

ガラス転移と過冷却液体のファンデアワールス模型

〒 811-0215 福岡市東区高美台 4 丁目 37-9 川崎恭治

過冷却液体とガラス転移を第一原理から取り扱おうとする時の最大の困難は、それが微視的スケール ($10\text{\AA}$ 程度) で起こる長時間 (10^{-9} 秒以上) の現象である事による。これまで最も成功したと言われるモード結合理論では、この様な問題に対して無謀とも思える近似や仮定が導入されている。それでも過冷却液体に於ける粒子の閉じ込めやクロスオーバー温度の様な物理的に重要な結果を出すことに成功している。しかしクロスオーバー温度以下での熱的活性化過程やエージングを理解出来る迄には到っていない。この様な事情の下では過冷却液体の現実からは離れるが、より厳密な取り扱いを許す、或いは、素性の知れた近似で取り扱える、理想化された模型に依る研究が価値を持ってくる。既にこの様な模型は幾つも提案されている。ここでは今ひとつの理想化された模型について議論する。この模型を考えるに到った動機は以下の如くである。上述した過冷却液体の 2 つの困難の一つ、即ち微視的スケール、を半巨視的なスケールに引き伸ばした模型を考える。すると我々の問題は長距離、長時間の問題になる。これは臨界現象やパターン形成で近年我々にはお馴染みになった問題である。具体的には、液体粒子間の分子間力を微視的な短距離力とその他の長距離力の部分にわけると。次にこの短距離分子間力のみを一つのレファレンスと考え、これについてはガラス転移や普通の相転移などの異常は一切ないものとする。即ち、過冷却液体とガラス転移その他の異常はすべて長距離力の存在に帰せられるものとする。この立場は何ら目新しいものではなく、相転移のファンデアワールス理論の立場と同じである。新しい点はこの視点をダイナミクスに拡張した事である。具体的には次の様にする。我々に興味がある現象はすべて長距離力のレンジで起こる。これを微視的な長さより十分大きく取る事が出来れば、レファレンス液体のダイナミクスはすべて巨視的な流体力学方程式で記述できる。その際長距離力は連続体として見た液体の (巨視的) 微小要素間の力と言う形で自然に取り入れられる。この模型の最大の利点は、液体の動力学に於ける最も困難な粒子間の動的な微視的相関に立ち入らずにすむ事にある。この立場で現在のモード結合理論に内在する仮定や近似を吟味する事が可能になる。又、他のガラス転移の連続体模型、例えば stripe glass[1] との対応がつけられる。ここで述べたガラス転移のファンデアワールス模型の詳細については [2] 参照のこと。

参考文献

- [1] H. Westfahl, Jr., J. Schmalian and P.G. Wolynes, *Phys. Rev. B* **64** (2001) 174203-1
- [2] K. Kawasaki, Dynamical van der Waals model of glassy behavior, submitted to the Fisher special issue of J. Stat. Phys. 関連する 数値的結果については
- [3] K.-K. Loh, K. Kawasaki, A.R. Bishop, T. Lookman, A. Saxena, J. Schmalian, and Z. Nussinov, to be submitted