

研究会報告

基研短期研究計画「構造不規則系におけるダイナミックス」報告

(1994年5月9日受理)

標記研究会が1994年11月18日(木)と19日(金)に、京都大学基礎物理学研究所で開催された。

液体やガラスなど構造不規則な系は、結晶に見られるような並進対称性、回転対称性をもたない。これまで、構造不規則系における原子配置の特徴を把握するため、X線・中性子回折実験、剛体球モデルによる検討、計算機シミュレーションによる解析等、種々の試みが為されてきた。しかし、系の電子状態とそれを反映した動的構造、ガラス形成過程における原子の個別運動と集団運動、臨界領域における密度及び濃度ゆらぎとクラスターの形成機構等、解明されるべき問題が山積している。

最近、世界各地で強力中性子源、高輝度放射光源が開発され、不規則系の静的・動的構造についての研究が急速な発展を遂げつつある。特に、アイソトープ置換法による中性子散乱、広範囲X線吸収微細構造法(E X A F S)、X線異常分散法等の部分構造解析法の進歩に伴い、混合系における特定原子周辺の化学的短範囲相関や中距離相関に関するデータが蓄積されている。また、中性子スピネコー法の開発、レーザー分光法の進歩により、広い時間領域での時空相関関数の測定が可能になり、ガラス転移点近傍での構造緩和の観測に成功している。更に、液体-気体臨界点近傍の流体水銀に見られる誘電率や熱電能の異常、高分子系の二液相分離に伴うパターン形成等、ゆらぎが本質的な役割を果たす興味ある現象が次々と発見されている。また、最近では、液体のマクロな振舞とミクロな性質の関連を浮き彫りにするため、ナノメートル・サイズの微小液滴の構造と物性を調べる試みも始められている。

一方、理論分野では、電子状態と原子配置の時間発展を追跡する画期的な計算機シミュレーション法がCar-Parrinelloにより提唱され、不規則系における空間荷電分布、短距離・中距離相関等を調べる新しい道が開かれ、シリコン、カーボン、セレン等の液体状態における原子間距離、結合角、二面角の原子配置の時間変化、振動状態密度等についての情報が得られている。ガラス転移については、Goetzeらのグループが、モード結合理論の立場から、動的密度関数の長時間緩和や α 型、 β 型の共鳴緩和の実験結果を説明している。しかし、このモード結合理論で記述される転移はガラス転移そのものというよりは、より高温で現れる過冷却液体の不安定化(エルゴード-非エルゴード転移)であるとの見方がある。これとは別に、トラッピング拡散モデルの立場から、この現象をガウス過程から非ガウス過程への移行として捉える理論も発表されている。

これらの実験的、理論的研究における共通の問題点は、経時的变化を行う不規則系の構造をどのように特徴づけるか、また、それが物理的性質にどのように反映されるかを明らかにすることである。これは、従来は静的側面に主たる関心が払われていた構造不規則系の研究に、全く新しい視点を切り開くことを意味し、理論的研究と実験的研究の密接な協力によって初めて可能となるものである。

上記の趣旨にそって、統計力学、計算機物理学、金属物理学、高分子工学等、諸分野の理論、実験研究者が一同に会して、

(1) 静的・動的構造と結合性、(2) ガラス形成、(3) ゆらぎとクラスター等に関する情報交換を行い、今日までの構造不規則系研究の成果を将来の発展に繋ぐことを目指して研究会を開催した。

プログラムは以下の通りであった。

研究会報告

11月18日(木)

座長：田村剛三郎

- 10:00 液体研究について
京大・理 遠藤裕久
10:30 準結晶の電子構造と電気伝導
東大・工 藤原毅夫

10:50-11:00 《Coffee Break》

座長：藤原毅夫

- 11:00 液体アルカリ金属の動的構造
広大・総合科学 星野公三
11:30 液体金属の動的相関関数と記憶関数
一分子動力学シミュレーション
広大・総合科学 下條冬樹
11:50 Prediction of Intrinsic Defects in Hydrogenated Amorphous Silicon
by ab initio Molecular Dynamics
電総研 織田 望、東北大・理 吉田 博
12:10 逆光電子分光法によるアモルファス半導体の伝導帯電子構造の研究
広大・理 細川伸也

12:30-13:30 《昼休み》

座長：田巻 繁

- 13:30 メカニカル・アロイングとカオス
京大・工 石原慶一、新宮秀夫
14:00 メカニカル・アロイングによるナノ結晶-アモルファス化固体構造変化
東北大・金研 鈴木謙爾、柴田 薫
14:20 金属クラスターの構造
甲南大・理 西岡英寿
14:40 非結晶金属の中距離構造と低エネルギー励起
東北大・金研 柴田 薫、水岡博志、祭 安邦、鈴木謙爾
15:00 金属ガラスにおける光学的フォノンモード
島根大・理 伊藤正樹

15:20-15:40 《Coffee Break》

座長：鈴木謙爾

- 15:40 アモルファス GeSe_2 の光誘起結晶化と中距離構造
阪大・理 邑瀬和生、松田 理
16:10 非晶質のダイナミックスと構造(中性子散乱からの新しいアプローチ)
神戸大・理 新井正敏
16:30 First-Principle Molecular Dynamics of Liquid Na
福井県立大 上田 顕
16:50 液体カルコゲナイドの過渡吸収スペクトル
一光誘起半導体-金属転移の可能性について

広大・総合科学 坂口佳史、田村剛三郎

17:10 Slow Dynamicsについて

慶大・理工 米沢富美子

17:50-20:00 《懇親会》

11月19日(金)

座長：小田垣 孝

9:00 高分子のガラス転移近傍のダイナミックス

京大・化研 金谷利治、梶 慶輔

9:30 熔融硝酸塩の中性子非弾性散乱

北大・理 加美山 隆、 東北大・金研 柴田 薫、鈴木謙爾

9:50 ガラス性液体における構造ゆらぎと不可逆的非線形緩和の温度ジャンプ法による特性化

東工大・理 藤森裕基、小國正晴

10:10 過冷液体、ガラス転移の β 緩和のコンピュータシミュレーション

金沢大・理 村中 正、高須昌子、樋渡保秋

10:30-10:50 《Coffee Break》

座長：小貫 明

10:50 ガラス転移の遅い緩和の理論

九大・理 小田垣 孝、 金沢大・理 樋渡保秋

11:20 超長時間分子動力学シミュレーションによる一般化された感受率 $\chi(\omega)$ の計算

金沢大・理 松井 淳、九大・理 小田垣 孝、

金沢大・理 樋渡保秋

11:40 ハードコアコロイド系における多分散性の効果

九大・理 森口一郎、川崎恭治、川勝年洋

12:10 On Sorption of Gases and Liquids in Glassy Polymers

名大・工 関本 謙

12:30-13:30 《昼休み》

座長：遠藤裕久

13:30 Fluids with State-Dependent Electronic Structure

東北大・金研(マルブルグ大) F. H e n s e l

座長：星野公三

14:10 流体水銀の臨界点近傍におけるクラスター形成

京大・理 八尾 誠

14:30 金属-アンモニア(アミン)溶液の性質

北大・理 中村義男

14:50 ストキャスティック輸送現象における多体効果

九大・理 柴田博史、和智勇治、小田垣 孝

15:10 ソフトパーコレーション系のダイナミックス

九大・理 和智勇治、小田垣 孝

研究会報告

15:30-15:50 《Coffee Break》

座長：八尾 誠

- 15:50 超臨界二酸化炭素流体の中性子回折及び分子動力学シミュレーション
東工大・総合理工 岡崎 進、岡田 勲、石井 亮
- 16:10 二液混合液体の臨界点近傍における音速
九大・教養 武田信一、乾 雅祝
- 16:30 Rayleigh-Brillouin散乱による二元系液体の動的構造因子
— 2相-1相臨界点近傍での挙動
新潟大・医短 川瀬俊為、新潟大・自然 丸山健二、
新潟大・理 田巻 繁

世話人：

氏 名	所属研究機関	氏 名	所属研究機関
遠藤 裕久	京大理	田村 剛三郎	広大総合
小田 垣孝	九大理	樋渡 保秋	金沢大理
小貫 明	京大理	藤原 毅夫	東大工
鈴木 謙爾	東北大金研	八尾 誠 *	京大理
田巻 繁	新潟大理	米沢 富美子	慶大理工

*は連絡責任者

以下に、プログラムの順に各講演の報告書を列挙する。但し、題目や共同研究者等が、プログラムとは若干異なっている。