

学位申請論文公開講演会

日時: 2017年 2月1日 (水) 13:30

申請者: 池田 晴國 (R研)

場所: 理学館 506室

題目: **Thermodynamic theory of the glass transition of binary mixtures of disparate size ratio**

(二成分系のサイズ比が大きく離れた系におけるガラス転移の熱力学理論)

主論文の要旨

過冷却液体の温度を下げると、粘性係数や密度相関関数の緩和時間が発散的に増大し、遂には分子運動が凍結する。これがガラス転移と呼ばれる現象である。ガラス転移の大きな特徴は、転移点近傍で分子の動的な振舞いが劇的に変化するにも関わらず、静的な物理量はほとんど変化しない点である。この意味でガラス転移は、対称性の破れを伴う通常の相転移とは大きく異なる。ガラス転移を説明する理論は数多く提案されてきたが、その中でも成功を収めているのが、スピングラスにおけるレプリカ理論を過冷却液体に拡張した、レプリカ液体論である。この理論は、一段階レプリカ対称性の破れ(1RSB: One-step replica symmetric breaking)の仮定に基づき、ガラス転移を熱力学的相転移として記述する。レプリカ液体論は、単成分系や、異なる粒子間のサイズ比が1に近い二成分系の過冷却液体に対する観測結果を、ほぼ定量的に説明する。しかし、粒子間のサイズ比が1から大きく異なる場合には、1RSBの仮定が破れる可能性がある。実際に、サイズが大きく異なる二種類の粒子からなるコロイド系の実験では、それぞれの成分のガラス転移点が発見されているが、現在の理論ではこれを説明できない。申請者は、1RSBの仮定を見直すことによって、この問題の解決を試みた。

申請者は、1RSBより高次の二段階レプリカ対称性の破れ(2RSB)の仮定のもとに、多成分系のレプリカ液体論を定式化し直した。多成分の粒子系にレプリカ理論を適用しようとした場合、区別できない粒子の場合の数を計算することは自明ではなく、ギブス因子のエントロピーへの寄与を正確に計算することは困難である。申請者は、液体論で良く知られている森田・広池理論をレプリカ液体論に適用することで、この問題を回避した。その上で、解析的な取り扱いが可能な高次元極限の場合に、ガラス転移点を厳密に計算した。以上の結果から得られたガラス転移の相図は、実験の結果と定性的に一致しており、二段階レプリカ対称性の破れによって大小粒子のガラス転移点の分離が説明されることを示した。