

ガラス転移の疑似動的臨界現象—ソフトコアモデルのMD計算

金沢大学・理 樋渡 保秋

液体を急冷すると結晶化することなく固化する。固化した状態をガラス状態という。固化するとは、一応ずれ粘性係数 η が 10^8 （ポワーズ）程度以上になる事と定義する。拡散係数 D は η にほぼ逆比例し、一方、液体の密度の揺らぎの特性緩和時間 τ は拡散係数に逆比例するとすると、 τ もガラス転移点（過冷液体が固化する温度）に近づくにつれて非常に大きくなる。このような緩和時間の異常性（dynamical slowing down）にともなって、転移点近傍で動的な物性に異常性が生じる。我々はこれを疑似動的臨界現象とよぶことにする。

本研究では、二元合金系の特徴を有する最も簡単なモデル（二成分ソフトコアモデル）を用いて、分子動力学（MD）法からガラス転移現象の動的諸性質を考察した。計算した主なものは、拡散係数、平均二乗変位、ずれ粘性係数、非干渉性散乱関数、ノンガウシアンパラメータ等である。この他、ジャンプ拡散モデルに基づいて解析を行い、最近提唱されたトラッピング拡散モデルとの比較を行った。その結果、MDの結果はトラッピング拡散モデルの結果とよく符合する事が分かった。

以上ごく簡単に述べたが、更に興味のある読者は解説記事（樋渡、宮川、小田垣：日本物理学会誌、2月号、1991）を参照下されたい。