

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 5 月 28 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(B)

研究期間：2010～2013

課題番号：22340109

研究課題名(和文) 熱力学ガラス転移を示す統計力学モデルの探索と特徴抽出

研究課題名(英文) Thermodynamic glass transition: seeking for statistical mechanical models and extracting their characteristics

研究代表者

佐々 真一 (SASA, Shin-ichi)

京都大学・理学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：30235238

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 10,300,000円、(間接経費) 3,090,000円

研究成果の概要(和文)：熱平衡状態において不規則に固まった状態である「理想ガラス相」を実現することを目標に掲げ、原子分子の運動と巨視的な物質の状態をつなぐ平衡統計力学にもとづいて、様々な数理モデルを解析した。その結果、不規則なままに巨視的な重なりがあらわれる相を示す有限次元モデルを構成することに成功した。そのモデルは転移点では潜熱を示す1次転移である可能性が高いが、さらに潜熱がでないランダム一次転移を示す有限次元モデルも見出した。これらはいずれも世界で最初の発見であり、現実に存在するガラスの深い理解に向けた一歩となる。

研究成果の概要(英文)：Toward the ultimate goal to have "ideal glass", in which molecules are frozen in an irregular manner at equilibrium, we have analyzed various mathematical models within a framework of equilibrium statistical mechanics that connect atomic level descriptions with macroscopic states of matter. As the result, we have found a finite dimensional model that exhibits the emergence of macroscopic overlap. While the transition of this model seems to be of the first-order with latent heat, we also find another model that exhibits Random First Order Transition without latent heat. These two results are the first report in the world, and they will provide a significant step toward deep understanding of realistic glasses.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：数理物理・物性基礎

キーワード：統計力学 ガラス 不規則充填

1. 研究開始当初の背景

温度の低下に伴って、空間的に不均一なまま固化する物質がある。この過程で、粘性率の急激な増大や比熱の大きな変化が生じる。粘性率の値などによって便宜的に決められた転移温度は「実験室ガラス転移温度」と呼ばれるが、その転移温度は、液固転移温度や臨界温度と異なり、熱力学的特異性によって特徴づけられていない。また、その値は温度の下げ方など試料の用意の仕方に依存する。その一方、平衡状態において熱力学特異性を伴うガラス転移は「熱力学ガラス転移」と呼ばれるが、一般に平衡状態に緩和するのが極端に遅くなるためその存在は確認されていない。

理論的には、熱力学ガラス転移の問題に対して、スピングラス研究で成功を収めたレプリカ理論にもとづく平均場解析が適用されてきた。特に、ランダムグラフ上に定義された粒子模型が1段階レプリカ対称性の破れ(1RSB)を示すことが理論的に導かれた。1RSBが熱力学ガラス転移と関係している可能性は20年前から指摘されており、それにもとづく現象論(ランダム1次転移シナリオ、以下、RFOT)も発展していた。

ところで、この理解は平均場描像にもとづいている。例えば、有限次元空間における熱力学ガラス転移については、理論的解析でも、数値実験でも、室内実験でも、議論以前の状況にあった。

2. 研究の目的

まず、熱力学ガラス転移を示す有限次元統計力学模型を構築する。具体的には、結晶秩序など明示的な対称性の破れは生じていないけれど、スピングラス研究で知られている重なりオーダーパラメータが有限の値になることを示す。

次に、有限次元熱力学ガラス相の特徴づけを行う。ガラスオーダーに付随する特徴的長さを定義し、その発散傾向を見出す。また、粒子配置の直接的解析によって「レプリカに依存しない」ガラスオーダーの定量化を提案する。これらを介して、熱力学ガラスの普遍性クラスを考え、現実のガラス系を分類する足がかりを与える。

最後に、熱力学ガラス転移に対する以上の結果を踏まえて、動力学研究に新しい視点を持ち込む。有限次元系において消失するモード結合転移点近くの動的不均一性の理解を深めるだけでなく、熱力学ガラス転移点近くでの動力学の異常性から、実際の実験ではそこに近づけない機構を明らかにし、実験で見られる動力学の異常性についての法則を見出す。

3. 研究の方法

(1)不規則パターンが基底状態やエネルギー極小状態になるような方法を構成した。以下の3つのアプローチを考えたが、順により有用

なものとなってきた。第一の方法では、セルオートマトンの時空パターンを統計力学の基底状態に持ち込む。第2の方法では、ワングタイルを使う。そして、第3の方法では、3次元化したワンキューブに対して、セルオートマトンの構成とエネルギーランダムネスを組み合わせる。これらのアプローチで構成された模型に対して、レプリカ交換モンテカルロ法で数値実験を行い、熱力学的性質、ガラスオーダーの出現、ダイナミクスについて調べる。また、その模型の理論的解析を行う。

(2) RFOTに代表されるガラスの現象論では、ガラス転移に伴う動的な異常は位相空間の非常に多数の分割と関係しているとする。幾つかのレプリカ法やキャピティ法など平均場解析から位相空間の分割は指摘されている。さらにダイナミクスに関する数値計算から、その分割と異常長緩和の出現が同時に起こることが示唆されている。しかしながら、位相空間の理論的解析は平均場模型の特性を反映した仮定が前提となっており、例えば有限次元系での妥当性を検討するためには、別の方法が必要となる。そのための数値計算手順を考案し、平均場模型で期待される結果が再現されることを確かめる。

(3) RFOTが実現するとされる主な微視的模型は、平均場スピングラス模型やランダムグラフ上の格子ガラス模型である。空間次元が無限大であったり、系に乱れがあらかじめ導入されていることから、我々の世界である3次元系においてRFOTの示唆する現象のどこが正しくてどこを修正しなければならないかは不明である。そこで、RFOTを実現する有限次元模型を見つけ、その熱力学特性を明らかにすることは大きな意味があると考えられる。元来、実験系のガラス転移は外的な乱れの少ない状況でも起こるために、対応する統計力学模型は並進対称性を持つことが期待されるが、ここでは先の平均場スピングラス模型の一つである3次元ポッツグラス模型を大規模なモンテカルロ・シミュレーションで調べ、熱平衡状態を調べた。

(4)ガラスは異常長緩和を示す典型系であり、その系をモンテカルロ法で調べる際に遅い緩和は障害になる。特に、熱平衡ガラス転移を探求する本課題にとっては問題点の一つである。そこで、既存の方法を組み合わせ、できるだけ計算時間と緩和時間が短くなるような方法を模索する。

4. 研究成果

(1)セルオートマトンによる不規則基底状態を構成した模型のうち、双対性の議論で相転移の存在が理論的に理解できるものがあった。この相転移は興味深いものであったが、最終結果としては、重なりオーダーが転移を示さず、複雑な基底状態と関係する液体と単純な液体の1次転移であることが分かった。ダイナミクスも異常であるが、この異常性は、いわゆる運動論的拘束模型(KCM)の振る舞い

と定性的に同じだと判断された。

(2) ワンタイルを使った模型は、不規則基底状態を作っても転移がないか、規則相に入るか、準周期相に入るかしかなかった。徹底的に調べたが、2次元格子模型では、熱力学ガラス転移は出現しないと予想するに至った。ワンタイルを層状に積み重ねた模型では、不規則秩序が出現しうることを示した。熱力学的性質は興味深いが、模型に恣意性がある。

(3) 最終的に、3次元格子模型でワンキューブを用いて、セルオートマトンルールによって不規則配置を構成し、かつ、エネルギーにランダムネスを持ち込むことで重なりオーダーパラメータが有限の値をとる相への転移を確認した。しかし、数値実験の範囲では、潜熱を伴った1次転移になっており、平均場模型から考えられているランダム1次転移シナリオとは異なっている。それと関係しているのか、ダイナミクスの様子もだいぶ違う。例えば、平衡状態における時間相関関数は遅くならない。その一方、平衡への緩和時間は膨大になっている。以上の結果は論文として公表され、国際会議等でも発表された。特に、最後の結果は、Phys. Rev. Lett. に掲載されたことを附記したい。

(4) ランダムグラフ上の格子ガラス模型では、ある密度以上では位相空間が指数関数オーダーに分割することが知られている。一般に、その密度は熱平衡ガラス転移を示す密度よりも低い。そこで、位相空間の分割が起きている高密度だけを許した局所更新では、位相空間を広く巡ることができないことを示せばよい。許される密度の下限を変化させたときに、位相空間の拡散に局在・非局在転移が起こることを確認する数値計算手順を提案した。実際に、格子ガラス模型において、分割の起こる密度で局在転移が起こることを示した。この手順は任意の格子模型に応用可能である。

(5) 3次元ポツグラス模型の平均場極限では RFOT が実現することが理論的に分かっており、純粋に有限次元のゆらぎに対する RFOT の頑健性の検証に焦点を絞ることができる。Cammarota らによる議論(2013)では、3次元ポツグラス模型では RFOT は極めて起きにくいとされているが、我々は彼らの指摘する困難点を回避するために第三近接相互作用を導入した。その結果、有限温度で RFOT を示すことが明らかになった。さらに、臨界指数の評価により、現象論的に示唆されている RFOT 普遍性クラスに属することと矛盾しないことが分かった。この結果は、RFOT を基盤とする熱力学ガラス転移の理解へ向けた重要な一歩を提示していると考えられる。

(6) 格子ガラス模型では、与えられた配置の元で、遷移可能な格子をリストアップすることにより、無駄な時間を短縮することが可能になる。その考えを具体的に実装し、高密度領域においてかなりの高速化が実現できた。また、モンテカルロ法において、平衡分布を

持つための十分条件である詳細つりあい条件を緩めることにより、平衡分布に早く到達する可能性を幾つかの簡単な模型で調べた。特殊な模型では定性的に緩和が加速されることが示された。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 22 件)

Masato Itami and Shin-ichi Sasa,

"Macroscopically measurable force induced by temperature discontinuities at solid-gas interfaces", 査読有,

Phys. Rev. E 89.052106 /1-6(2014)

DOI: 10.1103/PhysRevE.89.052106

Hiroki Ohta and Shin-ichi Sasa,

"Jamming transition in kinetically constrained models with the parity symmetry", 査読有,

J. Stat. Phys. 155,827-842(2014)

DOI:10.1007/s10955-014-0978-y

Shin-ichi Sasa,

"Derivation of Hydrodynamics from the Hamiltonian Description of Particle Systems"

Phys. Rev. Lett. 112,

100602/1-5(2014), 査読有,

DOI:10.1103/PhysRevLett.112.100602

Takahiro Nemoto and Shin-ichi Sasa,

"Computation of Large Deviation Statistics via Iterative

Measurement-and-Feedback

Procedure", 査読有,

Phys. Rev. Lett. 112,090602/1-5(2014)

DOI:10.1103/PhysRevLett.112.090602

Masahiko Ueda and Shin-ichi Sasa,

"Calculation of 1RSB transition temperature of spin glass models on regular random graphs under the replica symmetric ansatz", 査読有,

J. Stat. Mech. P02005 /1-21(2014)

DOI:10.1088/1742-5468/2014/02/

P02005

Shin-ichi Sasa,

"Possible extended forms of thermodynamic entropy", 査読有,

J. Stat. Mech. P01004 /1-15(2014)

DOI:10.1088/1742-5468/2014/01/

P01004

S.Takabe and K.Hukushima, Typical Behavior of the Linear Programming

Method for Combinatorial

Optimization Problems: A

Statistical-Mechanical Perspective,

J.Phys.Soc.Jpn, 査読有 Vol. 83, 2014,

043801-1-4,

<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.83.0438>

01
 Y.Sakai and K.Hukushima, Dynamics of One-Dimensional Ising Model without Detailed Balance Condition, J.Phys.Soc.Jpn, 査読有, Vol.82, 2013,064003-1-8, <http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.82.064003>
 M.Sasaki and K.Hukushima, A List Referring Monte-Carlo Method for Lattice Glass Models, J.Phys.Soc.Jpn, 査読有, Vol.82, 2013,094003-1-15, <http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.82.094003>
 Naoko Nakagawa and Shin-ichi Sasa, "Work relations for time-dependent states", 査読有, Phys. Rev. E 87, 022109/1-5 (2013) DOI: 10.1103/PhysRevE.87.022109 Shin-ichi Sasa, "Physics of Large Deviation", 査読有, Phys. Scr. 86, 058514/1-3 (2012) DOI:10.1088/0031-8949/86/05/058514 Shin-ichi Sasa, "Pure Glass in Finite Dimensions" Phys. Rev. Lett. 109, 165702 /1-4(2012), 査読有, DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.165702 Shin-ichi Sasa, "Statistical mechanics of glass transition in lattice molecule models", 査読有, J. Phys. A: Math. Theor. 45, 035002 /1-18(2012) DOI:10.1088/1751-8113/45/3/035002 A.Sakata, K. Hukushima and K.Kaneko, Replica symmetry breaking in an adiabatic spin-glass model of adaptive evolution, Europhysics Letters, 査読有, Vol.99, 2012, 68004—1-7, doi:10.1209/0295-5075/99/68004 Takahiro Nemoto and Shin-ichi Sasa, "Thermodynamic formula for the cumulant generating function of time-averaged current" Phys. Rev. E 84, 061113/ 1-18(2011) 査読有, DOI: 10.1103/PhysRevE.84.061113 Masamichi J. Miyama, Shin-ichi Sasa, "Shear-induced criticality near a liquid-solid transition of colloidal suspensions" Phys. Rev. E 83, 020401(R) /1-4(2011), 査読有, DOI: 10.1103/PhysRevE.83.020401 Takahiro Nemoto and Shin-ichi Sasa, "Variational formula for experimental determination of high-order correlations of current

fluctuations in driven systems" Phys. Rev. E 83, 030105(R) /1-4(2011) 査読有, DOI: 10.1103/PhysRevE.83.030105 Teruhisa S. Komatsu, Naoko Nakagawa, Shin-ichi Sasa, and Hal Tasaki, "Entropy and Nonlinear Nonequilibrium Thermodynamic Relation for Heat Conducting Steady States", 査読有, J. Stat. Phys.142/127-153(2011) DOI:10.1007/s10955-010-0095-5 Shio Inagaki, Michio Otuski, and Shin-ichi Sasa, "Protocol dependence of mechanical properties in granular systems" The European Physical Journal E 34: 124/1-6 (2011), 査読有, DOI:10.1140/epje/i2011-11124-6 Shin-ichi Sasa, "Thermodynamic transition associated with irregularly ordered ground states in a lattice gas model", 査読有, J. Phys. A: Math. Theor. 43, 465002 /1-13(2010) DOI:10.1088/1751-8113/43/46/465002
 21 K.Hukushima and S.Sasa, An extended ensemble Monte Carlo study of a lattice glass model, J.Phys : Conf.Ser., 査読有, Vol.233, 2010, 012004/1-10, doi:10.1088/1742-6596/233/1/012004 10.120

〔学会発表〕(計 31 件)

- 1) 佐々真一、非平衡ゆらぎの普遍性と特異性、日本物理学会第 69 回年次大会、東海大学、(招待講演) 2014 年 3 月 28 日
- 2) 高邊賢史、福島孝治、線形緩和した組み合わせ最適化問題のレプリカ解析、日本物理学会年次大会、2014 年 3 月 28 日、神奈川県平塚市、東海大学湘南キャンパス
- 3) 高橋昂、福島孝治、有限次元スピングラス模型の示す 1 段階レプリカ対称性の破れ、日本物理学会年次大会、2014 年 3 月 28 日、神奈川県平塚市、東海大学湘南キャンパス
- 4) 西川宜彦、福島孝治、2 成分 Biroli-Mezard 模型の示す転移の性質、日本物理学会年次大会、2014 年 3 月 28 日、神奈川県平塚市、東海大学湘南キャンパス
- 5) 佐々真一、ハミルトン方程式から流体方程式へ、日本物理学会第 69 回年次大会、

- 東海大学、2014年3月27日
- 6) 福島孝治、有限次元スピングラス模型のレプリカ対称性の破れ、「京」セミナー、2014年1月21日、兵庫県神戸市、理化学研究所計算科学研究機構
 - 7) 高邊賢史、福島孝治、最適化問題に対する線形計画法の典型的性能評価、日本物理学会秋季大会、2013年9月27日、徳島県徳島市、徳島大学常三島キャンパス
 - 8) 高橋昂、福島孝治、3次元ポツングラス模型のスピングラス相の性質、日本物理学会秋季大会、2013年9月27日、徳島県徳島市、徳島大学常三島キャンパス
 - 9) S. Sasa, Steady State Thermodynamics 統計物理に関する国際会議 XXV、ソール国立大学(ソール、韓国) (招待講演)、2013年7月23日
 - 10) S. Sasa, Turbulent crystal and idealized glass、粉体とガラスの物理、京都大学基礎物理学研究所(京都、日本) (招待講演) 2013年7月19日
 - 11) 福島孝治、RKKY イジングスピングラスの相転移、日本物理学会年次大会、2013年3月27日、広島県東広島市、広島大学東広島キャンパス
 - 12) 高邊賢史、福島孝治、線形計画法の構成解に関する統計力学的研究、日本物理学会年次大会、2013年3月27日、広島県東広島市、広島大学東広島キャンパス
 - 13) 酒井佑士、福島孝治、ねじれ詳細つり合い条件を満たすマルコフ連鎖モンテカルロ法、日本物理学会年次大会、2013年3月27日、広島県東広島市、広島大学東広島キャンパス
 - 14) S. Sasa, Stochastic Thermodynamics of Adiabatic pistons、「確率的熱力学」(招待講演) ノルディック理論物理研究所(ストックホルム、スエーデン) 2013年3月9日
 - 15) S. Sasa, Turbulent crystal German-Japan workshop "Soft matter in non-equilibrium"、2013年2月16日、招待講演、(京都)
 - 16) 佐々真一、ピュアガラス、日本物理学会横浜国立大学、2012年9月20日
 - 17) 高邊賢史、福島孝治、一様ランダムハイパーグラフ上のパーテックスカバー問題、日本物理学会秋季大会、2012年9月18日、神奈川県横浜市、横浜国立大学
 - 18) 酒井佑士、福島孝治 詳細つり合い条件を満たさないマルコフ連鎖モンテカルロ法、日本物理学会秋季大会、2012年9月18日、神奈川県横浜市、横浜国立大学
 - 19) S. Sasa, Response Measurement of rare Fluctuations 「非平衡過程と揺動散逸定理に関する会議」(招待講演) 2012年9月10日、(カプリ島、イタリア)
 - 20) S. Sasa, Response Measurement of rare Fluctuations、「非平衡揺動応答関係に関する会議」(招待講演)(ジリオ島、イタリア) 2012年6月8日
 - 21) 千葉康一、福島孝治、パーテックスカバー問題の解の構造、日本物理学会、2012年3月25日、兵庫県西宮市、関西学院大学
 - 22) 佐々真一、不規則充填問題のガラス転移II、日本物理学会、関西学院大学、2012年3月25日
 - 23) S. Sasa, Response Measurement of non-typical Fluctuations、「統計力学に関する東アジアジョイントセミナー」(招待講演)(蘇州、中国)、2012年3月18日
 - 24) S. Sasa, Constructive approach to Glass in finite dimensions December 14, 2011 Unifying concepts in glass physics V, Paris, France, (招待講演)
 - 25) K.Hukushima, Entropy-driven transition in a simple hard-rod system, 日仏セミナー、2011年12月8日、フランス・パリ、ポアンカレ研究所
 - 26) S. Sasa, Playing with hard constraint models in finite dimensions December 8, Jamming, Glasses and Phase transitions, Paris, France, (招待講演)
 - 27) S. Sasa, Thermodynamic formula for the cumulant generating function of time-averaged current 「非平衡統計力学における基礎と応用」(招待講演) ノルディック理論物理研究所(ストックホルム、スエーデン) 2011年9月28日
 - 28) 佐々木志剛、福島孝治、ランダムグラフ上の格子ガラス模型におけるエルゴード性の破れ、日本物理学会、2010年9月26日、大阪府堺市、大阪府立大学
 - 29) S. Sasa, "Physics of high-order correlation of current fluctuations", (招待講演) Dynamics of the Glass/Jamming Transition, Pusan, Korea, 2010年9月9日
 - 30) S. Sasa, "Thermodynamic transition associated with irregularly ordered ground states in a lattice gas model", Nonequilibrium Statistical Physics of Complex Systems, Seoul, Korea, 2010年7月26日
 - 31) K.Hukushima, S.Sasa, Thermodynamic phase transition in finite-dimensional lattice glass models, 統計物理国際会議 24, 2010年7月19日、Cairns, Australia

〔図書〕(計 1 件)

現代物理学の論理と方法
編集 米谷民明、著者米谷民明他
(放送大学教育振興会NHK出版,2013)
総ページ数 292p
(うち、127p ~ 160p まで分担)

〔その他〕
ホームページ等

6. 研究組織

(1)研究代表者

佐々真一 (SASA, Shin-ichi)
京都大学・大学院理学研究科・教授
研究者番号：30235238

(2)研究分担者

福島孝治 (HUKUSHIMA, Koji)
東京大学・大学院総合文化研究科・准教授
研究者番号：80282606