

氏名	プーワデッチ スティパンヤー
学位の種類	博士(工学)
学位記番号	第 696 号
認定課程名	防衛大学校理工学研究科後期課程
学位授与年月日	令和4年5月20日
論文題目	3次元ランダム格子上のセル・オートマトンモデルによる A-B2 元合金の核成長過程に関する研究
審査担当専門委員	(主査) 東京大学教授 志村 努 東京大学教授 篠田 裕之 東京大学教授 長谷川 幸雄

審査の結果の要旨

本研究は、A-B2 元合金系の相分離過程を実現する Oono と Puri の CDS モデルを、密度揺らぎのある 3 次元ランダム格子上で実現できるようにセルオートマトン・モデルを改良し、そのモデルを、急冷した均一混合状態での A-B2 元合金系の人工的な単一及び複数のエンブリオからの核成長過程と核成長を調べ、その一般的な性質を考察したものである。また同時に対応する相分離過程中の部分構造因子を求め、そのスケーリング性質についても考察している。

まず、人工的にエンブリオを 1 つおいた場合のバイノーダル領域でシミュレーションを実施し、拡散律速成長過程の範囲は系の組成に依存すること、低濃度側の組成では拡散律速成長過程の範囲が狭くなること、界面の厚さは成長が最終段階になると特徴的な変化が起こることを明らかにした。

次に、多数の核がある場合について、核同士が影響し合わない場合に対する違いを調べている。核成長の全過程にわたって、核半径のベキ則の指数の動的变化、核数、表面自由エネルギー、核の体積、界面の厚さの時間変化、LSW 理論による核の成長の範囲を考察した。その結果、拡散律速成長過程の範囲、いわゆる LSW 成長のステージは、平均半径によるベキ則の指数が $\phi \sim 1/2$ と 1 エンブリオの場合ではみられなかった指数 $\phi \sim 1/3$ を両方持つ領域が観測された。

また、密度揺らぎが存在する粗視化モデルに対して、局所的濃度差から直接 Bhatia と Thornton (BT) の構造因子 $S_{NN}(Q)$ 、 $S_{CC}(Q)$ 、 $S_{NC}(Q)$ を求める方法を導出し、そこから 2 成分系の部分構造因子を導いた。

本研究のモデルにより、核成長は初期ステージと LSW 成長のステージの 2 つの段階があ

ると結論づけている。LSW 成長のステージで起こる成長過程は組成と初期のエンブリオの数によって大きく変わり、拡散率速成長過程あるいは粗大化過程のみ存在する場合や、拡散率速成長過程と粗大化過程が存在する場合があると結論づけた。

これらの結果は、近年とみに重要度が高くなっているインデンテーションに関し新たな知見を示したものである。よって、学術的価値は高く、博士(工学)として合格と判定した。