

安定化過冷却液体の大過冷却相変態の利用による
高機能性非平衡金属材料の創製と工業化

Fabrication and Industrialization of High Functional Non-Equilibrium Materials

Utilizing Transformation of Stabilized Supercooled Liquids at Highly Supercooled State

井上 明久 (INOUE Akihisa)

東北大学・総長



研究の概要

安定化過冷却液体が得られる新合金系開発、構造相安定性と大過冷却相変態の解明、最適合金組成の計算機科学予測法の確立、過冷却液体安定化のための3つの成分則およびその新相変態の特徴を利用したバルク非平衡材料、特に、新しいバルク金属ガラスの創製および工業化を目的とする研究を展開した。

研究分野：工学

科研費の分科・細目：材料工学、構造・機能材料

キーワード：バルク金属ガラス、過冷却液体、工業化、合金設計、計算機科学

1. 研究開始当初の背景・動機

1988年以降、本研究の開始年度の2003年までに、我々のグループは過冷却金属液体の安定化現象を発見し、この安定化現象を利用することによりMg基、希土類元素基、Zr基、Fe基、Pd-Cu基、Ti基、Co基、Ni基などの数多くのバルクガラス合金群を見出してきた。本研究では、この安定化現象の機構の解明を行うとともに、その利用により新規高機能性非平衡合金を創製すること、さらに、工業化へ発展展開することを着想するに至った。

2. 研究の目的

新規なバルク金属ガラス、ナノ結晶やナノ準結晶を分散したバルク金属ガラスのみならず、新規構造やナノ粒径組織の結晶を始めとする種々の非平衡相を創成し、構造、組織、基礎物性、工業的特性を調べるとともに、これと並行して、計算機科学法により理論的予測法の確立を目指す。また、大過冷却域での相変態とそれから得られる非平衡相の特徴を生かした新生成・加工プロセスを開発し、新非平衡材料の工業材料としての有用性を見極めることを目的とする。

3. 研究の方法

新しいバルク非平衡ナノ結晶合金および新しいバルク金属ガラスの探査を研究の開始点とし、(A)非平衡ナノ結晶合金、(B)計算機科学予測および(C)新規バルク金属ガラスの研究細目について研究を遂行した。研究を遂行するあたり、後述する設備備品などを各年度に購入し、適時、即効性があり、かつ、高効率の研究が展開できるよう

に努めた。主な設備備品等としては、母合金中の不純物の影響を避ける機能を具備した高周波溶解炉および高純度雰囲気アーク溶解炉(平成15年度設備備品)を導入するとともに、表面改質による高強度化実現のため新東ショットピーニング装置(平成15年度設備備品)を併せて導入した。次年度以降は、本格的なバルク金属ガラスの作製に伴い金属ガラス casting 装置(平成16年度設備備品)を導入するとともに、平成17年度以降には新規着想により金属ガラスの局所原子構造の解析を行うために、分子動力学ソフトウェア(平成16、17年度バージョン移行)を利用した。

4. 研究の主な成果

主要研究成果を新合金、応用・実用・工業化および計算機科学に分けて下記に記す。

【4-1. 新合金】

(4-1-1) 高強度Co基バルク金属ガラスの開発(主な発表論文 8.): 従来の二倍に近い5200 MPaの世界最高強度で、加工性にも優れた特徴と優れた軟磁気特性を併せもつ新Co合金を見出した。

(4-1-2) 高強度Ti-Fe合金の開発(主な発表論文 7.): 比重が4.5 Mg/m³の高比強度合金を実用合金系であるTi-Fe二元系合金で見出した。

(4-1-3) センチメートル級Ni基バルク金属ガラスの開発(主な発表論文 2.): Ni₆₀Pd₂₀P₁₇B₃合金において、世界で初めて臨界直径が1cmを超える最大直径12mmのバルク金属ガラスの作製に成功した。

(4-1-4) その他、Scを含む高強度Al合金(A. Inoue et al., J. Mater. Res., 2004)、4000MPaを超える超高強度Fe合金(A. Inoue et al., Acta Mater., 2004)、Ce基(Z. Bian and A. Inoue, Mater. Trans., 2006)、Pd-Pt基(N. Nishiyama et al., J. Alloys Comp., 2007)、La基(W. Zhang et al., Mater. Trans., 2007)、Cu基(Q. Zhang et al., Mater. Trans., 2007, Cu基最大直径: 30mm)などの新合金の開発に成功した。詳しくは、本公表資料「ホームページ等」に掲載の論文等検索システムを参照されたい。

【4-2. 応用、実用、工業化】

(4-2-1) 金属ガラス製マイクロギヤを用いた世界最小ギヤードモータを開発(図1、主な発表論文3., 6.): 金属ガラス製ギヤードモータの超小型化と高負荷特性を実現した。実用レベルとして従来の世界最小であったプラスチックを用いた直径1.9ミリメートルスイス製のモータを凌ぐ小型化に成功した。



図1 金属ガラス製マイクロギヤを内蔵した直径1.5mmの高出力トルク・長寿命マイクロギヤードモータ。

(4-2-2) 金属ガラスを用いた小型・超高感度圧力センサを開発(主な発表論文4.): 従来のステンレス鋼センサに比べて2倍以上の高圧対応が可能であり、4倍以上の感度を示す金属ガラス製圧力センサの開発に成功した。

【4-3. 計算機科学】

(4-3-1) バルク金属ガラス生成の合金組成則の確立(主な発表論文5.): 周期律表のs, d, f, pブロックおよび前期(E)ならびに後期(L)遷移金属から成る四つのサブグループ(s, d_f, d_p, p)をもとに描かれる正四面体合金組成図上でバルク金属ガラス合金組成帯の存在を明らかにした。

(4-3-2) 新規分子動力学(MD)シミュレーション手法の開発(主な発表論文1.): C₆Cr₂₃金属間化合物中の仮想的クラスターにランダム方位回転とその後の構造緩和を施すことにより、結晶から液相への構造変化が生じることを明らかにした。

5. 得られた成果の世界・日本における位置づけとインパクト

前項で述べた主要研究成果は、いずれも、

新規で斬新な独自の研究成果である。特に、「世界一」を冠する研究成果を持ちきたした新合金、応用・実用・工業化の研究成果は、産・学界にも大きなインパクトを与えた。

6. 主な発表論文

(研究代表者は太字、研究分担者には下線)

1. "Noncrystalline Atomic Arrangements Computationally Created from Crystalline Compound by Treating Groups of Atoms as Hypothetical Clusters", **A. Takeuchi**, K. Yubuta, Y. Yokoyama, A. Makino and **A. Inoue**, Intermetallics, 16, 283-292, (2008).

2. "Formation of a Ni-Based Glassy Alloy in Centimeter Scale", Y.Q. Zeng, N. Nishiyama and **A. Inoue**, Mater. Trans., 48, 1355-135, (2007).

3. "Developments and Applications of Bulk Glassy Alloys in Late Transition Metal Base System", **A. Inoue**, B.L. Shen and **A. Takeuchi**, Mater. Trans., 47, 1275-1285, (2006).

4. "Bulk Glassy and Nonequilibrium Crystalline Alloys by Stabilization of Supercooled Liquid: Fabrication, Functional Properties and Applications (Part 2)", **A. Inoue**, Proc. Jpn. Acad. Ser. B-Phys. Biol. Sci., 81(2005), 172-188.

5. "Classification of Bulk Metallic Glasses by Atomic Size Difference, Heat of Mixing and Period of Constituent Elements and Its Application to Characterization of the Main Alloying Element", **A. Takeuchi** and **A. Inoue**, Mater. Trans., 46, 2817-2829, (2005).

6. "Recent Progress in Bulk Glassy, Nanoquasicrystalline and Nanocrystalline Alloys", **A. Inoue** and **A. Takeuchi**, Mater. Sci. Eng., A375-377, 16-30, (2004).

7. "High-Strength Binary Ti-Fe Bulk Alloys with Enhanced Ductility", **D.V. Louzguine**, H. Kato, L.V. Louzguina and **A. Inoue**, J. Mater. Res., 19, 3600-3606 (2004).

8 "Cobalt-Based Bulk Glassy Alloy with Ultrahigh Strength and Soft Magnetic Properties", **A. Inoue**, B. Shen, H. Koshihara, H. Kato and A.R. Yavari, Nature Materials, 2, 661-663, (2003).

ホームページ等

1. 東北大金研、非平衡物質工学研究部門

<http://www.inoue.imr.tohoku.ac.jp/>

2. 同、論文等検索システム(CGI)

<http://www.inoue.imr.tohoku.ac.jp/paper.html>