



Title	Theoretical Study on Defect Properties of Multi-Principal Element Ceramics
Author(s)	Hossain, Md. Rana
Citation	大阪大学, 2022, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/89645
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、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

Abstract of Thesis

Name (Md. Rana Hossain)	
Title	Theoretical Study on Defect Properties of Multi-Principal Element Ceramics (多元素セラミックスの欠陥の特性に関する理論研究)
Abstract of Thesis: In this thesis, multiple theoretical methods based on the density functional theory (DFT), interatomic potential based molecular statics (MS), and semidiscrete variational Peierls-Nabarro (SVPN) model were used to explore the defect properties of multi-principal element ceramics. Ceramics are typically composed of two or more principal elements; most of them are binary/ternary oxides, nitrides, and carbides, providing huge space for tuning the properties (e.g., mechanical, electronic, and transport properties) for various applications by varying the constituent elements. In addition, defects like vacancies, interstitials, dislocations, grain boundaries, and interfaces are always involved in ceramic microstructures and play an important role in determining and controlling the properties of ceramics. Here, properties of dislocations in MAX phases and oxygen vacancies in perovskite oxide ceramics have been studied systematically, which are the key defects for engineering them towards better mechanical and functional properties, respectively. In MAX phases, basal dislocations (BDs) are abundant, highly mobile, and able to multiply at room temperature like metals. Moreover, the confined BDs lead to kink band (KB) formation. Since the incipient plastic deformation in MAX phases is dominated by BD nucleation and their motion, understanding the characteristics of BDs is important for tailoring their mechanical properties for structural applications. Our DFT and interatomic potential-based MS calculations on Ti_3AlC_2 and Ti_3SiC_2 MAX phases showed that the core structure of BDs exhibit significant asymmetry depending on their position and sign in the basal slip plane. The negative (type-I) BDs disassociated into Shockley partial dislocations have high mobility like metals. On the other hand, the positive (type-II) BDs remain compact, less mobile, and show asymmetric response with respect to the shearing direction at absolute zero temperature. Most features of BDs in both Ti_3AlC_2 and Ti_3SiC_2 phases are found to be similar. The relative position of the Si and Al layer in the slip plane has a similar impact on the edge BDs resulting in type-I and type-II core structures. The type-I edge BD was found to be easy glide dislocation which could be relevant in other MAX phases and responsible for the incipient plastic deformation. Later, the influence of oxygen vacancies on the optical and magnetic properties synthesis of $\text{DyFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$ perovskite nanoparticles has been discussed based on DFT calculations combined with experimental observations. Compared to the antiferromagnetic bulk $\text{DyFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$ counter-part, the nanoparticles show room-temperature weak ferromagnetism mediated by oxygen vacancies present at the surface of nanoparticles. The bandgap of the nanoparticles has been narrowed down by Fe doping and the simultaneous presence of oxygen vacancies as indicated by DFT calculations. Magnetic materials that show magnetic order at room temperature or higher are highly desirable for spintronic applications. Therefore $\text{DyFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$ nanoparticles can be useful for room-temperature spintronic device applications like magnetic data storage and sensors. Moreover, due to its low bandgap and higher surface-to-volume ratio compared to the undoped parent materials, photocatalytic degradation and water-splitting ability are expected to be enhanced and can be used as efficient photo-catalyst.	

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 (Md. Rana Hossain)			
	(職)	氏 名	
論文審査担当者	主 査	教 授	尾 方 成 信
	副 査	教 授	垂 水 竜 一
	副 査	教 授	中 村 篤 智
	副 査	教 授	君 塚 肇
(名古屋大学大学院工学研究科)			
論文審査の結果の要旨 Md. Rana Hossain氏の博士論文は、多元素セラミックス中の欠陥そのものの特性や、欠陥がセラミックスの物性に与える影響を、第一原理計算に基づく各種原子論的解析を用いて明らかにした研究成果をまとめたものである。 多元素セラミックスのひとつであるMAX相は、結晶内に金属結合と共有結合の両方の結合様式を有しており、セラミックスのように高い強度を有しつつも、金属のように塑性変形するという、興味深い特性を発現することが知られている。しかしながら、その塑性変形をもたらしている転位がもつ特性の詳細については十分に明らかになっていない。そこでMd. Rana Hossain氏はまず、典型的なMAX相のひとつである六方稠密構造を有するTi_3AlC_2に着目し、その変形を支配する底面刃状転位の転位芯構造とその運動を支配するパイエルスエネルギーやパイエルス応力を、密度汎関数法に基づく第一原理計算と準離散変分パイエルスナバロモデルを用いることで明らかにしている。次に、MAX相であるTi_3SiC_2に着目し、まず当該MAX相の各種物性の密度汎関数法に基づく第一原理計算結果を首尾良く表現できる原子間ポテンシャル表現 (SNAPポテンシャル) を開発し、計算コストが高い第一原理計算に比べて極めて高速かつ精度を損なうことなく、原子論的解析を実施することを可能としている。さらに開発したSNAPポテンシャルを用いて、同MAX相中の刃状転位やらせん転位の転位芯構造の詳細の解析やパイエルス応力の解析に成功している。これらMAX相の底面転位芯構造に対する解析の結果、転位芯構造が著しい非対称性を持つことや、解離してできた2つの部分転位の移動度が大きく異なることを発見している。 最後に、$\text{DyFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$ ペロブスカイトナノ粒子の光学特性および磁気特性の酸素空孔の影響について実験と理論計算の両側面から明らかにしている。特に、バルク材が室温で反強磁性を示すのに対し、ナノ粒子は弱強磁性を示すことを明らかにしている。 令和4年8月2日に審査委員会を開き、Md. Rana Hossain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。			