# 運転する転位に対する flexible boundary condition

大沢,一人 九州大学大学院総合理工学研究科高エネルギー物質科学専攻

蔵元, 英一 九州大学大学院総合理工学研究科高エネルギー物質科学専攻

https://doi.org/10.15017/17423

出版情報:九州大学大学院総合理工学報告.18(4), pp.311-322, 1997-03-01.九州大学大学院総合理工 学研究科 バージョン: 権利関係:

## 運動する転位に対する flexible boundary condition

大 沢 一 人\*・蔵 元 英 一\* (平成8年11月30日 受理)

#### **Flexible Boundary Condition for Moving Dislocation**

#### Kazuhito OHSAWA and Eiichi KURAMOTO

The displacement field around the dislocation is a long range field which falls away inversely with distance from the dislocation line, so that, with rigid boundary condition, the imaginary force from the boundary affects the result in the simulation for dislocation. Flexible boundary condition for static dislocation has developed to avoid such boundary effect. With the flexible boundary condition, the displacements of atoms in the boundary region change according to the state of whole system. Various modified versions of the boundary conditions have been applied to the calculations of the core structures of the dislocations and the Peierls stresses. Now, new flexible boundary condition is obtained for the moving straight dislocation, which is introduced by Lagrangian princlple. As an example, the glide motion of the screw dislocation are simulated on a two dimensional lattice with the flexible and the rigid boundary conditons. The effects of model size, boundary conditions, and potential will be discussed. The results of the system with low Peierls stress with the flexible boundary condition are independent of the model size used in the simulations, and in agreement with the large rigid boundary model.

#### 1. 序 論

格子欠陥のまわりの原子配置を知ることはその欠陥 の性質を把握し、さらに材料の性質を知るためにも重 要である.今日,STM など直接原子の配置を決定す る実験手段は開発されているが、一般には原子の位置 を直接観察することはできない. そこで, 原子間ポテ ンシャルとして適当なものを選び計算することが盛ん に行われるようになった. 点欠陥など有限な大きさの 格子欠陥については欠陥から十分遠方の原子配置は結 晶のものと同じであることを仮定し、欠陥近傍の原子 に対してのみ原子間ポテンシャルに従った緩和を行う 方法が一般に行われている.転位については少し複雑 で遠方の原子の変位は線形連続弾性論のものを仮定し, 転位に近い領域の原子については原子間ポテンシャル に従った緩和を行うという方法がある.この弾性論の 解に固定した境界条件は rigid boundary (固定境界) と呼ばれている.しかし,転位のまわりの変位場は r<sup>-1</sup> で減衰する長距離場である.また,線形連続弾性 論では格子の不連続性や非線形性は考慮されていない. そのため固定境界を課す計算のやり方では正確な転位 芯構造を計算できない、特に、固定境界から転位に作 用する鏡像力は強い斥力としてはたらくことが知られ ている. 固定境界でも大きなサイズで計算すれば境界 まで遠くなるため鏡像力は小さくなるが、それでも計

算機の能力のため限界がある. そこで、境界からの影 響を少なくするために工夫された計算方法が flexible boundary (可変境界) である. この方法では転位のま わりの変位場を弾性論の解で固定せず、状況に応じて 境界原子も一定の制約のもとに動くようにしたもので ある. 主に3つの流儀があってそれぞれ Flex-S<sup>1)</sup>, Flex-I<sup>2)</sup>, Flex-Ⅱ<sup>3)4)</sup>と呼ばれている.

格子欠陥の分野でも将来は分子動力学的計算が行わ れ,運動する転位と点欠陥の相互作用といった計算が されるようになることが予想される. ところが、運動 する転位は静止したものよりも強い影響を境界から受 ける恐れがある. そこでわれわれは運動する転位に対 しても flexible boundary を導入してそのような影響 を少なくできないかと考えた. そのため, Sinclair が 開発した静的問題に対する flexible な境界条件 Flex-S を発展させ、動的な問題に応用するようにし た. Flex-S では転位近傍の領域と境界領域の弾性エ ネルギーを同時に極小にすることで flexible な境界条 件を導入したが、われわれは Lagrangian を最小にす ることで動的な問題に対する flexible な境界条件を導 入する.

運動する転位の例として 2 次元格子上の螺旋転位の 運動をシミュレーションする. それをもとに境界条件 や計算に使うモデルサイズ、原子間ポテンシャルの影 響について議論する.

\*高エネルギー物質科学専攻



Fig. 1 Concentric arrangment of regions for the flexible boundary model.

#### 2. flexible な境界条件

#### 2.1 格子中の転位モデル

われわれは 2 次元問題, すなわち直線転位の運動を 扱うことにする. flexible な境界を導入するにはまず **Fig. 1** のように転位を中心として格子を 3 つの領域に 分割する. 転位芯を含む領域 I では弾性論の解が適用 できないため一般には非線形な原子間ポテンシャルに 従って原子の挙動が決まる領域である. 領域 II は境界 領域で flexible な境界とはこれに属する原子の座標が 計算の過程で変化することで導入される. 領域 II は境 も外側の領域でこの領域に属する原子は一部を除いて 計算の過程に関与しない. 原子間力は有限の cut-off があることを仮定する. 領域 II の厚さはその cut-off 長より大きくするものとする. すなわち領域 I と III の 原子が直接力を及ぼし合うことはない.

2次元格子上の *i* 番目の原子の *j* 方向の変位成分を  $u_{ij}$ , その原子にはたらく力を  $f_{ij}$  とする. 正確には 2 次元問題なので変位とは *z* 軸に平行な原子列の変位, 力とは単位長さあたりの原子列にはたらく line force というべきである. 転位線の位置を  $X_i$  ( $X_1 = X, X_2 = Y$ ) とする.

#### 2.2 静的転位に対する flexible な境界条件

ー様な外部応力中でしかも静止した転位に対する flexible な境界条件について述べる.これから述べる ことは Sinclair の研究"を参考にしている.

領域Ⅰの原子は通常の緩和計算で平衡位置が決められる.しかし、領域ⅡとⅢに属する原子の変位は次のような式で表されることを仮定する.

$$u_{ij} = u_{ij}^{0}(X_{l}) + \sum_{k} S_{k} u_{ij}^{k} + u_{ij}^{ex}, \qquad (1)$$

ここで  $u_{ij}^{0}$  は転位が  $X_{i}$  にある時の線形連続弾性論 から導かれる変位場.  $u_{ij}^{0}$  は弾性論の解よりも高次の 微小項,  $S_{k}$  はその係数. uff は外部応力によって加 えられる一様な歪に起因する変位である. 領域 II, II に属する原子の変位は変数  $X_{i}$ ,  $S_{k}$  が変化することに よって変わる. 弾性論の解  $u_{ij}^{0}$  は  $X_{i}$  に依存するが, 高次の項  $u_{ij}^{0}$  は依存しないことを仮定する. すなわち, 転位が移動しても  $u_{ij}^{0}$  は変化しない. この仮定は奇妙 かもしれないが計算の簡略化のために導入した. また, 高次の項の関数形については外力 0 の場合は Sinclair <sup>1)</sup> によってはっきりと示されている. しかし, 高次の 項を何項までとるか, 外力がはたらくときの関数形な どついてはある程度の任意性がある. 具体的なことは 後に述べる.

Flexible な境界条件での計算では原子の平衡状態の 計算に寄与するのは領域 Iと II に属する原子だけであ ることを仮定する. その 2 つの領域の全弾性エネル ギーを Uとする. 領域 I の原子の平衡条件は

$$f_{ij} = -\frac{\partial U}{\partial u_{ij}} = 0 \tag{2}$$

一方,変数  $X_i$ ,  $S_k$  はこれを解析力学の一般座標と みなし平衡条件は次のようになる.

$$f_{X_{i}} = -\frac{\partial U}{\partial X_{i}} = -\sum_{i \in II, j} \frac{\partial U}{\partial u_{ij}} \frac{\partial u_{ij}}{\partial X_{i}} = \sum_{i \in II, j} f_{ij} \frac{\partial u_{ij}^{0}}{\partial X_{i}} = 0$$
  
$$f_{S_{k}} = -\frac{\partial U}{\partial S_{k}} = -\sum_{i \in II, j} \frac{\partial U}{\partial u_{ij}} \frac{\partial u_{ij}}{\partial S_{k}} = \sum_{i \in II, j} f_{ij} u_{ij}^{k} = 0$$
(3)

ここで式(3)の和は領域 II のすべての原子について とるものとする.  $f_{X_i}$ ,  $f_{S_k}$  はそれぞれ  $X_i$ ,  $S_k$  に共役な 一般力である. 静的な計算の場合,平衡位置を求める には適当な初期条件から緩和計算を始め,式(2)と(3) がある精度で成り立つまで逐次近似を繰り返す. 領域 IIIの原子は領域 II の原子にはたらく力を求めるためだ けに使われる.

#### 2.3 動的転位に対する flexible な境界条件

静的計算では弾性エネルギー Uを最小にすること で flexible な境界条件を導入した.動的な場合はこれ を作用を最小にすることに置き換える. Lagrangian は

$$L = \frac{m}{2} \sum_{i \in I \cdot II, j} \dot{u}_{ij}^2 - U(u_{ij}), \qquad (4)$$

である.ここで和は領域 I とⅡのすべての原子に対してとる.領域 ⅡとⅢの原子変位は式(1)で定義されて

$$\dot{u}_{ij} = \frac{\partial u_{ij}^o}{\partial X_l} \dot{X}_l + \sum_k \dot{S}_k u_{ij}^k \tag{5}$$

である. Lagrange の運動方程式は

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right) = \frac{\partial L}{\partial q} \tag{6}$$

である.これより領域Iの原子の運動については Newton の運動方程式になる.

$$m\ddot{u}_{ij} = f_{ij} \tag{7}$$

ー般座標 X<sub>l</sub>, S<sub>k</sub> については Lagrange の運動方程式 より

$$m\sum_{i\in II,j} \frac{\partial u_{ij}^{o}}{\partial X_{l}} \left( \sum_{l'} \frac{\partial u_{ij}^{o}}{\partial X_{l'}} \dot{X}_{l'} + \sum_{k'} u_{ij}^{k'} \dot{S}_{k'} \right) = \int f_{X_{l}} dt$$

$$m\sum_{i\in II,j} u_{ij}^{k} \left( \sum_{l'} \frac{\partial u_{ij}^{o}}{\partial X_{l'}} \dot{X}_{l'} + \sum_{k'} u_{ij}^{k'} \dot{S}_{k'} \right) = \int f_{S_{k}} dt$$
(8)

である. ここで指数 i の和は領域 II の原子についてとる.  $f_{X_i}$ ,  $f_{S_k}$  は式(3) で定義した一般力である. 式(8) は一般速度  $X_i$ ,  $S_k$  についての連立方程式とみなすことができる. これを解くために次のような行列 M を定義する.

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} a_{ll'} & a_{lk'} \\ a_{kl'} & a_{kk'} \end{pmatrix}, \tag{9}$$

ここで行列 M の成分については

$$a_{ll'} = m \sum_{i \in II, j} \frac{\partial u_{ij}^{\circ}}{\partial X_l} \frac{\partial u_{ij}^{\circ}}{\partial X_{l'}}$$
(10)

などと定義する.式(8)は適当な初期条件を与えら れれば

$$\begin{pmatrix} \dot{X}_{l}(t) \\ \dot{S}_{k}(t) \end{pmatrix} = \mathbf{M}^{-1} \begin{pmatrix} \int_{0}^{0} f_{X_{l}} dt \\ \int_{0}^{0} f_{S_{k}} dt \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \dot{X}_{l}(0) \\ \dot{S}_{k}(0) \end{pmatrix}$$
(11)

となる. 転位の運動を flexible な境界条件で解くには 式(7)に加えて(11)を同時に計算すればよい.

#### 3. 螺旋転位の運動シミュレーション

#### 3.1 2次元格子上の螺旋転位

転位の運動計算に flexible な境界条件が有効である か調べるために Fig. 2 のような正方格子上の螺旋転 位のすべり運動を例にとってシミュレーションを行っ た. 異なるモデルサイズで計算した結果や rigid な境 界を課した場合の結果を比較する. 2 次元格子の原子 列は 2 軸方向にのみ変位するものとする. 格子定数



Fig. 2 Screw dislocation on a two dimensional rectangular lattice.



Fig 3 Inter-atom-row potentials used in the simulations.

を  $a_x$ ,  $a_y$ ,  $a_z$ , ただし  $a_x = a_y$  とする. また, 原子列 間ポテンシャルは隣接する 4 つの原子列の間にのみ作 用し, その力の大きさは隣り合う2つの原子列の z 方 向の相対変位にのみ依存するものとする. 計算に用い たポテンシャルは **Fig. 3** で示す. 関数形<sup>51</sup>は

$$V(z) = -\frac{1}{4\pi^2(1+\lambda)} \left(\cos\frac{2\pi z}{a_z} + \frac{\lambda}{4}\cos\frac{4\pi z}{a_z} + 1 - \frac{\lambda}{4}\right) Ga_z^2.$$
(12)

である.  $V_1$ は式(12)で $\lambda=1$ ,  $V_2$ は $\lambda=0$ である. どちらも連続体極限では剪断弾性率はGに規格化してある.外部応力は $\sigma_{xz}$ 成分のものだけが作用する一様応力である. Fig. 2 のような外部応力のもとでは転位はy軸の正の向きに運動する.簡単化のため変位場の branch はy軸の負の向きにとる.線形連続弾性論によると螺旋転位の変位場は

$$u_{iz}^{0}(0,Y) = \begin{cases} \frac{a_{z}}{2\pi} \tan^{-1} \frac{y_{i}-Y}{x_{i}} - \frac{a_{z}}{4}, & x_{i} > 0 \\ \frac{a_{z}}{2\pi} \tan^{-1} \frac{y_{i}-Y}{x_{i}} + \frac{a_{z}}{4}, & x_{i} < 0 \end{cases}$$
(13)

である. ここで対称性より *X*=0. (*x<sub>i</sub>*, *y<sub>i</sub>*) は原子列 *i*の2次元格子面上の座標である. 高次の項 *u<sup>i</sup><sub>i</sub>* は3 項までとるものとする.

$$u_{iz}^{1} = \frac{a_{z}}{2\pi} \frac{-2x_{i}y_{i}}{(x_{i}^{2} + y_{i}^{2})^{2}}$$

$$u_{iz}^{2} = \frac{a_{z}}{2\pi} \frac{-2x_{i}(x_{i}^{2} - 3y_{i}^{2})}{(x_{i}^{2} + y_{i}^{2})^{3}}$$

$$u_{iz}^{3} = \frac{a_{z}}{2\pi} \frac{24x_{i}y_{i}(x_{i}^{2} - y_{i}^{2})}{(x_{i}^{2} + y_{i}^{2})^{4}}$$
(14)

対称性より高次の項に y 軸に対して偶関数のものは 現れない. また,時間の単位はスケーリングにより  $\tau$ = $a_z \sqrt{\rho/G}$  である. ここで  $\rho$  は密度である.

螺旋転位の運動シミュレーションを行う手順は次の ようにする.まず,静的な flexible な境界条件のもと で外部応力0の状態での安定な転位の位置と転位芯 構造を決定する(Fig.4).次に転位が非可逆的に運動 を開始する最小の外部応力(Peierls 応力)を計算する. これにはflexible な境界条件のもとで外部応力を5×

**Table 1.** Peierls stress in the case of the potential  $V_1$  and  $V_2$ , external stress imposed on the dislocation in the glid motion, and core structure in no external stress.

potential	Peierls stress	external stress in glide motion	core structure at $\sigma = 0$
V <sub>1</sub>	7.15×10 <sup>-4</sup> G	$7.25 \times 10^{-4} \text{ G}$	asymmetry
$V_2$	$1.5955 \times 10^{-2} \text{ G}$	$1.5965 \times 10^{-2} \text{ G}$	symmetry

10<sup>-6</sup>G 刻みで次第に大きくしてゆくことで決定した (**Table 1**). 計算は領域 I の大きさが 30×30, 40×40, 60×60 の 3 通り行ったが Peierls 応力の値は大きさに はほとんど依存しなかった. ただし,特に rigid な境 界条件を課した場合では領域 I のサイズをあまり小さ くすると Peierls 応力が高くなる. このような準備の 後に Peierls 応力をわずかに  $1 \times 10^{-5}$ G 越えた外部応 力のもとでの螺旋転位の運動をシミュレーションした. Peierls 応力を越える外力を加え始めた時刻を t=0 と する. 比較のために境界条件が flexible と rigid の2 通りで計算を行った. flexible な境界では式 (11) に 従って変数  $X_i$ ,  $S_k$  が時間変化する. その初期値は Peierls 応力を越えないぎりぎりの外部応力をかけて いたときの値をそのまま使う. 一方 rigid な境界では 時間が経っても  $X_i$ ,  $S_k$  の値は初期値のままで維持さ



Fig 4 Static core structures expressed by Vitek's representation. (a) and (b) are corresponding to the potential  $V_1$  and  $V_2$ , respectively. The atoms A, and B are the typical set of atoms whose behaviors are shown in Fig. 6.



Fig. 5 The glide motions of the screw dislocations with the flexible and the rigid boundary conditions, which are expressed by Vitek's representation. Differences larger than 0.015  $a_z$  are exhibited. (a) potential  $V_1$ . (b) potential  $V_2$ .

れ、領域 I の原子だけが運動方程式(7) に従って運動する. つまりどちらの境界条件でも t=0 では領域 I の原子座標も  $X_i$ ,  $S_k$  の初期値もまったく同じである. 数値計算は時間刻み 0.0005 $\tau$  の差分法で行った. 時々 0.0001 $\tau$  刻みで計算したものと比較したが結果 はほとんど違わなかった.

#### 3.2 ポテンシャル V<sub>1</sub> での結果

外力が0のときの転位芯構造は **Fig. 4** (a) のように なる.転位の安定な位置は正方格子の中心で転位芯構 造は *x*, *y* 方向に非対称である.Peierls 応力は比較 的低い 7.15×10<sup>-4</sup>*G* である (**Table 1**).螺旋転位の 運動の様子は Vitek<sup>6</sup> の表示で **Fig. 5** (a) で示す.隣 の原子列との段差が 0.015 $a_z$  以上の大きな所だけを 表示した.flexible な境界条件を課すと転位は静止す ることなく移動し続ける.領域 I のサイズが40×40の 場合 *t*=200 $\tau$  で転位の中心部は領域 I の端に到達する. 一方 rigid な境界条件では転位は約 3 原子ほど移動し て静止する.これは転位を動かそうとする Peach-Koehler 力と rigid な境界からの鏡像力が釣り合うた めであると思われる.

1つの原子の *z* 軸方向の運動についても調べてみた. Fig. 4 (a) で示したはじめ転位線の近くにある原

子Aの運動について **Fig. 6 (a)** に示す. flexible な境 界では計算に用いるモデルのサイズが30×30,40×40 60×60と変化しても原子Aの振る舞いはあまり変化し ない.しかし,rigid な境界ではサイズが変わると原 子Aの振る舞いも明らかに変化する.また,rigid な 境界を課しても大きなモデルサイズでの計算,たとえ ば60×60のサイズでは flexible な境界の結果に近づい ていく.

#### 3.3 ポテンシャル V₂での結果

原子間ポテンシャルが  $V_2$  の場合外力が 0 のときは Fig. 4 (b) のように x, y 方向に対称な転位芯構造が 安定である. また, 転位の運動の様子は Fig. 5 (b) で 示すように  $V_1$  のものとはだいぶ違うことがわかる. 図の中に見える同心円状の歪の大きな部分は転位芯か ら発射され外へ向かう振幅の大きな格子振動である. これはポテンシャルが  $V_2$  の場合は境界条件が rigid でも flexible でも発生する. また, Fig. 6 (b) をみる と異なる境界条件でのシミュレーションでもサイズが 同じもの同士が似た結果になる. したがって flexible な境界を課すことはポテンシャル  $V_2$  の計算の場合は 効果がなかった.



Fig. 6 The behaviors of the atoms in various model size and boundary conditions. (a) atom A in Fig. 4 (a) for potential  $V_1$ . (b) atom B in Fig. 4 (b) for potential  $V_2$ 

#### 4. 議論と考察

運動する転位のための flexible な境界条件を導入し、 その有効性を螺旋転位の運動を例に調べてきた.まず, fleixbile な境界条件を課すことが有効なのはポテンシ ャル V<sub>1</sub>の場合であった.静的な転位芯構造の計算<sup>1)2)</sup> ・)と同じく計算結果がモデルのサイズにほとんど依存 しなかった. このことより flexible な境界は鏡像力の 影響を小さくする効果があると考えられる、それとは 逆にポテンシャル V2 によるシミュレーションでは flexible な境界条件を課すことはまったく役に立たな い. これは Fig. 5 (b) で示したように振幅が大きくし かも振動数が高い格子振動が発生したことによると思 われる. このような振動にはたとえ flexible な境界で も追従できず結果としては境界が rigid であるのと同 じことになったと考えられる. ポテンシャル V2 のと きに大きな振動が発生したのは高い Peierls 応力が原 因と思われる. つまり, 転位が動く直前までに大きな 歪エネルギーが貯えられ,転位の運動開始に伴い格子 振動としてエネルギーが解放されたからである.

ポテンシャル  $V_1$  の rigid な境界条件でのシミュ レーションでは、やはり境界から受ける鏡像力がたい へん大きくサイズ 40×40 のモデルによる計算でも転 位の動く距離がせいぜい 1 から 2 原子距離以下でなけ れば正確な結果が得られないことがわかる. したがっ て、安易に転位の運動シミュレーションをするべきで はなく十分な注意が必要である. flexible な境界条件 もそのために工夫した計算方法であるが、まだ改良し なければならない点が多くある. 式(1)の高次の項 をどのような関数にすればよいかについては必ずしも 一意的に決められるわけではない.また,高次の項の 個数を多くすれば近似の精度が上がってよいというわ けでもない.それは次元が高くなると式(11)で行列 Mの逆行列を計算することが難しくなるからである. これらのことは今後の研究課題である.

#### 5. 結 論

運動する転位に対する flexible な境界条件を Lagrange の原理を応用して導入し,それを用いて螺旋転 位の運動シミュレーションを行った. Peierls 応力の 比較的低い場合は flexible な境界条件を課した計算は たいへん効果があり,計算の結果はモデルのサイズに 依存しなくなる.一方, Peierls 応力が高い場合は振 幅の大きな格子振動が発生し flexible な境界条件を課 す効果はなかった.

#### 謝 辞

本研究は平成7年度総合理工学研究科奨励研究費の 援助を受けた.

#### 参考文献

- 1) J. E. Sinclair, J. Appl. Phys., 42, 5321 (1971).
- P. C. Gehlen, J. P. Hirth, R. G. Holand, and M. F. Kanninen, J. Appl. Phys., 43, 3921 (1972).
- 3) J. P. Hirth, Scripta Met., 6, 535 (1972).
- 4) J. E. Sinclair, P. C. Gehlen, R. G. Holand, and J. P. Hirth, J. Appl. Phys., 49, 3890 (1978).
- F. Minami, E. Kuramoto, and S. Takeuchi, Phys. Stat. Sol. (a), 22, 81 (1974).
- V. Vitek, R. C. Perrin, and D. K. Bowen, Phil. Mag., 21, 1049 (1970).

#### 学 位 論 文 審 査 報 告

氏 名 (本籍)	中 山	亮	治	(福岡県)
学位記番号	総理工	専乙第	<b>第25</b> 0	)号
学位授与の日附	平成 8 年	年9月	3241	3
学位論文題目	水素雰	に囲る	貳 中	熱処理による
	Nd-Fe-	B 系:	永久	磁石作製に関す
	る研究			
論文調査委員				
(十本) +	山十半	#4	扫	3 中 二 中

(王	査)	九州大学	教授	γŦ		憲	爂
(副	査)	11	"	森	永	健	次
1	>	4	4	友	清	彬	昶

### 論文内容の要旨

希土類磁石の磁気特性は、微細組織に強く依存する ことから様々な製造法による微細組織制御が研究され ている.これらの製造法の中で、熱処理の温度および 雰囲気等の条件は磁気特性を決定する重要な因子であ る.特に、近年の最高レベルの磁気特性を有する Nd-Fe-B系磁石の開発において、熱処理条件の中で 雰囲気としての水素の影響に関しては、強磁性金属間 化合物の水素化物 Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>BH<sub>x</sub>の基礎的特性について 調べられているが、この水素化物の異方性磁場が低下 することや650℃以上の高温では水素化物が相分解し て消失してしまうことから、水素を熱処理雰囲気とし て積極的に用いることには関心がもたれていなかった. また、水素雰囲気が微細組織におよぼす影響について の報告はほとんどない.

本論文は,Nd-Fe-B系永久磁石材料において合金 に及ぼす水素の影響を磁気的および組織学的観点から 研究を行い,材料合金から永久磁石やボンド磁石用永 久磁石粉末を作製するプロセスに関して水素吸蔵や脱 水素を含めた水素雰囲気中焼結および熱処理による微 細組織制御を試み,永久磁石特性と微細組織の関係を 明らかにすることを目的として行った研究をまとめた ものであり、以下の7章から構成されている.

第1章では、本研究の背景と目的および本論文の構 成を述べた.

第2章では、水素雰囲気中焼結による焼結磁石の磁 気特性と微細組織について研究を行った。昇温と焼結 過程が全て水素雰囲気である通常の水素焼結では、異 方性圧粉体を用いても保磁力 iHc が低下した等方性 磁石が得られた。昇温過程の650~1080℃までが水素 中である場合のみに磁気特性が等方性になることが明 らかとなり、その知見から焼結温度過程のみが水素中 であると真空焼結に比べて密度が向上し高特性異方性 焼結磁石が得られることを見出した。組織観察により、 等方性に変化した原因は、焼結前の異方性圧粉体中の 強磁性金属間化合物  $Nd_2Fe_{14}B$  相とは結晶方位が異な る  $Nd_2Fe_{14}B$  相が生成するためであることを明らかに し、焼結工程において  $Nd_2Fe_{14}B$  と  $NdH_2$ , Fe,  $Fe_2B$ とが可逆的な相変化をおこし結果的に  $Nd_2Fe_{14}B$  相が 再び生成する可能性を指摘した. また iHc が低下し た原因は、再生成した  $Nd_2Fe_{14}B$  相の異常粒成長が起 こった可能性が強いことを述べた.

第3章では、水素圧力を制御して主相の粒界部を崩 壊させる選択的水素吸蔵崩壊法を行い、異方性磁石粉 末を得るための検討を行った.高保磁力の焼結体に減 圧下で水素吸蔵させた後に真空熱処理を行うと、焼結 体と同程度の iHc を有する磁石粉末が得られること が判明した.しかし、これらの磁石粉末を圧力成形し て作製した圧粉体の磁気特性では成形圧力の増加によ って iHc が大幅に低下し、実用的なボンド磁石用原 料としては充分ではないことを指摘した.組織観察の 結果、選択的水素吸蔵崩壊法で作製した磁石粉末表面 は焼結体組織の主相粒界部が崩壊して生成した状態で あることを確認した.

第4章では、第2章の結果をもとに Nd-Fe-B-H 系 の相状態を調べて水素による磁気的および組織的な変 化を追跡し、新規製造法で微細組織制御を行い高保磁 力磁石粉末を得る水素化相分解、脱水素再結合処理法 (Hydrogenation-Decomposition-Desorption-Recombination; HDDR 処理法) に関する詳細な研究を行った. Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>Bは 1 atm の水素中600~1000℃の温度範囲で NdH<sub>2</sub>, Fe, Fe<sub>2</sub>B の 3 相に相分解し, 1000℃以上では これらが Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B 相に再結合することが明らかとな った. そこで, 750~900℃の温度領域において Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>BH<sub>x</sub>の水素化による NdH<sub>2</sub>, Fe, Fe<sub>2</sub>B への相 分解と、その状態から真空中で脱水素を行うことによ る Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B の再生成,という相変態を利用した水素 処理(HDDR 処理)を行うと高保磁力の磁石粉末が 得られることを見出した. HDDR 処理法では Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B 相の化学量論合金組成付近で高い磁石特性 が得られること、Nd-Fe-B3元系合金から得た磁石粉 末は磁気的にほぼ等方性を示すこと等を明らかにした. 組織観察の結果, HDDR 処理を行った磁石粉末は再 結合した Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B 相が0.3µm 程度に制御された微細 組織を有しており,再結合微細結晶粒界部分には層状 の粒界相はほとんど存在しないことが判明した. この ことから、従来の焼結磁石ならびに超急冷磁石とは異 なる保磁力の発現機構の可能性について述べた. HDDR 処理過程の微細組織観察を行い,相分解した NdH<sub>2</sub> が10<sup>-1</sup>µm 程度に微細に分布することを明らか にした.

第5章では、HDDR 処理した磁石粉末における添

加元素による残留磁化と保磁力の向上に着目して異方 性磁石粉末を得ることを目的とし、それらの磁気特性 と微細組織について検討を行った. Nd-Fe-Co-B 合金 に Ga, Zr, Hf, Nb, Ta 元素を適正量添加すること により磁石粉末に磁気的な異方性化が発現すること, および Al, Si, Ga を適正量添加することにより iHc が増大することを明らかにした. 異方性磁石粉末は最 適粒度範囲で最大エネルギー積 BHmax が最高 43.2MGOe を示し、異方性ボンド磁石としては世界最 高レベルの BHmax=20.1MGOe が得られることが判 明した. 微細組織観察の結果, 粉末内部に0.3µm 程 度の微細な Nd<sub>2</sub>(Fe,Co)<sub>14</sub>B 結晶粒の集合組織が存在 することを明らかにした.これらの集合組織は、a.c 軸各結晶方位が同程度に配向した特異な方位関係にな っており、磁石粉末の磁気異方性の出現は微細結晶粒 の c 軸配向によることを実験的に明らかにした. ま た、この特異な方位関係の集合組織は HDDR 処理前 には一つの結晶であることを提言した. HDDR 処理 した異方性磁石粉末の異方性発現機構に関して、相分 解前の Nd<sub>2</sub>(Fe,Co)<sub>14</sub>B 相の結晶方位が継承されてい るとの仮説に立った結晶方位のメモリーサイトの存在 を提唱した.

第6章では、HDDR 処理した磁石粉末にホットプレスを行うことでバルクの磁石作製を試みた.磁石粉末の磁気特性をほとんど損なうことなくバルクの磁石が得られることが判明した.異方性磁石粉末を用いた場合は BHmax が 30MGOe を越える異方性磁石が得られ、ホットプレス温度条件と磁気特性の関係および磁気特性の温度変化を示した.

第7章は結論で、本研究を通じて得られた成果を総 括した.

#### 論文調査の要旨

希土類磁石の磁気特性は微細組織に強く依存し,作 製プロセスにおける熱処理温度および雰囲気によって 大きく左右される.近年の最高レベルの磁気特性をも っ Nd-Fe-B 系磁石においても,磁気異方性の付与や 保磁力の発現となる微細組織制御をめぐって様々な製 造法が開発されてきたが,熱処理雰囲気としての水素 の積極的利用についての関心は薄く,また水素雰囲気 の微細組織への影響に関する研究は非常に少なかった.

本論文は Nd-Fe-B 系永久磁石作製における材料合 金に及ぼす水素の影響を磁気的および組織学的に研究 している.特に,HDDR 法と呼ばれる新規製造法を 提案し,水素雰囲気中焼結および熱処理によって微細 組織制御を試み,永久磁石特性と微細組織の関係を明 らかにしたもので,以下の結果を得ている.

1. 水素雰囲気中焼結による磁石の磁気特性と微細組

織を研究している.通常の水素焼結では異方性圧粉体 を用いても保磁力の低下した等方性磁石が得られるこ と、焼結過程のみを水素中で行うと、真空焼結に比べ て密度が向上し高特性の異方性磁石が得られることを 明らかにしている.また,焼結前の異方性圧粉体とは 結晶方位の異なる Nd<sub>2</sub>F<sub>14</sub>B 相が生成するために磁気 特性が等方性に変化すること、およびこの相の異常粒 成長が原因で保磁力が低下することを指摘している. 2. 水素圧力を制御して Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B 相の粒界部を崩壊 させる選択的水素吸蔵崩壊法による異方性磁石粉末の 作製法を検討している. 高保磁力の焼結体に減圧下で 水素を吸蔵させた後、真空中で熱処理を行うと焼結体 と同程度の保磁力を有する磁石粉末が得られるが、圧 力成形によって作製した圧粉体では成形圧力の増加に 伴い保磁力が大幅に低下し,実用的ボンド磁石用原料 として十分でないことを指摘している.

3. Nd-Fe-B-H 系合金の水素処理による磁気的およ び組織的変化を調べ、超急冷法、焼結法以外の本磁石 材料の新規製造法として水素化相分解・脱水素再結合 処理法(HDDR法)を提案している. すなわち, 750 ~900℃で Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>BH<sub>x</sub> の水素化(Hydrogenation)に よる NdH<sub>2</sub>, Fe, Fe<sub>2</sub>B の相分解 (Decomposition) と, その状態から真空中で脱水素(Desorption)を行い再 び Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B 相を生成させる (Recombination) という 相変化を利用した HDDR 処理により高保磁力の磁石 粉末を得ることに成功している. HDDR 処理法では Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B 相の化学量論組成付近で高磁石特性が得ら れること、Fe に対する Co 置換で磁化が増加するこ とを見出している. HDDR 処理後の磁石粉末は 0.3µm 程度の再結合 Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B 相から成り、粒界部に は層状の粒界層が存在しないことを電子顕微鏡観察で 確認し、従来の Nd-Fe-B 系焼結磁石や超急冷磁石と は異なる保磁力の発現機構の可能性を提示している.

4. HDDR 処理磁石粉末への添加元素の効果に着目 し、高特性の異方性磁石粉末の開発に成功している. Nd-Fe-Co-B 合金に Ga、Zr、Hf、Nb、Ta を添加す ると磁気的異方性が発現すること、Al、Si、Ga を添 加すると保磁力が増大することを見出している.異方 性磁石粉末は最大エネルギー積 BHmax が最高 43.2MGOe を示し、異方性ボンド磁石としては世界最 高レベルの BHmax=20.1MGOe を得ている.再結合 した磁石粉末の内部には 0.3µm 程度の微細な Nd<sub>2</sub>(Fe, Co)<sub>14</sub>B 結晶粒の集合組織が存在し、これら の集合組織は a, c 軸各結晶方位が同程度に配向した 特異な方位関係を持つこと、磁気異方性の出現は c 軸配向によることを明らかにするとともに、この特異 な集合組織は HDDR 処理前には一つの結晶であるこ とを指摘している.また、異方性の発現機構に関して、 相分解前の Nd<sub>2</sub>(Fe, Co)<sub>14</sub>B 相の結晶方位が継承され ているとの仮説にたった結晶方位のメモリーサイト説 を提唱している.

5. HDDR 処理した磁石粉末にホットプレスを行い, バルク磁石の作製を試みている.ホットプレスにより 磁石粉末の磁気特性を損なうことなくバルク磁石が得 られること,異方性磁石粉末を用いると *BH*max = 30MGOe を越える異方性磁石が得られることを示して いる.

以上要するに、本論文は Nd-Fe-B 系永久磁石材料 における永久磁石やボンド磁石用粉末の作製に関して、 水素雰囲気中焼結および熱処理に伴う磁石特性と微細 組織の関係を明らかにし、新規な水素化相分解・脱水 素再結合処理法(HDDR法)を提案するとともに、 実用化への指針を拓いたもので、金属材料学および磁 性材料学上寄与するところが大きい.よって、本論文 は博士(工学)に値するものと認める.

氏 ź	名(本籍)	郡島	友	紀	(神秀	NI II	Į)	
学 位	記 番 号	総理工	専乙第	\$251	号			
学位授	与の日附	平成 84	年9月	24	E			
学位言		液晶の	合成と	表表	示素于	F-~0	)応月	Ħ
論文詞	問査委員							
(主	査)	九州大学	教	授	田	代	昌	±
(副	査)	11	"		森			章
	//	11	11		筒	井	哲	夫

#### 論文内容の要旨

近年,液晶表示素子技術の発展はめざましい.その 発展を支える液晶材料の研究の重要性も高まっている. この論文では1971年から著者が取り組んできた4系統 の液晶の合成およびそれらの表示素子への応用研究に ついて述べる.

本論文は次の六章から成っている.

第一章は序論であり、本研究の背景、目的及び意義 について述べた.

第二章では、低融点でかつ安定な液晶の開発をめざ して、従来、ほとんど研究がなされていなかった分子 の短軸方向に置換基(フッ素原子、塩素原子、メチル 基)を有する安息香酸フェニルエステルを合成して、 液晶としての性質と誘電率異方性に対する置換基の効 果を調べて、次の結論を得た.

1. エステルの安息香酸側の2の位置のフッ素原子は 液晶温度範囲をあまり狭くしないで,融点を低下させ るのに有効であった.

2.3種の4-アルキルカルボナト-2-フルオロ安息香酸-4-アルコキシフェニルエステルの混合液晶は,室

温域まで広げられ, −2から60℃の広い温度でネマチ ック液晶相を示した.

3. この3元組成物は室温で5Vでツイステッドネマ チック駆動が可能であった.

4. 短軸方向へのフッ素原子の導入効果の知見はその 後の液晶開発に応用されている.

第三章では、ヘテロ環ユニットを有する液晶として、 ほとんど研究例の無い3種類のピペリジン誘導体液晶 を合成して、次の結論を得た.

1. 一種は,対応するシクロヘキサン誘導体と同程度 の広いネマチック液晶温度範囲を示し,それらの液晶 一等方性転移温度も高いので,表示素子用液晶組成物 の高温成分として有用である.

2. 他の一種は,対応するフェニルシクロヘキサン誘 導体より大きな誘電率異方性とより高い実質的なネマ チック一等方性液体転移温度を示すので,混合液晶の 1成分として,表示素子の動作温度を低下させること なく,駆動電圧を低下させるために有用である.

3. 1と2の結論は、窒素原子上の立体的にかさばっ た置換基はエクアトリアルポジションを占めるので、 立体的には、1、4-ジ置換ピペリジンはトランス-1、 4-ジ置換シクロヘキサンと似通った構造をしており、 電気的には、ピペリジン環は電子が豊富な窒素原子の 存在のために、シクロヘキサン環よりも極性に富んで いることによって説明出来ると考えられた。

4. ピペリジン環を有する2色性アントラキノン系液 晶を合成した.耐光性の優れたアントラキノン系2色 性色素としては,初めて見いだされた液晶性を示す化 合物であり,そのため,普通の液晶に対する溶解性が 高いので,液晶表示モードの1種であるゲスト・ホス トモードに有用であると考えられる.この研究で見い だされたピペリジン環導入による,アミノ基を有する 芳香族化合物の液晶化技術は,広く,アミノ基を有す る機能性化合物の簡単な液晶化技術として応用できよ う.

第四章では、表示素子の視野角や動作温度範囲およ び応答速度を改善するために、1-シクロヘキシル-2-フェニルシクロヘキシルエタン誘導体を合成し、その 液晶としての性質すなわち、相転移温度、粘度、誘電 率異方性 ( $\Delta \epsilon$ ) と誘電率異方性 ( $\Delta n$ )を測定して、 次の結論を得た.

1. 二つのシクロヘキサン環の連結基として, エチレン基 (-CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>-), オキシメチレン基 (-CH<sub>2</sub>-) とエステル基 (-COO-) を選んで, 相転移温度と粘度に対する効果を比較した結果, エチレン基を有する化合物はこれら三つの化合物のなかで最も広いネマチック温度範囲を示し, 粘度も低いので液晶表示材料として好ましい.

2. シクロヘキシルビフェニル誘導体液晶よりもネマ チック液晶温度範囲が広く,芳香環の共役の広がりが 小さいので、Δn が小さい.

3.  $\Delta \varepsilon \geq \Delta n$  に対する末端置換基の極性の効果を置換基のハメットの  $\sigma_p$  に対してプロットして考察した結果,置換基の極性が増加するにつれて $\Delta \varepsilon \geq \Delta n$  は 増加する事がわかった.

4. エタン誘導体は広いネマチック液晶温度範囲を示 し、粘度も低く、複屈折率も小さいので、車両のクロ ック・オーデイオメーターの表示素子のような広い動 作温度と高速応答性と広い視野角が求められる表示素 子の用途に好適であると考えられる.

第五章では,新たな高 Δε 液晶材料として加水分解 に耐えるジフルオロシアノベンゼン液晶を設計し,そ の合成方法を開発して,次の結論を得た.

1.3,5-ジフルオロブロモベンゼンを出発原料とし て,Grignard反応によるアルキル化と、ベンゼン環 の二つのフッ素原子に挟まれた水素原子のリチウム化 と、それに引き続くカルボキシル化を主要反応とする 新しい合成法を開発して、目的の化合物を合成できた. この新しい合成法は、広く、芳香族フッ素化合物の合 成法の開発に寄与したものと考えられる.

2. ジフルオロシアノベンゼン誘導体化合物は非常に 大きい誘電率異方性を示し、しかも、既存の大きい誘 電率異方性を有する化合物のような加水分解のおそれ がない.

3. ジフルオロシアノベンゼン誘導体化合物は,携帯 用や車載用液晶表示素子のように,特に,低電圧駆動 が求められている用途に適している.

第六章では本研究で得られた成果と液晶表示素子の 展望をまとめた.

#### 論文調査の要旨

液晶表示素子技術の発展はめざましく,あらゆる機 器に液晶表示素子が備えられているといっても過言で はない.その発展を支える液晶材料の研究の重要性も 高まっており,液晶表示素子に適した液晶の開発は最 重要課題である.以上の観点から著者は液晶表示素子 に応用可能な新しい液晶の開発を目的として,4系統 の新しい液晶の合成およびそれらの表示素子への応用 について研究し,以下に述べる興味ある知見を得てい る.

1. 低融点でかつ安定な液晶の開発をめざして,従来, ほとんど研究がなされていなかった分子の短軸方向に 置換基(フッ素原子,塩素原子,メチル基)を有する 安息香酸フェニルエステル類を系統的に合成して,液 晶としての性質と誘電率異方性に対する置換基の効果 を調べた.即ち,エステルの安息香酸側の2の位置の フッ素原子は液晶温度範囲を狭くしないで,融点を低下させるのに有効であった.本研究で得られた3種の液晶は,-2℃から60℃の広い温度でネマチック液晶相を示し,また室温で5Vでツイステッドネマチック駆動が可能であることを明らかにした.短軸方向へのフッ素原子の導入効果の知見は,含フッ素液晶開発に広く寄与した.

2. ヘテロ環ユニットを有する液晶として、ほとんど 研究例の無い数種のピペリジン誘導体液晶を合成した. 即ち、その中である液晶は、対応するシクロヘキサン 誘導体と同程度の広いネマチック液晶温度範囲を示し, それらの液晶一等方性転移温度も高いので、高温成分 として有効である.また,他の一種は,対応するフェ ニルシクロヘキサン誘導体より大きな誘電率異方性と より高い実質的なネマチック一等方性液体転移温度を 示すので、表示素子の動作温度を低下させることなく, 駆動電圧を低下させるために有用である液晶を見いだ した. これらの結果は, 窒素原子上の立体的にかさば った置換基はエクアトリアルポジションを占めるので, 立体的には、1,4-ジ置換ピペリジンはトランス-1,4-ジ置換シクロヘキサンと似通った構造をしており、電 気的には、ピペリジン環は電子が豊富な窒素原子の存 在のために、シクロヘキサン環よりも極性に富んでい ることによって説明出来ることを明らかにした. さら に、ピペリジン環を有する2色性アントラキノン系液 晶は普通の液晶に対する溶解性が高いので、液晶表示 モードの1種であるゲスト・ホストモードに有用であ ることを示した.

3.表示素子の視野角や動作温度範囲および応答速度 を改善するために、1-シクロヘキシル-2-フェニルシ クロヘキシルエタン誘導体を合成し、その液晶として の性質を検討した.即ち、二つのシクロヘキサン環の 連結基として、エチレン基(-CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>-)、オキシメチ レン基(-CH<sub>2</sub>O-)とエステル基(-COO-)を選んで、 相転移温度と粘度に対する効果を比較した結果、エチ レン基を有する化合物はこれら三つの化合物のなかで 最も広いネマチック温度範囲を示し、粘度も低いので 液晶表示材料として好ましいことを明らかにした.エ チレン誘導体は広いネマチック液晶温度範囲を示し、 粘度も低く、複屈折率も小さいので、車両のクロッ ク・オーデイオメーターの表示素子のような広い動作 温度と高速応答性と広い視野角が求められる表示素子 の用途に好適であることを明らかにした.

4. 新たな高誘電率異方性液晶材料として,加水分解 に耐えるジフルオロシアノベンゼン液晶を設計し,そ の合成方法を開発した.3.5-ジフルオロブロモベンゼ ンを出発原料として,Grignard 反応によるアルキル 化と,ベンゼン環の二つのフッ素原子に挟まれた水素 原子のリチオ化と、それに引き続くカルボキシル化を 主要反応とする新しい合成法を開発して、目的の化合 物を合成した.この新しい合成法は、広く、芳香族フ ッ素化合物の合成法の開発に寄与したものと考えられ る.得られた液晶は携帯用や車載用液晶表示素子のよ うに、特に、低電圧駆動が求められている用途に適し ていることを見いだした.

以上要するに本論文は,新たな液晶を設計し,その 合成法を開発し,液晶構造と物性の関連を系統的に明 らかにして高性能の液晶表示素子の開発に顕著な成果 を挙げたもので,有機工業化学,有機合成化学,物理 化学,応用物理学上価値ある業績である.よって,本 論文は,博士(工学)の学位論文に値するものと認め る.

氏	名	(本籍)	杉	本	尚	哉	(福岡	3県)		
学	位言	記番号	総理	盯掉	事甲角	<b>育</b> 222	;号			
学	位授	与の日附	十 平成	28年	E9戶	324	Ξ			
学	位論	文題目	71	クロ	コ波	レン	ズを	用い	たB	ECR
			プラ	ズマ	7生质	に ト	関する	3研9	5	
論	文調	査委員	t							
	(主	査)	九州大	、学	教	授	河	合	良	信
	(副	査)	"			<i>י</i>	伊	藤	智	之

#### 論文内容の要旨

村 岡 克 紀

物質を構成する原子・分子が電離してイオンと電子 に分離した状態にあるプラズマは,全体としては電気 的に準中性で,多様な集団現象を起こす高温電離気体 である.このように物質の特殊な状態であるプラズマ の特性を応用するものとして,制御熱核融合,プラズ マプロセッシング,MHD 発電,気体レーザー,イオ ンビーム源等が挙げられる.中でも,プラズマ CVD 法やプラズマエッチング等のプラズマプロセッシング は,常温程度の低温では進行しない化学反応を,プラ ズマを用いて高温下あるいは電界下での粒子の活性化 作用により促進させて利用するものであり,半導体産 業の分野で注目されている.

しかし,このような材料プロセスの分野においては, プロセスの高速化,超微細化,大面積化等が重要な課 題となっている.これらの問題を解決するためには, 低ガス圧力(10<sup>-4</sup>Torr~10<sup>-2</sup>Torr)で高密度(電子密 度10<sup>11</sup>~10<sup>12</sup>cm<sup>-3</sup>),低電子温度(電子温度1~10eV) のプラズマを,大口径で一様な分布で生成する必要が ある.その代表的なものの1つが,電子サイクロトロ ン共鳴(ECR)プラズマである.ECRプラズマ生成で は,磁場中において真空容器内に入射されたマイクロ 波は、電子サイクロトロン波(ECW)を励起する. ECW は磁力線に沿って伝播する右回り円偏向の電磁 波で、ECR により電子を加速し、プラズマを生成す る.このようにECRプラズマ生成では電子と電磁場と の共鳴を利用するので、効率よく選択的に電子にエネ ルギーを注入することが可能で、その結果低圧力で比 較的電子温度が高いプラズマを生成することができる.

ECR プラズマ生成では、マイクロ波は通常、マイ クロ波源から真空容器の近くまで導波管により矩形 TE<sub>11</sub>モードで伝送され、真空容器内へ放射されるが、 真空容器への導入の仕方についてはいくつかの方法が ある. 矩形導波管で伝送されてきたマイクロ波を円形 TEu モードに変え、テーパー導波管を通して導入す るのもその1つである.しかし,円形 TE<sub>11</sub> モードで のマイクロ波の放射分布は非一様で、中心が最大とな る山形の分布をしており、これが生成されるプラズマ の径方向密度分布を非一様にしている原因の1つと考 えられる.また、生成されるプラズマの径方向密度分 布が中心部で高い分布となると、プラズマが ECW に 対して凸レンズの効果を及ぼす.これらの理由から, テーパー導波管を用いた円形 TE11 モードのマイクロ 波入射による ECR プラズマ生成では、マイクロ波の 径方向放射分布を拡げて一様にする必要がある.

本研究では、マイクロ波入射口前面にマイクロ波凹 レンズを置き、テーパー導波管から放射されるマイク ロ波の径方向分布を変化させ、ECR プラズマを一様 化することを目的とする.以下に、各章の概要を示す.

第1章の緒言においては、プラズマプロセッシング 用プラズマ源の現状を簡単にまとめ、本研究の意義を 述べる.

第2章では、テーパー導波管とマイクロ波凹レンズ について述べる。円形 TE<sub>11</sub> モードで放射されるマイ クロ波の径方向放射分布を拡大し ECR プラズマを一 様化する目的としてマイクロ波凹レンズを製作し、そ れを基に直径42cmの大面積開口面を持つテーパー導 波管を製作した。これらを用いて、大気中でテーパー 導波管から放射されるマイクロ波の径方向放射分布を 測定し、マイクロ波凹レンズにより径方向放射分布の 半値幅は約1.2倍に拡大されることを確認した。

第3章では、マイクロ波凹レンズを用いたECRプラ ズマの一様化について述べる.プラズマ生成を行った 場合のマイクロ波の径方向放射分布の測定においても、 マイクロ波凹レンズを使用した場合に径方向放射分布 が拡大されることを確認した.入射マイクロ波パワー 3kW以上、アルゴンガス圧力1×10<sup>-3</sup>Torr以上の 時、マイクロ波凹レンズにより径方向放射分布の半値 幅は約17cmから約23cmへと約1.4倍に拡大される. 生成されたプラズマ中を伝播している波動を、干渉法

を用いて測定し分散特性を調べた結果、マイクロ波凹 レンズの有無に関わらずプラズマ中には波長が約5 cm の ECW が励起されていることがわかった. 励起 された ECW は共鳴点に到達する前に減衰するが、マ イクロ波凹レンズを使用した場合の方が減衰率は大き い.これは、磁場の非一様性と電子温度の違いが原因 であると考えられる. 生成されたプラズマのイオン飽 和電流の径方向分布は、直径約20cm にわたってほぼ 一様である.入射マイクロ波パワー3kW,アルゴン ガス圧力1×10<sup>-3</sup>Torr の場合, 一様性はレンズが無 い場合が±6%、レンズを使用した場合±4%であり、 現在必要とされるプラズマ応用のためのプラズマ源と して使用可能な値である.また、マイクロ波凹レンズ により、アルゴンガス圧力が低い場合には電子温度が 上昇し、1×10<sup>-3</sup>Torr、入射マイクロ波パワー5kW の時、5eV から12eV へと約70%上昇した、一方、さ らにアルゴンガス圧力が高い場合には電子密度が上が り、1×10<sup>-2</sup>Torr,入射マイクロ波パワー5kWで, 4.5×10<sup>12</sup>cm<sup>-3</sup>から6.0×10<sup>12</sup>cm<sup>-3</sup>へと約30%増加した. このため、マイクロ波凹レンズを使用するとイオン飽 和電流値が増加する. 生成されたプラズマは、応用プ ラズマ源として十分な高密度プラズマである.

第4章では、生成されたプラズマのイオン飽和電流 の分布への ECW の寄与について述べる. 中心軸上以 外でも ECW の干渉波形を測定し、プラズマ中を伝播 しているECW の波面を合成した. ECW は中央部で は平面波状か球面波状に伝播しているが、プラズマ周 辺部の真空容器壁の近くでは伝播していくにつれて外 向きから内向きへ伝播方向が変化している。また、中 心軸上以外でもイオン飽和電流の軸方向分布を測定し た結果、周辺部に発生するイオン飽和電流値の大きな 領域では、マイクロ波入射口から約40cm から約60cm の間でイオン飽和電流値が急増していることがわかっ た. このようにイオン飽和電流値がマイクロ波入射口 から離れた下流周辺部で高くなるのは、中央部と周辺 部で ECW が伝播する向きが逆であるため、波動のエ ネルギーが集中する領域が現れるためであると考えら れる.

最後に第5章において各章の結論をまとめ、今後の 課題を述べる.

#### 論文調査の要旨

電子サイクロトロン共鳴(ECR)を利用して生成される ECR プラズマは,低圧力にもかかわらずプラズマ密度が高いため,プロセシングプラズマとして期待されている.通常 ECR プラズマは,マイクロ波(周波数 2.45GHz)の電場強度が導波管の中心軸上で最大となる基本モード(円筒導波管では TE<sub>11</sub>)により

生成されているのでプラズマ密度が中心で高い分布と なる. プロセシングプラズマでは一様プラズマが求め られるので, ECR プラズマではその一様化が最大の 課題となっている.現在,ウエーハ径は6インチが主 流であるが,将来的には8インチ又はそれ以上に移行 すると予測されており,ウエーハの大口径化に対応出 来る ECR プラズマの生成が要望されている.

本研究は、マイクロ波凹レンズを用いてマイクロ波 の電場強度を径方向に拡げることにより ECR プラズ マの一様化を図ったもので、以下の成果を得ている.

(1)マイクロ波径方向放射分布を拡大するために直 径 420mm のテフロン製マイクロ波凹レンズを製作し, 大気中のマイクロ波放射実験を行い,径方向放射分布 が凹レンズを用いない場合に比べて約1.2倍拡大され ることを確認している.

(2) マイクロ波凹レンズを設置して ECR プラズマ 生成を行った場合の径方向放射分布は,マイクロ波パ ワー 3kW,アルゴンガス圧力 1mTorr で径方向に凹 レンズを用いない場合に比して約1.4倍に拡大される ことを見出している.

(3) プラズマ中に励起された電磁波の分散関係を干 渉法により測定することにより,マイクロ波凹レンズ の有無にかかわらず電子サイクロトロン波が励起され, 共鳴点に到達する前に減衰することを明らかにしてい る.

(4) 生成されるプラズマのイオン飽和電流値及びプ ラズマ密度の径方向分布をラングミュアープローブに より測定し,マイクロ波凹レンズを使用した場合マイ クロ波パワー 3kW,アルゴンガス圧力 1mTorr で直 径 200mm のイオン飽和電流値の変動率±4%を得て おり,直径8インチのウエーハに十分対応できる一様 プラズマの生成に成功している.

(5) マイクロ波凹レンズのプラズマパラメータ値へ の効果をガス圧力が(0.1-40) mTorr の領域で詳し く調べている、マイクロ波凹レンズの使用により、ガ ス圧力が低い場合には電子温度が上昇する、一方、ガ ス圧力が高い場合には電子温度はほぼ一定であるが電 子密度が高くなることを観測している.具体的には、 (i) ガス圧力 1mTorr, マイクロ波パワー 5kW で電 子温度が凹レンズを使用しない場合と比べて70%上昇 する、(ii) ガス圧力 10mTorr, マイクロ波パワー 5kW で電子密度が凹レンズを使用しない場合と比べ て30%高くなる、(iii) この結果、マイクロ波凹レン ズを使用するとイオン飽和電流値が増大し、プラズマ プロセスの高速化が期待出来る、ことを指摘している. (6) 中心軸以外での電子サイクロトロン波の伝播波 形を干渉法により測定し、波面から求めた伝播方向と イオン飽和電流の径方向分布との関連を考察している.

-329-

この結果、中心と周辺で電子サイクロトロン波の伝播 方向が逆になり、波動エネルギーが集中する領域が現 れることを明らかにするとともに、実験で観測される 周辺部でのイオン飽和電流の増大を説明している.

以上要するに、本研究はマイクロ波凹レンズの使用 により ECR プラズマの一様に大きな貢献をしたと評 価され、プラズマ理工学に寄与する所が大きい.よっ て本論文は博士(理学)に値すると認められる.

氏 名(本籍) 庄 山 裕 章(福岡県) 学 位 記 番 号 総理工博甲第221号 学位授与の日附 平成8年9月24日 学位論文題目 非一様磁場に捕捉された電子の電 子サイクロトロン波による統計的 加速に関する研究

論文調査委員

(主	査)	九州大学	教授	河	合	良	信
(副	査)	11	11	伊	藤	智	之
	>	11	11	村	岡	克	紀

#### 論文内容の要旨

決定論的力学系に先験的にストカスティシティー (stochasticity)を導入することによって、現象の統計 的記述をすることが広く行われているが、先験的スト カスティシティーの仮定の正当化はボルツマンが統計 力学を建設して以来の重要な問題である.最近、ある 条件下では決定論的力学系自身に起因したストカステ ィシティーによってその系が統計的挙動を示すという ことが理解されるようになった.特に、電磁場と荷電 粒子から構成される力学系を扱うプラズマ物理学にお いては、この決定論的力学系自身が示すストカスティ ック (stochastic) な挙動の解明は、宇宙線の発生機 構、プラズマの波動による統計加熱(stochastic heating)、トーラス磁場閉じ込めプラズマの磁気面の 構造などに関連した重要な課題である.

非一様磁場中での電子サイクロトロン共鳴加熱 (ECRH)実験でみられる高速電子群発生に対して, 統計加熱の機構を適用する理論的研究がこれまでに数 多くなされた.これらの研究は2つの方法に分類され る.一つの方法は,運動方程式を積分することにより, 勾配を持つ静磁場の電子サイクロトロン共鳴領域を電 子が一回通過するときの電子のエネルギーの変化量を 電子のサイクロトロン運動の初期位相と最終位相に依 存する形で評価する.そして,この電子のエネルギー の変化量を位相平均し,電子のエネルギー増加の平均 値を得る.もう一つの方法は,正準形式の摂動論に基 づいている.この方法は、ある場合に位相空間の高工 ネルギー領域に断熱不変量が存在することを示す.こ の断熱不変量は,電子が到達可能なエネルギーの上限 を与える.後者の方法は,問題としている力学系の位 相空間の大域的構造を直接把握するので,乱雑位相近 似の適用限界を示すことが可能であり,前者より優れ ている.しかし,これらの理論が適用された実験は, 多重モードキャビティーを含んでいたので,多数の波 動が混在している複雑な物理系を構成していた.従っ て,現実の物理系から見ればいずれの理論もかなり単 純化されており,統計加熱機構におけるストカスティ シティーの起源が決定論的なものであるのか否かの検 証はこの実験では困難であると考えられる.

マイクロ波を静磁場に平行に入射することにより電 子サイクロトロン共鳴(ECR)によって生成される高 密度プラズマは,系内に存在する波動が電子サイクロ トロン波のみであり,決定論的ストカスティック加速 機構の検証に適していると期待される.本研究は,電 子サイクロトロン波による非一様磁場に捕捉された電 子の加速現象を実験対象として,決定論的ストカステ ィック加速機構の検証を目的としている.以下に各章 の概要を示す.

第1章の序論においては,決定論的ストカスティシ ティーの重要性とこの観点によるプラズマ粒子の加速 の研究の現在に至る進展を要約し,本研究の意義を述 べる.

第2章では、直接型装置を用いて、2.45GHzのマ イクロ波による電子サイクロトロン波プラズマの生成 及び高速電子群発生現象の特性について実験的に調べ た結果を述べる.マスクロ波を静磁場に平行に入射し てプラズマを生成し、(1)プラズマ中にサイクロト ロン波の単一モードが励起されていること、(2)バ ルクプラズマの電子密度と電子温度及び電子サイクロ トロン波の伝搬形態は静磁場に弱い非一様性を付加し てもほとんど変化しないこと、を確認した.さらに、 静磁場に弱い非一様性を付加することにより、プラズ マ電子の一部が電子サイクロトロン波によって高エネ ルギーに加速され、数10keVのエネルギー領域に及 ぶ高速電子群が発生するのを観測した.

第3章では、高速電子群の発生機構を、与えられた 電磁場中を運動する電子の1粒子問題として説明する ためのモデルを構築し、その性質を調べた.電子の運 動方程式を簡略化して常微分方程式系モデル(保存 系)を導出し、その位相空間の断面を数値積分によっ て求め、位相空間があるエネルギーを境(断熱バリ ア)に低エネルギー側の粒子の運動がストカスティッ クな領域と高エネルギー側の断熱的な領域に分離して いることを示した.この常微分方程式モデルをミラー 捕捉によるバウンス周期で離散化して離散写像モデル を導出し、この離散写像モデルが元の常微分方程式モ デルを良く近似していることを確認した.また、波動 の振幅が小さい場合に常微分方程式系モデルはフェル ミ写像で近似されることを示し、このフェルミ写像よ り得られるストカスティシティーの条件から、断熱バ リアの電磁波と静磁場のパラメーターに対する依存性 を導いた.離散写像を用いて得た電子の運動は拡散的 であるが、タイムステップがエネルギーに依存するバ ウンス周期であることから、そのエネルギー分布関数 から求めた温度は時間の3/4乗に比例することがわか った.実験で得られた高速電子群の温度のミラー比依 存性は、この結果によって説明できることがわかった.

第4章では、高速電子群の発生機構が捕捉電子と電 子サイクロトロン波の相互作用であるという観点から, 実験パラメーターに対する高速電子群発生現象の依存 性を調べた結果を述べる. ミラー捕捉領域の静磁場を 形状を変えずに、全体の磁場強度を変化させる実験を 行った結果, 高速電子群が効率よく生成される領域は, 捕捉領域の磁場強度の最小値での  $\omega/\omega_{ce}$  ( $\omega$ ,  $\omega_{ce}$  は それぞれマイクロ波の周波数と電子サイクロトロン周 波数)が1より小さい領域に広がりを持つことがわか った. また、 $\omega/\omega_{ce}$  が減少するのに伴い、高速電子群 の温度が上昇する傾向がみられた、これらの結果は Fermi 写像による断熱バリアのエネルギーが ωce  $(min) - \omega$  ( $\omega_{ce}(min)$ ) は静磁場が最小値をとるときの ωce)に比例するという予測と定性的に一致する.入 射マイクロ波のパワーを変化させる実験を行い, X 線の計数のエネルギースペクトルのデータ点の最も高 いエネルギーは、入射マイクロ波のパワーの1/2乗に 比例することがわかった. この依存性も断熱バリアの 依存性と一致する. また、ミラー捕捉領域の静磁場の 平坦部の長さを変えて実験を行った結果、高速電子群 の生成はミラー捕捉領域の静磁場の平坦部の長さには 依存しないことがわかった.

最後に第5章において各章の結論をまとめ、今後の 課題を述べる.

#### 論文調査の要旨

最近の非線形力学の発展により決定論的力学系にも かかわらずそれ自身に起因したストカスティシティー によってその系の集団が統計的挙動を示すことが理解 されるようになった.プラズマ物理学では,磁気ミ ラー中の電子サイクロトロン共鳴加熱(ECRH)実験 で観測される高速電子の発生に対して統計加熱の機構 を適用する先駆的な理論研究がなされ,非線形力学の 発展に貢献してきた.しかし,これまでの実験は多重 モードキャビティを含んでいたため多数の波動が混在 している複雑な系を構成しており,理論との単純な比 較には問題が多く,統計加熱機構におけるストカステ ィシティーの起源が決定論的なものであるか否かの検 証は困難であった.

本研究は、マイクロ波を磁場に平行に入射して電子 サイクロトロン共鳴によって生成される高密度プラズ マでは系内に存在する波動が電子サイクロトロン波の みであることに着目し、電子サイクロトロン波による 電子の決定論的ストカスティック加速機構の実験的検 証を試みたもので、以下の成果を得ている.

(1) マイクロ波(周波数 2.45GHz)を磁場に平行 に入射することにより高密度の電子サイクロトロン共 鳴プラズマ(ECR プラズマ)を生成し,プラズマ中 に電子サイクロトロン波のみが存在する系を実現して いる.さらに,ミラー比が最大1.1の弱い非一様磁場 を付加しても電子サイクロトロン波の伝播特性は変わ らないことを電磁波の伝播測定により確認している.

(2)磁場に弱い非一様性を付加すると数十 keV に 及ぶエネルギーを持つ高速電子が発生し,高速電子は プラズマの中心軸付近に局在していることを観測して いる.

(3) ミラー捕捉領域の磁場形状を変えずに全体の磁 場強度を変化させる実験を行い,高速電子が効率よく 生成される領域を調べている.高速電子の密度はミ ラー捕捉領域の磁場強度の最小値での $\omega/\omega_{ce}$  ( $\omega \geq \omega_{ce}$ はそれぞれマイクロ波の振動数と電子サイクロト ロン振動数)が0.94と1の間の領域で高く,磁場に垂 直にマイクロ波を入射する ECRH 実験で観測された  $\omega/\omega_{ce} = 1$ を中心に高速電子が生成された結果と対照 的であることを指摘している.

(4) ω/ω<sub>ce</sub> が減少するのに伴って高速電子の温度が 上昇することを観測している.この結果は,電子の運 動方程式より導かれる常微分方程式系モデルをミラー 捕捉によるバウンス周期で離散化することにより得ら れた離散写像モデルによる断熱バリアエネルギーが (ω<sub>ce</sub>-ω) に比例するという理論的予測と定性的に一 致することを示している.

(5) X線計数(計測時間幅15秒)のエネルギースペクトルから得られる最も高いエネルギーの光子のデー タ点(断熱バリアの下限に相当する)は入射マイクロ 波パワーの1/2 乗に比例することを観測している.こ の依存性は、フェルミ写像から導かれる断熱バリアエ ネルギーの電子サイクロトロン波の電場強度依存性と 一致することを明らかにしている.

(6) X線計測より得られた高速電子の温度はミラー 比 Rm に対して (logRm)<sup>3/4</sup> に比例して上昇すること を見出している.一方,離散写像理論より得られる高 速電子の温度は時間の3/4乗に比例して上昇すること を導いている.磁気ミラーに捕捉された捕捉電子が捕 捉されている時間は logRm に比例するので,この理 論結果は高速電子の温度の磁気ミラー比依存性を良く 説明している.

(7)以上の結果から,電子サイクロトロン波プラズ マ中に磁場に非一様性が存在する場合に発生する高速 電子の加速機構は決定論的ストカスティシティーによ るものであることを結論している.

以上要するに、本研究は電子サイクロトロン波によ る非一様磁場に捕捉された電子の統計的加速機構の解 明に大きな貢献をしたと評価され、プラズマ物理学に 寄与する所が大きい.よって、本論文は博士(理学) に値すると認められている.

氏 名 (本籍)	加藤	由 紀	(神芬	₹川県	<b>ڊ</b> ) -	
学位記番号	総理工博	專甲第223	3号			
学位授与の日附	平成8年	F9月24日	Ξ			
学位論文題目	表面張力	り重力波の	の定常	常進行	亍波角	屛の
	安定性					
論文調査委員						
(主 査) ナ	L州大学	教授	及	川	正	行
(副 査)	"	11	本	地	弘	之
11	"	11	増	田		章

#### 論文内容の要旨

2次元的な表面張力重力波においては、無次元表面 張力係数  $\gamma = Tk^2/\rho g$  が 1/N に近いときに,基本波と その N 倍高調波との間に共鳴が起こることが知られ ている.ここで、Tは表面張力係数、 $\rho$ は流体の密度、 g は重力加速度, そして k は基本波の波数である. 以下では、基本波の波数を1とする、rが1/Nに近 い場合には高調波共鳴が起こるために、ストークス展 開では表せないような定常進行波解が存在する. ここ では、「定常」という用語を形を変えないという意味 で使っている.このような定常進行波解については, 解析的或は数値的な多くの研究があり、解が複雑な分 岐をすることが明らかになってきている. ところが. このような解の安定性は、ほとんど調べられていない. 共鳴が起こっているような定常進行波解について、そ の安定性を調べることが本研究の目的である.本研究 は主に二つの部分からなる. 前半部では, γ=1/20~ 1/5の範囲で、基本波と N 倍高調波との間に弱い共鳴 が存在する場合の定常進行波解に擾乱を加え、その時 間発展を調べた.後半部では、γ=1/4の近傍で、主に 基本波と4倍高調波との間に強い共鳴が存在する場合 の解の線形安定性を調べた.

本論文は,これらの結果をまとめたものであり,全 5章からなる.

第1章では,表面張力重力波の定常進行波解につい てのこれまでの研究を概観し、本研究の目的を述べた. 第2章では、γ=1/20~1/5の範囲での、定常進行波 解に擾乱を加えた場合の時間発展について調べた結果 を述べた.調べた解は、1/γ程度の高調波成分がやや 大きいような、弱い共鳴解である、加えた擾乱は、側 帯波擾乱と高調波擾乱の2種類である. 高調波擾乱と しては2倍高調波と3倍高調波を用いた.いずれの擾 乱を加えた場合でも、定常進行波解の振幅とγの値が ある範囲にあれば、定常進行波の周期で数周期程度の 時間内に、基本波の上にさざなみが発生することがわ かった. さざなみは、波列の中の一番振幅が大きい波 の上に最初に発生すること、その発生地点はその波の 頂点より前方の、水面の勾配が一番大きい点であるこ とがわかった. さらに, 水面の勾配の空間変化からさ ざなみの波数を評価した結果, さざなみは波数が 1/γ 近傍の波からなることがわかった.これらのことは, 過去の実験結果と定性的に一致している.

第3章では、 $\gamma=1/4$ の近傍での、弱非線形近似に基 づく解の2次元的な長波長擾乱に対する線形安定性に ついて述べた.まず、 $\gamma=1/4$ 近傍で基本波はその4 倍高調波の振幅のゆっくりとした時間的及び空間的な 変化を記述する弱非線形近似の方程式系を導出した. その方程式系は、基本波の振幅を $O(\varepsilon)$ としたとき、  $O(\varepsilon^4)$ まで考慮した近似方程式系である.この方程式 系を用いて、弱非線形の定常進行波解を求め、2次元 的な長波長擾乱に対する安定性を調べた. $O(\varepsilon^3)$ まで の近似方程式を使うと、波数が4の近傍の擾乱が成長 することがわかった、これは、共鳴がない場合の波数 4の波に対する変調不安定と本質的に同じものである. さらに、 $O(\varepsilon^4)$ までの近似方程式を使って、波数4の 波に対する変調不安定とは異なる、新しい不安定を2 つ見出した.

第4章では、 $\gamma=1/4$ の近傍での、弱非線形近似をし ない完全な水の波の方程式系の解の線形安定性につい て述べた.まず、完全な水の波の方程式系の定常進行 波解を境界積分法によって数値的に求め、第3章で求 めた弱非線形近似解と比較した. $\gamma$ が1/4に十分近く て、かつ、波数1の波の振幅が小さい場合は、両者は よい一致を示した.次に、この解の安定性を数値的に 調べた.2次元的な擾乱に対する安定性を調べた結果、 第3章で見出された不安定が、各々、波数1だけを含 む4波共鳴と波数1と4の波を含む4波共鳴に起因し た不安定であることがわかった.3次元的な擾乱に対 する安定性を調べた結果、波数1と4の波に関連した 共鳴曲線を中心として不安定領域が広がることがわか った.今回調べた範囲の解においては、波数4を含む 3波共鳴による不安定が最大の成長率を持つことがわ かった.さらに,擾乱の波数平面においてはどんな2 種類の不安定領域も重なることはなく,多くの場合, 2種類の不安定領域はつなぎかわるということがわか った,不安定領域のつなぎかわりは,過去の研究では 見出されなかった現象である.

第5章では,以上の結果を総括した.

#### 論文調査の要旨

波長の短い水の波においては、表面張力が重力に対 して無視できなくなるが、波長の短くない波において も、振幅が大きくなるにつれ、波の頂点の曲率が増す ため、局所的に表面張力の効果が大きくなる. したが って、水の波の発展における素過程、特にさざなみの 発生のような現象を明らかにするためには、表面張力 と重力の両方を考慮した扱いが必要になる. 表面張力 と重力の両方を考慮すると、無次元表面張力係数 γ=  $Tk_0^2/(g\rho)$  (T は表面張力係数,  $\rho$  は流体の密度, g は重力加速度, ko は基本波の波数)の値に応じて, 様々な共鳴が起こる。特に、1/r が整数 N に近い場 合には, 高調波共鳴のために N 倍の高調波が基本波 と同程度の大きさをもつような定常進行波解が存在す る、従来からよく調べられてきた重力波に比べると、 表面張力重力波の場合は定常進行波解自体が複雑であ るために、その振る舞いについてはまだよくわかって いない点が多い、特に、応用上重要となるような、γ の値が小さい共鳴定常進行波解については、時間発展 はもとより線形安定性さえ、ほとんど解明されていな いのが現状である。

このような観点から、本論文は、2次元的な深水表 面張力重力波の共鳴定常進行波解の安定性を、非粘性 の仮定の下で、解析的な近似法及び厳密な方程式に基 づく数値計算を用いて調べた結果をまとめたものであ る.

本論文では、まず、 $\gamma = 1/20 \sim 1/5$ の範囲で、共鳴 の弱い定常進行波解に擾乱を加えた場合の時間発展を、 厳密な方程式を数値計算することによって調べ、 $\gamma$  あ るいは振幅のどちらかが大きい場合には、共鳴の弱い 定常進行波解が、側帯波擾乱及び高調波擾乱に対して、 不安定であることを明らかにしている. さらに、この 不安定の結果、定常進行波の頂点の前面の、勾配の最 も急な点からさざなみが発生し、このさざなみの波数 は共鳴高調波の波数に近いことが明らかにされている.

つぎに, γ=1/4 近傍で, 弱非線形の仮定の下に近 似方程式系を導出し, これを用いて, 主に共鳴の強い 定常進行波解の2次元的な長波長擾乱に対する線形安 定性を解析的に調べ、以下の成果を得ている.

(1)基本波と共鳴高調波が同程度の大きさをもつ場 合,及び,基本波に比べ共鳴高調波のオーダーが小さ い場合について,振幅が時間的,空間的にゆっくり変 化するという仮定下に,基本波と共鳴高調波の複素振 幅の時間空間発展を記述する近似方程式系をそれぞれ 導出している.

(2)近似方程式系の解のうち定常進行波解に相当す るものが,従来知られていた定常進行波解と一致する ことを明らかにしている.その際,従来知られていた 定常進行波解はみな頂点に関する対称性を仮定した解 であったが,十分な高次近似の下では,定常進行波解 の波形はおのずと頂点に関して対称になることを発見 している.

(3) 基本波と共鳴高調波が同程度の大きさであるような定常進行波解は、すべて不安定であり、解の種類に応じて、3種類の不安定が起こることを見出し、そのうち、1種類の不安定については、これが、共鳴がない場合の変調不安定と本質的に同じものであることを明らかにしている.

さらに、 $\gamma=1/4$  近傍で、厳密な方程式を数値計算 することによって共鳴の強い定常進行波解を求め、そ の解の 3 次元的な擾乱にたいする線形安定性を数値的 に調べ、以下の成果を得ている.

(4) γ が 1/4 に近く, かつ, 波の振幅が小さい場合 には,上述の近似方程式系による解が良い近似解にな っていることを明らかにしている.さらに,近似方程 式系による解析で見出された2種類の新しい不安定が, それぞれ,基本波のみを含む4波共鳴と,基本波と共 鳴高調波の両方を含む4波共鳴に起因する不安定であ ることを明らかにしている.

(5)本論文で調べた範囲の定常進行波解はすべて3 次元的な擾乱にたいして不安定であり,基本波と共鳴 高調波を含むような3波共鳴,4波共鳴,5波共鳴の 共鳴曲線を中心として,不安定領域が広がることを明 らかにしている.その際,異なる種類の不安定領域は, 擾乱の波数平面において重なることはなく,多くの場 合つなぎかわることを見出している.

以上要するに、本論文は、表面張力重力波の共鳴定 常進行波解の安定性を調べることによって、さざなみ の発生機構や定常進行波解の不安定の機構などに関し て多くの重要な知見を得ており、これらの成果は流体 力学上寄与するところが大きい.よって本論文は博士 (理学)の学位論文に値するものと認められる.