

(続紙 1)

京都大学	博士 (エネルギー科学)	氏名	湯浅 元仁
論文題目	ATOMIC AND ELECTRONIC STUDIES ON GRAIN BOUNDARY PLASTICITY AND FRACTURE IN METALS (金属材料における粒界塑性および粒界破壊に関する原子・電子論的研究)		
(論文内容の要旨)			
<p>本論文は、分子動力学 (MD) シミュレーションと第一原理計算を用いることにより、金属材料の粒界塑性および粒界破壊について、原子・電子論的立場から論じた結果をまとめたもので、11章からなっている。</p> <p>第1章は序論で、金属材料の力学特性に及ぼす結晶粒界の影響や結晶粒界の幾何学的構造について概説した後、粒界塑性や粒界破壊に関する現行の研究を簡単にまとめ、それらの研究における計算科学の重要性を述べている。さらに、粒界塑性の電子論的解析や粒界破壊の動的解析が進んでいないこと等現状の研究に関する問題点を指摘し、本研究の目的や関連研究の中での位置づけを記述している。</p> <p>第2章では、電析法により超微細粒2相 Co-Cu 合金を作製し、その力学特性を硬さ試験を用いて調べた結果を示している。さらに、MD シミュレーションを用いて、超微細粒2相 Co-Cu 合金の特異な力学特性が Co/Cu 異相粒界からの転位放出に起因していることを明らかにしている。</p> <p>第3章では、様々な Co/Cu 異相粒界の転位放出挙動に関する MD シミュレーションの結果を記述している。Co/Cu 異相粒界は単相粒界とは異なる複雑な欠陥構造を有しており、その特異な欠陥構造が atomic shuffling や粒界すべりに影響を及ぼすことを見出している。</p> <p>第4章では、Co/Cu 異相粒界の粒界すべり挙動と Cu/Cu 単相粒界の粒界すべり挙動を、MD シミュレーションを用いて比較している。その結果、Cu/Cu 単相粒界では粒界の自由体積と粒界すべりには強い相関関係が見られたが、Co/Cu 異相粒界ではそのような相関関係は見られないことを見出している。Co/Cu 異相粒界の欠陥構造は Cu/Cu 単相粒界のそれと比べ著しく複雑であり、そのため粒界すべりのメカニズムが Co/Cu 異相粒界と Cu/Cu 単相粒界では異なることを指摘している。</p> <p>第5章では、MD シミュレーションによる粒界すべり解析および第一原理計算による電子状態解析から、粒界すべりの電子論的解釈を記述している。すなわち、従来粒界すべりの支配的要因であると考えられてきた粒界エネルギーや偏析元素の原子半径などでは、粒界すべり挙動が説明できないことを示すとともに、粒界すべりを決定する支配的因子は粒界を構成する原子間の Bond Critical Point (BCP)での電子密度であることを見出している。</p> <p>第6章では、粒界脆化メカニズムの1つである Bond Mobility 機構の解明を目的に、第一原理引張試験を行うことで、P 原子を偏析させた鉄粒界の脆化メカニズムを調べている。P 原子は周辺の Fe 原子と高い電子密度を有する強い結合を形成するが、Fe-P 結合で</p>			

最初に **bond-breaking** が生じ、それが粒界破壊を誘起することを見出した。この原因を解明するために電子状態密度の詳細な解析を行った結果、**P** 原子は周辺の **Fe** 原子に共有結合性を付加するため、高い電子密度でも破断しやすい結合となることを明らかにしている。

第 7 章では、もう 1 つの粒界脆化メカニズムである **Decohesion** 機構の解明を目的に、**Cu** 偏析鉄粒界の脆化機構を第一原理引張試験により調べた結果を述べている。**Cu** 原子は周囲の **Fe** 原子から電子を奪う **Charge Transfer** より **Fe-Fe** 結合を弱め、その結果として粒界破壊が誘起されることを見出している。

第 8 章では、各種元素を偏析させた鉄粒界脆化において、従来の熱力学を用いた静的解析結果と第一原理引張試験を用いた動的解析結果を比較し、変形にともなう **BCP** での電子密度変化の解析の重要性を指摘している。

第 9 章では、実用上特に問題となっている鉄鋼材料の水素脆性について、第一原理引張試験および第一原理せん断試験を用いて、電子論の立場からそのメカニズムについて述べている。**H** 原子は **Fe** 原子と結合する際、イオン結合性と共有結合性の両方の性質を示すが、変形に伴ってイオン結合性が強くなり **H** 原子が周辺の **Fe** 原子から電子を奪う **Charge Transfer** により粒界脆化を誘起することを明らかにしている。

第 10 章では、軽量材料として注目されるマグネシウム粒界の水素脆性について、第一原理引張試験および第一原理せん断試験を用いて調べた結果について述べている。鉄粒界と同じくマグネシウム粒界においても、**H** 原子は **Mg** 原子との結合においてイオン結合性と共有結合性の両方の性質を示すが、**Fe-H** 結合とは異なり **Mg-H** 結合では変形とともに共有結合性が強くなることを見出している。すなわち、マグネシウム粒界の水素脆性は **Mg-H** 間の共有結合性に起因するものであり、鉄粒界水素脆性とはメカニズムが異なることを明らかにしている。

第 11 章は、結論であり、本研究で得られた結果を総括、要約している。

(続紙 2)

(論文審査の結果の要旨)

本論文は、分子動力学 (MD) シミュレーションと第一原理計算を用いることにより、金属材料の粒界塑性および粒界破壊を原子・電子論的立場から論じた研究の成果をまとめたものであり、得られた主な成果は次のとおりである。

- (1) 電析法により超微細粒 2 相 Co-Cu 合金を作製し、その力学特性を調べた結果、超微細粒 2 相 Co-Cu 合金は超微細粒単相 Co や Cu とは異なる応力の速度依存性を示し、それが Co/Cu 異相粒界からの転位放出によるものであることを見出した。さらに、MD シミュレーションを用いて、超微細粒 2 相 Co-Cu 合金の転位放出は Co/Cu 異相粒界に存在する複雑な欠陥構造に起因するものであることを明らかにした。
- (2) 粒界すべりの支配的因子を明らかにするため、各種金属の粒界をモデル化し、MD による粒界すべりシミュレーションと第一原理計算による電子状態解析を行った。その結果、これまで粒界すべりの支配的因子であると言われてきた粒界エネルギーと粒界すべりには明確な相関関係が見られず、粒界すべりを決定する支配的因子は粒界を構成する原子間の Bond Critical Point での電子密度であることを見出した。
- (3) 第一原理計算を用いた仮想引張試験を行い、不純物偏析による鉄粒界脆化メカニズムを調べた結果、不純物原子と鉄原子が共有結合的な場合には Bond Mobility 機構により、不純物原子と鉄原子がイオン結合的な場合には Decohesion 機構により脆化が促進されることを明らかにした。また、粒界脆化機構を正確に解明するには、平衡状態を仮定したこれまでの熱力学モデルでは不十分であり、変形中の電子状態の動的変化を解析することが重要であることを示した。
- (4) 第一原理計算を用いて、鉄およびマグネシウムの水素脆性のメカニズムを調べた。その結果、鉄-水素の原子結合、マグネシウム-水素の原子結合はともに、イオン結合性と共有結合性の両方の性質を有するが、変形を加えると前者ではイオン結合性が、後者では共有結合性が強くなり、最終的にそれぞれ異なるメカニズムで粒界脆化が生じることを明らかにした。

以上、本論文は原子構造・電子状態の観点から金属材料における粒界塑性および粒界破壊のメカニズムを明らかにしており、ここで得られた知見は学術上、実用上、寄与するところが大きい。

よって、本論文は博士 (エネルギー科学) の学位論文として価値あるものと認める。また、平成 23 年 12 月 19 日実施した論文内容とそれに関連した試問の結果合格と認めた。

論文内容の要旨及び審査の結果の要旨は、本学学術情報リポジトリに掲載し、公表とする。特許申請、雑誌掲載等の関係により、学位授与後即日公表することに支障がある場合は、以下に公表可能とする日付を記入すること。

要旨公開可能日： 年 月 日以降