

学 位 審 査 報 告 書

(ふりがな) 氏 名	しば はやと 芝 隼人
学位(専攻分野)	博 士 (理 学)
学 位 記 番 号	論 理 博 第 号
学位授与の日付	平成 年 月 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 4 条 第 2 項 該 当
(学位論文題目) Studies on heterogeneities in 2D particle systems -Structural disorder and dynamics- (2次元粒子系における不均一性の研究－構造乱れとダイナミクス)	
論 文 調 査 委 員	(主査) 小貫明 教授 太田隆夫 教授 山本潤 教授

京都大学	博士（理学）	氏名	芝 隼人
論文題目	Studies of heterogeneities in 2D particle systems - Structural disorder and dynamics -		
（論文内容の要旨） 結晶化を阻害するような粒径多分散性などのフラストレーションが導入された系を急冷することにより、アモルファス構造が凍結され固体、即ちガラスが出現する。その運動の劇的緩慢化に重要な役割を担っている性質として「動的不均一性」、すなわち粒子運動が活発に起こる場所が不均一に偏在する性質が主要な研究対象とされてきている。しかし、動的不均一性の起源については、解明されたとは言い難い状況にある。視点を転じて、同様の条件のもとでフラストレーションを弱めていくと、結晶欠陥が線状に局在化して複数の結晶粒を隔てる多結晶状態、そして点欠陥を伴った結晶状態へと構造の乱れの空間構造に変化する。さらに例えば結晶状態を加熱すると、運動性のある欠陥が増殖しその相の構造不均一をもたらす。これら状態に剪断変形をかけると、構造欠陥の運動が強制的に誘起される。上述のいずれの状態においても動的不均一性は構造不均一性と強い関係を持っており、断片的にしか研究がなされてきていない。その静的動的側面について高密度二次元粒子系の振舞いを統一的な視点から研究することが本論文の目的である。本論文では特に二つのテーマ（i）結晶・多結晶・ガラス状態に剪断をかけたときの塑性変形機構（ii）特に単成分粒子系において密度を変化させたときに起こる二次元融解転移の様相、について掘り下げて記述している。一章と二章では問題の概観を与えている。 三章では上述のごとく粒径の異なる二種の粒子からなる系の組成比を変化させていったときに順次現れる、結晶、多結晶、ガラス状態の剪断変形を調べている。系に特徴的な緩和時間の逆数をやや上回る剪断率で剪断を印加したときのレオロジーと動的不均一性の様態を調べた。結晶、多結晶、ガラス、いずれにおいても非線形なシアシニングとともに歪みの集中が起きており、それに伴って動的不均一性は剪断状態特有の変質と加速を受けている事が観察された。ミクロな塑性変形の機構として、結晶面上における転位変形とが共存することが示された。線状欠陥上における滑りと結晶では後者がより支配的となるのが示された。組成比を増加させて線状欠陥が増加するにつれ前者の寄与が増し、ガラス状態に至ると、転位変形は消失し疎らであった。いずれの状態においても、千粒子前後が関与する大きいスケールに至ると、数十%の長時間の歪みに対しては不均一性が顕著であり変形帯のような歪み集中が実現された。広い領域に渡り弾性的異方性をもって実現されるのがわかった。長時間のみならず短時間スケールでも変形は不均一に長距離の空間相関を伴って起きた。この結果は、結晶・多結晶・ガラス状態に渡って内在する共通の塑性変形機構と個々に相違を持った動的階層性を新たに示している。 四章では、ソフトコア斥力系に対して比較的大規模な古典分子動力学計算を行い、長波長長時間の揺らぎが支配的となる二次元融解転移の様相を調べている。二次元粒子系では、低次元特有の臨界熱揺らぎの促進がおきるため系の相関が莫大に促進されることが知られている。乱れ変数を導入することで、結晶液体間に現れるヘキサチック相と呼ばれる中間相が、巨大なサイズの熱揺らぎが液体的クラスターを作っていることが発見された。密度場の構造因子は長波長領域まで成長し続けて、液体的クラスターとそれ以外の結晶的領域でわずかだがはっきりとした密度の不均一があることが判明した。即ち等温圧縮率が微弱だが発散しており、これと状態方程式とを比較する事で、連続転移を数値的に完全に結論づけるための必要条件が明確に			

なった。また結晶相において構造ガラスに対応した二段階緩和と動的不均一性を見いだした。この動的不均一性はわずかに体積が結晶相で熱揺らぎのため散漫に発生した欠陥、すなわち密度が僅かに低くなった自由体積領域の局所的な拡散運動によることが見いだされた。以上の通り、二次元融解転移における構造およびダイナミクスについて従来より明確な特徴付けを進めた。まとめると、構造及びダイナミクスの不均一性は、フラストレーションの度合いとしての組成比のみならず、剪断や密度を制御変数として加えることで内実を増すことがわかった。また、構造不均一性が長時間ダイナミクスに本質的影響を及ぼす物理系が提案されている。粒径分散度を操作できる種々の粒子系、特に全粒子撮像が可能な擬二次元のコロイド分散系などでの検証が待たれる。

(論文審査の結果の要旨)

本論文の扱う現象は本来工学特に金属冶金学において重要な研究対象であったが物理学においても重要課題として研究すべき対象である。近年の計算機能力の格段の進歩のため工学と物理学にまたがる計算機科学が様々の側面から発展しつつあるので、このような事情はますます明確になりつつある。複雑な対象に対しては他の物理系との関連をおさえながら統一的に理解することが重要であるが、ここでは大規模計算機シミュレーションをもってして初めて発見されることが多い。本論文はまさにこの精神と手法のもとに築かれた仕事でもある。以下に具体的に成果を列挙する。

第一に、塑性結晶・多結晶・ガラス状態に剪断をかけたときの塑性変形機構の解明が挙げられる。大規模計算により音速で伝播する塑性変形とそれよりはるかに10万倍程度の時間で協同的に起る遅い塑性変形を捕らえている。即ち塑性変形が極めて空間的に不均一に起りかつ極めて長時間にわたることが本論文により発見された。これは本論文の基礎となる極めて大規模かつ長時間の計算により初めて捕らえられた。

第二に、特に単成分粒子系において密度を変化させたときに起こる二次元融解転移の様相を明らかにしている。融解現象は物理学の長年の未解明の問題の一つであるが、本論文は2次元粒子系で融解が空間的に極めて不均一に起ることを初めて見出している。即ち結晶的な領域と流体的領域が熱平衡状態で混在して時間的に移動と崩壊を繰り返している有様の可視化に成功した。

以上の二つの問題は、近年多くの研究者が興味を持っている課題でもある。本論文の大規模計算による発見は、これらの問題解決のための重要な知見を与えるものである。将来におけるこの分野の発展への貴重な第一歩を構成すると評価される。

よって、本論文は博士(理学)の学位論文として価値あるものと認める。平成22年4月20日に論文内容とそれに関連した口頭試問を行った。その結果合格と認めた。また、外国語の学力については、本論文が英語で書かれていること及び英語による海外での講演をしていることなどから優秀と認められたため学力試験を免除した。

要旨公開可能日： 年 月 日以降

学識確認のための試問の結果

氏 名 芝 隼人

(試問の科目・方法・判定)

(科 目) (方 法) (判 定) (備 考)

専 攻 学 術

理論物理学	口頭	合格
理論物理学	筆答	合格

(試問の結果の要旨)

上記のとおり、専攻学術に関する試問の結果、本学大学院博士後期課程を修了した者と同等以上の学力を有することを確認した。

試問担当者氏名

氏 名 小 貫 明 教授

氏 名 太田隆夫 教授

氏 名 山 本 潤 教授

氏 名 早川尚男 教授

氏 名 荒木武昭 准教授