

ガウス型ポテンシャル液体のガラス転移

(筑波大数理物質科学研究科・物理学専攻) 宮崎 州正、池田昌司

【はじめに】

最近、粒子どうしが重なれるほど弱い斥力を持つ液体、いわゆる柔らかい相互作用系が関心を集めている。その熱力学的・動的振舞いは、通常の強い短距離斥力を持つ液体系に比べて、多彩で豊かな振舞いを示すことが知られている。例えば、固液共存温度が密度の増加とともに減少する現象やリエントラント転移などは、代表的な特徴である。このため柔らかい相互作用系は、ソフトマター物理の観点から興味深い系であるが、同時にガラス転移研究の格好のモデル系でもある。今までのガラスのシミュレーションのモデルはほぼ例外なく、短距離斥力の特徴づけられる「普通」の液体ばかりであった。そのため、それらの系のシミュレーション結果は、定性的にはどれも似通っており、そのことが、ガラス転移理論の **critical** な検証を難しくしていた。柔らかい相互作用系のように、定性的に全く異なるポテンシャル系を調べることは、このような状況を打開する可能性がある。それだけではない。相互作用が柔らかく、かつ密度が高い系では多くの粒子が重なり合っている、即ち長距離相互作用系であると言える。言い換えれば、柔らかい高密度液体は、平均場的な系でもある。我々はその最も単純なモデルである、ガウス関数型の相互作用、ガウスコア模型(GCM)のガラス転移をシミュレーションにより調べた。

【結果と考察】

MDシミュレーションの結果、GCMのガラス的挙動について、いくつか興味深い結果を得た(1,2)。第一点目は、高密度のGCMが単一成分であるにもかかわらず、ガラス化した点である。通常ガラス転移の数値的研究においては、結晶化を阻害する目的で、粒子の大きさに分散性を持たせたり、二成分系を調べるのが常識であった。そのため系の定量的な解析は複雑となっていた。GCMは単純なポテンシャルでかつ単成分系である点で、最もクリーンなガラス模型と言えよう。第二点目は、その動的性質が、今までのモデルガラス系と比べて、モード結合理論の予想と非常によく一致する点である。モード結合理論はガラス転移の一種の平均場理論と呼ばれているから、我々の結果は、GCMが確かに平均場的であることを示している。さらに、平均場的な系では、臨界的な揺らぎ(ガラス転移では動的不均一性と呼ぶ)が抑えられる筈である。我々は、非ガウス因子やストークスアインシュタイン則の破れなどを調べ、通常ガラスモデル系に比べて、動的不均一性ははるかに小さいことを示した。以上の結果は、未だ成立していないガラス転移の平均場描像の確立に向けて、大きなステップとなると思われる。

【参考文献】

- (1) A. Ikeda and K. Miyazaki, Phys. Rev. Lett. 106, 015701 (2011)
- (2) A. Ikeda and K. Miyazaki, arXiv:1105.5776; *J. Chem. Phys.* (in press); arXiv:1104.3426