

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 サイバーメディアセンター 吉野元

1. ランダムピンング液体の理想ガラス転移

ガラス転移点の存在はいまだに証明されていない。実験から得られる粘性やエントロピーのデータを高温側から外挿すると、確かに有限温度で熱力学的な特異点が存在することが示唆されるが、緩和時間の増大に阻まれて、その特異点を直接観測することが出来ないためである。最近、この困難を克服するアイデアがスピングラスの平均場模型の解析から提案された。これは構成粒子の自由度の一部を凍結（ピンング）させることにより、真のガラス転移点を高温側に引き上げるというものである。熱平衡状態で得られた粒子配置をピンングさせるため、この系の配置情報や静的な物理量は完全にバルクのそれと一致している。本研究では、3次元の液体の分子の配置を一部ピンングした系のシミュレーションを行い、有限次元の液体においても確かに真のガラス転移点（理想ガラス転移点）が存在を検証することを目的とした。まず、ランダム系における秩序変数であるオーバーラップ関数と配置エントロピーをレプリカ交換法と熱力学的積分を用いて精密に計算した。この秩序変数とエントロピーの二つの手法から独立に得られた理想ガラス点 T_K は、あるピンング密度の範囲でほぼ一致した。さらに、平均場理論が予想する動的転移点 T_d を、ポテンシャルランドスケープにおける鞍点を数え上げることにより計算した。これらを相図としてまとめたのが図1である。(a) T_K と T_d がピンング粒子密度 c の増加とともに上昇すること、(b) その二つの線が有限の温度で交差すること、(c) さらに c が増加するとそれぞれの線が分岐するように離れていること、などがわかる。(a)と(b)は平均場理論が予想したとおりの結果であり、(c)はいわゆる Widom 線の存在を示唆するものである(1)。

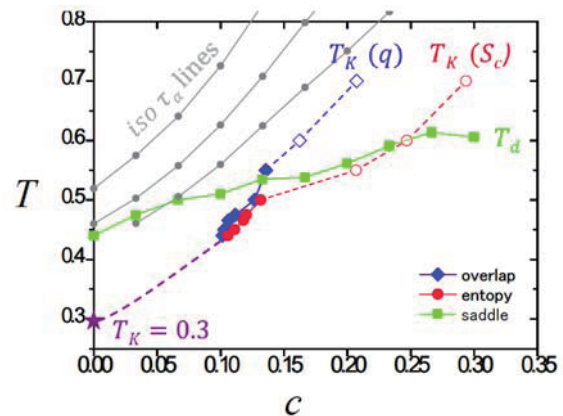


図1. 理想ガラス転移点 T_K (◆と●)と動的転移点 T_d (■)。

2. ガラス転移の高次特異点における異常なダイナミクス

モード結合理論(MCT)は、ガラス転移の平均場理論として重要であるが、前記のピンング系にはそのまま適用できない。我々は MCT を拡張し、ピンング系や引力ガラス系に特有の高次特異点周辺のダイナミクスを記述することに成功した。特に非一様系に拡張した MCT により、動的相関長や4体相関関数の臨界的な振る舞いを平均場の範囲で計算することに成功した(2)。

3. 高次元剛体球ガラスにおける剛性率

最近、高次元極限での剛体球ガラスにおいてはレプリカ液体論が近似なしに展開できること

が明らかになってきている。我々は、この系においてシア歪みを含む場合に一般化した剛体球ガラスの自由エネルギーの厳密な表式を導出することに成功した。これに基づき、剛性率の厳密な計算(1段階のレプリカ対称性の破れ(RSB)および連続 RSB の場合)を行った(3)。特に、ジャミング転移点近傍にあるランダム充填系の剛性率の臨界スケーリング則を、初めて第一原理的な理論計算から捉えることができた。さらに、連続 RSB 構造を反映して、階層的な剛性率が予言され、metabasin の剛性率は、上記の剛性率よりもずっと小さく、別のスケーリング則に従うことが明らかになった。これはスピングラスにおけるいわゆるゼロ磁場冷却(ZFC)帯磁率と磁場中冷却(FC)帯磁率の違いに相当するアノマリーがジャミング転移点近傍の剛体球ガラスの剛性率にも存在する可能性を示唆しており、興味深い。

4. ガラス準安定状態における圧縮・シアに対する断熱的応答

最近、Zamponi 氏と彼の共同研究者(Corrado Rainone 氏 (ENS Paris)、Pierre-Francesco Urbani 氏 (CEA, Saclay))らは Franz-Parisi ポテンシャルの方法で、この系におけるガラス的な準安定状態を圧縮してジャミングさせたり、逆に減圧して溶かしたりするプロセスを追う (state following) 解析を始めていた。吉野は、これに途中から加わり、これらの準安定状態にシアを加える解析を彼らと共同で行った。その結果、線形応答のみならず、非線形応答、特に降伏応力を捉えることに成功した(図 2)。この結果は、圧縮の場合を含めて共同で論文にまとめた(4)。この結果は、理想化された熱平衡状態としての理想ガラス状態のみならず、現実の準安定状態としてのアモルファス固体の物性に関する第一原理的アプローチとしてレプリカ液体論を今後さらに展開させてゆけることを期待させる。

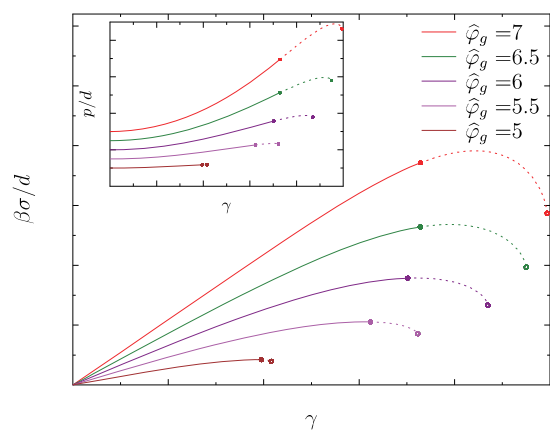


図 2. ガラス準安定状態のシア歪み・応力曲線：高密度においてサンプルされた準安定状態ほど、高い剛性率、降伏応力を示している。挿図に示すように圧力も同時に増加している(ダイラタンシー効果)

参考文献:

- (1) M. Ozawa, W. Kob, A. Ikeda, and K. Miyazaki, arXiv:1412.4911.
- (2) S. K. Nandi, G. Biroli, J-P. Bouchaud, K. Miyazaki, D. R. Reichman, Phys. Rev. Lett. 113, 245701 (2014).
- (3) H. Yoshino and F. Zamponi, Phys. Rev. E 90, 022302 (2014)
- (4) Corrado Rainone, Pierfrancesco Urbani, Hajime Yoshino, Francesco Zamponi Phys. Rev. Lett. 114, 015701 (2015)