

# 量子・古典ハイブリッド法を用いた鉄含有 ガラスの励起状態の研究へ向けて



今村 穂

AGC株式会社

# AGC株式会社について



会社名 : **AGC株式会社**  
証券コード : **5201**  
創立 : **1907年 9月8日**  
代表取締役 : **平井 良典**  
資本金 : **909億円\***  
連結売上高 : **2兆676億円\***  
連結従業員数 : **53,687人\***  
連結子会社数 : **186社**  
(うち海外149社) \*



創業時の志

受け継がれている思い



現在

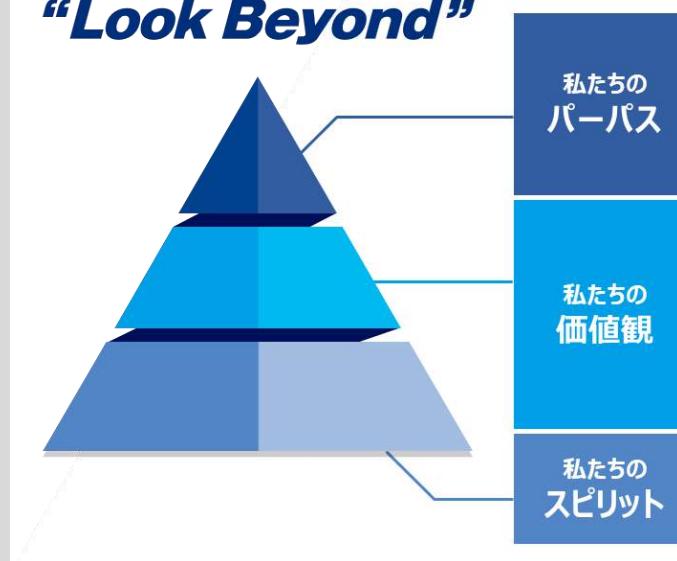
板ガラスの  
国産化を通じて  
社会の発展に貢献したい



創業者 岩崎俊彌

困難は覚悟の上で  
難題に挑む

**“Look Beyond”**



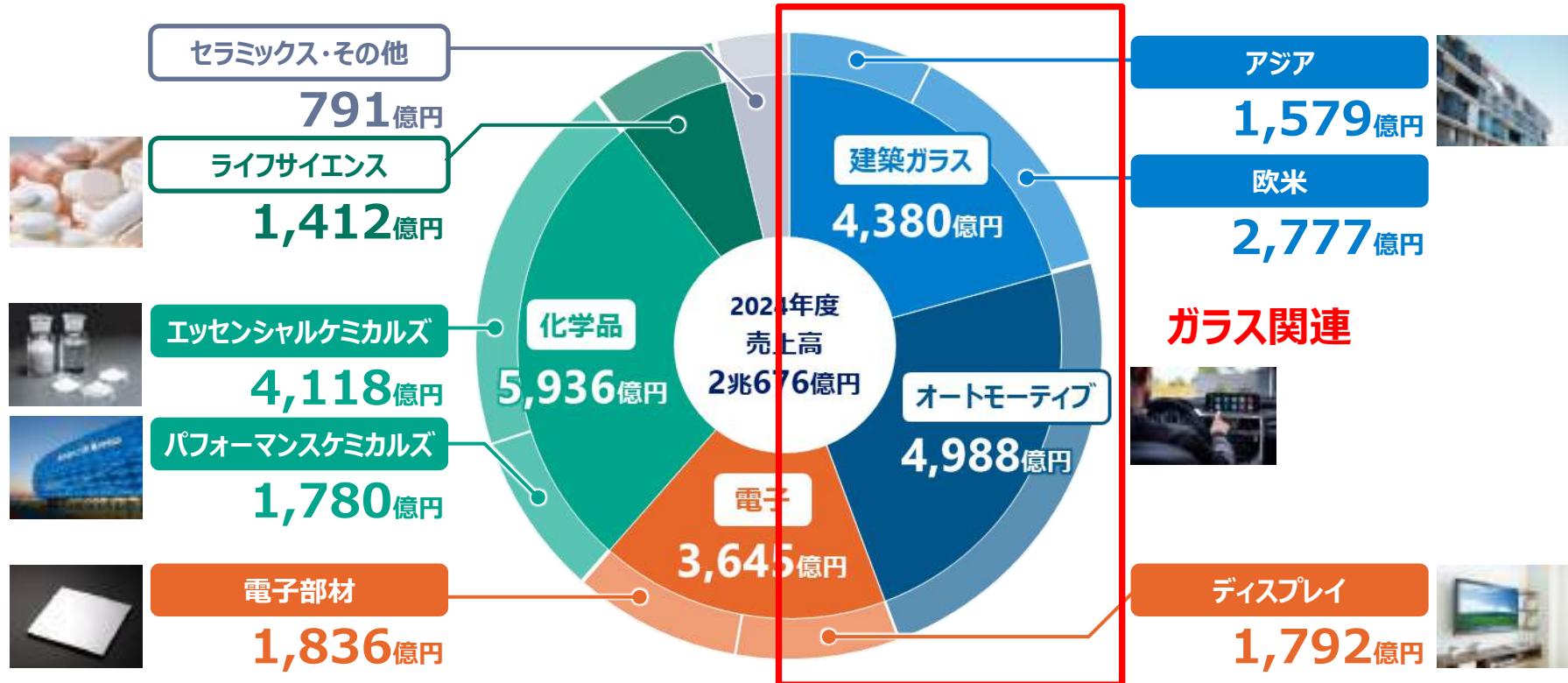
“AGC、いつも世界の大変な一部”

～ 私たちは先を見据え、独自の素材・ソリューションで、  
いつもどこかで世界中の人々の暮らしを支えます～

- Innovation & Operational Excellence
- Sustainability for a Blue Planet
- One Team with Diversity
- Integrity & Trust

“易きになじまず難きにつく”

# AGC株式会社の事業セグメント展開



ガラスに不純物の鉄イオンが含まれると吸収が発生  
→ガラスの光学特性の制御が困難

これまでAGCを含め多くの検討が行われてきた。

実験アプローチ：

[Na<sub>2</sub>O-RO-SiO<sub>2</sub>ガラス \(R= Mg, Ca\) 中のFe<sup>2+</sup>イオンの構造 | 技術開発とイノベーション | AGC](#)

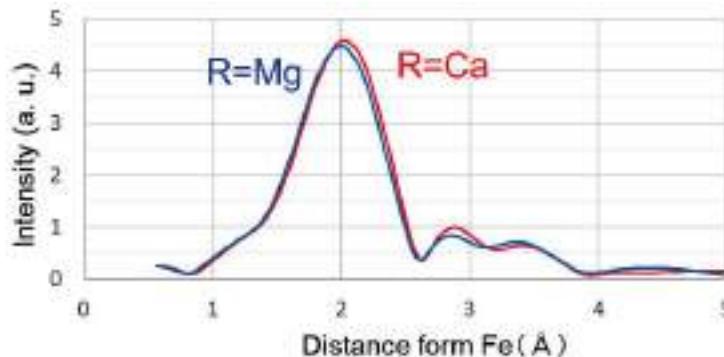
計算アプローチ：

[ガラス中に含まれる鉄イオンに起因する光吸収スペクトルの計算機シミュレーション | 技術開発とイノベーション | AGC](#)

計算のポイント：ガラス構造、鉄の励起状態計算

# 鉄を不純物として含むガラスの先行研究の紹介

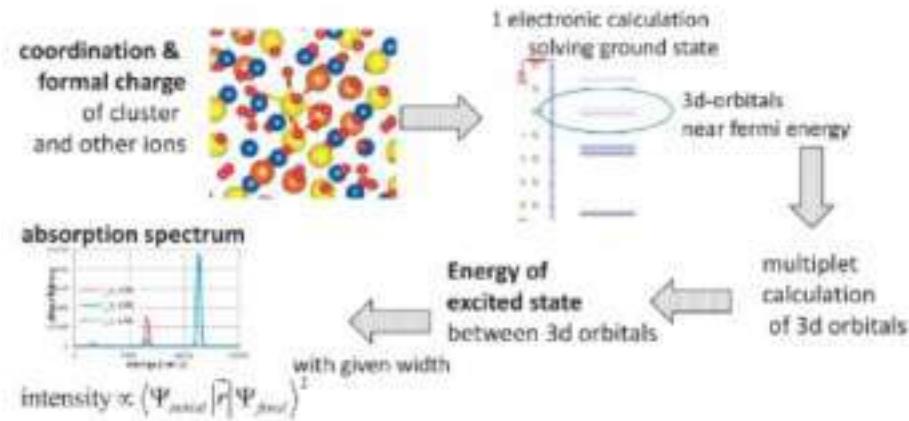
## 実験アプローチ



アルカリ土類をMgからCaに置換  
→第一配位のFe-O間距離が大きく、  
6配位のFe<sup>2+</sup>がより歪んだ構造

Fe<sup>2+</sup>を含むガラス構造の解析が必要

## 計算アプローチ



DV-ME法を用いて結晶構造、ガラスの光吸収スペクトルを計算

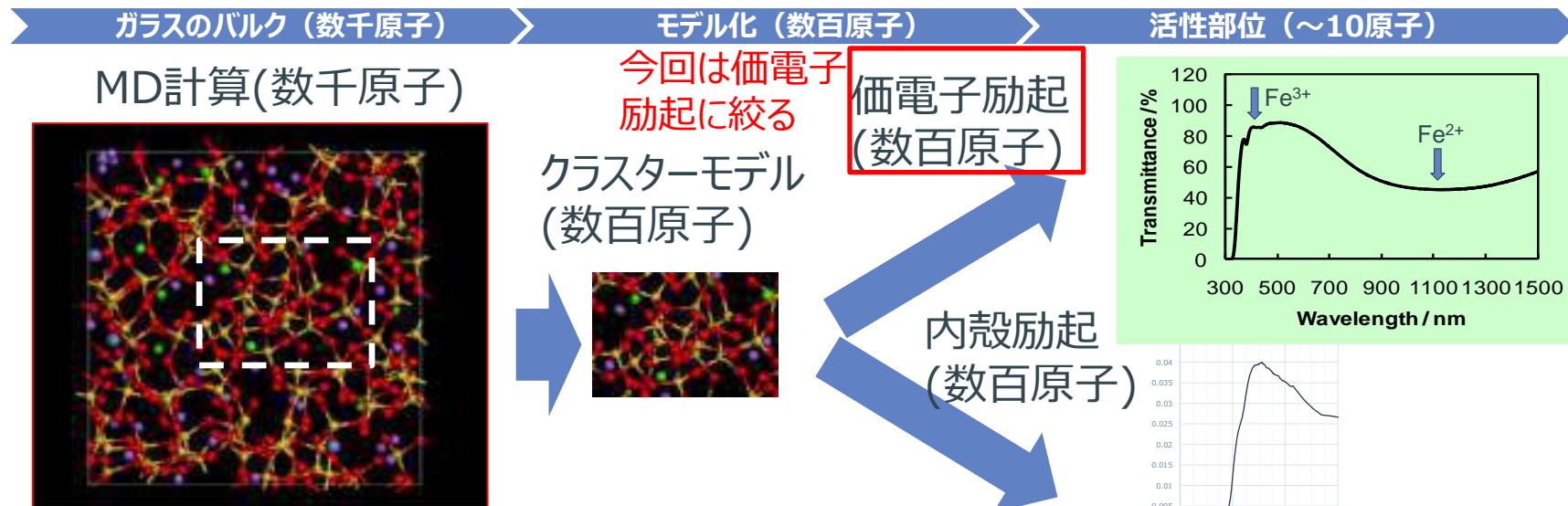
高精度な手法による検討が必要

# テストユーザープログラムの課題

研究実施期間：2026年1月-6月

課題名：量子・古典ハイブリッド法を用いた鉄含有ガラスの励起状態の研究

参加機関：AGC株式会社、理研RCCS



古典計算機

AGC:Matlantis MD

古典計算機

理研+AGC : ONIOM-MTA

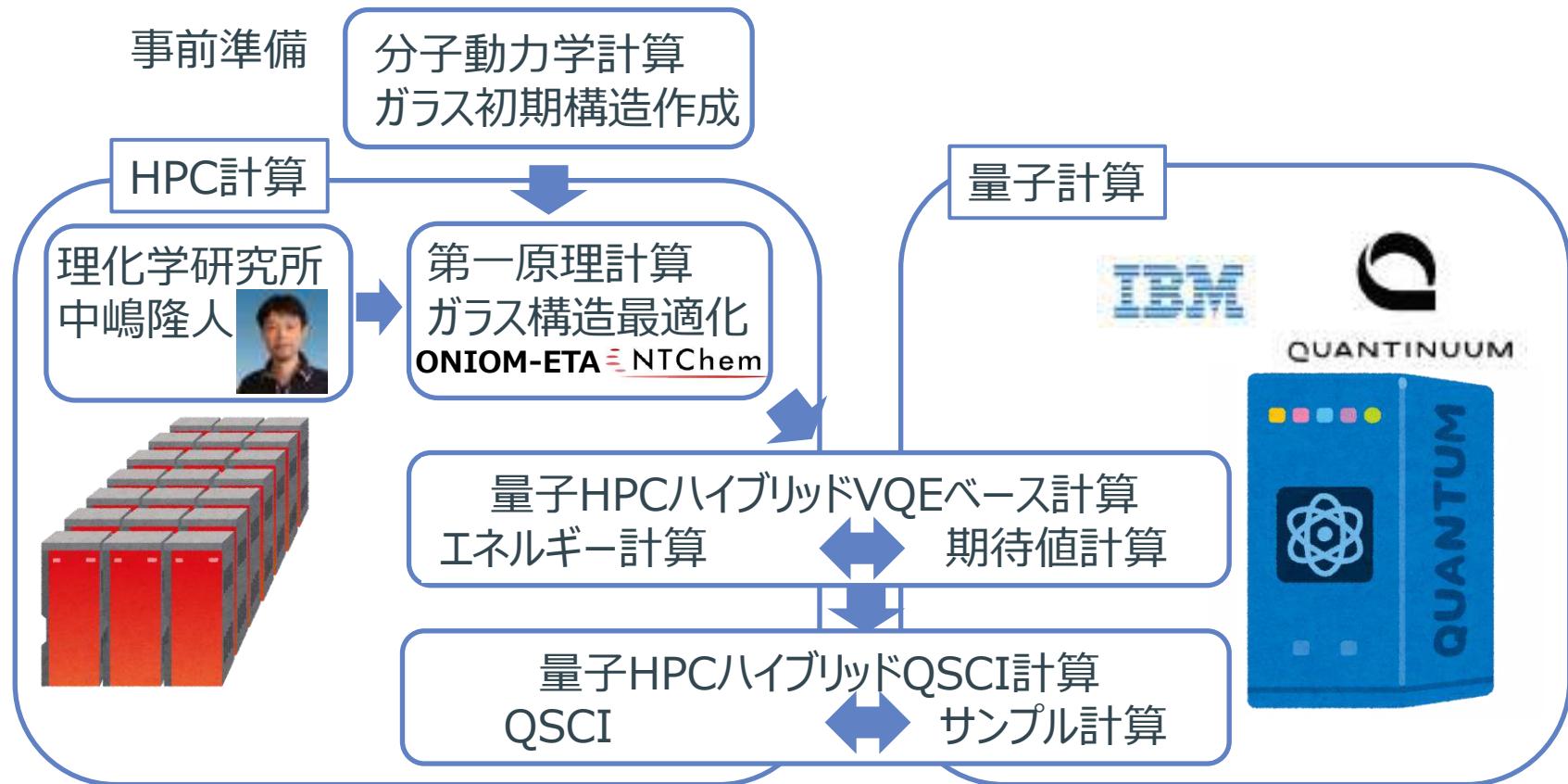
量子・古典計算機

AGC:VQEベース

量子・古典計算機

AGC:QSCI

# テストユーザープログラムの課題：古典・量子連携スキーム



# テストユーザープログラムの課題：準備状況

## 研究課題の進め方



ガラス構造の予備検討：

MDにより $\text{Fe}^{2+}$ を含むガラス構造を作成  
→ 実験とは異なる構造が得られた

適切な初期構造の設定及び密度汎関数理論計算を組み合わせることで実験結果と矛盾しない5,6配位構造の再現に成功

古典的な計算手法による励起状態計算を実行中

