

## 審査の結果の要旨

氏名 栃木 栄太

本論文では代表的構造用セラミックスである $\alpha$ -アルミナ( $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$ )における種々の転位構造、ドーパントの転位偏析挙動および変形双晶の成長過程について、透過型電子顕微鏡法(TEM)による解析を中心として詳細に論じられている。 $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$ は高温構造材料として広範に用いられており、さらなる機械特性の向上が望まれている。結晶塑性と密接な関わる格子欠陥である転位および変形双晶は古くから研究対象とされてきたが、それらの原子レベルの構造や動的な振る舞いに関しては未だ十分に理解されたとは言い難い。これは、転位および変形双晶の結晶中への導入を制御することが難しく詳細な欠陥構造の解析には至っていないためであると言える。このような点を踏まえ、本研究では転位の導入には双結晶法、変形双晶の導入にはナノインデンテーション法を採用することで、転位の原子構造および変形双晶の動的挙動の解析を実現している。

本論文は、第1章にて序論が述べられ、第2章の双結晶法を用いた転位配列制御手法の考察、第3章の転位コア原子構造の解析、第4章の転位へのドーパント偏析の解析、第5章のTEMナノインデンテーション法による変形双晶の動的観察、そして第6章にて総括される6章から構成されている。

第1章では、転位および変形双晶の一般論に始まり $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$ に関するこれまでの研究報告がまとめられている。そして、それらを踏まえた上で本研究の目的が述べられており、本論文の学術的位置づけ、重要性が明確に読み取れる。

第2章では双結晶法によって作製された $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3\{11\bar{2}0\}/\langle 1100 \rangle$ 小傾角粒界および(0001)/[0001]小角ねじり粒界に形成される転位配列のTEM解析がなされている。小傾角粒界には刃状転位、小角ねじり粒界にはらせん転位が周期的に配列しており、これは粒界方位関係の幾何学的要件によるものであることがわかった。また、比較的長い周期でその理想的な転位配列が乱れ、特異な転位配列が観察された。本実験により、この特異な転位配列は双結晶作製時にわずかに導入された粒界方位差の2次的な成分によって形成されたことが明らかとなった。これらの知見は、双結晶法を用いた転位配列制御技術の指針となるものである。

第 3 章では、 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$   $\{\bar{1}1\bar{2}0\}/\langle 1100 \rangle$ 、 $\{1100\}/\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 、 $\{\bar{1}104\}/\langle 11\bar{2}0 \rangle$  小傾角粒界および  $(0001)/[0001]$  小角ねじり粒界に形成された転位のコア原子構造を高分解能 TEM にて解析している。また、第一原理計算により部分転位間に形成される積層欠陥構造を理論的に構築し、実験結果と比較検討した。本研究により、 $b=\langle 1100 \rangle$  転位や  $b=1/3\langle 02\bar{2}1 \rangle$  転位の分解構造、 $b=1/3\langle 11\bar{2}0 \rangle$  らせん転位のコア構造、 $\{1100\}$  面および  $(0001)$  面に形成される積層欠陥構造などが明らかとなっており、 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  の転位構造に関して非常に重要な知見が得られたと言える。

第 4 章では  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  の basal 転位への金属元素の偏析挙動について論じられている。basal 刃状転位にはドーパントとして Sr、Ni、Er、Ti、Zr が選択され、いずれの元素についても部分転位対のコア近傍に偏析が認められた。しかし、細かな偏析挙動はドーパントによって異なり、元素のイオン価に強く依存した偏析傾向があることが明らかとなった。これは、イオン性結晶では転位コアドーパント間に電気的相互作用が存在することを示唆している。また、本結果より対をなす部分転位コアは構造的に等価ではないと結論付けられた。このことは、これまで数十年に渡ってなされてきた basal 転位のコア構造に関する議論に一定の結論を見出すものである。

第 5 章では、 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  における菱面双晶の成長機構に関して詳細に検討されている。第一に *in situ* TEM ナノインデンテーション法を採用することにより菱面双晶の成長および回復過程が動的に捉えられている。第二に超高压 TEM 解析によって双晶先端および双晶/母相界面の原子構造が明らかとなっている。これまで変形双晶の動的挙動や先端部分が実験的に観察されたことは極めて少なく、これらの観察に成功したことは学術的価値が非常に高いと認められる。また、 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  において菱面双晶は双晶転位の連続的な二重交差すべり (double-cross-slip) によって形成されると考えられてきたが、この機構では本結果をよく説明できないということが議論されている。つまり、変形双晶の成長機構を新たに模索する必要性を訴えており、本研究は変形双晶に関する学理を構築するための基礎となるものと考えられる。そして第 6 章において本論文が総括されている。

本論文には  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  における転位、積層欠陥、偏析、変形双晶を実験、理論の両面から総合的かつ緻密に解析、考察した結果がまとめられている。各々の論題は新規性を有しており、得られた結果についても新たな知見が多分に含まれている。従って、当該分野における研究意義は十分であると認められる。本研究の結論は論理的な議論によって導かれており、合理的に支持できるものである。

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。