

---

# 材料数学特論 (Mathematical Foundations of Materials Design)

---

種別・単位：講義 2単位 (週1講時)

開講期：第1学期

担当者：毛利哲夫 (材料科学専攻・マテリアル設計講座、内線 6348)

キーワード：クラスター変分法、クラスター展開法、シュレディンガー方程式、クローニッヒ・ペニーモデル、Cahn-Hilliard 方程式、TDGL 方程式、拡散反応方程式

---

## 主題と目標

---

本講義では、物質の安定性・平衡論・時間発展の原理を、その数理構造を中心に論じ、マテリアル設計に必要な数理の知識を付与することを目的とする。物質の現象は、電子や原子のようなミクロなスケールに端を発し、顕微鏡組織に見られるメソスコピックなスケールを介して、実際に使用するマクロなスケールへと連携するマルチスケール性を有している。また、それぞれの空間スケールにおける現象は異なった時間スケールを有している。物質におけるこのような時空の階層構造を理解し、それぞれのスケールにおける支配原理を学ぶ。ミクロな領域にあっては、量子力学や統計力学が指導原理であり、メソからマクロに至るスケールでは熱力学や弾性論が支配する。これらの学問領域を繋ぐ共通項が数学であるが、特に本講義では、偏微分方程式と確率論に焦点を絞り、ミクロ設計、メソ設計の基礎を学ぶ。

---

## 授業計画 項目 (授業実施回数) / 内容

---

### 1. 物質の構造[3]

原子の結合と結晶の対称性、基底状態とエネルギー、自由エネルギー関数とルジャンドル変換、物質の平衡、エントロピー生成速度、揺らぎ、非平衡と時間発展の原理

### 2. シュレディンガー方程式と電子の振る舞い[4]

演算子とハミルトニアン、自由電子モデルと波動関数、Tight Binding Hamiltonian とバンド構造、変分法と摂動法

### 3. 確率論と原子の配列[4]

ブラッグウィリアム近似とエントロピー、クラスター展開法、クラスター変分法

### 4. 偏微分方程式と組織の形成[4]

界面の生成、変分原理と発展方程式、Cahn-Hilliard 方程式と保存量、TDGL 方程式と非保存量、拡散反応方程式とパターンの形成

---

## 評価・教材・受講条件

---

評価：毎回の試験、中間試験・期末試験、レポート、及び、マテリアル設計講座の全教員による口頭試問に対して、各種の weight を乗じ、各自の best な点数を最終点とする。

90 点以上;秀、80 点以上;優、70 点以上;良、60 点以上;可。又、60 点に満たない者は再履修とし、基本的に再試験や追試験は行わない。

教材等：毛利著「材料システム学」(朝倉書店)を指定教科書とする。又、菊池・毛利著「クラスター変分法」(森北出版)、Frontiers of Materials Science (Ohmsha IOS press)を参考書とする。

受講条件：応用マテリアルコースの応用数学 I,II に習熟していること

備考：