

シンポジウム(口頭講演) | シンポジウム：不規則・不均質材料の力学における材料横断的融合とその最前線

■ 2025年9月10日(水) 9:30 ~ 12:00 | 会場 N103 (共通講義棟北)

**[10a-N103-1~6] 不規則・不均質材料の力学における材料横断的融合とその最前線**

加藤 和明(京都工繊大)

9:30 ~ 9:35

[10a-N103-1] オープニング

○篠崎 健二<sup>1</sup> (1.産総研)

---

9:35 ~ 10:05

[10a-N103-2] アモルファス固体に潜む階層的構造と力学応答の相関

○南谷 英美<sup>1</sup> (1.阪大産研)

---

10:05 ~ 10:35

[10a-N103-3] シリカガラスのボゾンピークとジャミング転移の物理

○水野 英如<sup>1</sup>、南谷 英美<sup>2</sup> (1.東大院総合文化、2.阪大産研)

---

10:45 ~ 11:15

[10a-N103-4] 金属ガラスの変形素子としてのアナンケオンの特定

○椎原 良典<sup>1</sup> (1.豊田工大)

---

11:15 ~ 11:45

[10a-N103-5] 液体の粘度と局所構造緩和

○岩下 拓哉<sup>1</sup> (1.大分大理工)

---

11:45 ~ 12:00

[10a-N103-6] 力学的不均質性を利用したガラスの強靱化指針

○篠崎 健二<sup>1</sup> (1.産総研)

# アモルファス固体に潜む階層的構造と力学応答の相関

## Hidden hierarchical structures in amorphous solids correlating with mechanical response

阪大産研 南谷英美

SANKEN, Univ. Osaka, Emi Minamitani

E-mail: [eminamitani@sanken.osaka-u.ac.jp](mailto:eminamitani@sanken.osaka-u.ac.jp)

アモルファス材料において、原子レベルの構造が力学特性をどのように支配するかを理解することは、固体物理学における本質的な課題である。ひずみを印加した場合、アモルファス材料はひずみに沿った均一なアフィン変形と、空間的に不均一な非アフィン変形の両方を示し、それぞれが Born 項（アフィン項）および非アフィン項として弾性率に寄与する。弾性率は、Born 項から非アフィン項を引いたものとして定義されるため、「ソフトな」領域とは Born 項が小さい、あるいは非アフィン変形が大きい局所構造であると考えられる。しかし、この2つの意味でソフトな構造が共通しているのか、それとも大きな違いを有するのかは、いまだ十分に解明されていない。特に、共有結合性アモルファス材料であるシリコンのような系では、中距離秩序（MRO）がネットワーク構造において重要な役割を果たすため、状況はより複雑である。

本研究では、分子動力学シミュレーションとパーシステントホモロジー解析[1]を組み合わせ、上記の課題に取り組んだ。パーシステントホモロジー解析の結果、Born 項が小さい局所構造は短距離の特徴によって支配される一方、非アフィン変形が大きい局所構造は、短距離での乱れが中距離秩序の中に埋め込まれた階層的構造を有することが明らかとなった。さらに、これらの階層的構造は、低エネルギーの局在振動励起とも強く関連していた[2]。

以上の結果は、共有結合性アモルファス材料の力学応答および動的特性が中距離秩序と本質的に結びついていることを示しており、これらの材料の特性を理解し、制御するための新たな枠組みを提供するものである。

本研究は、中村壮伸（産総研）、大林一平（岡山大学）、水野英如（東京大学）との共同研究成果である。

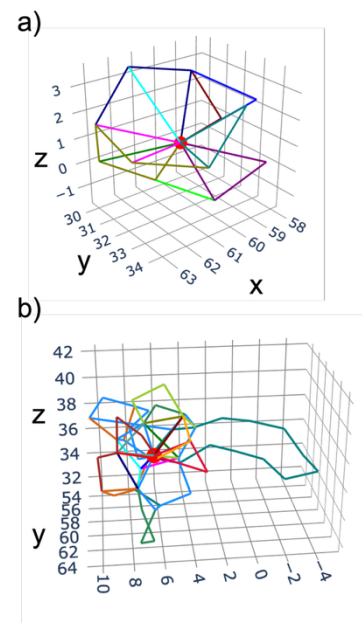


図1 a) Born 項が大きい、  
b) 非アフィン変形が大きい  
局所構造

### 参考文献

- [1] H. Edelsbrunner and J. Harer, *Computational Topology : An Introduction* (American Mathematical Society, Providence, R.I., 2010).
- [2] E. Minamitani, T. Nakamura, I. Obayashi, and H. Mizuno, <http://arxiv.org/abs/2407.17707>.

## シリカガラスのボゾンピークとジャミング転移の物理

### Boson peak in silica glass and physics of jamming transition

○東大院総合文化<sup>1</sup>, 阪大産研<sup>2</sup>, ○水野 英如<sup>1</sup>, 南谷 英美<sup>2</sup>

Univ. of Tokyo<sup>1</sup>, Osaka Univ.<sup>2</sup>, ○Hideyuki Mizuno<sup>1</sup>, Emi Minamitani<sup>2</sup>

E-mail: hideyuki.mizuno@phys.c.u-tokyo.ac.jp

不規則な固体であるガラスには、規則的な結晶で観察されるフォノン励起に加えて、局在振動などの非フォノン励起が観測される。フォノンに加えて余剰に存在する振動励起現象はボゾンピークと呼ばれ、さまざまな種類のガラスにおいて普遍的に観測されてきた[1]。例えば、共有結合性ガラスでは、中性子散乱実験や非弾性 X 線散乱実験が盛んに行われ、ボゾンピークが観測されてきた。ボゾンピークは、余剰比熱、低熱伝導率、非アフィン弾性、局所塑性など、熱物性から力学物性まで多岐にわたるガラス特有の性質と深く関連しており、ガラスにおいてボゾンピークの理解は本質的に重要となる。

これまでに、ガラスのボゾンピークを理解するために、さまざまな理論やアイデアが提案されてきた。その中でも代表的なものの一つがイソスタティック性 (isostaticity) である[2]。これは、ガラスを構成する原子・分子の自由度に対して、それを制約する拘束数をカウントし、剛性や振動状態を説明する考え方である。イソスタティック性はネットワークモデルとの相性が良いため、共有結合性ガラスを超えて、粉体のジャミング転移の物理へと応用された[3]。これにより、剛性パーコレーション理論や不規則系の限界安定性といった新しい理論や概念が創出されてきた。

本研究は、ジャミング転移の物理において発展してきたイソスタティック性や、その過程で提案された限界安定性の概念を用いて、共有結合性ガラスの理解を深めることを目的とする。特に、ガラスの代表例であるシリカガラスに焦点を当て、イソスタティック性と限界安定性の二つの概念を用いて理解することを試みる[4]。また、散乱実験で観測される動的構造因子において、これらの概念がどのように反映され、観測可能であるかを明らかにする。

#### 参考文献

- [1] T. Nakayama, “Boson peak and terahertz frequency dynamics of vitreous silica”, *Reports on Progress in Physics* **65**, 1195 (2002).
- [2] M. F. Thorpe, “Continuous deformations in random networks”, *Journal of Non-Crystalline Solids* **57**, 355 (1983).
- [3] M. Wyart, “On the rigidity of amorphous solids”, *Annales De Physique* **30**, 1 (2005).
- [4] H. Mizuno and E. Minamitani, “Boson peak in silica glass: Isostaticity and marginal stability”, in preparation.

## 金属ガラスの変形素子としてのアナンケオンの特定

### Identification of Anancheons as Deformation Units in Metallic Glasses

豊田工業大学, <sup>○</sup>椎原 良典

Toyota Technological Institute

E-mail: shiihara@toyota-ti.ac.jp

金属ガラスは長距離の結晶秩序を欠くため、その変形メカニズムの理解は難しい。特に、転位や粒界が存在しないため、塑性変形を担う素子を特定することが困難である。著者を含む研究グループはこの素子をアナンケオンと呼称し、分子動力学によるその解明を目指した。研究の独自性は、アナンケオンを原子の協調運動として捉えて、その抽出を可能とする「凍結原子解析」という手法を提案したところにある[1]。

具体的には、CuZr 金属ガラスにせん断を加えた際に、局所的な塑性変形イベントを引き起こす原子群を原子レベルで特定することを試みた。従来の手法では、非アファイン変位 ( $D^2_{\min}$ ) や局所的な応力低下などを基準に変形を担う素子、いわゆる Shear Transformation Zone (STZ) を定義してきた。しかし、これらの方法では変形を引き起こす原子とそれに追従する原子とを区別する閾値が必要であり、原子群を一義的に決定できない。凍結原子解析では、イベントの直前に 1 個の原子を凍結し、そのことで系全体の協調運動がどの程度妨げられるかを観察する。凍結によってイベントが抑制される場合、その原子は変形を引き起こす変形素子、アナンケオンに属するとみなす。この操作を系に存在する全原子に適用することである塑性変形イベントを引き起こす素子、アナンケオンを特定できる。

凍結原子解析を 10° K/s で急冷された Cu<sub>50</sub>Zr<sub>50</sub>金属ガラス試料に適用した。その結果、変形イベントはおおよそ 40 個程度の原子からなる小さな原子群によって協調的に引き起こされることが明らかとなった。注目すべき点として、これらの原子は、ボロノイ体積、面数、局所弾性といった一般的な構造指標からは他の原子と区別できない。この結果は、変形が「ソフトスポット」と呼ばれる特徴的な構造部位で優先的に生じるという広く受け入れられてきた仮説に疑義を呈する。また、アナンケオンが示す協調的運動がトリガーとなってその周囲に変形を伝播させ、別のアナンケオンを励起することがわかった。この描像に基づく STZ の定義は、静的な構造ではなくアナンケオン自体の協調性、また、アナンケオン同士の動的な協調性を重視する点で新規なものであると言える。

本研究の結果は、金属ガラスの塑性変形が既存の構造欠陥によってではなく、自発的に形成される協調的な原子群、アナンケオンによって担われることを示唆するものである。本研究は不規則構造における変形素子の同定に物理的に裏付けられた枠組みを提供し、より靱性に優れた金属ガラスの設計に寄与する可能性がある。

[1] Y. Shiihara, T. Iwashita, N. Adachi, Y. Todaka, and T. Egami, arXiv preprint arXiv:2503.14903 (2025).

## 液体の粘度と局所構造緩和

### Viscosity and Local Structural Relaxation in Liquids

大分大理工 岩下 拓哉

Oita Univ.

E-mail: tiwashita@oita-u.ac.jp

液体はその流動性により、外部からの力に応じて容易に形を変えることができる。液体の流れる振る舞いはしばしば粘度によって特徴づけられるが、その微視的起源は未だ明確には理解されていない。単純液体の代表である液体金属に関する分子動力学計算を用いた先行研究では、高温領域において、原子間結合の生成および消滅によって定義される素過程が、マクスウェル緩和時間、すなわち粘度を高周波せん断弾性率で割った量を決定することが示された [1]。これは応力緩和過程が結合ダイナミクスと密接な関係にあることを示唆している。ガラスにおける力学変形も、こうした素過程の積み重ねとして捉えることが可能であり、その基本的性質を明らかにすることは、構造不規則系の構造緩和やレオロジー特性の理解において重要な意義を持つ。

本講演では、この概念をより複雑な分子性液体、つまり複数の原子から構成される分子が構成単位となる液体へと拡張し、シリカ、水、シリコン、イオン液体といった系を対象として、単純液体と分子性液体の間に見られる共通性および相違点を議論する。

[1] T. Iwashita, D.M. Nicholson, T. Egami, "Elementary excitations and crossover phenomenon in liquids", Physical Review Letters 110 205504 (2013).

## 力学的不均質性を利用したガラスの強靱化指針

## Design Strategy for Toughening Glass via Mechanical Heterogeneity

産総研, ○ 篠崎 健二

AIST

E-mail: k-shinozaki@aist.go.jp

ガラスは透明性や耐薬品性などに優れる一方、本質的に脆く、破損が問題となる。理論的には表面にキズのない理想的なシリカガラスの破壊強度は約 20 GPa であり非常に高強度であるが、現実のガラス製品は微小な表面キズへの応力集中のため、実用的な強度はこれより 2~3 桁も低くなる。

異相分散や結晶化を利用し、板状結晶や針状結晶、繊維状フィラーを分散させ、き裂を架橋することでその開口を抑制するき裂後方へのアプローチも知られている。しかし、実用的な破壊靱性の改善には多量の分散が必要となり、透明性や鏡面研磨加工が難しいなど成形加工性の低下などももたらすためトレードオフである。有力な用途も存在するが、微小サイズ・微量の添加で破壊靱性向上が実現すれば応用はより広がるだろう。我々はガラスの脆さを克服するため、き裂進展を防ぐ従来の方法ではなく、き裂前方に作用する新たな戦略として、力学的に異なる性質をもつナノ構造をガラス中に分散させることで、破壊靱性向上を図ってきた<sup>1-3)</sup>。

ガラス中に力学特性の異なるガラス相や金属ナノ粒子を 1 vol%以下の微量で添加することで、破壊靱性が従来比で最大 3 倍に向上し、き裂進展も抑制されることが確認された(図 1)<sup>1)</sup>。粒子の塑性変形によってき裂先端の応力集中が緩和されるためと考えられる。また、粒径依存性も顕著であり、ニッケル粒子では 100 nm 前後が最適であることが分かった。粒径が大きすぎるとき裂と相互作用しにくく、小さすぎると塑性が発現しにくくなる。適度なサイズ・物性の異相が、き裂先端での塑性散逸の発現を促し、従来の脆性材料にはない性質を引き出す。

ガラス材料の長年の課題である脆さの問題に対し、力学的に異なる物性のナノ構造を導入するアプローチを実施し、微量の金属ナノ粒子添加など新たなガラス材料設計の可能性を提示した。詳細な機構解析や観察、シミュレーションなど基礎的理解を深化したい。

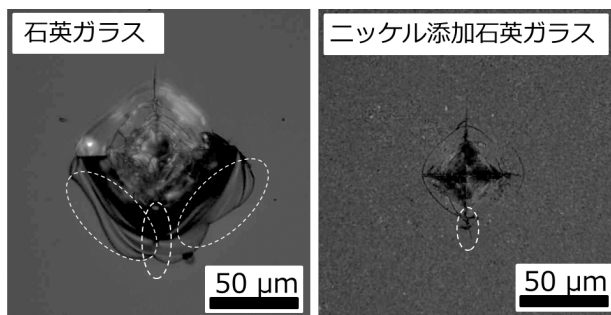


図 2 無添加及びニッケルナノ粒子を微量添加した石英ガラスのビッカース圧痕とその周辺のき裂

1) L. Liu, K. Shinozaki, J. Alloys Compd., 940, 168874 (2023). 2) L. Liu, K. Shinozaki, Mater. Sci. Eng. A, 817, 141372 (2021). 3) 篠崎健二、赤井智子、「ガラスおよびその製造方法」、特許 7389508