

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 15 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2012～2014

課題番号：24540403

研究課題名(和文)アモルファス固体における弾性のレプリカ理論

研究課題名(英文)Replica theory of the rigidity of amorphous solids

研究代表者

吉野 元(Hajime, Yoshino)

大阪大学・学内共同利用施設等・准教授

研究者番号：50335337

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：ランダム系の統計力学で発展したレプリカ法と、液体の密度汎関数理論の融合したクローン液体論の方法により、アモルファス固体の力学特性に関する第一原理的な理論を構築した。まずケージ展開の方法で、3次元ソフトコアポテンシャル系の剛性率の解析を行い、シミュレーションと定量的に良く一致する結果を得た。また剛体球ポテンシャル系において、無限大次元で厳密な解析を行い、動的ガラス転移およびジャミング転移にともなう剛性率の臨界的振る舞いを明らかにした。またstate followingの方法で、ガラス準安定状態の応力-ひずみ曲線を求める方法を開発し、剛性率のみならず降伏応力まで解析することに成功した。

研究成果の概要(英文)：We developed a set of first principle methods to analyze theoretically the mechanical properties of amorphous solids based on the so called cloned liquid method, which combines the replica method developed in the statistical mechanical studies of disordered systems and the density functional theory of liquids. We first applied it to the 3-dimensional soft-core potential system and obtained the shear-modulus which compares very well with the result of molecular dynamic simulations. Then we applied it to the hard-core potential system in the large-dimensional limit. We unveiled the critical properties of the shear-modulus in the dynamical glass transition point and the jamming transition point by the exact computation. Furthermore we developed a scheme to compute the stress-strain curve of glassy metastable states under shear using the state following method, which allowed us to obtain successfully not only the shear-modulus but also the yield stress.

研究分野：統計力学・物性基礎論

キーワード：アモルファス固体 ガラス転移 ジャミング転移 弾性 液体論 レプリカ法

1. 研究開始当初の背景

ガラスは、液体のように乱れた構造をもちながら、結晶と同じように剛性、すなわち有限のシアモジュラスを持つという意味で固体である。実験室の時間スケールでガラス化する温度 T_g よりも高温の過冷却液体状態においても、いわゆる構造緩和時間に比べて短い時間スケールでは、系は固体的に振る舞う。すなわち、各分子は、周囲の分子に囲まれて、ケージ（籠）と呼ばれるある一定の範囲内での振動的な運動を行う。この時間領域で、系は実効的な剛性率を持つ。一方、より長時間スケールでは、ケージ構造そのものが組み替わり、粘性を示す。その結果、過冷却液体・構造ガラスは、興味深い様々なレオロジー特性（粘弾性特性）を示す。

研究代表者は、準備研究において、過冷却液体・構造ガラスの実効的な剛性率をクローン液体の方法 [M. Mezard and G. Parisi, Phys. Rev. Lett. **82** 747 (1999). G. Parisi and F. Zamponi, Rev. Mod. Phys. **82**, 789 (2010).] を用いて微視的に計算する手法を考案していた。[H. Yoshino and M. Mezard, Phys. Rev. Lett. **105**, 015504 (2010)] これを本格的に発展させ、ジャミング系を含む、様々なアモルファス固体における力学物性の理論解析を展開することが急務となっていた。

2. 研究の目的

アモルファス固体の力学特性、特に弾性係数を第一原理的に求める理論の構築と具体的なモデル計算を行うことが本研究の目的である。液体論に基づいた「液体」の情報から、剛性（シアモジュラス）という、固体の情報を引き出すということは、一見非常に奇異にも見えるが、レプリカ法の力を最大限に引き出す試みである。本研究では、ソフトコアポテンシャル系、剛体球ポテンシャル系など、いくつかの系で具体的なモデル計算を行う。これを数値シミュレーションとの比較によって検証し、必要な理論の拡張、改良を行い、第一原理的計算手法としての信頼性、汎用性を高める。

3. 研究の方法

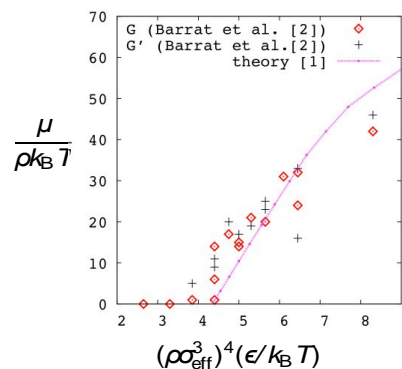
(1) 準備研究 [H. Yoshino and M. Mezard, Phys. Rev. Lett. **105**, 015504 (2010)] のアイデアを基盤に、より汎用性のある一般的方法な理論の構築を行い、また近似の精度を上げる改良を行った。これに基づき、3次元ソフトコアポテンシャル系におけるモデル計算を行った。

(2) 剛体球ポテンシャル系のような、接触型ポテンシャルは、準備研究の段階では取り扱いが大変困難だと思われた。しかし、無限大次元系では、解析が容易になる期待があっ

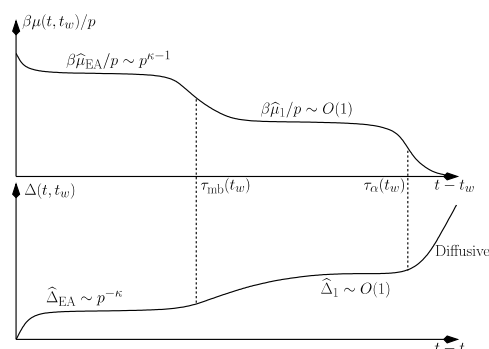
た。研究協力者の Zamponi 氏らが無限大次元極限での剛体球系において、クローン液体論を展開していた。その知見をヒントに、無限大次元極限での剛体球系の剛性率、降伏応力の解析手法の開発、また具体的な解析を行った。

4. 研究成果

(1) クローン液体の方法で求めた、ソフトコアポテンシャル系の過冷却液体・ガラスにおける実効的なシアモジュラス [Hajime Yoshino, J. Chem. Phys. **136**, 214108 (2012).] と分子動力学シミュレーション (J. L. Barrat, J. -N. Roux and J. -P. Hansen and M. L. Klein, Europhys. Lett **7** (1988) 707) との比較を下に示す。図に見られる剛性率の強いオンド依存性は、準安定状態内での非アフィン変形の効果による。アモルファス固体の場合、ヒアフィン変形の効果を無視してしまうと絶対零度においても相当過剰に（この系では 100% 近く）過剰に剛性率を見積もってしまう。下図のように理論とシミュレーションの良い一致が見られ、この理論の妥当性を示唆している。このような、力学特性に関する第一原理的な理論手法が開発されたことは、重要な意義を持つ。今後、固体物理からソフトマターまでまたがる広範な物質系の物性研究、物質設計で役立つと期待される。

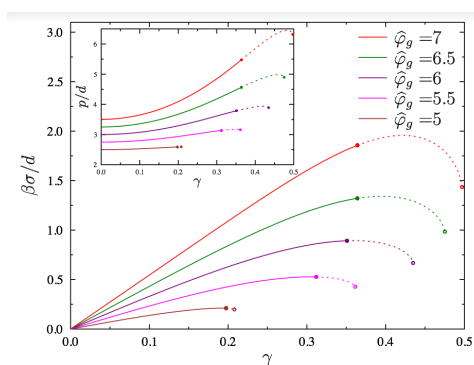


(2) 平均場理論が厳密になる無限大次元極限において、剛体球ポテンシャル系での剛性率を解析した。特に、(i) 動的ガラス転移に伴う不連続な剛性率の飛び、(ii) ジャミング転移に伴うべき的振る舞いを捉えることに



成功した。[Hajime Yoshino and Francesco Zamponi, Physical Review E 90, 022302 (2014).]これは、今後のアモルファス固体の力学物性に関する研究の基礎になる成果である。さらに興味深いことに、ジャミング転移密度近傍の高密度領域では、連続的なレプリカ対称性の破れを反映して、剛性率も階層構造を持つ。これは上図のように、応力緩和の様子に反映されると期待される。実際、応力緩和のシミュレーションによる検証を行い、この予想を強く支持する結果を得た。[Daijyu Nakayama, Satoshi Okamura and Hajime Yoshino, 投稿準備中]

(3) 上記の剛体球ポテンシャル系において、state following の方法を実装することにより、任意のガラス準安定状態にシアをかけ、その断熱変化を追跡する手法を開発した。[Corrado Rainone, Pierfrancesco Urbani, Hajime Yoshino and Francesco Zamponi, Phys. Rev. Lett. 114, 015701 (2015).] その結果、図に示すようないわゆる、「歪み-応力曲線」を第一原理的に計算することに成功した。その結果、剛性率のみならず、降伏応力まで捉えることに成功した。またシアに伴う、圧力の上昇(dilatancy 効果)も捉えることに成功した。いうまでもなく、現実のガラス転移は、熱平衡状態ではなく、準安定状態にトラップされる現象である。この手法は、今後、様々なガラス系の力学物性の研究に応用できると期待される。



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 4 件)

(1) Hajime Yoshino, "Replica Theory of the rigidity of structural glasses", J. Chem. Phys. **136**, 214108 (2012). 査読有
DOI:<http://dx.doi.org/10.1063/1.4722343>

(2) Hajime Yoshino, "Rigidity of glasses and jamming systems at low

temperatures", AIP Conference proceedings 1518, 244-251 (2013). 査読有
DOI:<http://dx.doi.org/10.1063/1.4794575>

(2) Hajime Yoshino and Francesco Zamponi, "Shear modulus of glasses: Results from the full replica-symmetry breaking soluteon", Physical Review E 90, 022302 (2014). 査読有
DOI:<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.90.022302>

(3) Corrado Rainone, Pierfrancesco Urbani, Hajime Yoshino and Francesco Zamponi, Phys. Rev. Lett. 114, 015701 (2015). 査読有
DOI:<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.015701>

[学会発表](計 22 件)

Hajime Yoshino, "Statistical mechanics of glasses: replica approaches to handle metastable states", Kyoto Winter School for Statistical Mechanics, Feb. 10-11, 2015

Hajime Yoshino, "Field cooled vs. zero-field cooled shear-modulus in the glassy phase", Mini-workshop on the physics of amorphous solids, IIS Univ. of Tokyo, March 20, 2015.

Hajime Yoshino, "On the elasticity of colloidal glasses: replica theory in the large-dimensional limit", International Conference "Physics of Structural and Dynamical Hierarchy in Soft Matter", IIS Univ. of Tokyo, March 17, 2014.

Hajime Yoshino, "Hierarchy of rigidities of hard-sphere glasses", Unifying concepts in glass physics VI, Aspen, Colorado, U.S.A., Feb. 5, 2015.

Hajime Yoshino, (invited) "Twisting and breaking glasses: a replica approach", Critical Phenomena in Random and COmplex Systems, Villa Orlandi, Anacapri, Capri, Italy, Sept 12, 2014.

中山大樹、吉野 元、「有限温度ジャミング系における非ガウス揺らぎ」日本物理学会年次大会(早稲田大学)、2015年3月22日

Hajime Yoshino and Francesco Zamponi, "Hard-sphere glasses under shear around the glass and jamming transitions: an exact analysis in the large-d limit", 日本物理学会 年次大会(早稲田大学)、2014年3月23日

Hajime Yoshino (invited) "Rigidity of structural glasses and jamming systems probed by twisting replicated liquids", 7th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Barcelona, Spain, August 22, 2013.

Hajime Yoshino "On the rigidity of jamming systems at finite temperatures" Physics of glassy and granular materials, Yukawa Inst. Kyoto Univ., July 17, 2013.

吉野 元:日本物理学会 2013 年秋季大会 " ジャミング転移点近傍における 1+連続レプリカ対称性の破れ " 2013 年 09 月 26 日、徳島大学

吉野 元:科研費新学術領域「ゆらぎと構造の協奏」第一回領域研究会 " 有限温度ジャミング系の異常な熱揺らぎと有効温度 " 2013 年 12 月 26 日、KKR ホテル熱海

吉野 元、Francesco Zamponi:日本物理学会第 69 回年次大会 " クローン液体論によるガラス準安定状態の温度・圧力変化の追跡 " 2014 年 03 月 27 日、東海大学湘南 キャンパス

吉野 元、「剛体球ガラスの力学特性：高次元極限でのレプリカ理論」 第 4 回ソフトマター研究会 名古屋大学 2014 年 12 月 7 日.

吉野 元、「剛体球ガラスにおける非線形力学応答のレプリカ理論」 鳥取大学非線形研究会 2014 年 12 月 18 日.

Hajime Yoshino, (invited) "Rigidity of jamming systems at low temperatures" Recent Developments of Studies on Phase Transitions, Univ. Tokyo, June 19, 2012.

Hajime Yoshino, "Rigidity of glasses and jamming systems at low temperatures". 4th International Meeting of Slow Dynamics in Complex Systems, Sakura Hall, Tohoku Univ., Dec. 6, 2012.

Hajime Yoshino, "Rigidity of jamming systems at finite temperatures: a cloned liquid computation and MD simulations", Workshop on the open problems of the glass transition and related topics, Nishijin Plaza, Kyushu Univ., Dec. 9 2012.

Hajime Yoshino, "Strong reduction of the rigidity of repulsive contact systems at vanishingly low temperatures", American Physical Society March meeting, Baltimore,

U.S.A. , March 21, 2013.

吉野 元: 基研研究会 2012 非平衡系の物理・その普遍的理解を目指して " 有限温度ジャミング系の剛性の異常 ", 2012 年 8 月 2 日、京都大学基礎物理学研究所

吉野 元: 日本物理学会 2012 年秋季大会 " 接触力系のガラス・ジャミング相における剛性の異常 " 2012 年 9 月 20 日、横浜国立大学

吉野 元:(招待講演)物性研究所 計算物質科学研究センター第 2 回シンポジウム " アモルファス固体の力学物性:レプリカ法+密度汎関数法による第一原理的計算 ", 2012 年 10 月 23 日、東京大学 物性研究所

吉野 元: 日本物理学会第 68 回年次大会 " 有限温度ジャミング系における塑性的な集団励起と長時間緩和 ", 2013 年 3 月 26 日、広島大学

〔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:
出願年月日:
国内外の別:

取得状況 (計 0 件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
出願年月日:
取得年月日:
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 : 5 0 3 3 5 3 3 7

(2) 研究分担者

()

研究者番号 :

(3)連携研究者

Francesco Zamponi

ENS, Paris • Chargé de Recherche CNRS

研究者番号：

(4)研究協力者

岡村 諭 (OKAMURA, Satoshi)

大阪大学・大学院理学研究科・修士課程

中山 大樹 (NAKAYAMA, Daijyu)

大阪大学・大学院理学研究科・修士課程

Corrado Rainone

(Department of Physics, Sapienza

Universita di Roma)

Pierfrancesco Urbani

(IPhT, CEA Saclay, France)