

🏠 交大首页 (<https://www.sjtu.edu.cn/>)

📰 上海交大报 (<http://shjdb.sjtu.edu.cn/>)

👁️ (https://weibo.com/chiaotunguniv?refer_flag=1001030102_)



旧版新闻学术网入口 (<https://oldnews.sjtu.edu.cn>)



上海交通大学 · 新闻学术网

SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY

(<https://news.sjtu.edu.cn/index.html>)

[首页 \(/index.html\)](/index.html) / [探索发现 \(/tsfx/index.html\)](/tsfx/index.html) / [交大智慧 \(/jdzh/index.html\)](/jdzh/index.html)

站内搜索



/ 正文

探索发现 · 交大智慧

上海交大童华课题组揭示过冷液体结构与动力学的普适性关系

2020年06月28日 责任编辑：叶丹



近日，上海交通大学物理与天文学院童华课题组在国际物理学权威期刊Physical Review Letters上以“Role of Attractive Interactions in Structure Ordering and Dynamics of Glass-Forming Liquids”为题发表了关于过冷液体结构与动力学普适性关系的最新成果。该项研究通过构建多体结构序参量揭示了降温过程中过冷液体中特殊结构的存在和演化，以及结构与动力学的普适性关联。该工作澄清了学术界争论10多年的经典问题，明确了简单液体理论的缺陷，从多体结构序的角度为过冷液体理论的发展和玻璃化转变问题的解决提供了新的思路。

PHYSICAL REVIEW LETTERS

Highlights Recent Accepted Collections Authors Referees Search Press About

Access by Shanghai Jiao Tong University Go Mobile »

Role of Attractive Interactions in Structure Ordering and Dynamics of Glass-Forming Liquids

Hua Tong and Hajime Tanaka
Phys. Rev. Lett. **124**, 225501 – Published 2 June 2020

Twitter Facebook More

Article References No Citing Articles PDF HTML Export Citation

ABSTRACT

A key question in glass physics is what the origin of slow glassy dynamics is. The liquid structure is a natural candidate; however, an apparently severe counterexample has been known. Two model glass-forming liquids, with the standard Lennard–Jones interaction potential and its Weeks–Chandler–Andersen variation without the attractive tail, exhibit very similar structures at the two-body level but drastically different dynamical behaviors in the supercooled states. Here we look at the liquid structure through a (many-body) structural order parameter Θ characterizing the packing capability of local particle arrangements. We show that the structures of these two systems seen by Θ are actually very different at a many-body level, but, quite surprisingly, the macroscopic structure (Θ)-dynamics (τ_v) relationships commonly follow a Vogel–Fulcher–Tammann-like function. Furthermore, the mutual information analysis reveals strong local structure-dynamics correlations. Therefore, we conclude that attractive interactions affect the liquid structure in a nonperturbative manner, but a general structural origin of slow dynamics holds for these systems.

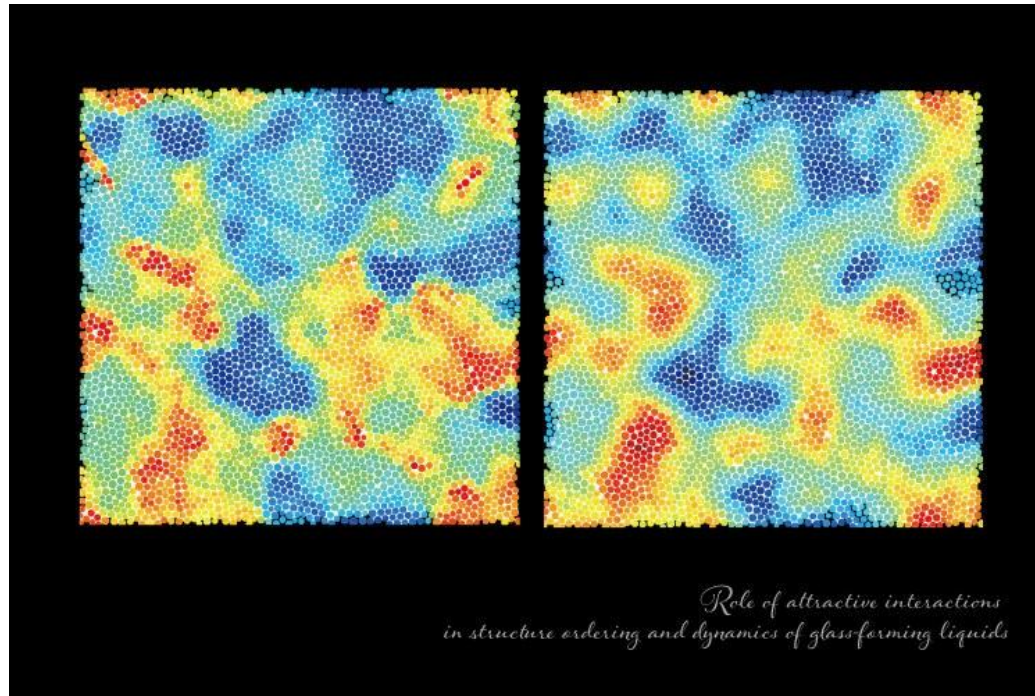
Issue
Vol. 124, Iss. 22 — 5 June 2020

Check for updates

Reuse & Permissions

PHYSICAL

玻璃是一种“非液非固”，同时“即液又固”的物质，时至今日其的形成过程仍不为科学家所理解。一个核心的问题是，过冷液体如何会在降温过程中迅速变得粘稠，而后形成玻璃。我们知道，液体通过结晶变成固体的过程伴随着结构从无序到有序的转变。然而玻璃、过冷液体和普通液体似乎具有类似的无序结构；那么在玻璃化转变的过程中，物质到底发生了怎样的变化？随着对过冷液体研究的深入，人们发现从范德瓦尔斯时代开始发展起来的简单液体理论并不能很好地描述其行为；相关联的，对玻璃化转变过程乃至结晶过程的认识也在不断地更新发展。研究人员逐步认识到，对这些经典物理过程的准确描述要求我们超越过去的简单两体（少体）或平均场理论，恰当地引入多体关联。



童华课题组及其合作者关注过冷液体中特殊结构的存在及其随温度的演化。这些特殊的结构不具有典型的对称性，因而不能通过传统的手段来探测和描述。基于结构有效排布导致自由能优化的考虑，童华课题组构建了过冷液体的多体结构序参量，发现表面类似的两种过冷液体实际上具有不同的结构，同时其动力学行为存在显著差异。因此，过冷液体在结构和动力学两方面均违背了简单液体理论的预期。课题组还发现，随着温度降低，过冷液体的特殊结构有序度不断提升，同时动力学快速变慢，但是其相互关系满足普适的幂率描述。这一结果重构了过冷液体中基本的结构-动力学关系，为后续的理论发展提供了基础。

童华课题组同时在微观层面研究了过冷液体结构与动力学异质性的关系。动力学异质性是过冷液体不同于普通液体的核心特征之一，其物理根源长期存在争议。课题组采用信息论的观点，分析发现关于动力学异质性的主要信息可以从初始结构特征得以预测。作为对比，能量项并不能预测动力学的任何信息。这一结果明确证明了动力学异质性的结构起因。有趣的是，研究还发现随着温度降低，过冷液体中结构的关联会不断延展，这暗示着玻璃化转变过程可能与临界现象存在某种相似性。

论文第一作者为上海交通大学物理与天文学院院长聘教轨副教授童华，合作者为日本东京大学Hajime Tanaka教授。

童华课题组学院主页：<https://www.physics.sjtu.edu.cn/huatong>
(<https://www.physics.sjtu.edu.cn/huatong>)

论 文 链 接 :

<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.124.225501>
(<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.124.225501>)

作者: 童华

供稿单位: 物理与天文学院

沪ICP备05052060 (<http://www.beian.miit.gov.cn/>) 沪举报中心 版权所有© 上海交通大学 新

闻网编辑部维护

地址: 上海市东川路800号 邮编: 200240 查号: 86-21-54740000