

論文審査の結果の要旨

論文提出者氏名 小松 尚登

冷却した流体が固体になる現象は固体流体転移として古くから知られているが、相互作用をする粒子系の取り扱いが難しく、理論的に理解することは難しい問題である。古くはファン・デル・ワールズ理論により、古典統計力学の範囲で気体流体転移は説明されている。しかし、対応する固体流体転移の説明は満足できる理解には到達していない。そこで、本博士論文は、固体流体転移を厳密に議論できるモデルやそのモデルに関する知見を応用した近似的考察などを通じて、固体流体転移の理解を深めることを目標としている。

本論文は全体で七章から構成されている。まず第一章では、通常の結晶性固体から流体への相転移とガラス転移との差異や、これらの現象の理解と解析を目標として行われてきた先行研究の紹介など、本研究の背景となる事項について説明されている。第二章では、全結合モデルの例やそこから発展した固体流体転移を示す一次元空間上の理論モデルの紹介など、本研究に関連したモデルや参考となる理論的考察に触れている。

第三章では、想定する結晶構造の最小逆格子ベクトルに対応した波数を陽に含む cosine 型の二体ポテンシャルにより相互作用する古典粒子系を考察する。このモデルは分配関数の厳密な計算が可能であり、転移温度以下の温度で固体相になることが陽に示すことができる。第四章では、最小単位胞内の粒子数の制限を緩めた、より複雑な格子構造への拡張を可能にする理論を展開している。

第五章では、レナード・ジョーンズ相互作用する三次元粒子系をこれまでに構成したモデルによって近似することにより、固体、液体、気体間の相転移の記述を試みる。排除体積効果やポテンシャルのフーリエ成分を適切に取り入れることにより、定性的に正しい相図を得ることに成功した。また、この近似理論では波数が 0 の成分にファン・デル・ワールズ理論における引力の項が現れ、結果として流体相内での気液転移を与えることが示される。

第六章では、ガラス転移に対する理解を深めるために平衡状態とダイナミクスが同時に解析できるモデルの考察をしている。ここでは、一体ポテンシャルの効果のみによる遅い変数を導入し、それと結合する相互作用系は平均場近似の範囲でダイナミクスが少数の微分方程式の問題に帰着できることを示した。この方程式の解析により、過渡現象としての秩序の存在や自己相関関数に見られる特徴的な遅い緩和の再現に成功した。第七章では、本論文のまとめとして、第六章までにおいて扱ったモデルの意義や将来の研究への展望が議論されている。

なお、本論文の内容の一部は福島孝治氏との共同研究であるが、論文提出者が主体になって解析を行ったものであると判断される。また、本論文の第三章の内容は単著の学術論文として出版されており、第四章と第五章の内容は投稿準備中である。

本論文で議論されたように、固体流体転移さらに気液転移を含んだ相構造を一つのミクロなモデルから導出できたことは古典統計力学の多体問題の発展に重要な寄与として認められる。

したがって、本論文は博士(学術)の学位を授与するにふさわしい内容であると審査委員会は全員一致で判定した。