

ガラス形成物質における非線形ダイナミクスの発現機構

島 弘幸 [北海道大学大学院工学研究科/助手]

背景・目的

光学的・音響的な非線形特性を持つガラス性物質は、光集積回路における光スイッチ・非線形光学材料・非線形熱伝導素子など幅広い分野での応用が期待されている。しかし応用技術の急速な進歩とは裏腹に、ガラス物性の発現機構の理解そのものは大きく遅れているのが現状である。

本研究の目的は、多様なガラス物質に普遍的に観測される光学的・音響的な非線形特性を、独自の理論的手法を用いて総括的に理解することである。さらに擬一次元伝導体が示す非線形現象をガラス物性の観点から解釈することで、両分野に跨る新しい研究分野の創設を目指す。

内容・方法

ガラス化した状態ではその原子配列が不規則な網目構造をなしているため、局所的な内部歪みが極低温でも解消されずに生き残る。この歪んだ位置に存在する原子は力の不均衡のために運動の自由度が増加するため、系内には多数の準安定状態が形成される。これらの準安定状態が、熱物性・光物性・力学的性質など種々の現象に現れる非線形性の一因となっている。よってガラス状態の特異な物性を理解するためには、局所歪みを内在する非平衡系を近似なしに取り扱うことのできる新しい理論的手法が必要となる。

本研究では原子配列の中距離秩序構造と局所歪みを反映した力学的ハミルトニアンを新たに構築し、そこから導かれる物理量を実験データと比較・検討することで、上記の非線形現象に対し統一的描像を与える。非線形性を包含する独自のハミルトニアンを始点として特異なガラス物性の物理的起源を探るという研究方針は、従来の分子動力学計算に基づく研究手法とは一線を画したものである。

結果・成果

本研究課題で得られた主な成果を3点、以下に述べる。

① 構造ガラスの低エネルギー励起

様々なガラス形成物質に普遍的に観測される、低温領域の余剰比熱や熱伝導異常の微視的起源は、当該研究分野における大きな謎のひとつである。本研究ではこの問題に対し、中距離秩序構造をもつ単位胞の回転自由度を考慮した理論モデルを考案した。

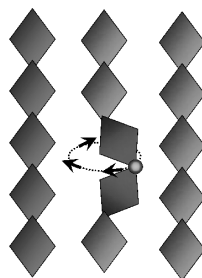


図1. 座屈の概念図

② 擬一次元導体のガラス物性

密度波状態が非線形性を示す最大の原因は、結晶中にランダムに分布する不純物や転位などの構造的乱れである。このような乱れのひとつに、鎖構造の局所的な座屈がある（図1を参照）。座屈した位置では鎖方向に垂直な面内での横回転振動が可能となり、凝縮状態は独立した自由度をもつ。申請者は、この自由度がもたらす低温領域での準安定状態に着目し、数十K以下での余剰比熱に決定的な役割を果たすことを明らかにした。また、座屈点に生じる電気双極子モーメントの回転運動を考察し、座屈の横振動モードに由来した新しい励起状態の存在を示唆した。

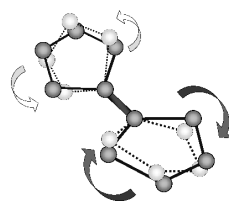


図2. 分子の秤動振動

③ 分子性導体の光学特性

分子性導体の大きな特徴の一つに、強い電子-格子相互作用があげられる。これは分子同士が比較的弱いファンデルワールス力で結合しており、振幅の大きい分子振動が分子同士を繋ぐ電子軌道を大きく変化させるからである。特に分子性物質特有の秤動振動（図2）は、非常に振動数の低い光学分枝を形成することが知られている。申請者は、単位胞の回転自由度・非線形ポテンシャルの効果に注目し、準安定状態間の量子力学的遷移が物質の誘電率や光散乱強度に与える影響について調べた。その結果、この振動モードは低エネルギー領域における物質の光散乱・電気伝導に強く影響することを理論的に明らかにした。

今後の展望

本研究が対象とする様々なガラス物質および低次元導体は、新時代の機能素子として既に活用の途にある。他方、低次元電子物性の基礎理解が未だ不十分であることを考えると、構成元素の異なる様々な無機・有機導体群について、この先多くの新規機能の発見が期待できる。申請者が提唱する理論的アプローチは、乱れたネットワーク構造をもつ様々なガラス物質一般に適用可能であるため、その成果は全く新しいタイプの機能性材料を生み出す契機となりえる。