

令和元年9月5日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2015～2018

課題番号：15K05212

研究課題名(和文) ガラス・ジャミング系におけるレプリカ対称性の破れと物性

研究課題名(英文) Replica symmetry breaking and physical properties in glass jamming systems

研究代表者

吉野 元 (Yoshino, Hajime)

大阪大学・サイバーメディアセンター・准教授

研究者番号：50335337

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：ガラス転移の問題は、物理学の重要な未解決問題として残されてきたが、最近平均場理論が確立されるに至った。特に、連続的なレプリカ対称性の破れを伴う「ガードナー相」とよばれる新しいガラス相が、ジャミング転移密度に近い剛体球ガラスの高密度領域において発見され、大いに注目された。研究代表者の吉野らは、このガードナー相における力学物性についていくつかの興味深い理論的予想を得ていた。本研究では、大規模分子動力学シミュレーションを行い、3次元剛体球ガラス系のガードナー相において、力学物性の異常を捉えることに成功した。さらに、平均場理論を発展させ、回転自由度によるガラス・ジャミング転移の理論の構築に成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ガラス転移に関わる諸問題は物理学の難問として残されてきたが、平均場理論の展開と大規模数値シミュレーションによる研究を行うことによってこの分野の発展に寄与することができた。特に、ジャミング転移密度近くの高密度領域にあると予言された「ガードナー相」における力学物性の異常を、分子動力学シミュレーションで捉えることに初めて成功した。これは、今後の研究に重要な示唆を与えるものである。さらに本研究では、並進自由度とならんで重要な回転自由度に注目し、回転自由度の関わるガラス・ジャミング転移の平均場理論の構築を行った。これは今後、現実のガラス物性、また工業的な応用に重要な寄与をするものと期待される。

研究成果の概要(英文)：Glass transition remained as a major challenge in physics. However, recently we witnessed development of the mean-field theory for structural glasses in large dimensional limit. Most notable finding was the “Gardner phase” deep in the glassy phase where unusual rheological properties were predicted. In the present project, we performed extensive molecular dynamics simulations on dense assembly of three dimensional hard-spheres and succeeded to find the mechanical anomalies associated with the Gardner phase: peculiar hysteric response to shear signaled by different shear moduli. We also succeeded to work out stability-reversibility map of the hard-sphere glass which describes yielding (melting) and jamming of the glass.

Another major achievement of the project is development of the exact mean-field theory of orientational glass transitions in the large dimensional limit. In particular we succeeded to show that spin-glass transitions are possible without quenched disorder.

研究分野：ランダム系の統計力学・物性基礎論

キーワード：ガラス転移 ジャミング転移 平均場理論 分子動力学シミュレーション コロイドガラス スピングラス 制約充足問題

1. 研究開始当初の背景

ガラス転移の問題は、長く物理学の重要な未解決問題として残されてきたが、最近、最も単純な剛体球ガラス系に対する平均場理論が確立されるに至った。(P. Charbonneau et. al., Nature Communications 5, 3725 (2014)) 特にこのアプローチによって、連続的なレプリカ対称性の破れを伴う「ガードナー相」とよばれる新しいガラス相が、ジャミング転移密度に近い高密度領域において発見され、大いに注目された。研究代表者の吉野は、F. Zamponi 博士らとの共同研究によって、このガードナー相における力学物性について平均場理論に基づく研究を行い、いくつかの興味深い理論的予想を得ていた。(H. Yoshino and F. Zamponi, Phys. Rev. E 90, 022302 (2014), C. Rainone, P. Urbani, H. Yoshino and F. Zamponi, Phys. Rev. Lett. 114, 015701 (2015))

2. 研究の目的

本研究の目的は、ガラス転移、ジャミング転移を示す系に対して統計力学的な理論・シミュレーション解析を行い、レプリカ対称性の破れを伴う複雑なエネルギー地形の出現が、ガラスの物性にどのように反映されるのかを明らかにすることである。

3. 研究の方法

(1) 大規模な数値シミュレーション(論文[1,2,3,4])

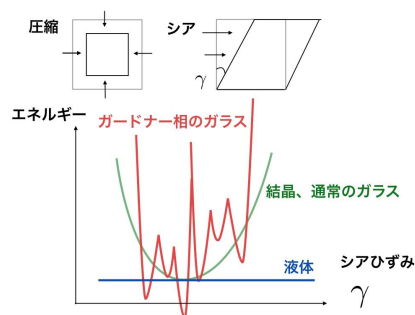
上記の平均場理論は、無限大次元で厳密になるものの、現実の有限次元系での妥当性は全く自明でない。そこで我々は、大規模な分子動力学シミュレーションによって、3次元ソフトコア粒子系[1]および剛体球系[2,4]の力学物性を詳細に解析した。

(2) レプリカ法に基づく平均場理論(論文[5])

上記の平均場理論では、並進自由度のみ持つ理想化された粒子系を想定している。実際のガラス系は、一般に回転自由度を持ち、より豊かなガラス物性を示す。回転自由度の関わるガラス物性を第一原理的に研究するための第一歩として、回転自由度のみを持つ系に関する理論の構築を行った[5]。その後さらに、並進自由度・回転自由度を併せ持つ系のレプリカ理論の構築を進めた。

4. 研究成果

(1) 3次元剛体球ガラスにおけるガードナー転移とそれに伴う力学物性の異常の発見、glass-stability mapの構築(論文[1,2,4])

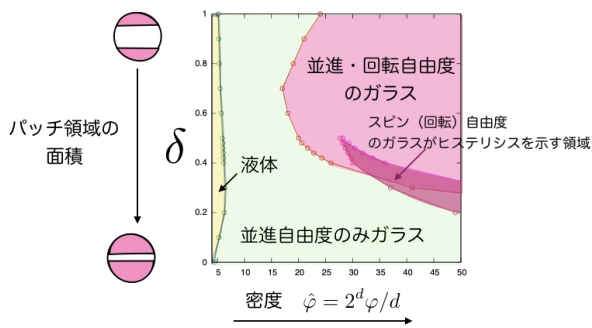


大規模分子動力学シミュレーションによって、平均場理論(Yoshino-Zamponi(2014), C. Rainone et.al. (2015))の予測するガードナー相における力学物性の異常を捉えることに成功した。特に、ガードナー相において、レプリカ対称性の破れを反映して、短時間・長時間スケールにあらわれると期待された2種類のシアモジュラスの観測に成功した[2]。また、垂直ひずみ(圧縮/膨張)およびシアひずみを軸としたガラスの安定性相図(glass stability map)を描き出し、ガードナー相の広がり、降伏線、シアジャミング線を定量的に求めることに成功した[4]。

(2) 回転自由度の関わる新しいガラス・ジャミング転移の開拓(論文[3,5])

回転自由度のガラス・ジャミング転移のレプリカ液体論を、平均場理論が厳密になる無限大次元で構成し、理論解析した[5]。従来のスピングラスと異なり、外的な乱れ(quenched disorder)を持つことなく、過冷却常磁性状態から自発的にガラス転移が起こることを示すことに成功した。

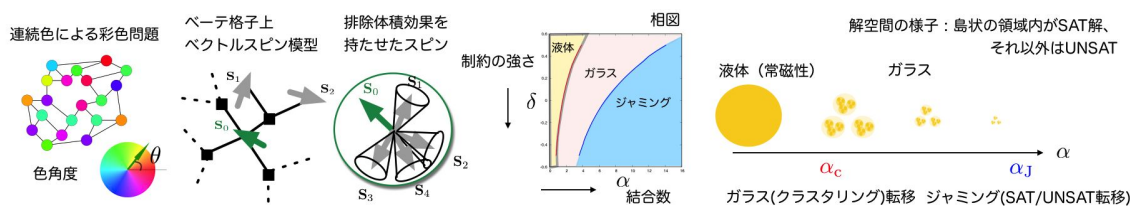
この成果を基にして次に並進自由度と回転自由度を併せ持つ系のレプリカ液体論の構成することに成功し、テストケースとしてパッチコロイドにおけるガラス転移の解析を行い、有意な結果を得た。(H. Yoshino, 投稿中) 特に、回転自由度の絡んだ、新しいリエントラント転移を発見した。



2つのパッチを持つコロイドにおける並進・回転自由度のガラス転移

さらに、楕円体型コロイドを念頭に、剛体楕円体系におけるガラス転移の解析も開始し、有意な予備的結果を得ることに成功した。特に、異方性の強さに対してガラス転移およびジャミング転移密度が非単調性を持つことを明らかにした。これは、実際の3次元系での数値シミュレーションの結果と整合するものである。(Yoshino, 2019 投稿準備中)

また論文[5]では、連続色による彩色問題など、ベクトル自由度を変数として持つ連続変数の制約充足問題を解析できることを示し、連続的なレプリカ対称性の破れを伴うガラス相が出現すること、その最深部における SAT/UNSAT 転移(ジャミング転移に対応)の臨界特性が、剛体球のものと同じであることを明らかにした。このように、当初の予想を超えて様々な問題と関連することが明らかになった。



5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計 5 件)

1. Hajime Yoshino, "Disorder-free spin glass transitions and jamming in exactly solvable mean-field models", SciPost Physics 4, 040-1 (2018) DOI: 10.21468/SciPostPhys.4.6.040 (査読有)
2. Yuliang Jin, Pierfrancesco Urbani, Francesco Zamponi and Hajime Yoshino, "A stability-reversibility map unifies elasticity, plasticity, yielding, and jamming in hard sphere glasses", Science Advances, 6387-1 (2018) DOI: 10.1126/sciadv.aat6387 (査読有)
3. Kota Mitsumoto and Hajime Yoshino, "Orientational ordering of closely packed Janus particles", Soft Matter 10.1039 (2018). DOI: 10.1039/C8SM00622A (査読有)
4. Yuliang Jin and Hajime Yoshino, "Exploring the complex free energy landscape of the simplest glass by rheology", Nature Communications 8, 14935 (2017) DOI: 10.1038/NCOMMS14935. (査読有)
5. Daiju Nakayama, Hajime Yoshino and Francesco Zamponi, "Protocol-dependent shear modulus of amorphous solids", Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment 10, 104001 (2016). DOI:10.1088/1742-5468/2016/10/104001. (査読有)

[学会発表](計 49 件)

1. Hajime Yoshino, "Signatures of the full replica symmetry breaking in jamming systems under shear", Japan-France Joint Seminar Kyoto Univ. 2015/08/11 (invited).
2. 吉野元, 「回転自由度ガラス・ジャミング転移の有効模型と平均場理論」、日本物理学会秋季大会 関西大学 2015年9月18日
3. 光元亨汰, 中山大樹, 吉野元, 「2次元正方格子斥カスピン模型のジャミング転移」、日本物理学会秋季大会 関西大学 2015年9月18日

4. 吉野元、「ジャミング系におけるマージナル安定性と非線形シアモジュラスの発散」、日本物理学会秋季大会 関西大学 2015年9月18日
5. 中山大樹, 吉野元, Francesco Zamponi、「3次元ジャミング系における非線形・線形シア応答」、日本物理学会秋季大会 関西大学 2015年9月18日
6. 吉野元、「回転自由度ガラス・ジャミング 転移と連続的なレプリカ対称性の破れ」、日本物理学会年次大会 東北学院大 2016年3月21日
7. 光元亨汰, 中山大樹, 吉野元、「斥力XYスピン模型のジャミング状態における圧縮・シア応答」、日本物理学会年次大会 東北学院大 2016年3月21日
8. 中山大樹, 吉野元、「ジャミング系における1粒子実効ポテンシャルの解析」、日本物理学会年次大会 東北学院大 2016年3月21日
9. 池田晴國, 宮崎州正, 吉野元, 池田昌司、「二成分系のガラス転移のレプリカ液体論による研究」、日本物理学会年次大会 東北学院大 2016年3月22日
10. 吉野元、「斥力ベクトルスピン模型におけるガラス転移とジャミング」 統計物理の新展開 大阪大学中之島センター 2016年3月26日.
11. Hajime Yoshino, “From continuous coloring to rotational glass transitions : a mean-field theory” International workshop on Glasses and Related Nonequilibrium Systems Nakanoshima Center, Osaka Univ., March 22 (poster)
12. Yuliang Jin and Hajime Yoshino, “Shear yielding and shear jamming of hard sphere glasses” International workshop on Glasses and Related Nonequilibrium Systems Nakanoshima Center, Osaka Univ., March 22 (poster)
13. Kota Mitsumoto and Hajime Yoshino, “Glass phases of a repulsive spin model”, International workshop on Glasses and Related Nonequilibrium Systems Nakanoshima Center, Osaka Univ., March 22 (poster)
14. Hajime Yoshino, “Glass transitions and jamming of supercooled vectorial spins”,CECAM workshop Glass & Jamming transition (Jan. 9-11, 2017), Lausanne, Switzerland. (invited)
15. Yuliang Jin and Hajime Yoshino, Exploring the complex free-energy landscape of the simplest glass by rheology, CECAM workshop Glass & Jamming transition (Jan. 9-11, 2017), Lausanne, Switzerland. (invited)
16. Jin Yuliang and Hajime Yoshino, Shear modulus of hard sphere glasses, Nonlinear Response in Complex Matter (Sep. 26-30, 2016), Primošten, Croatia. (oral)
17. Yuliang Jin and Hajime Yoshino, Shear modulus of hard-sphere glasses:, Packing : across length scales (Aug. 29- Sep. 1, 2016), Shanghai, China. (oral)
18. 吉野元「ソフトコア斥力ベクトルスピン模型におけるガラス・ジャミング転移のレプリカ液体論」日本物理学会 金沢大学 2016年9月15日
19. 光元亨汰, 吉野元「斥力ハイゼンベルクスピン模型の反強磁性相とガラス・ジャミング相」日本物理学会 金沢大学 2017年9月15日
20. Yuliang Jin and Hajime Yoshino, “Elastic anomalies in colloidal hard-sphere glasses”, 日本物理学会 金沢大学 2016年9月15日
21. 吉野元「回転自由度のガラス・ジャミング転移の普遍性」日本物理学会年次大会 大阪大学 2017年3月20日
22. 光元亨汰, 吉野元「3次元斥力ハイゼンベルクスピン模型のガラス相における緩和現象」日本物理学会年次大会 大阪大学 2016年3月20日
23. Yuliang Jin and Hajime Yoshino, “Shear yielding and shear jamming in three-dimensional hard sphere glasses”, 日本物理学会年次大会 大阪大学 2017年3月20日
24. (招待) 吉野元, “Glass transitions and jamming of supercooled vectorial spins” ジャムドマターの非ガウスゆらぎとレオロジー, 京都大学基礎物理学研究所 2017年3月10日.
25. Yuliang Jin and Hajime Yoshino, “Exploring the complex free energy landscape of the simplest glass by rheology”, ジャムドマターの非ガウスゆらぎとレオロジー 京都大学基礎物理学研究所 2017年3月10日.

26. Hajime Yoshino, Angular Random Packing : from Continuous Coloring to Rotational Glass Transitions, International Symposium on Fluctuation and Structure out of Equilibrium 2017 (Nov. 20-23, 2017), Sendai, Japan. (Invited)
27. Yuliang Jin and Hajime Yoshino, A Unified Numerical Study of Plasticity, Yielding, Melting and Jamming in Three-Dimensional Hard Sphere Glasses, International Symposium on Fluctuation and Structure out of Equilibrium 2017 (Nov. 20-23, 2017), Sendai, Japan. (Oral)
28. Kota Mitsumoto and Hajime Yoshino, Glassy States of a Repulsive Vectorial Spin Model, International Symposium on Fluctuation and Structure out of Equilibrium 2017 (Nov. 20-23, 2017), Sendai, Japan. (Poster)
29. Hajime Yoshino, Exploring complex free-energy landscape of the simplest glass by rheology, Yielding of amorphous solids (Oct. 26-28, 2017), Paris, France. (Invited)
30. Hajime Yoshino, Angular packing and jamming, Rheology near Jamming transition and its related subject (Aug. 19, 2017), Kyoto, Japan.(Invited)
31. Yuliang Jin, Hajime Yoshino, A unified numerical study of jamming, melting, yielding and plasticity in three-dimensional hard sphere, Rheology near Jamming transition and its related subject (Aug. 19, 2017), Kyoto, Japan. (Oral)
32. Hajime Yoshino, Rotational glass transitions and jamming in a large dimensional limit, IDMRC8 (8th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems) (Jul. 23-28, 2017), Wisla, Poland. (Invited).
33. Yuliang Jin, Hajime Yoshino, Pierfrancesco Urbani, Francesco Zamponi, A unified study of plasticity, yielding, melting and jamming in three-dimensional hard sphere glasses, IDMRC8 (8th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems) (Jul. 23-28, 2017), Wisla, Poland. (Invited)
34. 横井秀汰, 吉野元「疎な観測による p 体ベクトル推定問題」日本物理学会 (東京理科大学) 2018 年 3 月
35. 吉野元「パッチコロイドガラスのエネルギー地形:平均場理論」日本物理学会 (東京理科大学) 2018 年 3 月
36. 光元亨汰, 吉野元「ランダム充填ヤヌス粒子系の回転自由度のダイナミクス」日本物理学会 (東京理科大学) 2018 年 3 月
37. 吉野元「高次元極限における並進・回転自由度のガラス転移」日本物理学会 (岩手大学) 2017 年 9 月
38. 吉野元「連続制約充足問題の p-spin 球形模型:クラスタリング転移と SAT/UNSAT 転移」日本物理学会 (岩手大学) 2017 年 9 月
39. 光元亨汰, 吉野元「最密充填ヤヌス粒子における回転自由度の相転移」日本物理学会 (岩手大学) 2017 年 9 月
40. 横井秀汰, 吉野元「任意のノイズ分布をもつ group synchronization の解析」日本物理学会 (岩手大学) 2017 年 9 月
41. Yuliang Jin and Hajime Yoshino, "A unified study of melting, yielding, and jamming in three-dimensional hard sphere glasses" 日本物理学会 (岩手大学) 2017 年 9 月
42. H. Yoshino, "Glass transitions of patchy colloids in large-d limit", Unifying Concept in Glass Physics VII, Bristol, U. K., June 14th., 2018. (Oral)
43. Yuliang Jin, Pierfrancesco Urbani, and Francesco Zamponi, and Hajime Yoshino, "Stability of hard sphere glasses against normal and shear deformations" Unifying Concept in Glass Physics VII, Bristol, U. K., June 14th., 2018. (Oral)
44. K. Mitsumoto and H. Yoshino, "Orientational ordering of closely packed Janus particles", Designer Soft Matter 2018, Singapore, June 7th, 2018. (Oral)
45. Hajime Yoshino, "Stability-reversibility map of hardsphere glasses", Rheology of disordered particles suspensions, glassy and granular materials, Kyoto Univ., June 29th, 2018. (invited)
46. 吉野元「並進と回転自由度ガラス転移の平均場理論」、東大物性研短期研究会「ガラス転移と関連分野の最先端研究」、東京大学物性研究所、2018 年 5 月 10 日。

47. 吉野元「Disorder-free ベクトルスピン模型のランダムエネルギー特性」日本物理学会年会、同志社大学(京田辺キャンパス)、2018年9月16日
48. 吉野元「剛体楕円体のガラス転移とジャミング：高次元極限におけるレプリカ液体論」日本物理学会年会、九州大学、2019年3月16日
49. 光元亨汰, 堀田知佐, 吉野元「パイロクロア格子上反強磁性 Heisenberg 模型における動的 Jahn-Teller 歪みの効果」日本物理学会年会、九州大学、2019年3月16日

〔図書〕(計 0件)

〔産業財産権〕

出願状況(計 0件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年：
国内外の別：

取得状況(計 0件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年：
国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等 <http://www.cp.cmc.osaka-u.ac.jp/~yoshino/topics.html>

6. 研究組織

(1)研究分担者

研究分担者氏名：

ローマ字氏名：

所属研究機関名：

部局名：

職名：

研究者番号(8桁)：

(2)研究協力者

研究協力者氏名：

Yuliang Jin 博士(大阪大学サイバーメディアセンター)

光元亨汰 (Kota Mitsumoto)氏(大阪大学大学院理学研究科物理学専攻)

Francesco Zamponi 博士(ENS, Paris)

Pierfrancesco Urbani 博士(IPT, Univ. Paris Saclay)

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。