Binary Lattice Gas model の ガラス転移によって発生する不可逆性

東京大学 総合文化研究科　松尾美希 [1]

基研研究会「摩擦の物理」の各講演タイトルは一般的名称を用いているのが多い。そんななか、私の講演タイトルには特定のモデル名が入っているため、一般性の低いオタク的なものであるように見受けられるかもしれない。事実、講演内容も Binary Lattice Gas という一つのモデルに関するものでしかないため、そのような感想はしごく真っ当である。しかし私は次のようなことを信じている。それは、このモデルで得られる巨視的性質の大部分は他のガラス系一般に関しても備わっているものだということだ。ガラス状態とはいろいろな系で同じように生成される、すなわち系の詳細によらないユニバーサルな状態である。(このことの正しさは直観レベルでしかわかってないが、信じている研究者は多い [1]。) よって Binary Lattice Gas の研究によってガラス系というユニバーサリティクラス一般の性質について述べるとこができるのではないか。もちろんこの主張の当否はこれからの知見の蓄積によってしか判断できない。よって現時点では単なる信念でしかないが、この文章をお読みになる方々は一度私とともにこの信念を共有し、ガラス一般を論じていると思っていただきたい。そして読み終った後にはこの信念を保つも捨てるも皆様の自由である。

さて私はガラス状態の性質に普遍構造が存在するかを問いたい。一方、系の普遍的性質を抜きすことに成功したおなじみの理論に熱力学がある。この理論体系は外部からの操作によって観測できる量のみに着目し、その量を通して物質の種類や気体・液体などの相によらないユニバーサルな法則を導き出してきた。我々はこの手法を参考にすることにしよう。すなわちガラス状態に対してピストンで押すなどの操作を行ない、その操作によって観測される量の挙動に普遍的性質はないか探ることにする。使用するモデルは以下の Binary Lattice Gas model である [2]。

$$\mathcal{H}_0 = -J^{\mathrm{AA}}\sum_{\langle ij\rangle} n_i^{\mathrm{A}} n_j^{\mathrm{A}} - J^{\mathrm{BB}}\sum_{\langle ij\rangle} n_i^{\mathrm{B}} n_j^{\mathrm{B}} - J^{\mathrm{AB}}\sum_{\langle ij\rangle} n_i^{\mathrm{A}} n_j^{\mathrm{B}} \tag{1}$$

$$n_i^A = \{0,1\} \quad , \quad n_i^B = \{0,1\}$$

$$\sum n_i^A = N^A \quad , \quad \sum n_i^B = N^B$$

このモデルは粒子が一種類の Lattice Gas を粒子種が A、B の 2 種類にあるように拡張したものであり、粒子種の区別は相互作用大きさの違いにより区別している。以後 2 次元で話を進める。

[1] E-mail: miki@jiro.c.u-tokyo.ac.jp

粒子の重なりを許さず、また粒子同士の直接交換を許さないという条件のもとで、このモデルをKawasaki dynamicsで動かす [3]。すると十分低温のときにある臨界濃度を越えるとガラス転移を起こす [2]。本来ガラス転移を起すことをここで示すべきであるが、簡便のため今回は既知のものとしたい。さてこのモデルに操作の概念を加えたい。そこでピストンを記述するポテンシャル V_a を裸のHamiltonianに加える、

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \sum_i V_a(i)(n_i^A + n_i^B)。 \tag{2}$$

ここでピストンポテンシャルの形は次のように片側2次関数で表わすことにする、

$$V_a(i) = \begin{cases} K\,(i_x - a)^2 & (i_x > a) \\ 0 & (i_x \le a)。 \end{cases} \tag{3}$$

また、ポテンシャル境界の位置 a は外部から操作できるパラメタである。初期状態として希薄気体状態に粒子濃度をセットしておき、そこからピストンポテシャルで押すと、臨界濃度がある値を越えた所でガラス転移を起こし、系はガラス化する。このガラス化した状態からさらにピストンを押し引きすることによって、ガラス状態の仕事を通した巨視的性質を観測したい。具体的に

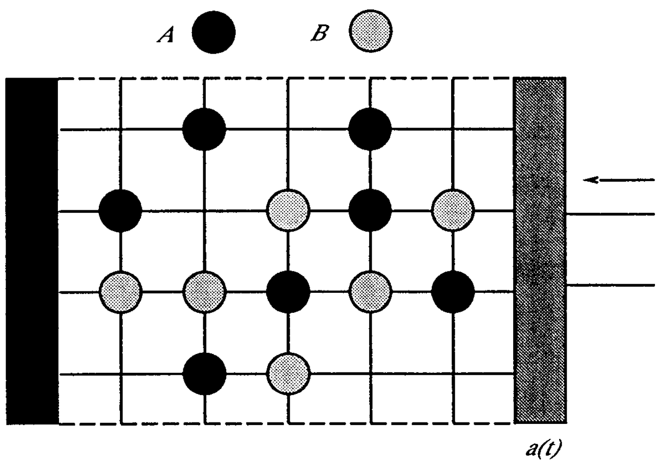

図 1: Binary Lattice Gasに対する操作

は操作プロトコルを $a = L$ から $a = L_0$ まで単調減少させ（つまり圧縮し）、再び $a = L$ まで単調に戻してやるように選び、その時に行った仕事を求める。ここで系の初期状態が気体状態にあるように L は十分大きくとり、圧縮中に系がガラス化を起すように L_0 は十分小さくとる。系に対して行う仕事は

$$W = \int da \sum_i \frac{\partial V_a(i)}{\partial a}(n_i^A + n_i^B) \tag{4}$$

で定義される [4]。もし系が熱力学系ならばこの操作は可逆であり、$W = 0$ になるはずであるが、ガラス状態のような非平衡状態に関して行った場合、系に与える仕事はどのようなアウトプットを示すであろうか。これを実際に数値的にもとめた結果を、操作速度を変数として図に示してお

く。ここで参照のために粒子種がAの一種類で濃度は同じであるような系に関する仕事も同図にプロットした。

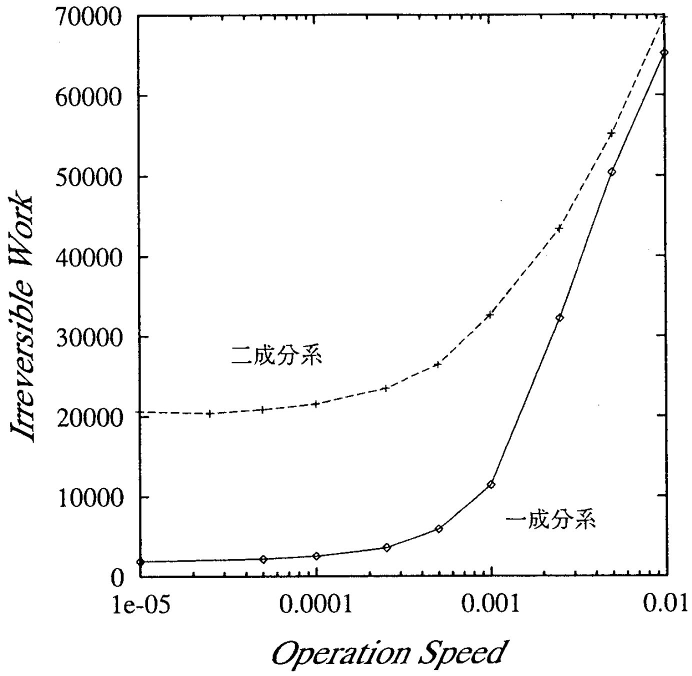

図 2: 不可逆仕事の操作速度依存性

この図の二成分系のプロットを見てまず第一に認識されることは、操作速度を十分小さくとれば、仕事はある値に収束することである。ガラス系における「準静的」操作と呼べるものが存在すると言って良い。しかし平衡熱力学の準静的操作の概念と大きく異なり、ゼロ値に収束しない。それが第二に認識されることで、「準静的」操作でも操作は可逆にならず、不可逆な散逸を伴う。(一成分系でも同様な兆候が見られるが、これは格子性が効いているだけであり、二成分系の不可逆仕事とは起源が全く異なる。それに起因して、二成分系の不可逆仕事は一成分系よりも圧倒的に大きい。) このようにガラス状態は操作論的には「準静的」操作を行っても可逆でない系であると特徴づけることができる。「準静的」でも不可逆散逸を伴うという性質は、今研究会の主題である摩擦にも付随する性質である。摩擦の研究にガラスの研究がどのように関わり、そしてお互いにどのような寄与ができるかは未知であるが、このように異なる分野間でユニバーサルな性質があらわれることを認識するのは自然科学者としてこの上ない喜びではないか。

注) 文章中での「準静的」は観測時間のスケールで十分ゆっくりとしているという意味で用い、準静的は平衡熱力学で標準的に使用される意味で用いている。

参考文献

[1] C. A. Angel, Science, vol. 267 (1995) 1924, etc.

[2] M. Matsuo and S. Sasa, in preparation.

[3] K. Binder, Monte Carlo Methods in Statistical Physics, Springer-Verlag, Tokyo, (1986).

[4] K. Sekimoto, J. Phys. Soc. Jpn. 66 (1997) 1234.