

令和 5 年 6 月 9 日現在

機関番号：16301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2022

課題番号：17K05581

研究課題名(和文) 液-液転移理論へのフィードバックを目指した微視的メカニズムの解明

研究課題名(英文) Elucidation of the microscopic mechanism that induces liquid-liquid transition

研究代表者

瀧崎 員弘 (Fuchizaki, Kazuhiro)

愛媛大学・理工学研究科(理学系)・教授

研究者番号：10243883

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：本研究の最大の成果は、全く予期しなかったことであるが、ヨウ化錫やヨウ化ゲルマニウムが液-液転移ないしはクロスオーバーの前後で分子の対称性がTdからC3vに低下することを実験的に見出したことである。この分子低対称化により、分子間相互作用が二つの特徴長さをもつことになり、低密度液相と高密度液相の出現の微視的根拠を示せたといえる。本研究の目的は液-液転移を記述するための大域秩序(密度)と局所秩序(例えば、分子配向)の結合様式を見出すことであったが、少なくともヨウ化錫に対しては結合項が転移の本質を担うわけではなく、転移圧以上で新たな安定状態が現れる形の局所自由エネルギーとなるべきであると結論できる。

研究成果の学術的意義や社会的意義

液-液転移、とりわけ、第二臨界点の存在は気-液相に対する既存の捉え方の再考を迫るものである。これらの相において熱力学的な秩序変数は密度のみである。局所(配向)秩序が断熱消去できる場合、臨界点異常は究極的には大域秩序(密度)揺らぎのみに由来することになる。しかし、そうでない場合は両方の秩序を同等に扱わなければならない。「状況証拠」からではなく、直接観測を通じて正しい理論を導くことが重要である。ヨウ化錫はポリアモルフィズム研究面で水の代替物質になり得るといふ点よりも実際に臨界領域を観測できる点を強調したい。

研究成果の概要(英文)：The foremost achievement of the present study is experimentally finding the symmetry lowering of tin tetraiodide and germanium tetraiodide molecules from Td to C3v upon the liquid-liquid transition and crossover, respectively. This finding was ultimately an unexpected consequence. The symmetry lowering induces the two different characteristic lengths to the intermolecular interaction, thereby making the intermolecular potential possess two minima. The two stable states in the potential should be responsible for the appearance of two liquid states with different densities. This investigation aimed to identify the way of coupling between the global (thermodynamic) and local order parameters. However, the essential feature that the local free energy should capture is not the coupling but the appearance of a new stable state upon a liquid-liquid transition.

研究分野：統計力学・物性基礎論分野

キーワード：液-液転移 第二臨界点 ポリアモルフィズム 局所構造 ヨウ化ゲルマニウム ヨウ化錫 XAFS 6-6方式

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

生命や地球環境における基本物質である水は負の熱膨張係数に代表される、熱学的には特異な物質である。この特異性の起源を液 - 液臨界点周りで臨界現象と捉える液 - 液(第二)臨界点仮説が有力である。¹⁾しかし、第二臨界点が氷点以下にあるとされるため、その両側の低密度水(LDL)と高密度水(HDL)、及び臨界点自体の存在を顕に示すことができない点、このシナリオの最大の且つ克服し難い弱点である。このため密度極大温度(TMD)線などの臨界点の「尻尾」がその存在の証拠とされる。²⁾

一方、ヨウ化錫の圧力非晶質化解明の試み(報告者平成16年度基盤研究(C))に端を発する一連の研究により、ヨウ化錫結晶相(CP-I)の融解曲線上1.8 GPa付近に屈曲点があることから、高密度非晶質状態(HDA)Am-Iと低密度非晶質状態(LDA)Am-IIに対応する高密度液相(Liq-I)と低密度液相(Liq-II)を見出し、³⁾擬二正則溶体(平均場)理論を用いてLiq-II - Liq-I相境界線、Am-II - Am-Iスピノーダルを決定した。⁴⁾同理論は970 K、1.3 GPaの位置に第二臨界点を与える。放射光X線吸収実験によりLiq-IIとLiq-Iの間に僅かながらも明確な密度差-0.4 g/ccがある(両液体を「相」と呼ぶ根拠)ことを示した。⁵⁾即ち、水とヨウ化錫はポリアモルフィズムの上で相似であるが、後者においては第二臨界点近傍に立ち入ることができる点が決定的な違いである。

2. 研究の目的

液 - 液転移理論の原典は現実の液 - 液転移現象が複数報告される以前に田中⁶⁾により提出された。「好ましい」局所構造と密度との双一次結合が仮定されている。即ち、理論の要になる、密度と局所秩序の結合様式に関しては仮定の域を出ていないのである。そこで、ヨウ化錫を対象系とし、液体の加圧過程での局所構造の変化を観測することにより、田中模型で用いた密度(熱学変数である保存量秩序)と局所(非保存)秩序の結合様式を確認、修正することが本研究の目的である。

3. 研究の方法

本研究は実験・理論・シミュレーションの三位一体方式で取り組む旨、申請調書に記述した。

(1) 実験研究

ヨウ化錫は「重い」元素から成るため、実験室X線での観察は困難である。必然的に放射光X線が選択される。高圧下でのその場観察ができる施設の一つ、高エネルギー加速器研究機構(KEK)に課題申請を行い、採択された。PF-ARのビームラインNE5Cに設置された高圧発生装置MAX80を用いることを前提に以下の実験を企画した。

放射光X線その場回折および吸収実験

すでに方法は確立しており、結果も得られている。^{4), 5)}補完すべき熱学条件下での追加実験を行う。構造因子に対して逆Monte Carlo(RMC)シミュレーションを施し、3次元構造を推定するが、エネルギー分散法で得られた構造因子をRMC法の入力に使用するの、報告者が知る限り、初めての試みである。

XAFS実験

報告者としては初の試みとなる。主に錫周りの局所構造を温度・圧力の関数として調べる。最適厚みの試料サイズにするため、用いる高圧セルとは異なるものを新たに設計・製作する必要がある。

6 - 6 加圧法

2010年代初頭から大型放射光施設などの共同利用施設に設置されたマルチアンビルプレスは従来の加圧方式からタンデム型方式に移行した。KEKの装置も2011年にはタンデム方式が標準となった。この方式では内側の小アンビルサイズをサンプル交換とともに変更できるため、単一のビームタイム中に様々な圧力領域での実験が可能になった一方で、小アンビル位置の設定などを含めたサンプル交換の時間が従来方式の3~10倍となったため、小人数から成る実験チームは実質的にビームタイムの削減を強いられることになった。理論研究室を主宰している報告者は後者の部類に属するため、サンプル交換の効率向上は真摯に取り組むべき課題となった。幸い、本科研費での研究期間中に愛媛県ライフサポート産業支援事業に採択され、県内企業である新興工機(株)との産官学間のR&D体制を築くことができた。報告者は立方体圧媒体内に試料を収めるため、この立方体各面に接する6個の二段目(内側)アンビルをプレスに装着された6個の第一段(外側)アンビルで加圧する、6 - 6方式と呼ばれる加圧方式を採用している。この6 - 6方式は物性分野では多用される加圧方式である。そこで、この方式に特化した効率向上を目指した。

(2) 理論研究

擬二溶体模型⁴⁾を平均場近似レベルで取り扱う。一方で微視的な特徴をとらえた統計力学理論も展開する。融解現象に関する理論研究も本研究の一部として遂行する。必要に応じて第一原

理計算を援用する。

(3) シミュレーション

ヨウ化錫を剛体四面体として取り扱い、分子動力学法により、定温、あるいは定圧アンサンブルを発生できている。分子を剛体として扱うことが(1)により明らかとなる。変形可能な分子系に拡張する必要がある。シミュレーション技術の開発も本研究の一部として行う。

4. 研究成果

本研究期間中に類似物質であるヨウ化ゲルマニウムが圧力誘起液-液クロスオーバーを起こすことを実験的に示した。本研究の最大の成果は、全く予期しなかったことであるが、ヨウ化錫やヨウ化ゲルマニウムが液-液転移ないしはクロスオーバーの前後でともに分子の対称性がTdからC3vに低下することを実験的に見出したことである。この分子低対称化により、分子間相互作用が二つの特徴長さをもつことになる。水の液-液転移の説明には二つの特徴長さを有するJaglaポテンシャルが「手」で導入されたわけであるが、ヨウ化錫では低密度液相と高密度液相の出現の微視的根拠を示せたといえる。本研究の目的は液-液転移を記述するための大域秩序(密度)と局所秩序(例えば、分子配向)の結合様式を見出すことであったが、少なくともヨウ化錫に対しては結合項が転移の本質を担うわけではなく、転移圧以上で新たな安定状態が現れる形の局所自由エネルギーとなるべきであると結論できる。

報告者は、この分子低対称化はリンをはじめとする四面体構造をもつ液体に一般的に生じていると予想している。ただし、低対称化はより微視的な観点から考えると「結果」であろう。即ち、圧力などの外部変数の変化により、分子(あるいはそれに相当するユニット)内での電子分布の変化が起こり、これが原因で分子(ユニット)の低対称化を生じるとともに分子(ユニット)間の化学結合が促進され、最終的に高分子(ユニット)の密度変化を起こすというシナリオである。

水もこの部類に属すると予想している。水の微視的模型として、例えばTIP4P⁷⁾などが多用されるが、上記の観点から、仮想電荷位置は圧力に応じて変化させるべきだと考える。これにより、H₂Oユニット間の水素結合が促進されるはずである。

もう一つ、本研究成果として特筆すべきものがある。これは副産物として得られたものである。3項で述べたR&Dにより、数十分から数時間を要した従来の準備がわずかに数分間で、試料交換全体を含めても10分程度で完了できるツールが完成した。この成果は愛媛経済レポート(地域銀行および主企業間流通誌)2020年1月27日号に取り上げられた。また、同ツール一式は2020年度初めに新興工機(株)から販売されるという状況に至っている。国際会議を通じての「宣伝」効果もあり、海外からの発注も受けているとのことである。

以下、本研究によって得られた主な成果を論文毎に要約しておく。

(1) ヨウ化ゲルマニウム液体の圧力誘起クロスオーバー(方法3、論文[1])

ヨウ化ゲルマニウムの融解曲線もヨウ化錫と相似である。従って、ヨウ化錫で見られた液-液転移の現出が期待できる。ヨウ化ゲルマニウムの融解曲線の傾きは圧力増加とともに3GPa付近で突然フラットになるため、この付近の液体構造の放射光X線その場観察を行った。構造因子を逆Fourier変換して得られた還元動径分布関数はヨウ化錫液体のそれと共通した特徴を備えている。このためヨウ化錫液体で導入した局所秩序変数によって転移が記述できるはずである。しかしながら、ヨウ化錫の場合と異なり、転移は緩慢に起こる。この様子からヨウ化ゲルマニウムの第二臨界点は固相領域に準安定状態で存在すると予想した。即ち、観測した圧力による構造変化はクロスオーバーである。局所秩序の圧力・温度依存性から低密度と高密度液体の準安定境界は負のClapeyron傾きを有すると考えられる。

(2) 融解曲線の高效率計算法(方法(3)、論文[2])

融解曲線を精密に計算できる新たな「二相」シミュレーション法を提案した。まず適切なアンサンブルを採用することにより、二相共存状態を発生させ、初期構造とする。この構造に対し、定圧(定温)条件下で昇温(加圧)した場合の両相の体積変化の比をシミュレーションから推定すると、Clausius-Clapeyronの関係式から昇温(加圧)後の相図上での共存点を求められる。変形Lennard-Jones系の融解曲線をこの方法で求めたところ、非平衡緩和法(Y. Asano and K. Fuchizaki, J. Phys. Soc. Jpn. 86, 025001 (2017))より低計算コストで、且つ高精度の結果を得ることができた。

(3) 変形Lennard-Jones系の液相-気相スピノーダル(方法(3)、論文[3])

Isingモデルに対して提案されたブロックスピン粗視化法を(初めて)粒子系である変形Lennard-Jones系に適用した。この系の低温での気液共存領域においてスピノーダルは粗視化長の関数として普遍的な形で特徴づけられる。スピノーダル線は粗視化長とともに気液共存線に漸近する。このことは、一見、あいまいさなく確立しているスピノーダル分解は粗視化長によって見え方が異なるということを示唆する。

(4) ヨウ化ゲルマニウムおよびヨウ化錫の液-液転移に際しての圧力誘起分子低対称化(方法(1)と(2)、論文[4])

ヨウ化ゲルマニウムとヨウ化錫は液-液転移(クロスオーバー)を発現する。この転移での微

視的経路を特定するため、適切な熱学条件にある両液体構造を RMC 法によりシミュレートした。両系において圧力誘起による Td から C3v への分子の低対称化を確認した。この低対称化はヨウ化錫系では転移点近傍で突然生じるのに対し、ヨウ化ゲルマニウム系では緩やかに起こる。即ち、前者が圧力変化に対して不連続な液 - 液転移を起こすのに対し、後者がクロスオーバーすること(上記(1))に矛盾しない。特に、この低対称化は高密度状態において分子間相互作用に二つの安定状態を誘導することは強調されるべきである。この二つの特徴長さによって密度の異なる液体が出現できる。一方で、この低対称化には電子論的高エネルギー状態を必要とすることが第一原理計算の結果から分かった。この分子低対称化は転移の前駆段階だと考えられる。

- (5) ヨウ化ゲルマニウムの液 - 液クロスオーバーの微視的経路(方法(2)と(3)、論文[5])
ヨウ化ゲルマニウム系を剛体四面体分子系と考え(上記(4)とは矛盾するが第ゼロ近似レベルとしては妥当であろう)、定温 - 定圧の分子動力学法シミュレーションをもとに液 - 液クロスオーバーの際の構造上の変化をとらえた。まず、金属 I₂ 結合を形成する条件を満たした最近接分子間ヨウ素に「物理的」結合を定義した。この結合によって動的に生ずるクラスター形成に着目した。このクラスター形成には、主に、四面体分子間の辺 - 辺、面 - 面、および頂点 - 辺配向が関与する。クラスターは圧力とともに成長し、1 GPa 未満で I₂ 「物理」結合の浸透が起こる。様々な大きさの系から得られた浸透確率に対し有限サイズスケールリングを施したところ、浸透の閾値として 0.85 ± 0.01 GPa を得た。この閾値は上記(1)で得られた両液相の準安定境界線付近にある。この結果からヨウ化ゲルマニウムの液 - 液クロスオーバーは分子間ヨウ素結合の浸透によって達成されると考えてよいであろう。ヨウ化錫の液 - 液転移も I₂ 結合の浸透によるものと考えられるが、この転移は不連続に起こるため、何かしらのブーツトラップ機構を考える必要がある。
- (6) 低圧結晶状態でのヨウ化錫分子変形(方法(1) と(2)、論文[6])
ヨウ化錫分子は液 - 液転移に際し、Td - C3v の低対称化を起こす(上記(4))。この低対称化と低圧結晶状態の対称性は矛盾しないので、実は結晶状態において既に分子の低対称化が起こっている可能性は否定できない。融解曲線が 1.5 GPa 付近からフラットになる(上記(1))のは、こうしたことに起因する可能性がある。そこで XAFS によりヨウ化錫分子の錫周りの環境を調べた。予想に反して、調査した領域(融点付近をも含む)において分子の正四面体対称性は崩れていなかった。従って、局所対称性低下は、融解後、比較的容易に接近できる分子間の多体効果により誘起される電子構造の不安定性に起因すると考えられる。高密度非晶質の錫周りのヨウ素が 6 配位であるという報告があるが、分子の立体障害を考慮すると、この配位は分子変形なしでは到達し得ない。また、液 - 液転移との直接の関連はないが、分子自体の圧縮特性を定量化すべく、「分子弾性率」の概念を提案し、XAFS 測定結果をもとに評価したところ、ヨウ化錫分子は鉱物の MgO と同程度に圧縮しにくいことを明らかにした。
- (7) キュービック型マルチアンビルプレスに対するユニークなマルチアンビル 6 - 6 アセンブリ(方法(1) 、論文[7])
キュービック型マルチアンビルプレスを用いて 6 - 6 方式で加圧する際のユニークな二段目(内側)アンビルアセンブル法を提案した。二段目アンビルを束ねるプラスチックフレームを設計、開発、および製作し、これを新たに開発したアセンブル用ジグとともに用いる。これにより、非常に時間を要する従来方式よりもはるかに短時間でアセンブルできるだけでなく、より良いアセンブル精度が得られる。1500 K、10 GPa の温度、圧力下においても全く問題なく使用できることを実証実験で示した。この方式を採用することにより大型放射光施設などの共同利用実験施設でのマシンタイムのロスをも最小に抑えることが可能となる。

<引用文献> 本研究成果によるもの[]で、その他の一般文献を)で示す。報告者にアンダーラインを施した。

- 1) K. Stokely *et al.*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **107**, 1301 (2010).
 - 2) V. Holtén *et al.*, J. Chem. Phys. **136**, 094507 (2012).
 - 3) K. Fuchizaki *et al.*, J. Chem. Phys. **120**, 11196 (2004).
 - 4) K. Fuchizaki *et al.*, J. Chem. Phys. **135**, 091191 (2011).
 - 5) K. Fuchizaki *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **82**, 033001 (2013).
 - 6) H. Tanaka, Phys. Rev. E **62**, 6968 (2000).
 - 7) H. P. Poole *et al.*, Nature **360**, 324 (1992).
- [1] K. Fuchizaki *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **30**, 045401 (2018).
[2] K. Okamoto and K. Fuchizaki, Mol. Simul. **44**, 384 (2018).
[3] K. Fuchizaki and K. Watanabe, J. Phys. Soc. Jpn. **87**, 114006 (2018).
[4] K. Fuchizaki, T. Sakagami, and H. Iwayama, J. Chem. Phys. **150**, 114501 (2019).
[5] K. Fuchizaki, H. Naruta, and T. Sakagami, J. Phys.: Condens. Matter **31**, 225101 (2019).

- [6] H. Naruta, K. Fuchizaki *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **32**, 055401 (2019).
- [7] K. Fuchizaki *et al.*, Rev. Sci. Instrum. **92**, 025117 (2021).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計10件（うち査読付論文 10件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Fuchizaki Kazuhiro, Ohmura Ayako, Naruta Hiroki, Nishioka Takuya	4. 巻 33
2. 論文標題 The microscopic transition process from high-density to low-density amorphous state of SnI ₄	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 365401 ~ 365401
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/ac0dd7	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Fuchizaki Kazuhiro, Wada Tomoyuki, Naruta Hiroki, Suzuki Akio, Irino Kazuo	4. 巻 92
2. 論文標題 A unique multianvil 6-6 assembly for a cubic-type multianvil apparatus	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Review of Scientific Instruments	6. 最初と最後の頁 025117 ~ 025117
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0039306	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Fuchizaki Kazuhiro	4. 巻 88
2. 論文標題 Predicting the Melting Curve of MgO: An Essential Update	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 065003(2 pages)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.065003	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Shito Chikara, Okamoto Keitaro, Sato Yuki, Watanabe Ryuji, Ohashi Tomonori, Fuchizaki Kazuhiro, Kuribayashi Takahiro, Suzuki Akio	4. 巻 39
2. 論文標題 In-situ X-ray diffraction study on -CrOOH at high pressure and high-temperature	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 High Pressure Research	6. 最初と最後の頁 499 ~ 508
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/08957959.2019.1642884	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Naruta Hiroki, Fuchizaki Kazuhiro, Wakabayashi Daisuke, Suzuki Akio, Ohmura Ayako, Saitoh Hiroyuki	4. 巻 32
2. 論文標題 Do Sn14 molecules deform on heating and pressurization in the low-pressure crystalline phase?	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 055401(9 pages)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/ab4cbc	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Fuchizaki Kazuhiro, Watanabe Kei	4. 巻 87
2. 論文標題 Liquid-Gas Spinodal of the Modified Lennard-Jones Fluid	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 114006(4 pages)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.87.114006	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Fuchizaki Kazuhiro, Sakagami Takahiro, wayama Hiroshi	4. 巻 150
2. 論文標題 Pressure-induced local symmetry breaking upon liquid-liquid transition of Ge14 and Sn14	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 114501(11pages)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5061714	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Fuchizaki Kazuhiro, Naruta Hiroki, Sakagami Takahiro	4. 巻 31
2. 論文標題 A polymerization scenario of the liquid-liquid transition of Ge14	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 225101(9 pages)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/ab0cf2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kazuma Okamoto, Kazuhiro Fuchizaki	4. 巻 44
2. 論文標題 An effective way to determine the melting curve	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Molecular Simulation	6. 最初と最後の頁 384-388
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/08927022.2017.1387657	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kazuhiro Fuchizaki, Hironori Nishimura, Takaki Hase, Hiroyuki Saitoh	4. 巻 30
2. 論文標題 Pressure-induced structural change in liquid Ge4	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 045401(9 pages)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/aaa180	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計26件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 13件)

1. 発表者名 成田博貴、西岡拓哉、淵崎員弘
2. 発表標題 ヨウ化錫の液体と非晶質状態の構造比較
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 淵崎員弘、成田博貴、中村克巳、鈴木昭夫
2. 発表標題 ヨウ化錫高圧結晶相に対するエネルギー分散法による角度分散測定を試み
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 淵崎員弘、和田智之、成田博貴、鈴木昭夫、入野和朗
2. 発表標題 キュービックマルチアンピルプレス用6-6アセンブリの開発
3. 学会等名 2020年度量子ビームサイエンスフェスタ
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kazuhiro Fuchizaki
2. 発表標題 Amorphous-amorphous transition in SnI4 reexamined
3. 学会等名 29th Annual Conference of the German Crystallographic Society (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 淵崎員弘
2. 発表標題 単独、あるいは少人数での6-6方式加圧実験のためのツール開発
3. 学会等名 未来を拓く高圧力科学技術セミナーシリーズ(45)(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 成田博貴、淵崎員弘、坂上貴尋
2. 発表標題 GeI4液体の「物理」結合浸透転移
3. 学会等名 物性研究所パソコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の新展開」
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 渡邊佳、瀧崎員弘
2. 発表標題 粗視化スケールの差による気-液分離過程の見え方の違い
3. 学会等名 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の新展開」
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kazuhiro Fuchizaki
2. 発表標題 A probable polymerization process on the liquid-to-liquid crossover in Ge14
3. 学会等名 XXVI Sitges Conference on Statistical Mechanics (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kei Watanabe, Kazuhiro Fuchizaki
2. 発表標題 Spinodal decomposition given various coarse-graining levels
3. 学会等名 XXXI IUPAP Conference on Computational Physics (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroki Naruta, Kazuhiro Fuchizaki, Takahiro Sakagami
2. 発表標題 The dynamical anomalies associated with the pressure-induced liquid-liquid crossover of Ge14
3. 学会等名 XXXI IUPAP Conference on Computational Physics (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kazuhiro Fuchizaki, Hiroki Naruta
2. 発表標題 The pressure-induced liquid-liquid crossover of GeI4 identifiable as a percolation transition
3. 学会等名 57th European High Pressure Research Group Meeting on High Pressure Science and Technology (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kazhiro Fuchizaki, Tomoyuki Wada, Hiroki Naruta, Akio Suzuki, Kazuo Irino
2. 発表標題 A Unique Multianvil 6-6 Assembly for a Cubic-Type Multianvil Apparatus
3. 学会等名 57th European High Pressure Research Group Meeting on High Pressure Science and Technology (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kazuhiro Fuchizaki
2. 発表標題 To what extent is the molecular symmetry lowering related to poly(a)morphism in a SnI4 system?
3. 学会等名 Joint Polish-German Crystallographic Meeting 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 淵崎員弘
2. 発表標題 変形 Lennard-Jones系のスピノーダル
3. 学会等名 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の今と未来」
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 K. Fuchizaki, N. Hamaya, A. Ohmura, A. Suzuki, K. Nishida, H. Saitoh
2. 発表標題 A critical-point scenario for the liquid-liquid transition of tin tetraiodide
3. 学会等名 35th International Conference on Solution Chemistry (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kazuhiro Fuchizaki, Takahiro Sakagami, Hiroshi
2. 発表標題 Pressure-induced local symmetry breaking upon liquid-liquid transition of GeI ₄ and SnI ₄
3. 学会等名 56th European High Pressure Research Group Meeting (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 淵崎員弘, 西村光仙, 長谷貴樹, 齋藤寛之
2. 発表標題 液体 GeI ₄ の圧力誘起構造変化
3. 学会等名 2018年度量子ビームサイエンスフェスタ
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 淵崎員弘, 坂上貴尋, 岩山洋士
2. 発表標題 ヨウ化錫やヨウ化ゲルマニウム系の液 - 液転移前駆現象としての分子低対称化
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 成田博貴, 瀧崎員弘, 西村光仙, 鈴木昭夫, 大村彩子, 若林大佑
2. 発表標題 高压下におけるSnI4固体のXAFS解析
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 渡邊佳, 瀧崎員弘
2. 発表標題 粗視化の程度によるスピノーダル分解の見え方
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kazuhiro Fuchizaki, Hiroki Naruta, Takahiro Sakagami
2. 発表標題 Is GeI4's liquid-liquid transition identifiable as a percolation transition of 'bonds'?
3. 学会等名 27th Annual Meeting of the German Crystallographic Society (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kazuhiro Fuchizaki
2. 発表標題 SnI4 - the substance that allows us to enter the no man's land
3. 学会等名 Waterspain 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 淵崎員弘
2. 発表標題 ヨウ化錫の液 - 液転移シナリオ
3. 学会等名 分子研研究会「不均一なゆらぎとその周辺の科学： Nishikawa Lineから第二臨界点まで」
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Kazuhiro Fuchizaki
2. 発表標題 Liquid-liquid transition in GeI4
3. 学会等名 55th The European High Pressure Research Group Meeting (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Kazuhiro Fuchizaki, Nozomu Hamaya
2. 発表標題 Detecting the structural change and density anomaly in liquid iodides by in-situ synchrotron x-ray diffraction and absorption measurements under high pressures
3. 学会等名 26th Annual Meeting of the German Crystallographic Society (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 淵崎員弘
2. 発表標題 ヨウ化錫の液 - 液転移シナリオ
3. 学会等名 日本物理学会第73回年次大会シンポジウム
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
スペイン	Universitat Politecnica de Catalunya			
フランス	University Paris Descartes			