所属：香川高等専門学校機械工学科

分子シミュレーション・計算力学を用いた揺らぎと空間パターンに関する研究



氏名：	木村祐人／Yuto KIMURA	E-mail：	kimura-y@t.kagawa-nct.ac.jp
職名：	講師	学位：	博士(工学)
所属学会・協会：	日本機械学会，分子シミュレーション学会，日本計算工学会		

キーワード：	分子動力学法，ブラウン動力学法，ガラス転移，スピノーダル分解
技術相談 提供可能技術：	・分子動力学法を用いた相変化現象の解析 ・ブラウン動力学法を用いたコロイド分散系/複雑流体の解析 ・粒子法等を用いた計算力学解析

研究内容：ガラス転移点近傍の過冷却液体のスローダイナミクスに関する研究

単純な液体におけるガラス転移現象やスピノーダル分解等の相変化現象や，熱流体における輸送現象をミクロな視点から解明すべく，分子動力学法やブラウン動力学法を用いてモデル系のシミュレーションを行い，理論との比較を行っている．また，上記の研究テーマに取り組む中で自然界に多く存在する揺らぎと空間パターンの関係に興味を抱き，研究対象を広げるべく，粒子法を中心に各種計算手法の習得を進めている．以下にガラス転移に関する研究内容を述べる．

ガラス転移点近傍の過冷却液体にみられる非常にゆっくりとした緩和過程はスローダイナミクスと呼ばれる．温度が低下しガラス転移点に近づくにつれ，自己中間散乱関数に代表される密度揺らぎの相関が二段階緩和を生じるなど，通常の液体状態とは異なる非線形性の強い特徴的な振る舞いが見られる．相関関数の緩和時間はガラス転移点近傍で急激に増大し，粒子の配置が液体とほぼ同様であるにも関わらず，マクロには固体とみなせる状態になる．これがガラス状態である．ガラス転移点近傍のスローダイナミクスを説明する理論としてモード結合理論が知られている．モード結合理論は森-Zwanzig 型の射影演算子法を用いて導出される一般化ランジュバン方程式に近似を適用することで導出される．しかし，一般化ランジュバン方程式を導出する際の射影演算子法は森-Zwanzig 型以外にも存在することが知られている．我々はこの「もう一つの」射影演算子法を用いて導出されたモード結合理論を数値的に解き，既存の理論と比較を行った．その結果，既存の理論と同様にガラス転移点近傍のスローダイナミクスに対応する解が得られること，および既存の理論に比べ理論で予測される転移点がより現実の転移点に近くなることを確認した．
今後は理論間の比較に加え，モデル系のシミュレーションとの詳細な比較を行い，ガラス転移現象の理解を深めていきたいと考えている．

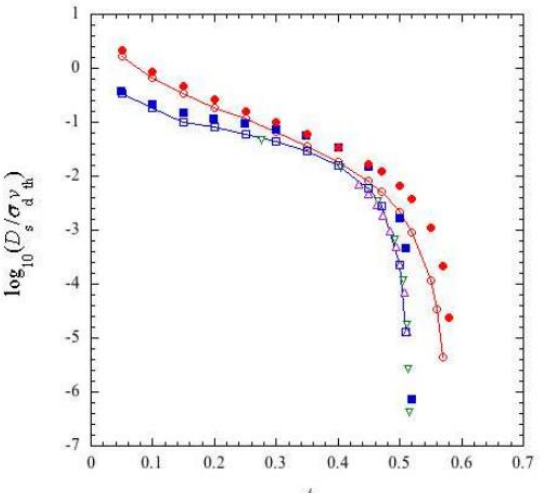


図 1: 剛体球系における拡散係数の体積分率依存性．

提供可能な設備・機器：

名称・型番（メーカー）	