

氏名	みなみ 南	あき 暁	ひこ 彦
学位(専攻分野)	博士(理学)		
学位記番号	理博第3228号		
学位授与の日付	平成20年3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	理学研究科物理学・宇宙物理学専攻		
学位論文題目	Theoretical Study of Phase Transitions with Elasticity (弾性変形を伴った相転移の理論的研究)		

論文調査委員 (主査) 教授 小貫 明 教授 太田 隆夫 准教授 篠本 滋

論文内容の要旨

固体における相転移では、力学的な応答や形態が弾性場から大きく影響を受ける。本論文では大きく分けて二つのトピックに関して弾性場を伴う相転移の研究を行っている。

まず第一に転位の生成に関する理論がある。弾性場は2相合金の相分離の過程で大きな影響を与える。例えば、析出物の粗大化が止まったり、界面が異方性を持つのは弾性場の影響であるとする研究が過去になされてきた。しかし、それらの理論は線形な弾性理論に基づくもので、格子欠陥の生成は理論上取り入れることができない。本論文では2次元と3次元の系に関して、フェイズ・フィールド・モデル (phase field model) を構築し、秩序変数と非線形な弾性場との結合を考慮することで転位の生成を議論している。この理論は弾性エネルギーを、格子の周期性を反映させるために局所的な変形に関して周期的なポテンシャルとすることで、転位の生成を自然に取り込んだ形式となっている。本論文では時間依存ギンツブルグ・ランダウ型の方程式を数値的に解き、以下の結果を得た。1) 外的な変形や2段階の冷却によって転位は界面付近で生成され、それらは弾性的に柔らかい領域に進んでいく。2) 非線形弾性理論を3次元に拡張することで、転位のループ生成を再現することができた。3) 転位ループは2相の界面や系に元々存在する転位付近から生成される。

次に固体構造相転移における中間状態に関する理論がある。構造相転移では弾変形がドメインの内部やその周辺で発生するため、構造相転移を考える上で弾性場を除外することはできない。多くの構造相転移に特徴的な効果として、ある温度領域で秩序相と無秩序相が共存する「中間状態」が知られている。本論文では、軌道秩序化をする系において弾性場との結合を取り入れることで中間状態を数値的に再現した。まず、ヤーン・テラー効果の存在する固体を想定し、軌道秩序を記述する変数を定義し、その弾性場との結合を導入した。この秩序変数に関する時間依存ギンツブルグ・ランダウ方程式を解くことで、ある温度領域で中間状態を再現することに成功した。また、これらの相の状態は近似的な解として解析的に記述することができ、それによって以下の結果を得た。(i) 共存温度幅は結合定数を大きくすると広がる。(ii) 秩序相の体積比率は温度を下げるに従って線形に増加する。(iii) 数値計算の結果と整合した相図が解析的に得られた。

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な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・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。まず一つは転位の生成に関する理論と計算機実験がある。転位は金属内での格子

のずれを伴う局所変形でありその動的過程の記述は極めて難しい。3次元系で非常に多くの粒子を含む体系でなければ有意義な結果は得られないからである。南氏の仕事は、非常に巧妙に粗視化された弾性エネルギーを使い効率的に大きな体系で転位の生成過程を実現したものである。数々の転位の動的過程を調べることに成功した。1) 一軸的に金属を引っ張ると、まず大量に転位網が発生し塑性変形が起こる。2) 金属に前もって転位が存在するとそこが種となり新しい転位の源になる。3) また合金が相分離して低温相のドメインが存在すると、転位は界面近傍で発生して軟らかい母相に進展する。4) ドメインが沢山ある場合は、転位は網目状に母相を埋めていく。5) さらに長時間計算を続行すると、転位に影響を受けた相分離が進行する。以上の効果のうち3) - 5) は南氏が最初に計算機で実現した。3) と 4) はこういった効果自体が知られていなかった。このように、南氏の理論・計算は画期的なもので、貴重な新しい知見を与えている。

次に二つめは、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形態形成過程に応用した。金属系についてはこのような動的効果についてたちいった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。