

2023 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	川崎猛史
研究機関名	名古屋大学
所属部署名	大学院理学研究科
役職名	講師
研究課題名	多様な非晶性固体の構造抽出スキームの開発
研究実施期間	2023 年 4 月 1 日～2024 年 3 月 31 日

研究成果の概要

ガラス転移は、様々な物質系において広く観察される普遍的な現象であるが、その物理的起源は未解明である。特に、ガラス転移に伴う粒子構造の発達の有無は、ガラス転移現象が熱力学的な相転移現象であるかを定める重要な未解決問題と言える。我々は近年、深層学習に基づくガラスの特徴構造抽出手法を新たに開発し、複数のガラス形成モデルにおいて汎用的に特徴構造を特定できることを示した。本研究では、多様なガラス系にこの手法を適用することで、(1)ガラス転移を支配する構造の有無の解明、(2)系の詳細によらない普遍的構造抽出手法の開拓、(3)得られた構造に対する人間が理解可能な解釈の与えることを目標としている。本年度は、主に課題(1)および(2)に取り組んだ。比較的単純なガラス系においては、ガラス転移を支配する構造が順次見出されつつある。また、我々の機械学習手法を用いた極低温状態に限ったモデル金属ガラス系における準備的研究では、想定をはるかに上回る精度での動力学的予測を実現した[N. Oyama, S. Koyama, and T. Kawasaki, *Front. Phys.* 10, 1007861 (2023)]。しかし、これらの結果が過冷却液体や多様なガラス系において普遍的に成立するかは自明ではない。そこで当該スキームを、多様な温度にあるモデル金属ガラス系の過冷却液体における特徴構造の抽出に適用した。その結果、幅広い温度帯において当該機械学習スキームが有効であり、特徴構造とダイナミクスの相関が増大していく様子を捉えることができた。さらに、本スキームから粗視化自由体積が構造指標であることを突き止め、ガラスの「秩序変数」としての性質が明らかとなりつつある。また、金属ガラス以外にもシリカガラスなど質的に大きく異なるガラス系についても同様の解析を行うことを計画しており、特に本年度はその準備として、深層学習スキームの改良を行っており、あと少しで解析に取り組めるところまでできている。