論文の内容の要旨

論文題目 ガラス熱力学 (Thermodynamics of Glass)

氏名 松尾美希

外界からの情報を記憶し、自立的なを発展し、そして多様な構造を生み出す。そのような性質を持つシステムは、非線形非平衡の状況下において普遍的で自然な動力学過程である。このような動力学過程を生み出す基本法則、これを探求するにはどうしたらよいのであろうか。本論における著者独自の信念は、この問題に挑むためのヒントが Glass にある、と考えていることだ。なぜならば Glass はその最低限必要な要素であると思われる『記憶』および『多様性』をその性質として保持しているからだ。おそらく、Glass はこの二つの性質をもつ系のなかで、最も単純な系である。そのことは、これまで主に無機的世界の記述に成功してきた物理学を、重い腰を上げさせてその記述に向けて駆り立てようとする力強い要素の一つである。無論有機的世界の記述を視野に入れるべきことは当然であるが、そのまず一歩として Glass を探求することは、地道な進歩を歩むことを運命づけられている科学の為すべきことではないだろうか。それ故にこそ、本論では Glass の研究を公表し、議論する。特に我々は本論では、Glass 状態の巨視的法則、すなわち Glass 熱力学を形式化できるかを問い、Glass とは何かについての形式的理解を目指す。

本論で思考のてこに用いるのは、操作論的思考法であり、単純な rugged energy landscape(REL) 描像への帰依からの脱却である。REL 描像は、非常にシンプルでわかりやすい Glass 描像だ。これが重要な観点を提供するときがあることは確かである。しかしこの描像は操作論的思考法とは直接にはつながっておらず、操作論的な意味での Glass とは何かという問いには答えられない。操作論的な意味での Glass を考える上でのキーワードは、安定性概念による状態の区別である。REL 描像では、過冷却液体と Glass との間に安定性概念からの区別は存在しない。我々が為すべきことの一つは、Glass の安定性を表現する新しい安定性概念を構成することである。

我々はまず、Glass 状態の熱力学的性質を問題にする。Glass の操作論的意味での重要な性質をまず取り出そうというのだ。Glass 状態を保有するモデルを数値的に動かし、そこに巨視的操作を加えることによって、Glass 状態の熱力学的性質を実測する。その数値計算の対象としてまず binary lattice gas model を導入する。

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

まずこのモデルが Glass 転移を経験することをモンテカルロシュミレーションによってしめす。次にその熱力学的性質を調べために、ピストンをあらわすポテンシャルをモデルに導入する。

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

で与えられる。特に我々はピストンを次の2次関数の形で表現する:

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

このピストンによりGlassを圧縮および膨張させる循環操作を行う。この操作に必要な仕事をGlass状態にある系に対して測ると、準静的極限においても有限の値を持つことがしめされる。すなわちGlass状態では、平衡熱力学における要請の一つである準静的操作の可逆性が破綻し、準静的操作に対しても不可逆仕事が必要であることをしめしている。これはRheologyの言葉で言えば、Glass転移によって系に降伏応力が発生することを意味する。

次に熱力学をしてゆらぎの理論からの概念分析によって、この不可逆性の巨視的起源を知る上で、揺動散逸関係が重要な鍵となっていることがわかる。よってGlassにおけるゆらぎと応答の関係を考察する。第2章で導入したbinary lattice gas modelを再び用いて、Glass状態においてゆらぎと応答がどのような関係になっているか数値的に調べる。ここにおいて我々は平衡状態ならば成立する揺動散逸関係が、Glass状態において破綻していることを見る。この揺動散逸関係の破綻が、Glass状態における準静的極限でも無視できない不可逆性に結びつけられる。揺動散逸関係の破綻は、系を構成する粒子の間の集団運動によって引き起こされていることを推察する。そしてさらに考察を重ねることによって、Glassの応答には2つのplateau scaleが存在が示唆され、Glass現象論を構成できる可能性が見出される。

このようなGlassの重要な性質が見出されたわけだが、それらすべてマクロに閉じた形で記述できる可能性を示唆する方法が存在する。次にはそれを概観しその適切な解釈方法を提供する。理論解析にとって前章までで用いてきた離散モデルは非常に扱いにくいので、ここでは性質を共有していると思われる連続系Glassモデルを導入する。このモデルを古典確率動力学を経路積分法の考え方から定式化したMartin、Siggia、RoseおよびDeDominicis、Janssenの系統的方法を用いて解析する。この適用はSompolinsky-Zippeliusに習う。それによって得られた巨視的方程式をいかに解釈すべきか考え、前章まで得られたGlassの重要な性質を説明することを試みる。そしてそこからGlass性によって生み出される新しい概念を汲み取る。例えば、非線形記憶力学系としてのGlassが見出され、Glassを安定化させている要因として記憶に誘起された安定性(Memory Induced Stability: MIS)が見出され、Glass状態を記述する分岐として疑似分岐が見出され、奴隷化原理へのGlass的反乱が見出される。

そして最後に、Glass性の思考応用として、粉体、アルゴリズム複雑性、Glass普遍性、初期化学進化過程について考える。