

## 不規則系物質科学における今後 10 年の動向

### Development of Disordered Materials Science in the Coming Decade

不規則系物質先端科学研究会

Disordered Material Advanced Sciences Research Group

乾 雅祝, 広島大学

小原真司, 高輝度光科学研究センター

Masanori Inui, Hiroshima University

Shinji Kohara, JASRI

不規則系物質科学の今後十年の動向を考える上で留意しなければならないことは、これはどの分野にも言えることかも知れないが、研究者を駆り立てる要素に学術的興味と科学技術的興味があることである。これらは相互に絡み合っているとはいえ、方向性は微妙に異なっていると思われる。さらには得られた成果が我々の生活を豊かにするような貢献も必要である。これは最終的には産業界へ貢献することを意味している。本稿ではこのようなことを念頭に置きつつ、不規則系物質科学の近い将来を展望する。

結晶を中心とする固体物理学と物質科学は近年ますます盛んである。超伝導や磁性体など新しい物質の創成と理論的研究の進展は著しい。一方、同じ固体でも不規則系物質に関しては、数十年にわたる研究により多くのことが解明されたが、それでもまだガラス構造やガラス転移の本質、またこれらがどのように関連しているかの理解さえ共通の認識に至っていない。ガラスの中距離構造や動的構造因子および振動状態密度に共通に現れるボゾンピークに関しても、これまで数多くの理論的、実験的研究が報告され、諸説入り乱れている状態である。このように学術的な興味からガラス構造、ガラス転移を理解したいという動機からは、ガラス構造およびその非平衡状態に対して、ミクロからマクロにわたる構造およびダイナミクスの時間・空間スケールの情報をどのようにして収集していくかが中心的な課題となる。20 世紀のほとんどの期間、原子スケールの静的・動的構造研究といえば中性子散乱を利用した測定が必要不可欠と考えられていた。しかし放射光科学の発展により、1990 年代後半から高輝度高エネルギー X 線回折を用いた回折実験および高輝度 X 線を用いた高分解能非弾性散乱実験が可能になり、中性子散乱を利用した測定と相補的に利用されるようになった。

冒頭でも述べた産業界へ貢献について考えると、不規則系物質分野においても新しい物質の創製とその基礎的・応用的研究は活気に溢れている。最近では結晶-アモルファス相変化を利用した高密度記憶素子や様々な機能を有する金属ガラスの開発が盛んである。放射光科学がこれらの研究をサポートする事柄の中で、不規則系の構造・ダイナミクスの研究は古くて新しい挑戦的な課題である。20 年前、McGreevey らにより提案された逆モンテカルロ (RMC) 法は、今では X 線散乱、中性子散乱から得られる静的構造因子および X 線吸収微細構造分光 (EXAFS) 法との組み合わせにより、より信頼性の高い三次元原子配置を導出できる手法になっている。また RMC 法をさ

らに発展させ、実験データを再現するように経験的ポテンシャルを修正しながらシミュレーションを行うことにより、液体や非晶質の物性を三次元原子配置に加えて原子間相互作用のレベルから解明できるようになってきた。しかしながら機能性材料の開発という観点から、今後はさらに複雑な系の非晶質物質が創製されるのは間違いなく、元素選択性のない通常の回折実験および短範囲構造しか観測できない EXAFS だけでは実験データとしては不十分で、X線異常散乱実験（吸収端近傍での原子散乱因子の異常散乱項の差を用いた回折実験）を SPring-8 で行い、元素を選択し、かつ短・中距離構造を決定することが必ず必要になる。

理論的研究からは、実験データによらない第一原理分子動力学 (FPMD) シミュレーションが、構造不規則系の構造や物性を理解する上で大きな役割を果たしてきた。最近では大型計算機を使い 500 個程度の粒子を扱った DVD 材料の構造研究も報告されているものの、一般に報告されている例で用いられている粒子数は 100 個程度と小さいことが弱点である。RMC 法や経験的ポテンシャルを用いたシミュレーションはシステムサイズをかなり大きくできるので、FPMD シミュレーションの及ばない中・長距離構造が重要な場面ではますます重要視されると考えられる。一方で FPMD は量子力学を使って電子状態を正しく評価しながら原子のダイナミクスを追えるという大きな特徴を持っている。FPMD と非弾性散乱とを組み合わせることにより、元になる融体の電子状態の違い（金属か絶縁体か）がガラス転移に及ぼす影響を解明し、原子・分子ダイナミクスからガラス転移の本質に迫るといいう大きな目標があると言える。

さらに不規則系物質が発現する重要な機能には、マイクロ相分離や不均一性に由来すると考えられているものが少なくない。サブミクロンの X線マイクロビームの照射位置を観測しながら回折・散乱実験や EXAFS 実験を行うことができれば、物質科学・材料科学分野の発展にさらに大きく貢献するに違いない。また物質が実際に機能を発現する環境下での実験、すなわち低温・高温・高圧などの極端条件を達成し、その場での観察・構造決定を行うことも重要である。試料が経時変化する場合には、可能な限り時間変化を追跡できるようなシステムの構築（目標としては ns）も必要である。さらに結晶からアモルファス相への変化のように原子レベルの時間変化を伴う系では、原子の動きを把握することが肝心であることから、放射光のパルス性を利用した時分割実験は非晶質物質の分野においても必要不可欠な手法である。

先にガラス転移の解明という学術的観点から動的構造の重要性を強調した。それに加えて高度化された高分解能非弾性ビームラインを利用した動的構造研究は、これまで理論的には予想されていたが微弱なため観測が不可能と思われていた液体中を伝搬する横波モードや液体合金中の光学モードなど、nm 領域の新しいサイエンスに切り込みうる手法として大いに期待されている。さらに超高密度のコヒーレントな X線束を発生する X線自由電子レーザーを動的構造研究に利用できるようになった暁には、結晶、非晶質、液体に関わらず物質中の原子の動きを統一的に理解できる新しい理論が必ず構築できるであろう。物質の物性や機能を基礎から理解して材料開発に還元する上でも、このようなより高度な動的構造解析はますます重要になると予想される。

一方、このような個々の高度な手法を細部まで一人の研究者が理解して最終結果を導くことは不可能になりつつある。コンピューターやロボットを用いて自動化をできる限り押し進め、研究者がたとえば非晶質物質試料を持ち込み実験を行えば、その三次元構造まで導出されるシステムの構築が待ちこがれる。その一方、それぞれの手法に関しては細部まで理解し発展させることのできる研究者の養成も急務である。最近では、学生に実験が敬遠される傾向にあり、答をインターネットで検索して自ら思考することを節約する学生も増えている。華々しきで学生を引きつけることよりも、じっくり考えて着実に理解を深めていくプロセスを大切にする教育をどのように実現するかは、大学に籍を置くユーザーに課せられた最大の課題と思われる。

以上、不規則系分野の今後十年に望まれる方向をまとめると、

1. より精度の高い RMC 法や経験的ポテンシャルを用いたシミュレーションを行うため、高エネルギー X 線回折、X 線異常散乱法、X 線吸収微細構造分光法、X 線小角散乱法など、様々な手法の実験データ収集から解析までの効率化を図ること。とくに X 線異常散乱実験の環境整備は急務である。
2. サブミクロンのマイクロビームを用いた回折・散乱実験、ならびに放射光のパルス性を利用した ns を目標とする時分割実験を実用化すること。
3. 低温・高温・高圧などの極端条件や特殊な試料作製を達成し、その場観察を行うこと。
4. X 線自由電子レーザーの動的構造研究への利用や、高分解能非弾性 X 線散乱ビームラインの高度化を果たすこと。

これらはこれまで目標とされてきたことであるが、限られた人員と予算、既存の技術の限界などにより、なかなか実現できないことであった。しかし、これらがようやく実現に近づいていると期待できる段階に到達した。その一方、不規則系を取り扱うことが余りにも難しいためか、先に述べた第一原理分子動力学シミュレーションが盛んに適用されるようになって以降、不規則ポテンシャル中の伝導電子のアンダーソン局在のような不規則系固有の理論的問題に正面から取り組まれていない状況が続いているように感じられる。このような現状を打破するためには、放射光や強力中性子源を用いた新しい実験がブレークスルーを果たして不規則系分野の理論的研究の活性化を促すと共に、これまで以上に理論との緊密な協力体制を構築することが極めて重要であると考えられる。さらには得られた成果が我々の生活を豊かにするような貢献に結びつくことも期待する。