

## 論文審査の結果の要旨および担当者

報告番号	※ 甲 第 号
------	---------

氏 名 葉韋廷 (YEH Wei-Ting)

論 文 題 目 Effect of Mechanical and Thermal Annealing on the Yielding Transition of Cyclically Deformed Amorphous Solids (周期的に変形したアモルファス固体の降伏転移に対する機械的および熱的アニーリングの効果)

### 論文審査担当者

主 査	名古屋大学大学院理学研究科	教 授	博士 (理学)	宮崎 州正
委 員	名古屋大学大学院理学研究科	教 授	理学博士	河野 浩
委 員	名古屋大学大学院理学研究科	教 授	博士 (理学)	渡邊 智彦
委 員	名古屋大学大学院理学研究科	准教授	博士 (理学)	谷口 博基

## 論文審査の結果の要旨

液体やコロイド分散系を、急冷あるいは急圧縮すると、系はランダムな分子配置を保ったままアモルファス状に凍結する。これがいわゆるガラス転移である。ガラス転移は、情報科学や生物物理などとも深い関わりがある学際的な問題であるが、真のガラス転移点の有無や凍結の機構の詳細など、その本質は完全には解明されていない。

数多い未解決問題の一つに、降伏転移がある。ガラスに剪断応力を加えると、応力が小さければ、弾性的な力学応答を示すが、応力の増大と共に、塑性的（流動的）な応答に変化し、やがて破壊に至る。これが降伏転移である。この転移は典型的な非平衡相転移であるが、その微視的な機構や普遍性クラスは十分に解明されていない。

申請者は、降伏転移の本質および、降伏転移とガラス転移の関係を明らかにするために、単純なガラスのモデル系に対して大規模な分子動力学シミュレーションを行った。様々な温度の液体を平衡化させてから、その液体を急冷してアモルファス固体を生成し、その後、周期的剪断変形を準静的に印加し、系の力学応答を解析した。幅広い温度領域を解析する必要から、特殊なサイズ分散を持つモデル系を用いた。

まず、初期温度が高温の場合は、アモルファス固体の内部エネルギーが、剪断変形の振幅の増大と共に徐々に減少すること、振幅が降伏転移点を超えると逆に内部エネルギーが増大に転ずることを確認した。そして、変形と応力の解析により、この降伏転移は連続転移的であり、工学用語で延性的な振る舞いを示すことを明らかにした。次に、初期温度を系統的に低くしていくと、この内部エネルギーの低下は緩やかになり、ある温度 $T_c$ を境に、内部エネルギーが剪断変形の振幅に依存せず、一定となることを示した。さらにこの $T_c$ 以下では、降伏転移は不連続となり、転移点で、様々な物理量が一次転移的な振る舞いを示すことを発見した。これは工学用語で脆性的と呼ばれる振る舞いである。温度 $T_c$ は、液体中の揺らぎが協同的になり、ガラスらしさが現れ始める温度として知られる動的転移点とほぼ一致する。さらに、変形の振幅が降伏転移点を越えた瞬間に、シアバンドと呼ばれる塑性変形の局在状態が生じることと、そのシアバンドが初期温度に依存して二つの種類に分類できることを、微視的解析により明らかにした。

以上の結果は、アモルファス固体の延性的および脆性的な力学特性が、ガラス転移におけるエネルギーランドスケープ描像を用いて、ガラスの熱力学的状態として、統一的に理解できることを明らかにした研究であり、高く評価される。なお、参考論文は、上皮細胞のモデル化や流動特性に関する研究であり、価値あるものである。以上の理由により、申請者は博士（理学）の学位を授与される十分な資格があるものと認められる。