A theory for divergent fluctuations at glass transitions

東京大学大学院　総合文化研究科　岩田　真実、　佐々　真一 [1]

1 Introduction

ガラス転移の研究は、粘性の増大、密度の２体時間相関関数の緩和の単純な指数緩和でない振る舞い、緩和時間の発散等の説明をすることから始まった。これらのうちもっとも定性的にも定量的にも説明をクリアに与えた現象は、モード結合理論が始めに予言した非エルゴード転移である。

非エルゴード転移とは、密度の二体時間相関関数の長時間極限が、温度を下げて行くとある転移温度でゼロから有限値に飛ぶことで定義される。これは緩和時間の発散を示す。二体時間相関関数の緩和は、転移温度より高温側の液体領域では、指数的に減衰する。温度を下げて過冷却液体領域に入ると、緩和が二段階に分かれ、間に緩和が止まるプラトー領域が現れる。さらに温度を下げると、この２つ目の緩和が消え、時間相関は長時間極限で有限値のままかたまってしまう。

とりわけ近年の研究では、非エルゴード転移に関して、臨界的振る舞いが見られるようになって来た。まず、ガラス転移温度付近で密度の典型的緩和時間に粒子が動いた距離だけをプロットすると、これらが空間的に不均一になっていること（動的不均一性）が見出された。さらに驚くべきことに、近年の研究では、この動的事象の相関に着目すると、その動的事象の緩和時間、相関が持つ長さスケール、相関の振幅が発散を示すことが明らかになって来た。この臨界的性質を理論的に研究するアイディアとしては、場の理論的アプローチ、格子系の解析などが有効であり、実際、これらの試みが成されて来た。

さて、平衡の臨界現象の有効な理解の１つに、ギンツブルグ・ランダウ理論による理解がある。この理論は、まず転移の分岐形を特定し、この分岐を示す、揺らぐ場の有効ハミルトニアンの解析をすることで、臨界現象の定性的理解に大きな進歩を与えた。ところが、非エルゴード転移に着いては、未だこの”分岐を示す揺らぐ場の解析”によるアプローチが成されていない。そこで私たちは、非エルゴード転移の臨界的性質を理論的に攻略するための策として、”分岐を示す揺らぐ場の解析（理論）”を提唱する。

2 非エルゴード転移の分岐形を特定する

まず私たちが行なったのは、非エルゴード転移の分岐形を特定することだ。そのためにモデルとして選んだのは、１種類の、引力斥力相互作用を持つランジュバン多体系だ。この系では、粒子配

[1]E-mail: iwata@jiro.c.u-tokyo.ac.jp

置によってエネルギーによるフラストレーションが生まれ、比較的希薄な場合にも非エルゴード転移が起きることが分かっている。この密度場の方程式から、密度の２体相関関数 $\langle\Psi(\mathbf{k},\mathbf{k}';t,s)\rangle = (2\pi)^3\hat{C}(k,t-s)\delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}')$ を定義し、この２体相関関数で閉じた発展方程式を導出すると、高次相関を含む表式となる。そこで、分岐を特定するために、平均場的な近似として、密度場の３体相関のを含む項が、２体相関の非線形項に比べて無視できるという近似を用いた。但し、時間相関関数の２階時間微分方程式になっているため、長時間極限で解がゼロに減衰するという境界条件を課す。

さて、この方程式をもとに、分岐形を特定したい。分岐形を特定するのに有効であった理論として、パターン形成の分野の特異摂動という手法がある。この手法は、もとの方程式に特徴的な遅いモードを特定し、もとの方程式をこの遅い変数の方程式に縮約することができる。そこで２体時間相関関数の方程式に関して、まず着目する温度領域を高温側に限定する。このとき、特徴的な解として、長時間極限ではゼロに減衰する解がある。そこで、この相関がゼロとなる解のまわりで線形安定性解析を行なうと、高温側では指数緩和となるのに対し、温度を下げて行くと、ある温度 T_0 で、１つのゼロモードが発生することが分かった。

解 $C(k,t)$ は、最も遅い一つのモードと、その他の極めて速く減衰する変数成分で展開できる。そこで、解 $C(k,t)$ の時間変化を、この遅い変数の振幅を介してのみ決まると仮定する。また、ゼロモードが現れる温度 T_0 の周りで $\epsilon \equiv (T-T_0)/T_0$ を小さい変数とし、摂動展開を行なう。このようにして、解 $C(k,t)$ の時間変化を、遅いモードの振幅方程式に、特異摂動をもちいて縮約できた。

さて、この得られた方程式は、常微分方程式となっている。この振幅方程式は、ポテンシャル $U_\epsilon(\phi) = -\phi^2\left[(\phi-1)^2+\epsilon\right]$ 上での１次元の運動方程式 $\partial_t^2\phi = -\partial_\phi U_\epsilon(\phi)$ と同じ振る舞いを示す。ただし、境界条件として $t\to\infty$ で $\phi\to 0$ を課す。この温度パラメータ ϵ に依存したポテンシャル上の運動は、次のようなものだ。まず高温領域では、ϕ は単純な指数緩和を示す。温度を下げて行くと、緩和の途中で（運動エネルギーの保存から）２つ目の山の近くを通過するときには速度が小さくなる。これが、２体時間相関の緩和に、プラトー領域が現れるのに対応している。さらに温度を下げて行くと、ついにこの速度がゼロとなり、ϕ は $\phi=1$ の山に完全に停止したままうごけなくなる。これが、非エルゴード転移だ。このタイプの振る舞いは、力学系の言葉では、固定点と固定点を結ぶ軌道が生まれることから、サドルコネクション分岐と呼ばれる。こうして、私たちは、まず非エルゴード転移の分岐形をサドルコネクション分岐であると初めて同定した。

3　サドルノード分岐の周りで揺らぐオーダーパラメータによる、動的事象の臨界的振る舞いの記述

非エルゴード転移に関しては、次のような物理描像が示唆される。転移温度より高温では粒子は互いに邪魔しあいながら平衡状態を探すための再配置運動を繰り返すが、転移温度に近づくと、再配置のためにまわりの粒子から抜け出すという動的な事象の頻度が次第に減り、ついに転移温度で配置が凍結してしまうという描像だ。サドルコネクション分岐点近くでの２体時間相関関数

の振る舞いは、周りの粒子によって閉じ込められた粒子がこの閉じ込められた空間領域から抜け出す動的事象に対応している。私たちは、この動的事象の揺らぎの臨界的性質を調べるために、分岐点の近くで揺らぐ場の解析をした。ここでギンツブルグ・ランダウ理論の有効ハミルトニアンにならい、場の経路確率のモデルとして、サドルコネクション分岐を示す最も簡単な局所項と拡散的な結合をオンサーガーマクラップ表示として仮定した、経路確率を仮定した。

この場の経路確率は分岐構造に起因した強い非線形性のために、標準的な摂動計算が適用できない。私たちは、この非線形性を強引に近似してしまうのではなく、この構造を生かした解析を行なった。具体的には、もとの方程式が時間並進対称性を保つのに対して、分岐に伴って現れる解が時間並進対称性を破ることに着目し、この対称性の破れを利用するため、軌道アンサンブルを生成する仮想時間ダイナミクスを導入した。この仮想ダイナミクスによる記述では、分岐に伴う解が実時間上のキンク解になり、もとの場の経路積分ではあらわではなかった時間並進対称性の破れに起因するゴールドストーンモードが現れる。これにより、パターン形成の研究で知られていたキンクに対する特異摂動（Kawasaki, Ohta 1982 Physica A）が適用され、秩序変数の仮想時間発展方程式をさらにキンク位置の方程式へ縮約ができた。このキンク位置の方程式から動的事象の秩序変数の相関を計算することで、時間スケール、空間スケール、振幅の発散を特徴づける臨界指数がそれぞれ、2,1/4, 3/4 と求まった。

4 conclusion

私たちは、分岐のまわりで揺らぐオーダーパラメータによる記述によって、非エルゴード転移と、その転移を示すオーダーパラメータの揺らぎの相関の臨界的振る舞いを説明することに成功した。この理論は、理論の中では閉じているが、ガラス転移としての理解は未だ始まったばかりである。まずは、このアプローチとガラス転移を記述し得る理論との関係を探って行きたい。

本講演の内容は、[1]、[2] に詳細が書かれている。

参考文献

[1] Mami Iwata and Shin-ichi Sasa, J.Stat.Mech., (2006), L10003

[2] Mami Iwata and Shin-ichi Sasa, Europhys. Lett., **77** (2007), 50008