

Title	金属材料中の異種原子が力学場と材料強度に与える影響の原子モデリング
Author(s)	新里, 秀平
Citation	大阪大学, 2018, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/69617">https://hdl.handle.net/11094/69617</a>
rights	
Note	やむを得ない事由があると学位審査研究科が承認したため、全文に代えてその内容の要約を公開しています。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">〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉</a> 大阪大学の博士論文について <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈/a〉</a> をご参照ください。

***Osaka University Knowledge Archive : OUKA***

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

Osaka University

## 論文内容の要旨

氏 名 ( 新 里 秀 平 )

論文題名

金属材料中の異種原子が力学場と材料強度に与える影響の原子モデリング

## 論文内容の要旨

金属材料中に異種原子を添加し合金化することで材料強度が向上する。また、実用環境中で異種原子が材料内部へ侵入することにより材料内部への化学場や力学場へ作用することで材料強度や材料寿命が変化する。新規合金材料の予測的開発や金属材料の腐食寿命の予測においてはこれら異種原子の影響を原子レベルから非経験的に予測することが不可欠である。本博士論文では金属材料中の異種原子が材料強度に与える影響および異種原子の材料中でのふるまいと力学場に与える影響を、原子モデリングに基づき非経験的に解析する手法を新規に構築し、その手法を用いて異種原子が材料内の力学場と材料強度に与える影響を解明した。

第一章では、研究背景・目的として合金材料開発における材料強度予測の現状と新規合金材料開発に向けた課題、および材料表面から侵入する異種原子が材料強度・寿命に与える影響とその予測に向けた課題を概説した。

第二章では、金属結晶材料の塑性変形を支配する転位欠陥と異種原子との相互作用に関する知見を原子モデリングにより獲得し、既存の降伏強度予測モデルに導入することで降伏強度を非経験的に予測する理論モデルを構築した。構築した理論モデルを用いて予測した降伏強度は経験的パラメータを一切用いずに実験により観察される温度・濃度・ひずみ速度に対する依存性を再現できることを確認した。

第三章では原子モデリングにより獲得した知見に加えて転位の複雑な挙動を解析できるkinetic Monte Carlo法を導入したモデルにより転位の移動速度を予測・解析し、異種原子が転位運動の素過程に与える影響とその温度・応力依存性を明らかにした。さらに、獲得した転位の移動速度に基づき降伏強度を予測し、複雑な転位運動の詳細を考慮することで、従来から行われている温度域によるモデルのスイッチングを行うことなく、単一のモデリングで広い温度域の降伏強度を統一的に予測できることを示した。

第四章では原子モデリングから獲得できる知見を導入した拡散方程式を用いて、ナノ材料に侵入する異種原子が材料中の力学場に与える影響と、材料中の力学場が異種原子の拡散プロセスに与える影響との相関を解析し、異種原子の侵入によるナノ材料の降伏の可能性と、材料の降伏が異種原子の拡散を遅延させることを示した。

第五章では第二章から第四章を総括し本博士論文の結論を述べた。

## 論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 ( 新 里 秀 平 )		
	(職)	氏 名
論文審査担当者	主 査	教 授 尾 方 成 信
	副 査	教 授 小 林 秀 敏
	副 査	教 授 田 中 正 夫
	副 査	准教授 君 塚 肇

## 論文審査の結果の要旨

新里秀平氏の博士論文は、異種原子が添加されることによって金属材料の力学場と強度が受ける影響を原子モデリングに基づくモデルを構築することで研究した成果をまとめたものである。

金属材料中に異種原子を添加し合金化することで材料強度が向上する。また、実用環境中で異種原子が材料内部へ侵入し材料内部の化学場や力学場へ作用することで材料強度や材料寿命が変化する。新規合金材料の予測的開発や金属材料の腐食寿命の予測においてはこれら異種原子の影響を原子レベルから非経験的に予測することが不可欠である。このような研究背景において、新里氏による本研究は金属材料中の異種原子が材料強度に与える影響および材料中の異種原子のふるまいと力学場との相関を、原子モデリングに基づき非経験的に解析する手法を新規に構築し、その手法を用いて異種原子が材料内の力学場と材料強度に与える影響を明らかにしている。異種原子の材料強度への影響の予測においては非経験的合金開発に向けた従来の予測モデルの問題点である転位運動と異種原子との相互作用の原子論的詳細と複雑な転位運動を導入することで経験的パラメータを必要としない予測モデルを構築し、異種原子が材料の降伏強度に与える影響を明らかにしている。また、原子論的詳細を導入した拡散方程式を用いてナノ材料に侵入する異種原子が材料中の力学場に与える影響と、材料中の力学場が異種原子の拡散プロセスに与える影響との相関を解析し、異種原子の侵入によるナノ材料の降伏の可能性と、材料の降伏が異種原子の拡散を遅延させることを示している。

平成30年2月13日に審査担当者と新里氏とで審査委員会を開き、新里氏に博士論文の内容について説明を行わせ質疑・討論及び口頭試問を行なった。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。