

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)	審査の要旨
Type(English)	Exam Summary

論文審査の要旨及び審査員

(2000字程度)

報告番号	乙 第	号	学位申請者	阿部 太一	
論文審査員		氏 名	職 名	氏 名	職 名
	主査	梶原 正憲	教 授	合田 義弘	准教授
		木村 好里	教 授		
		曾根 正人	教 授		
		中辻 寛	准教授		

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、規則-不規則変態の適切な記述や液相の相安定性の再現が困難な既往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を解析的に検討した結果について述べたものであり、全10章から構成されている。

第1章「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、本論文で対象とする合金系の平衡状態図や熱力学性質について解説し、本論文の構成について述べている。

第2章「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、コンパウンドエナジーフォーマリズム、スプリットコンパウンドエナジ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記述法の問題点を指摘している。

第3章「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ナジ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化法を構築している。この定式化法を用いると、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「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近接対の効果をも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化法を構築している。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「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化法を構築している。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。この定式化法を用いると、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「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化法を構築している。この定式化法では、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「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化法を用い、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「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化法を用い、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「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化法を用い、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「結論」では、以上の成果を総括している。

以上を要するに本論文は、構成相の相安定性や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できる熱力学的状態図計算法を確立しており、工学上および工業上貢献するところが極めて大きい。よって本論文は、博士(工学)の学位論文として十分な価値のあるものと認められる。

注意：「論文審査の要旨及び審査員」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。