

何が合金をガラスになりやすくしているのか

東京大学 生産技術研究所の田中 肇 教授、フーユアンチャオ 特任研究員の研究グループは、複数の原子種からなる混合系が結晶化しやすいのか、ガラス化しやすいのかを、どのような物理的な因子が支配しているのかについて、分子動力学シミュレーションを用いて研究を行った。

研究グループは、分子動力学シミュレーションを用いて、異なるガラス形成能を持つ3つのモデル金属系、Zr、CuZr、NiAl についてその結晶化、ガラス化について研究を行った。その結果、これらの系の結晶化の駆動力(結晶の自由エネルギーと液体の自由エネルギーの差)には大きな違いはないが、一方で、液体と結晶の界面張力には大きな差があることを見出した。また、これらの液体における原子拡散にも大きな差がないことから、これらの系のガラス形成能の違いは、液体・結晶間の界面張力によって主に支配されていることが明らかとなった。

さらに、界面張力は、液体中に自発的に形成される構造的な秩序とその構造内の原子組成によって決定されていることを見出した。これらの構造的な秩序には、結晶に似た構造を持つ結晶前駆体 1 と結晶の対称性と相いれない正二十面体構造があることが明らかとなった(図 1)。

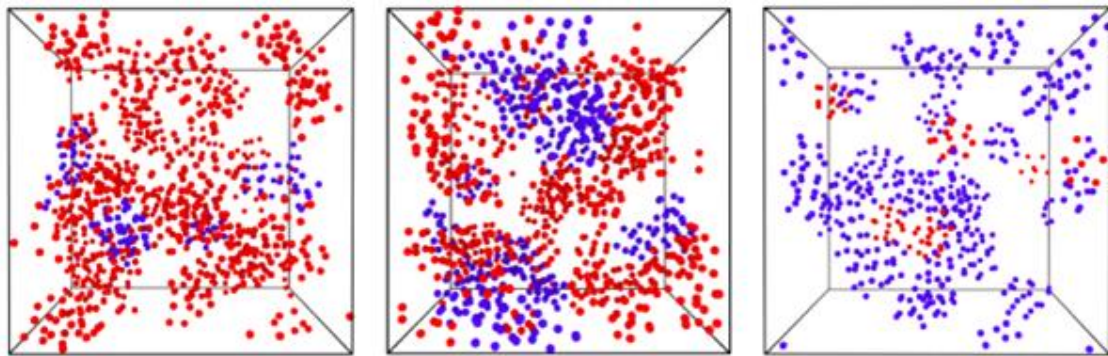


図 1: CuZr(左)、NiAl(中)、Zr(右)の過冷却状態における局所安定構造のスナップショット。正二十面体構造に属する原子は赤色で、結晶前駆体に属する原子は青色で示してある。

液体中に自発的に形成される局所的に安定な構造が、結晶の持つ方位対称性と似ており、さらに、原子組成にも大きな差がない場合、この構造が結晶核形成において結晶化を助ける前駆体として働き、その結果、結晶核形成が容易になるという理屈である。また、界面張力は、結晶の核形成を支配しているだけでなく、結晶成長にも大きな影響を与えることを示した。古典的な結晶成長理論においては、結晶成長速度は界面張力には依存しないと考えられており、この発見は古典モデルに重大な欠陥があり、液体中に形成される局所的な秩序の結晶成長への影響をあらわに考慮する必要があることを強く示唆している。

この発見は、液体中に自発的に形成される自由エネルギーの低い構造のもつ対称性並びに原子組成が、結晶と大きく異なるように設計すれば、結晶化が阻害され容易にガラス化することが可能になることを示唆している。これらの成果は、金属合金のガラス形成能や相変化メモリーのスイッチング速度を、経験に頼ることなく、物理的に制御するための新しい指針を提供するとともに、結晶化という様々な物質に普遍的に見られる現象の基礎的な理解にも大きく貢献するものと期待される。

論文情報

タイトル Physical origin of glass formation from multi-component systems

雑誌 Science Advances(12月11日:第6巻(2020年)eabd2928頁)

DOI: [10.1126/sciadv.abd2928](https://doi.org/10.1126/sciadv.abd2928)

日本語リリース

<http://www.iis.u-tokyo.ac.jp/ja/news/3438/>