

動的事象の臨界揺らぎに関する理論

岩田 真実

東京大学 総合文化研究科 広域科学専攻

【背景】 ガラス状態を理解する試みは、動力学や統計力学などのさまざまな立場からなされてきた。その一つに、動力的異常性による以下のような特徴付けがある。例えば、過冷却液体においては、密度場の2体時間相関関数は単純な指数緩和ではなく2段階緩和を示し、ある転移温度に近づくとつれ緩和時間が発散傾向を示す。この緩和時間が有限の値から発散する転移は非エルゴード転移と呼ばれ、次のような物理的描像が考えられている。転移温度より高温では粒子は互いに邪魔しあいながら平衡状態を探すための再配置運動を繰り返すが、転移温度に近づくと、再配置のためにまわりの粒子から抜け出すという動的な事象の頻度が次第に減り、ついに転移温度で配置が凍結してしまうという描像だ。とりわけ近年の研究では、この動的事象を表現する試みによって、ガラス転移点における特徴的な長さや時間の発散傾向が以下のように示唆され、新たな展開が期待されている。まず、温度を与えると密度場の2体時間相関関数の緩和時間が決まる。液体状態のある温度でこの緩和時間の間の粒子の変位を描画すると、粒子配置は空間的に均一に存在する。その一方、ガラス状態に近い低温側では不均一に存在し(動的不均一性)、さらに特徴的長さの増大が見られる。より正確には、この動的相関は密度場の4体時間相関関数で定量化され、ついにある転移点では、驚くべきことに、緩和時間と同時に揺らぎの振幅と特徴的長さの発散が起きる。この臨界的振る舞いは、統計物理学の問題として刺激的な可能性を提示しているように思える。

【着眼】 このようなある転移点における時間空間スケールの発散は、ガラス転移が協同現象であることの証拠であり、平衡系の臨界現象との類似性を示唆している。つまり、この現象が理解されたときには、臨界現象のときにあったような、簡単な構造による分類ができる可能性がある。臨界現象においては、分類の基本要素となったひな形は、ギンツブルグ・ランダウ模型である。具体的には、秩序変数の分岐(温度を変化させたときの秩序変数の定性的変化)を最小に表現する有効ハミルトニアンに基づいて、揺らぎの解析が行われ、臨界現象を特徴づける指数が定量的に計算された。そこで、ギンツブルグ・ランダウ理論に着想を得て、ガラス転移の動力学に対する分岐(温度を変化させたときの軌道の定性的変化)に着目し、この分岐に付随する揺らぐ場の解析から、“臨界的”ふるまいの記述を試みた。

【ガラス転移に関係するいくつかの模型の分岐構造】

モード結合転移の分岐: モード結合理論は、実験に先駆けて構造ガラスにおける非エルゴード転移を予言し、ガラス転移の研究において重要な役割を担ってきた。この理論の中核をなす方程式はモード結合方程式と呼ばれ、密度場の2体時間相関関数が満たす式に対してパーテックスコレクションを無視して得られる。 p 体球スピングラス模型では、モード結合方程式が厳密に導出され、その動力学はもっとも簡単なモード結合方程式で記述される。本研究では、このモード結合方程式に対して、非エルゴード転移点近傍で転移点からのずれを摂動パラメータと

して、解を構成する系統的な摂動論を初めて構築した。転移点近傍においては、解の様相が摂動に対して大きく変化するため、素朴な摂動論は破綻する。そこで、3つのタイムスケールを導入し、特異摂動法を使うことで系統的な摂動解の構成を行った。その際、モード結合方程式は遅い時間スケールでディラレーション対称性を持つことが重要な役割を果たす。この性質を使って、転移点からのずれを表す小さいパラメタ依存性を明示した、解の最小表現を得た。

k コアパーコレーション模型の動力学の分岐： 先行研究では、粉体のように排他性が本質的に強く効く系におけるガラス転移に焦点を当てるため、動力学に制限の入った格子模型が研究されてきた。この動力学の制限は、粒子がお互いの配置の交換の邪魔をし合う寄与を表している。これに関連する模型として、 k コアパーコレーション模型がある。この模型は、 k 本以上の辺を持つ格子点だけから成るクラスタ (k コア) のサイズが、密度を変えるとシステムサイズに到達するパーコレーション転移を示す。ここでは、初期状態としてランダムグラフを与え、最後に k コアだけが残るように辺を消す確率過程を考える。そして、この過程が、熱力学極限 (決定論的極限) で厳密にサドルノード分岐することを示した。さらに、この分岐点において、緩和時間の発散と軌道の揺らぎの振幅が発散することを見いだした。

【分岐の周りの揺らぎの解析】 以上のように、ガラス転移に関係する二つの模型の動力学が、分岐論の立場からはサドルノード分岐の仲間として表現されることが分かって来た。そこで、サドルノード分岐に付随する揺らぎの解析を行い、臨界揺らぎの臨界指数を計算した。具体的には、動力学がサドルノード分岐を示す揺らぐ場の有効確率過程を考え、この経路積分を与える作用を特異摂動法を用いて解析した。この解析では、分岐点近傍で、分岐形に起因した時間並進対称性を破った解の周りで揺らぎの記述を摂動論的に行うことに成功した。その結果、模型が元来持っている対称性を破ることに付随したゴールドストーンモードが存在し、このゴールドストーンモードの揺らぎが特異的になることで軌道の揺らぎが臨界的になることが分かった。このゴールドストーンモードはサドル点から離れる時刻に対応するので、より広く構造ガラスの問題においては、粒子再配置が起きる時刻のゆらぎの特異性が非エルゴード転移点近傍の臨界的振る舞いをもたらす可能性を提示することができた。

【考察】 ガラス転移点における臨界的ふるまいは、素朴な量の観察からは見えにくく、密度の高次相関という複雑な量で定量化される。この量が強い非線形性を持つことから、モード結合理論に基づく解析などの先行研究では、系統的な解析が困難であった。一方、本研究は、ガラス転移に関するいくつかの模型に対して転移を力学系の立場から見直して、その分岐に着目し、非線形性の強い分岐構造を捨てた未摂動状態のまわりで揺らぎを摂動論的に記述することで、より簡単に高次相関の異常性を記述することに成功した。その結果、臨界点に近づくにつれて特異的揺らぎが次第に稀になる様相を簡潔な理論で示すことができた。これにより、ガラス転移に関係するいくつかの模型における臨界的振る舞いが、動的現象の協同現象として捉えられた。

本研究が提示した新たな着眼がガラス転移の本性を捉えているかどうかは未知である。しかし、いくつかのガラス転移と関係する重要な模型に対して本研究が提案した理論的枠組を着実に展開することができたことは、将来のさらなる発展を期待させると考えている。