

構造ガラスにおける動的相関長の大規模 MD 計算による精密定量化

(¹東京大学物性研究所、²モンペリエ第二大、³新潟大理)

芝 隼人¹、川崎 猛史²、金 鋼³

【はじめに】

構造ガラスの大規模協調運動が動的臨界ゆらぎを示す、という「動的不均一性」の概念が提出されてから 20 年近くになるが、その由来については現在まで分かっていない部分が多い。我々は、2次元系の協調振動由来の動的不均一性についての報告を以前行った。しかし3次元系については、長波長振動が存在する余地のある系のサイズにおいてどうなるかを確かめる数値実験は、これまで行われていない。我々は最大百万、あるいは千万粒子数を伴う構造ガラスにおける不均一性の動的相関長や緩和時間を見積もった。

【結果と考察】

異なるサイズ比からなる2成分粒子系、具体的には Kob-Andersen 模型や 12 乗斥力模型の大規模計算を行った。最大粒子数は 1024 万粒子数、主な計算は 128 万粒子数で行った。これにより得られた軌道を解析し、動的不均一性と長時間緩和にかかわる時空間スケールの評価を行った。

まず、時間スケールに関する解析として、密度場の時空揺らぎを解析するために導入された4点相関関数に加えて、協調再配置のイベントの分布を取り出すことのできる結合破断関数を評価した。これらによって評価される緩和時間は(2次元系同様)3次元系でも一意ではないことが明確に示された。一方で、空間スケールを表す相関長は、時空間関数に対して定義される構造因子を通じて評価した。低波数極限でこの構造因子がゼロ波数極限の収束値に達するほど巨大な系を用いているため、我々の計算はこれまでにないレベルで正確である。その結果、3次元系ではそれぞれのモデルについて両者同様の相関長となることが分かった。大規模振動が協調再配置による動的不均一性を凌駕している2次元系とは振る舞いが顕著に異なっており、動的な不均一分布は3次元系では一意に定まることを示唆する。

その上で、調和相互作用系なども含めた複数のモデルの典型的時空間スケールを、大規模系を用いて評価した。それぞれの共通点、相違点、また4体相関関数のカットオフなどを任意パラメータとしたときの時空間不均一性の評価の変化、などについても発表予定である。

【参考文献】

(1) H. Shiba, T. Kawasaki, and A. Onuki: Phys. Rev. E **86**, 041504 (2012)

(2) H. Shiba, T. Kawasaki, and K. Kim: in preparation