ガラス転移の劇的スローダウン：分子シミュレーションによるシリカガラスと金属ガラスを俯瞰的に理解する試み

Slow dynamics of glass-forming liquids: A comprehensive analysis from silica to metallic glasses using molecular dynamics simulations

○ 金 鋼 [1](1. 阪大院基礎工)
○Kang Kim[1] (1.Osaka Univ.)
E-mail: kk@cheng.es.osaka-u.ac.jp

ガラス形成物質は非常に幅広い温度領域でアモルファス構造を保持しながら液体的から固体的な振る舞いまで連続的に示す。乱れの中に隠された秩序を利用し新たな産業基盤へつながる新物質探索・材料設計指針の構築は重要な課題である。ガラスを様々な形態・大きさ・機能をもった工業製品へ成形加工するのに鍵となる物性が流動特性であり、それを特徴付けるのが粘性率や拡散係数といった輸送係数である。したがって、分子スケールから物理化学的な原理に基づいた乱れた系の流動特性制御が工学応用の基盤となる技術となる。一方で、分子が強く凝集・相関されることから、ガラス形成物質では分子スケールの運動よりはるかに遅いダイナミクスが引き起こされる。特に、構成要素の物質・化学組成・構造のわずかな違いが多様な物性を生み出す一方で、物質の詳細に依らない普遍的な性質も存在しており、両者を同時に考慮することは極めて難しい。

講演者はこれまで、液体を過冷却しガラス化する過程に対して分子シミュレーションを用いた研究をおこなってきた。従来のガラスに対する計算科学的研究では、対象となる物質が変わればそれに応じて個別各論的にシミュレーションモデルを精緻化する研究がされてきた。逆にガラス転移温度や輸送係数を制御できるシミュレーションモデルの開発に焦点が当てられてこなかった。講演者は、このことがガラスの流動特性の分子論的な根本的な理解の遅れをもたらしていると考え、物質によって個別論的にモデルを導入するのではなく、シリカガラス型と金属ガラス型と異なるガラスの流動特性を連続的に橋渡しできる統一的なモデルを開発している。モデル構築における本質的なアイデアは以下のようになる。2 成分短距離 Lennard-Jones 系において異成分 (シリカガラスの Si-O 相互作用に対応) の引力相互作用を強くすることで、第一原理電子状態計算に基づいたシミュレーションモデルと同様の状態密度を再現するネットワーク形成ガラスが得られることが示されている。さらにこのモデルを一般化し Si-O 相互作用を人工的に逓減させれば、等方的液体が示すパッキング型のガラスへ変化させることの可能なシミュレーションモデルができるはずである [1]。つまり、シリカガラスで特徴的なネットワーク出現を Si-O 間ポテンシャルを変化させることで制御するのである。本モデルはただ 1 つのパラメータのみでシリカガラス型と金属ガラス型を連続的に橋渡しできることから、ガラス流動特性の温度依存性を決める分子論的な因子を突き止めることに貢献できると考えている。また、分子レベルの構造およびダイナミクスのデータを網羅的に取得できることから、各論的なシミュレーションや実験によって得られた物性データを俯瞰することが可能になると考えている。さらに実験的傍証からフラジリティと密接であると考えられてきた比熱のブロードなピーク、状態密度に見られるボソンピーク、Stokes-Einstein 則の破れなど、ガラスに特有な物性の本質的な解明を目指している。

[1] Ozawa, M., Kim K., and Miyazaki K., “Tuning Pairwise Potential Can Control the Fragility of Glass-Forming Liquids: From Tetrahedral Network to Isotropic Soft Sphere Models”, J. Stat. Mech., 074002 (2016). [Special Issue on Structure in Glassy and Jammed Systems]

© 2018年 応用物理学会