
ひろば

YKIS'96 "Dynamics of Glass Transition and Related Topics"

に出席し考えた事など

中部大学理学教室 川崎恭治

(E-mail: kawasaki@isc.chubu.ac.jp)

(1996年11月29日受理)

周知の様に1984年に起こったLeutheusser, Goetze 等による理論のブレークスルーに端を発し現在まで過冷却液体やガラス転移の理論、実験、計算機による研究が主に欧米を中心に爆発的な勢いで進んでいる。これに刺激されてかどうかは知らないが1996年の湯川国際セミナー(YKIS)が上記の表題で11月12-15日に京都で開催された。内外から多数の参加者があり一定の成果はあったと言ってよかろう。筆者も参加し内外の研究者の研究動向に触れ大変有益であった。とりあえず、会議の開催に大変な努力を払われた関係者の方々に感謝したい。一方、主催者(則ち、会議の組織委員長、以下委員長と略す)の自画自賛や外国人招待者の外交辞令的発言にもかかわらず、内容に問題を残した事も事実である。ここではそれらにも触れながら、筆者の感想と関連する事柄を述べてみたい。

冒頭でも述べたように、現在のこの分野の盛況は先ず理論が口火を切った。この理論は臨界現象で開発されたモード結合理論(mode coupling theory)をガラス転移に応用したもので、略してMCTと呼ばれている。会議では予想以上に多くの、MCTとの比較を意識した実験および計算機による研究に関する講演が主に外国勢からなされた。しかるに肝心のMCTの理論の講演者はBosse氏ただ一人であった。従って肝心の所で議論を深める事が出来ず中途半端で終わってしまう事が起こってしまった。この分野に光散乱を用いて大きな貢献をしているH. Z. Cummins教授は、そのいらだちを、会議のディスカッションのなかで、"There are no real experts of MCT here"と言う言葉で表現された。"expert"としてはBosse氏や私が居ると思われるかもしれない。Bosse氏は始めから二成分系のMCTを中心にやってこられ、それ自体重要な問題ではあるが、Cummins氏が求めているのとは違った方向のように見うけられる。一方私がガラスのMCTに入ったのは最近で、九大を退官した今、MCTのより基礎的な面に関心がある。従って、兩人共現在のMCT研究の最先端からは距離があり、Cummins氏の求めるreal expertsにははいらない。更に私はMCTに直接関連した研究の口頭発表を申し込んだが却下されてしまった。現在この分野は理論、実験、計算機が互いに三つ巴になって研究が進んでいる所に特徴があり、それが将来の発展に大きな期待を抱かせる理由である。所がこの三本柱の最も重要な理論が殆ど欠落していたのである。そこで改めてこの会議の組織委員やAdvisory Boardのメンバー、招待講演者、口頭発表者の顔ぶれを見てみると色々と氣がつくのである。1995年にMITのSidney Yip教授が編纂したMCTに関連した理論、実験、および計算機による研究を特集した論文集がでた[1]。そこには13名のMCT理論家による論文がある。この中にはW. Goetze, L. Sjogren, G. Mazenko, T.

Kirkpatrick 等 1984-85 のガラスの MCT の草創期に論文を発表し今のブームの口火を切り今でも盛んに活躍している人々や、その他にも現在世界で MCT を代表する人々の大部分が含まれている。所が、この中の誰一人として上にあげた会議の組織委員、Advisory Board や講演者に入っては居ないのである。YKIS96 には、この中から私がただ一人、ポスターで参加したに過ぎない。一方ガラスの MCT 自体が未熟な理論である事もある、MCT に対立する立場をとってこられた人々もいる。これら、私の知っている内外の MCT 反対派の人々はすべて会議の組織委員、Advisory Board, 招待講演者、として名を連ねている。委員長は講演申し込み者の数が多くてすべて採用できなかったと言われるが、要は数の問題ではなく選択の問題である事は明らかである。ある著名な参加者は "What are the criteria for choosing invited and contributed talks ?" と言って首をかしげていた。その他にもプログラムについての不審の念が内外の参加者から直接、間接、私によせられた。更に驚くべき事に Kivelson 教授の話しでは、私が会議を欠席するものと思われていたとの事である。私はその様な事を言った事はないし登録もはやくすませている。こんな話しが流れていたとは呆れる他ない。まさか私が出席しない様に仕向けていたのではあるまいが。何れにしても、理論不在の人選の結果、世界最先端の理論家、実験家、計算機研究者が一同に会し実りある討論を通じて研究の進歩に貢献すると言う国際会議本来の目的が損なわれたのは否定できない事実である。又その為に参加者全員がこうむった損失は決して小さくはない。組織委員の中でこの会議の理論面に最も近い専門家は委員長であり、この様な事になった経緯について皆に納得出来る説明が委員長自身からなされて然るべきである。さもないと、何か、学問以外の目的のために YKIS が利用されたと勘ぐられても致し方ない。私の申した事が単なる思い過ごしかどうか、プログラムや委員会名簿等会議の資料はすべて揃っているし、^{*)}文献[1]も出版されているので誰でも自分で確かめられる筈である。又会議のプロシーディングもプログレスのサプルメントに出るので詳細な内容がわかるであろう。いやしくも YKIS は基礎物理学研究所の重要な公式行事である。更に日本学術振興会や文部省等の公的機関からの資金援助も受けている。どこかの私立機関がその私的行事としてやるのとはわけがちがう。私の文章のこの部分の締めくくりとして、YKIS に出席した友人からきたメールの一節を引用する。これは私が YKIS についての意見をのべ、彼の印象を尋ねたのに対する返事である：

"I agree with you about YKIS, and in my opinion a polite protest letter from you is a good idea. In fact, we scientists must "police" each other, or else the public will do so (can you imagine if that happens ?)."

さて、MCT の話が出たついでに、誤解を避けるためにもガラスの MCT と私との関わりについて述べておきたい。現在の私の立場はこの会議で計算機による優れた研究を発表した Walter Kob 氏が発言した言葉 "I am for truth. Goetze does not pay me" が最もよく代弁している。ちなみに、Kob 氏は、今回は MCT を概ね支持する計算機シミュレーションの結果を発表されたが、以前、異なったモデルで MCT を全面的に否定する結果も出しておられる。所で私は何があんでも MCT という立場はとらない。私が最初ガラスの MCT に接したのは 1984 年 Mazenko 氏の講演をきいた時である。始め

は当然興味をもったが、よく聞いてみると分子間距離程度の短いスケールを問題にしている事をしり興味をうしなった。当時私はMCTは臨界現象の様な長距離の問題にしか使えないと信じていたので Mazenko の話しは全くナンセンスとして退けてしまった。今の Kivelson 氏の立場がそれに近いようである。(YKIS 前日のパーティでの会話から。) その後 1989-90 年頃ある会議の報告を読みガラスのMCTが多くの実験家の関心をひいている事をしり、再び興味を持ち勉強をはじめた。色々調べて振り返ってみるとガラスのMCTが1984に(ある人々にとっては忽然と)姿を現す前に既に前駆現象があった。私にとってそれは1982年 Boulder における Non-equilibrium Fluid Behavior という会議に始まる。そこには Leutheusser氏 も顔を見せていた。そこで話題になった事の一つに時間相関関数が長時間で時間の $(-d/2)$ 乗のべきで減衰する、いわゆるロングテールの問題があった。ここで、 d は空間次元数である。これはMCTで予言されていたが、計算機でも出てくる。所が高密度の液体で前に掛かる係数を見てみると計算機の値の方が2桁も大きい。会議ではこれは未解決のまま残った。暫くしてこの問題は、それまでのMCT計算で抜けていた短波長の密度ゆらぎをMCT計算にとり入れることによって理解される事が T. Kirkpatrick と H. van Beijeren によって独立に見いだされ解決した。Leutheusser, Goetze 等のガラスのMCTは正にこの機構をセルフコンシステントに取り入れたものに他ならない。こう見てくるとガラスのMCTは単に誰かの思いつきとして突然出てきたものではなく、遠くはMaxwell, Boltzmann、近くは日本の久保、中島、中野、森 等の諸先輩の非平衡統計力学の長い伝統の延長線上にある必然性をもった理論と言う事が出来る[4]。しかし今のガラスのMCTは私見では大変チャチな段階で、つつけばいくらでもボロが出てくるのである。ここで私が自身で経験した 動的な臨界現象Critical Dynamics (以下CDと略記)の場合どうであったかを見てみるのは大変教訓的である[2]。CDの最初のブレークスルーは Marshall Fixman (1962) の基本的アイデアの提出である。それを統計力学の相関関数理論に乗せる事が出来たのが1965-6年(KK. Phys. Rev. 1966)で、私がまだ米国にいた時である。しかし全くチャチな段階で間違った結果もだしてしまった。1966年秋九州大学に帰ってきたが、私の初期のMCTは日本では「現象論」として一段低くみられていた様で殆ど注意をひかなかった。しかし米国では私の知らぬ間に関心がもたれていた様で、1968年に Kadanoff とSwift が Fixman や私のMCTをスケーリングの考えをいれてすっきりした形に書き直した。又その間 Ferrell等の動的スケーリング理論が現れた。私は1969年始め又渡米した。一方日本では既に1960年頃から、外国に先駆けて基研を中心としてCDの研究が始まっていた。(外国でCDが重要な問題として意識され始めたのは1965年のワシントンの会議からだと思う。)しかし私が日本にいたこの二年あまりの間わが国からの理論面で今に残る重要な寄与をしたのは鈴木増雄、八幡英雄 両氏のグラウバー模型の臨界指数の計算だけだった様に思う[3]。(計算機シミュレーションの方では、松原教授を中心とするグループのグラウバー模型の先駆的な仕事がある。)。米国に移ってからは、MCTから一步すすんで、臨界揺らぎに対する一般的な非線形ランジュバン型の方程式をつくった(Annal. Phys. 1970)。これは非線形古典論的場の理論とも言えるもので、ナビエーストークス乱流がもう一つの

例である。これは大変な難問で、その頃この様な難問を扱う新しい計算法が次々に開発された。即ちMartin-Siggia-Rose(1973), Ma-Mazenko(1975), Deker-Haake(1975), Bausch-Janssen-Wagner(1976), De Dominicis-Peliti(1978) 等の仕事それぞれである。これらの技法はその頃現れた Wilson のくりこみ群の考えと組みあわせられ動的くりこみ群 (Dynamical Renormalization Group、略してDRG) に結実した。これでCDの理論は完成した。こう見てくれば、DRGに到るまでのCDの理論の発展の主流を成す寄与は殆どすべて外国にさらわれたと言っても過言ではないことがわかる[3]。せっかく日本で早くスタートをきっておきながら、この結果は残念な事である。私は1973年帰国したが、その時には、はさすがに多数の人が関心をよせてくれた。しかしCDの基本的な仕事は大体終わっていたのである。

所でCDの最終理論であるDRGは初期のMCTとは全く違った美しい理論体系になってしまった。しかしその源流はFixman や私の初期のMCTにある事にはかわりがない。この様な事を長々と書いたので、年寄りの自慢話と受け取られる方がおられるのは承知している。しかし次ぎを読んでもらえば私の意図が別の所にある事がお分かりいただけるであろう。

ここで話を現在に戻す。ガラスのMCTはCDとの比較で言えば1960年代末のCDに対するSelf-Consistent MCT に相当する。前述した様にCDではその後理論面での整備が急速に進んだ。そうみると、現在のガラスのMCTは未だ赤ん坊である、しかし大きな可能性を秘めた赤ん坊であると言える。もしガラスの最終的な理論が将来仮に作られる事があるとすれば、恐らくそれは現在のMCTとは似てもつかぬ形のものになるだろう。しかし、その源流は現在のMCTにあると思う。何故なら、星の数ほどある ad hoc なガラスの模型の中で唯一成功した第一原理 (即ち非平衡統計力学の正統な流れ) に基づく理論だからである[4]。ここに他のどの模型にも増してMCTが注目を集め数多くの実験や計算機の仕事がそれを検証しようとしている真の理由がある。しかし現在のMCTは余りにも多くの実験や計算機の仕事との比較に使われてすり切れてしまっている。いわゆる Extended MCTの混迷がそれを如実に示している。次世代の理論が切に求められる時期がとっくにきているにもかかわらず、まだそれは出来ていないし、YKISの議論を聞いた限り、どの方向に進めばよいか見通しもない様である。ガラスの問題に参入するとすれば、今が最良の機会である様に思われる。今ならば今後主流となるであろう理論を作れる可能性がある。私もあるアイデアを得てそれを進める努力はしているが[2]、60才代の半ばを過ぎ、国立大退官後の厳しい研究条件の下ではいつまで続けられるのか不透明である。このままでは今度も又CDの時と同様にクリームはすべて外国に取られてしまう事になるのであろうか。今回の様に本来のYKISの主旨をはずれた不明朗な運営がまかり通る様ならば、ガラスに限らずわが国の基礎研究の未来は暗いと言わざるを得ない。

文献及び註

[1] S. Yip, guest editor, Theme Issue on Relaxation Kinetics in Supercooled Liquids-Mode Coupling Theory and its Experimental Tests, Transp. Theor. Stat. Phys. 24 (6-8) (1995)

[2] ここで述べる内容の学問的な部分については実は YKIS に続く重点領域国際会議で「Beyond Self-Consistent Mode Coupling Theory : What Can We Learn From Our Experience In Critical Dynamics?」

と言う題で話しをさせて頂いた。この「重点」での私の話の内容が YKIS の講演として筋違いか、レベルが低すぎるか、両方の会議に出席された方々が判断されるであろう。

[3] 何分、大昔の事なので見落としがあるかもしれない。その節はご容赦下さい。又ここでは C D の個別の問題での寄与は省いた。尚、本文中で引用した筆者の 1966 年、1970 年の論文は始めから終わりまで米国滞在中になされ、発表された仕事なので、国内からの寄与に入れるわけには行かない。

[4] 平衡、非平衡を問わず統計力学を貫く精神は粗視化(coarse-graining)の一語に尽きる。その最たるものは、平衡統計力学の手法である。天文学的数の自由度を持つ系の状態を 2 つとか 3 つの巨視変数で表現してしまうのである。久保等による線形応答理論では巨視変数が流体力学変数になる。粗視化には色々なレベルがあってよい。中島-Zwanzig-森の射影演算子も同じ精神である。MCT 亦然りである。今のガラスの MCT が如可につたなかろうと、この精神が一本通っていることに変わりはないのである。この意味で何の基礎もない勝手に作ったモデルとは一線を画している。

*) このプログラムおよび会議報告は、本号の研究会報告欄に掲載。(編集部注)