

ガラス転移の平均場理論についての考察

(筑波大学数理物質科学研究科) 宮崎 州正、池田昌司

【はじめに】

ガラス転移とは、液体を急冷した際に、構成分子がランダムな配置を保ったまま運動が凍結してしまう現象である。「転移」という名を冠しているにもかかわらず、それがいかなる転移なのか、そもそも何らかの特異点を伴う物理現象であるのかすらも分かっていない。ガラス転移の本質を記述するための様々な理論が提案されてきたが、どれもある程度、定性的に観測結果を説明できてしまうため、どのシナリオが正しいのかが分からないのである。

数ある理論の中で、モード結合理論 (MCT) は第一原理的かつ定量的にガラス転移を説明できるほとんど唯一の理論である。残念ながら転移温度近傍の低温領域では破綻してしまうものの、そこにいたるまでの、複雑なダイナミクスの階層性を説明できる点で強力な理論である。このMCTは、ガラス転移の動的「平均場理論」と呼ばれてきた。これは、スピングラスの平均場模型の運動方程式とその数学的構造がほぼ等価であるからである。一方、スピングラスの熱力学的平均場理論はレプリカ法により定式化されている。このスピングラス模型の運動方程式と熱力学は、厳密に等価であることが知られていて、熱力学的理論が記述するエネルギーランドスケープがダイナミクスの凍結を引き起こす仕組が良く理解されている。この描像は、液体のガラスにもそのまま成り立っているに違いない、つまりMCTと液体レプリカ理論はセットでガラス転移の「平均場」理論であるに違いないと今まで信じられてきた。しかしその根拠は無い。しかし反証も見つかっていない。反証が容易ではない理由は、一般に(過冷却)液体の統計力学は、スピンのそれに比べはるかに複雑であることにある。そこで我々は、この液体理論特有の汚い近似に紛らわされずに、この疑問に答えるために次元依存性を調べた。

【結果と考察】

MCTが本当に「平均場」的であるならば、(i) ガラス転移点近傍における臨界的な振舞いについては、空間次元が高くなるに従って、シミュレーションとMCTの一致が良くなる筈である、また(ii) MCTとレプリカ理論の整合性は、高次元では少なくとも取れている筈である。この2点について、我々は解析を行った。まず、(i)を示すために、4次元における剛体球系の大規模なシミュレーションを行った。その結果、動的不均一性が3次元に比べて大きく抑えられるほか、緩和時間の発散の指数などに関するMCTとの一致が著しく改善することが分かった。(ii)については、動的ガラス転移点の、特に高次元の極限における次元依存性を、MCTとレプリカ理論により解析した。高次元では、液体論の積分方程式は厳密になり、解析可能となるからである。その結果、両者の結果が全く一致していないことが分かった。どちらかあるいは両方の理論が破綻していることは間違いない。我々はMCTの結果が、高次元極限で、非自明ながら明らかに非物理的な結果を導いてしまうことから、少なくともMCTは破綻していることを示した。つまり、MCTは、スピングラスと同じ意味での平均場理論ではないのである。この結果は、疑問に対する解答を与えるというより、かえってより多くの新たな疑問をガラス研究者に提示しているように思われる。

【参考文献】

- (1) P. Charbonneau, A. Ikeda, J. A. van Meel, and K. Miyazaki, Phys. Rev. E 81, 040501(R) (2010).
- (2) A. Ikeda and K. Miyazaki, Phys. Rev. Lett. 104, 255704 (2010).