

1. 研究領域名：金属ガラスの材料科学
2. 研究期間：平成15年度～平成19年度
3. 領域代表者：井上 明久（東北大学・総長）

#### 4. 領域代表者からの報告

##### (1) 研究領域の目的及び意義

90年代初めに東北大学金属材料研究所井上らが見出した金属成分のみ、あるいは金属成分が主成分の金属ガラスは、従来型アモルファス金属と異なり、比較的遅い冷却速度でもガラス化し、結晶化し難くガラス転移を示し過冷却液体状態を実現する。本研究領域では、金属ガラスの究極の相安定化機構の解明と金属ガラスの変形・破壊メカニクスの解明という重点的連携研究課題を設定し、様々な分野の研究者を迎え入れ、新金属材料としての将来展開のため、基礎知識を集約・体系化し、「金属ガラスの材料科学」という新しい学問領域の確立を目指してきた。この目的を達成するために、5つの研究項目を設定し、20の計画研究と中間評価を挟んで延べ47の公募研究を組織した。研究項目 A01 では新規材料としての金属ガラスの組成・プロセス最適化のための知的基盤を確立すること、研究項目 A02 では金属ガラスの原子配列と電子構造を解析し相安定化機構を解明すること、研究項目 A03 では構成要素(電子/原子/短距離クラスター構造) 相互作用場の階層性モデルと構造変形・相安定性・ナノ組織形成を予測すること、研究項目 A04 では金属ガラスの変形と破壊のメカニクスを統一的に解明すること、研究項目 A05 では金属ガラスの相分離・結晶化・準結晶化によるナノ組織形成を探索し、相変態の立場から金属ガラス安定化機構を解明することを目的に研究を行った。

##### (2) 研究成果の概要

代表的な金属ガラスの1つである Zr 基金属ガラスを共通試料として、放射光高エネルギー X線回折、中性子回折、高分解能電顕観察、放射光高分解能光電子分光、分子動力学シミュレーション等、各評価技術の専門家が共同し、1万個近い原子を含む立体原子構造モデルを構築した。その結果、主に金属結合で構成される金属ガラスでは、20面体的な原子が密に詰まったクラスターが特徴的に存在することを明らかにした。このクラスター構造の密度が高いほど、ガラス構造が安定化されることを証明した。このようなガラス構造の安定化機構が明らかになると共に、合金設計、製造技術が改善され 30mm 直径の金属ガラスの作製が実現した。また、実験的に得られた金属ガラスの構造モデルを参考に、金属ガラスの変形・破壊のシミュレーションも着実に進展し、金属ガラスの弾性変形に対する抵抗は 20 面体的な原子配列を示すクラスター構造の密度と比例関係にあることや、金属ガラスの塑性変形におけるせん断帯の生成と発展挙動をシミュレーションにより明らかにした。これらの研究成果は、733 編の原著論文、265 件の国際会議での招待講演、10 回の本研究領域が主催あるいは共催した国際会議・シンポジウムなどを通して世界に発信され、この分野の発展に大きく寄与することができた。材料分野と機械分野の研究者が連携して取り組んだ今回の研究領域では、これまでの結晶材料にはない新たな分野であるランダム構造を基本とする金属材料の構造と変形のメカニクスの学理構築に、大きな第一歩を踏み出すこととなった。

#### 5. 審査部会における所見

##### A (研究領域の設定目的に照らして、十分な成果があった)

本研究領域により、金属ガラスに関する基礎・応用研究が大きく発展したと評価する。組織的な研究と領域代表者のリーダーシップがよく機能し、金属ガラスの特徴的局所構造が 20 面体クラスターであることを解明するなど、金属ガラスの相安定化機構及び変形・破壊メカニクスの解明について、十分な成果が上げられている。また、国際シンポジウムを多数回開催する等、積極的な公表・普及を行っており、若手育成についても十分に配慮されている。さらに、研究成果が既に工業化され、国際標準化への取り組みがなされる等、応用・実用面での成果も上げられている。したがって、金属ガラスに関する研究を総合的に進めるといふ目的は十分に達成されたと判断する。今後は、基礎的・学理的な面でのさらなる進展に期待する。