

平成22年度学融合推進センター学融合研究事業 成果報告書

研究テーマ名称	ガラス転移現象におけるフラジリティの物理的起源の解明
応募事業区分	若手研究者研究支援事業
申請代表者氏名	金 鋼

○ 研究状況報告

本研究では金属、高分子、分子性液体などに共通して見られるガラス転移現象の普遍的声質について理論的研究をおこなった。特にガラス転移点近傍における粘性係数の温度依存性を特徴付けるフラジリティ(脆弱性)とよばれる性質の微視的な起源を解明することを目的とした。

そのために、フラジリティが極端に変化する多孔質系に拘束されたガラス系を取り上げ、そのモデル系に対する分子動力学シミュレーションを実行し、最新の液体論に基づく解析をおこなった。

○ 当該事業年度において達成された研究成果

細胞やミセル中の水分子の挙動など、空間的に拘束されたガラス転移のダイナミクスは学術的あるいは工学的問題として極めて重要な問題である。特に最近の実験やシミュレーションから空間拘束されるとともに脆弱性が **fragile** 的から **strong** 的へ大きく変化することが見出されている。本研究では、分子動力学シミュレーションで得られる情報から、液体論に基づいた理論解析をおこない、フラジリティの変化とその微視的起源の解明をおこなった。その結果、分子運動に動的な相関を伴う領域の増大とフラジリティが対応していることを明らかにした。

またさらに、ガラスに特徴的な動的相関領域の発生が、粘性係数と拡散係数の関係を示す Stokes-Einstein 則が破綻することに直接関与することを示した。

なお、2011年3月に第5回日本物理学会若手奨励賞を受賞した。

○ 本研究を基に発表した論文と掲載された雑誌名等のリスト (論文があれば添付)

“Slow dynamics, dynamic heterogeneities, and fragility of supercooled liquids confined in random media”, Kang Kim, Kunimasa Miyazaki, and Shinji Saito, *Journal of Physics: Condensed Matter*, in press (2011).

“Hidden slow time scale of correlated motions in supercooled liquids: Multi-time correlation analysis”, Kang Kim and Shinji Saito, *Journal of Non-Crystalline Solids* **357**, 371-375 (2011).

“Molecular dynamics studies of slow dynamics in random media: Type A-B and reentrant transitions”, K. Kim, K. Miyazaki, and S. Saito, *The European Physical Journal Special Topics* **189**, 135-139 (2010).

“Role of the Lifetime of Dynamical Heterogeneity in the Frequency-Dependent Stokes-Einstein Relation of Supercooled Liquids”, Kang Kim and Shinji Saito, *Journal of the Physical Society of Japan* **79**, 093601 (2010).