

審査の結果の要旨

論文提出者氏名 小串 典子

巨視的な系における熱伝導はフーリエの法則により良く記述されることが知られているが、拡散型熱輸送においてもその微視的起源は明らかでない。微視的には可逆な力学法則に従う分子が、巨視的には個々の分子の個性を越え集団として不可逆な現象を示す。これは統計力学の基礎的課題であり、熱伝導は不可逆現象の典型例である。しかし、微視的ダイナミクスに基づき直接“熱”を扱うことは解析的には困難である。計算機の進歩は初めて個々の分子運動に基づいた熱輸送の直接的研究を可能にした。その成果、熱伝導現象では系の次元・システムサイズが重要であることが明らかとなって来ている。具体的には熱伝導率が次元・サイズ依存性を持つ。ナノからメソスケールではこのようなサイズ依存性が顕著であり、従って、系が巨視的であっても統計力学的にはメソスケール以下の構造を持つ相界面を含むような場合には、界面の挙動が重要となる。一方、相界面は本質的に非平衡／非線形性が重要となる領域である。

本論文では非平衡分子動力学法を用いて多相共存系における熱輸送現象について研究を行った。分子動力学法では分子運動に基づいてエネルギー・熱輸送を扱うことが可能である。これまでの研究では剛体粒子という簡単な分子模型を用いたものであったが、本研究では Lennard-Jones 粒子を用いており気液相転移を記述することが可能になった。

第二部は単相での熱伝導率を非平衡シミュレーションを用いて解析した結果をまとめている。固相や気相においても 3次元で $L^{-1/2}$ のサイズ依存性を持つ結果を得た。相関関数のべき緩和および線形応答理論から予測されるこのサイズ依存性が有限系における一般的な性質であることを確認するとともに、ナノスケールからマクロスケールに至る道のりを明らかとした。さらに非平衡熱流を特徴付ける指標として微視的熱流とその分布に着目することを提案し、熱平衡及び非平衡定常熱流下での分布を解明した。

第三部では気液共存系を実現し界面の構造及び熱輸送を解析した結果をまとめている。定常状態では気液各相でフーリエ型の熱輸送が実現し、熱伝導率の違いから異なる二つの温度勾配が確認されている。非対称構造を持つ界面が得られ、非対称性を扱う場の理論的モデルも提唱している。界面の構造は気泡や液滴の核生成率を解明するために基本的であるが、本界面モデルを用いることで特に非平衡下での核生成についてより良い予測を得ることが期待される。さらに非平衡非定常状態における解析から、界面での界面熱抵抗およびその非対称性（いわゆる熱流ダイオード効果）を確認した。

本論文の研究は、原子・分子の物理理論および熱統計物理学を、計算科学の手法により生物学、熱・機械工学、気候・環境学はじめ広く非線形非平衡現象を扱う問題へと結びつけるものとして高く評価できる。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。