

## 多分散レナード・ジョーンズ系における相図の粒度分布と温度依存性

東北大金研 CMRI<sup>1</sup>、Boston Univ. Dept. of Chem.<sup>2</sup> 寺田弥生<sup>1</sup>、T. Keyes<sup>2</sup>、J. Kim<sup>2</sup>

材料科学における結晶材料（単結晶・多結晶）とガラス材料の特性の違いは、広く知られている。しかしながら、多結晶などの内部組織を含むマイクロからマクロにいたるマルチスケールの材料の構造や、多結晶などの複雑なダイナミクス、液体相からガラス相へと遷移する途中過程である過冷却液体状態で見られる複雑な緩和現象を伴うガラス相の形成過程のような時空間におけるマルチスケールにわたる材料科学の諸問題と材料特性の関係性についてはいまだ本質的な理解がなされていないところが多い。そこで、本公演では、よく知られている 12-6 レナード・ジョーンズ(LJ)タイプの粒子間相互作用を用いたモデルシステム系でのシミュレーションによって気体・液体・結晶・ガラス相の相図について議論する。特に、粒子にコロイド粒子などでよく見られるガウス型の粒度分布（粒子サイズの分散）を与えることによって結晶化をさけた場合に、粒子の大きさの違いのみ（図1）で、粒度分布と温度に対して、相転移点や相図などがどのように変化するのかを明らかにする。

相図を効率的に求めるために、一次相転移近傍などの不安定なエネルギー状態にアクセス可能な一般化されたレプリカ交換法[1]を用いた圧力一定の系のシミュレーションを行い、エンタルピー・自由エネルギー・体積などの物理量を求めた。シミュレーションの結果得られた臨界点と三重点の間の粒度分布-温度空間の相図の典型例（圧力  $P=0.10$  と  $0.01$ ）を図2に示す。高温領域では、気体-液体の相転移点に粒度分布と圧力の影響が強く見られる。一方、低温側では、液体-結晶相転移点とガラス相転移点にはほとんど圧力差は見られず、粒度分布の増大による結晶相転移点の消失は、圧力によらず、粒度分布の標準偏差  $0.15 < s < 0.20$  の間に存在することが明らかになった[2]。なお、研究会での講演では、臨界点以上の相図についても議論を行う。

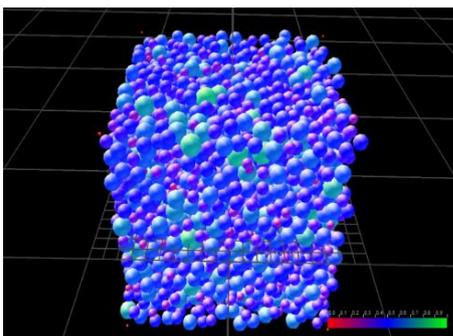


図1 標準偏差  $s=0.25$  の粒度分布を持つ LJ システムのアモルファス状態のスナップショット

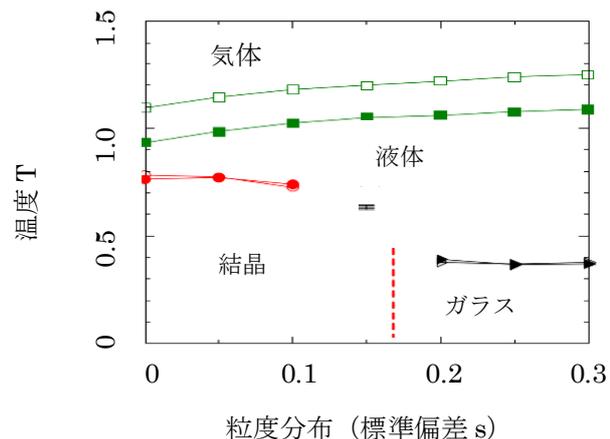


図2 粒度分布-温度に対する相図

白抜シンボル :  $P=0.10$  中塗シンボル :  $P=0.01$

文献

[1] J. Kim, T. Keyes and J. E. Straub, **JCP** vol.132, 224107(2010).

[2] Y. Terada, T. Keyes, J. Kim and M. Tokuyama, **AIP Conf. Proc.** vol.1518, p.776 (2013).