

# 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 穰

AGC株式会社

# AGC株式会社に関して



代表取締役  
社長執行役員・CEO  
**平井 良典**

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

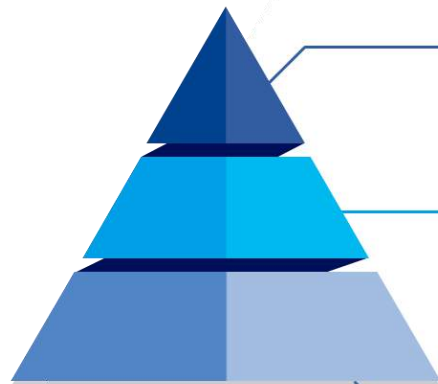
板ガラスの  
国産化を通じて  
社会の発展に貢献したい



創業者 岩崎俊彌

困難は覚悟の上で  
難題に挑む

***“Look Beyond”***



私たちの  
パーパス

私たちの  
価値観

私たちの  
スピリット

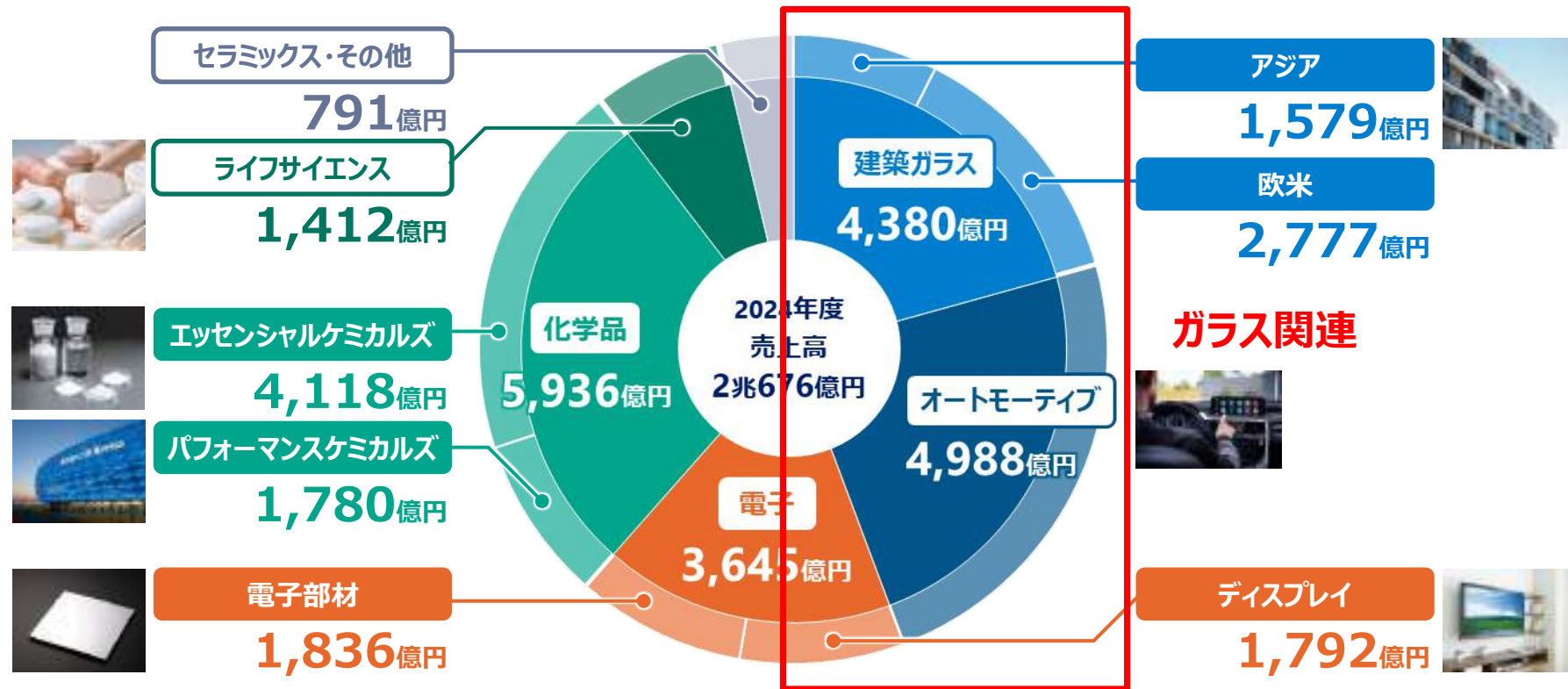
**“AGC、いつも世界の大事な一部”**

～ 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



※各セグメントの売上高は消去前の数字であるため、セグメント売上高の合計は全社売上高とは一致しません。また、サブセグメント売上高は、外部顧客に対する売上高を使用しています。

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：

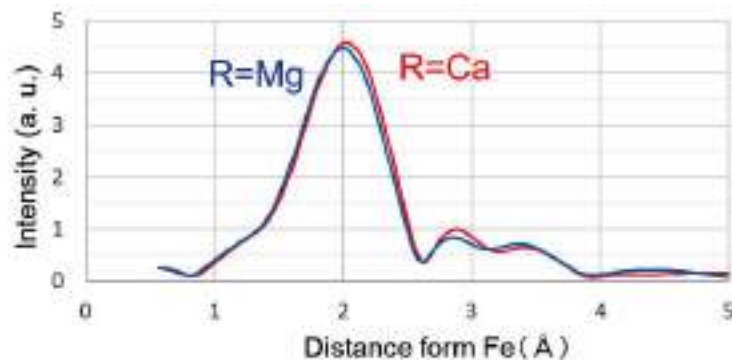
[Na<sub>2</sub>O-RO-SiO<sub>2</sub>ガラス（R= Mg, Ca）中のFe<sup>2+</sup>イオンの構造](#) | [技術開発とイノベーション](#) | AGC

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

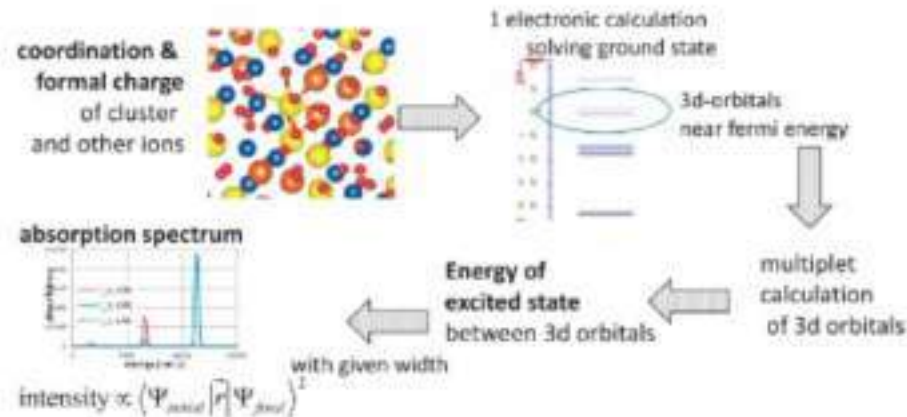
## 実験アプローチ



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

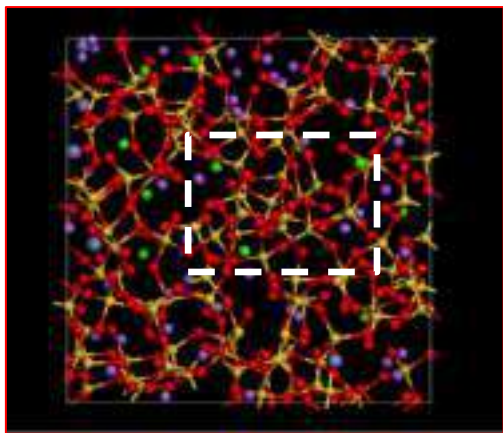
参加機関：AGC株式会社、理研RCCS

ガラスのバルク（数千原子）

モデル化（数百原子）

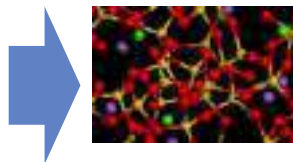
活性部位（～10原子）

MD計算(数千原子)



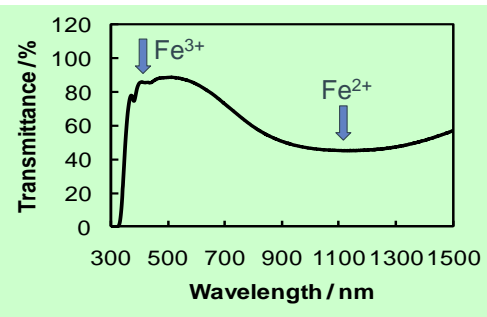
今回は価電子  
励起に絞る

クラスターモデル  
(数百原子)



価電子励起  
(数百原子)

内殻励起  
(数百原子)



古典計算機

AGC: Matlantis MD

古典計算機

理研+AGC : ONIOM-MTA

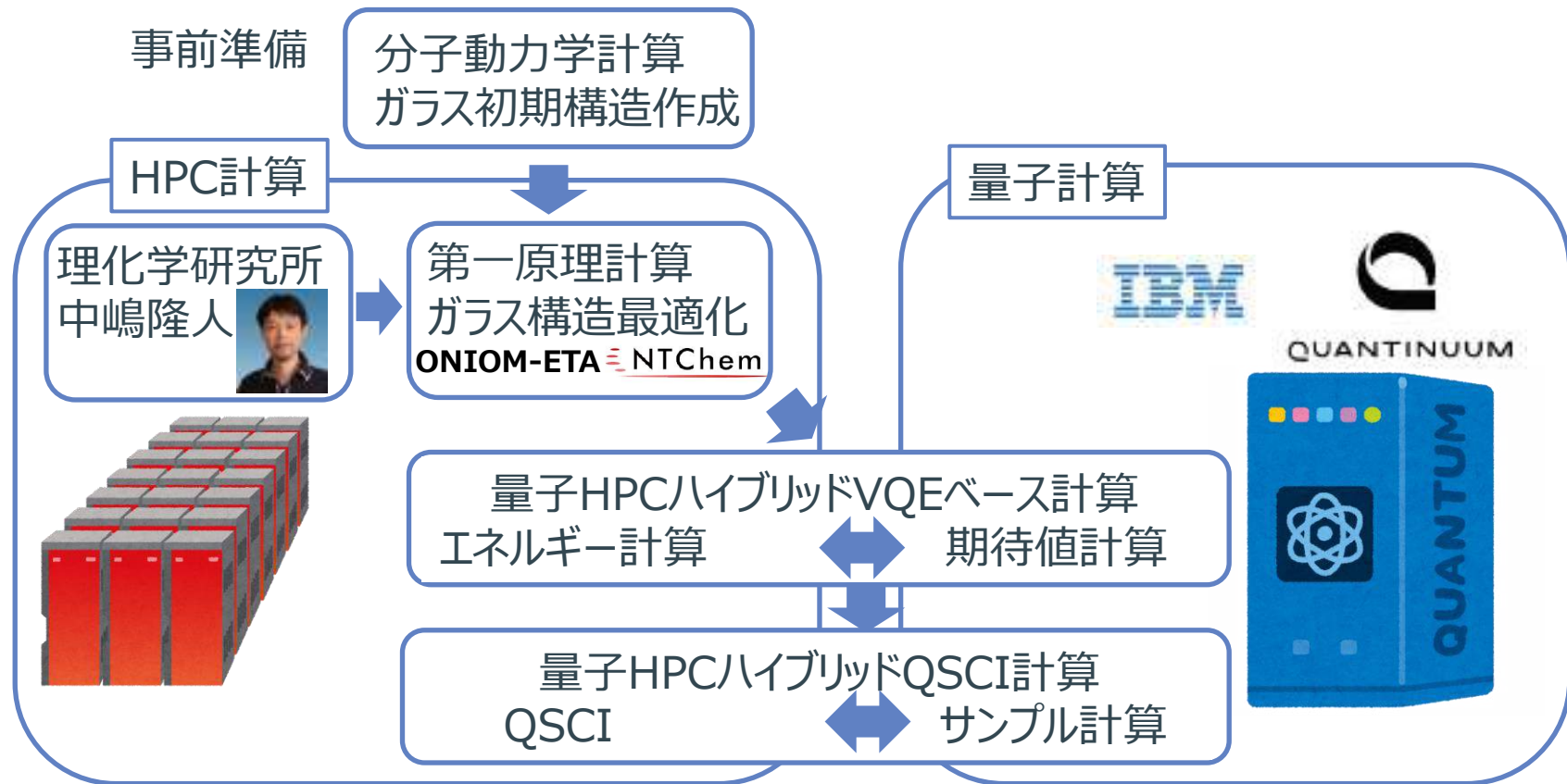
量子・古典計算機

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

2026年1月

ガラスの初期構造準備

ガラスの構造決定

シミュレータ

2026年4月

価電子励起計算  
実機計算(組成①)

実機計算(組成②~)

2026年7月

結果まとめ

2026年10月

成果報告

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

