

A01-004 ガラスにおける遅いゆらぎのダイナミクスと隠れた秩序

名古屋大学大学院理学研究科 宮崎州正

大阪大学 大学院理学研究科 吉野元

1. Dynamical heterogeneity と Shear transformation zone の関係

ガラス転移には、十数桁にもおよぶ緩和時間の増大が伴う。興味深いことに、このダイナミクスの劇的なスローダウンに、静的な粒子配置の目立った変化はない。しかしながら、ダイナミクスの空間パターンに注目すると様相は一変する。ガラス転移点近傍の過冷却液体には、粒子のよく動ける空間領域と、ほとんど動けない空間領域が実空間上にパッチワークのように現れる。この現象は **Dynamical heterogeneity (DH)** と呼ばれている。一見するとランダムに見える静的な粒子配置と、DH がみせる不均一なダイナミクスのパターンの関係は、未だ完全には理解されていない。一方で、紛体や泡系にせん断変形を加えた場合にも、DH のように粒子の変位の空間的な集中が観測されている。変形前後のスナップショットには欠陥構造など一切見当たらないにも関わらず、粒子の動いた変位には不均一なパターンが現れる。このような空間領域は **Shear transformation zone (STZ)** と呼ばれている。STZ も DH と同様に、変形前の粒子配置のスナップショットから、変形後の不均一な変位を予測することは難しい。

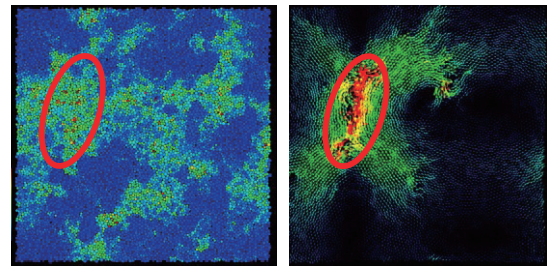


図1. DH と STZ

DH(左図)におけるよく動いた空間領域(黄緑)とほとんど動かなかった空間領域(濃青)。STZ(右図)における変位の大きな空間領域(赤)と変位の小さい空間領域(黒)。

DH, STZ の研究では、“一見ランダムに見える粒子配置の何がダイナミクスの不均一なパターンを生み出すのか”、という問題意識が共通している。本研究では、シミュレーションを通じて両者の間の関係性を探った。その結果、応力-歪曲線の線形領域の中に現れる STZ の出現パターンが、DH におけるよく動ける空間領域と対応していることが分かった。このことは、過冷却液体における熱揺らぎと、せん断変形による非熱的な駆動力の違いに関わらず、ヘテロなダイナミクスを支配する共通の「動きやすい/壊れやすい粒子配置」が存在することを示唆している(1)。

2. 乗法的なノイズを持つランジュバン方程式と拘束条件

ランジュバン方程式は揺らぎが支配的な系を扱う標準的な運動方程式である。拘束系や非平衡系など興味深い問題の多くは、ノイズとシステム変数が非線形に結合した **multiplicative** 系である。我々は、非線形ランジュバン方程式に特有のノイズの解釈のあいまいさを排した一般的な方程式を導出した。この式は任意の拘束、非平衡系に応用できる一般性の高いものである(2)。

3. ジャミング転移点近傍における異常な熱揺らぎ

コロイドやエマルジョン、また粉体などをランダムに凝集させるといわゆるジャミング状態と呼ばれるアモルファス固体ができる。固体であるという点ではジャミング状態も結晶と同

じである。しかし、その「熱揺らぎ」の特性は、通常の固体描像から大きく逸脱するものであることがわかってきた。

ここで通常の固体描像とは、エネルギー極小状態の近傍で系が「ばね」の様な調和的な振動をしているというものである。アモルファス固体では当然、乱れたばね系を考えることになる。ところが、高密度エマルジョンを念頭に行った大規模なMDシミュレーション(3)の結果、ごく弱い熱揺らぎ(注1)によるごく弱い粒子間接触の切断によっても、それが引き金となってその周囲にメソスケールに広がった塑性変形、「ばねの組み替え」が起ることがわかってきた。その結果、実効的なばね定数(剛性率)が繰り込まれて一桁近く低下し、系は絶対零度で正確な調和近似から期待されるものよりもずっとやわらかな固体として振る舞う。定量的な違いだけでなく、ジャミング転移点近傍での剛性率のスケーリング特性までが調和近似とは定性的に異なることもわかった。このような特異性は、接触型の斥力相互作用に起因していると考えている。

また上記の現象は、無限大次元系での理論解析によって最近見いだされた「連続的なレプリカ対称性の破れ」(4)が「硬さの階層構造」となって現れたものである可能性があり、無限大次元系での剛性率の理論解析を現在進めている。

(注1) 典型的なエマルジョン粒子間接触によるエネルギーによって換算した「室温」は 10^{-9} - 10^{-7} という「極低温」に相当し、MDシミュレーションもこの温度スケールで行っている。

4. ガラス・ジャミング準安定状態の準静的応答の理論解析法の構築

Franz-Parisi ポテンシャルの方法(5)をクローン液体論に応用することによって準安定状態の準静的変化を、平衡状態から外れたところまで追跡できることを見いだした。これを用いて第一原理的に「降伏応力」を解析する手法を現在開発中である。

参考文献:

- (1) M. Ozawa and K. Miyazaki (in preparation).
- (2) T. Kuroiwa and K. Miyazaki, *J. Phys. A: Math. Theor.* **47**, 012001/1-8 (2013).
- (3) S. Okamura and H. Yoshino, arXiv:1306.2777
- (4) P. Charbonneau, J. Kurchan, G. Parisi, P. Urbani, F. Zamponi, arXiv:1310.2549.
- (5) S. Franz and G. Parisi, *J. Phys. I France* **5**, 1401 (1995); F. Krzakala and L. Zdeborova, *EPL* **90**, 66002 (2010).