

豊橋技術科学大学長 殿

平成 4 年 2 月 17 日

審査委員長 小林 俊郎



論文審査及び最終試験の結果報告書

このことについて、下記の結果を得ましたので報告いたします。
記

| | | | |
|---------|---------------------------------|---------|------------|
| 学位申請者 | 齊藤 淳一 | 学籍番号 | 第 853216 号 |
| 申請学位 | 博士(工学) | 専攻名 | 材料システム工学専攻 |
| 論文題目 | 金属間化合物 TiAl の変形過程における電子状態 | | |
| 公開審査会の日 | 平成 4 年 2 月 17 日 | | |
| 論文審査の期間 | 平成 4 年 1 月 22 日～平成 4 年 2 月 17 日 | 論文審査の結果 | 合格 |
| 最終試験の日 | 平成 4 年 2 月 17 日 | 最終試験の結果 | 合格 |

論文内容の要旨

金属間化合物TiAlは軽量耐熱構造材料として注目されている新しい材料である。しかし常温で延性が乏しいことが実用化の大きな妨げとなっている。本論文では、その変形過程における電子状態を初めて計算し、TiAlの変形機構をこれまでの転位論に代わる電子論の立場から理解することを目的としている。本論文は以下の8章より構成されている。第1章ではTiAlの概要、従来までの研究ならびに研究の目的について述べ、第2章ではTiAlの変形機構である、すべり変形と双晶変形について説明している。第3章では電子構造の計算に用いている分子軌道法(DV-X α クラスター法)について述べている。第4章ではまず金属間化合物より変形が容易で、かつ変形機構がわかっている純ニッケルおよび純鉄の変形過程における電子状態を計算し、原子間結合の強さを示す結合次数と機械的性質の関係を明らかにしている。第5章ではその理解を基に、TiAlのすべり変形過程における電子状態の計算から化学量論組成およびTiリッチTiAlでは普通転位方向へ、AlリッチTiAlでは超転位方向へ変形しやすいことを明らかにしている。またAl原子サイトに合金元素(例:Cr, Mnなど)を置換すると変形しやすくなるが、Ti原子サイトに合金元素を置換しても変形にはさほど影響を及ぼさないことを初めて計算により示している。第6章ではTiAlの双晶変形過程における電子状態の変化はすべり変形に比べて小さく、双晶変形は比較的容易な変形であることを示している。第7章ではTiAlの延性改善の可能性を電子論の立場より論じている。第8章では結論として以上の結果を総括している。

審査結果の要旨

金属間化合物TiAlは、新しい耐熱構造材料として最も有望視されている材料である。しかし、セラミックスと同様に延性がないことが実用上の問題であり、その改善が強く望まれている。本論文の最も独創的なところは、材料の変形過程における電子状態を分子軌道法を用いて逐次計算し、その機械的性質を従来の転位論に代わる新しい電子論の立場から説明したところにある。これは世界でも最初の試みであり、高く評価できる。とりわけ、変形過程において原子間結合力の変化の少ない方向へ変形が最も容易に起こるという計算結果は、材料の変形に対する新しい知見である。さらに、TiAlのすべり変形と双晶変形の違いについても、化学結合論を基に考察している。そのみならず、実用上重要な延性改善に対しても電子論の立場より議論を展開しているところも斬新である。例えば、特定の合金元素(例、Cr)の添加がTiAlの延性改善に有効であることを計算から予測している。そして、その予測が他の研究者の実験で実際に確かめられている点も注目して良いと思われる。このように本論文は、原子間の化学結合が、金属間化合物の変形を担う一つの重要な因子であることを明確に示している。さらに、本論文の計算および取り扱い方は、金属間化合物に限ることなく、同じく脆性が問題となるセラミックスへも適用可能であり、波及効果が期待される。以上のように、本論文は学術上のみならず実用上の観点からも優れており、博士(工学)の学位論文に相当するものと判定した。

審査委員

小林俊郎



森永正彦



新家光雄



逆井基次



印

印

(注) 論文審査の結果及び最終試験の結果は「合格」又は「不合格」の評語で記入すること。