The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	イットリウム添加がマグネシウム結晶の力学特性に及ぼす影響の原子論的研究
Author(s)	松原, 和輝
Citation	大阪大学, 2016, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/55895
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

様式３

論　文　内　容　の　要　旨

氏　名　（　松　原　和　輝　）	
論文題名	イットリウム添加がマグネシウム結晶の力学特性に及ぼす影響の原子論的研究

論文内容の要旨

博士論文は、マグネシウム(Mg)中にイットリウム(Y)を添加したMg-Y合金において、強度の向上の要因となる溶質Y原子による析出物形成の機構、および延性の要因となるYを含有した積層欠陥が介在する塑性変形機構を第一原理電子状態計算法、分子動力学法等の原子シミュレーションを用いて解析し、固溶YがMg結晶の力学特性に対して与える効果とそのメカニズムを原子レベルから明らかにした成果をまとめたものである。

第一章では序論として研究の目的・背景を記述した後、軽量構造材料としてのMg-Y合金の特徴と強化機構について概観した。

第二章では、第一原理電子状態計算法および古典分子動力学法に基づく原子シミュレーション手法の概要を述べた。

第三章では、高濃度Mg-Y合金において析出強化現象の主因子となるナノ析出物における溶質規則化の機構を、第一原理電子状態計算を用いて解析した。特に、短距離のクラスター内相互作用と長距離のクラスター間相互作用の競合によって生じるナノ析出物の熱力学的安定性をエネルギー論的に評価し、固溶Yの特徴的な中範囲規則構造の形成に当たって適切な温度域と時効時間が必要となる要因を明らかにした。

第四章では、希薄Mg-Y合金においてY添加により延性が非線形的に向上する現象の要因を、原子間ポテンシャルに基づく古典分子動力学法を用いて解析した。固溶Yにより形成が促進されるI_1型積層欠陥を含有したMg結晶モデルにおいて、非底面転位の活動をきっかけとして{11-21}変形双晶が積層欠陥境界から生成する機構を明らかにした。更に、双晶界面が底面転位に対する抵抗の役割を果たし、系の強化ならびに延性の向上に対して寄与する可能性を見出した。

第五章では、Mgの構造異方性を考慮しながら準調和近似に基づく振動自由エネルギーを第一原理的に解析するための計算の枠組みを構築し、Mgの熱膨張の温度依存性の理論的予測と実験値との定量比較を通じてその有効性を確認した。

第六章では、本論文の結論としてまとめを述べた。

様式7

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏　名　（　松　原　和　輝　）			
論文審査担当者		（職）	氏　名
	主 査	教　授	尾　方　成　信
	副 査	教　授	吉　田　　博
	副 査	教　授	小　林　秀　敏
	副 査	准教授	堀　川　敬太郎
	副 査	准教授	君　塚　　肇

論文審査の結果の要旨

松原和輝氏の博士論文は、次世代の軽量構造材料の候補として注目されるマグネシウム(Mg)を対象に、イットリウム(Y)添加がMgの力学特性に対して与える影響およびその微視的機構に関して、第一原理電子状態計算法、分子動力学法等を活用して原子論的な立場から研究した成果をまとめたものである。

Mgは実用金属の中で最軽量の材料として注目されている一方で、他の金属系と比較した際の強度の低さおよび塑性加工性の悪さが実用上の課題となっており、構造材料として活用するに当たっては合金化による改質が欠かせない。このような中、YをMgに添加することにより、強度を保ちながら延性が飛躍的に向上するという他の添加元素では見られない特異な効果が見出されている。Y添加がMg結晶の力学特性、特に強度と延性の向上に対して果たす役割を詳細に理解し、そのメカニズムを明らかにすることは、より効果的・効率的な合金化を可能とするための設計指針を構築する上で有用な知見となり得る。

このような研究背景において、松原氏による本研究は、Mg-Y合金において強度の向上の要因となる溶質Y原子による析出物形成の機構、および延性の要因となるYを含有した積層欠陥が介在する塑性変形機構を原子レベルのシミュレーション手法を用いて解析し、固溶YがMg結晶の力学特性に対して与える効果とそのメカニズムを明らかにしている。特に、特徴的な規則パターンを有するナノ析出物相の熱力学的安定性に関して溶質クラスター間に働く長距離相互作用が支配的な役割を果たすことを見出したこと、また固溶Yにより形成が促進されるI_1型積層欠陥が介在した際の，Mgの複合的な変形モードの様態を明らかにしたことは重要な成果である。

平成28年2月22日に審査担当者と松原氏とで審査委員会を開き、松原氏に博士論文の内容について説明を行わせ質疑・討論および口頭試問を行った。論文の内容はこの分野の進展に寄与する十分な新規性を有していること、解析は緻密に行われていること、質疑において松原氏は本分野における十分な機械・材料科学に関する知見を有していることが確認できたことから、本論文は博士（工学）の学位論文として価値のあるものと認めるに至った。