

氏名	山崎 義弘
学位(専攻分野)	博士(理学)
学位記番号	理博第2019号
学位授与の日付	平成11年3月23日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
研究科・専攻	理学研究科物理学・宇宙物理学専攻
学位論文題目	立方-正方晶構造相転移に伴う形態形成の理論

(主査)

論文調査委員 教授 小貫 明 教授 蔵本由紀 教授 吉川 研一

論文内容の要旨

結晶を構成する固体においてはその構造変化が一次相転移現象としてある転移温度において引き起こされることがよく知られている。このような現象においては相転移に伴い様々なドメイン構造が出現することが観測されてきたが、そのダイナミクスの理解はいまだ極めて不十分である。そこでは格子変形による弾性エネルギーと異なる相の間の界面エネルギーの釣り合いによって持異なドメイン構造が決定されるが、このメカニズムの解明をするには解析計算はしばしば無力であり近年において計算機シミュレーションが有効になりつつある。

本論文ではまず弾性体内で三軸方向が対称な立方晶から一軸的に変位した正方晶への対称性の破れを伴う1次相転移が起こる場合のギンツブルグーランダウ理論を展開する。即ち格子を構成する原子の存在確率を表すベクトル的な複数の秩序変数を導入する(これを $\vec{\phi}$ と書く) $\vec{\phi}$ の関数であるギンツブルグーランダウ自由エネルギーを最小化することによって、ある転移温度を境に高温側の無秩序相($\vec{\phi}=0$)と低温側の秩序相($\vec{\phi}\neq 0$)が得られる。現実の結晶では相転移に伴い格子のゆがみ(これを \vec{u} と書く)が発生する。本論文ではこの効果を取り入れるために、秩序変数と格子変位の結合項をギンツブルグーランダウ自由エネルギーにおいて存在することを仮定する。具体的には $(\vec{\nabla}\cdot\vec{u})|\vec{\phi}|^2$ の形の項と $\Sigma_i(\partial u_i/\partial x_i)$ の形の項が系の対称性を考慮した物理的考察より要請される。ダイナミクスにおける基本方程式は、秩序変数の緩和型時間発展と弾性場の釣り合い条件を仮定し構成されている。即ち釣り合い条件により弾性場が秩序変数の汎関数として表現でき、このことにより秩序変数の揺らぎの間の長距離相互作用が生まれることが解析的に計算できる。

このようなモデル系においては複数の低温相と高温相が転移温度近辺において共存しうるが、本論文ではその間の界面構造についてまず調べどのような界面が相転移に伴い出現するか考察する。そして相転移に伴う弾性係数の変化についても議論する。本論文ではさらに計算機シミュレーションを遂行することによって相転移のダイナミクスを調べる。そこでは主に問題を二次元空間に焼き直したが、三次元空間でも一部計算を行っている。この場合立方晶の(二次元)母相中に二つの主軸方向([10]と[01])に伸びた2種類の正方晶相のドメインが析出することが見出されている。立方晶と正方晶では結晶格子の構造が異なるため系全体として整合性を保つ(弾性場の連続性を保つ)ために弾性歪みが生じることが本論文のモデルによって再現される。そして、弾性歪みのため正方析出相の成長段階に応じて3つの特徴的な形態が本論文のシミュレーションにおいて観察されている。

- (i) 正力晶核の初期の発展における異方的(楕円状, 正方形)成長。
- (ii) 正方晶核が中間過程において示す[11] [1 $\bar{1}$]方向に並ぶツイード構造。
- (iii) 2種類の正方析出相による[11] [1 $\bar{1}$]方向への縞状構造(ツイーン構造)。これはパターン形成過程で現れる最終構造である。

さらにシミュレーションを解釈する理論的解析をも本論文は提出している。即ち相転移の初期過程に現れる殆ど丸い正方晶核の時間発展を再現する時間発展方程式(界面ダイナミクスと呼ばれる)を提出し解いている。ここでは核の中心からの

距離の方向依存性を考慮して核が楕円状、または正方形に成長していく有様が明確に把握される。相転移の最終後期過程におけるツイン構造の時間発展についても界面ダイナミクスから明瞭に理解できることが示めされている。即ち界面が直線的になり [111 または $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$] 方向に揃うとき、界面の動く速度が恒等的に 0 になることになり、ツイン構造が静的な構造であることが説明できる。

以上のように立方-正方晶構造相転移で特徴的な一連の形態形成を統一して表現するためのモデルが本論文では提案されており、解析計算と計算機シミュレーションをともに用いた研究がなされている。

論文審査の結果の要旨

本論文の扱う現象は本来工学特に金属冶金学において重要な研究対象であったが物理学においても重要課題として研究すべき対象である。近年の計算機能力の格段の進歩のため工学と物理学にまたがる計算機科学が様々の側面から発展しつつあるので、このような事情はますます明確になりつつある。複雑な対象に対しては他の物理系との関連をおさえながら統一的に理解することが重要であるが、ここではギンツブルグーランダウの現象理論的なアプローチが大変有効である。そして複雑な動的効果は計算機シミュレーションをもってして初めて発見されることが多い。本論文はまさにこの精神と手法のもとに築かれた仕事でもある。以下により具体的に成果を列挙する。

本論文は大きく二つの研究にわけられる。まず一つは構造相転移に伴う弾性効果を取り入れるための現象の本質を取り入れた数理モデルの構築である。この研究においてはギンツブルグーランダウの理論的アプローチのよって立方-正方晶構造相転移での特徴的な一連の形態形成を統一的に表現することに成功している。解析的にはモデルの熱力学安定性と弾性変位を仲立ちとした秩序変数間の長距離相互作用を導出し界面動力学を立方-正方晶構造相転移の形態形成過程に応用した。単一核の非等方的成長、およびツイン構造の形成過程を界面の運動方程式を導出することによって簡潔な形式で表し、形態形成の機構を説明した。とくに弾性相互作用によって転移温度に異方性が生じ、立方晶の弾性定数が [111], $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ 方向で低下することが示されるという結果は、実験的にも確認されている。以上堅実な成果といえる。

二つめは、このモデルによって、数値計算シミュレーションがなされたことである。特にこの手法が非線型の問題に対して巧みに駆使されている点が評価できる。そこでは秩序-無秩序転移初期から粗大化過程で観られる一連の形態形成を再現することができた。このモデルを用いれば、解析計算の困難なツイード構造の形成機構を自然な形で理解することができる。以上のように、立方-正方晶構造相転移で特徴的な一連の形態形成を一つのモデルで表現し、実験で観測されるような相分離構造をシミュレーションによって再現することができたといえる。金属系についてはこのような動的効果についてたまたま解析的理論はいまだないのが現状であるので、本論文のシミュレーション成果は将来における発展への貴重な第一歩を構成すると評価される。

本論文は構造相転移する固体という応用上も極めて重要な物理系に対し、統計物理学原理から出発した体系的理論を構築している。数学的にも数値解析的にも高度な手法を使いながら、興味ある結果を得ている。このような観点から、本申請論文は総合的に学位論文として優れた内容をもつものとして、博士(理学)の学位論文として価値あるものと認める。

なお、本論文に報告された研究業績を中心に、平成11年1月5日に論文内容に関する口頭試問を行った結果、合格と判断した。