

Title	BCC金属における自己格子間原子の移動に関する研究
Author(s)	網野, 岳文
Citation	大阪大学, 2011, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/59238
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、 〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉 大阪大学の博士論文について 〈/a〉 をご参照ください。

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

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

Osaka University

氏名	網野 岳文
博士の専攻分野の名称	博士 (工学)
学位記番号	第 24934 号
学位授与年月日	平成 23 年 9 月 20 日
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当 工学研究科マテリアル生産科学専攻
学位論文名	BCC 金属における自己格子間原子の移動に関する研究
論文審査委員	(主査) 教授 保田 英洋 (副査) 教授 荒木 秀樹 教授 田中 敏宏 准教授 荒河 一渡

論文内容の要旨

点欠陥の挙動に関する知見は、結晶格子欠陥論の基礎としてのみならず、原子炉や核融合炉材料の寿命予測および新規開発の上でも重要である。本論文は、点欠陥の一種である自己格子間原子 (SIA) の移動に関する新たな知見を得ることを目的とし、(1) SIA が関連する点欠陥反応を記述する反応方程式、および (2) SIA の挙動を特徴づける各種パラメーター、の二点に注目して研究を行い、その成果をまとめたものである。本論文は、以下に示す全 5 章から構成されている。

第 1 章は序論であり、研究の背景および目的を述べた。

第 2 章では、体心立方 (BCC) 格子結晶に対して、SIA と原子空孔の反応方程式に現れる点欠陥濃度のべき指数および幾何学的定数の反応半径依存性を object kinetic Monte Carlo (OKMC) 法によって評価し、確率理論に基づく既存式と比較した。この評価は、BCC 金属における SIA 移動の既存のモデルを考慮して、SIA の移動次元が三次元 (3D) と二次元 (2D) の場合について行った。その結果、SIA の移動次元が 1D の場合、既存の反応方程式における幾何学的定数の表式には修正が必要なことを明らかにした。また、既存式の存在しない、SIA 同士の反応に対して同様の評価を行い、その反応方程式を導出した。その結果、SIA の移動次元の違いによって、反応方程式の表式が大きく変わることを明らかにした。さらに、ここで導出したこれらの反応方程式の定量性は、多数の点欠陥が関わる系では、点欠陥同士の空間相関によって低下することを明らかにした。

第 3 章では、代表的な BCC 金属である高純度タングステン (W) に対して、16K から 291 K の温度範囲で、超高压電子顕微鏡 (HVEM) 内高エネルギー電子照射および微細組織観察を行い、照射によって生成される SIA の集合体 (転位ループ) について、その飽和数密度の照射温度依存等を測定した。また、SIA に関する各種パラメーターをインプット・パラメーターとして、大規模な OKMC シミュレーションを行い、照射温度 16 K における転位ループの数密度および平均サイズの照射時間依存性を再現するパラメーターの組を探索した。その結果、16 K では、SIA の移動次元は 1D であり、SIA の移動の活性化エネルギーは 0.02 eV 以下であると結論された。

第 4 章では、電子照射下での転位ループの成長過程が、SIA の移動次元を反映し得るか否かを OKMC 法により検討した。その結果、転位ループ径の時間依存性におけるべき指数の大きさが SIA の移動次元を反映することを

明らかにし、逆に、このべき指数の大きさを以て SIA の移動次元を比較的簡便に判別し得ることを見出した。電子照射下での高純度 W 中の転位ループの成長過程を HVEM によって 273 から 573 K において調べ、この手法を用いて、各照射温度での SIA の移動次元の判別を試みた。その結果、SIA の移動次元は、473 K 以下では 1D であるのに対し、473 から 573 K では、温度の上昇に伴って 1D から 3D へと遷移していくことが示された。

第 5 章では、本研究で得られた成果を総括した。

論文審査の結果の要旨

本論文は、代表的な点欠陥である自己格子間原子 (SIA) の移動に着目し、個々の SIA の挙動に関するパラメーターおよび SIA の関連する点欠陥反応を実験及び計算機シミュレーションによって調べたものであり、以下の知見を得ている。

- (1) SIA の関連する反応を記述する反応方程式における点欠陥濃度のべき指数および幾何学的定数の反応半径依存性を Object-based kinetic Monte Carlo (OKMC) 法によって評価する手法を開発している。
- (2) この手法を体心立方 (BCC) 格子結晶における SIA-空孔、SIA-SIA 反応に適用し、SIA の移動次元の違い (3 次元あるいは 1 次元) によって反応方程式の表式が大きく変わることを明らかにしている。また、この手法で導出した反応方程式は、OKMC 結果とは定性的には一致するが定量的には一致しないことを明らかにしている。
- (3) 代表的な BCC 金属である高純度タングステン (W) における 16K での高エネルギー電子照射下微細組織発達過程を超高压電子顕微鏡法を用いて調べるとともに、OKMC シミュレーションを組み合わせることによって、SIA の移動次元が 1 次元であること、および SIA の移動の活性化エネルギーが 0.02 eV 以下であることを明らかにしている。
- (4) 高エネルギー電子照射下における SIA 集合体 (転位ループ) の成長過程から SIA の移動次元を比較的簡単に判別し得る方法を開発した。この手法を W 中のループ成長へ適用し、473K 以上では、SIA の移動次元が 1 次元から 3 次元へと遷移することを明らかにしている。

以上のように、本論文は、超高压電子顕微鏡内電子照射実験と OKMC シミュレーションにより、SIA の関連する点欠陥反応方程式を導出するとともに、SIA の移動を特徴づけるパラメーターを明らかにしたものであり、結晶格子欠陥論の基礎としても、また、原子炉や核融合炉材料の寿命予測や新規開発においても、重要な知見を含んでおり、材料工学の発展に寄与するところが大きい。

よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。