

流動、変形、相転移を伴う非平衡現象の計算科学

芝 隼人

東北大学金属材料研究所 計算材料学センター

計算物質科学研究におけるシミュレーション手法の多くは量子論に基礎を持っているが、連続体物理、相転移論などに基礎を置いた古典論の理論と手法もまたもう一つの中心的な役割を担ってきた。相転移や構造ゆらぎを伴うメソスケールの多体協同現象の解析には、現象を大づかみにしたモデル化を行うことが重要となる。具体例としては、秩序変数や保存量などを切り出した連続体描像を構築したり、あるいは本質的な物理量を再現するように構成された分子モデルを構築することによるモデリングである。これらは、普遍的な性質がいかに組み合わせさせて複雑なダイナミクスが現れるのかを説明するのに、しばしば威力を発揮してきた。過去のソフトマターや生体物質、金属材料などの研究にその成功例を見ることができ、その概念は物理・化学・生物学・材料科学の研究領域に関係している。本シリーズの他の講義でもテーマとして取り上げられている。

本講義では、まず最初に (A) 流動、変形、相転移における動的な自由度の結合を扱う基礎となる物理概念を導入する。続いて (B) 階層結合計算手法、流体力学的計算手法、粗視化分子シミュレーション手法などの手法を解説し、最後に (C) これらメソスケールの性質に着目した粗視化モデリングの最近の発展的な話題の中から、講演者の研究に関連したテーマ（膜、コロイド、ガラス）についての最新のシミュレーション研究について、その視点を理解いただくことを主眼として紹介する予定である。

References.

- [1] 土井正男・小貫明、現代物理学叢書「高分子物理・相転移ダイナミクス」(岩波書店, 1992)
- [2] P. M. Chaikin and T. C. Lubensky, “Principles of Condensed Matter Physics”, (Cambridge Univ. Press, 2000, reprint)
- [3] G. Gompper and M. Schick Ed. “Soft Matter” Vols. 1-4 (Wiley, 2006)