

氏 名	上 原 拓 也
学位(専攻分野)	博 士 (エネルギー科学)
学位記番号	エネ博第5号
学位授与の日付	平成10年11月24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	エネルギー科学研究科エネルギー変換科学専攻
学位論文題目	相変態過程における熱・力学的挙動の微視的および巨視的解析

(主査)

論文調査委員 教授 井上達雄 教授 松本英治 教授 牧野俊郎

論 文 内 容 の 要 旨

本論文は、相変態における熱・力学的挙動について、分子動力学法を用いたシミュレーションによって微視的見地からの考察を加え、従来の巨視的解析結果との関連性について論じた結果をまとめたもので、8章から成っている。

第1章は緒論であり、相変態に関する研究の背景と歴史と分子動力学法による微視的研究の必要性について述べ、本研究の目的を示している。第2章では、本論文で用いる分子動力学法の概要を示している。

第3章では、均質なモデルを用いた溶融・凝固に関する基礎的なシミュレーション結果について述べ、密度、ポテンシャルエネルギー、内部エネルギー、融点などの温度・圧力依存性などの解析を行っている。この結果、融点は圧力によって大きく変化するが、融解が起こる限界状態は、ポテンシャルエネルギーで表すとほぼ一定の値で決定されることを示し、加熱・冷却のシミュレーションでは、エネルギー供給法を用いることによって、変態潜熱が温度変化に及ぼす影響について検討している。さらに、結晶化に際しての温度依存性は冷却速度の影響を大きく受け、急冷した場合には結晶化が起こらず、非晶質化することを明らかにしている。

第4章では、モデルの一部を加熱することによって生じる熱伝導などの非平衡過程を取扱っている。まず、定常的なエネルギーの流れに関して、巨視的熱力学において経験的に用いられているFourierの法則が、原子レベルでの熱伝導においても成り立つことを確認し、非定常な熱伝導過程のシミュレーションでは、エネルギー供給による加熱方法では変態潜熱の影響が現れ、溶融時には温度が一時的に低下するというを確認している。さらに、熱応力についての解析を行い、系内に温度勾配が存在するときには、高温部に圧縮、低温部に引張りの応力が得られ、溶融した部分では応力が0となるなど、巨視的熱応力と同じ傾向を表すことを示している。

第5章では、固相変態の例として、fccとhcp材料に圧縮および引張りの応力を負荷したときに起こる構造相変態のシミュレーションを行っている。結晶構造の変形による幾何学的考察を行い、原子の複雑な運動やすべり面の発生など、分子動力学法でなくては再現できない結果を得ている。また、変態が起こる限界応力は温度によって大きく異なるが、ひずみなどの幾何学的条件がある限界状態に達したときに変態が起こることを確認し、溶融・凝固の場合と同様に相変態では応力や温度のような巨視的な状態量よりも、原子の相対位置またはそれによって直接決定されるポテンシャルエネルギーという微視的な値を用いて状態を表すことが重要であると述べている。

第6章では、巨視的な熱・力学との対応について、分子動力学法による熱伝導シミュレーションの結果と、現象論的熱伝導を表す熱伝導方程式の比較を行っている。等価比熱法によって潜熱の効果を考慮した熱伝導方程式の数値解と、分子動力学法による結果は、Fourier数という無次元時間を用いて比較するとかなりよい一致を見せることを確認している。また、微視的考察結果を巨視的解析に取入れるため、内部エネルギーをパラメータとし、ポテンシャルエネルギーによって溶融時の変化を表現する手法をエネルギー伝導方程式として提案し、溶融時の温度低下を再現している。また、相変態が起こらな

い場合は、この式は通常の熱伝導方程式と同じ結果を表すことから、熱伝導問題に広く適用できる可能性が認められる。

第7章では、工学的な問題への適用例として、相変化型光ディスクの記録過程に注目し、そのモデルとして薄膜表面の熔融・凝固シミュレーションを行っている。加熱による表面の熔融では表面形状に凹凸が現れるが、その原因は表面張力であるとし、連続体的観点から計算した結果と比較してよい一致を表すことを明らかにした。冷却過程では、はじめに結晶状態であった薄膜上に、熔融・急冷することによって非晶質の部分が得られること、またその非晶質部分は再加熱することによって結晶化することを示している。この結果は、これまで工学的な問題への適用例の少ない分子動力学法に対して、ここで挙げた相変化型光ディスクの例のように、分子動力学法による研究が工学的な製品開発の研究分野に応用されることの可能性を示している。

論文審査の結果の要旨

本論文は、相変態過程における材料の熱・力学的挙動を分子動力学法によってシミュレートし、それを連続体力学による解析結果と比較することによって、微視的および巨視的観点から検討した成果をまとめたものであり、得られた主な成果は次のとおりである。

1. 熔融・凝固の相変態過程における変態潜熱の発生、体積膨張および相変態の圧力依存性など、変態・熱・力学的連成挙動を、原子レベルで検討し、それらが原子の運動に基づいて現れていることを明らかにした。

2. 熱伝導過程では、Fourierの法則が原子レベルでも成立することを示すとともに、熱応力の解析を行い、連続体力学的に定義される熱応力と定性的に一致することを明らかにした。

3. 応力を負荷したときの固相変態のシミュレーションを行い、熔融・凝固も含めて、相変態は温度、応力の効果の他に、幾何学的な原子配列が一定の限界に達することによって発生することを明らかにした。

4. 熔融・凝固を伴う熱伝導過程について、エネルギー変化を表す形式で記述した熱伝導方程式に、ポテンシャルエネルギーという微視的変数を導入する方法を提案し、それによって分子動力学シミュレーションで確認された変態潜熱の効果が適切に再現できることを示した。

5. 実用問題への応用として、相変化型光ディスクに用いられている薄膜の熔融・凝固問題を取上げ、レーザー加熱によるアモルファス記録マークの記録、消去過程のシミュレーションを行い、これらの結果が工学的問題への適用例として有意義な成果をもつことを示した。

以上のように、本研究は微視的立場から相変態現象をとらえるとともに、それを巨視的現象と関連づけ、さらに実際的問題の解析への発展を意図したものであり、学術上、實際上寄与するところが少なくない。よって、本論文は博士（エネルギー科学）の学位論文として価値あるものと認める。また、平成10年10月6日、論文内容とそれに関連した試問の結果合格と認めた。