

論文審査の結果の要旨および担当者

報告番号	※ 甲 第 12757 号
------	---------------

氏 名 浮田 昌也

論文題目

無機化合物中の結晶転位の構造と運動に関する第一原理計算
(A first-principles study on atomic structures and motion of
dislocations in inorganic compounds)

論文審査担当者

主査	名古屋大学	教授	松永 克志
委員	名古屋大学	教授	小橋 眞
委員	ファインセラミックスセンター	主任研究員	桑原 彰秀
委員	名古屋大学	准教授	中村 篤智

論文審査の結果の要旨

浮田昌也君提出の論文「無機化合物中の結晶転位の構造と運動に関する第一原理計算」は、AgClおよびZnS結晶中の転位の電子・原子構造ならびに運動性を理論的に解析し、これら無機化合物結晶の示す特異な塑性変形挙動の物理的な起源を解明している。各章の概要は以下の通りである。

第1章では、転位の基本的特性を概説し、代表的な無機化合物の示す塑性に関する過去の報告をまとめるとともに、本研究の目的を述べている。

第2章では、AgCl中の各すべり系のすべり変形抵抗について、一般化積層欠陥（GSF）エネルギーとパイエルス・ナバロ近似に基づいて調査した結果を述べている。AgClと同じ結晶構造を有するNaClでは存在しなかった、Ag-Cl間やAg-Ag間の共有結合的相互作用によってすべり変形抵抗が低下し、AgCl中では複数のすべり系が活動可能であることを明らかにしている。

第3章では、四重極子配列モデルを用いて、NaClおよびAgCl中の転位コア構造を計算した結果を述べている。転位の自己エネルギーの計算結果より、AgCl中の転位はNaCl中の転位よりもエネルギー的に安定であることがわかった。とくにAgCl中のらせん転位は、顕著に小さい転位コアエネルギーを持つことを明らかにした。すなわち、AgClが示す特異な塑性変形挙動の起源として、らせん転位形成の促進を示唆する知見を得ている。

第4章では、ZnS結晶中の{111}すべり面のすべり変形抵抗について、GSFエネルギーとパイエルス・ナバロ近似に基づいて調査した結果を述べている。ZnSにおけるすべり面として考えられるglide面およびshuffle面におけるGSFエネルギーから、glide面上に沿って、ショックレー部分転位へ分解した際に形成される積層欠陥が形成されるほうが、より安定であることがわかった。また、弾性論に基づき自己エネルギーを算出した結果、glide面上の拡張転位はshuffle面上の完全転位よりも低い自己エネルギーを有することが明らかとなった。この結果より、暗室下でのZnSの巨大塑性変形挙動は、glide面上の拡張転位によって支配されることを明らかにしている。

第5章では、四重極子配列モデルを用いて、ZnS中の部分転位を計算した結果を述べている。ZnSにおける部分転位コアの原子配列の再構成を検討した結果、すべての部分転位において再構成が生じないことが明らかとなった。一方で、計算セルの電子数を変化させた部分転位コアの計算を行ったところ、原子配列の再構成が起こった。よって、光照射で生成された電子やホールが、転位コアでトラップされると、転位コアにおいて原子配列の再構成が起こり、ZnS中の部分転位の易動度が大きく低下すると考えられる。この結果は、光照射の有無によってZnSの塑性変形能が変化する現象を説明するために有用な知見である。

第6章では、本研究の結論を与えている。

以上のように本論文では、第一原理計算を用いて、AgClおよびZnS結晶中の転位の電子・原子構造ならびに運動性を明らかにしている。ここで得られた結果は、無機化合物の機械的性質の制御を実現するために重要であり、工学の発展に寄与するところが大きいと判断できる。よって、本論文の提出者である浮田昌也君は博士（工学）の学位を受けるのに十分な資格があると判断した。