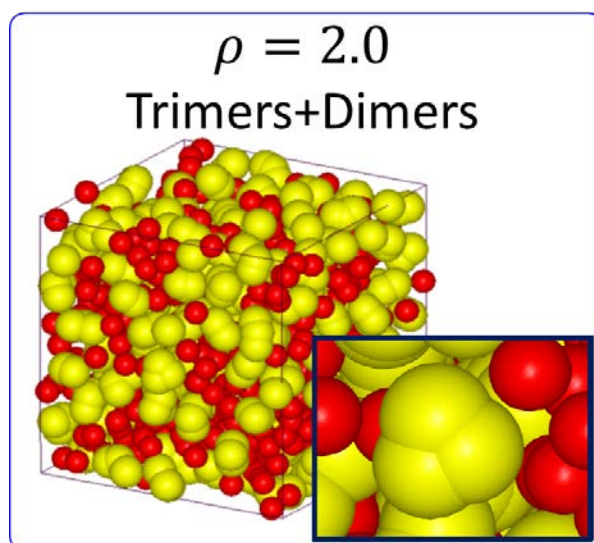


Ultra-Soft Potential 液体のクラスターガラス転移

(名古屋大学・理学・物理) 宮崎州正、宮崎涼二、川崎猛史

【はじめに】過冷却液体のガラス転移は、極めて普遍性が高い現象であるにも拘わらず、その本質は未解明である。その理由の一つとして、従来のほとんどの理論研究が、レナード・ジョーンズポテンシャルや剛体球のような単純なモデル液体ばかりを対象にしてきたことが挙げられよう。これらはいずれも短距離斥力が支配的な系であるが、単純すぎて出てくるデータにシステム依存性があまり出でこず、似たり寄ったりの結論しか導けないのだ。そこで最近、我々は、いろいろな角度から理論との比較が容易にできるような新しい研究方法を探している。特に注目しているのが、まったく新しい相互作用を用いることである。今回報告するのは、「一般化



Hertz モデル」と呼ばれる一連のモデルの研究成果である。一般化 Hertz モデルとは、相互作用ポテンシャルが、 $v(r) = \alpha(1-r)^a$ ($r > 1$)で与えられるような系のことである。ここに出てきた指数は、 $a=2$ の場合は調和ポテンシャル、 $a=5/2$ の場合は Hertz ポテンシャルと呼ばれており、しばしばコロイドガラスの研究で用いられている。このポテンシャル系は $r=0$ で斥力が発散することがなく、粒子二つが完全に重なることさえできるので、ultra-soft potential 液体と呼ばれている。ultra-soft potential 液体は、その「柔らかさ」のために、ときに直観に反する様々な特異な熱力学的な振る舞いをする事が知られている。当然この系のガラス転移も特異になるであろう、というのが我々の動機の一つであった。

【結果と考察】

我々は、特に一般化 Hertz モデルの指数 a が 2 以下である場合のガラス転移に注目した。先行研究で、この場合の結晶状態に「クラスター相」と呼ばれる、何個もの粒子が重なって、一格点点を構成するような、超格子構造が予言されていたからである。我々はこの系をガラス化しやすいように二成分系にして数値実験を行ったところ、右図に示すようなガラス相が実現することを発見した。そのダイナミクスや構造（粒子配置）などを詳細に調べた結果、密度の増大とともに、通常の一粒子（モノマー）からなるガラスから、段階的に二粒子（ダイマー）のガラス、トリマーガラスへと変化することがわかった。いわゆる glass polyamorphism が見つかったわけだが、その様子は、液体・液体転移のそれによく似ている。さらに異なるガラス相の相境界のダイナミクスが、高次ガラス転移と呼ばれる系に特有の特異性を持つことも分かった。いずれも従来の液体モデルでは見られなかった新規現象である。

【参考文献】

(1) Ryoji Miyazaki, Takeshi Kawasaki, and Kunimasa Miyazaki, Phys. Rev. Lett. (in press), arXiv:1604.05886