

審査の結果の要旨

論文提出者氏名 村上輝好

熱平衡状態から離れた非平衡状態の制御は工学技術の中核をなす。このことはたとえば、現代科学技術社会の基幹技術である熱機関技術の歴史と現在とから確認することができよう。非平衡現象の物理学的研究は、ボルツマン、アインシュタインにはじまる現代的なものだけに限ってもすでに1世紀を超える歴史がある。数多くの輝かしい成果が得られ、工学のみならず広く科学諸分野の確たる基礎を培ってきた。とはいえ、解明が期待されている非平衡現象は未だ尽きない。これまでも新しい研究技術が現れるたびにその地平を広げてきた非平衡現象の物理研究であるが、20世紀の終わりに確立した計算科学的手法を活用し、主に統計物理学的な視点から非平衡研究現象の基礎を再検討した成果をまとめたものが本論文である。特に剛体粒子模型の計算機シミュレーションによる研究が本研究の特徴である。

第1章では、非平衡現象に対するこれまでの統計物理学的研究を紹介しつつ、本研究の背景と目的とが述べられている。特に剛体粒子模型を使うことの特長を論じている。剛体粒子模型とは一定の大きさを持った剛体を模型の構成要素粒子として使うもので、相互作用ポテンシャルの言葉では、粒子同士が重なった場合には無限に大きな、重ならない場合には0のポテンシャルエネルギーを持つものと表現される。この系は、熱力学的には流体・固体の2相（2次元ではさらに固相が2種類ある）をもつ一方、簡潔な状態方程式・相図をもつという著しい特徴があり、理想気体の次に簡単な系といえる。計算統計物理学的研究の対象として、的確な選択と評価できる。

第2章では、もっとも基本的な非平衡状態として、定常熱伝導および流れがある場合を解析している。まず、剛体円盤（2次元）および剛体球（3次元）からなる系の左端を高温、右端を低温とした場合の非平衡定常状態を解析した。その結果、フリーエ型の温度分布が得られること、さらに熱伝導率が2次元では系の大きさの対数で発散すること、3次元では $-1/2$ 乗で収束することを確認した。ずり粘性率に対しても同様の依存性を確認している。さらにこれら応答係数の値は久保公式を使って評価したものと一致することも確認しており、線形非平衡統計力学上の歴史的な課題の1つに対する計算統計物理学的な解決として高く評価できる。さらに系の内部で自律的に固体流体転移が生ずることも示し、さらにこの転移が熱平衡相図を使って良く説明できることを示した。このことは熱流のある非平衡状態定常状態でも局所熱平衡が良い近似で成立していることを意味する。次に、同様の非平衡定常状態の左端にずり速度を与えた場合の定常状態を解析した。その結果、局所熱平衡状態に基づく固体流体転移を維持しつつ、流体相では固体との界面近くを除いてニュートン流体としてのふるまいが確認された。こうした性質が、ずり速度が熱速度を超えるほどの状態でも維

持されている点の特筆に価する。

第3章、第4章では、第2章の結果から示唆される、興味深い現象とその応用とを研究している。第2章のような温度差とずり速度とがある系は、工学的には流体潤滑現象を分子論的な系とみることができる。こうした系で、物体の相対速度によっては潤滑剤の固化が生ずることを理論的に実証し、ずり速度誘導相転移と名付けた。ずり速度により粘性による流体相中の発熱のため、境界付近が固体に相転移するのである。これは潤滑現象の現象論的な研究からも示唆されていたものである。

第5章では剛体粒子模型を使い、回転角速度の異なる同心2重円柱管内の流れを解析した。その結果、テーラー渦として知られている対流が実現し、臨界テーラー数は連続体による解析と一致した。さらに流体固体相転移を伴った渦も実現した。

第6章では全体をまとめ、さらに本研究を基礎として今後期待される工学的応用と理学的研究の進展とを展望している。さらに本研究で特に問題となる圧縮性流体の連続体力学による記述を付録にまとめてある。

本研究では、統計物理学的な非平衡現象に対する一般的な研究という、ともすると形式論に陥りがちな課題に対して、計算機シミュレーションを道具に具体的かつ説得力のある研究を展開した点を、まず高く評価できる。剛体粒子模型という最適な系を提唱し、熱揺らぎから巨視的な運動までを理論的に再現し、特にこれまでの研究が及ばなかったメソスコピックな系の非平衡状態を系統的に研究した。その結果、局所熱平衡状態と連続体力学とを使った巨視的な模型が、ナノスケールの現象にまで適応可能である場合があることを示した。このことはナノテクノロジーの実験的な研究からも示唆されており、本研究により理論的な裏付けが与えられたことから今後の原子・分子スケールでの技術の研究・開発に与える影響は大きいものと考えられる。また理論的には、相転移という熱力学的な現象と流れという連続体力学的な現象とを自立的に生じる模型として今後ますます重要となると考えられる。さらに本研究で提案された剛体粒子系の計算機シミュレーションは今後、複雑な流れの解析手法として、混相流や熱流体の研究への展開が期待される。

よって本論文は、博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。