

B 2

ガ ラ ス 転 位

東大理 二 宮 敏 行

ガラス状態は、液体構造が凍結されたものと考えられるが、ガラス転移の本質が何であるかは、いまだ明確にはされていないように思われる。

idealなものとして、simple liquid がガラス転移をするかどうかと云う理論的興味とは別に、実際には液体の急冷によりガラス転移を起こす物質を調べて見ると、これらは、一般に内部自由度を持ち、しかも、融解のエントロピーが simple liquid より大きいので、融解にさいして内部自由度の解放が起きていると考えられる。すなわち、実際におきているガラス転移（1. ガラス転移点で膨張率が小さくなる。2. 比熱が結晶のものとはほぼ同じになる。3. ガラス転移点に近づくと viscosity は急激に大きくなる。）は内部自由度の凍結によるものと考えられる。

液体の転位モデルの立場に立って、次のようなことを考慮して、ガラス転移を調べて見た。

1. 内部自由度に属する運動は、低いエネルギーでは振動的であるが、高いエネルギーになると、振動数が低くなるか回転運動に移る。この境のエネルギー、および振動数は体積の増大と共に小さくなる。
2. 液体状態（ガラス状態）では、多くの転位を含むため、結晶状態に比べて体積が大きく、内部自由度は解放されやすい（高いエネルギーの状態に移る）。

非調和性の効果を self-consistent に考慮すると、比較的せまい温度領域で、急速に内部自由度が解放されることがわかるが、パラメーターの具体的数値を与えにくいいため、実験との直接の比較は、現段階では難しい。

なお、転位モデルでは、viscosity は転位の動きやすさで与えられるが、転位 segment の上で、内部自由度が全部高いエネルギー状態にある時、転位が動き易いと仮定すれば、ガラス転移点に近づくにつれて、viscosity は急激に大きくなる。