

2023 年度年次報告書

複雑な流動・輸送現象の解明・予測・制御に向けた新しい流体科学

2022 年度採択研究代表者

高橋 和義

産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター
主任研究員

局所秩序変数に基づくナノ熱物質移動論の前進

研究成果の概要

流体からの結晶化やガラス化などは相転移を伴う流体現象であり、自己集合などナノレベルの熱物質移動現象が局所的な粘性や密度の差などに波及して、流体スケールの現象に影響を及ぼすことが考えられる。本研究ではこのような複雑流動現象を取り扱うシミュレーション手法の開発を目指す。具体的には、機械学習により自己集合の記述に適した局所秩序変数(LOP: Local Order Parameter)を特定し、LOPを導入した統計力学により自己集合を記述して、これを最新の連続体理論と接続する。よって本研究の課題は主に以下の3つである。

(イ)自己集合の記述に適したLOPの探索

(ロ)LOPに基づいた統計力学による自己集合の観察

(ハ)LOPを介した自己集合と連続体理論の接続

本年度は主に課題(イ)の解決および課題(ロ)への着手を目標とし、(a)過冷却水の自発的液-液相分離とその後の結晶化、(b)高分子融液の冷却による結晶/ガラス化、(c)クラスレート水和物(ハイドレート)の結晶化に対して有効なLOPの探索を試みた、あるいは相転移現象観察のための分子シミュレーションを実施した。特に(b)ではシミュレーションから得られたガラス構造の信頼性を評価するために、シミュレーション結果と陽電子消滅寿命測定データを比較する手法を提案した。同手法は The Journal of Chemical Physics 誌に掲載済である。

また課題(ハ)に向けた調査研究から波及したメソスケールLOPの探索および連続体シミュレーションを実施した。具体的には液晶ブルー相IとIIを区別できるLOPを探索、発見した。このLOPを「ブルー相IIが冷却されブルー相Iの双晶になる」連続体シミュレーションに適用し、双晶形成過程の解明や双晶面の特定など、複数の重要な発見をした。

なお課題(ハ)の非ニュートン流体への適用可能性に関する共同研究FSの可能性を検討中である。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Kazuaki Z. Takahashi (単著), “Mapping positron annihilation lifetime spectroscopy data of a polymer to classical molecular dynamics simulations without shifting the glass transition temperature”, The Journal of Chemical Physics, Vol.159, Article No.084903, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0160034>
- 2) Kazuaki Z. Takahashi (第一著者・責任著者) and Masaki Hiratsuka, “Local order parameters classifying water networks of ice and cyclopropane clathrate hydrates”, Crystal Growth & Design, Vol.23, No.7 pp.4815-4824, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.2c01519>
- 3) Kazuaki Z. Takahashi (単著), “Molecular cluster analysis using local order parameters selected by machine learning”, Physical Chemistry Chemical Physics, Vol.25, No.1, pp.658-672, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1039/D2CP03696G>