

GCOE 研究室紹介 (物性基礎論：統計動力学研究グループ)

基礎物理学研究所に統計力学部門が設立されたのは久保亮五教授が東大定年後に基研に移ってきた1980年のことであった。この部門は年限付であったために、非線形動力学部門、非平衡物理学部門と名を変えつつ存続し、2007年に至って最終的に統計動力学部門として恒久化した。この名称は文科省向け、或いは基研内部での正式名称である。しかし理学研究科では物性基礎論：統計動力学という分科名を用いているだけでなく、基研内部でも殆どの場合には物性理論分野の一部として扱われて独立したユニットであるという認識は持たれていない。ある程度物理学に馴染んだ人には研究室の名称の変遷或いは或いは歴代の主宰者である久保、蔵本、池田、関本、太田(現理学部教授)等から研究対象がほぼ想像がつくかと思う。つまり統計力学分野の中でも非平衡寄りの分野が研究対象になっている。因みに統計力学の分野で最も権威の高い Boltzmann medal を日本人で受賞したのは当講座初代教授の久保亮五と70年代の基研の物性理論の教授であった川崎恭治である。そして近年の当講座の三代の教授である関本、太田、早川と基研の助教授から現在理学研究科物理教室で教授を勤める小貫は川崎スクールの出身である。

ところで統計力学とは研究対象なのだろうか。既に教科の名前であり、研究の対象になるとは想像し難いかもしれない。これは専門家の間でも意外と深刻な問題である。実際、IUPAP(国際物理学応用物理学連合)のコミッション 3(C3)が統計力学の分野を統括しているが、近年特にプラグマティックなアメリカでその帰属意識が低下して1986年を最後にC3の国際会議 STATPHYS での北米開催がない。しかし統計力学の特に非平衡分野は森羅万象なんでもありの世界で、物理に留まらず全ての理学分野にまたがるあらゆる現象は勿論のこと社会科学迄含めて自由に研究している分野である。従って15年程前には複雑系という言葉に呑み込まれそうになったし、題材が多岐にわたるため既に統計力学でも何でもなく下手をすると自分の研究の立ち位置や将来性について不安に苛まされる分野でもある。実際、対象が多岐にわたるということは各論的にならざるを得ず原理的な発展が望みにくい。その一方でオーソドックスな非平衡分野の研究のイメージと言っても久保公式以降のそれを持ち辛いという悩みがある。それでも近年、非平衡統計力学で各論的な話から普遍的な法則を求める流れが再び盛んになり、近年面目を一新している。その成果として久保公式や Onsager の関係式を一般化したゆらぎの定理、熱力学第二法則と密接に関係して今やゆらぎの定理の一部に組み込まれた Jarzynski の等式等幾つかの興味深い恒等式が提出され、熱平衡から遠い系での久保公式の一般化等のような50年前にあったような試みも再び盛んになっている。

系が非平衡になるためのみならず平衡系への緩和するためには散逸が必要である。実際、完全なハミルトン系では時間反転対称性があるので本質的な系の時間発展がない。従って、非平衡系を研究するということは散逸がどのように現れ、それが系の挙動にどう影響を与

えるかということであると言ってよい。こうした研究のバックグラウンドの中で、当研究室では散逸非平衡系の一般論の他、粉体やナノスケールの物理、生物物理等を手掛けている。その中で幾つかの研究内容について簡単に紹介していこう。

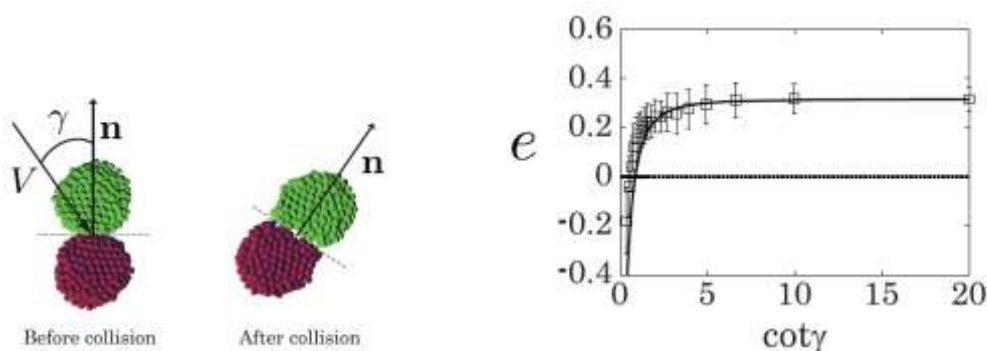


砂やゴマのような巨視的な大きさを持つ粒子の集まり粉体と呼ぶ。図の写真はゴマであるが、ゴマを特徴付けるものは何であろうか。この写真に写っているゴマ粒の数は数千から数万といったところである。従って熱力学極限とは程遠い数である。また見ての通り、粒はそれぞれ形状を保ったままお互いに離れた状態を保っている。つまり主たる相互作用は斥力相互作用である。更に自発的な運動はなく、外場によって力を加えてもその力を取り除けば速やかに減衰してしまう。このように外力がなければ静止してしまう散逸多体系であることが大きな特徴になっている。

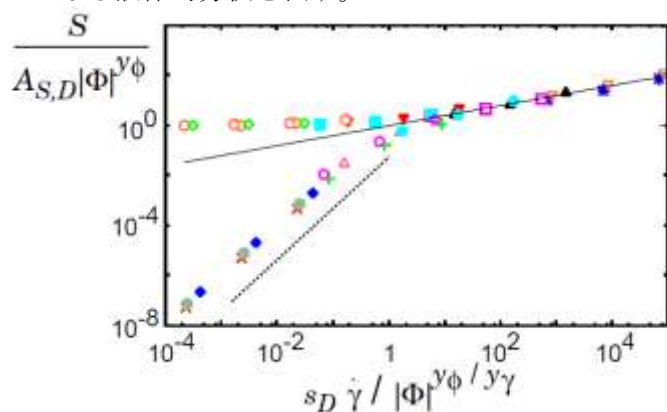
このような粉体は土木、薬学、化学工学、機械工学、地学等いたるところで応用があるばかりか、その振る舞いは固体、液体、気体とも異なった特異なものである。このような物質の物理に長年取り組み、ようやく研究成果が出始めた段階である。その顕著な成果の一つは粉体の液体論の構築であり、もう一つは液体的状態から固体的状態への転移であるジャミング転移の物理的メカニズムを明らかにしつつある点である。思ったより不思議でないこの粉体は統計力学の好個の対象であり、その理解を進めるためには間違いなく過去の学問の蓄積を総動員しなければならない。

既にゴマや砂粒のような粉体を構成する巨視的な物体の相互作用は散逸的と記したが、それはどの程度自明なのだろうか。こうした問いかけは粉体のモデル化に必要である。話を簡単にするために正面衝突する2つの球形の物体を考えてみよう。一般に自由度が大きければ熱力学第2法則によって並進速度等のマクロな自由度は内部自由度に分配される。逆に内部自由度がマクロ自由度に転換できる機械があれば極めて便利であるが、それを禁止しているのが熱力学である。従って衝突によって減速するのが正常な反発である。反発係数を導入したら0と1の間にあると考えるのが自然であろう。しかし熱力学極限が取れ

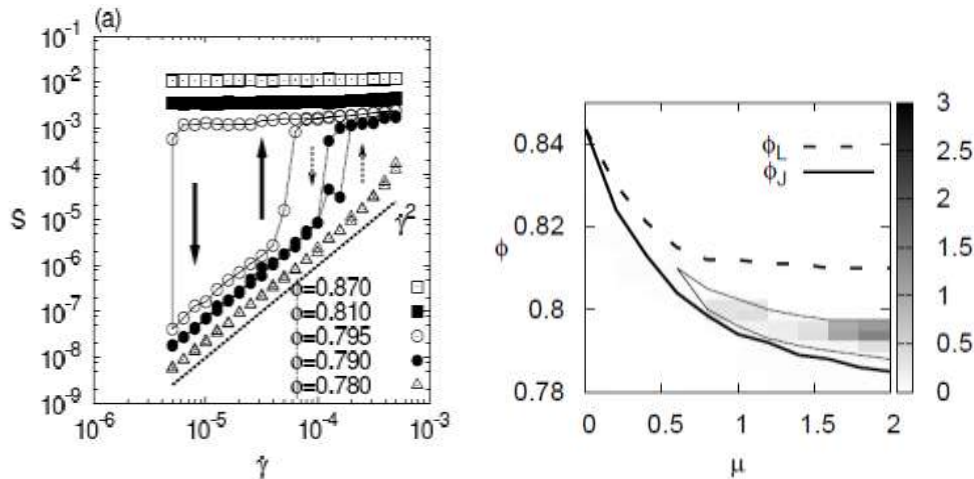
ない程度に粒を小さくしていったらどうなるだろうか？例えば線形バネで結ばれたハードコア粒子が 1 次元線分を対称に運動しながら衝突をすると膨張モードで衝突すると必ず反発係数が 1 を超える。このように自由度が小さな系では必ずしも反発係数が 1 より小さいとは限らない。実際、分子数が 1000 程度のナノクラスターの衝突では初期の内部の熱運動の影響が並進自由度に逆流し、反発係数が 1 を超える確率が有限に現れ、衝突でエントロピーが衝突で減少することがある。また斜め衝突であれば反発係数が 1 を超えることは勿論、負になることもある。このようなナノスケールの低エネルギー衝突は従来よく調べられているとは言いがたく、ナノスケールの熱機関の制御を考える上で応用上も重要になると思われる。(下図は斜め衝突の模式図と衝突角度 γ が大きいと反発係数が負になる様子を示している。実線は理論曲線)。



最近、当研究室ではせん断粉体系での非平衡定常状態の普遍的性質に特に着目している。特に濃厚粉体系のジャミング転移と散逸粒子系の液体論で進展がある。まずはジャミング転移についての紹介をしたい。せん断等の外力をコントロールした場合、或いは密度を変えた場合には液体状の状態からガラス状或いは固体状の動かない相に変化する。このゼロ温度での非平衡相転移をジャミング転移と呼ぶ。ジャミング転移は液体状態では物質の硬さがないものが硬さを持つ固体的な状態へ変化する相転移とも言えるし、或いはせん断率がゼロの極限で降伏応力のない状態（接線応力がゼロ）から有限の降伏応力を持つ状態への相転移と捉えることも可能である。我々のグループではこのジャミング転移に対して接線応力 S が下図のようなスケーリングを充たすことを見出した。ここでのスケーリング、 Φ はジャミング密度からのずれ、 y_ϕ, y_γ はスケーリング指数。様々な次元、 Φ のデータを重ね書きしたもの。図の左側で水平に伸びている分枝はせん断速度がゼロの極限でも有限の降伏応力を持つことを示すジャミングを表し、左下に伸びている分枝はせん断速度がゼロになると接線応力がゼロになる液体的分枝を表す。



このようなスケーリングとその平均場理論は当初、粒子間相互作用に摩擦の含まれていないモデルに対して発見したものであるが、最近の研究では摩擦によってヒステリシスが生じ、臨界密度も沢山あるような複雑な系でも同じ臨界指数が使えることが分かってきた。



上の2つの図は摩擦のある粉体系の2次元シミュレーションから左図がせん断応力がせん断速度に応じてヒステリシスの存在を示した図であり、右図は摩擦係数の関数としての臨界面積占有率を図示したものである。ヒステリシスはせん断速度を徐々に減少させた際に応力の大きな固体的な相が準安定になり、せん断速度を上げていったときには液体的な相が準安定になっていることを示している。一方、右の図では摩擦がない系では臨界密度は1つしかなく、それはランダムパッキングの密度と一致しているのが摩擦係数を入れたモデルを扱った瞬間に液体的分枝と固体的分枝の臨界密度が各々異なった値を取り、更にヒステリシスが現れることで更に2つの臨界密度(都合4つの臨界密度)が現れることを示している。このような非平衡相転移は有限温度系にも拡張できる普遍的なものであると思われ、当研究室では集中して研究を行っている。

ジャミング密度より低くても粉体の液体は通常の水等の液体とはかなり異なった性質を示す。しかし最近分かってきたことは少なくとも摩擦のない粉体で有効なリュウビル方程式から出発した統計力学的な記述は量子系も含めた散逸のある非エルミートな系で普遍的に成立し、非平衡定常状態を記述する一般論を与えることである。その中で時間反転操作に頼らない古典及び量子系のゆらぎの定理の導出や線形応答理論を拡張した一般化Green-Kubo公式の導出に成功している。粉体等の散逸系の統計力学が一つの大きな普遍的なクラスを構成していることは著者がその研究を始めた頃には思いもよらないことであった。

当研究グループでは、構成人数はそれほど多くないが定期的に外国人のゲストが滞在し、2009年に5週間にわたる滞在型国際会議を主宰し、国際的な共同研究を行う等活発な研究活動を行っている。勿論、この研究紹介で紹介したテーマは研究室で行われている研究の

ごく一部に過ぎないが、久保・川崎の伝統を引き継いだ正統的な統計力学の研究を行っていることは理解して頂けたのではないだろうか。またこのような研究を伝統ある基礎物理学研究所で行う機会があることの意義は大きいと思われる。今後の研究の進展を期待して欲しい。