

モード結合理論を超えて

ある温度以下に液体を急冷したら液体がガラス化する。このガラス転移によって液体の粘性率は急激に増大し、液体のダイナミクスは凍結する。最も簡単なガラス化とエルゴード性の回復の説明は、着目している粒子（分子）が他の分子の作るケージに囲まれて動けなくなり、熱ゆらぎによってそのケージを抜けるジャンプによって再配置を起こすというものである。このような粒子運動の軌跡を反映して二段階緩和が生じ、その平均自乗変位や密度自己相関関数にプラトーが現れる。その特異なダイナミクスを理解する鍵となるのは動的不均一性がガラス転移点近傍で急激に増大する事であると思われる。

ガラス転移の理論的アプローチは多岐にわたっている。その中で30年程前に提案されたモード結合理論(MCT)がガラス転移点よりやや高温の実験やシミュレーションの結果を再現する事に成功している。MCTは二段階緩和等多くのガラス転移に特有の現象を説明する事に成功したが、その一方でMCTの予言するガラス転移がシャープ過ぎて、そこで粒子運動が非エルゴディックになる、即ち運動が完全に凍結して相空間を自由に動けなくなってしまうという実際の過冷却液体では観測されない転移を予言してしまう等様々の不十分な点がある。

ガラス転移点近傍でMCTの転移がシャープに現れ過ぎるのは、それが平均場的な理論であると思えば納得がいくだろう。しかながら驚くべき事に過去20年の間にMCTを超えた理論を作ろうという試みが余り行われていない。その主たる理由はMCTのオリジナルな導出が不明確であったからだと思われる。最近は場の理論を用いてダイヤグラムによる摂動展開を行うという手法も行われているが、その複雑な計算法故にMCTを超えるレベルの結果は得られていない。

このPTEPでの論文で、著者は5年前の論文を皮切りに独自に開発した場の理論と異なるダイヤグラムによる摂動展開の理論を解説している。この理論では多体問題を粒子の配位空間で扱い、また静的な揺らぎは既知として動的な多体問題を扱う点に特徴があり、そのお蔭でDyson方程式や自己エネルギーは場の理論によるものと同じ結果を再現する一方で計算が大幅に単純化できるようになった。勿論、その1-ループ計算はMCTと等価である。

2つ目に強調すべき重要な結果はダイヤグラムの高次項を考慮し、非エルゴード転移パラメータの静的な自己無撞着方程式を解く事でMCTへの補正を初めて具体的に計算した点である。MCTの予言する非エルゴード転移を取り除くために、ダイヤグラムの高次項による既約なメモリー関数の計算を行い有限な補正值を得た。本論文で求めた一次補正は非エルゴード転移パラメータを大きくする方にずらすが、二次補正は一次補正より大きな効果があり転移パラメータをかなり小さくする事を明らかにした(図1参照)。この結果は物理的に妥当であり、より高次項を

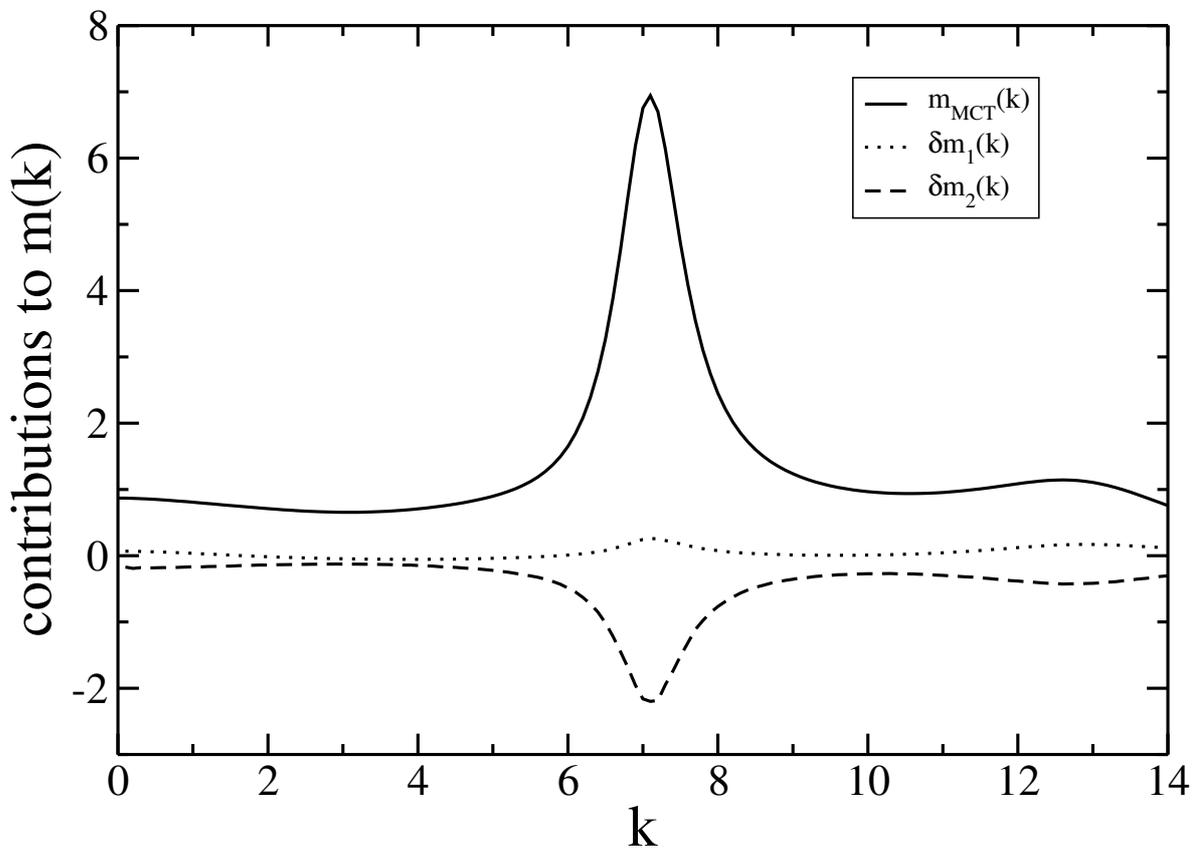


図 1: モード結合理論の臨界密度でのスケールされたメモリーカーネルの波数依存性。実線がMCT, 点線が一次補正, 破線が二次補正。

原論文 (2013年1月1日出版済み)

Mode-coupling theory and beyond

Grzegorz Szamel, Prog. Theor. Exp. Phys. 2013, 012J01 (2013)

doi:10.1093/ptep/pts036

< 情報提供 : Grzegorz Szamel (コロラド州立大学物理学科) >