



| | |
|--------------|---|
| Title | Ni結晶中の水素拡散機構の分子動力学法による研究 |
| Author(s) | 政家, 利彦 |
| Citation | 大阪大学, 2010, 博士論文 |
| Version Type | |
| URL | https://hdl.handle.net/11094/57504 |
| rights | |
| Note | 著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。 |

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

【81】

| | |
|-------------|--|
| 氏 名 | まさ 政 家 利 彦 |
| 博士の専攻分野の名称 | 博士(工学) |
| 学 位 記 番 号 | 第 23799 号 |
| 学位授与年月日 | 平成22年3月23日 |
| 学位授与の要件 | 学位規則第4条第1項該当 工学研究科知能・機能創成工学専攻 |
| 学 位 論 文 名 | Ni結晶中の水素拡散機構の分子動力学法による研究 |
| 論 文 審 査 委 員 | (主査) 教授 中谷 彰宏 (副査) 教授 南埜 宜俊 准教授 吉矢 真人 教授 浅田 稔 教授 菅沼 克昭 教授 平田 勝弘 教授 安田 秀幸 |

論文内容の要旨

本論文は、格子欠陥に起因する力学場中の水素原子の微視的な運動と巨視的な拡散特性を統一的かつ定量的に結びつける理論の定式化、およびNi結晶中における水素原子の拡散機構の解明を目的として行なった分子動力学法による研究成果をまとめたものである。本論文は全5章で構成されており、各章ごとの要旨は以下の通りである。

第1章では、研究背景となる金属結晶中における水素原子に関する研究、および、微視的な描像を基礎とする拡散理論の研究とその計算機シミュレーションによる研究の動向について述べ、本論文の目的を述べた。

第2章では、拡散理論と計算機シミュレーションの基礎理論について述べた。具体的には、格子欠陥に起因する力学場が水素原子の拡散特性に及ぼす影響についての検討において必要となる、一定エネルギーこう配下における水素原子の微視的運動と巨視的拡散特性とを結びつける一般化拡散理論を定式化した。ここでは、動力学理論に基づく微視的な方程式から、巨視的拡散特性を記述する方程式を導出した。さらに、跳躍理論に基づく拡散頻度と拡散係数の関係を導出し、動力学理論との整合性を示した。続いて、計算機シミュレーションの基礎となる分子動力学法、共役こう配法、Nudged-Elastic-Band法をはじめとした解析手法について述べた。

第3章では、Ni完全結晶中の水素原子拡散過程について、分子動力学法を用いる計算機シミュレーションを行なった。シミュレーションにより得られる水素原子のこう配による漂動を含む微視的情報に対して、動力学理論および跳躍理論により導出した評価式を用いて拡散係数を計算し、理論の妥当性と有効性を実験値との比較により明らかにした。また、動力学理論と跳躍理論に基づいて評価した拡散係数は定量的に一致することを明らかにした。さらに、水素原子の拡散素過程である安定サイト間跳躍に対して、分子動力学解析により得られた拡散係数の温度依存性とNudged-Elastic-Band法により活性化エネルギーを評価し、水素原子は遷移サイトに停留せず、跳躍の間はNi原子構造は変化しないことを明らかにした。

第4章では、双晶境界および拡張軸位近傍における水素原子拡散過程に対し、分子動力学法を用いて計算機シミュレーションを行ない、欠陥構造の存在に起因する水素原子拡散の漂動を明らかにした。

第5章では、本論文で得られた知見を総括し、結論を述べた。

論文審査の結果の要旨

格子欠陥が作り出す力学環境における水素原子の拡散機構を理解するためには、水素原子の微視的運動と巨視的な拡散特性を結びつける理論の構築が重要である。本論文は、Ni結晶中における水素原子拡散機構の解明を目的として、水素原子の微視的運動と巨視的拡散特性を結びつける定式化と、導出した理論式の妥当性および有効性を分子動力学シミュレーションにより検討した研究成果をまとめたものである。得られた知見を要約すると以下の通りである。

(1) 格子欠陥によって作り出される力学環境をモデル化した一定エネルギーこう配下における水素原子の微視的運動と巨視的拡散特性とを結びつける一般化拡散理論として、動力学理論に基づいて水素原子の座標の時間発展を用いて拡散係数を評価する定式化を行なっている。さらに、跳躍理論に基づいて水素原子の跳躍回数を用いて拡散係数を評価する定式化を行ない、動力学理論および跳躍理論による評価式の理論的な整合性を明らかにしている。

(2) Ni完全結晶中の水素原子拡散過程に対して、分子動力学法を用いた計算機シミュレーションを行ない、得られ

た水素原子の微視的運動から動力学理論および跳躍理論による評価式を用いて拡散係数を評価し、動力学理論と跳躍理論の定量的な整合性を計算機実験的に明らかにしている。さらに、実際の実験によって測定された拡散係数の値との比較により評価式の妥当性を明らかにしている。

(3) 水素原子の拡散素過程である安定サイト間の跳躍過程に対して、分子動力学解析により得られた拡散係数の温度依存性とNudged-Elastic-Band法により活性化エネルギーを評価している。これらの結果と原子配置の時系列変化の詳細な検討から、水素原子は跳躍過程において遷移サイトに停留せず、水素原子の跳躍中、Ni原子構造は変化しないという水素原子特有の拡散機構を明らかにしている。

(4) 双晶境界および拡張軸位近傍におけるNi結晶中の水素原子の拡散過程に対して、分子動力学解析を行なうことにより、格子欠陥が作り出すエネルギーこう配に関連する水素原子漂動を明らかにしている。

以上のように、本論文は、水素原子の微視的拡散機構と巨視的拡散係数を結びつける理論の構築と分子動力学解析による理論の有効性の検証を行なうとともに、格子欠陥によって作り出される力学的環境下での水素原子の拡散機構を解明しており、機械工学および材料工学に貢献するところは大きい。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。