

ガラスの硬さを計るレプリカ理論

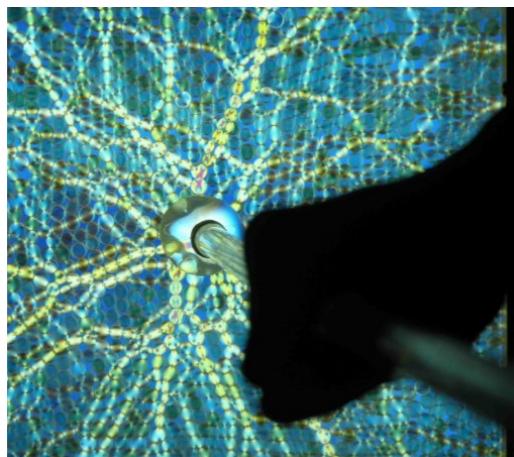
アモルファス固体での第一原理的な物性理論の模索

吉野 元

(阪大サイバーメディアセンター)

粉体のジャミング状態にみられる

応力鎖(force chain)



- H. Yoshino and M. Mezard, Phys. Rev. Lett. 105, 015504 (2010).
- H. Yoshino J. Chem. Phys. 136, 214108 (2012).
- H. Yoshino and F. Zamponi, Phys. Rev. E 90, 022302 (2014).
- C. Raione, P. Urbani, H. Yoshino and F. Zamponi, arXiv:1411.0826.

吉野 元 「ガラスの硬さを計るレプリカ理論」
日本物理学会誌67巻10号699 (2012) 「最近の研究から」

■ スピングラスとガラス

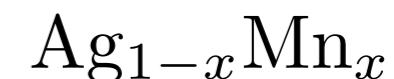
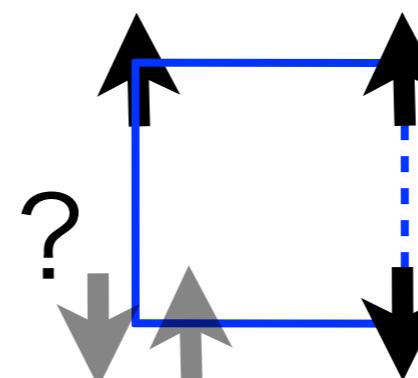
スピングラス：強磁性と反強磁性がランダムに存在する磁性体（例：希薄磁性合金）

Edwards-Anderson模型(1975)

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j$$

正負ランダムな спин間相互作用

$$[J_{ij}] = 0 \quad [J_{ij}^2] = J^2$$



ランダム系の統計力学の発展(レプリカ法)

ガラス：通常の液体を冷やしてできる。ハミルトニアンにランダムネスはない。



$$H = \sum_{i,j} V(r_{ij}) \quad r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$$

粒子（原子、分子、コロイド、..）間の距離

Acknowledgements

共同研究者

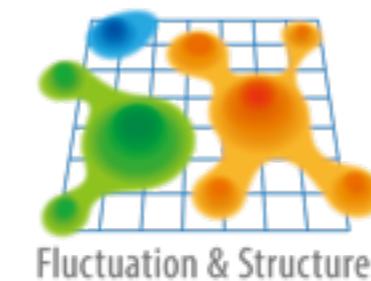
Marc Mezard (ENS,Paris)

Francesco Zamponi (ENS,Paris), C. Raione (ENS, Paris), Pierfrancesco Urbani(CEA, Saclay)

岡村 諭 (大阪大学)

Triangle de la Physique 2009-2011

#117 “Intermittent response of glassy systems at mesoscopic scales”



ゆらぎと構造の協奏：非平衡系における普遍法則の確立

平成25年度～29年度科学研究費補助金「新学術領域研究」

領域代表：佐野 雅己（東京大学）

アモルファス固体における弾性のレプリカ理論

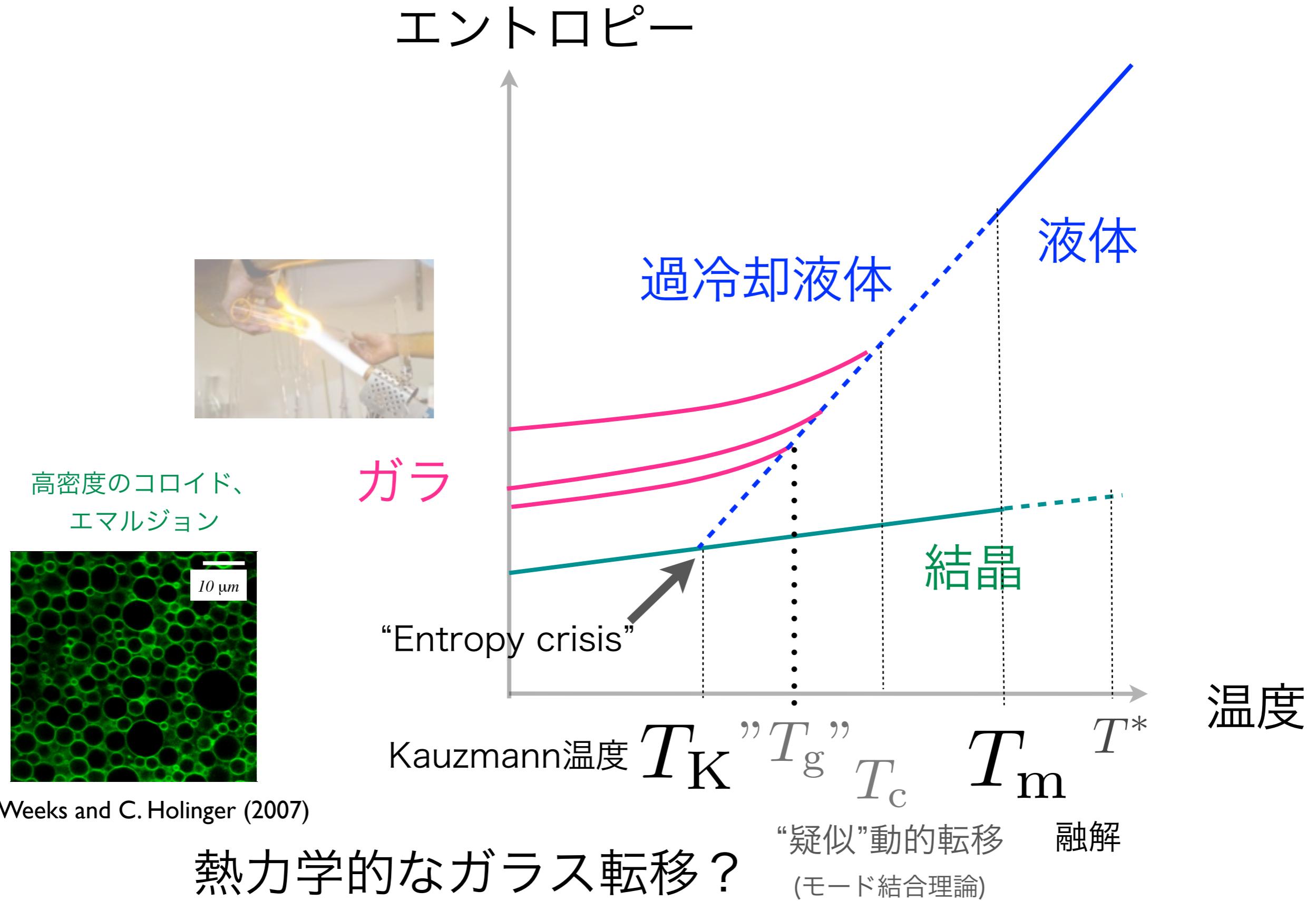
2012-2015 24540403 吉野 元



先端研究拠点事業（国際戦略型）「ソフトマターと情報に関する非平衡ダイナミクス」

JPS Core-to-Core program 2013-2015 Non-equilibrium dynamics of soft matter and information

■ ガラス転移



■ 過冷却液体：ケージ構造、2段階緩和

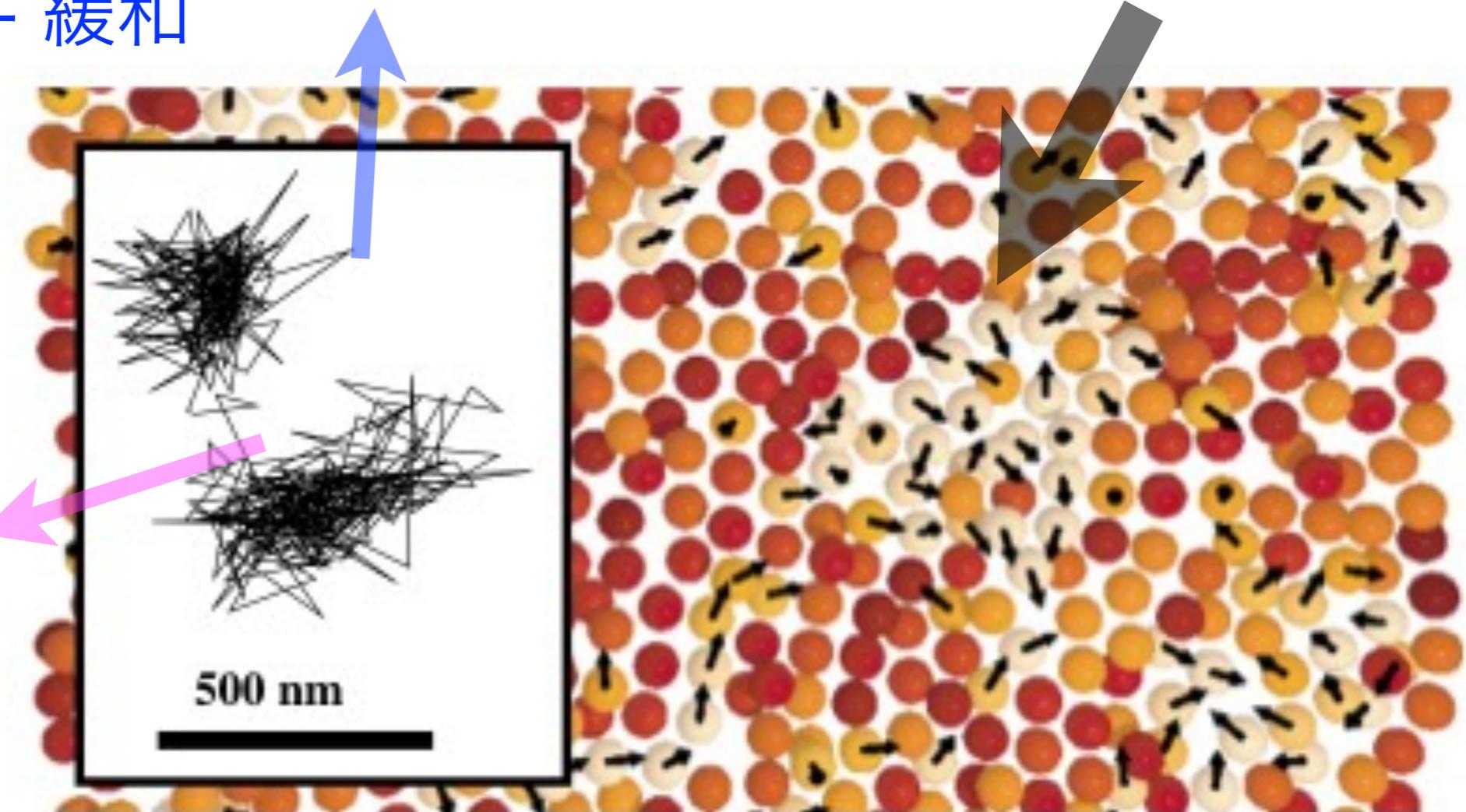
ケージの中での熱振動

β -緩和

動的不均一性

(Stokes-Einstein 則の破れ)

ケージ構造の
組み替え
 α -緩和

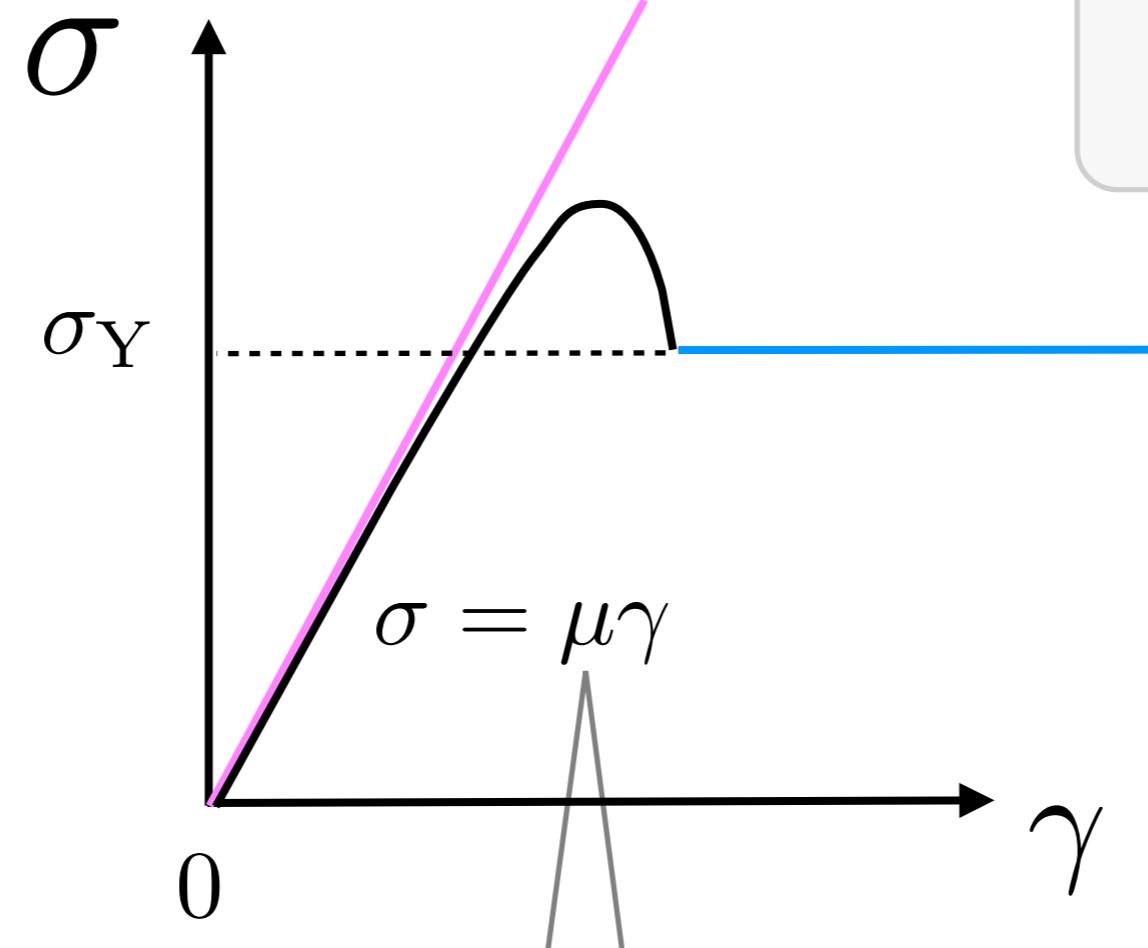


高密度コロイドの共焦点顕微鏡像 (E. Weeks and D. Weitz (2002))

stress-strain curve 応力-ひずみ曲線

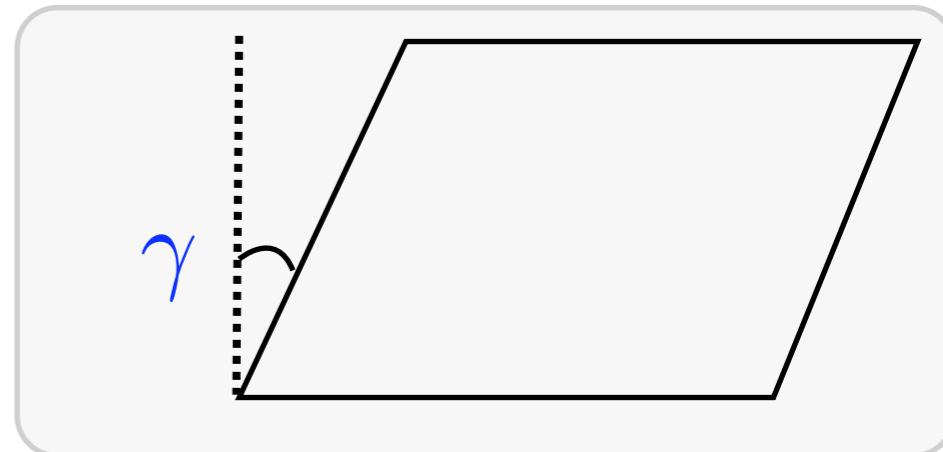
shear-stress (force/area) シア応力

yield stress
降伏応力



shear-strain
シアひずみ

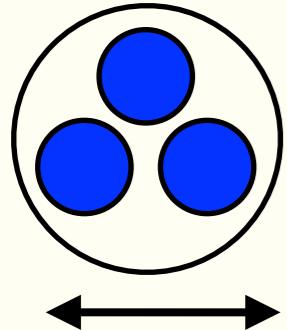
rigidity (shear-modulus) 剛性 μ



レプリカ液体論の基本的なアイディア

同じハミルトニアンに従う m 個のレプリカ系を考える。

$$\mathbf{x}_i^a \quad i = 1, 2, \dots, N \quad a = 1, 2, \dots, m$$



“ケージサイズ”

$$\Delta = \langle (x_i^a - x_i^b)^2 \rangle$$

$$H = H_0 - \frac{\epsilon}{4} \sum_i \sum_{a,b} \langle (\mathbf{x}_i^a - \mathbf{x}_i^b)^2 \rangle$$

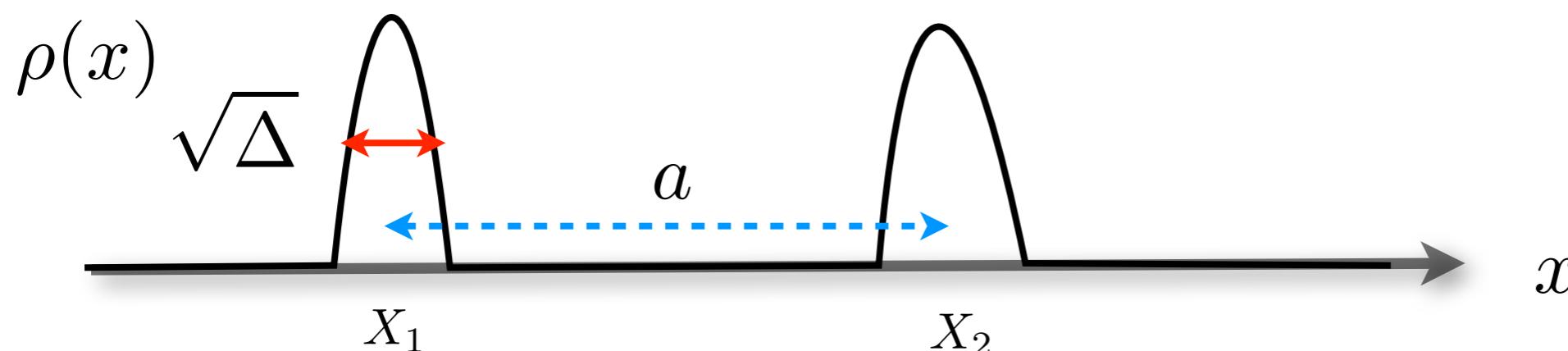
liquid

$$\Delta = \infty$$

solid

$$\Delta < \infty$$

“Einstein model”



Edwards-Anderson Order Parameter
(non-ergodicity order parameter)

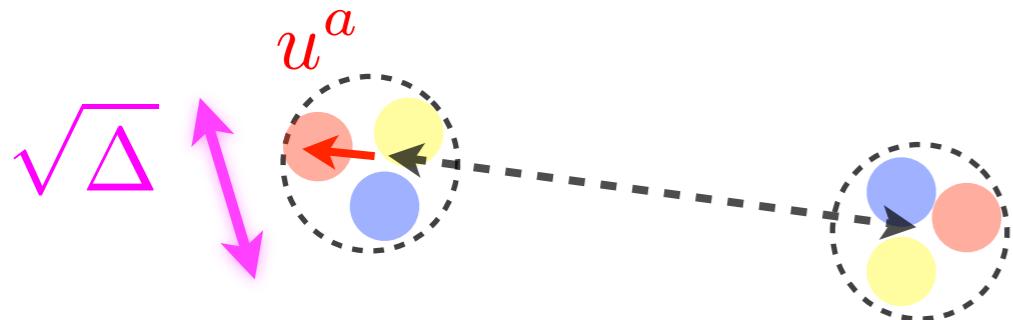
$$q_{\text{EA}} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle s_i(t) s_i(0) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle s_i \rangle^2$$

■ 平均場理論 : Replicated “Van der Waals theory”

レプリカ粒子がつくる
仮想的な「分子」

$$d \rightarrow \infty$$

P. Charbonneau, J. Kurchan, G. Parisi, P. Urbani, F. Zamponi,
Nature Communications 5, 3725 (2014).



$$\bar{x} = \{x_1 \dots x_m\} \quad x_a = ((x_a)_1, (x_a)_2, \dots, (x_a)_m)$$

$$-\beta F = \int d\bar{x} \rho(\bar{x}) [1 - \log \rho(\bar{x})] + \frac{1}{2} \int d\bar{x} d\bar{y} \rho(\bar{x}) \rho(\bar{y}) f(\bar{x}, \bar{y})$$

$$f(\bar{x}, \bar{y}) = -1 + \prod_{a=1}^m e^{-\beta v(|(x_a - y_a)|)}$$

Replicated Mayer function

秩序パラメータの汎関数で表わした自由エネルギー

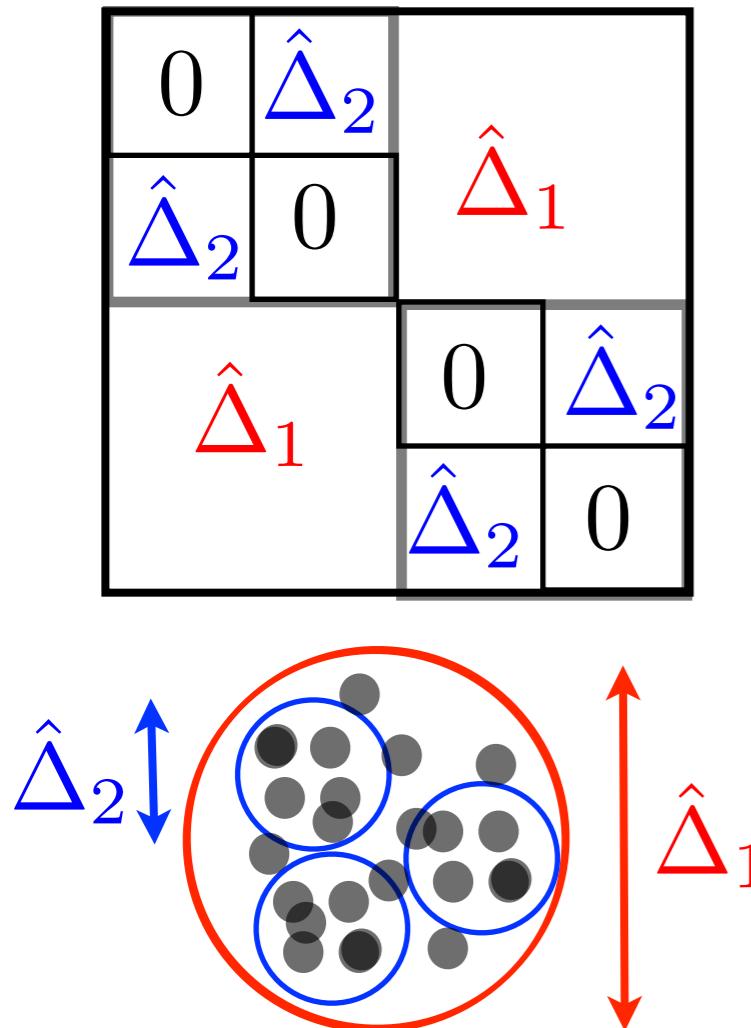
$$-\beta F(\hat{\alpha}, \{\gamma_a\})/N = 1 - \log \rho + d \log m + \frac{d}{2}(m-1) \log(2\pi e D^2/d^2) + \frac{d}{2} \log \det(\hat{\alpha}^{m,m}) - \frac{d}{2} \hat{\varphi} \mathcal{F}(\Delta_{ab})$$

秩序パラメータ $\Delta_{ab} = \frac{d}{D^2} \langle (u_a - u_b)^2 \rangle$

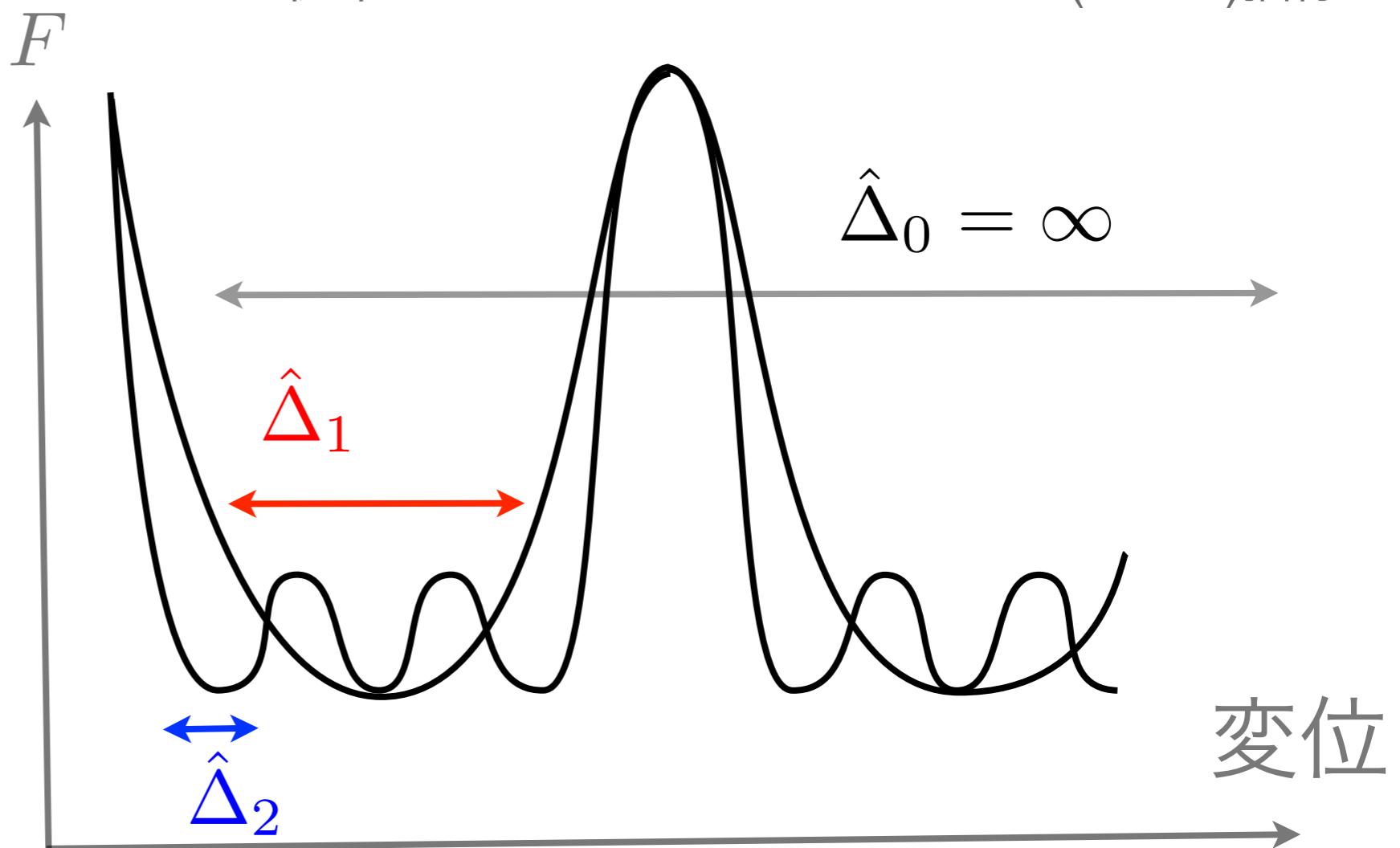
$$\hat{\varphi} = \frac{2^d}{d} \varphi$$

■ ガラス転移：1+連続レプリカ対称性の破れ(RSB)

Parisi's 行列 ($m \times m$)



従来のrandom first order transition(RFOT)描像



$$-\beta F_{\infty RSB} = -m \int_m^1 \frac{dx}{x^2} \log \left[\frac{x\Delta(x)}{m} + \int_x^1 dz \frac{\Delta(z)}{m} \right] - \hat{\varphi} e^{-\Delta(m)/2} \int_{-\infty}^{\infty} dh e^h [1 - e^{mf(m,h)}]$$

Parisi's equation

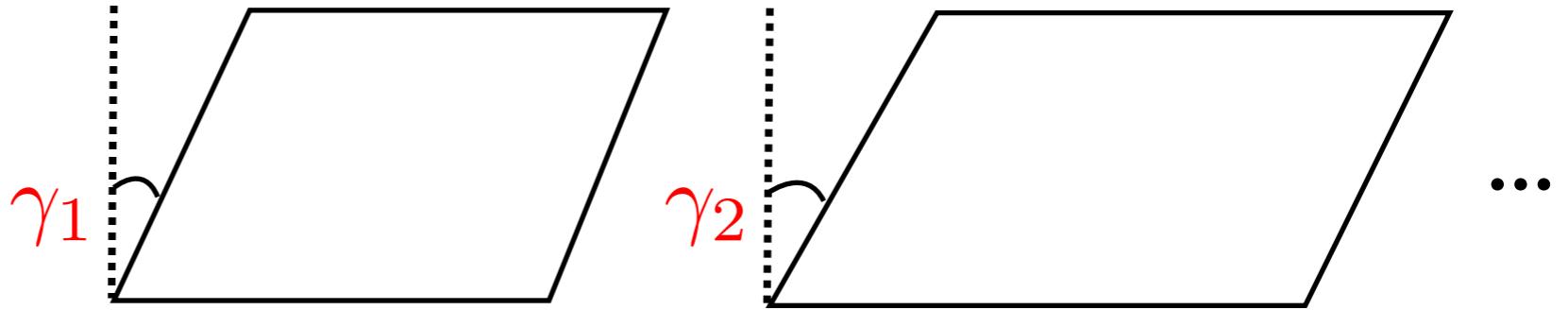
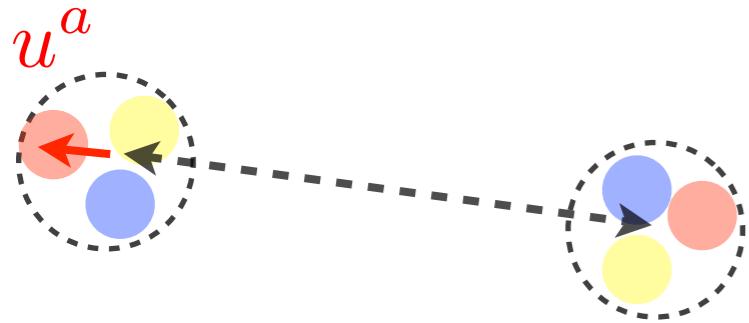
$$\frac{\partial f(x, h)}{\partial x} = \frac{1}{2} \dot{\Delta}(x) \left[\frac{\partial^2 f(x, h)}{\partial h^2} + x \left(\frac{\partial f(x, h)}{\partial h} \right)^2 \right], \quad f(1, h) = \log \Theta \left[\frac{h}{\sqrt{2\Delta(1)}} \right].$$

(note) Spinglass の場合: G. Parisi (1980)

massless “replicon” mode, marginal stability

レプリカ液体をひねる

HY and F. Zamponi, “The shear modulus of glasses:
results from the full replica symmetry breaking solution”,[arXiv:1403.6967](https://arxiv.org/abs/1403.6967)



$$-\beta F(\{\gamma_a\}) = \int d\bar{x} \rho(\bar{x}) [1 - \log \rho(\bar{x})] + \frac{1}{2} \int d\bar{x} d\bar{y} \rho(\bar{x}) \rho(\bar{y}) f_{\{\gamma_a\}}(\bar{x}, \bar{y})$$

Replicated Mayer function (under shear)

$$f_{\{\gamma_a\}}(\bar{x}, \bar{y}) = -1 + \prod_{a=1}^m e^{-\beta v(|S(\gamma_a)(x_a - y_a)|)} \quad S(\gamma)_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} + \gamma \delta_{\nu,1} \delta_{\mu,2}$$

(Compression: $C(\gamma)_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} + \gamma \delta_{\nu,1} \delta_{\mu,1}$)

$$\begin{aligned} -\beta F(\hat{\alpha}, \{\gamma_a\})/N &= 1 - \log \rho + d \log m + \frac{d}{2}(m-1) \log(2\pi e D^2/d^2) + \frac{d}{2} \log \det(\hat{\alpha}^{m,m}) \\ &\quad - \frac{d}{2} \hat{\varphi} \int \frac{d\lambda}{\sqrt{2\pi}} \mathcal{F} \left(\Delta_{ab} + \frac{\lambda^2}{2} (\gamma_a - \gamma_b)^2 \right) \end{aligned}$$

Small strain expansion

$$F(\{\gamma_a\})/N = F(\{0\})/N + \sum_{a=1}^m \sigma_a \gamma_a + \frac{1}{2} \sum_{a,b}^{1,m} \mu_{ab} \gamma_a \gamma_b + \dots$$

yields shear-modulus matrix

$$\beta \mu_{ab} = \frac{d}{2} \hat{\varphi} \left[\delta_{ab} \sum_{c(\neq c)} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \Delta_{ac}} - (1 - \delta_{ab}) \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \Delta_{ab}} \right]$$

“sum rule” $\sum_b \mu_{ab} = 0$

Hierarchical RSB

0	$\hat{\Delta}_2$		
$\hat{\Delta}_2$	0	$\hat{\Delta}_1$	
		0	$\hat{\Delta}_2$
$\hat{\Delta}_1$		$\hat{\Delta}_2$	0

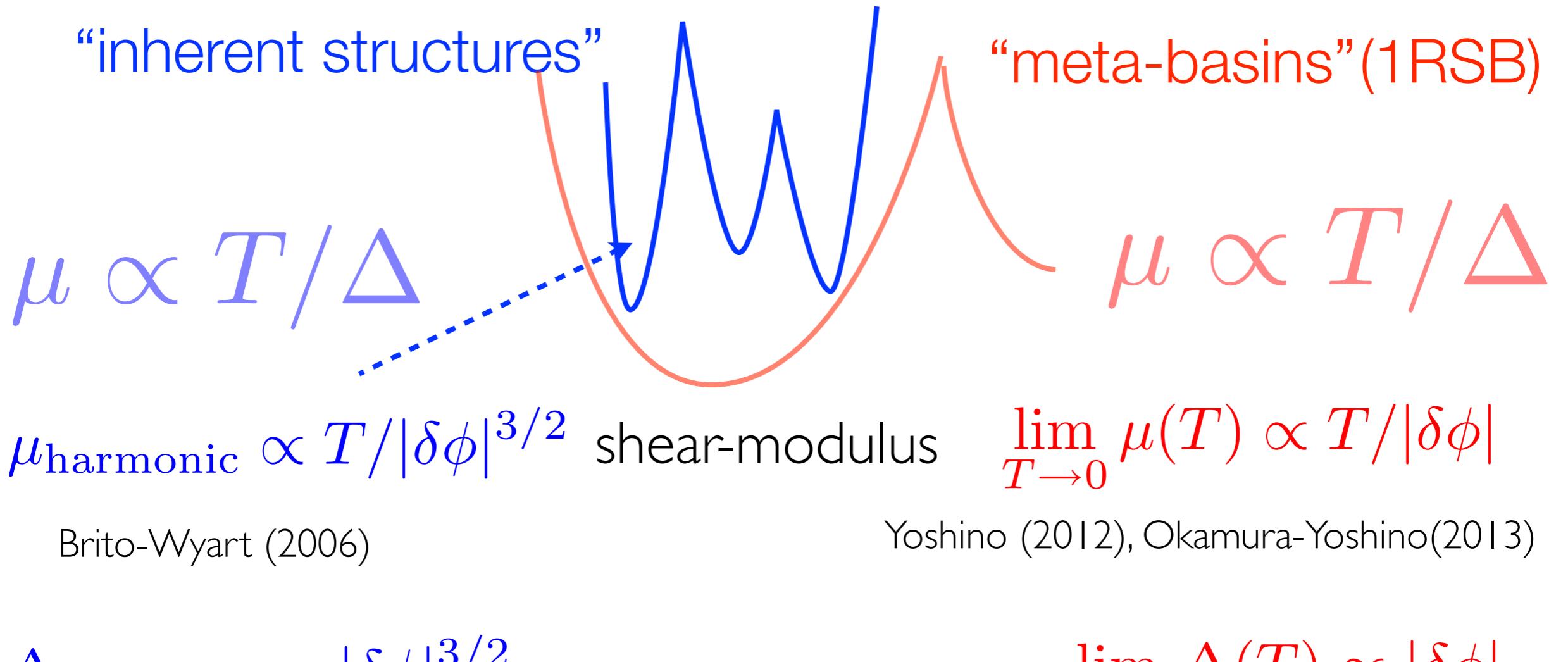


Hierarchical rigidity

$\tilde{\mu}_2$	$\tilde{\mu}_1$		
$\tilde{\mu}_1$	$\tilde{\mu}_2$		
		$\tilde{\mu}_0$	
		$\tilde{\mu}_2$	$\tilde{\mu}_1$
$\tilde{\mu}_0$		$\tilde{\mu}_1$	$\tilde{\mu}_2$

Solution to a paradox around the jamming point

$$\delta\phi = \phi_J - \phi \quad P \propto T/|\delta\phi|$$



$$\Delta_{\text{harmonic}} \propto |\delta\phi|^{3/2}$$

cage size

Ikeda-Berthier-Birol (2013)

$$\lim_{T \rightarrow 0} \Delta(T) \propto |\delta\phi|$$

Berthier-Jacquin-Zamponi (2011)

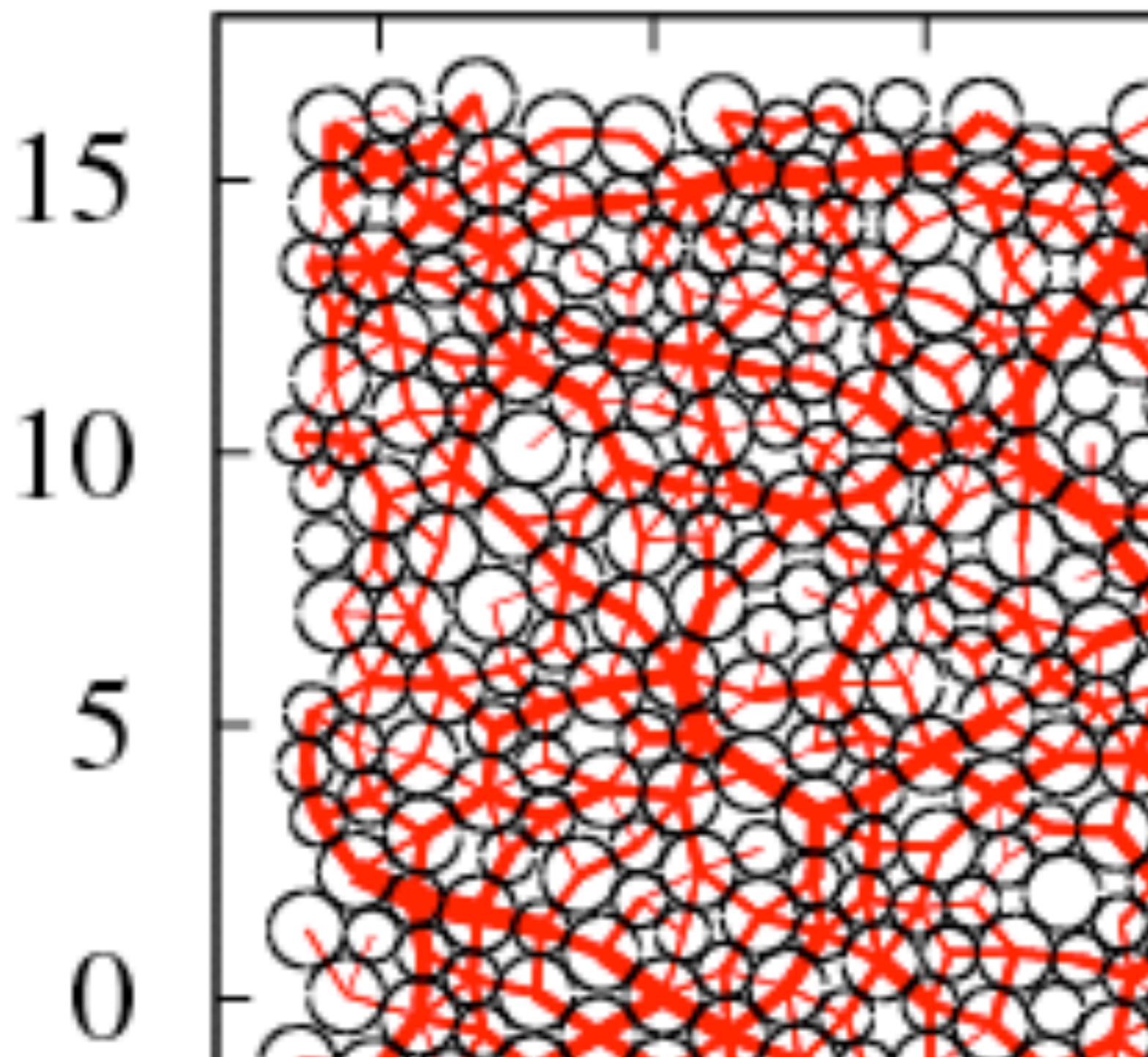
Emulsion experiments:
T. G. Mason et al (1997). Guerra-Weitz (2013)

This paradox is solved! HY and F. Zamponi,

“The shear modulus of glasses: results from the full replica symmetry breaking solution”, Rev. E 90, 022302 (2014)

Avalanche like plastic events during stress relaxation

007



time unit: collision time

$$\tau_T = \sqrt{m\sigma^2/k_B T}$$

$$N = 800$$

$$\phi = 0.85$$

$$\phi_J \sim 0.84 \text{ (2dim)}$$

$$T/\epsilon = 10^{-6}$$

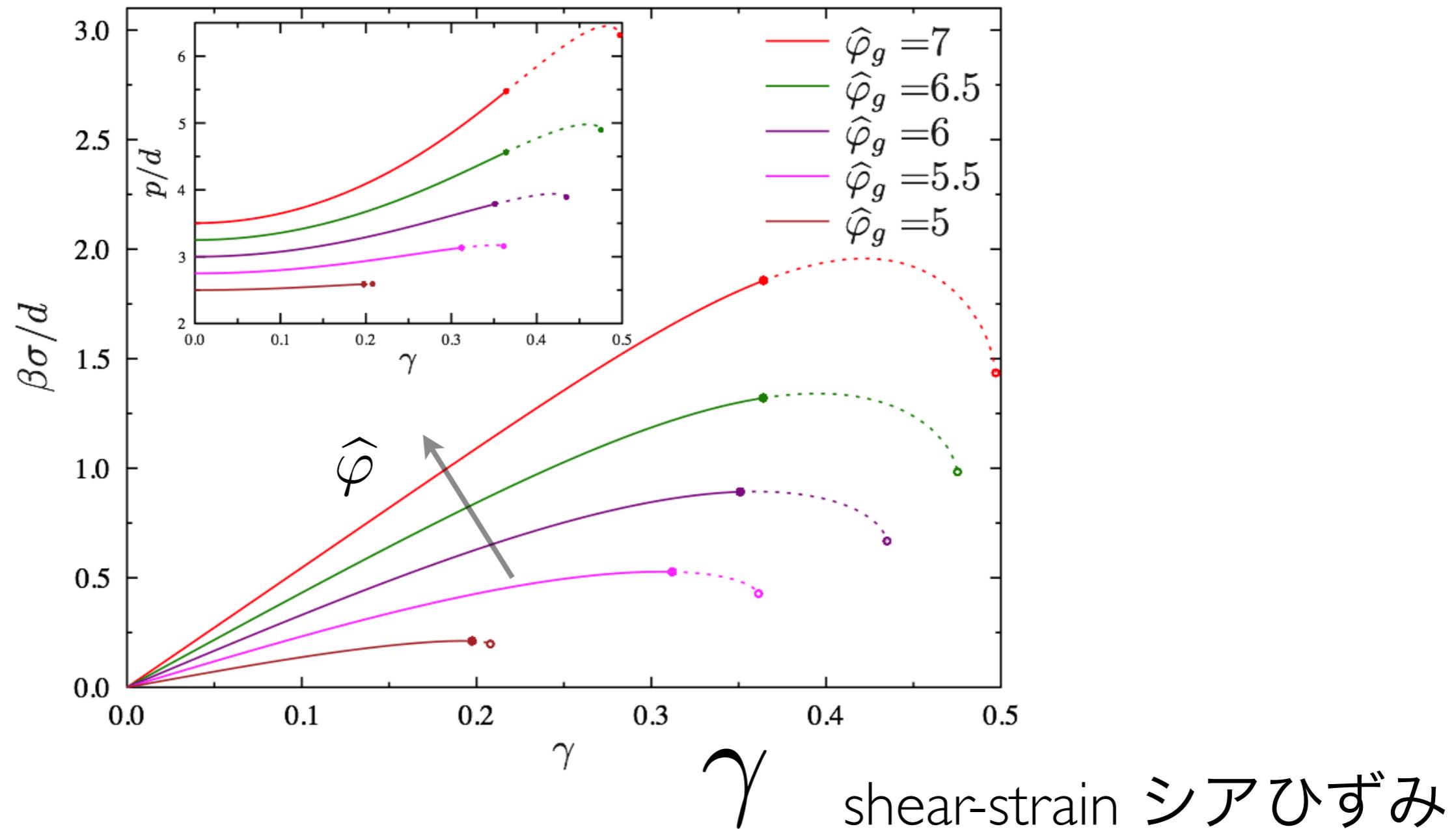
$$\gamma = 0.05$$

■ 非線形応答、降伏 yielding

“state following under shear” via Franz-Parisi potential

shear-stress (force/area)
シア応力

C. Raione, P. Urbani, H. Yoshino and F. Zamponi, arXiv:1411.0826



“active” jamming of self-propelled particles

細胞の集団運動 (がん化、傷の治癒、発生、...)

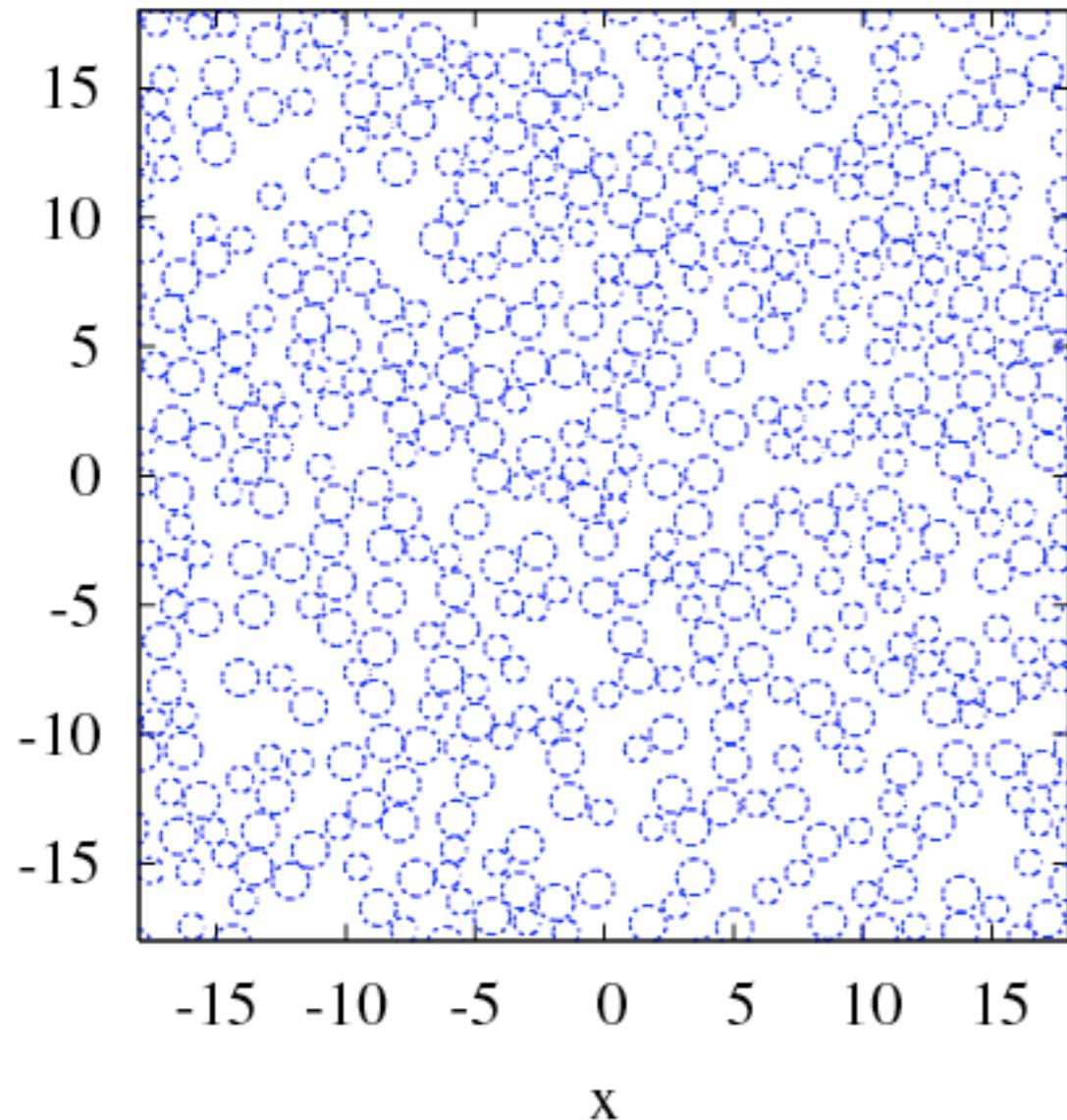
Vicsek model:

Vicsek, T., Czirók, A., Ben-Jacob, E., Cohen, I., & Shochet, O. Phys. Rev. Lett, 75(6), 1226 (1995).

S. Henkes, Y. Fily and M. C. Marchetti, Phys. Rev. E, 040501(R) (2011)

$$\dot{\mathbf{r}}_i = v_0 \mathbf{n}_i + \sum_j \mathbf{F}_{ij} \quad \dot{\phi}_i = \frac{1}{\tau} (\theta_i - \phi_i) + \eta_i \quad \langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = \sigma^2 \delta_{ij} \delta(t - t')$$

$$\varphi = 0.4 \quad 100$$



$$v_0 = 0.001 \quad \varphi = 0.8 \quad 001$$

