

# 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. ランダムピニング液体の理想ガラス転移

ガラス転移点を数値計算で到達することは事実上不可能である。この困難を克服するアイデアがスピニングガ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（ピニング）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ニングさせるため、この系の配置情報や静的な物理量はバルクのそれと一致している。我々は、3次元の液体の分子の配置を一部ピニ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真のガラス転移点（理想ガラス転移点）が存在を検証した。特に今年度はダイナミクスの特異性についても解析を行った [1,2]。特に動的相関関数の自己成分と協同成分を独立に解析した結果、バルクのそれと異なり、それぞれの成分のダイナミクスが分離することが分かった。この結果は、理想ガラス相の中では協同的な揺らぎは凍結しているにもかかわらず、個々の粒子はホッピング運動を介して自己拡散が可能であることを示している。さらにバルクの過冷却液体で普遍的に観測される Adam-Gibbs 法則がランダムピニング系では大きく破綻することも分かった。これはモード結合理論など平均場理論の解析から既に示唆されていた結果と矛盾しない。

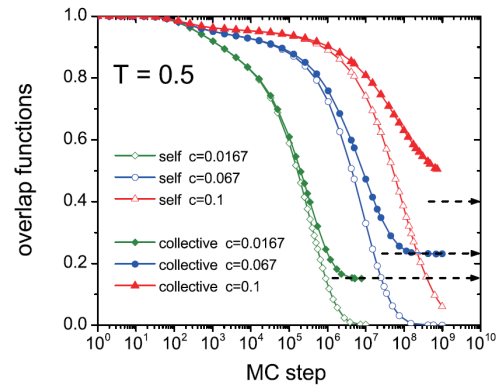


図 1 オーバーラップ関数の時間依存性。線が協同成分、点線が自己成分を表す

## 2. ベーテ格子上的 Fredrickson-Andersen 模型のランダムピニングガラス転移

ガラス転移を説明するために発達した理論は数多ある。その中で、熱力学的な理論である Random-First Order Transition (RFOT) 理論の対局にあるのが、ガラス転移を動力学的転移とみなす Dynamic Facilitation (DF) シナリオである。DF シナリオを説明するために導入されたモデルに、Fredrickson-Andersen (FA) 模型という単純なスピン模型である。異なるシナリオに従うモデルを使って、ガラス転移のダイナミクスの定性的な振る舞いの違いを比較することでガラス転移の本質に迫る目的で、我々は、ベーテ格子上的 FA 模型のランダムピニングガラス転移を解析した。RFOT 理論は、粒子の自由度の一部ピニングするとガラス転移線が上昇し、また新種の臨界点が存在すること预言している。我々は、FA 模型の動的転移点を半解析的に計算し、この転移点も不純物密度の増加に伴い、上昇すること、新種の臨界点に対応する終端点が存在することを示した。

## 3. 高濃度ガラス状態における階層的剛性率

最近、ガラス相の奥深く、高密度領域におけるエネルギーランドスケープが従来考えられていたものよりもはるかに複雑で、ガードナー転移と呼ばれる連続レプリカ対称性の破れに

よってある種の階層性を獲得することが理論的に示された。これは高次元極限における剛体球系のレプリカ液体論によって厳密に示された (P. Charbonneau, et al. *Nature communications* 5 (2014))。昨年度、我々はこの階層構造がレオロジーにも反映されること、特に剛性率に明瞭に反映されることを同じ高次元極限でのレプリカ液体論の枠組みの中で厳密に示していた (H. Yoshino and F. Zamponi, *Phys. Rev. E* 90, 022302 (2014))。

そこで今年度はこれを 3 次元斥力ポテンシャル系の高密度領域で検証する MD シミュレーションを行った [4]。

その結果、図 2 に示すように、剛性率に履歴依存性が現れ、圧縮とシアが非可換になっていることが示された。また、FC と ZFC では圧力に対するスケールも異なり、理論と合致していることがわかった。このことは現実の 3 次元系においてもエネルギーランドスケープの階層性が存在することを強く示唆している。さらに現在、3 次元剛体球系でも解析中である。

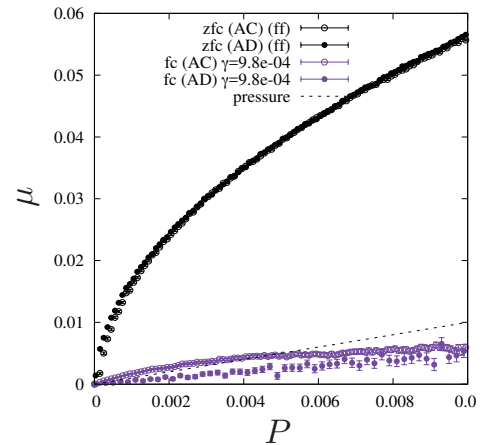


図 2 ZFC (圧縮→シア)と FC(シア→圧縮)の線形剛性率の圧力(P)依存性

#### 4. 回転自由度のガラス転移とジャミング転移、あるいは連続彩色問題

我々は、プラスチック・クリスタルや、orientational glass と呼ばれる系を念頭に、粒子の「回転自由度」のガラス転移、ジャミング転移を考察するための理論模型を構築し、理論とシミュレーションによって解析を行った。この模型はスピン模型であるが、いわゆるスピングラス模型とは異なり、quenched randomness を一切持たない。パイロクロア格子上的反強磁性体など、ある種のフラストレート磁性体では quenched randomness によらずにガラス転移を示しているように見えるものもあり、関連する可能性がある。さらにこの模型は、グラフの彩色問題を連続化したいわゆる circular coloring の問題を含んでおり、情報統計力学の問題としても興味深い。(ジャミング転移は彩色の限界に、ガラス転移は彩色解の解空間の分裂に対応する。)

今年度は、まず回転自由度を表すスピン変数の成分数  $N$  が無限大の極限で、レプリカ「スピン」液体論が厳密に展開できることを示し、具体的に 1 段階のレプリカ対称性の破れ、ガードナー転移による連続レプリカ対称性の破れが起こることを理論的に示した。(H. Yoshino, 投稿準備中) また現在、有限の成分数  $N=2, 3$  の系において、ジャミング転移、ガラス転移の数値シミュレーションによる解析をそれぞれ進めている。

- [1] M. Ozawa, W. Kob, A. Ikeda, K. Miyazaki, (2015) *PNAS* **112**, 6914 (2015).
- [2] M. Ozawa, W. Kob, A. Ikeda, K. Miyazaki, (2015) *PNAS* **112**, E4821 (2015).
- [3] Harukuni Ikeda, Kunimasa Miyazaki, *EPL* **112**, 16001-p1 ~ 16001-p6 (2015).
- [4] D. Nakayama, H. Yoshino and F. Zamponi, arXiv:1512.06544.