

# 博士論文の内容の要旨

氏名	吉川 創
学位名	博士 (工学)
学位授与年月日	2020年9月30日
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

(博士論文の内容の要旨)

マグネシウム (Mg) は比強度・比剛性に優れた材料であり、その比重は、鉄 (Fe) の約 1/4, チタン (Ti) の約 1/3, アルミニウム (Al) の約 2/3 と、実用金属中で最も軽量であるため、自動車や航空機をはじめとする輸送機器の軽量化において、益々の幅広い実用化が期待されている。しかし、Mg 材料の室温延性は低く、室温での成形加工が困難であることがその幅広い実用化のための課題の一つとして残されている。これは Mg の結晶構造が六方最密 (HCP) 構造であるために、主すべり系である底面すべりだけではすべり系の数が十分でなく、多結晶において任意の形状に変形するには五つの独立なすべり系が必要であるとする von Mises の条件を満たせないためである。したがって、von Mises の条件を満たすためには非底面すべりの駆動が重要となる。しかし、室温域での非底面すべりの臨界分解せん断応力 (CRSS) は底面すべりと比べて極めて高く、その温度依存性は大きいため、非底面すべりはほとんど駆動しない。このすべり系の不足を補うために、Mg の塑性変形では双晶変形も駆動する。Mg の塑性変形においては複数の種類のすべり系が関係し、双晶変形も寄与する上、それらの活動性が著しく異なるため、その変形挙動は体心立方 (BCC) 金属や面心立方 (FCC) 金属と比べ非常に複雑になる。一方で、Mg の塑性変形を理解しそれを深化させるためには、単一の変形モードだけでなく、複数の変形モードそれぞれの理解が必要不可欠である。

本研究では、実験的に直接観察することが困難な Mg の塑性変形における種々の素過程を原子スケールで解明することを目的とした。そこで、原子スケールで欠陥場のダイナミクスを解析することが可能な分子動力学 (MD) 法および欠陥の生成や反応といった動的過程をエネルギー論的に調べる事が可能な Nudged Elastic Band (NEB) 法を用いて、Mg の(a)すべりに及ぼす非すべり応力の影響、 $I_1$  積層欠陥からの欠陥核生成、 $\{10\bar{1}2\}$ 双晶の均一核生成に主眼を置き、それぞれの解析を行った。各章で得られた知見および結論は以下の通りである。

第 1 章では、研究背景と Mg の基本的な変形特性について述べた。また、本研究の目的と構成を示した。

第 2 章では、本研究で用いた MD 法と NEB 法の概要を説明し、これらのシミュレーションで用いられる原子間ポテンシャルを記述しそれらの基本的な物性値を示した。

第 3 章では、すべり面に対して垂直方向の荷重の負荷下において、底面、柱面および一次錐面に対するせん断変形の MD シミュレーションを行うことで Mg の(a)すべりに及ぼす非すべり応力の影響を調べた。また、各変形モードに対して異なる活動の容易さを有する二種類の原子間ポテンシャルを用いることで、得られた結果を議論した。底面および一次錐面に対するシミュレーションでは、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。また、一次錐面に対するシミュレーションでは、一次錐面すべりは観察されず、双晶変形を介して(a)方向の塑性変形が生じることを示した。柱面に対するシミュレーションでは負荷した垂直応力によって変形挙動が異なったが、これは二つの原子間ポテンシャルの変形モード間の相対的な活動の容易さの違いによって引き起こされることを示した。本結果は、各変形モード間の相対的な活動の容易さが低い場合、非すべり応力成分が Mg の変形挙動に影響を及ぼすことを示唆する。

第 4 章では、Mg-Y 合金において強化された(c+a)転位の活動の要因として考えられている  $I_1$  積層欠陥 ( $I_1$  SF) が Mg の塑性変形において果たす役割を調べるために、 $I_1$  SF を含んだ Mg に対してせん断変形の MD シミュレーションを行った。その結果、 $\{11\bar{2}1\}$ 双晶形成に対する分解せん断応力 (RSS) が高い場合、 $I_1$  SF の端部から $\{11\bar{2}1\}$ 双晶が形成され、錐面すべりに対する RSS が高い場合、 $I_1$  SF の端部から二次錐面および一次錐面に関して SF を伴って(c+a)部分転位が生成されることを示した。さらに、 $I_1$  SF 端部での転位の分解反応をエネルギー的に評価し、 $I_1$  SF 端部の転位の特性および(c+a)部分転位成分の違いから、一次錐面上の(c+a)部分転位の生成が二

次錐面上での生成よりも優位であることが分かった。これらの知見は、 $I_1$  SF が  $\langle c+a \rangle$  転位の生成のための有望な欠陥構造であることを支持する。

第 5 章では、NEB 法を用いて  $\{10\bar{1}2\}\{\bar{1}011\}$  双晶の均一核生成のエネルギー解析を行った。NEB 法を用いた  $\{10\bar{1}2\}$  双晶の核生成のエネルギー解析では、負荷せん断ひずみに応じてエネルギー曲線に違いが現れ、せん断ひずみの負荷によって双晶の形成が安定化された。また、 $\{10\bar{1}2\}$  双晶の均一核生成におけるエネルギー変化を、欠陥エネルギーと弾性ひずみエネルギーを用いてモデル化した。双晶の成長に関して、モデル計算は NEB 計算と定性的に一致することを示すが、両計算による結果は双晶の核生成がモデル計算のような核生成理論とは一致しないことを示唆する。

第 6 章では、本論文で得られた成果を総括し、今後の展望について述べている。