





## 学 位 論 文 審 査 報 告 書

【理学研究科】

報 告 番 号	甲第1058号	氏 名	宇野 俊明
論文審査担当者	(主 査)	矢崎 茂夫	
	(副 査)	米田 茂隆	
	(副 査)	猿渡 茂	
	(副 査)	守 真太郎	
論 文 題 目 シンプレクティック分子動力学法による相転移の研究			
【論文審査の要旨】			
<p>宇野俊明氏は、平成22年4月に北里大学大学院理学研究科博士前期課程に入学し、正統的に統計力学を学び、物質を構成する原子・分子の相互作用から、物質の巨視的な性質を導く理論的な研究を行った。</p> <p>引続き平成24年4月から博士後期課程に進学し、分子動力学法に基づく物性物理学の研究を行った。学位論文「シンプレクティック分子動力学法による相転移の研究」は、その成果として纏められ、概要が学位論文審査委員会において説明された。論文は4章から成っており、第1章は物質の構成要素である原子・分子のミクロの運動からマクロな性質を導き出す分子動力学法の手法とこの論文の主題である相転移への分子動力学法の適用について説明されている。</p> <p>第2章は相転移の熱力学的な現象論がファン・デル・ワールス気体を例にとりて示され、つづいて相転移の指標である輸送係数について述べられている。</p> <p>第3章は本題である相転移のシミュレーション法が、温度や圧力一定などの拘束条件、用いる境界条件、初期条件に基づいて説明されている。特に、時間を差分化したときに用いるリープ・フロッグ法がシンプレクティック解法となっていることをポアソン括弧を使って直接に証明されている。これは系が時間発展に関して安定性を保つことを保証する上で重要な点である。さらに、シミュレーションで用いた能勢・ポアンカレ法が実時間間隔に依存する輸送係数等の計算には有効であることが詳しく説明されている。また、この方法の場合は分子間ポテンシャルが有限距離で滑らかな切断を持つ必要があり、3相を現すことができる斥力と同時に引力を持ったポテンシャルを提案した。</p> <p>第4章は数値シミュレーションの結果が報告されている。まず、系が熱平衡状態を実現しているかが確認され、(i) 温度一定のP-V グラフ、(ii) 熱伝導度と比熱の振舞による気液相転移点の同定、(iii) 自己拡散係数の比体積に対する振舞による固液相転移点の同定がなされた。これらをもとに、相図が求められ、提案された分子間ポテンシャルが固相、液相および気相の3相を記述し得ることを示した。更に、固相における結晶構造が六方最密格子構造を持つことが結論されている。</p> <p>以上の内容は新しい視点から得られた結果を含み、この分野の進展を促す具体的な手法を明らかにしている。これらの理由から学位論文として十分の価値があると判定する。</p>			