

研究論文の概要

論文題目： Energy landscape-driven non-equilibrium evolution of inherent structure in disordered material (エネルギーランドスケープ駆動による不規則物質の非平衡な構造発展)

著者： Yue Fan, Takuya Iwashita, & Takeshi Egami

概要： “物”の性質を研究している物性科学の最前線，特にその基礎科学の分野では，物理学や化学，数学や材料工学など幅広い分野の研究者からなる学際研究領域を形成しており国内外で精力的に研究が行われています．その中で，我々の身近に存在する不規則物質である“ガラス”と呼ばれている物質は多くの物性研究者の興味を引きつけており，ガラスに関連する問題は物理学の未解決問題のひとつとして挙げられています．

ガラスとは，液体を急冷することにより過冷却液体を経て，液体のような無秩序な構造を維持したまま固化した状態のことを呼びます．固体ではありますが，構造は液体に似ています．窓ガラスのような酸化物ガラスが我々に馴染みがある代表例であるが，一般的には金属液体や分子性液体など多くの材料がガラスになることが可能であり，物質の状態の一つとして“ガラス”という言葉が使われています．ガラスの特徴としては，ガラスは冷却速度の違いや熱処理などの作成プロセスによって，壊れやすいガラスになったり柔らかいガラスになる性質があり，制御が難しい非平衡材料とも言えます．

実は，液体から過冷却液体を経由してガラスになる冷却過程において，どのように構造が変化しているのか？という単純な疑問に対する明確な答えは明らかになっていませんでした．**本研究では，金属ガラスのモデルを用いた分子動力学シミュレーションと Activation-Relaxation-Technique (ART) と呼ばれる計算手法を用いて，これまでと全く異なる視点から現象論モデルを提案し，冷却過程中の金属液体の複雑な非平衡挙動を定量的に記述することに成功しました。** 図1に示しているように，今回の研究では物質固有のエネルギーに着目しており，このエネルギーの温度依存性や冷却依存性など熱的な非平衡過程を定量的に説明する現象論的数理モデルの構築に成功しました．

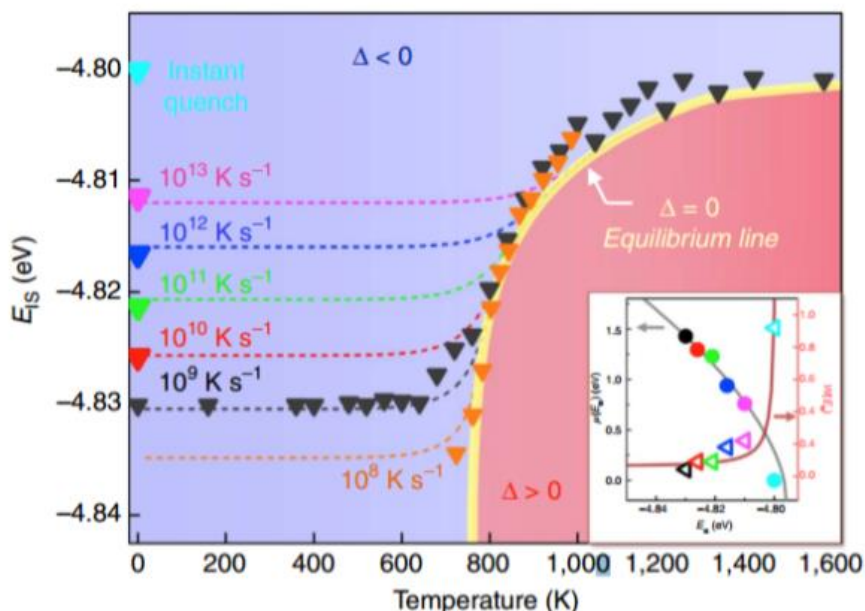
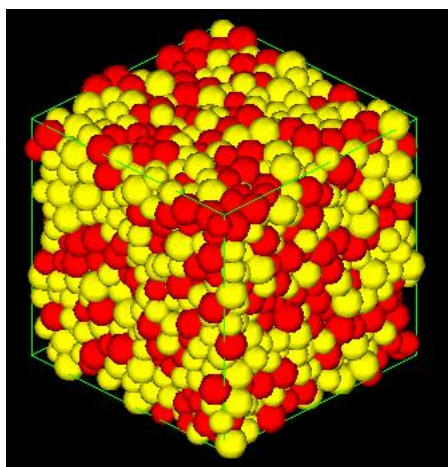


図1 (左)2成分金属ガラスの不規則構造と(右)物質固有のエネルギーの温度依存性と冷却依存性. 点線や線(Equilibrium line)は, ART と呼ばれる計算手法に基づいて提案された現象的数理モデルの計算結果. ▼はシミュレーション結果であり, モデル計算とのよい一致が示されている.

本研究結果は, さまざまなガラス形成物質を微視的な(ミクロな)観点から分類する方法を提供すると共に, ガラス形成物質の制御や産業的応用にとって欠かせない基礎的見地を与えるものであります. 近年, 金属系のガラス, つまり金属ガラスが次世代の構造材料として期待されており, 工学的にも重要な材料分野の発展に大きく寄与すると考えられます. また, ガラス材料を超えて, 未だに理解が不十分である“液体”の物理学解明へとつながると期待されます.

論文掲載ページ

Yue Fan, Takuya Iwashita, Egami Takeshi, Nature Communications **8**, 15417 (2017).
<https://www.nature.com/articles/ncomms15417>