

博士論文審査の結果の要旨

氏名	吉川 創
学位名	博士 (工学)
学位番号	甲 第 740 号
論文題目	マグネシウムの塑性変形における素過程に関する原子論的研究
論文審査委員	主査 松中 大介 榊 和彦 中山 昇 西村 正臣 椎原 良典 (豊田工業大学)

(博士論文審査の結果の要旨)

本論文は、六方最密構造を持つマグネシウムの塑性変形に関する理解を深化させることを目的として、その塑性変形における重要な素過程を原子論的な計算手法により詳細に解析し、結果に対する考察をまとめている。

第1章では、序論として、本論文の研究背景を述べ、マグネシウムの変形機構を簡単に概説し、本論文の目的および構成について示している。

第2章では、本研究の解析で用いた分子動力学 (MD) 法と Nudged Elastic Band (NEB) 法について説明し、それらの原子シミュレーションで適用したマグネシウムの原子間ポテンシャルとその基本的な物性値を示している。

第3章では、すべり面に対して垂直方向の荷重が負荷された条件下における底面、柱面、一次錐面に対するせん断変形の MD シミュレーションを実行し、3つの a すべりにおける分解せん断応力以外の非すべり応力の影響を詳細に解析している。底面および一次錐面に対するせん断変形の場合では、垂直応力の負荷による明確な変形挙動の変化は観察されなかった。一方、柱面に対するせん断変形においては、垂直応力によって変形挙動が異なった。MD の結果に対して、{101-1} 双晶を介した a 方向のすべり変形の機構を考察している。また、EAM と MEAM の2種類の原子間ポテンシャルを適用することで各変形モードの活動度が異なる系を仮想的に考慮し、柱面すべりと {101-1} 双晶の相対的な活動度の違いが小さい場合には垂直応力の影響が顕著であることを示している。

第4章では、 I_1 型積層欠陥近傍での欠陥生成について MD シミュレーションを用いて解析している。 I_1 型積層欠陥を含む原子モデルに対してせん断変形を加える解析を行い、せん断変形の方位に依存して I_1 型積層欠陥から {112-1} 双晶や c+a 部分転位が生成されることを示した。また、 I_1 型積層欠陥からの c+a 部分転位の生成に関して、二次錐面だけでなく一次錐面にも生じることを明らかにし、生成時のバーガースベクトルの分解反応を議論している。

第5章では、NEB 法を用いて {101-2} 双晶の均一核生成の最小エネルギー経路を解析し、{101-2} 双晶に関してエネルギー論的評価を行っている。双晶変形に対応するせん断ひずみをモデルに加えることで、双晶が生成した終状態が安定化され、核生成のエネルギー障壁も減少することを明らかにした。NEB 解析から得られたエネルギー曲線は、古典的な核生成理論に基づくモデル計算によって定性的な傾向が説明できるが、せん断ひずみが大きい場合では臨界核サイズやエネルギー障壁が核生成理論とは異なることを示した。

以上のように、本論文で得られた成果はマグネシウムの塑性変形に関して重要な基礎的知見を与えており、特に、固体力学および材料科学の分野に寄与するところが多い。よって、本論文は博士論文として価値あるものと認める。

(公表主要論文名)

1. So Yoshikawa, Daisuke Matsunaka, “Molecular Dynamics Study of Influences of Non-Glide Stress on $\langle a \rangle$ Slips in Magnesium”, *Materials Transactions* Vol. 61, No. 1, pp. 127-135 (2020).
2. So Yoshikawa, Daisuke Matsunaka, “Defect nucleation from a pre-existing intrinsic I1 stacking fault in magnesium by molecular dynamics simulations”, *Computational Materials Science* Vol. 179, 109644 (2020).