

氏名(本籍地)	黒岩 健(長野県)
学位の種類	博士(理学)
学位記番号	博甲第6793号
学位授与年月日	平成26年3月25日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
審査研究科	数理物質科学研究科
学位論文題目	

Brownian Motion and Glassy Dynamics with Disparately Separated Time Scales
(時間スケールの分離があるときのブラウン運動とガラスダイナミクス)

主査	筑波大学教授	工学博士	初貝 安弘
副査	筑波大学教授	博士(学術)	都倉 康弘
副査	筑波大学客員教授	博士(理学)	宮崎 州正
副査	筑波大学教授	博士(理学)	岡田 晋

論文の要旨

本論文では、時間スケールの分離が関連するという共通の性質を持つ大きく分けて2つの研究を行った。一つはサイズ比が大きく異なる2成分系におけるガラス転移に対する理論的解析であり、もうひとつは拘束のもとでのブラウン運動の定式化である。ガラス転移は液体がアモルファス状に凍結したものである。ガラスを作るためには融点における結晶化を避ける必要がある。この目的のもとで1成分液体ではなく、サイズ比がわずかに1から異なる2成分系がモデルとして選ばれることが多い。しかしながらサイズ比を1から大きく変化させると結晶化を阻害する要因とは全く異なる効果が現れる。その一つが大粒子と小粒子の間の運動の時間スケールの分離である。すなわち、サイズ比が大きい極限では、大粒子のダイナミクスは小粒子と比べて圧倒的に遅いので、大粒子のみの有効的な一成分系として取り扱えるようになる。この近似は非常に有用であるが、それが具体的にどれほどのサイズ比から正当化されるのかについてはほとんど理解されていない。我々は2成分液体のダイナミクスを記述する理論的枠組みを用いてこの問題に対してアプローチを行った。もうひとつの軸である拘束条件のもとでのブラウン運動の最も身近な例としては高分子が挙げられる。高分子においてはモノマー間が化学結合によってつながっているためにその距離はほとんど変化しない。これをしばしばモノマー間の距離が固定されているという拘束条件で理想化することがある。こうするメリットとして、化学結合の速い振動のことを考えなくても良くなるために数値計算の負荷を減らすことができるという点がある。高分子は溶媒分子よりもずっと大きいいためそのダイナミクスはブラウン運動により記述される。この他にも、生体膜上の拡散や、スピン系 spherical 模型など拘束のある系のブラウン運動はありふれた現象である。しかし、その運動を記述するための Langevin 方程式は、発見法的な導出しかなされていないか、相矛盾する結果さえ報告されている状況であった。黒岩氏は拘束を取り扱う最も一般的な方法である Lagrange の未定乗数法をブラウン運動に適用することにより、過去の研究の曖昧な点をすべて排除する簡明かつ一般性の高い Langevin 方程式を導出した。拘束のもとでのブラウン運動では、力に拘束表面への射影演算子がかかることにより拘束条件が運動の各時刻で満たされるように

なっている。力には決定論的なものと、溶媒分子のランダムな衝突から来るランダム力がある。一方で拘束表面への射影演算子はブラウン粒子の場所に依存する。すなわち拘束のもとでは場所に依存する関数がノイズにかかったものが必ず現われる。このようなノイズを一般に multiplicative ノイズと呼ぶが、これは積分する方法を決めないと定まらないという問題を抱えている。ブラウン運動においては、運動量が Boltzmann 分布に緩和して位置のみで現象が記述できる overdamp 極限がとりわけ重要であるが、このような場合に上の multiplicative noise の定義の問題はより深刻なものになる。ノイズが multiplicative でない時は、overdamp 極限は単に慣性を無視したものと等価になる。この理解を multiplicative ノイズを含む場合にも一般化してしまうと、multiplicative ノイズの積分方法を決めることができなくなってしまうという問題が起こる。黒岩氏は運動量が減衰する前の Langevin 方程式の形式解を、運動量の緩和時間を小さいパラメータとして評価することによってこの問題を回避しつつ multiplicative ノイズの積分方法をきちんと決めた overdamp 極限を導出することに成功した。multiplicative ノイズがあらわれるブラウン運動は拘束条件のもとでのそれに限らず普遍的に存在する。たとえばブラウン粒子間に流体力学相互作用が働く場合はブラウン粒子間の距離によりノイズの強さが変化するために multiplicative ノイズがあらわれる。黒岩氏が構築した形式論はその単純さのためただちに平衡状態にない系にも適用することができる。温度勾配のもとでの高分子のブラウン運動は、近年その実験も可能になったため興味を持たれており、本研究の結果の恰好の応用例である。

審 査 の 要 旨

〔批評〕

本研究は、時間スケールの大きな乖離が本質的となる、典型的な非平衡現象の二つの問題に関する理論的解析を行ったものである。一つはサイズ比が大きく異なる二成分単純液体系のガラス転移の問題である。ガラス転移のダイナミクスを扱う標準的な理論であるモード結合理論を、サイズ比が極端に異なる二成分系に応用し、一成分系との間の定性的な違いについて数値解析を中心に研究を行った。この研究中に競合する別のグループ(ドイツ)が先行して成果を発表したために、査読論文として発表することはできなかったが、今後の研究の発展の基礎となる多くの未発表の解析結果を提示した。もう一つのテーマは、拘束条件下におけるブラウン運動理論の定式化である。高分子や膜上の個々の分子の拡散現象は、分子どうしの連結や膜との相互作用のために、構成要素の運動は強い制約を受けている。この制約は早い時間スケールでの原子間の相互作用をすべて扱えばよいのだが、現実的な遅い時間スケールでは、いわゆる拘束条件として扱う方が便利である。しかし、従来の拘束条件下におけるブラウン運動の理論は、熱平衡状態近傍でのみ利用できるものであり、かつ一般性の乏しいものであった。本研究では、この理論を、考え得る最も一般性の高い形で再定式化したものである。この理論は、平衡状態を仮定しないため汎用性が高く、見通しも極めて良い。本研究では、温度勾配系も含む非平衡状態を記述する拘束系ランジュバン方程式を、初めて導出した。本研究の成果は、非平衡系のメソスケールの記述法の一つとして大きな波及効果が期待できるものである。

〔最終試験結果〕

平成 26 年 2 月 21 日、数理物質科学研究科学位論文審査委員会において審査委員の全員出席のもと、著者に論文について説明を求め、関連事項につき質疑応答を行った。その結果、審査委員全員によって、合格と判定された。

〔結論〕

上記の論文審査ならびに最終試験の結果に基づき、著者は博士(理学)の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。