

論文の内容の要旨

1 申請者

防衛大学校 プーワデッチ スティパンヤ

2 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-B 2元合金の核成長過程

3 論文の内容の要旨

近年、「計算組織学」と呼ばれる材料組織形成過程および形成組織安定性をコンピュータで解析する分野が計算機処理能力の向上に伴い大きな勢いで拡大してきた。2相分離する2元合金の組織形成のシミュレーションでは、Cahn-Hilliard 方程式(CH)やTime-dependent Ginzburg-Landau(TDGL)方程式に基づいたフェーズフィールド法やモンテカルロ法が使われるが、3次元におけるシミュレーションで得られた組織や構造と実験結果との定量的な比較においては未だ十分ではないと考えている。1987年にOonoとPuriはcell-dynamical system model(CDSモデル)を用いて、スピノーダル分解の過程を2次元格子上でのセルオートマトン(CA)法として実現し、相分離過程の構造特性などを調べている。相分離過程には従来、スピノーダル分解と核生成-成長型分解の2つの機構があるとされてきたが、最近の研究から基本的には区分する必要はないと考えられようになってきた。しかし、形成される組織は両者で異なっているため、今日の研究報告でも、別々にその相分離過程は議論されている。CDSモデルは短時間で核成長の初期の段階から終段階までシミュレーションできるにもかかわらず、CDSモデルを現実の合金に対して適応した例はほとんどなく、モデルの性質の詳細についてはあまり細かく調べていない。さらに、密度揺らぎをもつ3次元格子上での相分離過程を調べた研究例はほとんどない。

そこで、OonoらのCDSモデルを使ってそのモデルの核成長過程の全貌を詳細に調べ、そこから核成長の一般的な性質を明らかにできると考えた。本研究は、A-B 2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-B 2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することを目的とした。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た。

核同士が影響を及ぼさない希薄な条件での核成長過程を調べるために、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、核成

長の全過程を考察した。得られた結果より、核半径のベキ則の指数の動的変化、界面の厚さの動的変化、核の成長段階、そしてテコの原理から推定できる最終段階での核の半径を考察した。その結果、拡散律速成長過程の範囲は系の組成に依存することがわかった。また、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がわかった。さらに、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がわかった。

核同士が影響し合わない場合の核成長と比べて、多数の核がある場合には、核同士がどのように成長を妨げ、あるいは成長を助けるかを調べ、1 エンブリオでの初期条件の場合で見られた核半径の動的発展の指数についても評価した。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変化、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、そして 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。古典的核形成理論と比較すると、それらの指数はそれぞれ拡散律速成長過程、粗大化過程に対応すると思われる。

密度揺らぎが存在する粗視化モデルに対して、相分離過程中的粒子系の部分構造因子を求めることに大きな意味があると考え、粗視化モデルの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。具体的に BT の構造因子と Faber と Ziman (FZ) と Ashcroft と Langreth (AL) の部分構造因子の時間変化を計算し、導出した理論が正しいか確認した。これまで多くの研究者が相分離過程にみられる構造関数の一次のモーメントのベキ則について報告しているが、それが正確な部分構造因子として本当に成立するのか確かめるために、 β 相の構造因子 $S_{22}(Q)$ の一次のモーメントのベキ則の指数を計算した。その $S_{22}(Q)$ の 1 次モーメントの時間変化では、どの場合でもステップ時間 0-100 まででは、ベキ則の指数はゼロとみなせる。ステップ時間 1,000-10,000 では、エンブリオの数が 1, 5 個について指数 ~ 0.5 を示した。また、エンブリオの数が 400 個以上でみられる小さな指数で、 $1/3 (\bar{\Psi} = -0.5)$ 、 $1/4 (\bar{\Psi} = -0.6)$ 、 $1/5 (\bar{\Psi} = -0.7)$ を示した。それらの指数は、ステップ時間 10,000 以降まで続く観測された。

本研究のモデルでは、エンブリオからの核成長としては 25 at%B にスピノードル線との交点、4.5 at%B にバイノードル線との交点が存在する。また、0-50 at%B の組成での臨界エンブリオ半径を決定できた。このモデルの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。この 2 つのステージの間をつなぐ過渡的遷移と成長終了への遷移が存在する。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。今後の展望については、初期段階からエンブリオをおかずに、自発的に核形成が発生し、時間経過につれて核成長が進行する均一核形成・成長過程の全貌を詳細に調べることを望んでいる。

4 キーワード（5個程度）

3次元ランダム格子、セル・オートマトンモデル、相分離現象、核形成・成長過程、部分構造因子