

審査の結果の要旨

氏名 サイード ハサン アフタブ

論文題目 Reaction pathway analysis of homogeneous dislocation nucleation in solids: Influence of crystal structure

(固体における転位の均質核生成の反応経路解析—結晶構造の影響—)

転位の生成現象に関する研究は、パイエルス、ライスらによる転位論からのアプローチが古くから行われている。しかしながら、連続体的取り扱いでは、原子スケールの転位芯の取り扱いがあいまいになり精度に欠けるといった問題があった。

一方、近年の原子シミュレーションの進歩は、転位の生成に関して、一定の成果を挙げてきた。しかしながら、現在、最も大きな課題は、時間スケールが長い転位の生成現象に対して、分子動力学などの原子振動を扱う手法は、適用できないということであった。しかしながら、近年 Nudged Elastic Band 法を始めとする時間スケールの問題を克服する手法が多く提案され、その問題が解決に向かいつつある。

本論文では、Nudged Elastic band 法 (NEB 法) をベースとした転位の反応経路解析を使って、固体中の転位の均質核生成の活性化エネルギー及び活性化体積の応力依存性を調べる手法を FCC, BCC, ダイヤモンド構造など様々な結晶構造へ応用し、結晶構造による物理現象の違いを明らかにするものである。さらに、シリコンに対しては、異なる種類の転位であるシャフルセット転位とグライドセット転位の核生成の違いを明らかにした。また、従来の連続体ベースの転位論では扱えない原子スケール特有の現象について指摘し、本手法の有効性について提案した。

第一章では、研究の背景と目的について述べられている。

第二章では、用いたシミュレーション手法である NEB 法の詳細と、転位の生成過程を表現するために不可欠である人工的な転位のすべり面への挿入手法が述べられている。これらは、NEB 法の転位形状のレプリカを作成するために必要な手法である。

第三章では、FCC 構造として Cu, BCC 構造として Mo, ダイヤモンド構造として Si の均質核生成解析モデルについての詳細が述べられている。

第四章では、転位の均質核生成プロセスに対して、Cu, Mo, Si について、活性化エネルギー、鞍点の転位の形状、活性化体積の比較を行っている。結果、活性化エネルギー及び体積は Mo, Si, Cu の順に高くなることがわかった。転位の形状については、Cu はすべり面内に限定されたすべり変位が生じるが、Mo, Si

はすべり面外の変位が大きく、転位生成の障壁に重要な役割を果たすことがわかった。さらに、Mo では、バーガースベクトルと異なる方向へのすべりが生じていることがわかった。

また、従来転位の生成の障壁の指標として用いられてきた不安定積層欠陥エネルギーが誤った評価をもたらすことを示した。具体的には、不安定積層欠陥エネルギーは、Mo より Si のほうが大きかったが、活性化エネルギーは Mo のほうが大幅に大きいことがわかり、定性的にも不安定積層欠陥エネルギーの評価は問題があることがわかった。さらに、均質核生成と角部や表面からの不均質核生成との比較も行われ、形状・応力の不均質性に起因して、主に臨界核の形状が異なり、活性化体積が小さくなることがわかった。

第五章では、パイエルスーナバロウモデルとの比較を行い、パイエルスモデルが活性化エネルギーを Si で 2 倍、Mo で 5 倍程度過大評価すること、原子レベルでは、すべり変位がバーガースベクトルより小さいという転位芯の構造を正しく表現しないことが分かり、本原子スケールモデルの有効性を示した。

第六章では、シリコンのグライドセット転位とシャフルセット転位の比較を行った。結果、6.5GPa 以上の応力ではシャフルセット転位の活性化エネルギーがグライドセット転位より小さくなり、それ以下の応力では逆にグライドセット転位のほうが小さくなることがわかった。これは、高温低応力ではグライドセット転位が観察され、低温高応力でシャフルセット転位が観察される実験結果を定性的に説明していると考えられ、長年議論されてきたシャフルーグライド論争を均質核生成の観点から明らかにした。

第七章では、結論と今後の課題が述べられている。さらなる、材料の展開、不均質核生成との関係の一般化が課題であることが示された。

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。