

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

2022年度  
年次報告書

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现象であり、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、これを最新の流体理論と接続する。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流体理論の接続

本年度は主に(イ)に着手した。(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)の結晶化をモデルケースとし、LOPの探索を試みた。

(a)および(b)では、LOP探索のための構造データを作成中である。

(c)では、シクロプロパンハイドレートの4相共存点(sI-sII-氷Ih-ガス)近傍のsI・sII・氷Ihを区別するLOPの探索に成功した。本成果はCrystal Growth & Design誌に掲載済である。

その他、LOPの性質を理解する基礎研究を行った。LOPは局所的な秩序構造を表現できるが、LOPと大域的秩序変数との対応関係はまだ整理されていなかった。そこでLOPを用い一次相転移現象を追跡した。その結果、LOPは核生成や核成長を詳細に記述でき、かつパーコレーション転移において大域的秩序変数と接続できることを示した。本成果はPhysical Chemistry Chemical Physics誌に掲載済である。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) Kazuaki Z. Takahashi and Masaki Hiratsuka, “Local order parameters classifying water networks of ice and cyclopropane clathrate hydrates”, Crystal Growth & Design, Published Ahead of Print. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.2c01519>
- 2) Kazuaki Z. Takahashi, “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>