

会場 A

領域 1, 5, 6

A-3 バネの振動とクラマースクローニッチ関係式

佐賀大学工学系研究科物理科学専攻^A 原大晃^A, 古賀圭樹^A, 遠藤隆^A

我々は、バネ振動子のような古典的な系で、緩慢変動包絡線近似を用いて量子力学の現象をシミュレーションする実験を行ってきた。今回は、バネ振動子が因果律を満たすことから、クラマース・クローニッチの関係が成り立つと考え、実際に減衰振動を測定し、図1のようにヒルベルト変換により、実数で記述される変位の時間変化信号 $A(t) \cos(\omega t + \phi)$ を解析関数 $A(t) \exp i(\omega t + \phi)$ に変換し、包絡線 $A(t)$ を抽出し、その時間変化を求めた。図2は、バネにつけた錘の単振動を FSR (Force Sensing Resistor) を用いて抵抗変化に変換し、測定した結果である。錘に磁石を付け、銅板を接近させることで、誘導電流による強い制動を与えている。図3は、ヒルベルト変換によって解析信号に

変換し、高速振動部分 $\exp i(\omega t + \phi)$ を絶対値を取ることで消去し、包絡線のみを求めたものである。信号のひずみのため、振動成分が残っているが、概ね包絡線が得られている。

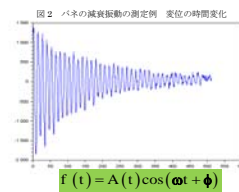
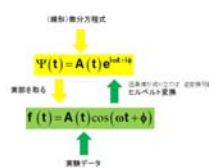
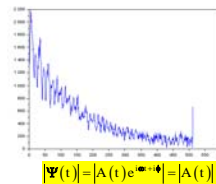


図3 バネの減衰振動の測定例 ヒルベルト変換による振幅の抽出



A-4

水素分子の2電子励起状態の計算

宮崎大学^A 細見昌弘^A, 五十嵐明則^A, 大崎明彦^A

H_2 の二重励起状態(共鳴状態)は単一光子吸収、多光子吸収や $e^-+H_2^+$ 散乱、 $H+H$ 衝突散乱などの中間状態として重要な役割を果たす。 H_2 の二重励起状態は連続状態に埋もれた擬束縛(共鳴)状態で、一定の寿命で電子と水素分子イオンに壊れる。最も基本的な分子である H_2 では、 H_2^+ の第一励起状態 $2p\sigma_u$ のエネルギーに収束する Q_1 系列のポテンシャル曲線については多くの理論計算が行われてきたが、より高い H_2^+ の励起状態のエネルギーに収束する系列の計算の報告は少ない。今回、 H_2^+ の第三及び、第四励起状態に収束する Q_3, Q_4 共鳴状態のエネルギー、幅、分岐比を緊密結合法で計算し、先行研究の結果と比較する。例として、図1に Q_3 系列 $^1\Sigma_u^+$ の電子エネルギーの結果を示す。二乗可積分型緊密結合法による Fernandez 等 [1] の結果と比較すると、エネルギーが低い所では、概ねよい一致をしているが、エネルギーが高くなるにつれて違いが出てくる。また $R=3$ 付近で共鳴状態

の主成分が $[2s\sigma_g, np\sigma_u]$ から $[nd\sigma, np\sigma_u]$ への移行が起こり擬交差が起きたり、 n_{eff} に変化が起こる。

[1] J. Fernandez and F. Martin, J. Phys. B **34**, 4141 (2001).

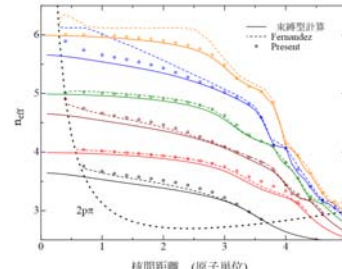


図1. Q_3 系列($^1\Sigma_u^+$)の有効主量子数

A-5

イオン衝突による水素分子の電離微分断面積

宮崎大学工学部^A 田上智基^A, 五十嵐明則^A, 大崎明彦^A

分子標的は複数の原子の集合体と大雑把に見なすことができるので、各原子が散乱波の波源となって、運動量移行などに依存した干渉効果を示す。イオン衝突における干渉効果は水素分子(H_2)を標的とした衝突実験で実際に確認されている。ここで水素分子の2つの陽子はヤングの二重スリットの実験のスリットと良く似た役割をする。 H_2 は二つの水素原子からなる最も簡単な分子であるが、分子標的の多中心性から断面積計算は水素原子の計算よりはるかに難しくなる。そのため、有効二中心(TEC)近似を使ったCDW-EIS(Continuum distorted wave Eikonal initial state)近似がよく使われてきた。TEC近似では H_2 の電子軌道を2つの水素様原子の重ね合わせと見なし、電離される電子はそれぞれの水素様原子から飛び出す波の重ね合わせとして表す。しかし、放出される電子は残りの水素分子イオンと相互作用しているので、2つの陽子からの相互作用を同時に扱った方がよい。本研究では様々なイオンによるイオンと H_2 の衝突の電離微分断面積を、TEC近似を使った場合(CE1)と使わない場合(CE2)のCDW-EIS近似で計算し、実験値や他の理論値と比較・検討す

る。図1は入射エネルギー6MeV/uにおける $C^{6+}+H_2$ 衝突の電子の放出方向を 30° と 150° に固定し、電子の放出エネルギーの関数として描いた2重微分断面積である。電子のエネルギーを下げていくと、CE2の値は、CE1やCE-Misraよりもやや小さく、Misra[1]ら実験値により近い。

[1] D. Misra et al., J. Phys. B **80**, 012014 (2007).

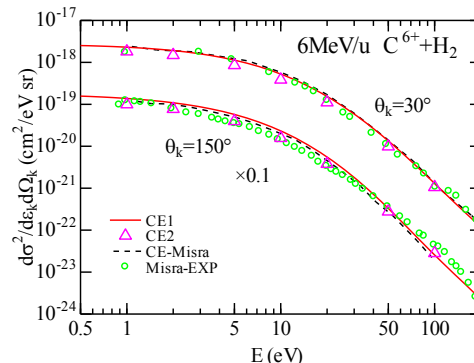


図1 6MeV/uにおける $C^{6+}+H_2$ 衝突の二重微分断面積

A-6

イオン結晶における外因性および内因性領域を跨るイオン伝導度の連続挙動

大分高専^A, 熊大院先端科学^B 池田昌弘^A, 安仁屋勝^B

微量の不純物を含むアリカリハライドや銀ハライドにおけるイオン伝導度の温度依存性は、2つの明瞭なアレニウスの挙動を示す¹⁾。高温側は不純物濃度にあまり依存性しないが、低温側では欠陥濃度に反映して顕著な濃度依存性を示す。前者は内因性領域、後者は外因性領域と区別される。この振舞いは、通常、電荷中性条件や質量作用の法則を併用することで理論的には説明される。しかしながら、両アレニウスの挙動は中間領域で連続的に繋がるため、全体としての振舞いは非アレニウスのであると云える。この連続挙動を理解するためには、従来のアプローチでは不十分である²⁾。

イオン結晶中のイオン拡散過程において欠陥が重要な役割を果たすことは明らかである。そこで本研究では、従来の点欠陥形成理論に改良を加えることで、イオン伝導度が示す上述の非アレニウスの挙動を説明することを試みる。講演では点欠陥濃度の温度依存性の観点から Frenkel 欠陥型である銀ハライドが示すイオン伝導度について考察した結果を報告する。

1) B. Henderson, 訳 堂山昌男, 固体物性シリーズ I 格子欠陥, 丸善株式会社.

2) A.P. Batra, E.F. Ekpo, M. Dominique, N.U. Okorie, Phys. Rev. B 42 (1990) 1404.

A-7

ナノ粒子のイオン伝導度に対するモデル

熊大院自然科学^A, 熊大院先端科学^B 萩原一馬^A, 安仁屋勝^B

ナノ結晶ではバルク結晶と異なり、物理的性質が粒子サイズに大きく依存する。その中で、ナノ粒子のイオン伝導度に対する粒子サイズ依存性は、電池材料の性能向上とも関係するため、近年大きな注目を集めている。多くの研究事例において空間電荷層の存在を仮定したモデルが適用されているが [1], その物理的背景は十分に解明されていない。一方、ナノ粒子のイオン伝導度に対するモデルとして Brick-Layer Model (BLM) が知られている [2]。BLM は、粒子をコアとシェルの領域に分け、それぞれの伝導度から全体の伝導度を求める。

本研究では、BLM を拡張し、コア領域とシェル領域それぞれに粒子サイズ依存性を取り入れることで、ナノ粒子におけるイオン伝導度の振舞いを記述するモデルを提案する。当モデルによると、イオン伝導度の粒子サイズ依存性は、ある粒子サイズで最大値をとるように振る舞うことを示す。

[1] J. Maier: J. Electroceram. 34 (2015) 69.

[2] R. Bouchet, P. Knauth, J.M. Laugier: J. Electroceram. 16 (2006) 229.

A-8

超流動ヘリウム中の第2音波と電気分極

九大理物^A, 九大基幹教育院^B 西村優吾^A, 内山大嘉^A, 矢山英樹^B

第二音波とは2流体モデルにおける超流動成分と常流動成分とがカウンターフローを起こすことによって伝わる波である。この力学的な現象が電氣的な分極現象を引き起こすという興味深い実験結果 [1] が報告されている。今回はこの実験の検証を行った。図1は実験装置の断面図である。セルの左端に発信器としてヒーターが、右端にディテクターとして抵抗温度センサーとキャパシターが取り付けられている。ヒーターに交流の電流を流すことで第二音波を発生させ、セルの両端で反射共鳴させた。そのときの温度振幅 ΔT を抵抗温度センサーで、電気分極 ΔV をキャパシターで観測した。図2の下は第二音波の温度振幅の周波数依存性を表している。第二音波が一定間隔の周波数で共鳴していることがわかる。このピークはセルの大きさと音速から求めた共鳴周波数と一致している。図2の上は電気分極の周波数依存性を表している。下のグラフの共鳴周波数の位置にピークはみられない。このことから今回の実験では第二音波による電氣的な信号は観測できなかった。

[1] A.S. Rybalko: Low Temp. Phys., 30 (2004) 994-997.

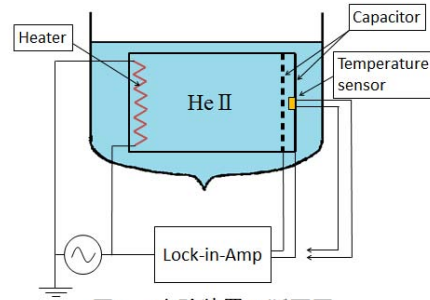


図1 実験装置の断面図

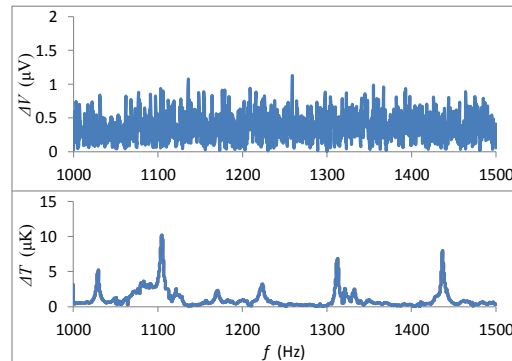


図2 第二音波による温度振幅(下)と電気分極(上)の周波数依存

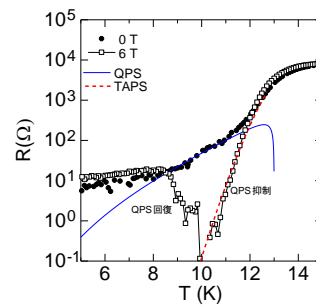
A-9

超伝導細線における異常磁気抵抗 II

九大理^A, 情報通信研究機構^B 篠崎文重^A, 牧瀬圭正^B

MgO 基板上 NbN 薄膜を Nano-wire(NW) 化した擬1次元超伝導体の $R(T,H)$ 特性を調べ、これまでに以下を報告した。i) $R(T)$ 特性は2,3次元系が示さない broad な転移を示す。ii) 特異な負の磁気抵抗や抵抗の振動現象を示す。しかし、エピタキシャル成長に適した MgO 基板でも微細加工時の影響以外に、NbN と MgO 基板間に 4percent 程度の格子ミスマッチがあり欠陥や乱れが生じ得る。そこで今回、格子ミスマッチが 0.7 percent と非常に小さく、格子不整合による乱れをより抑えると期待される立方晶炭化シリコン (3C-SiC) 基板上に NbN-NW を作製し、その輸送特性を調べた。図に $w=20\text{nm}, t=10\text{nm}, L_v-v=600\text{nm}, T_{c,\text{mid}}=13.5\text{K}$ の $R(T)$ を示す。(●) で示した $R(T,H=0)$ は NW に特有な超伝導オーダーパラメーターの位相すべりによる特性を示す。一方、(○) で示すように磁場 ($H=6\text{T}$) 下では T_c 近傍で 2-3 桁にも及ぶ負の磁気抵抗による急激な抵抗減少、更に「温度が減少す

ると抵抗は再び増加に転じる」quasi-reentrant 現象を示す。実線、破線はそれぞれ、量子位相すべり、熱的位相すべりの理論線である。講演では上部臨界磁場 $H_{c2}(T)=H_{c2}(0) \times (1 - T/T_c)^n$ の振る舞いも紹介する。

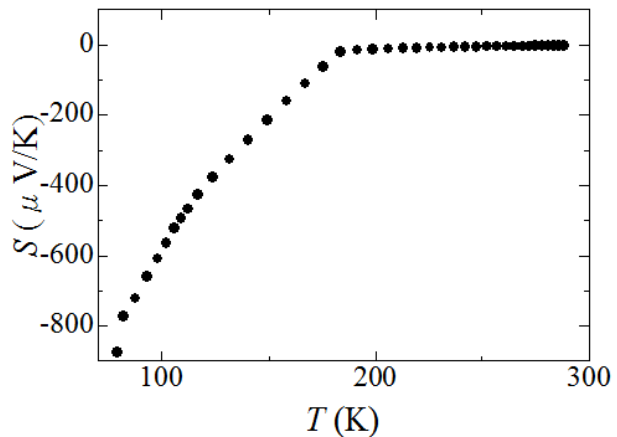


A-10

$K_{0.3}MoO_3$ 単結晶の熱電能測定

佐賀大理工^A, 佐賀大院工系^B 松尾一輝^A, 中島和貴^A, 高倉将一^B, 真木一^B

擬一次元物質である $K_{0.3}MoO_3$ は、180 K で電荷密度波 (CDW) 状態へと相転移する。この CDW 状態が示す熱電能のメカニズムは、まだ解明されていない。そこで、我々は自作の熱電能測定装置を用いて $K_{0.3}MoO_3$ 単結晶の熱電能の温度変化を測定した。図は、一次元鎖方向である b 軸方向における熱電能の温度依存性である。熱電能は温度とともに減少し 180 K で急激に減少した。この振舞いはこれまでの報告とよく一致しているように見える。本研究では、さらに不純物を混入した試料でも熱電能を測定した。当日はその結果もあわせて、詳細を報告する。



A-11

液体急冷した Ni-Cu-Sn 合金のスピンノーダル分解

長崎大学大学院工学研究科院生^A, 長崎大学大学院工学研究科^B 堤貴瑛^A, 近藤慎一郎^B, 森村隆夫^B, 中島弘道^B

スピンノーダル分解は均一な微細構造が得られ、過時効や再結晶が生じないため時効処理を長時間行っても硬度が保てることが利点として挙げられる。ところで Cu rich な Cu-Ni-Sn 合金はスピンノーダル分解を生じ、ばねやベアリング等に使用されている工業用材料であるが、Ni の添加量を増やすことで強度と耐熱性の向上が見込まれる。そこで本研究では、Ni、Cu、Sn を Ni rich な組成に秤量し Ar ガス雰囲気中で高周波誘導加熱により合金インゴットを作製し、次にその合金インゴットをスピノキャスト装置を用いて液体急冷し、液体急冷試料を得た。また比較のために合金インゴットを 1000 °C にて、180 min の溶体化処理を行い、氷水中へ焼入れし、溶体化試料を作製した。これら両試料を真空封入後、塩浴中で 400 °C において 20 min、80 min、400 min で時効処理を行い、Cu-Ni-Sn 合金との動力学的側面の差異について XRD を用いて広角並びに (200) 面、(220) 面の精密測定を行い、更に 400 °C において 80 min 時効した溶体化試料と液体急冷試料について TEM を用いて考察を行った。その結果から Ni-Cu-Sn 合金では、液体急冷を施した場合、Cu rich な Cu-Ni-Sn 合金と同じく溶体化処理を施した試料に比べてスピンノーダル分解過程は遅くなると思われる。また、Cu-Ni-Sn 合金とスピンノーダル分解過程での規則相の析出に差異があることがわかった。

A-12

Pd-Ni-Pt 合金の水素吸蔵および放出特性

長崎大学工学部^A, 長崎大学大学院工学研究科^B, 長崎大学工学研究科^C 増崎公史^A, 大石 幹^B, 近藤慎一郎^C, 森村隆夫^C, 中島弘道^C, 山本将貴^C, 大貝猛^C, 香川明夫^C

水素吸蔵合金は、自己の体積の大凡 1000 倍以上の水素ガスを可逆的に吸蔵もしくは放出でき、色々な応用が期待されている。例えば発熱と吸熱反応を利用したヒートポンプや体積の膨張を利用したアクチュエータなどが考えられている。最近では人体に有毒であるとされる活性酸素の除去に水素は重要な役割を果たすことが指摘されている。これら応用分野の広い水素吸蔵合金に関して、我々は Pd 系合金に注目している。これまで Pd 系合金については、Pd-Ni 合金については PCT 曲線、水素吸蔵・脱蔵時の変異の経時変化、水素吸蔵速度などについては調べられているが、さらに Pt を加えた三元系での熱力学的緒量についてはまだ調べられていない。そこで本研究では、Pd-Ni-Pt 三元系での水素溶解について考察を行う。

Pd, Ni 及び Pt を Ar ガス雰囲気下で高周波溶解し合金インゴットを作製した。合金インゴットを真空中で温度 900 で 2 時間均質化焼鈍を行った。その後、試料の厚さが 60-70 μm になるまで歯科用圧延機で圧延及び歪み取り焼鈍を行った。そうして得られた試料に関して、プラトー圧の測定後、水素吸蔵前と吸蔵後の試料について X 線解析を行い相の同定を行った。

Pt を添加すると Ni と同様で脱蔵の役目として働いた。Pt を添加することでの劇的な変化は見られなかったが、プラトー圧とヒステリシスには影響を与えた。X 線の回折パターンから吸蔵する際に格子がひずみ、ピークが分裂していることが確認された。格子定数の減少とプラトー圧が上昇の関係より、格子定数を変化させることでプラトー圧を調整できると予想できるので、他の代替金属でも同様の結果が得られると推測できる。

A-13

イオン導電体の体積弾性率

熊大院自然科学^A, 熊大院先端科学^B 飯川景祐^A, 安仁屋勝^B

イオン導電体は固体でありながら、液体に匹敵する程度の高いイオン伝導度を示す。イオンの移動度は物質の化学結合と関係していると考えられている [1]。体積弾性率は物質の力学的、熱的性質を表すマクロな物理量であるが、物質の結合性を反映する。以前の研究において、弾性定数の温度変化に対する非線形性とイオン伝導は密接に関係することが示された [2]。つまり、系統的な弾性定数の温度依存性の研究から、イオン伝導機構を解明する上での貴重な情報が得られることが期待される。近年、結晶構造から直接得られるパラメータを用いて体積弾性率を求めるモデルが提案された [3]。このモデルは多くの二元系物質で実験値と良い一致を示す。今回の発表では、大きな非調和性を有するイオン導電体でもこのモデルが有効であるか否かを調べた結果について報告する。

[1] M. Aniya: Solid State Ionics 50 (1992) 125.

[2] M. Aniya, H. Sadakuni: Thermochim. Acta 532 (2012) 111.

[3] B. Xu, Q. Wang, Y. Tian: Sci. Rep. 3 (2013) 3068.

A-14 イオン伝導と格子振動の非調和性

熊大院自然科学^A, 熊大院先端科学^B 田中良哉^A, 安仁屋勝^B

イオン導電体の基礎物性の起源に関してまだよく分かっていないものが多い。その一つにペロブスカイト型酸化物イオン導電体において見出された、熱膨張率の増加に伴いイオン伝導度が増加するという現象がある [1]。同様な現象は、その他の多くのイオン導電体でも確認されている [2]。当研究室で行われた過去の研究では、固体の熱膨張の主な要因が格子振動の非調和性であることに注目し、それを取り入れた原子間ポテンシャルから活性化エネルギーを求めることで熱膨張率とイオン伝導度の関係が議論された。しかし、その関係の物理的背景は十分に解明されておらず、理論的な面での課題も残されていた。

本研究では以前の研究を引き継ぎ、イオン導電体における熱膨張率とイオン伝導度の関係を調べた。今回の発表では、イオン拡散に關与するイオンの振動数とフォノン数について報告する。

[1] H. Ullmann, N. Trofimenko, F. Tietz, D. Stover, A. Ahmad-Khanlou: Solid State Ionics 138 (2000) 79.

[2] S. Taniguchi, M. Aniya: IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng. 18 (2011) 132016.

A-15 アルカリ土類酸化物を含むケイ酸塩ガラスのフラジリティー

熊大院自然科学^A, 大分高専^B, 熊大院先端科学^C 森下貴史^A, 池田昌弘^B, 安仁屋勝^C

我々が提案している結合力 - 配位数揺らぎ (BSCNF) モデルは、ガラス形成物質における構造単位の結合や配位数の観点から、液体の粘性の温度依存性を系統的に説明する [1]。このモデルは、多くのガラス形成物質に適用されるだけでなく、よく知られた Vogel-Fulcher-Tamman (VFT) 方程式のパラメータに対する一つの物理的解釈を与え [2]、非アレニウス型イオン伝導度の理論の構築 [3] などにも応用された。

最近、アルカリ土類酸化物を含むケイ酸塩ガラスのフラジリティーが興味深い組成依存性を示し、解析に使われるモデルによってその値が異なることが報告された [4]。本報告では、我々のモデルの観点からこの振る舞いを検証する。また、イオン伝導との関係について議論する。

[1] M. Aniya: J. Therm. Anal. Calorim. 69 (2002) 971.

[2] M. Ikeda, M. Aniya: J. Non-Cryst. Solids 371-372 (2013) 53.

[3] Y. Okada, M. Ikeda, M. Aniya: Solid State Ionics 281 (2015) 43.

[4] W. Qu, S. Liu, Z. Xiao, J. Ma, M. Wei: J. Alloys Compd. 661 (2016) 1.

A-16

プランク輻射と電子の正規分布を結び式 $h = m c^2 (\gamma - 1)$

長崎県立小浜高等学校^A 山本文隆^A

1. プランク輻射振動数を、電子速度で書き換える。

光子エネルギー＝電子エネルギー $h \nu = m c^2 (\gamma - 1)$ の式を用いて黒体輻射のプランクの公式を、その原因と考えられる電子の速度軸に並び替えればきれいな正規分布曲線となる。これは1個の光子エネルギーは、光を発生する1個の電子エネルギーに置き換えられることを示す。黒体輻射は速度軸に正規分布した電子群が生み出す、光の束であると考えることができる。

$$U d \nu = \frac{8 \pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h \nu}{k T}} - 1} d \nu$$

$$U = \frac{8 \pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h \nu}{k T}} - 1} = f \frac{1}{e^{\frac{h \nu}{k T}} - 1} \dots \dots \dots \textcircled{1}$$

$$f = \frac{8 \pi h}{c^3} = 6.17 \times 10^{-34} \quad s = \frac{h}{k} = 4.80 \times 10^{-11}$$

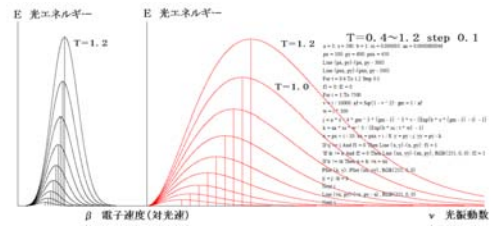
である。この光の振動数を電子速度に置き換えることを考えると

$$h \nu = m c^2 (\gamma - 1) \quad \text{より} \quad \nu = B (\gamma - 1)$$

$$U d \nu = \frac{8 \pi h B^3 \gamma^3 (\gamma - 1)^3 \beta}{c^3 (e^{\frac{h B (\gamma - 1)}{k T}} - 1)} d \beta$$

$$U = \frac{8 \pi h B^3 \gamma^3 (\gamma - 1)^3 \beta}{c^3 (e^{\frac{h B (\gamma - 1)}{k T}} - 1)} = a \frac{\gamma^3 (\gamma - 1)^3 \beta}{e^{\frac{b (\gamma - 1)}{T}} - 1} \dots \dots \dots \textcircled{2}$$

ここで $a = 8 \pi h B^3 / c^3 = 1.41 \times 10^{23}$, $b = h B / k = 5.91 \times 10^7$
定数値が大きすぎるので、それぞれを適当に与えて V. B. で図を描写



```
V. B プログラム : a = 3 : s = 500 : b = 1 : ss = 0.000005 : aa = 0.0000000046 : px = 100 : py = 600 : pxx = 450
Line (px, py) (px, py - 500) : Line (pxx, py) - (pxx, py - 500)
For t = 0.4 To 1.2 Step 0.1 : fl = 0 : f2 = 0 : For i = 1 To 7500 : v = i / 10000 : af = Sqr(1 - v^2) : gm = 1 / af : w = i * 300
j = a * s^4 * gm^3 * (gm - 1)^3 * v / (Exp(b * s * (gm - 1) / i) - 1) : k = aa * ss * w^3 / (Exp(b * ss / t * w) - 1) : x = px + i / 10 : xx = pxx + i / 8 : y = py - j : yy = py - k
If j > j And fl = 0 Then Line (x, y) - (x, py) : fl = 1 : If k > k Then n = k : vx = xx : PSet (x, y) : PSet (xx, yy) : RGB
(255, 0, 0) : ij = j : ik = k : Next i : Line (vx, py) - (vx, py - n) : RGB (255, 0, 0) : Next t
```

A-17

イオン導電性高分子に対するモデル

熊大院自然科学^A, 熊大院先端科学^B 西牟田拓朗^A, 安仁屋勝^B

近年、ポリマー電解質は電池などへの応用の面から大きな注目を集めている [1]。しかし、その基礎物性についての理解が十分であるとは言い難い。ポリマー電解質は母体となるポリマーと、それにドーブされた塩から構成される。超イオン導電体に対する以前の研究において、アニオンが形成するケージ中でカチオンが流動するという流体力学的モデルが提案された [2]。今回の研究では、このモデルをポリマー電解質に適用し、電解質の集団運動に対する表式を得た。当モデルから得られた結果は実際のポリマー電解質で見られる交流伝導度の振る舞いを捉えている。

[1] Y. Wang, K.S. Chen, J. Mishler, S.C. Cho, X.C. Adroher : Appl. Energy 88 (2011) 981.

[2] M. Aniya, and M. Kobayashi : Appl. Phys. A 49 (1989) 641.

A-18

イオン伝導の結合ゆらぎモデルとエントロピーのスケーリング則

熊大院自然科学^A, 熊大院先端科学^B 松永薫^A, 安仁屋勝^B

Rosenfeld は拡散係数と過剰エントロピーとの間にスケーリング則が成立すると提案した [1]。ここで、過剰エントロピーは熱力学エントロピーと理想気体のエントロピーの差として与えられる。スケーリング則を記述する関係式は近年、多くの注目を集め、より詳細な理論の構築、実験やシミュレーションによる関係式の検証など、多くの研究が現在進行中である。しかし、同関係式を固体について検討した報告の例は聞かない。一方、最近、エネルギーランドスケープの概念を用いて上記のスケーリング則の解釈がなされた [2]。その研究によると、過剰エントロピーはエネルギーランドスケープ上でのポテンシャルのゆらぎを用いて記述される。本研究では、当研究室から提案された超イオン導電体の結合ゆらぎモデル [3] を、拡散係数とエントロピーのスケーリング則に関連付ける試みについて紹介する。

[1] Y. Rosenfeld: Phys. Rev. A 15 (1977) 2545.

[2] K. Seki, B. Bagchi: J. Chem. Phys. 143 (2015) 194110.

[3] M. Aniya: J. Phys. Soc. Jpn. 65 (1996) 3406.

A-19

ガラス形成物質における集団運動の特性長

熊大理^A, 大分高専^B, 熊大院先端科学^C 坂本遼太^A, 池田昌弘^B, 安仁屋勝^C

通常、液体をゆっくり冷やすと結晶化するが、急冷すると融点で結晶化は起こらず過冷却液体になる。これをさらに冷やすと、過冷却液体の粘性や緩和時間が急激に増加し、系はランダムな構造を保ったまま流れなくなってしまう。これがガラス転移である。ガラス転移における粘性の温度依存性はフラジリティーによって特徴づけることができる [1]。ガラス転移に伴う緩和時間の増加機構を理解するために、分子間の協同的再配置領域のアイデアや [2]、その集団運動を特徴づける「特性長」を算出する様々な理論的手法が提案されている。我々の研究グループは、構造単位間の連結の観点から粘性に対する結合力・配位数揺らぎ (BSCNF) モデルを提案しており [3]、このモデルの観点から、ガラス転移に伴う集団運動を特徴づける融体の構造単位数が求められる [4]。

本研究では、BSCNF モデルに基づき、ポリマー、酸化物、金属ガラスなど種々のガラス形成物質における特性長を求め、それらを比較検証した。本講演では、フラジリティーの観点から、物質間でみられる特徴を議論する。

References

[1] C.A. Angell: J. Non-Cryst. Solids. 131-133 (1991) 13.

[2] G. Adam, J.H. Gibbs: J. Chem. Phys. 43 (1965) 139.

[3] M. Aniya: J. Therm. Anal. Calorim 69 (2002) 971.

[4] M. Aniya, M. Ikeda: Phys. Procedia 48 (2013) 113.