

【基盤研究(S)】

理工系(数物系科学)



研究課題名 液体の階層的自己組織化とダイナミクス

東京大学・生産技術研究所・教授 たなか はじめ
田中 肇

研究分野：生物物理・化学物理

キーワード：化学物理、ソフトマターの物理

【研究の背景・目的】

液体状態には、物質輸送・反応の場として極めて重要な機能が備わっており、工業的な輸送プロセス、マイクロフレイディクス、生命活動における水のように、多くの場面で極めて本質的な役割を果たしている。そのような重要性にもかかわらず、液体状態、そしてそれが凍結した状態であるガラス状態の物理的理解は、気体・結晶状態に比べて著しく遅れている。

本研究では、液体における未解明現象、(1)水型液体の熱力学異常・運動学的異常、(2)単一成分の液体-液体転移現象の起源の解明とその応用、(3)ガラス転移現象の解明、(4)高分子メルトを含む液体の結晶化の素過程と機構解明、(5)液体・ガラス状物質の非線形流動・破壊現象の解明と制御、という5つの基本問題の解明を目指す。

これまで単純液体は、微視的な構造・ダイナミクスに基盤を置く液体論の立場から研究されてきた。しかしながら、我々は、上述の液体における未解明問題の本質は、単純液体の構造・ダイナミクスに潜む階層性(図1参照)にあると考えている。本研究の特徴は、従来の液体論の立場とは異なり、階層性が本質的に重要である複雑液体(ソフトマター)の立場から単純液体に迫る点にある。

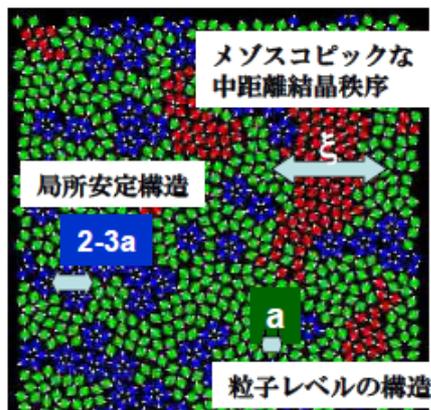


図1 過冷却液体の階層的構造

【研究の方法】

具体的には、(1)-(4)については、結晶構造形成傾向とそれとは異なる対称性をもつ局所安定構造形成傾向の競合という観点から、実験的アプローチ(実空間、波数空間での構造、ダイナミクス解

析、分光学的測定、熱測定)、ブラウン動力学、分子動力学シミュレーション、流体粒子ダイナミクス法などの数値シミュレーション、理論的研究の有機的な連携により、液体の動的階層性という概念に基礎を置いた新たな物理描像を定量的レベルで確立することを目指す。

【期待される成果と意義】

液体状態は物質の基本状態の一つであり、その基礎的な理解の進展の意義は極めて大きいと考えられる。生命現象、化学反応、様々な工業的プロセスにおいて水に代表される液体は不可欠であることは言うまでもない。応用面でも、例えば液体-液体転移を利用すると液体の様々な物理的性質

(密度、屈折率、粘度など)、化学的性質(反応性、異種物質との相溶性)等を、温度、圧力、流れ場、光などの外場を用いて制御することが可能になると期待される。また、液体、ガラス状物質、粉体などの非線形流動、アモルファス物質の破壊の機構解明も、破壊の予測、流動現象の基礎的理解において重要なばかりでなく、材料設計、マイクロ流路、コーティングなどその他の工学分野へも多大な貢献が期待される。また、我々は、非平衡状態における運動学的経路の選択には、運動量保存則に関わる輸送係数の動的対称性の破れが決定的な役割を演じていると考えており、これは非平衡状態における系の時間発展の道筋を支配する自然界の基本法則の解明につながると期待され、その波及効果も大きいと考えられる。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- H. Shintani and H. Tanaka, Frustration on the way to crystallization in glass, *Nature Phys.* 2, 200-206 (2006).
- R. Kurita and H. Tanaka, Critical-like phenomena associated with liquid-liquid transition in a molecular liquid, *Science* 306, 845-848 (2004).
- C. P. Royall, S. R. Williams, T. Ohtsuka and H. Tanaka, Direct observation of a local structural mechanism for dynamic arrest, *Nature Mater.* 7, 556-561 (2008).

【研究期間と研究経費】

平成21年度-25年度

151,800千円

ホームページ等

<http://tanakalab.iis.u-tokyo.ac.jp/>