

金 鋼 (きんこう)

【研究課題名】水の粗視化ポテンシャルで探索する液液転移のメカニズム



大阪大学 大学院基礎工学研究科 准教授

【E-mail】kk@cheng.es.osaka-u.ac.jp

【専門】ソフトマター化学工学

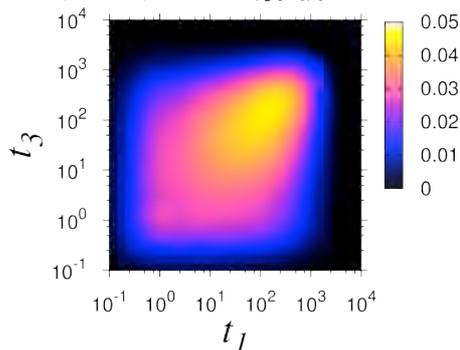
【キーワード】ガラス転移、液液転移、遅いダイナミクス、

分子動力学シミュレーション

凝縮相の中で特にガラス転移と水型液体が示す液液転移について、構造の異常性と遅いダイナミクスの相関を解明することを目指しています。特に、分子動力学シミュレーションと多次元分光法との類推による多体相関関数を用いて、階層的な時空間構造を支配するメカニズムを見出すことが鍵であるとしてアプローチしています。

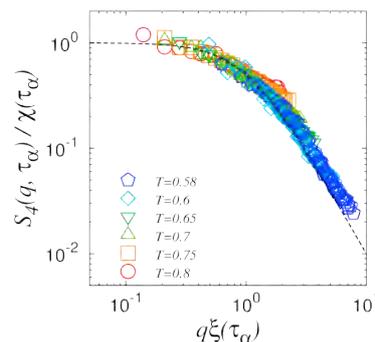
〈研究グループアクティビティ〉

多時間相関関数法による不均一ダイナミクスの解析



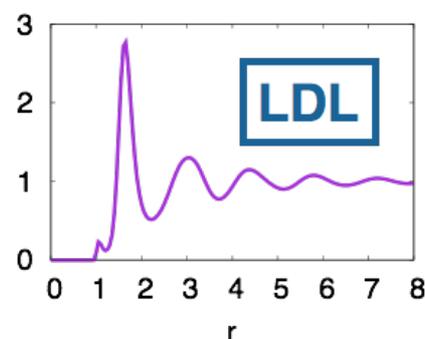
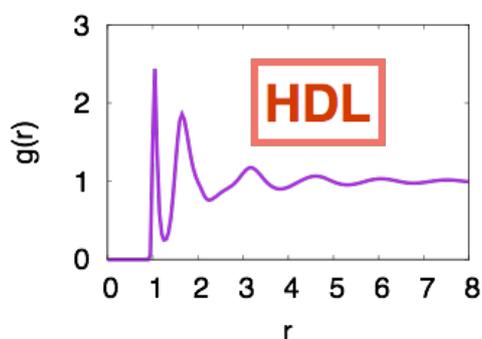
複数の時刻点の相関を持つ多時間相関関数による不均一ダイナミクスの特徴付け

ガラス転移における動的相関長の抽出



ガラス転移において顕著となる動相関長が4点相関関数によって抽出できる

高密度液体(DHL)-低密度液体(LDL)間の液液転移に対する分子動力学シミュレーション



水型液体に対する粗視化モデルである core-softened ポテンシャルにおける HDL, LDL の動径分布関数

Kang KIM

【Research Subject】 Water like polyamorphism in a monoatomic potential model:
liquid-liquid transition and glassy dynamics



Associate Professor

Graduate School of Engineering Science, Osaka University

【E-mail】 kk@cheng.es.osaka-u.ac.jp

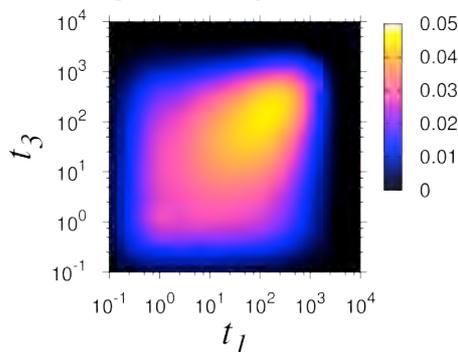
【Speciality】 Chemical Engineering in Soft Matter

【Keywords】 Glass transition, Liquid-liquid transition, Slow dynamics,
Molecular dynamics simulation

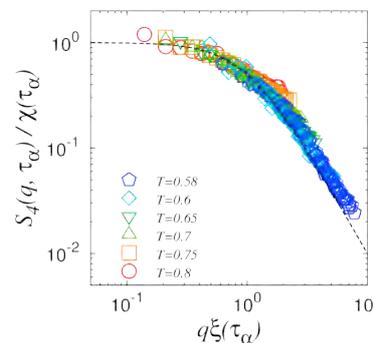
We have been working on simulation approaches to reveal the mechanism of slow dynamics in the structured and complex fluids and soft matters. A particular interest recently occurred in our research is multiple time and length scales in glassy systems and liquid-liquid transformations.

Research Group Activity

Multi-time correlation function analysis for heterogeneous dynamics **Dynamic length scales in glassy systems**

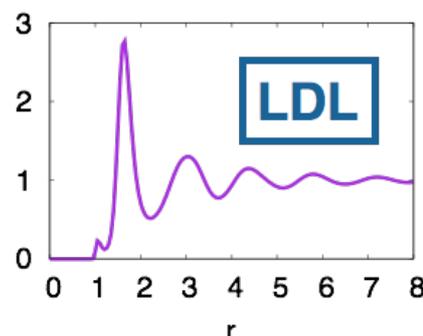
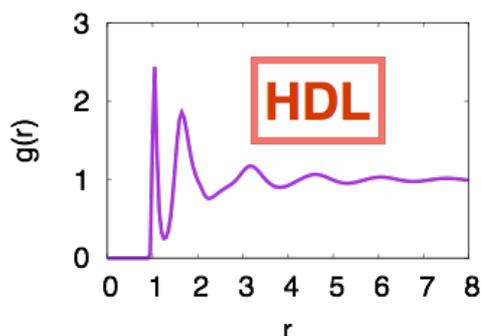


Characterizing the correlation of dynamics between t_1 and t_3



Determining the dynamic length scales from 4-point correlation function

Molecular dynamics simulation for liquid-liquid transition using core-softened potential



Radial distribution functions of high-density (HDL) and low-density (LDL) liquids