予測することとします。

4) 特性予測 (特性予測画面)



- 重回帰分析検索結果画面に戻り、何もガラスを選択せずに特性予測[PLOP]アイコンをクリックし、[Question]ダイアログの[OK]ボタンをクリックし、特性予測画面を開きます。
- Content の[New]欄に成分値 (SiO₂ 45%, Al₂O₃ 12%, MgO 13%, CaO 20%, Y₂O₃ 7%, TiO₂ 3%) を入力し、[Calculate]ボタンをクリックします。
- Property の[Predictive Value]欄にヤング率予測値 108.7GPa が現われます。

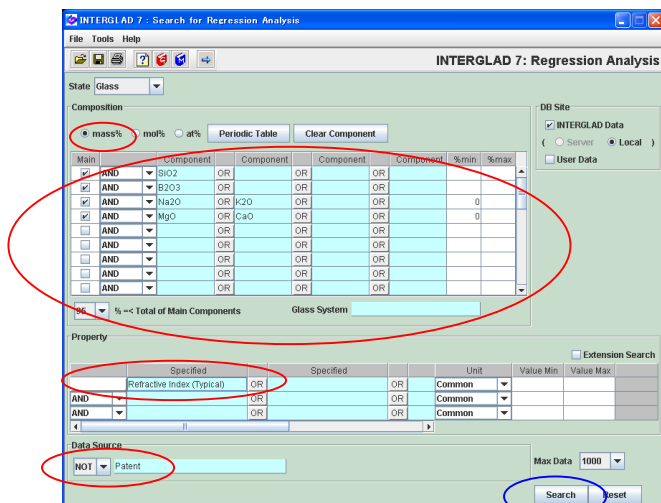
3.5 特性予測（3 次式）－ ホウケイ酸塩ガラスの屈折率

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

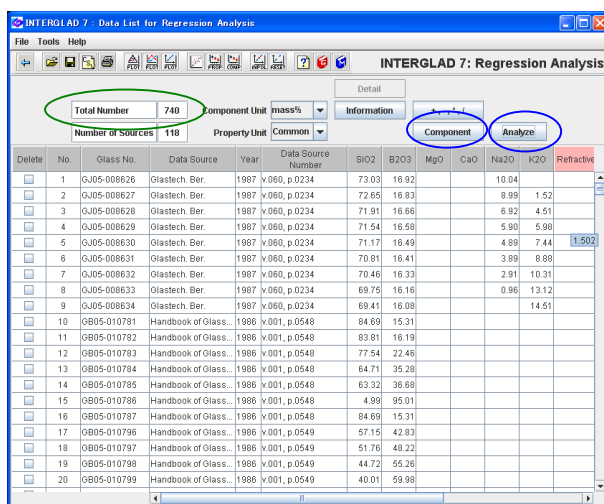


・ 組成の検索条件を以下とします。

SiO₂ + B₂O₃ + (Na₂O or K₂O ≥ 0)

+ (MgO or CaO ≥ 0) ≥ 95 mass%

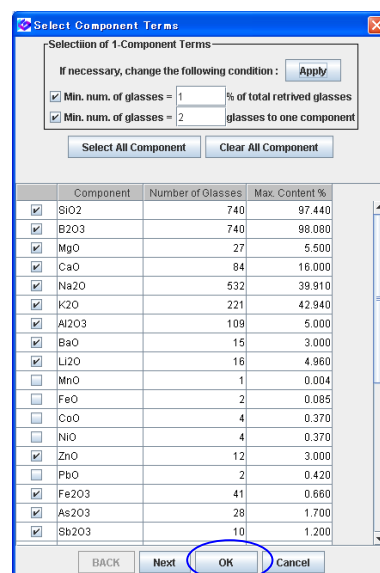
2) 検索結果



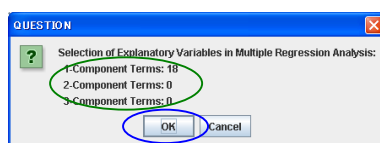
・ 740 件のガラスがリストアップされます。

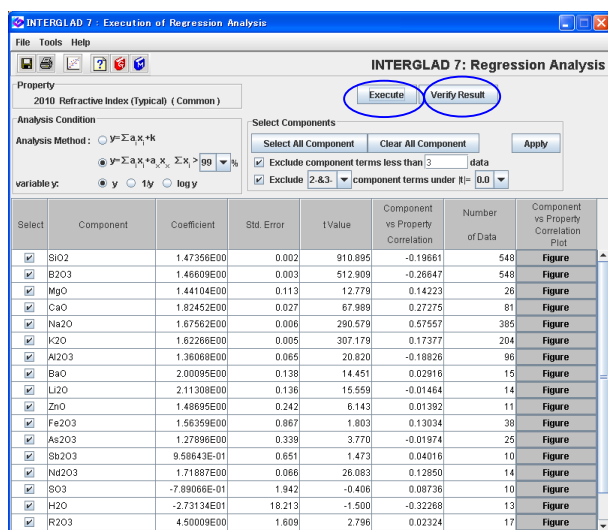
・ まず比較のために 1 次式による重回帰分析を行います。

・ 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。

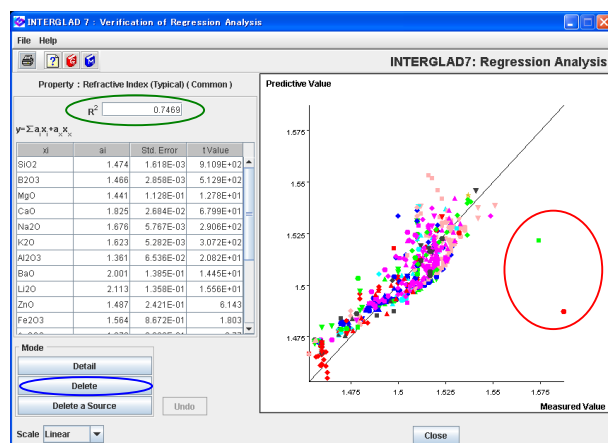


3) 重回帰分析（1 次式）

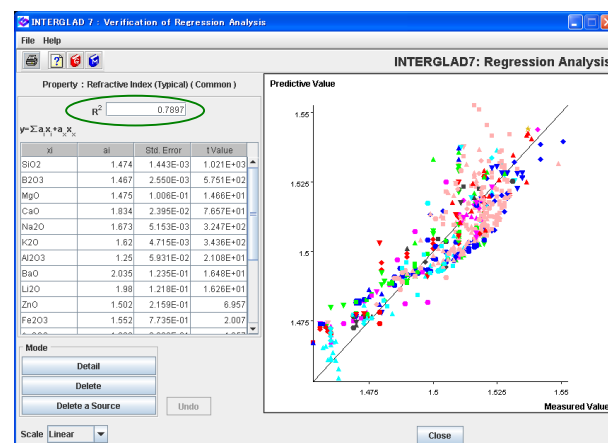




- 重回帰分析実行画面で重回帰分析を実行し検証画面を開くと、寄与率 R^2 は 0.7469 と低く、 $y=x$ の直線に乗っていないことがわかります。

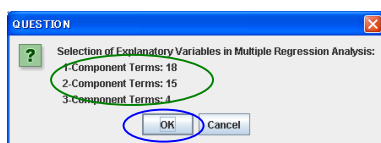


- $y=x$ から大きく離れた 2 点を除去し、重回帰分析実行画面に戻り、再度重回帰分析を行います。

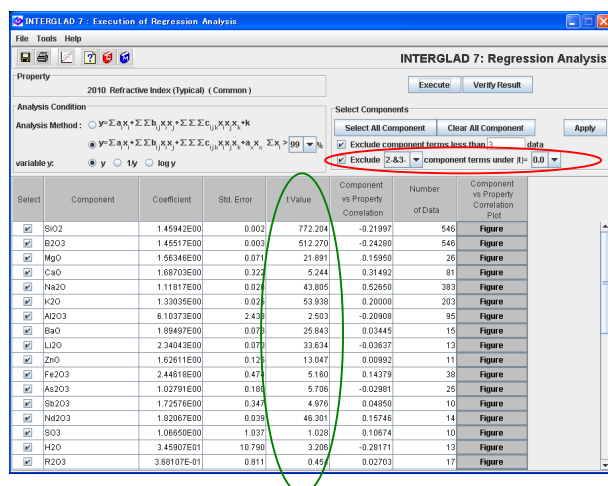


- 検証画面を開き R^2 を確認すると、0.7897 と低いまです。この例の場合、1 次の重回帰式では十分な予測ができないことがわかります。

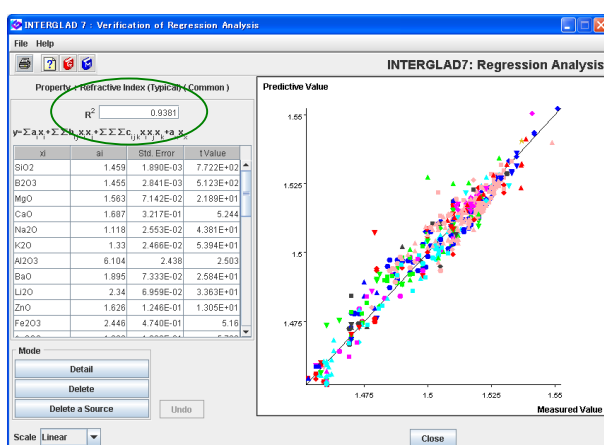
4) 重回帰分析 (3 次式)



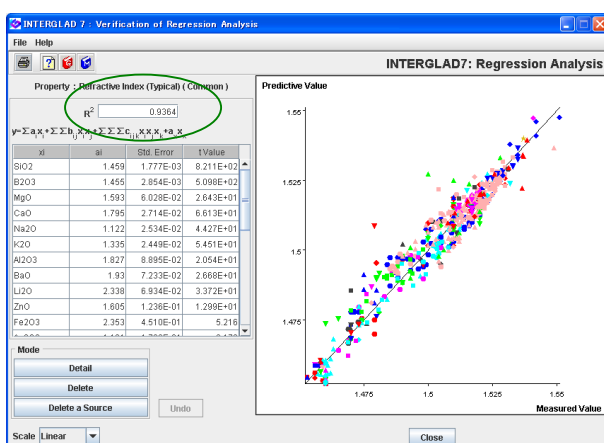
- 検索結果画面に戻り、成分項の選択を 3 成分項までデフォルト通りの条件で選択すると、左記の成分項数となります。



- 重回帰実行画面で重回帰分析を行い、検証画面を開くと R^2 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)。

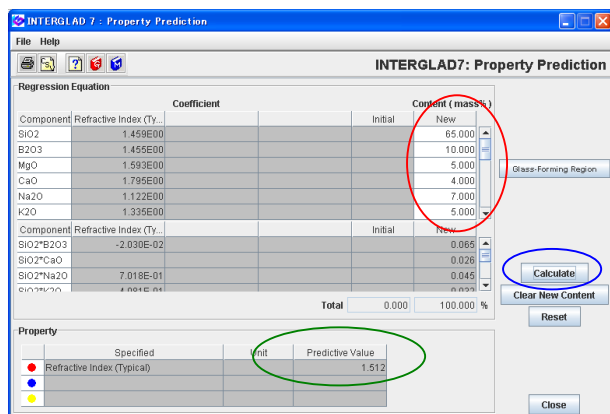


- 次に重回帰分析画面の右上[Select Component]欄の 3 行目の $|t|$ の最小値設定欄で、下記の手順により、 $|t|$ の小さい成分項の除去・重回帰分析実行を繰り返します。(一度に除去せず、少しずつ行います)



- 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)
- 2,3 成分項 $|t| = 2.0$ より小を削除計算
- all 成分項 $|t| = 1.0$ より小を削除計算

5) 特性予測 (特性予測画面)



- 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、 R^2 は 0.9364 となります。これで重回帰式が完成します。

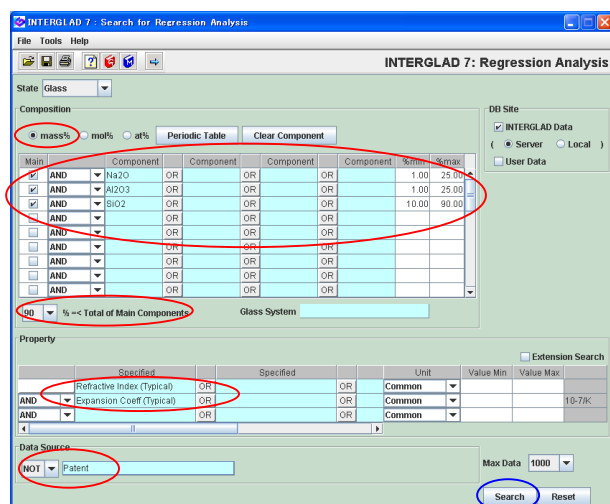
- ・ 重回帰分析検索結果画面に戻り、特性予測 [PLOP]アイコンから特性予測画面を開きます。
- ・ [Regression Equation]欄の[Content New]欄に SiO₂ 65%, B₂O₃ 10%, MgO 5%, CaO 4%, Na₂O 7%, K₂O 5%, Al₂O₃ 4%を入力し、[Calculate]ボタンをクリックします。
- ・ 特性欄の予測値に屈折率 1.512 が計算されて現われます。

3.6 材料設計 (組成最適化) (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

<マニュアル第 3 章 D.3、第 4 章 4.2-4.5、4.7 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



- ・ 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てます。

2) 検索結果（重回帰分析検索結果画面）

Delete	No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	SiO2	Al2O3	Na2O	Expansion Coeff. (10 ⁻⁶ /K)	Expansion Co. (Predictive)
☐	1	QJ02-015829	J. Non-Crystalline S.	1977	026, p.0517	75.69	1.15	13.67	7.900E+01	
☐	2	QJ02-032267	J. Austral. Ceramic	1984	020, p.0053	74.57	1.56	14.22	8.690E+01	
☐	3	QJ02-032270	J. Austral. Ceramic	1984	020, p.0053	73.67	1.56	14.92	8.960E+01	
☐	4	QJ02-032271	J. Austral. Ceramic	1984	020, p.0053	73.46	1.56	15.13	9.050E+01	
☐	5	QJ02-032272	J. Austral. Ceramic	1984	020, p.0053	73.36	1.56	15.43	9.140E+01	
☐	6	PC05-051160	Schott AG (DE)		8329	84.00	3.00	3.00	2.750E+01	
☐	7	PC02-051349	Corning Inc. (US)		0080	73.00	1.00	17.00	9.350E+01	
☐	8	PC02-051362	Corning Inc. (US)	1976	0317	61.00	17.00	13.00	8.800E+01	
☐	9	QJ02-055405	Glastech. Ber.	1980	053, p.0149	63.38	12.03	24.58	1.210E+02	
☐	10	QJ06-055406	Glastech. Ber.	1980	053, p.0149	62.04	15.69	22.26	1.090E+02	
☐	11	QJ06-055407	Glastech. Ber.	1980	053, p.0149	61.67	18.88	19.45	1.000E+02	
☐	12	QJ06-055408	Glastech. Ber.	1980	053, p.0149	60.36	23.08	16.55	9.200E+01	
☐	13	QJ06-055409	Glastech. Ber.	1980	053, p.0149	59.94	24.20	15.86	8.850E+01	
☐	14	QJ06-082265	Glass Phys. & Chem.	1982	008, p.0121	65.26	15.63	9.47	7.500E+01	
☐	15	QJ06-082266	Glass Phys. & Chem.	1982	008, p.0121	66.19	16.52	10.05	7.500E+01	
☐	16	QJ06-082267	Glass Phys. & Chem.	1982	008, p.0121	66.70	17.11	10.40	7.200E+01	
☐	17	QJ06-082268	Glass Phys. & Chem.	1982	008, p.0121	68.74	19.44	11.82	7.000E+01	
☐	18	GB02-088942	Technical Glasses	1961	001, p.0265	70.94	1.14	21.29	1.030E+02	
☐	19	GB02-088994	Properties of Glass	1954	001, p.0232	72.12	8.95	18.77	8.110E+01	
☐	20	GB02-088995	Properties of Glass	1954	001, p.0232	72.22	6.87	20.67	9.390E+01	

- ・43 件のガラスが抽出されます。

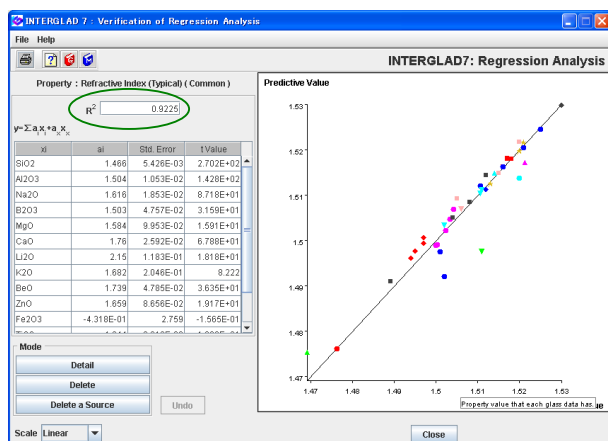
3) 重回帰分析（1 次式）（成分項選択小画面 → 重回帰分析実行画面 → 重回帰分析検証画面）

Component	Number of Glasses	Max. Content %
☒ SiO2	43	84.110
☒ Al2O3	43	24.430
☒ Na2O	43	24.580
☒ B2O3	3	10.000
☒ MgO	7	4.000
☒ CaO	27	9.950
☐ BaO	1	1.940
☒ Li2O	5	3.390
☒ K2O	6	6.540
☒ BeO	4	9.310
☒ ZnO	2	6.080
☐ SnO	1	1.690
☐ Cr2O3	1	0.320
☐ Fe2O3	14	0.430
☐ Sb2O3	1	0.200
☒ TiO2	5	5.690
☐ SO3	3	0.250
☐ F	1	4.130

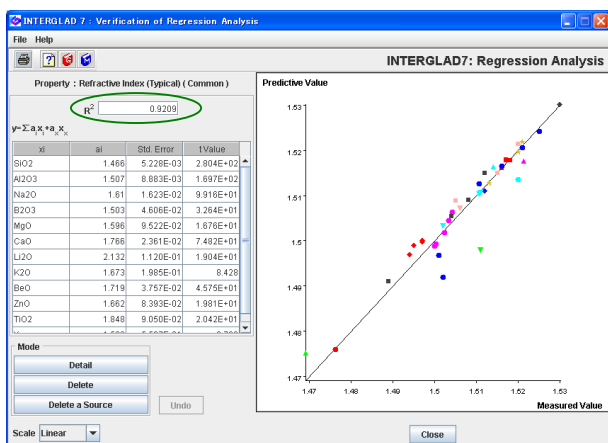
- ・[Component]ボタンをクリックして成分項選択（1 成分項選択）画面を開き、デフォルト条件のまま[OK]ボタンをクリックします。
- ・成分項選択確認ダイアログで1成分項が13であることを確認し、[OK]ボタンをクリックします。

Select	Component	Coefficient	Std. Error	t-Value	Component vs Property Correlation	Number of Data	Component vs Property Correlation Plot
☒	SiO2	1.46602E00	0.005	270.165	-0.47664	43	Figure
☒	Al2O3	1.50377E00	0.011	142.807	0.12083	43	Figure
☒	Na2O	1.61568E00	0.019	87.177	0.24936	43	Figure
☒	B2O3	1.50262E00	0.048	31.585	-0.55167	3	Figure
☒	MgO	1.58360E00	0.100	15.911	0.06615	7	Figure
☒	CaO	1.75977E00	0.026	67.881	0.40293	27	Figure
☒	Li2O	2.15029E00	0.118	18.180	0.35606	5	Figure
☒	K2O	1.68227E00	0.205	8.222	-0.26234	6	Figure
☒	BeO	1.73941E00	0.048	36.353	0.30557	4	Figure
☒	ZnO	1.65908E00	0.087	19.168	0.14678	2	Figure
☒	Fe2O3	-4.31762E-01	2.759	-0.156	0.11591	14	Figure
☒	TiO2	1.84356E00	0.093	19.799	0.27654	5	Figure
☒	SO3	7.76641E00	8.536	0.910	0.06029	3	Figure
☐	xx	-3.18598E00	6.604	-0.482			

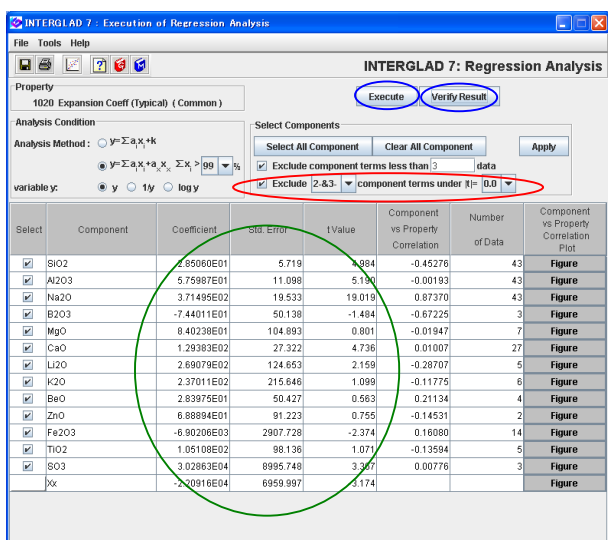
- ・重回帰分析検索結果画面で[Analyze]ボタンをクリックすると、屈折率および熱膨張係数の重回帰分析画面が重なって現われます。
- ・まず、屈折率の画面で[Execute]ボタンをクリックします。現われる複数の[Question]ダイアログに OK すると、画面の表の Coefficient、Std. Error、t-Value に数値が現われ、重回帰計算が成功したことがわかります。



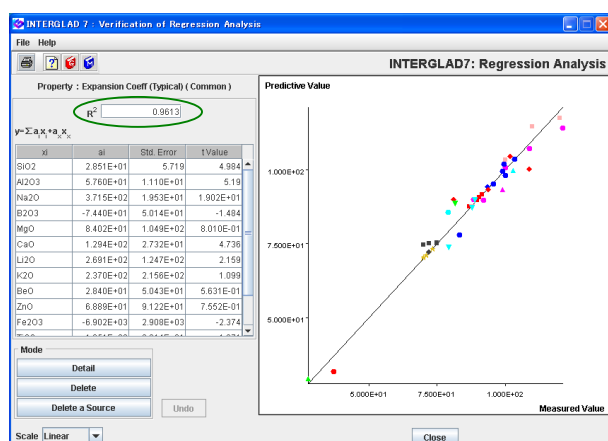
- [Verify Result]ボタンをクリックし、重回帰分析検証画面を開きます。
- 寄与率 R^2 が 0.9225 であり、0.9 以上と良好であることを確認します。
- 重回帰分析画面で $|t|$ を確認すると、2 より小さい成分項があることがわかります。



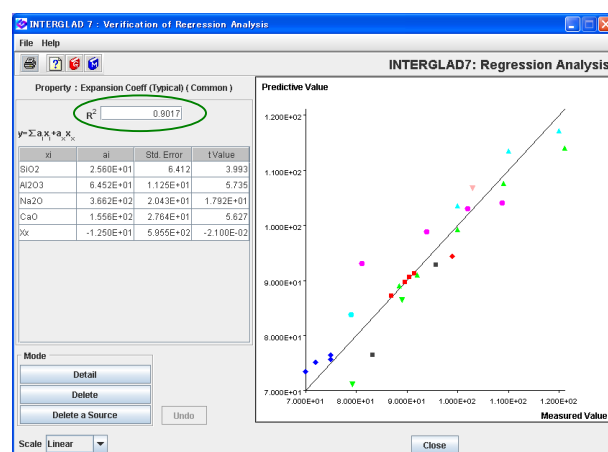
- $|t|$ の小さい Fe_2O_3 (-0.156)、 SO_3 (0.910) のチェックをはずして除外し、再計算を行います。その結果、 R^2 は 0.9209 となり、 $|t|$ はすべて 2 以上となります。これにより、屈折率の重回帰式が完成します。



- 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。

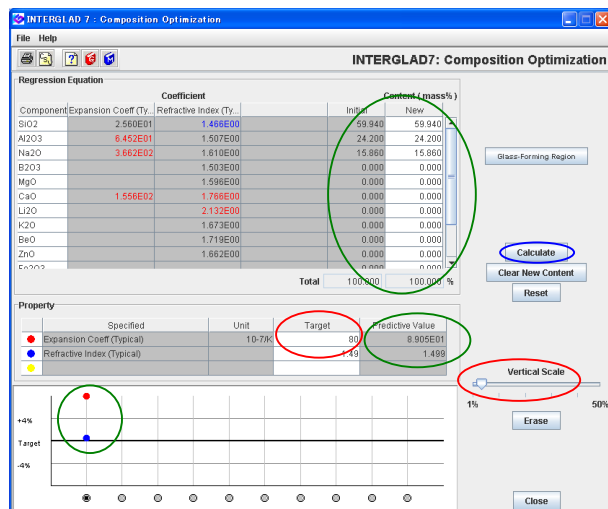
4) 組成最適化（重回帰分析検索結果画面 → 組成最適化画面）

INTERGLAD 7: Data List for Regression Analysis

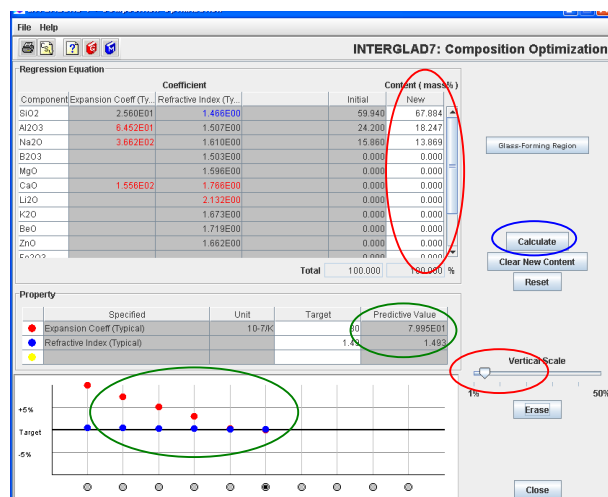
Total Number: 43, Number of Sources: 18

Delete	No.	Grass No.	Expansion Coeff (Ty, (10^-7/K))	Expansion Coeff (Ty, (Predictive Value))	Expansion Coeff (Ty, (Residual))	Refractive Index (Ty, (Predictive Value))	Refractive Index (Ty, (Residual))	Refractive Index (Ty, (Residual))
☐	8	OC05-051160	2.750E+01			1.469	1.475	-6.252E-01
☐	43	OB02-245444	3.090E+01			1.476	1.476	2.220E-01
☐	42	OB02-245443	7.370E+01			1.483		
☐	17	OB08-082288	7.000E+01	7.343E+01	-3.434	1.489	1.491	-2.015E-01
☐	38	OB02-215714	9.000E+01			1.489		
☐	19	OB02-096094	8.110E+01	9.310E+01	-1.200E+01	1.494	1.497	-2.948E-01
☐	20	OB02-096095	9.390E+01	9.880E+01	-4.899	1.495	1.499	-3.950E-01
☐	21	OB02-096096	1.020E+02	1.031E+02	-1.073	1.497	1.5	-2.791E-01
☐	22	OB02-096097	1.088E+02	1.041E+02	4.704	1.497	1.5	9.629E-01
☐	13	OB06-055409	8.850E+01	8.805E+01	-5.486E-01	1.5	1.498	1.284E-01
☐	43	OB06-055408	9.200E+01	9.206E+01	1.041	1.5	1.499	4.349E-01
☐	38	OB02-098994	9.570E+01	9.280E+01	2.559	1.501	1.497	4.208E-01
☐	39	OB02-245348	7.930E+01	7.108E+01	8.241	1.502	1.503	-1.252E-01
☐	29	OB02-098995	8.320E+01	7.643E+01	6.769	1.502	1.492	1.009E-01
☐	11	OB06-055407	1.000E+02	9.921E+01	7.930E-01	1.502	1.502	5.474E-01
☐	10	OB06-055406	1.090E+02	1.075E+02	1.466	1.503	1.504	-1.170E-01
☐	16	OB08-082267	7.200E+01	7.521E+01	-3.215	1.504	1.505	-1.390E-01
☐	9	OB02-055405	1.210E+02	1.140E+02	6.888	1.504	1.506	-2.095E-01
☐	32	OB06-116981	1.100E+02	1.135E+02	-3.47	1.506	1.506	-3.773E-01
☐	8	OC02-051362	8.800E+01			1.506	1.507	-1.033E-01

- ・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、[PredictiveValue] 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。

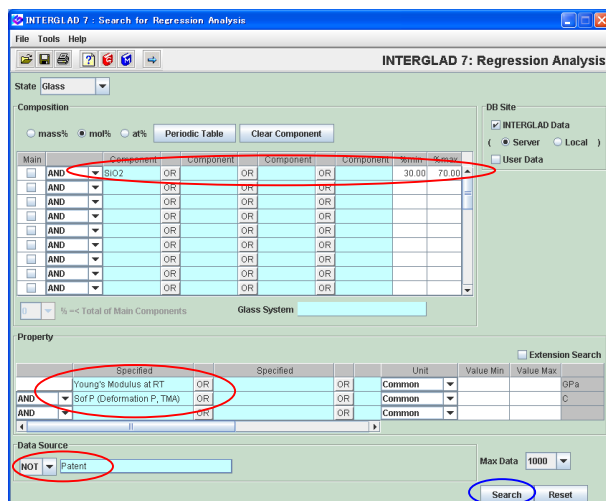
3.7 材料設計（組成最適化）（3 次式）－ 特性を特定したホウケイ酸塩ガラス

ヤング率（室温）が 70GPa、屈伏点が 700℃であるホウケイ酸塩ガラスを設計します

組成系は $\text{SiO}_2(30\text{-}70 \text{ mol}\%)\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-CaO-BaO-Na}_2\text{O}$ とします。

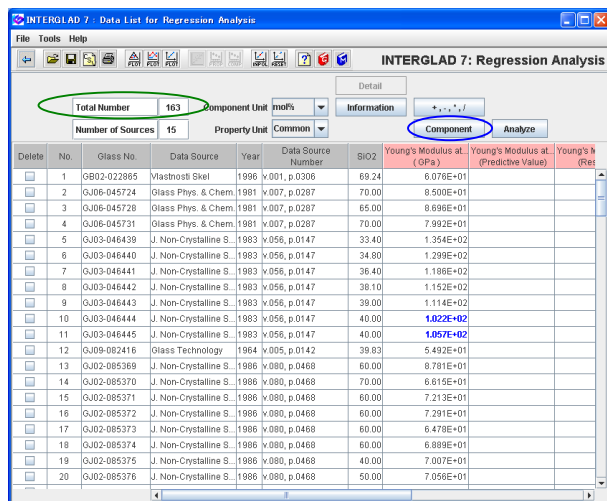
<マニュアル第 3 章 D.3、第 4 章 4.2-4.5、4.7 参照>

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



- 組成成分は SiO_2 のみ、最小値 30mol%、最大値 70mol%とします。
- 特性は Young's Modulus at RT と Sof P(Deformation P, TMA)を AND で結びます。
- 出典は NOT Patent とします。

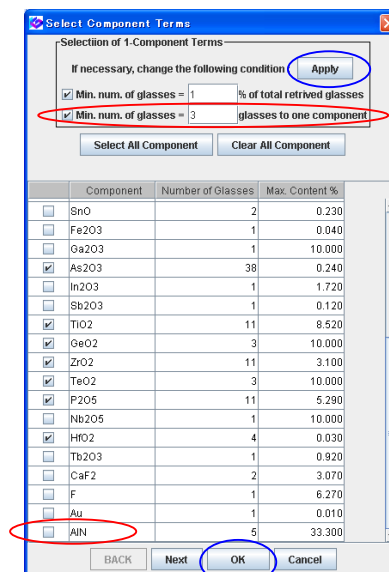
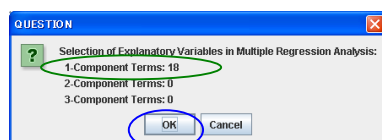
2) 重回帰分析検索結果



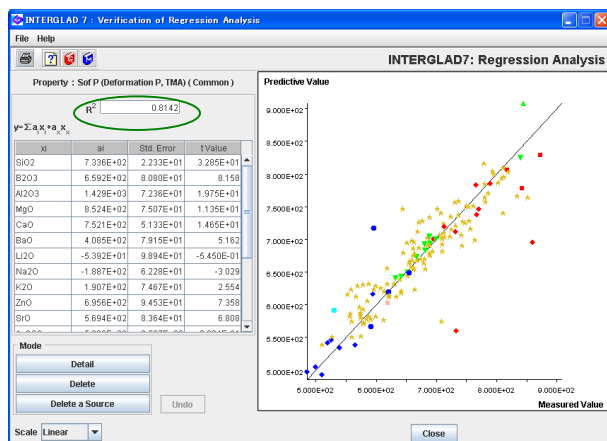
- 163 件のガラスが抽出されます。

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）



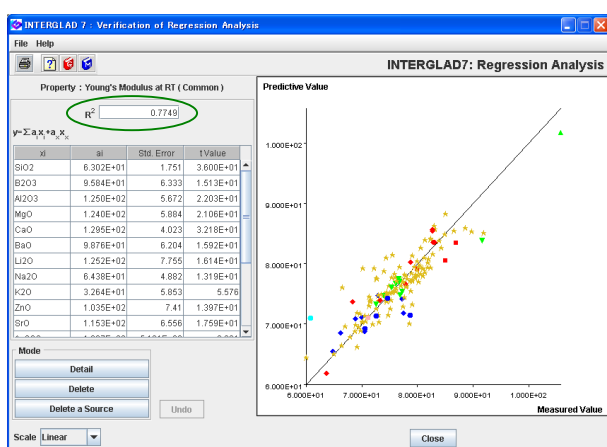
- ・1成分項選択小画面で、成分当たりのガラス数を3とし、[Apply]ボタンをクリックします。さらにリストより酸化物以外の成分項 (AIN) のチェックをはずし、非選択とします。[OK]ボタンをクリックし、説明変数確認ダイアログで説明変数が18であることを確認します。



- ・重回帰分析実行画面で2特性につき、それぞれデフォルト条件で重回帰分析を実行し、重回帰分析検証画面で分析結果を検証します。

- ・屈伏点の重回帰分析検証画面 1 次式 $R^2=0.8142$

- ・図中の黄色の星印は信頼性の高いデータの Gold-Data です。<第4章 2.1 (2) (C) ②参照>

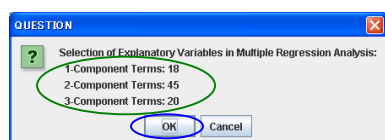


- ・ヤング率の重回帰分析検証画面 1 次式 $R^2=0.7749$

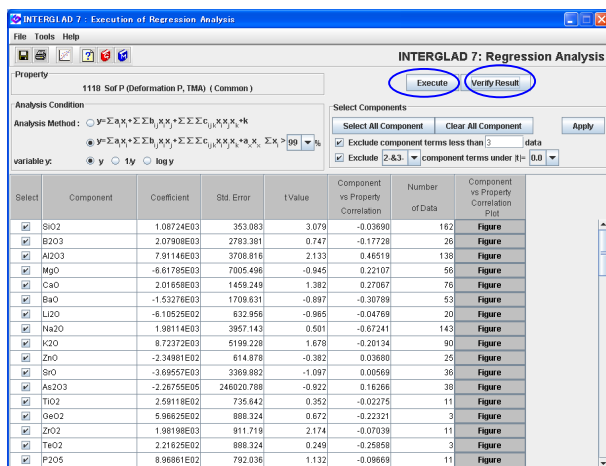
- ・屈伏点、ヤング率のいずれも R^2 が 0.82 以下であり、十分ではないことがわかります。そこで次に3次式による重回帰分析を試みることにします。

- ・重回帰分析検証画面および重回帰分析実行画面を閉じます。

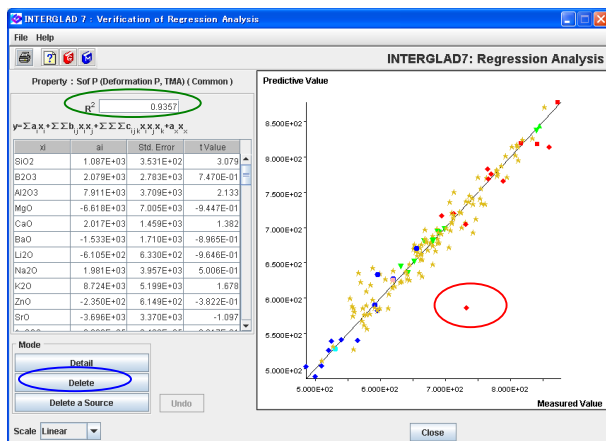
4) 重回帰分析 (3 次式) (成分項選択小画面 → 重回帰分析実行画面 → 重回帰分析検証画面)



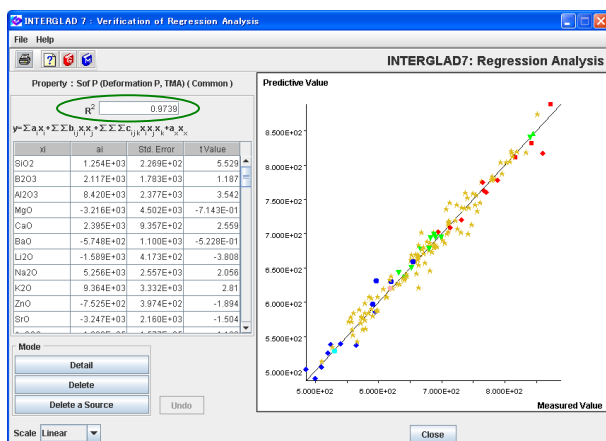
- ・重回帰分析検索結果画面に戻り、[Component]ボタンをクリックし、成分項選択小画面を開きます。
- ・1成分項の選択は、1次式の場合と同じとし、2, 3成分項の選択はデフォルト条件とします。
- ・この結果、成分項の選択数は、1成分項18、2成分項45、3成分項20となります。



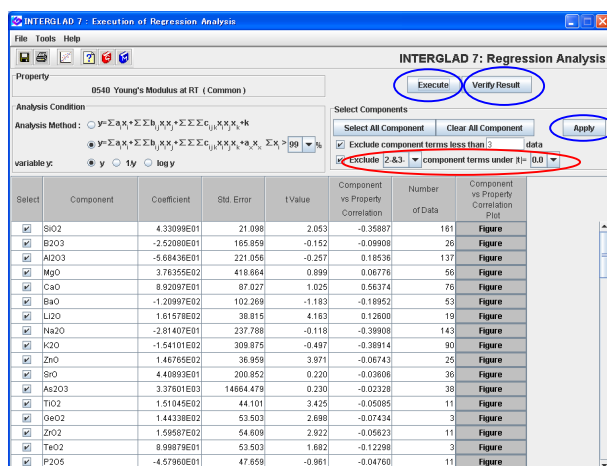
- ・屈伏点の重回帰分析実行画面で[Execute]ボタンをクリックし重回帰分析を行います。



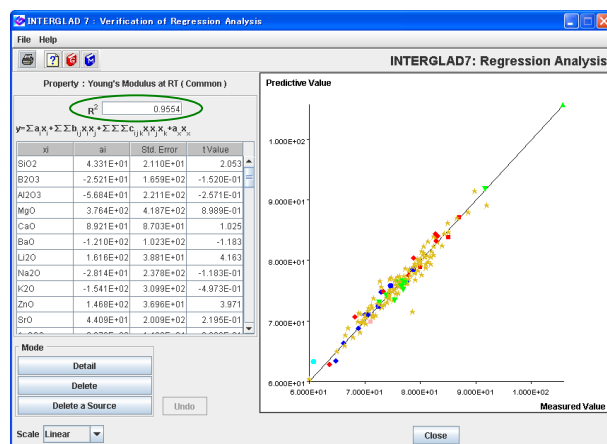
- ・検証画面を開くと、 $R^2=0.9357$ であることがわかります。
- ・ $y=x$ より離れた点が 1 点あるため、[Delete]ボタンをクリックした上で、この点をクリックし、除去します。重回帰分析画面に戻り、[Execute]ボタンをクリックし、再計算を行います。



- ・この結果、 R^2 が 0.9739 と上がります。

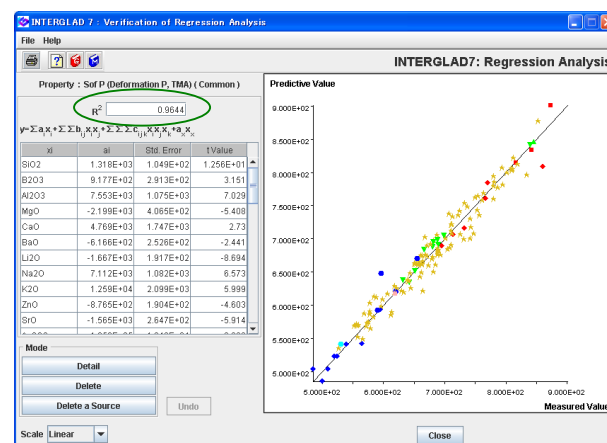


- 次に、ヤング率の重回帰分析画面で[Execute]ボタンをクリックし重回帰分析を行います。



- 検証画面を開くと $R^2=0.9554$ であることがわかります。 $y = x$ より大きくはずれた点はありません。

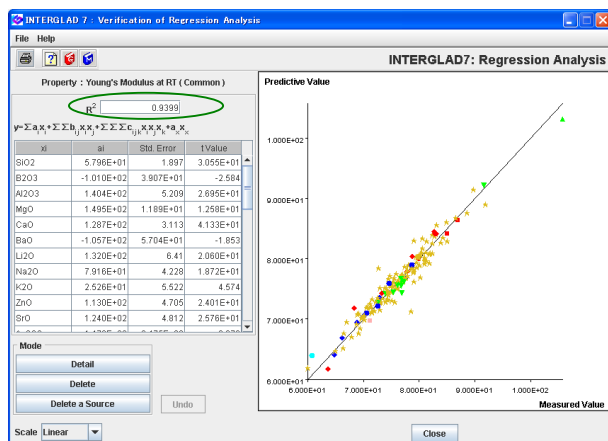
- 両特性で R^2 が 0.9 以上となる良好な結果が得られたため、次に t 値による成分項の絞り込み ($|t|$ の低い成分項を除外)を行います。



- まず、屈伏点の重回帰分析画面で、t 値により成分項の絞り込みを行います。

- ① 2,3 成分項の内 $|t|=0.5$ より小の成分項を削除して計算を行います ([Select Components] 欄の最下段で '2- & 3-' と '0.5' 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 $|t|=1.0$ より小を削除計算 2 回
- ③ 2,3 成分項 $|t|=1.5$ より小を削除計算 1 回
- ④ all 成分項 $|t|=0.5$ より小を削除計算 1 回
- ⑤ all 成分項 $|t|=1.5$ より小を削除計算 1 回

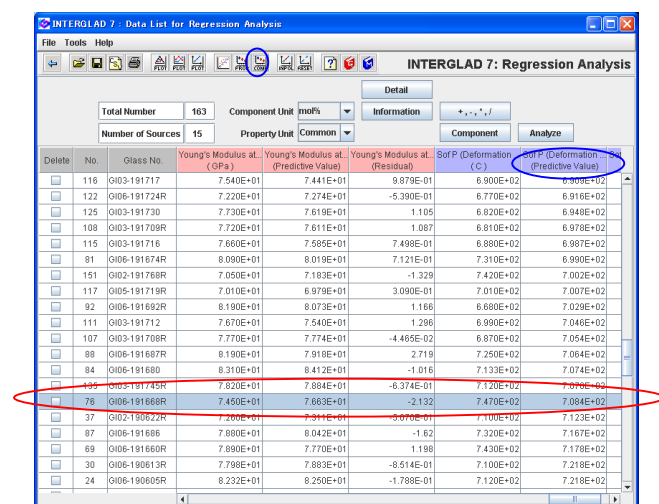
- ⑥ 2,3 成分項 $|t|=1.5$ より小を削除計算 1 回
- ・上記の操作により、 $|t|$ が 1 成分項で 1.4 以上、2 成分項で 1.9 以上、3 成分項で 2.0 以上となり、 $R^2=0.9644$ の重回帰式が得られます (すべての $|t|$ を 2 以上とすることは難しいため、これで重回帰式の完成とします)。



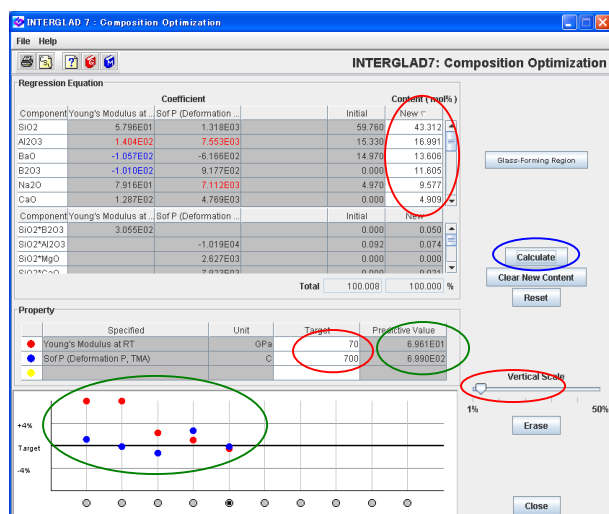
- ・次に、ヤング率の重回帰分析画面で、 t 値による成分項の絞り込みを行います。

- ① 2,3 成分項の内、 $|t|=0.5$ より小の成分項を削除して計算を行います ([Select Components] 欄の最下段で '2- & 3-' と '0.5' 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) 3 回行います。
 - ② 2,3 成分項 $|t|=1.0$ より小を削除計算 2 回
 - ③ 2,3 成分項 $|t|=1.5$ より小を削除計算 2 回
 - ④ 2,3 成分項 $|t|=2.0$ より小を削除計算 1 回
 - ⑤ all 成分項 $|t|=0.5$ より小を削除計算 1 回
- ・上記の操作により、 $|t|$ が 1 成分項で 1.9 以上、2 成分項で 2.2 以上、3 成分項で 2.3 以上となり、 $R^2=0.9399$ の重回帰式が得られます (すべての $|t|$ を 2 以上とすることは難しいため、これで重回帰式の完成とします)。

5) 組成設計 (最適化) (重回帰分析検索結果画面 → 組成最適化画面)



- ・重回帰分析結果画面に戻り、目標特性に近いガラスをモデル組成として選択します。このために、[Sof P(Predictive Value)] 欄をソートし、Sof P が 700℃に近いガラスを探します。Sof P が 699℃のガラスがありますが、本例では成分として必要な BaO をある程度含む 196688R を選択します。
- ・組成最適化[COMP]アイコンをクリックし、組成最適化画面を開きます。



- 特性の[Target]欄にヤング率と屈伏点の目標値、70GPa、700℃をそれぞれインプットします。
- [Calculate]ボタンをクリックすると、モデル組成の予測値が特性欄の[Predictive Value]欄およびグラフに表示されます。
- Content の[New]欄に[Initial]欄のモデル組成の成分値を参考として必要な成分に数値をインプットします。本例では、必要な成分以外の数値を 0 とし、必要な成分で 0 のところに数値を入れ[Calculate]ボタンをクリックします。[New]欄をソートしておく、と、数値のある必要な成分が並び、操作が容易になります。
- 成分項の重回帰係数の大小を考慮しながら、[New]組成を変え、計算します。グラフにより目標値との差をチェックしながら操作を繰り返します。
- 本例では、SiO₂ 43.3mol%、B₂O₃ 11.6%、Al₂O₃ 17.0%、CaO 4.9%、BaO 13.6%、Na₂O 9.6%の場合に、ヤング率 69.6GPa、屈伏点 699℃の特性が得られることがわかります。この結果は最適組成例の一つであり、SiO₂ 以外の成分にも設定範囲を設けると、別の最適組成が得られます。

4. 構造データの検索と解析

4.1 構造情報調査 – ゲルマン酸塩ガラス

＜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

INTERGLAD 7: Search Structure Data

State: Not Specified

Composition: mass%, mol%, at%

Periodic Table

Clear Component

Numerical

Structure

Measurement Method

Measurement Condition

Data Source

First Author

Search

- ・ガラス系として Germanate を指定します。

2) 検索結果（構造検索結果画面）

INTERGLAD 7: Data List of Structure

Total Number: 437

Number of Sources: 55

Component Unit: mol%

Structure

Delete	No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	IR-Visible (Peak, Valley) (cm-1)	IR-Visible (Peak, Valley) (cm-1)	IR-Visible (Peak, Valley) (cm-1)	IR-Visible (Peak, Valley) (cm-1)
☐	386	S-06562	J. Non-Crystalline S.	1988	v099, p0289				
☐	387	S-06563	J. Non-Crystalline S.	1988	v099, p0289				
☐	388	S-06564	J. Non-Crystalline S.	1988	v099, p0289				
☐	389	S-06565	J. Non-Crystalline S.	1988	v099, p0289				
☐	390	S-06566	J. Non-Crystalline S.	1988	v099, p0289				
☐	391	S-06567	J. Non-Crystalline S.	1988	v099, p0289				
☐	392	S-06568	J. Non-Crystalline S.	1988	v099, p0289				
☐	393	S-06569	J. Non-Crystalline S.	1988	v099, p0289				
☐	394	S-07306	J. Non-Crystalline S.	2009	v355, p0468				
☐	395	S-07308	J. Non-Crystalline S.	2009	v355, p0468				
☐	396	S-07309	J. Non-Crystalline S.	2009	v355, p0468				
☐	397	S-07310	J. Non-Crystalline S.	2009	v355, p0468				
☐	398	S-07311	J. Non-Crystalline S.	2009	v355, p0468				
☐	399	S-07312	J. Non-Crystalline S.	2009	v355, p0468				
☐	400	S-07533	J. Non-Crystalline S.	1997	v210, p0130				
☐	401	S-07534	J. Non-Crystalline S.	1997	v210, p0130				
☐	402	S-07535	J. Non-Crystalline S.	1997	v210, p0130				
☐	403	S-07536	J. Non-Crystalline S.	1997	v210, p0130				
☐	404	S-07537	J. Non-Crystalline S.	1997	v210, p0130				
☐	405	S-07556	J. Non-Crystalline S.	1999	v243, p0159				

- ・437 件のガラス（55 の出典より）がリストアップされます。

- ・どのような構造情報が登録されているかを知るために、[Structure]ボタンをクリックし、[Select Structure]小画面を開き、[Select All]ボタンをクリックします。

- ・これにより、それぞれのガラスについてのデータは少ないですが、全体では 100 以上の項目にデータが登録されていることがわかります。

- ・以下、使用上の注意点も含め、いくつかのデータについて説明します。

INTERGLAD 7: Detail Data of Structure

Glass No. S-02641

State: Glass

Composition: Condition of Data

Batch

Components

Thermal Treatment

Synthesis

Measurement Condition

Structure

Description	Atoms	Unit	Value	Accuracy (σ)	Comment
IR-Visible (Peak, Valley) (O-H)	cm-1		3400.0		hydroxyl, free
IR-Visible (Peak, Valley) (O-H)	cm-1		2300.0		hydroxyl, free
IR-Visible (Peak, Valley) (O-H)	cm-1		3450.0	5.0	free hydroxyl
IR-Visible (Peak, Valley) (O-H)	cm-1		3250.0	5.0	free hydroxyl
IR-Visible (Peak, Valley) (O-H)	cm-1		2999.0	5.0	strong hydroxyl
IR-Visible (Peak, Valley) (O-H)	cm-1		2324.0	5.0	very strong

Author: Jewell J. M., Aggarwal I. D.

Data Source: J. Non-Crystalline Solids Vol. 161 (1995) Page 0189

Glass No. (Property): GJ35-161045

Related Glass No.

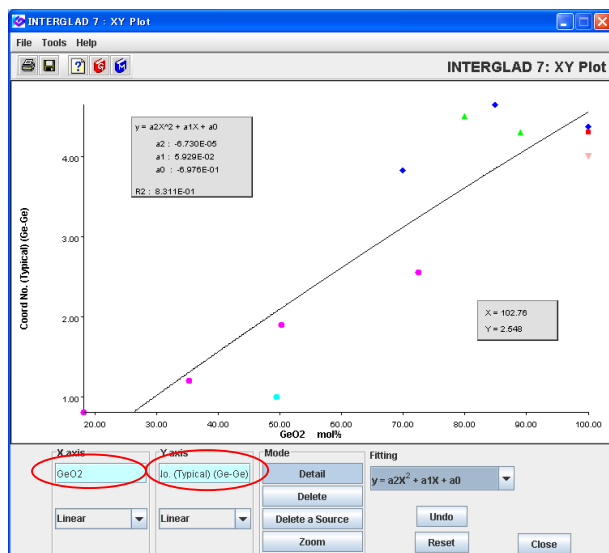
Measurement

Description	Method	Condition	Note
IR-Visible Spect.	Transmission or Abs.	absorption	

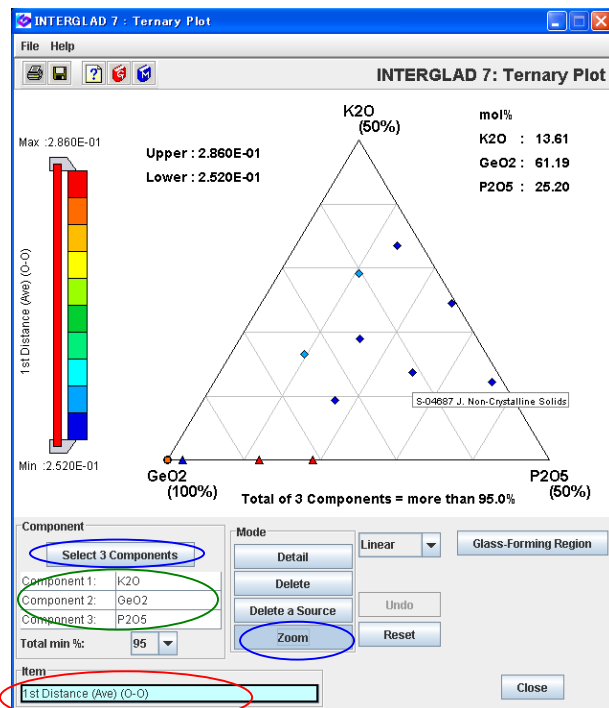
- ・左図は S-02641 の詳細画面です。このガラスには IR-Visible(Peak, Valley) (O-H) の波数値が登録されています。詳細画面には 6 個の数値が記されていますが、検索結果画面のリストには詳細画面の 1 番上の 1 データのみが現われます。構造データでは、同様な場合が多く、詳細画面の(Structure の[Comment]欄も含め)

確認が必要となることがあります。また、INTERGLAD には通常、スペクトル図は登録されていないので、必要がある場合には出典を確認してください。

3) 検索結果の利用 (XY プロット画面、三角図画面)



- 左図は GeO₂ 量と配位数(Typical)(Ge-Ge)の XY プロットです。本例では配位数(Typical)は第一近接配位数であり、GeO₂ 成分量が増えるに従い Ge の周りの Ge の配位数が増加の様子が示されます。

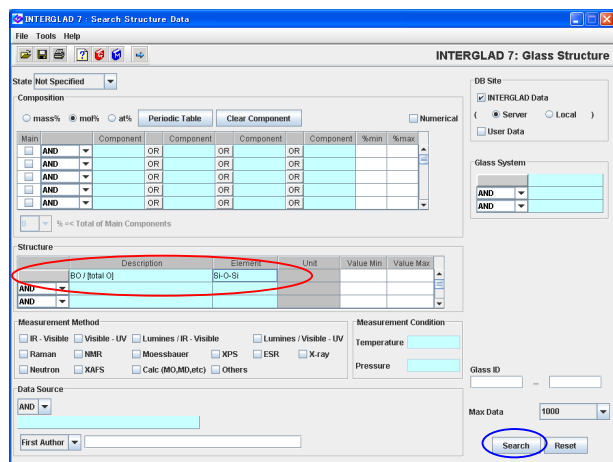


- 左図は三角図表示の例で、GeO₂-P₂O₅-K₂O 系における O-O 間の第一結合距離を色別に表示しています。本図は GeO₂(100%)-P₂O₅(50%)-K₂O(50%)にズームアップした図です。

4.2 組成と構造の相関調査 — SiO₂ 量と架橋酸素(BO)の割合

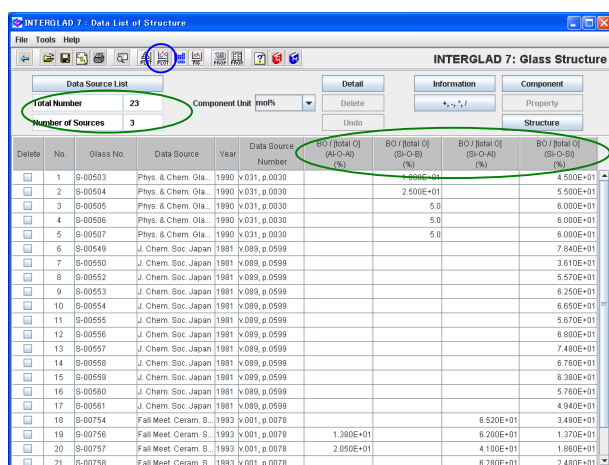
＜マニュアル第 3 章 E、第 4 章 5 参照＞

1) 検索条件設定（構造検索画面） → 検索実施



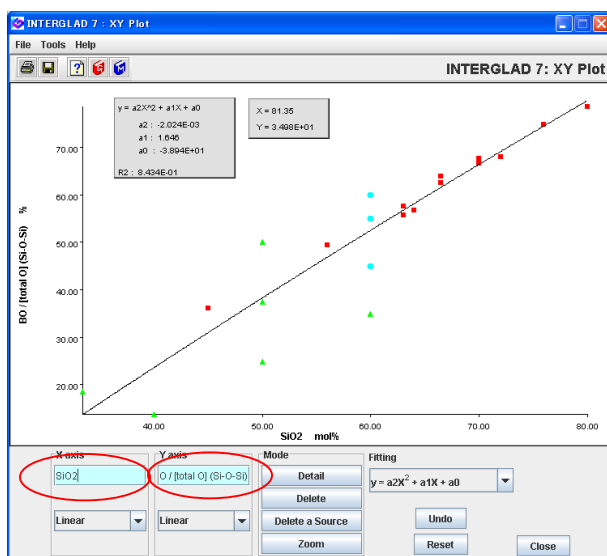
- 構造の[Description]欄に BO/[totalO]を指定し、[Element]欄に Si-O-Si を指定します。

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。

4.3 構造因子間の相関調査 ― アルカリケイ酸塩ガラスの Q² と非架橋酸素(NBO)割合

<マニュアル第3章E、第4章5 参照>

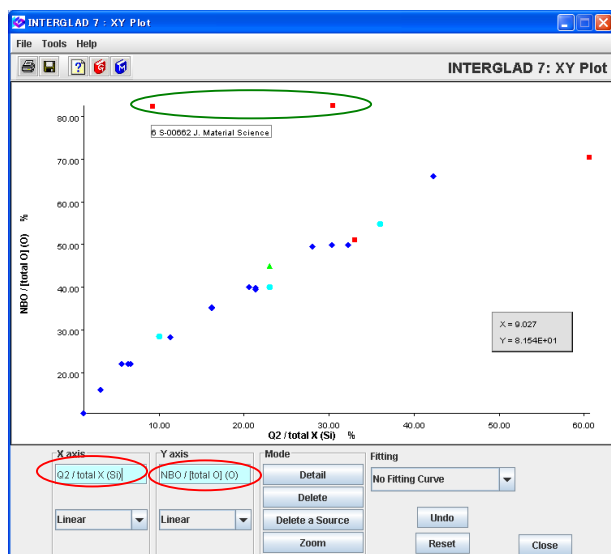
1) 検索条件設定 (構造検索画面) → 検索実施

- ガラス系を Alkali Silicate に指定します。
- 構造情報として Bridging Oxygen Information の Qn Distribution 中の Q2/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)

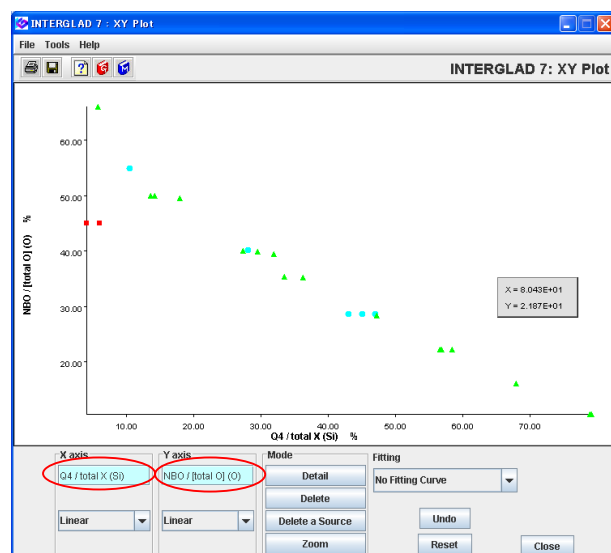
No.	Glass No.	Data Source	Year	Data Source Number	NBO / [total O] (%)	NBO / [total O] (Si-O) (%)	NBO / [total O] (Ca-O) (%)	NBO / [total O] (B)
1	S-00119	J. Non-Crystalline S.	2002	v.297, p.0220	2.980E+01			
2	S-00120	J. Non-Crystalline S.	2002	v.297, p.0220	4.010E+01			
3	S-00121	J. Non-Crystalline S.	2002	v.297, p.0220	5.490E+01			
4	S-00122	J. Non-Crystalline S.	2002	v.297, p.0220	2.980E+01			
5	S-00123	J. Non-Crystalline S.	2002	v.297, p.0220	2.980E+01			
6	S-00062	J. Material Science	1993	v.026, p.3473	8.220E+01			
7	S-00063	J. Material Science	1993	v.026, p.3473	8.230E+01			
8	S-00064	J. Material Science	1993	v.026, p.3473	7.030E+01			
9	S-00065	J. Material Science	1993	v.026, p.3473	5.110E+01			
10	S-01150	J. Jpn. Inst. Metals	1993	v.047, p.0392	4.500E+01			

- 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。Q2/ 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)

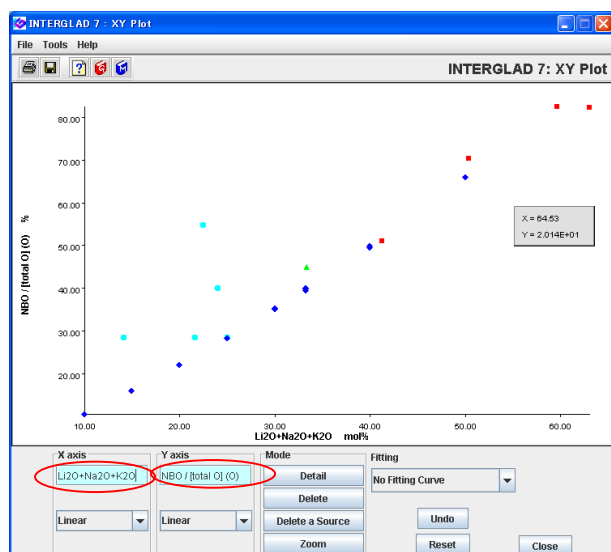
• $Q^2/\text{totalX}(\text{Si}) - \text{NBO}/[\text{totalO}](\text{O})$ のXYプロットを表示します。

• 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 $Q^4/\text{totalX}(\text{Si}) - \text{NBO}/[\text{totalO}](\text{O})$ 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。

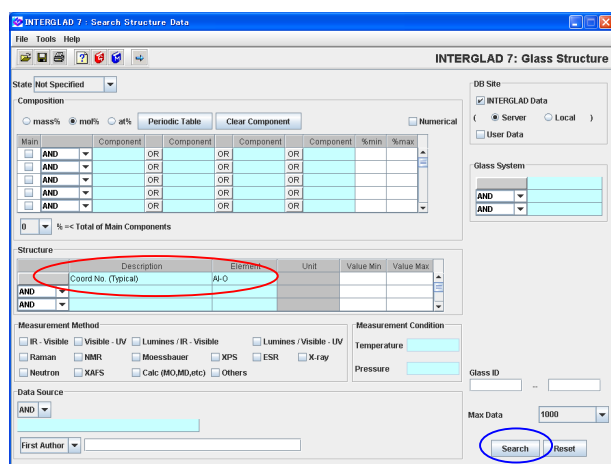


• また、本例で抽出されたガラスはいずれもアルカリを含むため、 Li_2O 、 Na_2O 、 K_2O の合計量 (mol%) と NBO 割合との関係を調べると、左図のようになります。これにより、アルカリ量と NBO 割合がほぼ比例し、アルカリ量の増加により非架橋酸素が増加することが示されます。

4.4 構造と特性の相関調査 — Al-O 配位数(Al の周囲のO配位数)と特性

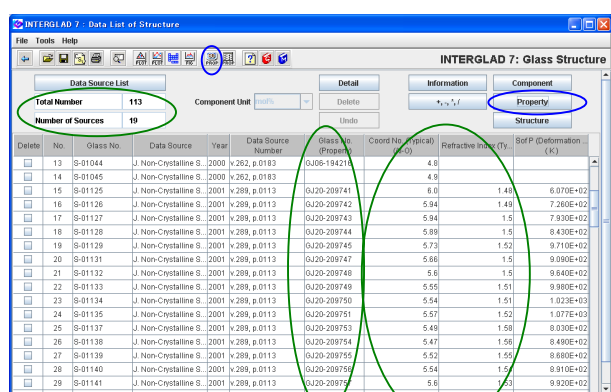
＜マニュアル第3章E、第4章5参照＞

1) 検索条件設定（構造検索画面） → 検索実施



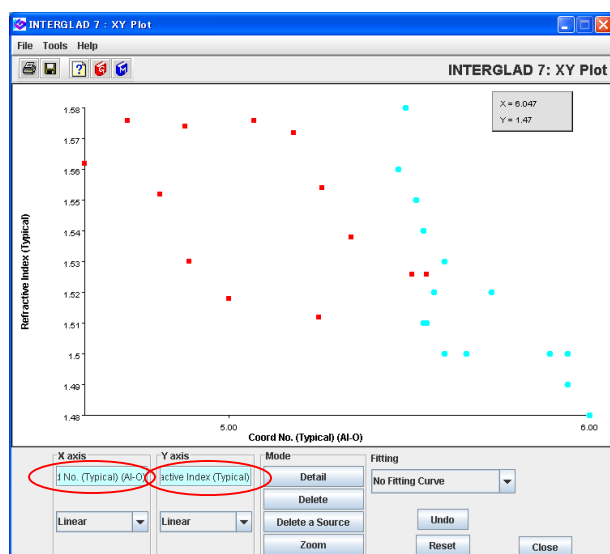
- 構造情報として Coord No.(Typical)、Element として Al-O を設定します。

2) 検索結果（構造検索結果画面）

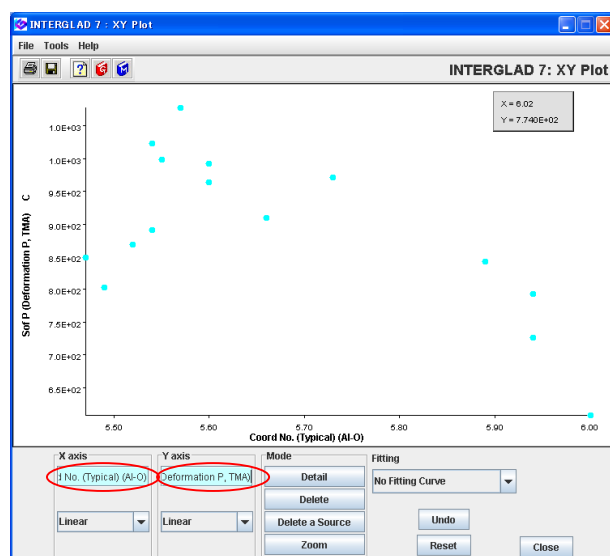


- 113 ガラス（19 出典より）がリストアップされます。
- 特性データベース呼出アイコンをクリックし、対応する特性データベースの Glass No.を表示させます。
- 次に、対応する特性データがあるかどうかを調べるために [Property] ボタンをクリックし、特性選択小画面で屈折率 Refractive Index(Typical)をクリックしてデータをリスト表示させます。また軟化(屈伏)点 Sof P を同様に表示させます。左図では [Coord No.(Typical)(Al-O)]、[Refractive Index(Typical)]、[Sof P] 欄を左に移動し、見易くしています。

3) Al-O 配位数と特性の相関 (XY プロット図)



- 左図は Coord No.(Typical)(Al-O) と Refractive Index(Typical)のXYプロットです。データがばらつき、明確ではありませんが、配位数が大きくなる程、屈折率が小さくなる傾向がみられるようです。



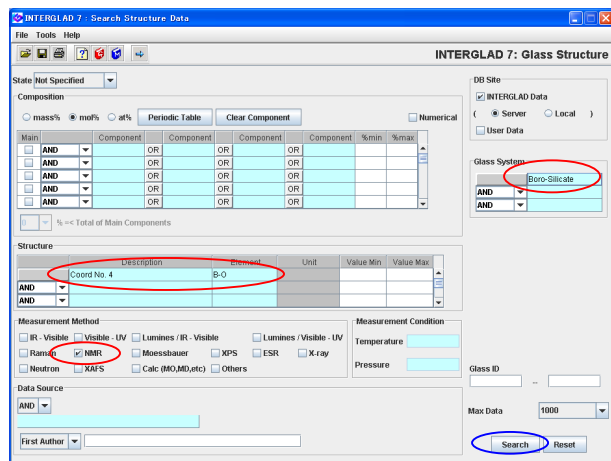
- 左図は Coord No.(Typical)(Al-O) と Sof P のXYプロットです。この場合もデータがばらついていますが、配位数 5.6 付近にピークがあるようにも読み取れます。
- なお、構造データと特性データの両方が登録されているデータは現状ではわずかです。

4.5 解析方法を特定した構造データの調査 — NMR による 4 配位ホウ素量

NMR により測定した 4 配位ホウ素量（ホウケイ酸塩ガラスについて）を調査します

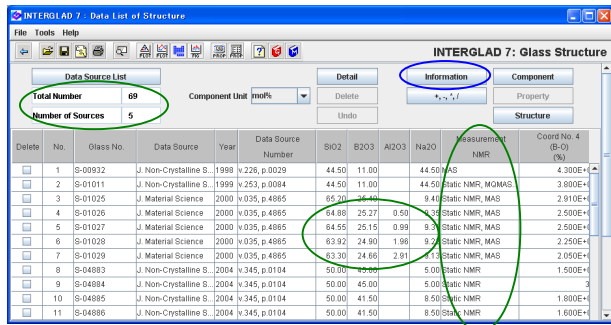
<マニュアル第 3 章 E、第 4 章 5 参照>

1) 検索条件設定（構造検索画面） → 検索実施



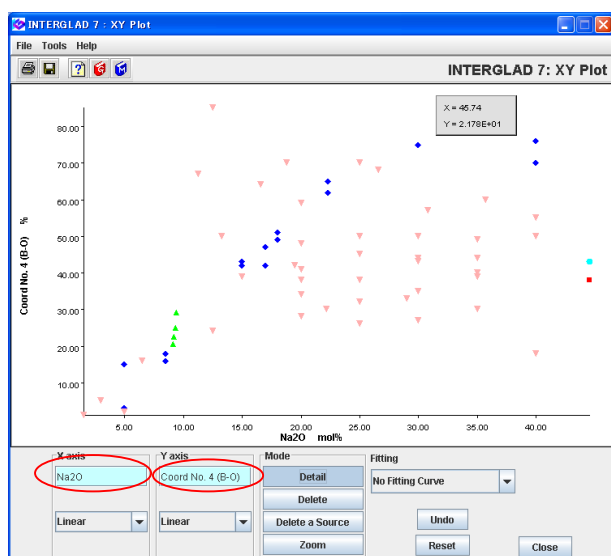
- ・ガラス系として Boro-Silicate を指定します。
- ・構造情報として Coord No.4、Element として B-O(B の周囲の O 配位数が 4)を指定します。
- ・測定法として NMR にチェックを入れます。

2) 検索結果（構造検索結果画面）



- ・69 ガラス（5 出典）がリストアップされます。
- ・Component ボタンをクリックして Select Structure 小画面を開き、Select All を選択し、組成を調べると、全てが $\text{SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Na}_2\text{O}$ 系であることがわかります。その内 4 ガラスに 3mol%までの Al_2O_3 が含まれています。
- ・Information ボタンをクリックし、Measurement をリストに表示させることにより、リストアップされたガラスの 4 配位ホウ素量はすべて NMR により測定されたことがわかります。

3) 検索結果の利用 (XY プロット画面)



- 左図は Na_2O 量-4 配位ホウ素量の XY プロットです。 Na_2O 量 10mol%以上で 4 配位ホウ素量が増加し、ばらつきも大きいことがわかります。