

審査の結果の要旨

氏名 西村 仁志

アルミナ多結晶は代表的な高温構造用セラミックスであり、その巨視的な特性は粒界の構造や性質に強く依存している。またその粒界も粒界性格によって様々な構造や特性を有する。よって粒界が及ぼす材料特性を本質的に理解するためには、様々な粒界を系統的に調査し、各粒界の構造と物性との関係を明らかにすることが重要となる。本論文では、アルミナ双結晶を用いて系統的に[0001]軸を回転軸とする対称傾角粒界を作製し、粒界原子構造の定量的な解析を行うことによって、粒界原子構造と粒界すべり特性との相関性、粒界における不純物偏析効果を明らかにすることを目的としている。粒界原子構造は高分解能透過型電子顕微鏡法 (HRTEM)、格子静力学法によって実験的理論的に解析した。そしてその粒界すべり挙動を圧縮クリープ試験によって測定し、粒界原子構造との相関性を明らかにした。また不純物を粒界に偏析させた双結晶を作製し、それによる粒界構造の変化やすべり挙動への影響を明確にした。本論文は五章からなる。

第一章は序論であり、アルミナ結晶及び粒界の幾何学モデルに関して概説し、双結晶研究の有用性や実験手法に関する概略を述べている。また、本研究の位置づけ、重要性、新規性などとともに本研究の目的について述べている。

第二章では、アルミナの粒界原子構造を定量的に明らかにすることで、包括的にその特徴を明確にすることを目指している。本研究において独自に作製したアルミナ双結晶を HRTEM 観察することによって、粒界にはアモルファス相等の第二相は見られず原子レベルで直接接合していることが確認された。また、小傾角粒界は、完全転位ではなく分解した 2 つの部分転位と積層欠陥から形成された転位列によって構成されていることが分かった。さらに、その分解距離は転位間に働く弾性反発力と積層欠陥領域を縮めようとする引力とのバランスによって決定されることを明らかにし、この小傾角粒界においては部分転位に分解して存在する方がエネルギー的に有利であることを実証した。また、near $\Sigma 3$ 粒界も転位列によって構成されており、 $\Sigma 3$ 方位関係の DSC ベクトルに相当する転位が周期的に導入されていることが分かった。一方、対応粒界の粒界原子構造解析を行った結果、HRTEM 像と計算から得られた原子モデルは良く一致した。さらに定量的な解析を行った結果、全ての粒界は幾何学的には対称傾角粒界であるが、粒界方向に並進成分を持つため原子レベルでは非対称な構造を有していることが分かった。ま

た、大部の粒界が比較的大きな原子空隙をその構造中に含んでいること、粒界構造は Σ 値よりもむしろ粒界面に強く依存していることなどについても明らかにした。最後にサーマルグループヴィング法によって粒界エネルギーを測定し、それが粒界性格に強く依存していることも実験的に明らかにした。

第三章では、粒界構造と粒界すべり挙動との相関性について検討している。その挙動は粒界性格によって異なっていたが、 Σ 値や傾角といった幾何学的なパラメータでその挙動を一義的に整理することはできなかった。そこで粒界原子構造に注目したところ、粒界極近傍の原子密度とすべり速度との間に相関性が見られ、粒界を形成する原子密度が小さいほどクリープ変形が起こりやすいことが明らかとなった。また、変形後の粒界観察において転位の発生は観察されなかったことから、この変形は転位の活動ではなく粒界拡散を主機構とした現象であることが示唆された。さらに、HRTEM 観察の結果、アルミナの低エネルギー面である $\{11\bar{2}0\}$ 面に沿って粒界が **waving** していることが分かった。これは、今回の粒界すべりが、Ashby によって提案されている粒界すべりモデルに準じた **shuffling** メカニズムによって進行していることを示唆している。

第四章では、Y、Ti といった不純物が原子レベルで粒界構造やすべり挙動に及ぼす影響に関して新たな知見を得ることを目的としている。まず、不純物を偏析させた Al_2O_3 双結晶を作製し、HRTEM 観察や圧縮クリープ試験を行った。その結果、Y の偏析によって粒界原子構造はほとんど変化しないが、その粒界すべり挙動は無添加粒界と比較して大きく抑制されることが分かった。また、格子静力学計算によって Y は粒界の原子スペース近傍に偏析することが明らかとなり、Y の微量偏析では粒界構造はほとんど変化しないことが理論的にも示唆された。一方、Ti 添加粒界は無添加の場合と比べて、かなりクリープ変形速度が大きくなったことから、Ti が粒界に偏析し粒界すべりを促進していることものと予想される。またこの場合も Ti 添加による構造の変化は認められなかった。こうした粒界すべり挙動の変化は、第三章で示したような構造上の要因ではなく不純物が存在することによる Al-O イオン結合力の増減によるものと結論づけた。

第五章は総括であり、本論文全体の成果がまとめられている。

以上を要約すると、本論文では、まず系統的にアルミナ粒界の原子構造を調べることで、その特徴を包括的に理解している。そして粒界特性の1つである粒界すべり挙動と粒界原子構造との本質的な相関性を見出した。さらには、不純物による粒界原子構造及び粒界すべり挙動への影響に対して実験、理論の両面からアプローチし、新たな知見を得た。以上、本論文で得られた成果は、アルミナセラミックスの粒界研究に大きなブレークスルーを与えるものと期待される。

よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。

「審査の結果の要旨」の概要

1. 課程・論文博士の別 課程博士
2. 申請者氏名（ふりがな） 西村 仁志（にしむら ひとし）
3. 学位の種類 博士（工学）
4. 学位記番号 博工 第 号
5. 学位授与年月日 平成 年 月 日
6. 論文題目 アルミナセラミックスの粒界原子構造と高温変形挙動
7. 審査委員会委員
(主査) 東京大学 教授 幾原 雄一
助教授 枝川 圭一
助教授 榎 学
助教授 山本 剛久
助教授 渡邊 聡
8. 提出ファイルの仕様等
提出ファイル名 仕様アプリケーション OS
使用文書ファイル 西村仁志.doc word 2000 win 2000
テキストファイル 西村仁志.txt