

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	熱力学的状態図計算における短範囲規則性の定式化法
Title(English)	
著者(和文)	阿部太一
Author(English)	Taichi Abe
出典(和文)	学位:博士(工学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:乙第4174号, 授与年月日:2019年3月31日, 学位の種別:論文博士, 審査員:梶原 正憲,木村 好里,曾根 正人,中辻 寛,合田 義弘
Citation(English)	Degree:Doctor (Engineering), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:乙第4174号, Conferred date:2019/3/31, Degree Type:Thesis doctor, Examiner:,,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	論文要旨
Type(English)	Summary

(論文博士)
(Dissertation Doctorate)

論 文 要 旨 (和文2000字程度)

Dissertation Summary (approx. 2000 characters in Japanese)

報告番号 For administrative use only	乙 第	号	氏 名 Name	阿部 太一
---	-----	---	-------------	-------

(要 旨)

本論文は、「熱力学的状態図計算における短範囲規則性の定式化法」と題し、全10章から構成されている。従来の状態図計算法では、原子のランダム配置を仮定したギブスエネルギー関数に基づく熱力学モデルが用いられてきた。しかし、従来型の熱力学モデルは、規則-不規則変態を適切に表現することができない。また、従来型の熱力学モデルによる計算状態図は、高温度域において液相の二相分離領域が出現し実験状態図と矛盾する場合がある。本研究は、上記の熱力学モデルの諸問題を解決するために、ギブスエネルギーの記述法を高度化し、固相や液相のギブスエネルギーに及ぼす短範囲規則性の効果について定量的に検討している。その結果、上記の短範囲規則性を定式化するための独自の手法を開発し、実験状態図を精度良く再現するための熱力学的状態図計算法を確立している。第1章～第10章の内容を以下に示す。

第1章の「緒論」では、平衡状態図を計算によって構成するための熱力学的手法の歴史を概観し、本論文で取り扱う合金系の平衡状態図や熱力学性質について述べている。

第2章の「既往の熱力学モデル」では、物質のギブスエネルギーを記述する従来の主要な熱力学モデルである正則溶体モデル、副格子モデル、コンパウンドエネルギーフォーマリズム、スプリットコンパウンドエネルギーフォーマリズム等について概観し、これらの熱力学モデルにおける短範囲規則性の表記法の問題点を指摘している。

第3章の「面心立方格子の短範囲規則性」では、第2章で指摘した熱力学モデルの問題点を克服するために、第1近接対の効果に注目し、対近似モデルとスプリットコンパウンドエネルギーフォーマリズムの熱力学パラメーターを比較・検討することにより、面心立方格子の固相(FCC相)の短範囲規則性を記述する独自の定式法を構築している。この定式法を用いると、FCC相の規則-不規則変態の次数や相境界の定性的形状に対する実験結果を適切に再現することができる。

第4章の「体心立方格子の短範囲規則性」では、第3章の成果に基づき、第2近接対の効果

を新たに考慮することにより、体心立方格子の固相(BCC相)の短範囲規則性を記述する定式法を構築している。その結果、FCC相とは異なり、BCC相では、規則-不規則変態に及ぼす短範囲規則性の影響は限定的であることを見出している。この成果は、従来の実験結果とよく対応している。

第5章の「液相の短範囲規則性」では、正則溶体モデルに基づき、液相の短範囲規則性を記述する定式法を構築している。その際、Kopp-Neumann則により相互作用係数の温度依存性を表現する従来の正則溶体モデルとは異なり、絶対温度 T の逆数の T^{-1} 項を相互作用係数の温度依存性表現に加えると、液相の短範囲規則性が記述できることを見出している。この定式法を用いると、液相の二相分離領域の出現条件を定量的に評価することができる。

第6章の「侵入型固溶体の拡張型正則溶体モデル」では、第3章～第5章の成果に基づき、置換型副格子と侵入型副格子の二つの副格子から成る侵入型固溶体の短範囲規則性を記述する定式法を構築している。この定式法では、従来の正則溶体モデルを拡張することにより、相互作用係数を変換するための関係式を導出している。

第7章の「Cu-Pt二元系における短範囲規則性」では、FCC相と液相の短範囲規則性の定式法を用い、実験的に決定されたCu-Pt二元系の平衡状態図を計算により構成している。その結果、短範囲規則性を考慮していない従来の計算結果とは異なり、本計算結果は各相の相関係ばかりでなく、各相の熱力学物性値を精度良く再現できることを明らかにしている。

第8章の「Ir-Nb二元系における短範囲規則性」では、第7章と同様に、FCC相と液相の短範囲規則性の定式法を用い、実験的に決定されたIr-Nb二元系の平衡状態図を計算により構成している。その結果、Cu-Pt二元系と同様に、従来の計算結果とは異なり、本計算結果は各相の相関係や熱力学物性値を精度良く再現できることを見出している。

第9章の「Al-Ir二元系における短範囲規則性」では、BCC相と液相の短範囲規則性の定式法を用い、実験的に決定されたAl-Ir二元系の平衡状態図を計算により構成している。その結果、Cu-Pt二元系やIr-Nb二元系と同様に、本計算結果は各相の相関係や熱力学物性値を精度良く再現できることを明らかにしている。

第10章の「結論」では、以上の成果を総括している。

備考：論文要旨は、和文2000字と英文300語を1部ずつ提出するか、もしくは英文800語を1部提出してください。

Note: Dissertation summaries must be written in either of the following formats: (A) both in Japanese (approx. 2000 characters) and in English (approx. 300 words), or (B) in English (approx. 800 words).

注意：論文要旨は、東工大リサーチリポジトリ (T2R2) にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。

Important: Dissertation summaries will be published online on the Tokyo Tech Research Repository (T2R2). Do not include information treated as confidential under certain circumstances.

(論文博士)
(Dissertation Doctorate)

論 文 要 旨 (英 文) (300語程度)

Dissertation Summary (approx. 300 words in English)

報告番号 For administrative use only	乙 第 号	氏 名 Name	阿部 太一
<p>(Summary)</p> <p>The random mixing of atoms on lattice sites has been assumed in the previous thermodynamic models because of its simplicity. This random assumption, however, causes the following significant drawbacks: (a) incorrect degree of the order-disorder transition in solid phase, and (b) appearance of contradictory miscibility gap in liquid phase at high temperatures. To overcome such drawbacks, influence of short range ordering on the molar Gibbs energy of each phase was accurately formulated in the present study. The formulation was conducted for body-centered cubic (BCC), face-centered cubic (FCC) and liquid (L) phases. For the BCC and FCC phases, distribution functions of like-pair and unlike-pair were considered to evaluate the deviation from randomness. On the other hand, for the L phase, the so-called T^{-1} term was included for the formulation, where T denotes the absolute temperature. Owing to the formulation, the degree of the order-disorder transition is correctly reproduced for the BCC and FCC phases. For the L phase, the contradictory miscibility gap at high temperatures can be prevented appropriately. The formulation was utilized to calculate equilibrium phase diagrams in the binary Cu-Pt, Ir-Nb and Al-Ir systems. Here, the constitutional phases are as follows: the $A1$, $L1_1$, $L1_2$ and L phases in the Cu-Pt system; the $A1$, $A15$, $L1_0$, $L1_2$, α_2, σ and L phases in the Ir-Nb system; and the $A1$, $A2$, $B2$, $L1_0$, $L1_2$, line compound and L phases in the Al-Ir system. Experimentally determined phase diagrams in these binary systems were satisfactorily reproduced by the calculation.</p>			

備考：論文要旨は、和文2000字と英文300語を1部ずつ提出するか、もしくは英文800語を1部提出してください。

Note: Dissertation summaries must be written in either of the following formats: (A) both in Japanese (approx. 2000 characters) and in English (approx. 300 words), or (B) in English (approx. 800 words).

注意：論文要旨は、東工大リサーチリポジトリ (T2R2) にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。

Important: Dissertation summaries will be published online on the Tokyo Tech Research Repository (T2R2). Do not include information treated as confidential under certain circumstances.