

## ガラス転移における平均場シナリオの理論的検証

(筑波大数理, 名古屋大理 A) 池田 晴國, 宮崎 州正 A

### 【はじめに】

結晶化の機会を逃したまま融点以下まで冷却された液体を過冷却液体と呼ぶ。過冷却液体をさらに冷却していくと緩和時間が劇的に増大し、ついには観測時間を越えてしまう。この現象はガラス転移と呼ばれ、分子性液体だけではなく金属液体や高分子溶液等、多くの物質を急冷した際に見られる普遍的な現象である[1]。ガラス自体は金属について我々に身近な物質であるにも関わらず、ガラス転移の微視的起源は未だ明らかにされていない。

ガラス転移は通常の相転移とは異なった現象である。結晶化や強磁性転移等の、熱力学的相転移における緩和時間は、静的な相関長と共に増大して行く。この為、多数の粒子が強制的に動くことが遅い緩和を引き起こす原因であると信じられている。これに対してガラス転移では、分子の配置は液体同様乱雑なままに、緩和時間だけが増大して行く。ガラス転移の背後には如何なる機構が隠されているのだろうか？

我々はガラス転移の背後に隠れた熱力学的機構があるという立場に立って研究を進めている。この立場に立った際に参考になるのはスピングラスの平均場モデルである。スピングラスでは過冷却液体と同様に配位が乱れたまま動力学が遅くなる。そして、少なくとも平均場近似のレベルでは遅い緩和とそれを引き起こす熱力学的機構の関係が完全に明らかにされている。

ガラス転移がある種のスピングラスモデルが示す転移と同等のユニバーサルクラスに属するという仮定のもとに、ガラス転移の平均場シナリオが提唱された[2]。このシナリオでは過冷却液体の温度を減少させていくと、動的転移点と呼ばれる温度で自由エネルギーに指数関数的な量の極小が表われ初めることを主張する。極小の数が指数関数的なので、全ての極小を足し合わせれば一つの極小にある状態よりもエントロピーが高い状態を作ることが出来る。この為熱力学的には全ての極小について重ね合わせた乱雑な状態がより安定となる。一方で、動力学はこの極小の影響を受け、極小の間を熱活性化過程によって遷移していくことによって遅い緩和が実現されると考えられる。

上のシナリオは、運動論と液体論という独立に発展して来た二つの理論が、ガラス転移の研究においては互いに整合する可能性を示唆するという点で興味深い。ガラス転移の研究を通して二つの理論の利点を相互に参照し、より精度の高い汎用的な理論を構築できることが期待されるからである。

### 【結果と考察】

上で説明したシナリオは、ある種のスピングラスの平均場モデルにおいては厳密に成立している。しかし当然ながら、同じシナリオが実際のガラス転移において成立する保証は無い。そこでこれを理論的に検証することが本研究の目的である。

我々は、自由エネルギーに多数の極小が表われ初める温度と、動力学が遅くなり初める温度を場の理論を用いた摂動計算によって算出した[3]。その結果、近似の最低次の範囲では、二つの結果が整合していることが明らかになった。この結果はガラス転移における平均場描像の成立を示唆する強力な状況証拠になると考えられる。

### 【参考文献】

- [1] P. G. Debenedetti, et al, Nature materials, **410**, 259(2001)
- [2] T. R. Kirkpatrick, et al, Phys.Rev.A, **40**, 1045(1989)
- [3] G. F. Mazenko, Phys.Rev.E **83**, 041125(2011)