

ガラスは本当に固体か？

-コンピュータシミュレーションと情報理論による予測-

概要

ブリストル大学の Paddy Royall 博士（物理学科・化学科）、Karoline Wiesner 博士（数学科）、京都大学の山本量一教授（化学工学専攻）らのチームは、コンピュータシミュレーションと情報理論とを組み合わせた研究を行い、ガラス状態にある物質中では、固体的領域と液体的領域が混在するものの、低温・高密度になるほど固体的領域のサイズが増大し、その領域では分子がある特定の幾何学的構造（例えば正 20 面体、下図）に組織化されていることを発見しました。この結果はガラスが確かに固体であることを示す有力な証拠となります。

本研究成果は、2015 年 1 月 22 日（英国時間）付け、英国科学誌「Nature Communications」の電子速報版に掲載されました。本研究成果のプレスリリースは、京都大学とブリストル大学（英国）で同時に行います。

1. 背景

「ガラスは固体である（つまり液体のように流れない）」と断言できるだろうか？この一般常識に反する問いに答えるべく、ブリストル大学と京都大学の研究者らは、コンピュータシミュレーションと情報理論（電話や暗号通信のために発明された）を組み合わせる研究を行いました。

ガラス吹き職人が工芸品を作る様子を見れば、加熱されたガラスが液体的な性質を持つことは明らかです。しかし、一旦そのガラスを室温まで冷却すれば、一転して固体的な性質が支配的になり、おかげでグラスの中にワインを注いだり、窓ガラスとして使用したりすることが出来るようになります。

固体とは、微視的には分子が結晶的な規則正しい配置に収まって移動しない（流れない）状態を意味し、液体とは明確に区別できます。しかし、ガラスを構成する分子は規則正しい状態には収まっておらず、非常にゆっくりではありますが、移動し（流れ）続けているように見えます。ガラスの場合それが本当にゆっくりなので、例えば窓ガラスが知覚できる程度に流れるには千年以上かかるとも言われています。もしそうだとすると、一般常識には反するものの、ガラスが固体だと断言する根拠が怪しくなってきました。

ガラスという巨視的には固体に、微視的には液体に見える不思議な状態に関する研究は実は古くからありますが、その本質は未だに解明されていません。今日のスーパーコンピュータの力を持ってしても、ガラスが千年のスケールで流れるか否かという問題に、直接答えを出すには性能が遠く及ばないのです。

2. 研究手法・成果

ガラスを構成する個々の分子は、一見完全にランダムに見えつつも、それぞれ他の分子と情報を交換しながら複雑に連動して動いています。情報理論は、それらの間にある隠れた規則性を感知し、定量化するための数学的なツールを我々に提供するものです。今回、コンピュータシミュレーションと情報理論とを組み合わせた研究を行い、ガラス状態にある物質中では、固体的領域と液体的領域が混在するものの、低温・高密度になるほど固体的領域のサイズが増大し、その領域では分子がある特定の幾何学的構造（例えば正 20 面体、下図）に組織化されていることを発見しました。

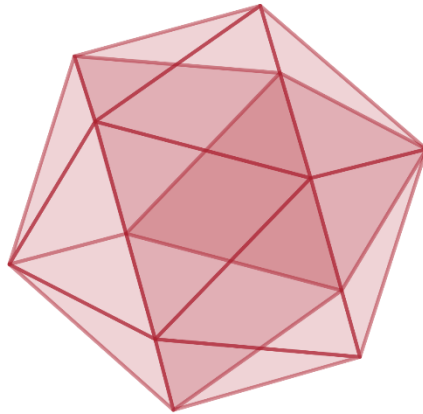


図 1952年, Charles Frank 卿 (ブリストル大学 HH Wills 物理学研究所) により安定構造として予見された正 20 面体. 正 3 角形 20 枚で構成される多面体で, 3 次元空間では最大の面数を持つ正多面体.

3. 波及効果

ここでいうガラスとは, 液体が温度低下とともに不規則な分子構造のまま固体的になった物質, あるいはその状態のことです. これ自体, 今日の科学の進歩の速度からすると非常に長い間解明されないままの難問ですが, それだけではなく「粉粒体の詰り (ジャミング)」、「土砂や火山灰の流動化 (土石流)」、「なだれ」、「交通渋滞」などの発生原理, さらには「分子混雑」と呼ばれる非常にこみ入った状態の生物の細胞内環境などもガラス状態と深く関係していることがわかっています. いずれの問題も, 世界最速のスーパーコンピュータでも答えを出すことが出来ない難問ばかりですが, ガラス状態の本質, あるいは液体がガラス化する原理を解明することによって, このようなガラスに関連した広範囲の問題の解明につながることを期待できます.

4. 今後の予定

コンピュータシミュレーションと情報理論を用いた一つの予測ではありますが, 今回の研究によって, ガラスと液体との間に明確な違いを示唆できたことは大変価値があります. その違いを物理量としていかに定量化するか, さらには同様の結果を実際のガラスについて実験的に得ることが出来るかどうか, 今後に残された課題です.

<論文タイトルと著者>

Title : Mutual information reveals multiple structural relaxation mechanisms in a model glass former
Authors : Andrew J. Dunleavy, Karoline Wiesner, Ryoichi Yamamoto and C. Patrick Royall

<用語解説>

- コンピュータシミュレーション
何らかのシステムの挙動を, それがしたがう実際の法則とほぼ同じ法則としてモデル化し, コンピュータによって模擬すること. 模擬実験とも呼ばれる. 本研究では「分子動力学シミュレーション」と呼ばれる方法を用いて, 多数の球状分子の集合体としてガラスをモデル化し, そこで得られる個々の分子の動きを情報理論によって解析した.
- 情報理論
種々の情報やデータを数学的に論じる学問体系. 古くは電話や暗号通信のために発明され, 応用数学の一部をなす. 一見ランダムに見える情報からわずかな相関を感知し, それを定量化するための数学的なツールとして今回用いた.
- 正 20 面体

正 3 角形 20 枚で構成される多面体で、3 次元空間では最大の面数を持つ正多面体である。1952 年に Charles Frank 卿（ブリストル大学 HH Wills 物理学研究所）により安定構造として予見された（図を参照のこと）。

- ジャミング

熱振動が無視できるぐらいに大きな粒子（穀物など）を輸送する際に、流路の形状や流量によって目詰まりを起こす現象をジャミングという。英語で交通渋滞を” Traffic Jam” というが、これも自動車という粒子の目詰まりだと考えれば合点がいく。ガラスの分子では熱振動が無視できないため、ジャミングとは区別して考えられている。

- 分子混雑

生物を構成する細胞内には多数の巨大分子や細胞内器官が存在しており、それらが占める体積の合計は実に細胞の全体積の 20~40%にも達することがわかっている。タンパク質をはじめとして、細胞内では様々な物質が合成され、しかるべき場所に運ばれた後に機能を発現するが、このような混雑環境下における分子輸送メカニズムについてはまだよくわかっていない。