

氏 名	佐 藤 紘 一
学位の種類	博士 (工 学)
学位記番号	工 博 第 2351 号
学位授与の日付	平成 16 年 3 月 23 日
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当
研究科・専攻	工学研究科機械物理工学専攻
学位論文題目	Point Defect Behaviors in Metals under High Strain (高歪み下における金属の点欠陥挙動)

論文調査委員 (主 査) 教授 義家敏正 教授 立花明知 教授 北村隆行

論 文 内 容 の 要 旨

金属において転位が活動しにくい条件下, 例えば薄膜の変形や高速変形時に, 高い弾性歪みが発生していることが最近報告されている。実験的にも, 引張破断直前に生成する薄膜部分では10%以上の弾性歪みが観察されている。また転位等の欠陥近傍でも10%程度の弾性歪みが存在する。このような高歪み場での点欠陥挙動は, 歪みのない場でのそれとは大きく異なると考えられるが, ほとんど説明されていない。本論文は, 高歪み場における点欠陥挙動を実験と計算機シミュレーションにより研究したものであり, その主な成果は次のとおりである。

第1章は序論であり, 金属中の格子欠陥について概説し, 格子欠陥を導入する典型的手段である塑性変形について説明している。また, 転位の生成や移動が起こりにくい薄膜や高速変形中の欠陥組織についての最近の成果を紹介し, これらの背景をもとに, 本研究の位置づけ, および本論文の構成について述べている。

第2章では金属における薄膜の変形や高速変形が, 転位による機構で説明できるかどうかを調べるために, Ni合金を用いた実験を行っている。透過電子顕微鏡を用いて, 純NiとNi-2at. %Sn合金の塑性変形中における転位の動きを調べ, 圧縮変形させた試料の内部組織から, 溶質原子であるSnが変形中に多量の転位をトラップしていることを確認している。また, これらの試料を引張破断して, 破断面に残っている転位の密度に差が見られないことから, 金属薄膜における引張破断時など高歪みが発生する場では転位の発生が極端に少ないことを見いだしている。

第3章では本研究に用いた計算機シミュレーションの方法を述べている。まず用いた多体ポテンシャルについて説明し, 点欠陥の生成・移動の活性化エネルギーの導出方法を述べている。そのポテンシャルから得られた物性値がほぼ実験値を再現することを確認している。

第4章では計算機シミュレーションによりCuおよびNiにおける高弾性歪み下での点欠陥挙動を調べるために, 結晶モデルに一軸性の歪みを与え, その中での原子空孔と格子間原子の生成・移動の活性化エネルギーを調べている。その結果, 歪みの存在により, 点欠陥の生成・移動の活性化エネルギーが大きく変化することを見いだしている。10%の引張歪みの場合, Cuでは原子空孔生成の活性化エネルギーが90%, 移動の活性化エネルギーが30%に歪みがない場合に比べて減少するという結果を得ている。そして, この結果が, 実験で報告されている金属薄膜の破断面近傍における大量の原子空孔集合体発生原因の一つとなると結論している。また格子間原子も原子空孔と同様に, 高歪み下では生成・移動の活性化エネルギーが減少することを見いだしている。更に格子間原子の安定状態と考えられているダンベル構造が, 歪みがあるとクラウディオ構造に移行する過程があるという結果を得ている。これは点欠陥の移動を考えるうえで非常に重要な知見である。また格子間原子の高弾性歪み下における拡散機構についても論じている。

第5章では第4章とは異なるポテンシャルを用いて点欠陥の挙動を調べ, ほぼ同じ結果が得られることを示し, 計算機シミュレーションで得られた結果は, ポテンシャルに依存しないことを確認している。

第6章ではCuとFeの刃状転位近傍における原子空孔の生成・移動の活性化エネルギーを計算機シミュレーションにより

調べ、原子空孔が最も圧縮された場に移動するためのエネルギーは低くなり、その場から遠ざかるためのエネルギーは高くなることを見いだしている。このことから、FCCおよびBCC金属ともに低温では原子空孔が転位芯近傍にトラップされ、バルクの原子空孔が十分に移動できる高温になると転位から離れるという機構を提案している。更に、陽電子消滅分光法により観察されている、塑性変形したFeやNiの焼鈍による原子空孔集合体の増加が、この機構により説明できると指摘している。

第7章は本論文のまとめであり、得られた成果について要約するとともに、今後に残された課題について述べている。

論文審査の結果の要旨

本論文は、金属薄膜の変形や高速変形等の転位が活動しにくい条件下での塑性変形機構を解明するために、金属の高歪み場における点欠陥挙動を実験と計算機シミュレーションにより研究したものであり、得られた主な成果は次のとおりである。

(1) 透過電子顕微鏡を用いて、純NiとNi-2at. %Sn合金の塑性変形中における転位の働きを調べた。圧縮変形させた試料の内部組織観察により、溶質原子であるSnが変形中に多量の転位をトラップしていることを確認している。また、これらの試料を引張破断した後の破断面に残っている転位密度に違いが見られないことから、金属薄膜における引張破断時など高歪みが発生する場では転位の発生が極端に少ないことを見いだしている。

(2) 計算機シミュレーションにより高弾性歪み下での点欠陥挙動を調べるために、FCC金属の結晶モデルに一軸性の歪みを与え、その中での原子空孔と格子間原子の生成・移動の活性化エネルギーを調べた。その結果、歪みの存在により、点欠陥の生成・移動の活性化エネルギーが大きく変化し、10%の引張歪みの場合、原子空孔生成の活性化エネルギーが90%、移動の活性化エネルギーが30%に歪みがない場合に比べて減少することを見いだしている。そして、これらの結果が、実際に観察されている金属薄膜の破断面近傍における大量の原子空孔集合体発生原因の一つとなると結論している。

(3) CuとFeの刃状転位近傍における原子空孔の生成・移動の活性化エネルギーを計算機シミュレーションにより調べ、原子空孔がもっとも圧縮された場（転位芯近傍）に移動するに従って移動の活性化エネルギーが低くなるという結果を得ている。このことから、室温では転位芯近傍に原子空孔がトラップされ、バルクの原子空孔が十分に移動できる高温になると転位から離れる機構を提案している。

以上要するに、本論文は、金属の高歪み場における点欠陥挙動を実験と計算機シミュレーションにより研究したものであり、学術上、実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、平成16年1月26日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行った結果、合格と認めた。