

氏 名	さか い かず しげ 阪 井 一 繁
学位(専攻分野)	博 士 (情 報 学)
学 位 記 番 号	論 情 博 第 57 号
学位授与の日付	平 成 17 年 1 月 24 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 4 条 第 2 項 該 当
学 位 論 文 題 目	A Study of Phase Field Models for Phase Change of Alloys (合金の相変化に対するフェーズフィールドモデルの研究)
論文調査委員	(主 査) 教 授 野 木 達 夫 教 授 藤 坂 博 一 教 授 磯 祐 介

論 文 内 容 の 要 旨

本論文は物質の相変化現象の巨視的側面(数 μm ～数 mm スケール)の記述に有効とされるフェーズフィールドモデルを、従来の純物質に対するものから、合金などの混合系の相変化現象を記述するものに拡張した新たな数理モデルを提案し、それを用いた計算機シミュレーション結果を報告したものである。

材料創製の現場などで扱われる物質の多くは合金であり、相変化の途上で組成が偏ることで形成される合金特有の微細組織は材料の特性を左右し、新たな機能を生む基盤にもなるので、その形成過程を調べることは重要な研究課題であると位置づけている。ところが合金の相変化の過程は、融解、凝固、化合物生成、相分離といった現象が複雑に絡み合うプロセスである。特に動的変化の観察が困難であるために、その詳しいメカニズムはほとんど解明されていない。本論文のフェーズフィールドモデルはそのような複雑な現象を解明する数理的アプローチの基本モデルになるものである。

序章で、歴史的背景を含め、フェーズフィールドモデルの骨子を述べ、その特徴である(1)物質の「相」を熱力学的状態の一つと考え、フェーズパラメータと呼ぶ現象論的変数を用いて相状態を表現し(2)その変数を含んだ自由エネルギーの減少過程としてフェーズパラメータの変化を扱うことを基本にしながら、合金の相変化にも通用する拡張を図ることが本論文の目的であることを述べている。

1章は2成分合金の等温相変化のフェーズフィールドモデルを提案している。この章ではモデル導出の詳細には触れず、従来純物質の相転移現象のモデルとして提案されたフェーズフィールドモデルを混合系の相変化現象のモデルに拡張するための方針が立てられる。ここでのモデリング手法が次章以降の議論の共通の基礎になっている。系の局所的自由エネルギーをフェーズパラメータと組成比の2変数でもって表し、それらを積分した汎関数を系の自由エネルギーとする。自由エネルギーの勾配系として偏微分方程式モデルを導出している。自由エネルギーの関数形の選択によって代表的な合金の相変化が定性的に再現されることをシミュレーションによって確認している。

2章は1章での2成分合金のフェーズフィールドモデルにおける自由エネルギーの決め方の詳細を述べている。合金を格子系と考え、格子点に配置された成分粒子間の最近接相互作用エネルギーから組成比の関数として自由エネルギーを決めるという正則溶体近似を採用している。その際、相互作用エネルギーにフェーズパラメータ依存性を導入することで相変化を扱うことを可能にしている。フェーズパラメータと相互作用エネルギーの大きさの与え方によって相変化のさまざまな「型」が再現できることになる。実際、シミュレーションによって一致溶融型(congruent melting)と共晶型(eutectic)の合金に特徴的な微細組織を再現している。

3章は多成分合金への拡張を行っている。3成分以上になると組成比を表す変数が複数になるが、組成比の和が常に1である制約を満たすように、「射影」勾配系という方法を考案している。その実現例として3成分合金の相変化にともなうモザイク状の相分離組織の形成過程をシミュレーションで確認している。

4章は、多成分であるのみならず多相の相変化過程へのモデル拡張を図っている。現実の合金の相変化過程は安定相、準安定相を含め多数の相が介在する複雑な現象であり、それにも対応させたものである。3章で考案した射影勾配系のアイデア

アを応用している。一般的2成分3相系および実際の材料合成例に即したシミュレーション実験を行っている。後者では実際に観測された微細組織の形状と目的材料の合成量の経時変化において定性的再現に成功している。この結果は材料合成研究において未解決の課題であった反応機構を解明するきっかけを与えるものであり、数理モデルが材料合成の補助的役割を果たすだけでなく、シミュレーション結果をフィードバックすることで材料研究における主要な役割も果たす可能性を示したことになっている。

5章で論文内容を総括し、提案モデルのさらなる応用と将来的発展の可能性を述べている。

論文審査の結果の要旨

本論文は従来の純物質に対するフェーズフィールドモデルを拡張し、合金などの混合系の相変化現象を記述する新たな数理モデルを提案し、計算機シミュレーションによって多様な組織形成過程が再現可能であることを示したものである。

論文では一貫して、フェーズフィールドモデルの骨子である(1)フェーズパラメータと呼ぶ現象論的変数を用いて「相」状態を表現し(2)その変数を含んだ自由エネルギーの減少過程を扱うことを基本にしながら、順次多成分、多相相変化過程へ拡張を図っている。

出発点に、2成分合金の等温相変化のフェーズフィールドモデルをおき、そこで系の局所的自由エネルギーをフェーズパラメータと組成比でもって表し、それらを積分した汎関数を系の自由エネルギーとし、その勾配系として偏微分方程式モデルを導出する枠組みを呈示している。

自由エネルギーの決め方が重要になるが、合金を格子系と考え、格子点に配置された成分粒子間の最近接相互作用エネルギーから組成比の関数として自由エネルギーを決めるという正則溶体近似を採用している。その際、相互作用エネルギーにフェーズパラメータ依存性を導入することで相変化を伴った現象まで扱えるようにしたところが著者の貢献の要である。フェーズパラメータと相互作用エネルギーの大きさによって相変化のさまざまな「型」が再現できることになった。実証例としてシミュレーションによって一致溶融型 (congruent melting) と共晶型 (eutectic) の合金に特徴的な微細組織を再現することに成功している。

3成分以上の多成分合金を扱うためには組成比の和が常に1である制約を満たすように工夫をしなければならないが、そのために「射影」勾配系という方法を考案した。実現例として3成分合金の相変化にともなうモザイク状の相分離組織の形成過程をシミュレーションで確認している。

現実の合金の相変化過程は安定相、準安定相を含め多数の相が介在する複雑な現象である。それらにも対処するために、多成分かつ多相の相変化過程へモデル拡張を図っている。一般的2成分3相系および実際の材料合成例に即したシミュレーション実験を行っている。後者では実際に観測された合金の微細組織の形状と目的材料の合成量の経時変化において定性的再現に成功している。

以上の通り、合金の形成過程をも解析しうる可能性を与える数理モデルを提案したものであり、数理モデル自身の発展に寄与するとともに、材料科学分野への応用の可能性を与えた意味は大きい。

よって、本論文は博士(情報学)の学位として価値あるものと認める。

また、平成16年12月21日に実施した論文内容とそれに関連した試問の結果合格と認めた。