

京都大学	博士 (理学)	氏名	平泉真生
論文題目	潜熱を伴う相成長に関する法則		
<p>(論文内容の要旨)</p> <p>過冷却条件下における結晶成長のように、安定な相が準安定相と接しながら成長する現象は様々ところでみられる。不安定性にもとづく多様なパターンに着目することが多いが、本論文では、もっと基礎的な側面である安定相の成長則に焦点をあてる。これが非自明な問題になる理由は、界面幅がナノメートル程度のミクروسケールになっているからである。界面領域の物理的過程を界面自由エネルギーとして秩序パラメータの勾配で表現できると仮定すると、局所的な熱力学と組み合わせることでマクロな流体方程式を書き下すことができる。その方程式を単純化したモデルはphase-field modelとよばれ、潜熱を伴う相成長の時間発展を記述する基本的な方程式とみなされている。ただし、その方程式の妥当性については、様々な現象ごとに調べられているが、安定相の成長則については理解が十分になされていない。具体的に、過冷却度がある閾値よりも小さいときphase-field model において平坦な界面の変位が経過時間の平方根に比例することは、数値計算の結果や界面幅が薄い極限での漸近的解析によって分かっていたが、偏微分方程式の解析はなされていないままだった。また、より重要なこととして、この結果は実験による直接的な検証が見つからず、メソスコピックなモデルでの数値計算の報告もなく、相成長則に関してphase-field model の妥当性が確認されていなかった。本論文はこの二つの問題を解決したものである。</p> <p>第2章では、1次元phase-field model に対して、伝搬解を摂動的に構成する。界面の厚みを固定したまま、時間とともに長くなる熱拡散長と界面の厚みの比を小さい無次元量の摂動パラメータとする。熱拡散長の時間依存性は結果として求まる界面の変位の時間依存性によって決まるので、素朴な摂動論では計算できない。摂動項を計算しつつ、同時に未定な時間依存性も決める特異摂動を定式化することによって解を導いている。</p> <p>第3章では、第2の問題を研究するために、潜熱を伴って相成長する統計力学的モデルを構築する。一次転移するPotts model に対して、運動エネルギーに対する変数を導入してバルクでエネルギー保存ダイナミクスを定義して境界でカノニカルな熱浴ルールを使う。また、安定相や準安定相を具体的に計算するために、一方向にランダム化した格子を用いる。</p> <p>第4章では、このモデルに対する数値実験の結果が紹介される。まず、界面の変位の時間依存性を調べると、時間の平方根で比例する領域とそれにひきつづいて異なるべきで成長する領域が生じることが観測された。様々な系の大きさを計算することにより、普遍的なスケールリング則が見いだされる。このとき、クロスオーバーする時間や後半のべき指数は、安定相の温度に依存している。これらの結果は、phase-field model の数値計算では報告されていなかったのもので、統計力学モデルに固有の振る舞いかと予想された。しかしながら、phase-field model の数値計算を丁寧に行うことにより、同様なクロスオーバーが観測され、さらに安定相の温度が平衡での転移温度に近づくにつれて、初期スケールリング領域の割合がゼロに近づくことが分かる。つまり、系の大きさが大きい極限、経過時間が長い極限、平衡に近づく極限という3つの極限の順序に伴って観測される現象が異なることを意味する。そして、それは統計力学モデルに固有ではなく、phase-field model でも記述される。</p> <p>第5章は全体のまとめであり、今後の展望が述べられる。</p>			

(続紙 2)

(論文審査の結果の要旨)

近年の非平衡統計力学の発展により、ミクロな世界の記述とマクロな現象をつなぐ研究が活発になっている。結晶成長は、様々なスケールの物理的過程が関わる典型的な現象であり、現代的な視点から再考するのにふさわしい対象である。各論として議論するだけでなく、例えば、統計力学模型を提案して、それから巨視的なダイナミクスを導出することがひとつの目標になる。本論文が目指したのはそのような研究であろう。しかしながら、具体的に研究をすすめると、標準的な流体力学とは異なり、そもそも巨視的なダイナミクスを記述する法則が確立していないので、異なるスケールで定義されたモデルが示す現象の関係を理解することにとどまっている。それでもそこで得られた結果は、将来の研究にとって重要な基盤となるものである。

第2章で定式化された摂動論は技術的には独自性の高いものである。過冷却度が閾値よりも大きい場合の定常伝搬解の構成は20年前になされているのにも関わらず、閾値よりも小さい場合の解の構成はできていないままだった。実際、摂動パラメータの選び方など摂動展開の形式について、それまでの研究から飛躍する部分が必要だった。これは高い専門性と独創性の結果だと評価される。

第3章で提案される統計力学模型は、Potts Modelをエネルギー保存する形に拡張するものであり、それは既知のアイデアに基づいている。また、ランダムグラフを用いて平衡統計力学を適用可能にするのも技術的には困難ではない。これらは、将来、ダイナミクスを導出する際の準備として捉えられる。

第4章の数値計算の結果が、物理的な意義としてはもっとも重要である。メソスケールでの有効模型が示すマクロダイナミクスの結果とノイズがないphase-field modelの結果が質的に同じである、というのは決して自明なことではない。メソスケール模型で観測される界面とマクロダイナミクスで記述される界面は異なるものであるが、後者の界面が何らかの意味でうまくくりこまれたものになっているのだと推測される。この描像については、さらに研究がすすめられるべきである。その意味で、本研究の結果は、非平衡統計力学に新しい課題を投げかけている。さらに、第4章で得られたクロスオーバーに関する法則は、phase-field modelで観測されているので、偏微分方程式の解析として理論化されるはずである。マクロダイナミクスの問題として意義深い問を提示することになる。この際には、第2章で得られた摂動解の構成を発展させたものになるだろう。

以上のように、本論文は、潜熱を伴う相成長について、重要な結果を提示していると判断される。統計力学模型やその時間発展の構成、マクロダイナミクスについての摂動論的構成、統計力学模型やマクロダイナミクスの数値計算など多数の方法がひとつのテーマに展開されているのも印象深い。本論文は、57ページにわたって丁寧に書かれており、今後このテーマを研究する際には参考になるであろう。

よって、本論文は博士(理学)の学位論文として価値あるものと認める。また、令和4年1月14日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行った結果、合格と認めた。

なお、本論文は、京都大学学位規程第14条第2項に該当するものと判断し、公表に際しては、当該論文の全文に代えてその内容を要約したものとすることを認める。

要旨公表可能日： 年 月 日以降