

学位論文審査要旨(課程博士)

東京農工大学大学院工学府長 殿

審査委員 主査	花崎 逸雄
副査	夏 恒
副査	山中 晃徳
副査	高田 智史
副査	堀 琢磨

学位申請者	機械システム工学 専攻 平成29 年度入学 学籍番号 17833005
	氏名 坂本 道昭
申請学位	博士(工学)
論文題目	液晶の分子描像からの粗視化に基づくスケーリング理論の構築と粘弾性座屈遷移機構の解明
論文審査要旨(600~700文字)	
<p>本論文は、フレキシブルディスプレイ等へのsmectic液晶の応用に際して問題となる、曲げや衝撃荷重による座屈や転位生成を支配する法則を、数値計算と解析的理論の融合を通じて明らかにした。まず、既存の理論で説明できない構造遷移の特性を解明すべく、全原子型の分子動力学法から、機械学習を駆使した多目的最適化に基づき、液晶の欠陥形成を扱える粗視化分子動力学法の力場構築に成功した。その上で、粗視化分子動力学法でも届かない大きなスケールの現象に対して、繰り込み群を援用したスケーリング理論を構築した。この理論により、有効性を実証した粗視化分子動力学法を足場として、実験計測が困難な時空間解像度の現象を予見する枠組みを確立したものである。</p> <p>液晶は固体と流体の性質を併せ持つ物質であるが、その挙動は場面に依りてどちらか一方の特徴に注目して扱われている。しかし、フレキシブルディスプレイ等への応用場面で想定するような、準静的とは言えない変形では、弾性と粘性の性質が共に顕在化する。さらに、大変形の際には欠陥生成なども伴い、分子論的な特性が顕在化する。これらを十分に扱える数理モデルも数値解析モデルも既往研究では存在せず、本研究で確立した意義は大きい。これまでに報告されてきた実験事実と首尾一貫した特性を持つ粗視化分子動力学法を系統的に確立する方法論では、力場の僅かな違いで特性が変わり得る液晶の変形挙動に対して、時空間解像度の低減に伴う精度確保の課題を、多目的最適化の的確な定義と解法により解決した。また、それを足場にして解析的(analytical)すなわち式変形に基づくスケーリング理論を確立したことで、扱える時空間スケールを桁違いに広げること成功した。それはまた、粗視化分子動力学法で得られる詳しい粘弾性挙動と共に既存の理論や数値解析で説明できなかったメカニズムを明らかにした成果に結実した。方法論の開拓から、対象とする現象のメカニズム解明まで、一連の成果を体系的に実現した内容が本博士論文を構成する。</p>	

(様式11)

論文審査要旨

以上のように、本論文は、多くの新しい知見を有すること、論文の内容、構成および公表論文数などから、本学位論文審査委員会は、全員一致して、本論文が博士(工学)の学位論文として十分価値があるものと判断し、合格と判定した。

審査経過(時系列)

2022年12月15日

2023年1月 11日

2023年1月31日

2023年2月8日

2023年3月6日

2023年3月博士後期課程修了に係る学位申請

審査委員の選出・指名・付議、論文審査委員の付託(運営委員会)

学位論文発表会

本専攻内における博士学位取得要件(2017年度以降入学者用)

「1)a. 査読付き論文*が3報以上採択されていること。それらのうち最低1報は定期刊行学術雑誌に掲載された査読付き論文でなければならない」、「1)b. 査読付き論文2報採択、3報目がreject以外の査読結果を受けていること。それらのうち最低1報は定期刊行学術雑誌に掲載された査読付き論文でなければならない」、「2) 上記採択論文には、WoS論文1報以上と筆頭著者論文1報以上が含まれること」のうち、1)a および 2) を満たしていること]を確認の上、専攻会議で論文合格及び最終試験合格を承認。

学位授与認定・修了認定(運営委員会)