

また塑性に関してはトポロジーの変化が重要であることがわかった。次に、一様な shear flow を仮定し、その動的な性質を調べた。定常状態は実現されなかったが、ずり速度 (shear rate) の小さな領域で応力とずり速度の間にスケーリング則が成り立つことが示された。またそれが成り立つ範囲は、大まかにトポロジー変化の頻度によって与えられ得ることを示すデータを得た。

5. ブラウン運動をしているソフトコア 2 成分系の ガラス化の分子動力学的研究

守 田 和 広

コロイド粒子系であるラテックスはセミマクロな結晶模型として昔から知られているものであり、水を分散媒としてブラウン運動を行っている球状高分子の集まりからなる系である。

最近、特に剛体球に近い相互作用を持つラテックス粒子系においてガラス状態が存在するという報告が P.N. Pusei と W. van. Megen によってなされた。そこでこのような実験事実と対応するようなシミュレーションを考え、モデル方程式として水分子は粗視化してランダム力として取入れセミマクロなランジュバン方程式を考えた。そして系全体を圧縮することによってガラス状態と思われるものを得た。この状態において分子動力学などによって知られていたガラス状態特有のダイナミクス (例えば jumping motion 等) が見られ、また分子系とコロイド系との相違についての知見も得られた。