

ガラスと通常の固体の本質的な違いを発見

—コンピュータシミュレーションによってガラスの特異な振動特性を解明—

1. 発表者：

水野 英如（東京大学大学院総合文化研究科 助教）

池田 昌司（東京大学大学院総合文化研究科 准教授）

芝 隼人（東北大学金属材料研究所 特任助教）

2. 発表のポイント：

◆ガラスに固有な分子振動のパターンを大規模コンピュータシミュレーションによって解析し、ガラスと通常の固体の振動特性が本質的に異なっていることを発見した。

◆固体に固有な分子振動は音波であり、音波はデバイ則と呼ばれる法則に従う。この常識に反し、ガラスには音波とは全く異なる局在振動があり、それが新しい法則に従うことを発見した。

◆今回の発見は、長年論争となっていた、ガラスの振動特性の問題に終止符を打った。また、新しいガラス材料の開発への足掛かりになることが期待される。

3. 発表概要：

東京大学大学院総合文化研究科の水野英如助教、池田昌司准教授、および東北大学金属材料研究所の芝隼人特任助教は、ガラス（注1、図1左）と通常の固体では振動特性が本質的に異なることを発見しました。

固体を叩くと音がでます。これは、固体に固有な分子振動のパターンが音波（注2）であるためです。音波は空間的に広がった波であり、デバイ則（注3）と呼ばれる法則に従います。しかしガラスには、このデバイ則では説明できない振動パターンがあることが古くから示唆されてきましたが、それがどのようなもので、どのような法則に従うかは分かっていませんでした。

本研究は、分子レベルのコンピュータシミュレーション（注4、図1右）によって、ガラスには音波に加えて、音波とは全く異なる、空間的に局在化した振動があることを発見しました（図2）。さらに、この局在振動は、デバイ則とは異なる全く新しい法則に従うことが明らかにされました。この結果は、ガラスが通常の固体とは本質的に異なることを決定的に示すものです。

本成果は、長年論争となっていた、ガラスの振動特性の問題に終止符を打つものです。さらには、ガラスの熱的・力学的性質の基礎理解に大きなブレークスルーをもたらし、新しいガラス材料を開発する技術へと繋がるものと期待できます。

4. 発表内容：

私達の身の回りにある固体は、分子が規則的に配列したものと、不規則に配列したものに大別できます。物理学の世界では、規則的なものは結晶、不規則的なものはガラス、とそれぞれ総称されています。しかしながら、どちらのタイプの固体も触れると固いという意味では同じであるように見えます。

固体中の分子は、絶えず振動運動を行っています。この分子振動の固有なパターンは、音波として知られています。固体を叩いたときに音を感じるのは、この音波が励起されるためです。

音波は空間的に広がった平面波であり、デバイ則と呼ばれる物理法則で記述できます。さらに、固体の熱的な性質、例えば熱が伝わり易い・難しいといった性質は、音波によって支配されているため、音波のデバイ則を基盤として理解するのが標準的です。そのため、物理学における「通常の固体」という概念は、デバイ則の成立と等価であるといっても過言ではないでしょう。

しかし実は、デバイ則を完全に曖昧さなく適用できるのは、結晶だけなのです。実際に古くから、ガラスは、デバイ則に基づいたのでは説明できない熱的な性質を示すことが知られています。このことは、ガラスの分子振動には、音波とは異なる振動パターンがあることを示唆しています。ところが、ガラスに固有な分子振動がどのようなものなのか、またその振動がどのような物理法則に従うかは、これまで解明されていませんでした。

本研究では大規模なコンピュータシミュレーションを行い、ガラスに固有な振動パターンを解明することに成功しました。具体的には、分子一つ一つを扱う分子シミュレーションを行うことによって、ガラス中で分子がどのようなパターンで振動しているのかを詳細に調べました。その結果、ガラスにも、通常の固体に存在する音波が振動パターンとして存在し、かつその音波がデバイ則に従うことが分かりました。しかしながら、ガラスにはその音波に加えて、音波とは全く異なる振動パターンが存在することが明らかになりました。その振動パターンは、空間的に局在化した振動、すなわち、空間中のある一部の分子が大きく振動する一方で、他の分子はほとんど振動しない振動パターンであることが分かりました。

さらに重要なことに、この局在化した振動パターンは、デバイ則とは異なる、全く新しい法則に従うことが明らかにされました。すなわち、ガラスにはデバイ則に従う音波と、それとは別の法則に従う局在振動が混在していることが確立されたのです。この発見は、ガラスは、デバイ則で説明される通常の固体とは、本質的に異なったものであることを決定的に示しています。したがって、ガラスを通常の固体の理論で説明することはできず、デバイ則と今回発見された新しい法則とを組み合わせた理論の構築が必要不可欠であることを如実に主張しています。

古くからガラスには、音波とは異なった分子振動のパターンがあることが示唆されてきましたが、それが実際にあるのか、あるとすればどのような性質を持つのかは、長い間、解決されることのない難問題でした。今回の発見は、まさにガラスに固有な振動パターンに対する理解を確立し、長年の問題に終止符を打つことに成功しました。さらに、このような振動特性こそが、ガラスの特異な熱的性質を生み出していると考えられるため、本研究の発見は、ガラスの熱容量や熱伝導率といった熱物性を記述する理論構築へと、直接的に繋がるものです。また、ガラスはその熱的性質に留まらず、弾性や塑性といった力学的性質にも、通常の固体とは違う特異な性質を示します。こうした力学物性も、今回発見された局在振動と直接的に関係していることが予測されます。本研究で発見された、局在振動、およびそれが従う新しい法則を基盤にして、ガラスの固体物性理論の新たな展開が期待できます。

また、本研究成果は、基礎物理学的な貢献に留まることはありません。シリカガラス、金属ガラス、セラミックス、プラスチックなどに代表されるガラス材料は、私達の生活において多様な形で使われており、欠かすことができない重要な素材です。私達はガラスに囲まれて、ガラスとともに生活しているといっても過言ではありません。そのため、高性能なガラス材料、あるいは新機能をもったガラス材料の開発は、私達の生活をより良くするために必要不可欠な課題の一つであり、工学応用、あるいは材料開発の現場において活発に取り組まれています。しかしながら、ガラスの基礎的理解は結晶の理解に比べて遅れており、工学応用における理論的な指針の欠如は致命的な問題です。本研究成果、およびそこから派生するガラス物性の基礎研究は、まさにこの理論的な指針を与え得るものです。本成果が、新しいガラス材料を開発する技術へと展開されていくことが期待できます。

本成果は2017年11月1日 午前1時（日本時間）に米国科学アカデミー発行の機関誌「Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America」のオンライン版で公開されます。

なお、本研究は、科学研究費補助金・若手研究（B）（研究代表者：水野 英如）、若手研究（A）（研究代表者：池田 昌司）、および基盤研究（B）（研究代表者：宮崎 州正）の支援を受けて行われました。

5. 発表雑誌：

雑誌名：Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America

論文タイトル：Continuum limit of the vibrational properties of amorphous solids

著者： Hideyuki Mizuno*, Hayato Shiba, Atsushi Ikeda

DOI 番号：10.1073/pnas.1709015114

アブストラクト URL：<http://www.pnas.org/content/early/2017/10/30/1709015114.abstract>

6. 問い合わせ先：

東京大学大学院総合文化研究科

助教 水野 英如（みずの ひでゆき）

TEL：03-5454-4376

E-mail：hideyuki.mizuno@phys.c.u-tokyo.ac.jp

東京大学大学院総合文化研究科

准教授 池田 昌司（いけだ あつし）

TEL：03-5454-6755

E-mail：atsushi.ikeda@phys.c.u-tokyo.ac.jp

研究室 URL：<http://park.itc.u-tokyo.ac.jp/ikeda-group/index.html>

7. 用語解説：

（注1）ガラス

シリカガラス、金属ガラス、セラミックス、プラスチックなどに代表される固体。微視的にみると、分子は不規則に配列した状態で熱的に振動している。ガラスと対比される固体として、結晶がある。結晶では、分子は規則的な格子構造のまわりを熱的に振動している。結晶の理解は、ガラスに比べてはるかに進んでいる。物理学で「固体」というときには、結晶を指す場合が殆どであり、結晶ではデバイ則が曖昧さなく成立する。

（注2）音波

固体に固有な分子振動のパターン。固体では分子は絶えず熱振動を行っており、その振動のパターンが音波である。固体を叩くと音を感じるのは、固体中に音波が励起されるためである。音波は空間的に広がった平面波であり、伝搬方向と同じ方向に分子が振動する縦波と、伝搬方向と垂直な方向に振動する横波の2つのパターンがある。

（注3）デバイ則

音波が従う物理法則。固体中に存在する音波のパターンの個数を記述する。具体的には、周波数 ω の音波の数が、 ω の2乗に比例することを説明する。さらに、デバイ則を基盤にして熱容

量といった熱的な性質を記述できる。デ바이則が厳密に成り立つのは、分子が規則的に配列した結晶のみであるが、物理学ではデバイ則を基盤にして固体物性を記述するアプローチが標準的といえる。

(注4) 分子シミュレーション

物質を構成する分子一つ一つを扱うコンピュータシミュレーションの総称。物質は多数の分子から構成される。そのため、その多数の分子を一つ一つ扱い、それらの運動を運動方程式により計算することによって、物質全体としての性質を評価することができる。

8. 添付資料：

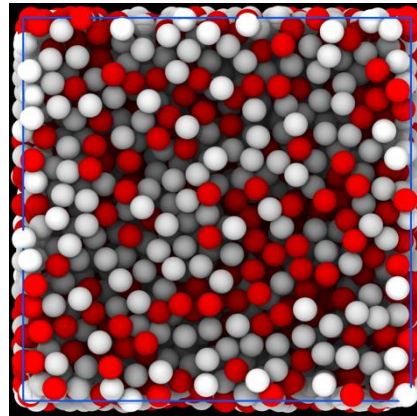


図1. 左図：日常生活でよく用いられる、ガラスで作られたコップ。右図：コンピュータシミュレーションによって計算されたガラス。分子は不規則な状態で配列する。

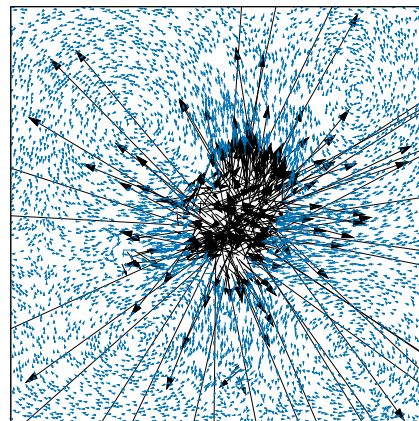
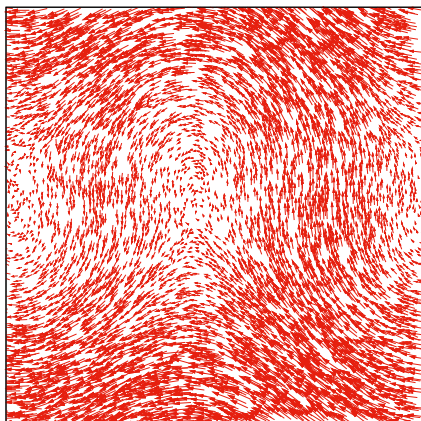


図2. コンピュータシミュレーションによって明らかとなった、ガラスに固有な分子振動のパターン。左図：音波の振動パターン。右図：局在振動のパターン。局在化している分子の振動を黒い矢印で強調して示す。