

過冷却液体に潜む秩序とガラス転移・結晶化

(東京大学生産技術研究所) 田中 肇

【はじめに】

ガラス転移現象そのものは、コロイド・高分子等のソフトマター・金属・半導体・酸化物・有機物等に普遍的に見られる液体状態から非エルゴート状態への転移現象であり、その研究の歴史はきわめて長い。しかし、そのスローダイナミクスの機構、普遍性の起源、ガラス形成能の制御因子等に関しては、未だに満足のいくレベルでは解明されていない。ここでは、ガラス転移を「結晶化に対するフラストレーション」として捉える我々のアプローチ(1-3)について紹介させて頂くとともに、動的なガラス転移現象の背景にある秩序変数について議論する。

【結果と考察】

我々は、ガラス転移において、結晶化が基本的な秩序化であると考えているので、バルク金属ガラス分野等で重要なガラス形成能の制御因子がフラストレーション強度により決定されるという簡単なシナリオを提示してくれる(3)。この問題は、結晶化が「純粋に」運動学的に回避されることを前提とした従来のフラストレーション・モデル、その他のガラス転移のモデルでは容易には扱えないことを強調しておく。

実際、我々の数値シミュレーションにより、エネルギー的、幾何学的フラストレーションの双方の場合に関して、過冷却液体中に実際に結晶的中距離秩序が出現し、過冷却度の増大と共にその特徴的な大きさが理想ガラス温度に向かって臨界発散的に増大することが示された(3-7)。また、このボンド配向秩序は、結晶核形成においても極めて重要な働きをすることが明らかとなった(8)。このことは、従来の結晶化を密度場の並進的秩序化として捉える立場の理論では説明できず、結晶化の理論的記述においてもボンド配向秩序がきわめて重要な役割を演じることを示している(9)。我々は、ガラス転移現象は、並進秩序化が阻害された上でのボンド秩序化へのフラストレーションとして理解できると考えている(9)。

【参考文献】

- (1) H. Tanaka, *J. Phys.: Condens. Matter* **10**, L207 (1998); *J. Chem. Phys.* **111**, 3163, 3175 (1999); *J. Non-Cryst. Solids* **351**, 3371, 3385, 3396 (2005).
- (3) H. Shintani and H. Tanaka, *Nature Phys.* **2**, 200 (2006); *Nature Mater.* **7**, 870 (2008).
- (4) T. Kawasaki, T. Araki, and H. Tanaka, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 215701 (2007); T. Kawasaki and H. Tanaka, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 185701 (2009).
- (5) K. Watanabe and H. Tanaka, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 158002 (2008).
- (6) H. Tanaka, T. Kawasaki, H. Shintani, and K. Watanabe, *Nature Mater.* **9**, 324 (2010).
- (7) K. Watanabe, T. Kawasaki, and H. Tanaka, *Nature Mater.* **10**, 512 (2011).
- (8) T. Kawasaki and H. Tanaka, *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A.* **107**, 14036 (2010); *J. Phys.: Condens. Matter* **22**, 232102 (2010); J. Russo and H. Tanaka, to be published. .
- (9) H. Tanaka, *J. Stat. Mech.* **2010**, P12001 (2010); *Euro. Phys. J. E*, to be published.