

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. ガラスのフラジリティの統一的理解[1]

フラジリティは、ガラス転移を特徴づける重要なパラメータであるが、その物理的起源は明らかになっていない。主な理由は、フラジリティを統一的に理解するのに適した単純なモデルが不在であったことにある。我々は、粒子間相互作用の一つのパラメータのみをコントロールすることで、最もフラジリティの小さいシリカのガラスと、最もフラジリティが大きいソフトコアガラスをシームレスに繋ぐことができる単純液体モデルを考案し、その数値解析を行った。その結果、フラジリティと、緩和指数、構造、比熱、Stokes-Einstein 則の破れとの相関を明らかにした。これらの多くは、異なる実験結果の傾向としては知られていたが、単一モデルを用いての系統的な解析は初めてのことである。

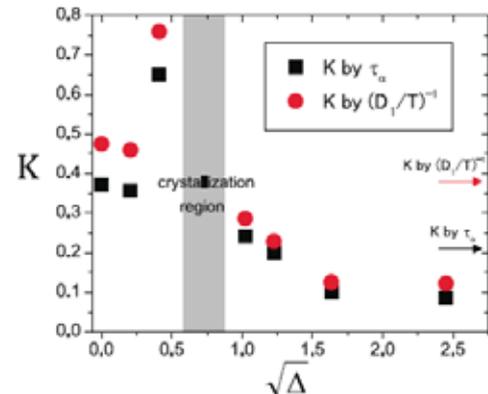


図 1 フラジリティ(K)の相互作用の引力の強さ(Δ)依存性。

2. ランダムピニング-Fredrickson-Andersen 模型の動的不均一性[2]

ガラス転移を説明するための理論は数多くあるが、その中でガラス転移を動力学的転移とみなすと仮定に立脚したシナリオが Dynamic Facilitation(DF)理論である。我々は DF 理論の代表的なモデルである Fredrickson-Andersen(FA)模型を、ランダムな不純物が付加されたベータ格子上で解析した結果を既に報告している。今回は、この解析をさらに推し進め、多体相関関数を理論的、数値的に解析することでこのランダムピニング FA 模型の動的不均一性の性質を明らかにした。その結果、不純物密度の大きい領域で現れる異常な臨界点で、動的不均一性のスケール則が、DF シナリオとは対極にあるモード結合理論が予言するそれと一致することが明らかになった。

3. Ultra-soft ポテンシャル液体のクラスターガラス転移[3]

ガラス転移の性質は、単純液体に対しては分子間相互作用の詳細に劇的に依存することはないと信じられてきた。我々は、ultra-soft ポテンシャルと呼ばれる、粒子の重なりさえ可能なほど単距離斥力が弱められたモデル系を用いて、ガラス転移の詳細を数値計算により解析した。その結果、超高密度領域で、粒子が2分子、3分子状にクラスター化し、そのクラスターがガラス転移をすることが明らかになった。密度と増大とともにクラスター内粒子数は離散的に増大し、そのたびに新しいガラス相が出現することが分かった。

4. ガードナー転移に伴う特異なレオロジー[4,5]

ガラスは乱れていることを除くと結晶と同じように固体である。そこで従来は、ガラスにおいても結晶と同じく、少なくとも十分低温・高密度では「エネルギー極小状態+調和的な振動」という描像が基本的に成り立つと考えられてきた。ところが最近、ガラス相の奥深くにおいてガードナー転移と呼ばれる連続レプリカ対称性の破れが起こり、これによって階層

的なエネルギーランドスケープが出現することが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示された(P.Charbonneau,et al. (2014))。我々はこの階層構造がレオロジー、特に剛性率に明瞭に反映されることをレプリカ液体論の枠組みの中で示していた (H. Yoshino and F. Zamponi,(2014))。

今年度、この現象を3次元剛体球系における分子動力学シミュレーションで明瞭に捉えることに成功した[5]。

(図2) 密度の増大によってガードナー転移が起こると、圧縮とシアが非可換になり ZFC/FC 剛性率に差異が生じ、異なる圧力依存性を示す。これは理論的な予測と合致している。昨年度のソフトコア系の解析[4]でもこの非可換性を捉えてはいたが、ガードナー転移との関連が不明で、またFC 剛性率に強いサイズ依存性が残っていた。今回、これらの問題を克服できた。

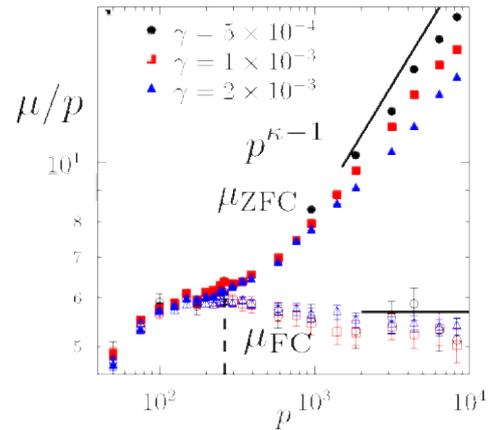


図2 剛体球ガラスにおける ZFC 剛性率 (圧縮→シア) と FC 剛性率 (シア→圧縮) の圧力 p 依存性。実線は理論予測。点線はガードナー転移点。

4. 回転自由度のガラス・ジャミング転移の普遍性

回転自由度のガラス・ジャミング転移を統一的に捉える平均場理論の構築、解析を進めた。我々のモデルは、(1)ヤヌス粒子の回転自由度のガラス転移、(2)ランダムネスをもたないフラストレート磁性体における自発的なガラス転移、さらに(3)circular coloring など連続自由度の制約充足問題 (図3) などの平均場模型とみなすことができる。昨年度すでに大雑把な解析を行っていたが、本年度は特に連続的にレプリカ対称性の破れが起こっている領域での解析を詳細に行った。このモデルは、ある種の p-spin 模型になっており、p=1 の極限では、パーセプトロンの問題に一致する。後者のジャミング転移の臨界指数は剛体球系と同じである (S. Franz and G. Parisi. (2016))。今年度の解析の結果、ユニバーサリティは全ての p において剛体球系と同じになることが明らかになった。これはジャミング (SAT/UNSAT) 転移のユニバーサリティが著しく広いことを示唆する。(吉野、投稿準備中)

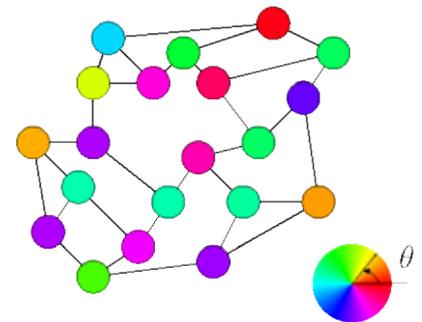


図3 p=2 体相互作用、2成分スピン (XYスピン) の場合、連続色によるグラフ彩色問題に対応づけられる。0 < θ < 2π の「色角度」(HSVカラーマップ) で表される連続色で各ノードを彩色する。ただし、隣接ノードにおける角度差がある閾値以上でなければならない、という制約を課す。

[1] M. Ozawa, K. Kim, and K. Miyazaki, (2016), J. Stat. Mech.: Theory and Exp., 074002.

[2] H. Ikeda, K. Miyazaki and G. Biroli, (2016) EPL, 116, 56004.

[3] R. Miyazaki, T. Kawasaki, and K. Miyazaki,(2016), Phys. Rev. Lett. 117, 165701.

[4] D. Nakayama, H. Yoshino and F.Zamponi, (2016) J. Stat. Mech. : Theory and Exp., 10, 104001.

[5] Y. Jin and H. Yoshino, arxiv:1610.07301