

研究会報告

モード結合理論とガラス転移

九大 理 川崎恭治

モード結合理論は元来、動的臨界現象を理解する努力の中から生まれ、1960年代から1970年代の中ごろまでの間に基本的な枠組みができあがった。また、動的臨界現象におけるこの理論の妥当性は、多くの実験事実との比較及びより進んだ動的繰り込み群理論により確かめられている。

一方、1970年代中ごろより、この理論を臨界点から離れた液体の動的構造因子の研究に応用する試みが主に欧州で現れ、実験や分子動力学法の結果と定量的比較に耐える結果が得られている。1980年代中ごろより現れた、モード結合理論を液体サイドからみたガラス転移に応用する試みは、この流れの延長線上にあるものと見るができる。しかしこの理論で記述される転移は、ガラス転移そのものと云うよりは、より高温で現れる過冷却液体の不安定性による転移（エルゴード・非エルゴード転移）であるとの見方が、現在では一般的である。この研究は、最近エルゴード・非エルゴード転移に起因すると思われる一連の現象が実験的に見いだされた事により注目をあびるようになった。即ち、非エルゴード状態における Debye-Waller 因子の温度変化や波数依存性、また密度相関関数の長時間緩和や α 型、 β 型の共鳴緩和等の実験事実がモード結合理論を用いて説明されている。特に、コロイド分散系の示す転移では、全く任意パラメータを用いずに実験と理論の定量的一致が得られている。

一方、上述したモード結合理論の成功にもかかわらず、この理論を動的臨界現象以外の問題に応用することの妥当性については色々問題がある。臨界現象は本質的に分子的長さに比べて充分長いスケールの問題で、セミマクロなモードの相互作用として捉えられるのが自然である。一方、臨界点から離れた液体やガラス転移等では、静的構造因子のピークに対応する微視的波長をもった揺らぎが主役である。この揺らぎの運動にセミマクロな考えをどこまで適用できるのか、また普通用いられる密度及び速度場の揺らぎだけで充分なのか、他に見落としているモードはないのか、更に方程式を閉じさせる為に用いられる揺らぎの同時刻相関の decoupling 近似は短波長で妥当性を失うのではないか等の疑問に対して、満足な答えはまだ無いように思われる。その他にも、モード結合理論で見いだされたエルゴード・非エルゴード転移と本当のガラス転移（もしそれがあるとして）とはどう関連しているのかという基本的な問題がある。