

研究種目：基盤研究 (C)

研究期間：2006～2009

課題番号：18540363

研究課題名 (和文) 複雑系における過冷却液体およびガラス転移の統計物理学的研究

研究課題名 (英文) A statistical-physics study of supercooled liquids and glass transitions in complex systems

研究代表者

徳山 道夫 (TOKUYAMA MICHIO)

東北大学・原子分子材料科学高等研究機構・教授

研究者番号：40175477

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・数理物理・物性基礎

キーワード：ガラス転移, 複雑系, 非線形緩和現象

1. 研究計画の概要

本研究課題の目的は、様々な複雑系において観測されるガラス転移現象のメカニズムを理解する為の統計物理学的基礎理論の構築である。現在下記が遂行中である。

- (1) スーパーコンピュータによる、様々な異なる体系での大規模計算機実験。
- (2) 研究代表者により最近提案された分子場理論による、実験およびシミュレーションデータの統一的観点からの解析
- (3) 森射影演算子法に代わる、徳山-森射影演算子法を用いた新しいモード結合理論の構築。

2. 研究の進捗状況

18年度(2006):

- (1) 様々な体系で見られるガラス転移現象のメカニズムを理解する為の、原子・分子系およびコロイド分散系に対する分子場理論の提唱。
- (2) 分子場理論を検証する為に、剛体球流体系に対する大規模計算機実験を遂行し、理論の正当性を実証した。

19年度(2007):

- (1) 分子場理論に基づき、長時間自己拡散係数の値が同じであれば、全く異なった体系のダイナミクスは完全に同じであるという普遍的法則を提案した。
- (2) 普遍的法則を検証する為に、二成分レナード・ジョーンズポテンシャル系に対する大規模計算機実験を遂行し、先に得た、剛体球流体との間に普遍的法則が成立つことを示した。

20年度(2008):

- (1) 普遍的法則を検証する為に、バルク金属

ガラス $\text{Cu}_{60}\text{Ti}_{20}\text{Zr}_{20}$ に対する大規模計算機実験を遂行し、先に得られている異なる体系との間に完全に普遍的法則が成立つことを示した。

- (2) 更に複雑な体系に対しても普遍的法則が成立つことを示す為に、ネットワーク形成物質 SiO_2 に対する大規模計算機実験を遂行し、同様に普遍性を実証した。
- (3) 森射影演算子法に基づく従来のモード結合理論がベータ緩和過程で正しく現象を記述出来ないことを検証する為に、二成分レナード・ジョーンズコロイド分散系に対する大規模計算機実験を遂行し、ガラス転移近傍では全く現象を記述出来ないことを示した。
- (4) 前述の計算機実験の結果を踏まえて、森射影演算子法に基づく従来のモード結合理論に代わる、徳山-森射影演算子法による新しいモード結合理論を提案。
- (5) コロイド分散系における自己拡散を記述する新しいモード結合理論を提案し、コロイド分散系に対する分子場理論の第一原理からの導出の可能性を示した。
- (6) 分子系における自己拡散を記述する新しいモード結合理論を提案し、金属ガラスや SiO_2 などのネットワーク形成物質系などの分子系に対する分子場理論の第一原理からの導出の可能性を示した。

3. 現在までの達成度

- ① 当初の計画以上に進展している。
ガラス転移近傍での分子場理論の提案とそれに基づく普遍的法則の発見が、研究の統一的方向性を決定し、その観点に基づいて

様々な体系での計算機実験の遂行による統一的検証が可能となり、新たな理論構築の足掛かりを提供したことが進展の大きな理由の一つであると考えられる。

4. 今後の研究の推進方策

- (1) 徳山-森射影演算子法に基づく新しいモード結合理論を完成し、シミュレーションによる理論の検証を行う。
- (2) 分子場理論で提案され、実験や計算機実験で検証された、長時間自己拡散係数の第一原理からの導出を試みる。
- (3) 高分子系など更に複雑な体系に対するスーパーコンピュータによる大規模計算機実験を遂行する。

5. 代表的な研究成果

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 8 件)

- (1) M. Tokuyama, A statistical-mechanical theory of self-diffusion in glass-forming liquids, *Physica A*, 査読有, 387, 2008, 5003-5011.
- (2) M. Tokuyama and Y. Kimura, Test of the mode-coupling theory near the colloidal glass transition by extensive Brownian-dynamics simulations, *Physica A*, 査読有, 387, 2008, 4749-4754.
- (3) M. Tokuyama, A statistical-mechanical theory of self-diffusion in colloidal suspensions--application to colloidal glass transitions, *Physica A*, 査読有, 387, 2008, 4015-4032.
- (4) M. Tokuyama, Comparison of the Tokuyama-Mori type projection operator method to that of Mori type near the glass transition, *Physica A*, 査読有, 387, 2008, 1926-1936.
- (5) M. Tokuyama, T. Narumi, and E. Kohira, Mapping from a fragile glass-forming system to a simpler one near their glass transitions, *Physica A*, *Physica A*, 査読有, 385, 2007, 439-455.
- (6) M. Tokuyama, Similarities in diversely different glass-forming systems, *Physica A*, 査読有, 378, 2007, 157-166.
- (7) M. Tokuyama and Y. Terada, How Different is a Hard-Sphere Fluid from a Suspension of Hard-Sphere Colloids near the Glass Transitions, *Physica A*, 査読有, 375, 2007, 18-36.

- (8) M. Tokuyama, Mean-Field Theory of Glass Transitions, *Physica A*, 査読有, 364, 2006, 23-62.

[学会発表] (計 4 件)

- (1) 徳山道夫, Self-diffusion in multi-component glass-forming systems, WIP Annual Workshop 2009, 2009年3月3日, 宮城蔵王
- (2) 徳山道夫, Universal Behavior near the Glass Transitions in Fragile Glass-Forming Systems, The 5th International Workshop on Complex Systems, 2007年9月25日, 仙台
- (3) 徳山道夫, Mean-Field Theory of Glass Transitions, 2006年10月9日, Portland, Maine, USA
- (4) 徳山道夫, Mean-Field Theory of Glass Transitions, Conference on Innovative Nanoscale Approach to Dynamic Studies of Materials, 2006年1月9日, 沖縄

[図書] (計 2 件)

- (1) M. Tokuyama, I. Oppenheim, and H. Nishiyama, American Institute of Physics CP982, Complex Systems, 2008, 1-829.
- (2) M. Tokuyama and S. Maruyama, American Institute of Physics CP832, Flow Dynamics, 2006, 1-604.

[その他]

ホームページ

<http://www.ifs.tohoku.ac.jp/tokuyama-lab/index.html>