

京都大学	博士 (工学)	氏名	溝上 慧祐
論文題目	Atomic mechanism of $\{10\bar{1}2\}$ twin growth in Mg and Ti by phonon calculations (フォノン計算による Mg および Ti $\{10\bar{1}2\}$ 変形双晶成長の微視的機構)		
(論文内容の要旨)			
<p>本論文は、HCP 金属の変形や破壊を議論するうえで重要となる $\{10\bar{1}2\}$ 変形双晶成長の微視的機構を、原子の協調運動の描像に基づき理論計算によって検討した結果をまとめたものである。具体的には、Mg および Ti $\{10\bar{1}2\}$ 双晶構造におけるせん断ひずみ付与に対するフォノン構造の変化から双晶成長を議論しており、本論文は4章からなっている。</p> <p>第1章は序論であり、研究背景および研究目的を述べ、論文全体の流れを総括している。$\{10\bar{1}2\}$ 双晶成長の従来モデルとしては、Rotation-Shear モデルをはじめとする整合双晶界面による成長モデルと、界面ステップを介した成長モデルに大別される。整合双晶界面による成長モデルとしては、双晶成長に伴う界面近傍の原子の再配列機構を示したいくつかの提案モデルが存在するが、いずれのモデルにおいても、再配列に伴う原子変位をその変位量が最小となるように幾何学的に決定しており、原子再配列のエネルギー的な妥当性については十分な検討が行われていない。また、界面ステップを介した双晶成長モデルでは、界面ステップ移動に伴うステップ近傍での具体的な原子の再配列機構は示されていない。本論文では、Mg および Ti $\{10\bar{1}2\}$ 双晶を計算対象とし、第2章では整合双晶界面を含む構造を、第3章では界面ステップを含む双晶界面を含む構造を作製し、それぞれの構造において、せん断ひずみの付与に伴うフォノン状態変化を調べることで、双晶界面移動の際の界面近傍原子の再配列機構をエネルギー安定性に基づいて明らかにすることを目的としている。</p> <p>第2章では、Mg および Ti $\{10\bar{1}2\}$ 整合双晶界面を含む構造に対して、第一原理フォノン計算により、せん断ひずみ付与に伴うフォノン状態の変化を調べることで、双晶成長の微視的機構をエネルギー的な安定性に基づいて解明した結果を報告している。結果として、Mg $\{10\bar{1}2\}$ 双晶構造および Ti $\{10\bar{1}2\}$ 双晶構造に対して、段階的にせん断ひずみを加えながらフォノン計算を行うことで、ともに波数の Γ 点で光学モードのうち最小のフォノン振動数を持つフォノンモードがソフト化し、せん断ひずみを 0.01 および 0.014 付与した構造において、構造が動的に不安定であることを示す虚数振動モードが出現したことを報告している。虚数振動モードでの原子の振動方向は、双晶界面において原子を集団的に回転させるような方向となっていた。これらのフォノンモードにより、構造が動的に不安定になることから、動的に安定な構造を得る目的で、各フォノンモードが示す振動方向に各原子を微小変位させ、構造最適化を行った。結果として、いずれの構造についても、整合双晶界面において原子団の回転による再配列が起き、双晶界面が母相側に移動することを明らかにした。また、原子再配列による双晶界面の移動により、せん断応力の緩和が起こっていることも示した。以上の結果から、整合双晶成長の素過程は、ひずみ応力負荷により、構造が動的に不安定となり、界面近傍において原子の再配列が起きることで双晶界面の移動が起こる一連の過程であると結論づけている。</p>			

京都大学	博士 (工学)	氏名	溝上 慧祐
------	---------	----	-------

第3章では、より現実的な構造モデルとして Mg および Ti $\{10\bar{1}2\}$ 双晶界面に $\{10\bar{1}2\}$ 面2層分の界面ステップを導入した構造を選択し、第2章と同様にせん断ひずみ付与に伴うフォノン状態の変化を調べることで、界面ステップによる双晶成長の微視的機構を解明した結果を報告している。 $\{10\bar{1}2\}$ 面2層分の界面ステップを介在した双晶界面移動は、Re $\{10\bar{1}2\}$ 双晶界面において、高分解能電子顕微鏡によるその場観察により、実験的に観察されている。計算構造は、第2章で用いた Mg および Ti $\{10\bar{1}2\}$ 整合双晶構造に対して、双晶界面水平方向に単位構造を拡張し、 $\{10\bar{1}2\}$ 面2層分の界面ステップのペアを導入することで周期的な構造とし、さらに界面ステップ導入に伴う巨視的ひずみを初期ひずみとして与え、格子不変条件下で構造最適化を行なったものを初期構造としている。第2章と同様に、初期構造に対するせん断ひずみ付与によるフォノン状態の変化を調べることで、界面ステップ移動による双晶成長の際の原子の再配列機構をエネルギー的な安定性に基づいて議論している。本章における計算構造は、単位胞内に1000原子以上含み、第一原理フォノン計算の実行が困難であることから、回転不変量による構造特徴量を用いて作製された高精度の機械学習ポテンシャルを使用し、フォノン計算に必要な力定数を取得している。結果として、いずれの構造についても波数の Γ 点で光学モードのうち最小のフォノン振動数を持つフォノンモードにおいて、せん断ひずみ付与に伴う顕著なフォノン振動数変化がみられ、ひずみを加えたいくつかの構造については構造が動的に不安定であることを示す虚数振動モードとなることを明らかにした。これは界面ステップの移動による局所的な構造変化を反映した振動数変化であると考えられる。これらのフォノンモードにおける原子振動は、界面ステップにおいて第2章と同様に原子を集团的に回転させるような振動方向となっていることがわかった。したがって、これらのフォノンモードによりステップ近傍での原子の再配列が駆動され、結果として界面ステップが移動することで双晶が成長すると結論づけている。

第4章は結論であり、本論文で得られた成果について要約している。本論文では、Mg および Ti $\{10\bar{1}2\}$ 双晶について、整合双晶界面および界面ステップを含む双晶界面のいずれにおいても、せん断ひずみを構造に対して加えることで、構造が動的に不安定となる虚数振動モードが出現し、このフォノンモードを詳細に解析することで、原子再配列による双晶成長の微視的な機構をエネルギー安定性に基づいて明らかにしている。本論文における一連の計算結果から、 $\{10\bar{1}2\}$ 変形双晶成長の微視的機構は、界面における原子の集团的な回転による再配列として統一的に理解できると結論づけている。

(論文審査の結果の要旨)

本論文では、Mg および Ti {10 $\bar{1}$ 2} 変形双晶を対象として、双晶成長に伴う双晶界面近傍での原子の再配列機構を、せん断ひずみ付与によるフォノン状態の変化を調べることで明らかにしており、主な成果は以下のとおりである。

1. Mg および Ti {10 $\bar{1}$ 2} 整合変形双晶における双晶成長の微視的機構は、ひずみ応力負荷により、双晶界面近傍の原子団が回転するように再配列することで双晶界面の移動が起こる一連の過程であることを明らかにした。
2. 界面ステップを含む Mg および Ti {10 $\bar{1}$ 2} 変形双晶における双晶成長の微視的機構は、界面ステップ近傍において、{10 $\bar{1}$ 2} 整合変形双晶成長でみられた機構と類似の原子団回転による原子再配列により、界面ステップが移動することを明らかにした。
3. 以上の結果から、{10 $\bar{1}$ 2} 変形双晶成長の微視的機構は、界面における原子の集団的な回転による再配列として統一的に理解できることを示した。

上記のように、本論文では、局所的な原子の再配列を伴う構造変化を扱ううえで、原子の協調運動の描像に基づいたフォノン解析は有効であることを示しており、他の双晶変形モードにおける双晶成長機構の解明や、結晶粒界における双晶核生成機構の解明に本論文での手法が応用できると考えられる。このように、本論文における成果は、学術上、實際上寄与するところが少なくない。よって本論文は博士（工学）の学位論文として価値あるものと認める。また、令和4年1月17日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行って、申請者が博士後期課程学位取得基準を満たしていることを確認し、合格と認めた。