

平成 22 年 5 月 18 日現在

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-mechanical study of supercooled liquids and the glass transition 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

研究成果の概要 (和文)：

様々なガラス形成物質において見られるガラス転移近傍における特徴的な現象を最近研究代表者が提案した平均場理論に基づく統一的観点から解析し、次の二種類の“普遍則”を見出した。

- (1) 異なる系において、それぞれ任意の原子を選び、それらの自己拡散係数が同じ値を取るときは、それぞれの原子のダイナミクスは全く同じ式 (即ち、マスター方程式) によって記述される、原子の種類に依らない。
- (2) 任意の原子の自己拡散係数は、その原子がどのようなことなる他の原子と結合していても、同じ式 (マスター方程式) に従う。

研究成果の概要 (英文)：

Analyzing the characteristic features seen in various glass-forming liquids near the glass transition from a unified point of view based on the mean-field theory recently proposed by the present researcher, Tokuyama found the following important two types of universalities:

- (1) If the self-diffusion coefficients of different atoms in two different systems have the same value, the dynamics of each atom obeys the same master equation.
- (2) The self-diffusion coefficient of atom obeys a master equation, even if it belongs to different multi-component liquids.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	900,000	0	900,000
2007年度	800,000	240,000	1,040,000
2008年度	800,000	240,000	1,040,000
2009年度	800,000	240,000	1,040,000
年度			
総計	3,300,000	720,000	4,020,000

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：統計物理学

1. 研究開始当初の背景

研究代表者は2000年から2006年初頭にかけてコロイド系の実験や計算機実験の結果を良く記述し得る平均場理論を提案してきた。この理論は、さらに原子・分子系へも拡張され、様々なガラス形成物質に対する計算機実験の液体状態での結果を旨く記述することが示された。この理論の特徴は、異なった様々な体系のガラス転移近傍での振舞を統一的観点から分析・議論出来ることにある。それで、この理論に基づいて、ガラス転移近傍での普遍則を見出すことが必然的な課題となっていた。

2. 研究の目的

様々な体系のガラス転移近傍で見られる現象に対して普遍則を見出すこと。

3. 研究の方法

(1) 射影演算子法を使い第一原理から基礎方程式を導出する。

(2) 平均場理論の基づいて統一的観点からデータ分析を行う。

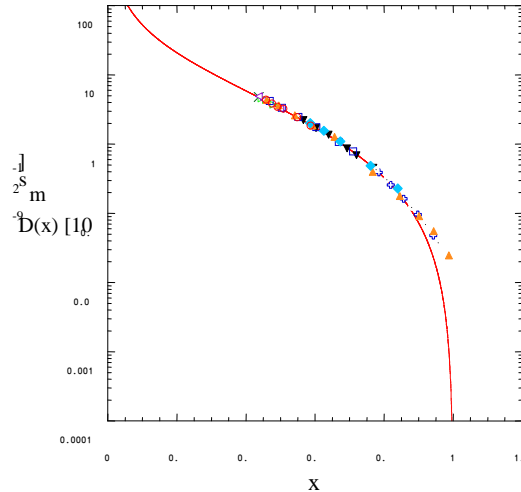
4. 研究成果

研究代表者が提案した、平均場理論による統一的観点からの、異なる様々な体系の計算機実験や実験のデータ分析に依り、次の二つの重要な普遍則の存在が確認された。

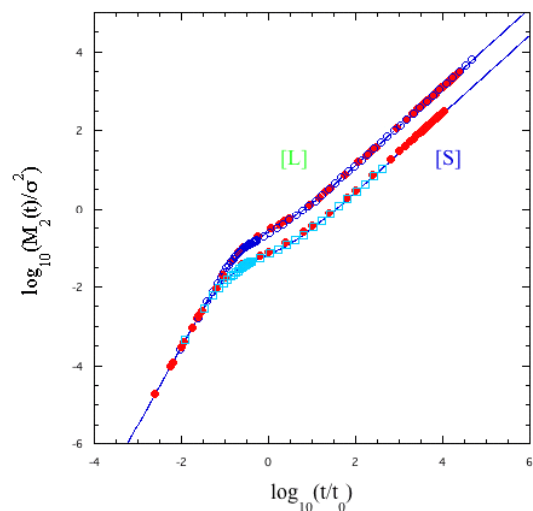
(1) 任意の原子の自己拡散係数 D は液体領域では下記のマスター方程式に従う。

$$D(x) = x(1-x)^{-2}/\kappa \quad [1]$$

ここに κ は原子間の斥力により与えられる定数で、原子が同じ場合はおなじである。 x は無次元化されたコントロールパラメータで、例として、コントロールパラメータが温度 T の場合は、 $x = T_c/T$ である。 T_c は見かけ上の特異点である。即ち、原子には原子特有のマスター方程式が存在し、その原子が他のどのような原子と結合していても結果は変わらないということである。簡単な例題として、単体 Ni の従う拡散係数と多成分系 ZrTiCuNiBe に含まれる Ni のそれとは全く同じ方程式に従うということである。図では、ニッケルを含む様々な系 (Ni, NiZr, AlNi, NiP, PdNiP, PdNiCuP, ZrTiCuNiBe) で観測された Ni の拡散係数 (実験値シンボル) と理論式 [1] とが示されている。実験値が式 [1] (実線) からずれ始めるところから過冷却状態が始まっていることが見て取れる。



(2) もし異なる原子で観測されたそれぞれの拡散係数 $D(x)$ が同じ値を持つ場合は、それぞれの原子のあらゆるダイナミクスは全く同じマスター方程式に支配される。簡単な例題として、1原子の平均二乗変位 $M_2(t)$ や平均四乗変位 $M_4(t)$ に対してこの普遍性が確かめられている。図では、 $M_2(t)$ に対する代表例として、同じ拡散係数の値を持つ温度での、金属ガラス $\text{Cu}_{60}\text{Ti}_{20}\text{Zr}_{20}$ 液体と SiO_2 液体の計算機実験の結果 (シンボル) が、液体状態 [L] と過冷却状態 [S] の二つの状態で比較されている。ともに平均場理論により提案されているマスター方程式 (実線) に一致していることが分かる。



5. 主な発表論文等

(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 17 件)

1. M. Tokuyama, A statistical-mechanical theory of slow dynamics near the glass transition, 査読有, *Physica A* **389**, 951-969 (2010).
2. Y. Terada and M. Tokuyama, Lateral Diffusion of Magnetic Colloidal Chains Confined in Thin Films, 査読有, *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 034802-1-6 (2010).
3. Y. Terada and M. Tokuyama, Universalities in the dynamics of suspensions of magnetic colloidal chains confined in thin films, 査読有, *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 084803-1-6 (2009).
4. M. Tokuyama, Universality in multicomponent glass-forming liquids near the glass transition, 査読有, *Phys. Rev. E* **80**, 031503-1-031503-12 (2009).
5. M. Tokuyama, Self-diffusion in multi-component glass-forming systems, 査読有, *Physica A* **388**, 3083-3092 (2009).
6. Takayuki Narumi and Michio Tokuyama, Study of spatial correlation functions near the glass transition by molecular dynamics simulations, 査読有, *J. Crystal Growth* **311**, 707-710 (2009).
7. Takayuki Narumi and Michio Tokuyama, Simulation study of spatial-temporal correlation functions in supercooled liquids, 査読有, *Philosophical Magazine* **88**, 33-35 (2008).
8. M. Tokuyama, Universal behavior near the Glass Transitions in Fragile Glass-Forming Systems, 査読有, *American Institute of Physics CP* **982**, 3-13 (2008).
9. M. Tokuyama, A Statistical-Mechanical Theory of Self-Diffusion in Glass-Forming Liquids, 査読有, *Physica A* **387**, 5003-5011 (2008).
10. M. Tokuyama and Y. Kimura, Test of the mode-coupling theory near the colloidal glass transition by extensive Brownian-dynamics simulations, 査読有, *Physica A* **387**, 4749-4754 (2008).
11. M. Tokuyama, A Statistical-Mechanical Theory of Self-Diffusion in Colloidal Suspensions -- Application to the Colloidal Glass Transitions -, 査読有, *Physica A* **387**, 4015-4032 (2008).
12. M. Tokuyama, Comparison of the Tokuyama-Mori type projection operator method to that of Mori type near the glass transition, 査読有, *Physica A* **387**, 1926-1936 (2008).
13. M. Tokuyama, T. Narumi, and E. Kohira, Mapping from a fragile glass-forming system to a simpler one near their glass transitions, 査読有, *Physica A* **385**, 439-455 (2007).
14. M. Tokuyama, Similarities in diversely different glass-forming systems, 査読有, *Physica A* **378**, 157-166 (2007).
15. M. Tokuyama and Y. Terada, How Different is a Hard-Sphere Fluid from a Suspension of Hard-Sphere

- Colloids near the Glass Transitions, 査読有, Physica A **375**, 18-36 (2007).
16. M. Tokuyama and Y. Terada, Glass Transition and Re-entrant Melting in a Polydisperse Hard-Sphere Fluid, 査読有, American Institute of Physics CP 832, 26-36 (2006).
 17. M. Tokuyama, Mean-Field Theory of Glass Transitions, 査読有, Physica A **364**, 23-62 (2006).
[学会発表] (計 8 件)
 1. M. Tokuyama, Universality in diversely different glass-forming liquids, The 1st International Workshop on Glass Forming Systems, 2009年11月6日, 釜山, 韓国
 2. M. Tokuyama, A Statistical-Mechanical Theory of Slow Dynamics near the Glass Transition, The 6th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, 2009年8月31日, Rome, Italy
 3. M. Tokuyama, Slow Dynamics of Self-Diffusion in Multi-Component Glass Formers, The WPI Europe Workshop 2009年8月27日, Grenoble, France
 4. M. Tokuyama, Self-diffusion in multi-component glass-forming systems, The 2nd WPI Annual Workshop, 2009年3月3日, 宮城蔵王
 5. M. Tokuyama, 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
 6. M. Tokuyama, Mean-Field Theory of Glass Transitions, The 4th International Workshop on Complex Systems, 2007年1月10日, 仙台
 7. M. Tokuyama, Mean-Field Theory of Glass Transitions, 78th Annual Meeting of the Society of Rheology, 2006年10月8日, Portland, Maine, USA
 8. M. Tokuyama, Mean-Field Theory of Glass Transitions, Conference on Innovative Nanoscale Approach to Dynamic Studies of Materials, 2006年1月9日, 沖縄
 9. [図書] (計 2 件)
 1. Complex Systems, edited by M. Tokuyama, I. Oppenheim, and H. Nishiyama, American Institute of Physics CP **982**, 1-829 (2008).
 2. Complex Systems, edited by M. Tokuyama and S. Maruyama, American Institute of Physics CP 832, 1-604 (2006).[その他] ホームページ等
<http://www.ifs.tohoku.ac.jp/tokuyama-lab/index.html>
 6. 研究組織
 - (1) 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
 - (2) 研究分担者
寺田 弥生 (TERADA YAYOI)
東北大学・流体科学研究所・助教
研究者番号 : 20301814