

# 高分子ガラスにおけるボゾンピークに潜んだ普遍性： デバイ理論と弾性力学に基づく振動状態密度のスケーリング

(阪大院基礎工\* 東大総合文化\*\* 筑波大数物\*\*\*)

友重直也\*, 水野英如\*\*, 金鋼\*, 森龍也\*\*\*, 松林伸幸\*

## 【はじめに】

固体は、規則的な配置を持つ結晶と、不規則な配置を持つガラスの2種類に分類することができる。結晶における比熱や熱伝導度などの熱的性質はデバイ理論で予測される振る舞いをするが、ガラスの熱的性質は結晶と異なった振る舞いを示すことが知られている。このようなガラスの熱的性質の振る舞いは振動状態密度が低周波数領域にデバイ理論で予測されるよりも過剰な振動モードであるボゾンピークを持つことに起因するとされている(1)。これまで、分子動力学シミュレーションを用いた、ガラスの振動特性・力学的特性の研究が勢力的に行われてきた。特に、レナード・ジョーンズ (LJ) 粒子系のような簡単なガラスモデルである単原子ガラスを用いた理論研究が主に行われている (2)。近年、金属ガラス・高分子ガラスについての、より現実系に近い分子動力学シミュレーションにより、実験事実と理論予測を結びつけることが希求されている。本研究では、高分子ガラスについて振動状態密度解析を行い、鎖長・鎖の剛性依存性を調べた。

## 【結果と考察】

本研究では、代表的な粗視化高分子モデルである **Kremer-Grest** モデルを採用し、鎖長  $L = 3, 50$  の高分子鎖について振動状態密度解析を行い、デバイ理論との比較をおこなった。デバイ理論では、低周波領域の振動状態密度が  $g(\omega) = A_D \omega^2$  ( $A_D$ : デバイレベル) となると予測されるが、**Fig.1(左)**では過剰なピーク(ボゾンピーク)がみられる。また、**Fig.1(右)**から、このボゾンピークがデバイレベルによりスケールできることが明らかとなった。さらに、デバイレベルの要素である、体積弾性係数・剪断弾性係数についての解析から体積弾性係数に比べて剪断弾性係数が遥かに小さいため、ボゾンピークを支配するのは剪断弾性係数であるということを見出した。詳細は講演にて発表する(3)。

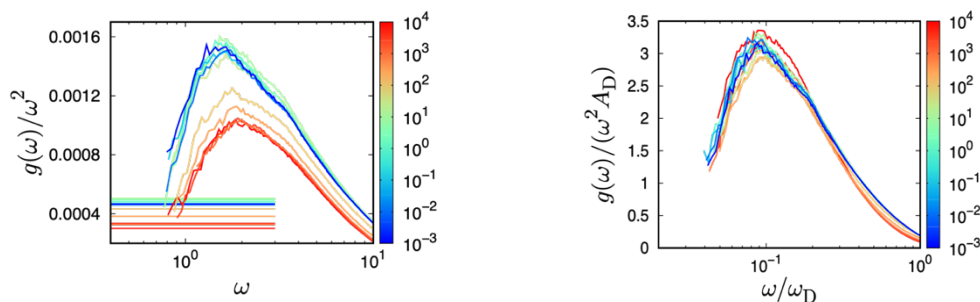


Fig.1 (Left) Low-frequency vibrational spectra for various bending rigidity. We plot the vDOS divided by  $\omega^2$ . The horizontal lines indicate the Debye level. The chain length is  $L = 50$ . (right) Scaled vibrational spectra for various bending rigidity in the scaled form: we scale the reduced vDOS  $g(\omega)/\omega^2$  and the frequency  $\omega$  by the Debye level  $A_D$  and the Debye frequency  $\omega_D$ . The scaled vDOSs nicely collapse for different bending rigidity. The chain length is  $L = 50$ .

## 【参考文献】

- (1) U. Buchenau, N. Nücker, and A. J. Dianoux, Phys. Rev. Lett. 53, 2316 (1984).
- (2) M. Shimada, H. Mizuno, and A. Ikeda, Phys. Rev. E, 97, 022609 (2018).
- (3) N. Tomoshige, H. Mizuno, T. Mori, K. Kim, and N. Matubayasi, arXiv:1907.10899 (2019).