

構造不規則系のレオロジー：アナンケオン動力学の確立



領域代表者	大分大学・理工学部・准教授 岩下 拓哉（いわした たくや）	研究者番号:30789508
研究領域情報	領域番号：22B206 キーワード：レオロジー、構造不規則、液体、ガラス	研究期間：2022年度～2024年度

なぜこの研究を行おうと思ったのか（研究の背景・目的）

研究の全体像

素材産業への新材料発見や既存材料の高機能化といった要求はより先鋭化しており、既存の材料にはない複雑な構造を持つ材料の開発が求められている。液体やガラスを代表とする原子・分子が不規則に並んだ『構造不規則系』材料の利用は、現代における新機能材開発戦略の一つであり、図1に示すように幅広いスケールで多岐にわたる不規則系材料が存在する。これらの材料の高性能・高機能化・制御を実現するために、20世紀初頭に完成した固体物理学にはない研究領域の創出が求められている。すなわち、『構造不規則系の科学』である。不規則系は結晶構造等の確固とした構造を持たない。そのため、外力に対して多彩な力学応答を見せる。構造不規則系の科学は、不規則構造であることに起因する柔らかさや流れ易さといった特異な力学応答、いわゆる、『レオロジー特性』を明らかとし、その制御を許す学術である。液体状態とガラス状態の固化現象であるガラス転移の謎をはじめとしてこの研究分野は現代物理学・材料科学のホットピックであり、関連研究がNature誌、Science誌に多く掲載され続けている一方で、構造不規則系の科学には未だ社会的要請に応えるほどの十分な理論が整備できておらず、学術体系として確立していない、という現状がある。

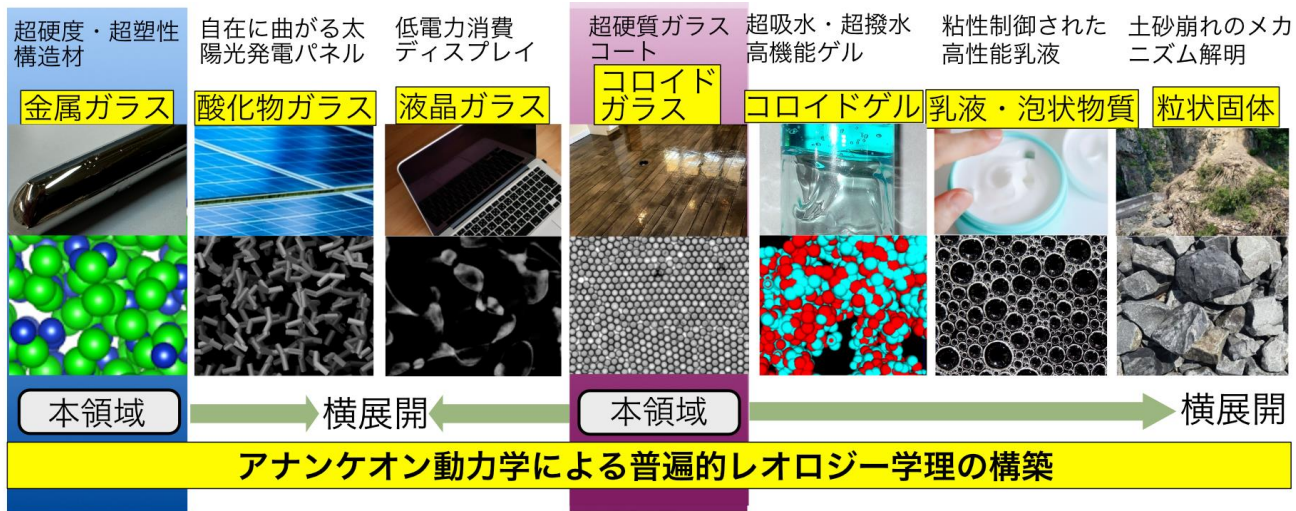


図1 構造不規則系の科学は幅広いスケールの様々な物質で重要となる。

問題の所在は、その構造の不規則性にある。結晶中の格子欠陥などの構造不整が容易に判別できないことから、レオロジー特性発現において何が重要な役割を演じるものか明確に特定できていない。この理由として、既存の構造不規則系に関する多くの研究が、固体物理学で培われた考え方である「物質の構造がその物性の予測を可能にする」というパラダイムに立脚したことが問題であった、と我々は考えた。従来の不規則構造のいわば静的な安定構造を精査するアプローチ自体は、熱力学的物性や振動物性、電気的物性の理解や予測を可能にする点で大変有用である。個々の材料特性の定量的同定を可能とすることから、きわめて実用的である。しかしながら、スナップショットとしての静的な構造をターゲットとすることは、構造不規則系の動的物性、すなわちレオロジー特性の予測を実現することはできず、構造不規則系の本質的理解や基礎研究としての普遍的な記述には直結しえない。『どのように乱れた構造が動くのか？』という問いへの解無くしては、不規則構造内部の動的挙動から発現されるレオロジー特性は予測できない。構造不規則性材料の力学特性を真に理解するためには、「静的→動的」という発想の転換が求められている。

領域代表者は、テネシー大学とオークリッジ研究所との共同研究で、液体金属の変形を支配する動的な素過程の最小単位が原子間結合の生成消滅に基づく『動的素励起(アナンケオン)』にあると提唱した(図2)。粒子間相互作用の生成消滅という観点からすれば、その素励起は、特定の材料、特定の空間スケールに依らない、一般的かつ汎用的な変形機構を記述する鍵となり得る。そこから、従来の「不規則構造の静的配置に立脚した物性予測」から「不規則構造の動的挙動に立脚したレオロジー特性予測」へと構造不規則性の科学パラダイムを転換することで、構造不規則系を支配する力学の統一的理解へと向けた学術的変革をもたらすことができる、と構想するに至った。

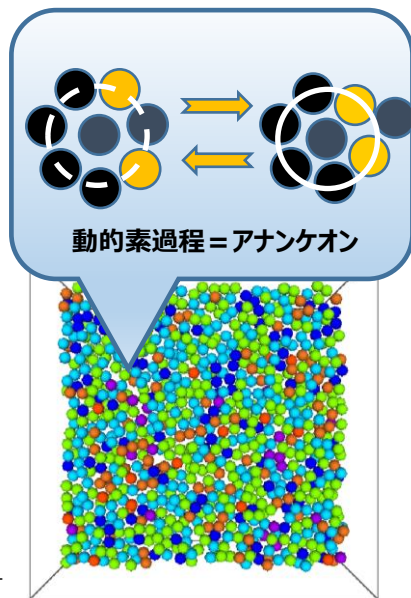


図2 アナンケオンの概念図

この研究によって何をどこまで明らかにしようとしているのか

本領域研究では、構造不規則系の代表である『金属ガラス』と『コロイド分散系』の巨視的レオロジー特性を統一的描像で記述可能な、動的素励起(アナンケオン)の時空間運動に関する学理構築を目的とする。未だに確立されていないアナンケオンという概念をハードマターからソフトマターまで一般化することを通じて、構造不規則系のメインストリームへと押し上げることを目指す。

●荷電コロイド分散系のレオロジーの解明

荷電コロイド微粒子が溶媒中に分散した荷電コロイド分散系は、多彩な外場応答性をもつ機能性流体として知られている。高機能制御を実現するためには、流れ易さを特徴づける粘度の発現機構を明らかにする必要がある。少量の塩添加で、その粘度が4桁以上も劇的に低下する電気粘性レオロジーは、流れ易さと構造変化を結びつける絶好の特異現象であるが、レオロジー特性の動的構造変化の理解は十分ではない。本研究では、計算機シミュレーション、レオロジー測定、小角X線・光散乱実験を融合し、流れ場中の荷電コロイド分散系の動的構造変化の素過程、すなわち、動的素励起(アナンケオン)を特定かつ発生条件を定量化し、ミクロな動的素励起からマクロな電気粘性レオロジー特性の接続原理の解明を目指す。

●金属ガラスのレオロジーの解明

金属ガラスとは、金属元素が規則正しく整列していない金属材料のことを指し、その原子構造のランダムさから結晶性金属材料にはない新奇な材料機能を発現することが知られている。金属ガラスの産業利用を拡大するには、容易に割れないよう、金属のように伸びる性能(塑性性能)を付加することが必要不可欠であるが、金属ガラスの塑性性能発現機構は完全に理解されていない状況である。力を受けて変形する中で、原子レベルの不可逆的な構造変化が集団的に励起されて互いに影響を及ぼし合うことがミクロレベルでの塑性性能に繋がると考えられているが、その原子レベルの励起子の素性は明らかになっていない。本研究では、この励起子をアナンケオンと呼称し、その正体を計算機シミュレーション、巨大ひずみ加工、変形下の金属ガラスの構造解析を用いて解明することを目指す。

波及効果

本領域での研究対象である金属ガラス、コロイド分散系からの数多くの構造不規則系(酸化物ガラス、ポリマーガラス、コロイドガラス、粒状固体等)への展開を通じた、異分野間の融合研究の創発に疑いの余地はない。アナンケオンという概念が、粒子間結合の生成・消滅運動という幾何学的数学に基づいているためである。こうした構造不規則系は、材料科学から物理・化学・生物分野、ジオサイエンス、医学から薬学に至る幅広い分野の研究対象となっていることから、レオロジー研究のブレイクスルーとしての本研究領域の推進がもたらす波及効果は絶大である。

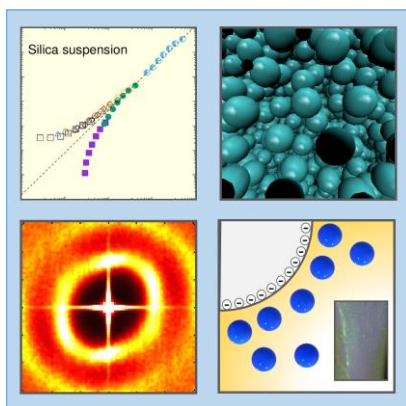


図3 荷電コロイド分散系の研究

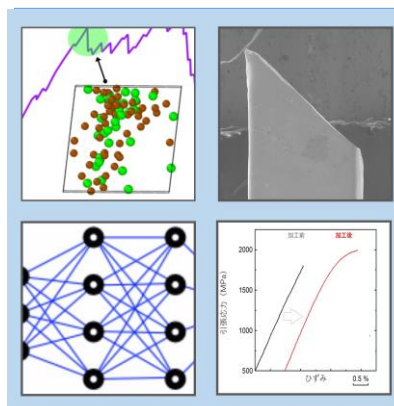


図4 金属ガラスの研究