OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	時間拡張原子モデリング法による材料欠陥中における拡散現象に関する研究
Author(s)	石井, 明男
Citation	大阪大学, 2013, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/27501
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

【53】

氏名	石井明男（いしい あきお）
博士の専攻分野の名称	博士（工学）
学位記番号	第　２６０８４　号
学位授与年月日	平成25年３月25日
学位授与の要件	学位規則第４条第１項該当 基礎工学研究科機能創成専攻
学位論文名	時間拡張原子モデリング法による材料欠陥中における拡散現象に関する研究
論文審査委員	(主査) 教授　尾方　成信 (副査) 教授　平尾　雅彦　　教授　小林　秀敏　　准教授　萩　　博次 准教授　君塚　　肇

論文内容の要旨

金属結晶材料の変形特性は，内部の原子レベル欠陥の挙動に支配されているため，その詳細な理解には原子モデリング法による解析が有効である．しかしながらダイナミクスを取り扱う原子モデリング法は解析可能な時間が短く，原子拡散をはじめ，原子振動に比べて長い時間で起こる材料変形に寄与する各種スローダイナミクス現象を捉えることができない．本学位論文では長時間の原子レベル欠陥挙動の解析が可能な時間拡張原子モデリング法を開発し，それを用いて金属結晶材料中の原子拡散ダイナミクスの詳細を明らかにすることを通じて，原子拡散挙動と金属結晶材料の機械的特性との関係を明らかにしている．学位論文は全５章から構成されている．

第１章で序論を述べ，第２章では本研究で開発した時間拡張原子モデリング手法 adaptive boost 法の理論と計算機上での実現法について述べている．開発した adaptive boost 法では，位相空間での存在確率分布を分子動力学法による位相空間サンプリングにより評価する．そして，その存在確率分布から自由エネルギー曲面を平坦にするブーストポテンシャルを求める．この平坦になった自由エネルギー曲面に対して分子動力学計算を実施することで，原子レベルの長時間解析を可能とする．最後に，α鉄中の炭素拡散の解析やこれまでの手法との比較を通じて adaptive boost 法の有効性を確認している．第３章では adaptive boost 法を用いてα鉄中の転位付近での炭素拡散現象の解析について述べている．転位芯での侵入型固溶原子の高速拡散方向が，従来から述べられてきた転位芯方向ではなく，転位のすべり方向と共役なすべり方向であることを明らかにしている．第４章では主として拡散によって支配されているナノ金属結晶のクリープ変形のメカニズムを，分子動力学計算を用いて明らかにし，ナノ金属結晶のクリープ変形の構成方程式を提案している．最後に第５章で結論を述べている．

論文審査の結果の要旨

金属結晶材料の変形特性は、内部の原子レベル欠陥の挙動に支配されているため、その詳細な理解には原子モデリング法による解析が有効である。しかしながらダイナミクスを取り扱う原子モデリング法は解析可能な時間が短く、原子拡散をはじめ、原子振動に比べて長い時間で起こる材料変形に寄与する各種スローダイナミクス現象を捉えることができない。本論文では長時間の原子レベル欠陥挙動の解析が可能な時間拡張原子モデリング法を開発し、それを用いて金属結晶材料中の原子拡散ダイナミクスの詳細を明らかにすることを通じて、原子拡散挙動と金属結晶材料の機械的特性との関係を明らかにしている。学位論文は全５章から構成されている。

第１章で序論を述べ、第２章では本研究で開発した時間拡張原子モデリング手法adaptive boost法の理論と計算機上での実現法について述べている。開発したadaptive boost法では、位相空間での存在確率分布を分子動力学法による位相空間サンプリングにより評価し、その存在確率分布から自由エネルギー曲面を平坦にするブーストポテンシャルを求める。そしてこの平坦になった自由エネルギー曲面に対して分子動力学計算を実施することで、原子レベルの長時間解析を可能としている。本章の後半では、α鉄中の炭素拡散の解析やこれまでの手法との比較を通じてadaptive boost法の有効性を確認している。第３章では開発したadaptive boost法を用いたα鉄中の転位付近での炭素拡散現象の解析について述べている。その中で、転位と炭素との協調運動の存在や、転位芯での侵入型固溶原子の高速拡散方向が従来から述べられてきた転位芯方向ではなく結晶のすべり方向と共役な共役すべり方向であることを明らかにしている。第４章では拡散によって支配されているナノ金属結晶のクリープ変形のメカニズムを、分子動力学計算を用いて明らかにし、ナノ金属結晶のクリープ変形の構成方程式を提案している。最後に第５章で結論を述べている。

このように本論文では時間スケールの壁を超えるための手法を提案し、これまで計算によって取り扱われてこなかった固体材料中の拡散現象の解析を可能とするとともに、解析結果から材料変形に関連した幾つもの重要な知見を得ており、博士（工学）の学位論文として価値あるものと認める。