
会場 G

領域 1, 11, 12

G-1 電子衝突におけるイオンの角運動量移行

宮崎大学工学部^A 秋田健一^A, 中崎忍^A, 五十嵐明則^A, 大崎明彦^A

散乱面に垂直な角運動量成分の期待値を角運動量移行 (L_{\perp}) と呼び、円偏光を表現するストークス・パラメータ P_3 と $L_{\perp} = -P_3$ の関係がある。

電子と中性原子の高速衝突において、一次 Born 近似を用いた $S \rightarrow P$ 遷移における L_{\perp} は全散乱角で 0 である。また、二次 Born 近似を用いた傾向則によると、 $S \rightarrow P$ 遷移に対する L_{\perp} の値は小角度散乱において正であり、報告されている原子の実験や計算については低速衝突でもこの傾向則が例外なく当てはまっている。

一方、電子とイオンの衝突では、いくつかのイオンについて理論的な報告しかなくされていない。水素様イオン、He 様イオン、Li 様イオン、Be 様イオン、Na 様イオン及び Mg 様イオンの L_{\perp} は小角度散乱において正や負の値をとることが報告されていて、単純な規則性が見られない。

リチウム原子系列について外殻の 1 電子のみを陽に扱って、小角度散乱における L_{\perp} を計算し、その衝突メカニズムを調べた。計算の詳細や結果は当日発表する。

G-2 Z変換による量子ウォークの計算

佐賀大学大学院 工学系研究科^A, 佐賀大学物理科学科 教授^B 遠藤隆^B, 香月健一郎^A, 豊島耕一^B, 平良豊^B

近年量子ウォークは、量子情報への応用が期待されており、関心が高まっている。1次元空間 (x 軸) に一定の間隔 Δx の格子点から成る系を考え (各格子点は、整数 k で識別する。)、隣接格子点間のみが結合しているとする。

最も単純なハミルトニアンとして、 $\hat{H} = -\frac{i\hbar v}{2\Delta x} \sum_{k=-\infty}^{\infty} (|k\rangle\langle k+1| - |k\rangle\langle k-1|)$ を考える。

時刻 $t = 0$ で、原点 ($k = 0$) に置かれた粒子の確率分布は、時間に比例して拡散する。この解は、ベッセル関数を用いて表すことができる。これ以外の様々な初期状態に対する解を、Z変換と呼ばれる手法を用いて求めた。

また、Z変換をZ(複素)空間の単位円上の点で考えると、周波数変調のモデルと一致するので、適当なフィルタまたは時間的な変調信号を周波数変調することで、与えられた初期状態の量子ウォークを電気信号によってシミュレーションできることがわかった。

G-4 Belousov-Zhabotinsky 反応高流速カオスに及ぼすノイズの影響

鹿児島大・工^A, 鹿児島大院・理工^B 松永大志^A, 吉本 稔^B

[緒言]

カオスに対するノイズの影響は、非線形動力学系において非常に重要である。一般的にノイズは、系に不規則な挙動を発生させると考えられている。しかし、我々の研究により、低流速カオスでは、ノイズが規則的な動作を発生させることを理論、シミュレーション、実験によって確認している。この現象は“Noise-Induced Order”と呼ばれている。一方、高流速カオスにおいては未だに詳細が検討されていない。そこで本研究は、コンピュータシミュレーションにより高流速カオスにガウス白色雑音を加えた時の影響を検討することを目的とした。

[実験]

高流速カオスを検討するためにBZ反応モデルとしてGyorgyi-Fieldの3変数モデルを用いて検討した。ノイズについては、ガウス白色ノイズを流速に加えた。

[結果及び考察]

カオスにおける“Noise-Induced Order”の条件を見つけるため、分岐点に近い点と分岐点から離れた点に、それぞれノイズを加えた。その結果、分岐点から遠いカオスでは、カオスの軌道はノイズによりわずかに散在しているだけであった。一方、分岐点に近いカオスにおいては、ノイズにより秩序をもたらしており、“Noise-Induced Order”を確認できた。そこで、そのメカニズムを解明するために、一次元写像による解析を行った。この解析により、不変密度でのピーク値の増加によって、分岐パラメータがカオス領域から周期的な領域に移動することで写像に安定点を生じ、秩序化の傾向が得られるからであることが明らかとなった。

G-5 動的に結合した化学振動子集団のクラスタリング

福岡大理^A 岡野太治^A, 山崎省二^A, 宮川賢治^A

複数の要素が有機的に結合した系では、各要素が相互作用することで様々な集団ダイナミクスが誘起される。今回、要素間の結合強度が動的に変化する系について調べた。

実験は、Belousov-Zhabotinsky 反応をする複数の振動子を結合した系で行なった。振動子間の結合は、系の反応情報を光学的な方法でフィードバックすることで実現した。各振動子に照射する光強度 I_i は、 $I_i(t) = I_0 + (1/N) \sum_{j=1}^N K_{ij} (f(B_j) - f(B_i))$ で表される。ここで、 I_0 、 N 、 K 、 B 、 $f(B)$ はそれぞれ、照射光強度、振動子数、結合強度、振動子表面の明るさ、 B の関数である。振動子 i 、 j 間の結合強度 K_{ij} は、 $\dot{K}_{ij} = \alpha \sin^2(\beta(\phi_i - \phi_j)) - K_{ij}$ で決定される。ここで、 ϕ は位相、 α 、 β はパラメータである。 $\alpha = 1000$ 、 $N = 100$ で実験を行なったところ、図のような結果が得られた。結合強度が一定の系では、系の一部でクラスタが形成されているのに対し、結合強度が動的に変化する系では、系のほぼ全体

でクラスタが形成された。このとき、 β の値によってクラスタの数が変化することが分かった。

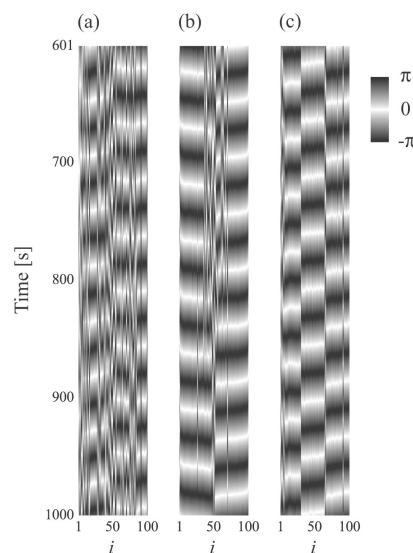


図 振動子の位相の時間発展。 $\alpha = 1000$ 。
(a) 結合強度一定、(b) $\beta = 0.5$ 、(c) $\beta = 1.0$ 。

G-6 液晶電気対流系における非平衡ブラウン運動

九州大学工学研究院^A 橋口愛^A, 細川雄作^A, 日高芳樹^A, 甲斐昌一^A

さまざまな非線形現象を示す液晶電気対流の研究では、これまで、対流パターンを場の変数によって記述するオイラー的手法が主にとられてきた。近年、液晶電気対流系に現れる時空カオスを非線形揺動と見なし、その統計的性質を明らかにするために、ラグランジュ的観点からの研究が行われている。すなわち、熱揺動によるブラウン運動とのアナロジーを用いて議論するために、時空カオスに混入した1粒子の運動が「非平衡ブラウン運動」として観測されている。これまで行われてきた研究は、等方性が自発的に破れたホメオトロピック系に現れる時空カオス「ソフトモード乱流」を対象としてきた [1,2]。ソフトモード乱流では非常に弱い揺らぎを実現できるため、時空カオスの揺らぎの基本的性質を熱揺らぎとのアナロジーを用いて調べるのに適している。

一方、等方性が強制的に破れているプレーナー系では、制御パラメータを変えると、欠陥乱流や欠陥格子、時空間欠性など様々なパターンが現れるので、多様な非線形揺動の統計的性質がラグランジュ的観点から得られることが期待される。今回は、比較的低い制御パラメータで現れる欠陥乱流における非平衡ブラウン運動の観測を行った。その結果、ロールの揺らぎによって粒子が稀にロールをまたぐホッピング現象が起こることがわかった。この場合、ロール構造を仮想ポテンシャル構造と見なすと、周期ポテンシャルの位相揺らぎによってホッピングが起こると考えられる。制御パラメータの増加に伴い揺動が強くなると、ホッピング頻度が上がり拡散係数が増加することも明らかとなった。さらに、試料を垂直に立てることによって粒子に重力を加え、一定外力下での粒子の運動を観測することにより、易動度についての議論も行う。

[1] K. Tamura, Y. Hidaka, Y. Yusuf and S. Kai: Physica A 306(2002)157.

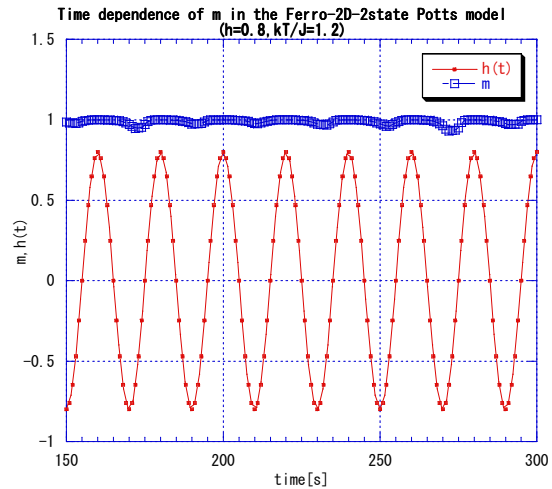
[2] Y. Hidaka, Y. Hosokawa, N. Oikawa, K. Tamura, R. Anugraha and S. Kai: Physica D, in print.

G-7 振動磁場下の Potts model における動的相転移

九大院工^A 太田穰^A, 木下岳大^A, 井戸垣俊弘^A

振動磁場 $h(t)$ を印加したスピン系において、 $h(t)$ の 1 周期 P にわたって秩序変数 $m(t)$ の平均 $Q = \frac{1}{P} \int_t^{t+P} m(t) dt$ をとると、ある臨界温度 T_C 以上では $m(t)$ が $h(t)$ に追従するため $Q = 0$ 、 T_C 以下では追従せず $Q \neq 0$ となるが、この現象を動的相転移という。今回は Potts model に $h(t) = h_0 \cos \omega t$ という磁場を印加した系 $H = -J \sum_{\langle ij \rangle} (q \delta_{\sigma_i \sigma_j} - 1) - h(t) \sum_i (q \delta_{\sigma_i, 1} - 1)$ について調べた。但し $m(\sigma_i) = \frac{q \delta_{\sigma_i, 1} - 1}{q - 1}$ という量のスピン平均 $m = \frac{\sum_i m(\sigma_i)}{N}$ を系の秩序変数とした。分子場理論によると、この系は温度と磁場振幅に関する相図において秩序相と無秩序相の共存相を持つとされるが、この結果の是非をモンテカルロシミュレーションにより確認することを目的とした。その結果 $q = 2$ の系では共存相は見られなかった。一方 $q = 3$ の系

では Q の温度依存性に急激な減少が見られず動的相転移発現の有無を判別することが出来なかった。これは $q = 3$ の場合は系のハミルトニアン中の振動磁場についての項の対称性が破れているためであり、その考察についても述べる。



G-8 チューリング不安定性を伴う振動パターン

福岡大理^A 坂本文隆^A, 宮川賢治^A

化学反応液を用いた論理演算やメモリ効果では、その伝搬経路の幾何学的な構造を制御することが重要である。反応場にチューリング不安定性を導入すると、スポット状、ライン状、迷路状などの静止パターンが均一な初期状態から自発的に現れる。振動性とチューリング不安定性のバランスを調節すると、空間的に一様な振動 (BO) が積み重なることで形成される静止パターンが観測される。しかし、BO と静止パターンは一時的に共存するだけで、最終的には静止パターンで空間が占められる。

今回、BO と静止パターンの定常的な共存状態を観測した (図)。実験においてチューリング不安定性は、Belousov-Zhabotinsky 反応場を Water in Oil 型のマイクロエマルジョン (ME)

で構成することで導入される。ME 反応場を考慮したオレゴネーターモデルを用いた数値シミュレーションの結果も報告する予定である。

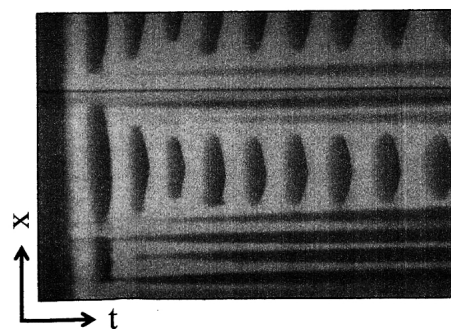


図 時空間パターン

G-9 ソフトモード乱流における新しいタイプの欠陥

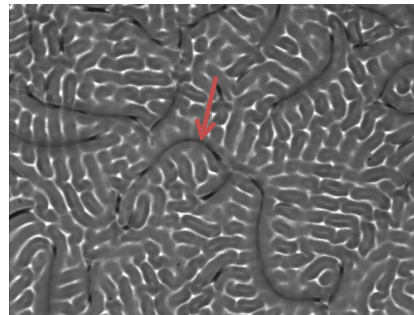
九州大学工学研究院^A 植木達博^A, RintoAnugraha^A, 日高芳樹^A, 甲斐昌一^A

ソフトモード乱流 (soft-mode turbulence:SMT)(図) は、液晶電気対流系における時空カオスの一種である。ネマチック液晶を電極に垂直配向させた系に電圧を印加すると、液晶の射影ベクトル (C ディレクタ) に関する長波長の Nambu-Goldstone モードが生じる。さらに電圧が対流発生の閾値を超えると、局所的な対流ロールの向きを表す波数ベクトル \mathbf{q} で表される短波長モードが生じる。SMT は、この2つの2次元 XY 場の非線形相互作用によって起こる \mathbf{q} の方向に関する時空カオスである。

SMT に関してはこれまで多様な観点から研究されてきたが、ブラックライン (BL)(図の矢印で示す線) については全く注目されておらず、その物理的性質は未解明である。そこで本研究では、その構造を明らかにし、統計的性質として線密度の制御パラメータ依存性を調べた。

結果として、BL は \mathbf{q} ベクトルと C ディレクタという2つの XY 場を作る、 C ディレクタの配向に関する欠陥であり、複数の点欠陥が

連なっているために線状を成していることがわかった。これは通常 XY 場では点欠陥しか現れないという古典的事実とは異なる新しいタイプの欠陥である。さらに、BL の線密度と内部の点欠陥密度の間に線形関係が確認された。そのことから、次元と変数の自由度が SMT と等しい2次元 XY モデルとの類似性を考慮し、統計的性質として欠陥密度の制御パラメータ依存性の比較を行ったところ、有意な結果が得られた。



G-10 ACトラップにおける帯電微粒子のカオス拡散の統計的性質

福岡県立大人社^A, 鹿児島大理^B, 名古屋大工学研究科^C 石崎龍二^A, 秦浩起^B, 庄司多津男^C

帯電微粒子を交流電場によって閉じ込めると、コントロールパラメータを変えることにより、帯電微粒子の運動は、固定点や周期運動やカオス運動を示すことが実験で確認される。交流電場による荷電粒子 (1 粒子) を閉じ込めるための条件は、Mathieu 方程式の固定点や周期運動の安定性により説明される。実際の実験では、空気抵抗などによる散逸が考えられるため、Mathieu 方程式に散逸が入ると、周期運動やカオス運動の発生を説明できない。そこで、散逸のある Mathieu 方程式を拡張した数理モデルを導入した。

散逸のある Mathieu 方程式を拡張した数理モデルにより、固定点が不安定化すると安定周期運動、更に安定周期運動からカオスが生じることを示す。特に、カオスが発生するパラメータ領域で、1 粒子の回転運動の揺らぎの統計的性質と2粒子を交流電場に閉じ込めた場合の2粒子の運動の統計的性質について、数理モデルにより数値的に調べた結果について報告する。

G-11 半導体レーザーと Rb 原子の結合系におけるカオスおよびノイズによる制御

福岡大理^A 中島渉^A, 岡野太治^A, 御園雅俊^A, 宮川賢治^A

半導体レーザー (LD) の出力光強度をそのバイアス電流に帰還すると、LD 周波数がカオス的な振る舞いを示すことが知られている。今回、我々はカオス状態の LD にノイズを加えることによって、LD の周波数変動が抑制されることを示した。

実験では、系の時間発展を測定し、スペクトルを計算した。そのスペクトルから、系の安定性を示す量である $\beta = Pf_0/\Delta f$ と LD 周波数ゆらぎの標準偏差 σ との関係性を求めた。ここで、 P はスペクトル線のピーク強度、 f_0 は中心周波数、 Δf は半値半幅である。LD バイアス電流にノイズを加えて σ を変化させると、 β が極大値をとることがわかった。このことは、ノイズによるカオス制御が可能であることを示している。

G-12 変形 S=1BLBQ 鎖における整合非整合遷移

九大院理^A 奥石健二^A, 野村清英^A

S=1 bilinear-biquadratic (BLBQ) スピン鎖

$$\sum_j = \mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1} + \alpha (\mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1})^2 \quad (1)$$

は、無秩序点 ($\alpha_D = \frac{1}{3}$) で基底状態が VBS 状態となります。最近、この近傍で整合-非整合 (C-IC) 遷移が起こること¹が見出されました。

本研究では、VBS 状態が固有状態となるような長距離相互作用を含むハミルトニアン²のなかで (今回、このハミルトニアンのことを変形 S=1BLBQ 鎖と呼んでいます)、

$$\tilde{H}_p = \sum_i \frac{1}{2} (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} + \mathbf{S}_{i+1} \mathbf{S}_{i+2}) + \frac{1-4p}{6} [(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1})^2 + (\mathbf{S}_{i+1} \mathbf{S}_{i+2})^2] + p [\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+2} - (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+2})^2] \quad (2)$$

となる場合を考えます。(p は任意のパラメタ) p の値によって \tilde{H}_p の固有状態である VBS 状態が基底状態となる領域が存在します。この領域の近傍で C-IC 遷移について、先行研究³の方法で、KOBE.PACK⁴を道具として用い、解析した結果を議論する予定です。

¹K.Nomura, and T.Murashima: J.Phys.Soc.Jpn.Vol 74(2005) 42 - 46

²H.Nakano, and M Takahashi: Phys. Rev. B 54, 9000 - 9003 (1996)

³T.Murashima, and K.Nomura: Phys.Rev.B 73(2006)214431

⁴T.Tonegawa, and M.Kaburagi, and T Nishino

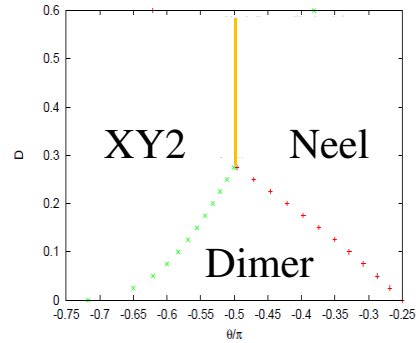
G-13 1 イオン異方性のある S=1 の BLBQ モデルの相図

九大院理^A, 東大院理^B 高橋 康太^A, 野村 清英^A, 肘井 敬吾^B

1 イオン異方性のある S=1 の BLBQ モデル
のハミルトニアンは

$$H(\theta, D) = \sum_{j=1}^N [\cos \theta (\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1}) + \sin \theta (\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1})^2] - D \sum_{j=1}^N (S_j^z)^2$$

である。Kolezhuk はこのモデルの相図とユニバーサリティクラスについて研究したがやや疑問点もある [1]。ここでは特にネール、ダイマー、XY2 相の 3 相に注目し、相境界をレベルスペクトロスコピー法 [2] を用いて数値的に決定した。また転移のユニバーサリティクラスについても述べる。



[1] A. Kolezhuk, Phys. Rev. B **78**, 144428 (2008)

[2] K. Nomura and A. Kitazawa, J. Phys. A: Math. Gen. **31**, 7341 (1998)

1

G-14 強磁性境界における全基底状態

九大物理^A 岩尾賢一^A, 野村清英^A

一次元イジングモデルにおいて、最近接相互作用が強磁性的で次近接相互作用が反強磁性的なスピントリプレット (F-AF スピントリプレット) の基底状態を考える。ただし開放端条件が課せられ、さらにボンド交代のあるモデルを考える。このモデルの基底状態が、強磁性状態から他の状態に変わる境界においての全基底状態を求めたい。はじめは参考文献にある論文よりスピン 1/2 のモデルから理解を深め、最終的に任意スピンのモデルにおいて全基底状態を求めたい。まず、ボンド交代があるので相互作用をそれぞれ J, J' (最近接相互作用)、 J, J' (次近接相互作用) としハミルトニアンは $H = \sum (J_1 s_{2n-1} \cdot s_{2n} + J'_1 s_{2n} \cdot s_{2n+1} + J_2 s_{2n-1} \cdot s_{2n+1} + J'_2 s_{2n} \cdot s_{2n+2})$ となる。この相互作用を γ ($-1 < \gamma < 1$)、 δ ($-1 \leq \delta \leq 1$) によって $J_1 = J'_1 / (1 + \gamma)$ $J'_1 = J'_1 / (1 - \gamma)$ $J_2 = J'_2 (1 - \delta)$ $J'_2 = J'_2 (1 + \delta)$ と表し、三つの粒子からなるハミルトニアンを $H_n = (1 + \delta_n) / 2 [J'_1 ((1 / (1 - \gamma_n)) s_n \cdot s_{n+1} + (1 / (1 + \gamma_n)) s_{n+1} \cdot s_{n+2}) + J'_2 s_n \cdot s_{n+2}]$ とする。ここで $H = \sum_{n=1}^{N-2}$ 、 $\delta_n = (-1)^n \delta$ 、 $\gamma_n = (-1)^n \gamma$ 。このハミルトニアンの最低固有値から基底状態の境界を決める。二つの粒子によって三つのトリプレット状態と一つのシングレット状態をとることができるので、 N 番目までの基底状態との直積により表される四つの状態の線形結合によって、 $N + 2$ 番目までの基底状態を記述する。この時に出てくる四つの係数を漸化式で表すとすべての基底状態が求まったことになる。参考文献; 1) H. Suzukian and K. Takano: J. Phys. Soc. Jpn. 77(2008)113708 2) T. Hamada, J. Kane, S. Nakagawa, and Y. Natsume: J. Phys. Soc. Jpn. 57(1988)1891

G-15 複数のスピン間相互作用の存在するイジングスピン系

東海大九州キャンパス^A, 九大院工^B, 有明高専^C 岩下孝^A, 浦上賀久子^A, 松岡良紀^C, 太田穰^B, 井戸垣俊弘^B

複数の相互作用が共存するスピン系の相転移を調べてみることは興味深く、意義のある課題である。さらに基底状態のスピン構造を確定して新しい磁気相を発見し、相転移の条件や相転移近傍の磁気的諸性質を調べてみることは意義があると思われる。

モンテカルロ・シミュレーションを用いて、通常の交換相互作用 $J_1 S_{iZ} S_{jZ}$ の他に双二次交換相互作用 $J_2 S_{iZ}^2 S_{jZ}^2$ 、スリーサイト・フォースピン相互作用 $J_3 S_{iZ} S_{jZ}^2 S_{kZ}$ 、フォーサイト・フォースピン相互作用 $J_4 S_{iZ} S_{jZ} S_{kZ} S_{lZ}$ が存在し、さらに一軸性異方性 $D S_{iZ}^2$ が共存する $S = 1$ のイジングスピン系の相転移を調べて相図を作成し、また基底状態のスピン構造を確定した。パラメーターとしては J_2/J_1 、 J_3/J_1 、 J_4/J_1 、 D/J_1 を用いている。

シミュレーション結果から得られた J_2/J_1 と J_4/J_1 をパラメーターとして持つ磁気相図と J_3/J_1 と J_4/J_1 をパラメーターとして持つ磁気相図では共に新しい磁気相が見つかった。また、 J_2/J_1 と J_4/J_1 をパラメーターとして持つ磁気相図では D/J_1 依存性を示すことも明らかにされた。さらに、これらの相転移の条件はスピン系のエネルギー計算から得られた条件と一致することも示される。

G-16 三角格子イジングモデル

九州大学理学府^A 小林敬吾^A, 野村清英^A

改題：転送行列法による三角格子スピン系の整合—非整合遷移

三角格子スピン系の整合状態、非整合状態について、転送行列法を用いて研究した。ハミルトニアン H は、

$$H = \sum_{\text{all } i,j} \{K_1 S_{i,j} S_{i,j+1} + K_2 S_{i,j} S_{i+1,j} + K_3 S_{i,j} S_{i-1,j+1}\}$$

となる。ここで、 $K_l = J_l/k_B T$ で、 J_l は、相互作用の大きさであり、スピン $S_{i,j}$ は $S_{i,j} = S_{i+n,j} = S_{i,j+m}$ の周期境界条件をとる。このとき、転送行列 T は、

$$(T)_{\alpha,\beta} = \{\exp(-H)\}_{\alpha,\beta}$$

と表せる。転送行列が対称行列となるとき、その固有値は、すべて実数となるので、転送する方向に対して、整合状態となる。一方で、非対称行列のときは、複素数の固有値をもつ可能性があり、非整合状態をとりうる。相互作用の大きさ J_1 、 J_2 、 J_3 の比によって、転送行列は変化する。しかし、比が特定の場合については、転送行列の特徴を決定され、状態が判明するので、その様子を確認した。

参考文献

- [1] J. Stephenson, J. Math. Phys. 11, 420 (1970)
- [2] J. Stephenson, J. Math. Phys. 11, 413 (1970)
- [3] G. H. Wannier, Phys. Rev. 79, 357 (1950)
- [4] S. Miyashita and H. Shiba, J. Phys. Soc. Jpn. 53, 1145 (1984)

G-17 ガラス転移での間欠性

九大物理^A 松井淳^A

ガラス転移は、動力学的な過程であるだけなのか、あるいは、熱力学的な転移であるのか、いまだ決着がついていない。どちらにせよ、ガラス転移は固化現象の1つであり、転移点近傍で粘性係数や緩和時間が急激に増大する。分子レベルでみると、分子の拡散が周囲に配置された分子によって抑制される”ケージ効果”が、温度降下とともに、顕著化したものである。ケージの生成やケージからの脱出には、多数の分子が関与する。このような分子の協調的集団運動を解析するため、これまでに、密度揺らぎの空間的相関（動的不均一性）が盛んに研究されてきた。それに対して、本研究では、時間的な相関に着目して、分子レベルの拡散についての待ち時間（1つの分子がジャンプ拡散してからつぎにジャンプ拡散するまでの時間）の分布を分子動力学シミュレーションを用いて測定した。その結果、指数が -0.8 から -1 のべき分布を示し、分子のジャンプ拡散が間欠的であることがわかった。（1）測定される緩和時間は観測時間に依存することとエイジング、（2）系のサイズと観測時間が無限大の極限で α 緩和は消失して、モード結合理論の予測と一致することを議論する。

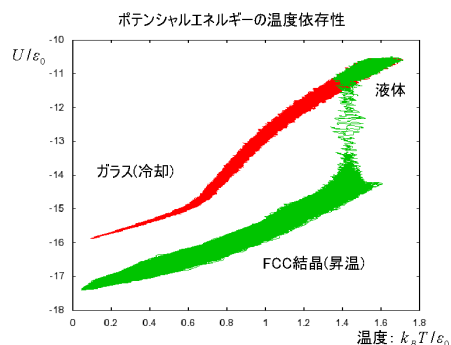
G-18 単成分単純液体のガラス転移

九州大学院理^A 才木将史^A, 松井淳^A

等方的な二体間ポテンシャルを持つような単純系で単成分の過冷却液体やガラスが安定に存在できるのだろうか？ガラスを形成するには多成分系を用いることが経験的に知られている。長時間安定な単成分のガラスが実現できる候補として、二つの極小を持つ等方的なモデルポテンシャルが考案されている。Lennard-Jonesポテンシャルにガウシアン型井戸を加えた相互作用を持つ二次元系では、転移点近傍ですぐに結晶化してしまうことが報告されている。これに対し、三次元系では過冷却液体やガラス転移点近傍でも観測時間内で結晶化の兆候は見られないことがわかった。

本講演では分子動力学シミュレーション

によって計算されたガラス状態とFCC結晶の構造因子や平均二乗変位等の結果から構造安定性について論じる。



G-19 自由エネルギーランドスケープ描像に基づいた過冷却液体の緩和過程

九大院理^A, 東京電機大学^B 浴本亨^A, 小田垣孝^B

物理・化学・生物分野において、自由エネルギーランドスケープ (F E L) 描像は複雑な系を理解する有用な手法として幅広く用いられている。ガラス転移研究においても、ガラス転移の本質を F E L 描像から理解する試み [1] が注目されている。

ガラス転移現象の主な特徴として、ガラス転移温度 (T_g) で比熱が急激な変化をする熱力学的特徴と、 T_g 近傍で緩和過程が3つに分離する動的特徴が知られている。ガラス転移の F E L 描像 [1] から熱力学的特徴が説明され [2]、F E L 描像から動的特徴がいかに理解されるかが課題となっていた。

我々は2次元モデル F E L 上のダイナミクスを解析し、ガラス転移の動的特徴が F E L 描像で理解できる事を示す。また、緩和過程と脱出時間との関係を示す。

[1] T. Odagaki, T. Yoshidome, A. Koyama, and A. Yoshimori, J. Non-Cryst. Solids, 352, 4843, 2006

[2] T. Odagaki and A. Yoshimori, J. Non-Cryst. Solids, 355, 681, 2009