

令和 6 年 6 月 9 日現在

機関番号：13903

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2020～2023

課題番号：20K03785

研究課題名(和文) 動的ファシリテーションにおける構造ガラス系の遅い緩和の微視的起源と非平衡相転移

研究課題名(英文) The microscopic origin of slow dynamics and non-equilibrium phase transition in structural glass systems from the viewpoint of dynamic facilitation

研究代表者

磯部 雅晴 (Isobe, Masaharu)

名古屋工業大学・工学(系)研究科(研究院)・准教授

研究者番号：80359760

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：「ガラス・ジャミング転移」それらの類似性に着目した「遅い緩和」を記述する統一的(普遍的)枠組みに関する研究が世界中で精力的に行われている。様々な視点から努力がなされてきているにも関わらず、決定的な概念や理論が存在せず多くの理論や方法論が創生され、研究者を魅了し続けている。本研究では、研究代表者の開発した高密度剛体球系解析の高速な方法論を用い「フリージング(freezing)」「フリーエナジー(free energy)」「ファシリテーション(facilitation)」という概念を軸に、構造ガラス系の遅い緩和の「微視的起源」と「非平衡相転移」の解明を目標とし、研究を遂行した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

近年、人間組織における「ファシリテーション」が注目される中、分子ガラス系でも「ファシリテーション」の存在を示唆する独創的な理論が提唱され、大きな論争となっている。本研究では、新しい方法論を基礎に、国際協力体制で分子シミュレーションとコロイド実験の双方から、剛体球モデル系における構造ガラス系の「遅い緩和」の微視的機構を探求した。開発された計算手法は高密度分子系の構造解析に広く応用可能であり、準空隙駆動ひも状ホッピング連鎖運動の発見はガラス形成物質の基礎理論に重要な知見を与えられ、これらの成果は、ガラスの材料設計や制御、粉体工学、ソフトマター物理学など幅広い分野への応用が期待される。

研究成果の概要(英文)：In the field of glass and jamming transitions, unified concepts of slow relaxation have been actively studied. Despite efforts from various perspectives, no definitive concepts or theories exist, and numerous theories and methodologies have been created, continuing to fascinate researchers worldwide. In this study, utilizing efficient methodologies for analyzing high-density hard-sphere systems from the viewpoint of the concepts of "freezing", "free energy", and "facilitation", we aimed to elucidate the "microscopic origins" of slow relaxation and "non-equilibrium phase transitions" in structural glass systems.

研究分野：計算統計物理学

キーワード：動的ファシリテーション 構造ガラス 遅い緩和 非平衡相転移 分子動力学法 局所構造解析

## 様式 C - 19, F - 19 - 1 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

「ガラス・ジャミング転移」それらの類似性に着目した「遅い緩和」を記述する統一的(普遍的)枠組みに関する研究が世界中で精力的に行われている。様々な視点から努力がなされてきているにも関わらず、決定的な概念や理論が存在せず多くの理論や方法論が創生され、研究者を魅了し続けている。本研究では、熱力学を基礎とした理論とは異なる「動的ファシリテーション」を非熱系に拡張した理論を基礎に、研究代表者のこれまで開発した高密剛体球系解析の高速アルゴリズムに関する方法論を用い、「フリージング(freezing)」「フリーエネルギー(free energy)」「ファシリテーション(facilitation)」という概念を軸に、理論・実験・計算機シミュレーションを用い、国際協力体制により構造ガラス系の遅い緩和の「微視的起源」と時空アンサンブル解析による「非平衡相転移」の解明を目標とし、研究を遂行している。

### 2. 研究の目的

本研究では分子・粉体・ガラス系の研究において、研究代表者が国際共同研究において、これまで開発してきた高密剛体球系を解析する新しい方法論、すなわち (i) 剛体球系のイベント駆動型ハイブリッド高速アルゴリズム, (ii) 局所構造解析法(近接粒子判定法と自由体積計算法), (iii) 時空アンサンブル法, などを用い、国際研究協力体制にて「遅い緩和」が生じるガラス系を含む「非平衡相転移」をめぐる論争について、微視的機構から全容解明することを主な目的とした。本研究では、「遅い緩和」の微視的機構の解明のため、剛体球系の局所構造解析の方法論開発ならびに、「フリージング」「フリーエネルギー」「ファシリテーション」の3つの概念と軸に研究を遂行した。研究開始当初の目的の概要を以下にまとめる。

- (I) ガラス転移の論争解決のため、実験・分子シミュレーションのデータ解析と理論の確立は緊急を要する課題である。新しく発見された String-Repetition 現象を粒子のフリーエネルギーの観点から微視的機構の解明を行う。
- (II) DF 理論には大きな「パラドックス」がある。つまり、高密度系では粒子が密に詰まり、大きな変位を起こす隙間がない。このため、Hopping 連鎖の最初のトリガーとその起源が全く不明である。先行研究では、粒子構造の自由体積(Free Volume)との相関が調べられたが否定された(Widmer-Cooper&Harrowell, J. Non-Cryst. Solids, 352, 5098, (2006))。研究代表者らは、高精度の粒子軌道解析した結果、最初のトリガーには第2, 第3近傍まで含めた領域内に小さな隙間(準空隙:Quasi-Void)が多数あり、これらが積算され十分な自由体積が確保され、複数粒子がファシリテーションを起こし Hopping 連鎖が生じる事象を多数発見した。この仮説を基に検証を進める。稀に起こる大きな粒子変位(レアイベント)の探索に時空アンサンブル解析(s-ensemble)から非平衡相転移の解明(cf. Hedges et al., Science(2009))をめざす。
- (III) EMMC 法の未解決問題は、高速化の鍵である Event-Chain 長のパラメータ最適化と緩和機構の解明である。このため、様々な「非平衡状態」から「平衡緩和」の計算時間を調べ、緩和の基本原則の解明に向け系統的研究を行う。
- (IV) (III)と密接に関係する未解決問題として、最密結晶構造(「面心立方格子(fcc)」と「六方最密格子(hcp)」)間の安定性問題(なぜ同じ充填率の fcc と hcp に対し結晶構造が選択されるか?) (cf. Woodcock, Nature(1997), P. G. Bolhuis et al., Nature(1997))を第2近接まで考慮したフリーエネルギーを計算の研究を遂行し解明をめざす。

### 3. 研究の方法

21世紀初頭の現在、電子計算機を使ったシミュレーションは広範な科学技術分野で最も重要で強力かつ汎用的な方法論の1つとなり理論、実験と並ぶ「第3の手法」として確立されている。半世紀余り前の電子計算機の黎明期「分子シミュレーション」の創始者の一人、Berni J. Alder (LLNL, 2009年, National Medal of Science 受賞)は、世界で初めて分子動力学法(MD)法という新しい方法論を開発し、最も単純な「剛体球系」で結晶への「相転移」が起るか?という当時の難問「剛体球問題」を解明した。この驚愕すべき結果は、計算機を使った研究の威力を示す象徴として科学史の一里塚となり、「アルダー(Alder)転移」と呼ばれている。「研究の目的」であげた研究を遂行するためには、「高速計算機環境の構築」ならびに「遅い緩和」が生じる高密度系の分子シミュレーションにおける「新しい解析手法(アルゴリズム)の導入とブレークスルー」が不可欠となる。これらの研究遂行のため、a-dの3つの新しい方法論を導入ならびに開発した。

- (a). 「Event 駆動型アルゴリズム」: W. Krauth 教授(ENS-Paris)らは、メトロポリス法などに代表させる従来のモンテカルロ法とは全く異なる Event-Chain モンテカルロ法という高速な方法論を開発した(Bernard&Krauth&Wilson, PRE, 2009)。このアルゴリズムは、粒子衝突まで直線運動させ、次々に起こる衝突の連鎖を1つのイベントとして扱い棄却がないため、

高密度系で非常に高速な計算が可能となる。高密度系では粒子が頻りに衝突を繰り返し、計算時間が増大するのに加え、ガラス系では準安定状態から定常(平衡)系への緩和も著しく遅くなる。平衡緩和の高速化のため、時間発展を直接計算する高速な Event-Driven 分子動力学法 (Isobe, IJMPC, 1999) との相補的な特徴を利用し、長所を生かしたハイブリッドアルゴリズムを完成させた(Isobe, Mol. Sim., 2016)。(高速 Event 駆動型 Hybrid アルゴリズム)

- (b). 「近接粒子判定法と自由体積計算法」: 分子シミュレーションの創始者 B. J. Alder 教授との国際共同研究で開発された方法論(Isobe&Alder, JCP, 2012)では、高密度系のシアストレスや結晶核など物理量の時空相関関数が従来より約 2 桁高速に計算でき(計算不可能とされた)「8 点相関(4 体 2 時間相関) 計算も可能となった。また D. Frenkel 教授(Univ. of Cambridge)らのグループが開発した新しい最近接粒子判定法(SANN 法)を 2 次元並びに高次近接まで拡張した(2D SANNex 法)。この拡張により、相分離が生じるような不均一系やガラス系のように多分散系においても、曖昧さなしに(最近接ならびに第 2 第 3 といった)高次まで近接粒子の判定が可能となる。また、分子の局所構造とガラス転移点近傍で特有の現象として知られるホッピング連鎖運動の解析をするため、多成分系にも適用できる自由体積計算の方法論を開発し適用する。新しい方法論は、高密度ガラス・粉体系の非平衡相転移の定量化・精密化に大変有効であり、高密度液体の時空構造解析のみならず、非平衡相転移現象の定量化にも大変有効である。
- (c). 「Transition Path Sampling (TPS)法と時空アンサンブル解析」: 高密度粒子系におけるガラス・ジャミング転移の解明は、重要な研究課題となっているが、動的ファシリテーション(Dynamic Facilitation(DF))理論は極めて独創的である。この理論では、粒子の空間配置や密度場から構築された従来の理論とは一線を画し、時間を含めた「時空間」での粒子の軌道に着目し、時空間で定義される物理量を基礎に、新しい統計力学理論(時空アンサンブル: s-ensemble)を構築した。稀に起こる大きな粒子変位(レアイベント)の探索に TPS 法(MC 法を粒子の軌道へ拡張: D. Chandler グループ(U. C. Berkeley)が開発)を用い、時空間上で生じる非平衡相転移(1 次転移)を見出した。TPS 法は拡張アンサンブルであるが、軌道を Sampling する点から計算コストがかかる。研究代表者は、Chandler 研究室(U. C. Berkeley)に長期滞在時に Event-Driven MD と TPS 法をハイブリッドした方法論を開発した。
- (d). 「剛体多面体系の高速接触判定法」: Isobe&Krauth(2015)の論文に刺激され、M. Engel (FAU, Germany)らが剛体球の「融解過程」において、従来法、ECMC 法に加え、衝突則を考慮する新しい方法論(Newtonian Event-Chain MC (NEC))を提案し、拡散や平衡緩和で高速計算が可能となることを示した(Klement&Engel, JCP, 150, 170108, (2019))。また、剛体球でなく剛体多面体では、複雑な形状同士の衝突判定が必要となり計算は困難である。XenoSweep 法(Klement&Lee&Anderson&Engel, JACS, 2021)は、「凸多面体同士のミンコフスキー差が原点を含む」=「接触している」を利用した GJK 法(1988)をさらに発展させ、衝突予測と移動距離を高速に求める画期的な方法論である。これらを剛体多角形系へ適用した。今後、CG、ロボット工学、粉体系の動力学など広範な分野での応用が期待される。

#### 4. 研究成果

本プロジェクトでは、分子シミュレーションで得られた大規模な粒子の軌道データの解析を行うため、研究遂行に必要な高速計算機クラスター環境の整備を行った。研究期間中に、高並列度的高速計算機を導入し計算機環境を整え、広範囲なパラメーター空間でのデータの精密化を行った。国際共同研究では、研究打ち合わせや情報の交換をより円滑に行う必要がある。コロナ禍において海外の研究者との直接対面による議論が困難となったため、高速ネットワーク環境を用いた研究環境構築を積極的に遂行した。研究プロジェクト期間において行った研究活動を以下にまとめる。

1. 「分子の局所構造解析の方法論開発」  
高密度多成分剛体円板系において、従来の最近接粒子判定法である SANN 法を高次へ拡張ならびに高速化したアルゴリズムを開発した (2D extended SANNex)。また、2 次元高密度多成分剛体球系 (2 成分ガラス系を含む)において、単純で厳密な局所的自由体積計算法(NELF-A 法)を開発した。この手法では、高次近接粒子も含めた構成粒子群候補から、自由体積に寄与する判別条件を効率よく見出し、従来の自由体積計算法や圧力計算法との比較検証を行った。成果は、原著論文(J. Chem. Phys. (2024))にて公表した。また応用例として、各自由体積の幾何中心から Inherent (jammed) 構造を見出す方法論を開発した。また、自由体積の異方性 (フリーエネルギー) と高密ガラス系の Hopping 連鎖運動の方向の相関関係について系統的に調べた。
2. 「平衡緩和」  
非平衡から平衡状態への緩和(平衡緩和)の基本原理解の拡張を目的とし、その微視的メカニズムを調べるため、高密度 2 次元剛体球系 Alder 転移点近傍の融解過程に着目し、系を均質的に膨張させた後の応答に関して、Event-Driven 分子動力学法で各物理量の緩和時間を調べた。予想に反し、結晶相よりも共存相からの融解過程の物理量の平衡緩和が著しく遅く(異常緩和)、局所密度の空間不均一性と相関があることを見出した(EPJ Web of Conferences

(2021)にて公表) .また ,EDMD の成果を基に ,様々なイベント駆動アルゴリズムにおける , ECMC 法や NEC 法について ,緩和過程や拡散特性の効率性の違いに着目し ,微視的機構を系統的に調べた .ECMC 法系列ではイベント鎖長が効率や緩和に強く依存し ,サンプリングの空間不均一性が効率に大きな影響を与えることが判明した(Journal of Physics: Conference Series (2022)にて公表) . NEC では ,液相での拡散や結晶相からの融解で明確な「平衡緩和」効率の優位性が確認された .また固液相転移点(Alder 転移点以上)の高密度系の融解過程や拡散特性 , Hopping 拡散 (緩和) においても優位性があり ,全密度領域で NEC 法の有用性が確認できた (出版準備中) .次に ,粒子の異方性 (剛体多角形) の影響を調べるため ,剛体多面体系を解析する高速な方法論として ,並進平衡緩和に NEC 法 ,接触判定に XenoSweep 法を導入し ,高密度剛体多角粒子系の相図を作成した .粒子の異方性を考慮した新しい配向秩序変数を提案し ,各相の特徴づけを行った(第 29 回交通流と自己駆動粒子系シンポジウム論文集(2024)にて公表) .

3. 「高密度構造ガラス系のホッピング連鎖運動とファシリテーション」

日中 (香港) 国際共同研究を遂行し ,重要な分子の微視的素過程を発見した .従来に比べ桁違いに長時間で精密なコロイド実験 (香港・深セン研究グループ) により ,コロイド実験で個々の分子の動きを長時間追跡した結果 ,(A) 数粒子距離程度の領域に断片的に分布する小さな空隙「準空隙」が協働促進し大きな空隙が生まれ輸送され ,「ひも状ホッピング連鎖運動」を駆動する ,(B) 「活動分子」のコア状のドメイン領域の協調運動は ,時間分解能をあげるとホッピング連鎖運動に分解される ,(C) ホッピング連鎖は高確率で反転し揺り戻し運動が生じる ,ことが判明した .これらの新事実は分子シミュレーションで検証され ,成果は Phys. Rev. Lett. (2020)に公表した .またアウトリーチとして ,名工大からプレスリリースが刊行された「分子の「ファシリテーション」実験でもとらえた! - 準空隙で駆動されるガラス形成物質の神秘を解明 - 」 (<https://www.nitech.ac.jp/news/press/2020/8646.html>) 次に ,ガラス転移点近傍の準空隙駆動「ひも状のホッピング連鎖」協調運動の待ち時間分布のべき乗則理論を等配置アンサンブルを用いた 2 成分剛体円板系シミュレーションで検証した .連続するホップ素過程相関を計算する方法論を導入した結果 ,高密度で待ち時間が増大し再帰運動が支配的となった .ガラス転移点近傍の高密度ではホッピング運動自体がレアイベントとなるため ,統計性確保のため ,平衡状態から粒子を 1 つならびに複数取り除き ,Cavity を生成させることでホップ運動を駆動させる Cavity 駆動アンサンブルの方法論を確立し ,待ち時間のべき乗則理論を検証した .これらの成果は ,国際会議 9IDMRCS などにて公表した .

4. 「排除体積効果をもつ自己駆動粒子系の流れと相図」

排除体積効果と非平衡流の協働現象を調べるため用い高密度剛体円板の自己駆動粒子 (Vicsek) 系の相図を作成し ,相転移点のシフトと微視的機構を調べた (第 28 回交通流と自己駆動粒子系シンポジウム論文集にて公表) .またアクティブブラウン粒子流で生じる非自明な結晶・ガラス化現象の微視的機構を調べた (公表準備中) .

研究プロジェクト期間の研究業績(まとめ)は ,図書(分担執筆) 1 ,論文 (解説記事含む) 7 ,招待・依頼講演 2 ,国際会議 21 ,国内会議 29 ,研究成果のアウトリーチ 1 件であった .

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 6件）

1. 著者名 白井知樹, 麦田大悟, 磯部雅晴	4. 巻 29
2. 論文標題 Newtonian Event-Chainモンテカルロ法を用いた 剛体三角粒子系の相転移	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 第29回 交通流と自己駆動粒子系 シンポジウム 論文集	6. 最初と最後の頁 49-52
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 村瀬信明, 磯部雅晴	4. 巻 28
2. 論文標題 剛体円板を用いた自己駆動粒子系の相転移点シフト	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 第28回 交通流と自己駆動粒子系 シンポジウム論文集	6. 最初と最後の頁 9-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Mugita Daigo, Isobe Masaharu	4. 巻 249
2. 論文標題 Non-equilibrium response and slow equilibration in hard disk systems	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 EPJ Web of Conferences	6. 最初と最後の頁 14004 ~ 14004
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1051/epjconf/202124914004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Banno H, Mugita D, Isobe M	4. 巻 2207
2. 論文標題 Diffusional characteristics of a Newtonian event-chain Monte Carlo in hard disk systems	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012011 ~ 012011
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/2207/1/012011	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kitaya K, Isobe M	4. 巻 2207
2. 論文標題 Molecular dynamics study of a nano-scale $\gamma$ -type Stirling engine	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012006 ~ 012006
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/2207/1/012006	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 磯部 雅晴	4. 巻 76
2. 論文標題 Berni J. Alder博士を偲んで	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 日本物理学会誌	6. 最初と最後の頁 236 ~ 236
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11316/butsuri.76.4_236	査読の有無 無
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 C.-T. Yip, M. Isobe, C.-H. Chan, S. Ren, K.-P. Wong, Q. Huo, C.-S. Lee, Y.-H. Tsang, Y. Han, C.-H. Lam	4. 巻 125
2. 論文標題 Direct Evidence of Void-Induced Structural Relaxations in Colloidal Glass Formers	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 258001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.125.258001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計52件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 22件)

1. 発表者名 麦田大悟, 宗野和祥, 磯部雅晴
2. 発表標題 剛体円板ガラス系の深層過冷却液体状態におけるホッピング解析 自由体積とinherent 構造
3. 学会等名 日本物理学会2024年春季大会オンライン
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 齋藤稜太, 華井凌平, 礪部雅晴
2. 発表標題 Cavity駆動アンサンブルを用いた剛体円板ガラス系における 深層過冷却状態のホッピング予測
3. 学会等名 日本物理学会2024年春季大会オンライン
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 北川遼, 村瀬信明, 麦田大悟, 礪部雅晴
2. 発表標題 2 次元自己駆動粉体気体系の自己組織化と空間不均一性
3. 学会等名 日本物理学会2024年春季大会オンライン
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 徳吉泰紀, 白井知樹, 麦田大悟, 礪部雅晴
2. 発表標題 Newtonian Event-Chain モンテカルロ法を用いた 自己駆動剛体多角粒子系の相転移
3. 学会等名 日本物理学会2024年春季大会オンライン
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 中村泰晴, 村瀬信明, 礪部雅晴
2. 発表標題 異なる近接相互作用を用いたVicsekモデル系における協働現象
3. 学会等名 日本物理学会2024年春季大会オンライン
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 岩瀬晃司、磯部雅晴
2. 発表標題 障害物周りのアクティブブラウン粒子流の渦形成と結晶化
3. 学会等名 第37回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 華井 凌平, Cho-Tung Yip, Chi-Hang Lam, 磯部 雅晴
2. 発表標題 2成分剛体円板ガラス系における深層過冷却状態での 局所構造とホッピング予測
3. 学会等名 第37回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 稲葉和香, 岩瀬晃司, 磯部雅晴
2. 発表標題 多分散自己駆動粒子系におけるアクティブガラスと非平衡相転移
3. 学会等名 第37回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 白井知樹, 麦田大悟, 磯部雅晴
2. 発表標題 Newtonian Event-Chain モンテカルロ法を用いた2次元剛体多角粒子系の相転移
3. 学会等名 第29回交通流と自己駆動粒子系のシンポジウム
4. 発表年 2023年



1. 発表者名 Taisei Nakamura, Masaharu Isobe
2. 発表標題 Cooperative phenomena in active matter systems with alternative interaction of neighbors
3. 学会等名 The 9th International Conference on Discrete Element Methods (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Daigo Mugita, Kazuyoshi Souno, Hiroaki Koyama, Masaharu Isobe
2. 発表標題 Simple and efficient methods on local structure analysis in dense poly-disperse hard disk systems
3. 学会等名 The 9th International Conference on Discrete Element Methods (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Tomoki Shirai, Daigo Mugita, Masaharu Isobe
2. 発表標題 Diffusional characteristics of a Newtonian Event-Chain Monte Carlo in hard polygon systems
3. 学会等名 The 7th International Soft Matter Conference (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Nodoka Inaba, Koji Iwase, and Masaharu Isobe
2. 発表標題 Active glass transition in poly-disperse self-propelled particle systems
3. 学会等名 The 7th International Soft Matter Conference (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Cho-Tung Yip, Chor-Hoi Chan, Masaharu Isobe, and Chi-Hang Lam
2. 発表標題 Quasivoid-Induced Structural Relaxation in Colloidal Glass Formers: Microscopic origin of stringlike Motions
3. 学会等名 9IDMRCs (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ryohei Hanai, Cho-Tung Yip, Chi-Hang Lam, Masaharu Isobe
2. 発表標題 Prediction of a Trigger of Hopping Motion in Deeply Supercooled Liquid of Binary Hard Disk Systems
3. 学会等名 9IDMRCs (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Motoki Wakita, Ryohei Hanai, Yuito Kakihara, Cho-Tung Yip, Chi-Hang Lam, Masaharu Isobe
2. 発表標題 Statistical properties of Microstring Activation in Deeply Supercooled Liquids of Binary Hard Disk Systems
3. 学会等名 9IDMRCs (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Daigo Mugita, Kazuyoshi Souno, Hiromasa Koyama, Masaharu Isobe
2. 発表標題 Free volume estimator (NELF-A) in dense poly-disperse hard disk systems --- local structure analysis on pressure and inherent structure
3. 学会等名 28th International Conference on Statistical Physics (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Koji Iwase, Masaharu Isobe
2. 発表標題 Karman Vortex around Obstacle with Active Brownian Particles
3. 学会等名 CCP2023 - 34th IUPAP Conference on Computational Physics (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Daigo Mugita, Kazuyoshi Souno, Hiromasa Koyama, Masaharu Isobe
2. 発表標題 Free volume estimator (NELF-A) in dense poly-disperse hard disk systems --- local structure analysis on pressure and inherent structure
3. 学会等名 CCP2023 - 34th IUPAP Conference on Computational Physics (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Daigo Mugita, Masaharu Isobe
2. 発表標題 Efficiency of Newtonian Event-Chain Monte Carlo in dense hard disk systems
3. 学会等名 33rd IUPAP Conference on Computational Physics (Online) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kazuyoshi Souno, Daigo Mugita, Masaharu Isobe
2. 発表標題 Simple method on free area calculation using the intersection of excluded volume in poly-disperse hard disk systems
3. 学会等名 33rd IUPAP Conference on Computational Physics (Online) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 宗野和祥、麦田大悟、磯部雅晴
2. 発表標題 新しい自由体積計算法(NELF-A法)を用いた高密度分子系の統計的解析
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 麦田大悟, 磯部雅晴
2. 発表標題 高密度2次元剛体球系におけるNewtonian Event-Chainモンテカルロ法の拡散特性
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 麦田大悟, 磯部雅晴
2. 発表標題 Newtonian Event-Chainモンテカルロ法の平衡緩和 –高密度2次元剛体球系で生じるホッピング鎖の拡散特性–
3. 学会等名 第10回ソフトマター研究会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 村瀬信明, 磯部雅晴
2. 発表標題 剛体円板を用いた自己駆動粒子系の相転移シフト
3. 学会等名 第28回交通流・自己駆動粒子系シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 麦田大悟, 礪部雅晴
2. 発表標題 Newtonian Event-Chainモンテカルロ法の平衡緩和 -高密度2次元剛体球系で生じるホッピング鎖の拡散特性-
3. 学会等名 第36回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 礪部雅晴
2. 発表標題 剛体球系の相転移 - アルダー転移と分子シミュレーションの発展 -
3. 学会等名 2022年度理学談話会 (計算科学分野) 金沢大学 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Nobuaki Murase, Taisei Nakamura, Masaharu Isobe
2. 発表標題 Anomalous phase transition in self-propelled hard disk systems
3. 学会等名 Japan-France joint seminar "Physics of dense and active disordered materials" (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Daigo Mugita, Kazuyoshi Souno, Hiromasa Koyama, Masaharu Isobe
2. 発表標題 Local structure analysis on pressure and inherent structure using the free volume estimator (NELF-A) in dense poly-disperse hard disk systems
3. 学会等名 Japan-France joint seminar "Physics of dense and active disordered materials" (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Koji Iwase, Masaharu Isobe
2. 発表標題 Karman vortex around the obstacle with Active Brownian particles
3. 学会等名 Japan-France joint seminar "Physics of dense and active disordered materials" (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 白井知樹, 麦田大悟, 磯部雅晴
2. 発表標題 Newtonian Event-Chainモンテカルロ法による剛体多角粒子系の拡散特性
3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会オンライン
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 脇田元樹, 華井凌平, 柿原唯人, 磯部雅晴
2. 発表標題 2成分剛体円板ガラス系におけるHopping鎖運動の統計則
3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会オンライン
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 麦田大悟, 宗野和祥, 児山弘昌, 磯部雅晴
2. 発表標題 高速自由体積計算法 (NELF-A) を用いた高密度多分散分子系の局所構造解析 - 圧力分布とInherent構造 -
3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会オンライン
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Daigo Mugita, Masaharu Isobe
2. 発表標題 Non-equilibrium response and slow equilibration in hard disk systems
3. 学会等名 Online workshop on ECMC and related subjects (Online) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Masaharu Isobe
2. 発表標題 Equilibration in Event-Chain MC, Event-Driven MD, and other methods
3. 学会等名 Online workshop on ECMC and related subjects (Online) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Daigo Mugita, Masaharu Isobe
2. 発表標題 Non-equilibrium response and slow equilibration in hard disk systems
3. 学会等名 Powders & Grains 2021 (Buenos Aires (Argentina, VIRTUAL)) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuito Kakiyama, Hiroaki Koyama, Masaharu Isobe
2. 発表標題 Statistics of the hopping motion approaching the glass transition in the binary hard disk systems
3. 学会等名 XXXII IUPAP Conference on Computational Physics (Coventry University, Coventry, UK (Online)) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hirotaka Banno, Daigo Mugita, Masaharu Isobe
2. 発表標題 Diffusional characteristics of Newtonian Event-Chain Monte Carlo in hard disk systems
3. 学会等名 XXXII IUPAP Conference on Computational Physics (Coventry University, Coventry, UK (Online)) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Daigo Mugita, Masaharu Isobe
2. 発表標題 Efficiency of equilibration with three event-based algorithms in hard disk melting
3. 学会等名 XXXII IUPAP Conference on Computational Physics (Coventry University, Coventry, UK (Online)) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kaito Kitaya, Masaharu Isobe
2. 発表標題 Molecular dynamics study on the nano-scale beta-type Stirling engine
3. 学会等名 XXXII IUPAP Conference on Computational Physics (Coventry University, Coventry, UK (Online)) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 麦田大悟, 磯部雅晴
2. 発表標題 2次元剛体球系Alder転移近傍における平衡緩和 融解過程の方法論依存性
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会 (オンライン)
4. 発表年 2021年



1. 発表者名 村瀬信明, 磯部雅晴
2. 発表標題 剛体円板を用いた自己駆動粒子系の相転移
3. 学会等名 第 35 回分子シミュレーション討論会 (オンライン)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 宗野和祥, 磯部雅晴
2. 発表標題 高次近接粒子を用いた自由体積計算法と構造ガラス系への応用
3. 学会等名 第 35 回分子シミュレーション討論会 (オンライン)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 阪納洋啓, 麦田大悟, 磯部雅晴
2. 発表標題 Newtonian Event-Chain モンテカルロ法の 平衡緩和と拡散特性
3. 学会等名 第 35 回分子シミュレーション討論会 (オンライン)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 麦田大悟, 阪納洋啓, 磯部雅晴
2. 発表標題 イベント鎖モンテカルロ法の平衡緩和 - 拡散特性の方法論依存性 -
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 村瀬信明, 磯部雅晴
2. 発表標題 剛体円板を用いた自己駆動粒子系の空間相関と相転移
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 宗野和祥, 柿原唯人, 磯部雅晴
2. 発表標題 高次近接粒子を用いた新しい自由体積計算法と構造ガラス系への応用
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 柿原唯人, 兎山弘昌, 磯部雅晴
2. 発表標題 2成分剛体円板ガラス系におけるHopping鎖運動と準空隙分布の相関
3. 学会等名 第34回分子シミュレーション討論会 (オンライン開催)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 麦田大悟, 磯部雅晴
2. 発表標題 2次元剛体球系Alder転移近傍における平衡緩和 - パルス膨張に対する非平衡応答 -
3. 学会等名 第34回分子シミュレーション討論会 (オンライン開催)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 柿原唯人, 児山弘昌, 礒部雅晴
2. 発表標題 2成分剛体円板ガラス系におけるHopping鎖運動と準空隙分布の相関
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 麦田大悟, 礒部雅晴
2. 発表標題 2次元剛体球系Alder転移近傍における非平衡応答と遅い緩和
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 北谷海斗, 礒部雅晴
2. 発表標題 型スターリングエンジンの分子シミュレーション 安定稼働する温度差と熱効率
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 礒部 雅晴 他 (分担執筆)(中村 浩、山中淳平 監修)	4. 発行年 2020年
2. 出版社 シーエムシー出版	5. 総ページ数 251
3. 書名 コロイド結晶の形成とその応用	

〔産業財産権〕

〔その他〕

分子の「ファシリテーション」実験でもとらえた！ 準空隙で駆動されるガラス形成物質の神秘を解明  
<https://www.nitech.ac.jp/news/press/2020/8646.html>

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			
中国	香港理工大学	ハルビン工業大学深セン校	香港科技大学	
フランス	エコールノルマルシュペリール			