

拡散－反応方程式を用いた FCC 単結晶の塑性変形挙動の解析

学位論文内容の要旨

近年の急速な計算機技術の発展に伴い、計算機を用いた塑性変形に関する研究が盛んに行われている。このような研究分野においては、取り扱うスケールの階層化が進んでおり、これらはマクロ、メソ、及びミクロの3つの階層に分類される。この中のメソスケールの領域では、原子や転位の集団挙動から金属組織や転位組織の形成過程を再現する研究が顕著である。特に、転位組織の形成過程に関する研究に着目すると、これまでの研究は、疲労試験に対する研究が大半を占めており、引っ張り試験のような一軸応力下に対する研究はほとんど見られないのが現状である。本論文では、FCC 単結晶に対して、引っ張り試験の進行過程における転位組織の形成過程と応力－歪挙動を動的に解析できるモデルを提案する。

本論文の構成は全6章より成り立っている。

第1章は緒言であり、転位論におけるこれまでの転位の集団挙動および転位組織の形成過程の研究を概括し、本研究の位置づけ及び目的について述べている。

第2章では、転位の集団運動に対する先駆的な研究である Gilman-Johnston モデルと Alexander-Haasen モデルに言及し、その意義を紹介した上で、これらが均一系に対するモデルであることから生じる難点を列挙している。そして実験事実との対応をとるためには、不均一系に対するモデルの構築が必要であることを指摘した。

第3章では、本研究の基盤をなす拡散－反応方程式についての基礎理論を述べている。空間的に不均一な転位密度の発展挙動を記述する有力な手法として、拡散－反応方程式が提唱されているが、この解の数学的な構造を予測するためには、より単純な反応系を用いることが肝要である。本章では、Brusselator モデルの背景を紹介し、線形化解析を用いて解の安定－不安定性を論じた上で、不

安定解の時間発展挙動を詳述した。又、数値計算により線形化解析が導く解を検証すると共に、非線形領域の解の挙動についても議論を試みた。

第4章では、拡散-反応方程式を転位密度の発展挙動に応用した先駆的研究である Walgraef-Aifantis のモデルを詳述している。但し、このモデルは疲労試験のような繰り返し応力下での組織の形成過程を記述するものであり、引っ張り試験のような典型的な塑性変形に対しては直接应用することはできない。そこで、引っ張り試験を対象にした一次元モデルを提案した。このモデルでは、有効応力を、系の塑性変形の進行状態を制御するパラメーターとして採用した。そして、線形化解析、及び数値計算から、転位セル壁の形成・発展過程が有効応力の関数として記述できることを明らかにした。

第5章は本論文の中核を成す。第4章で論じた従前のモデルでは、1. 動転位のすべり運動を拡散として取り扱うことの妥当性に欠けること、2. フランクーリード源などの転位源の活性化による動転位の増殖や双極子の形成が考慮されていないために、変形の初期挙動が再現できないこと、3. 単一のすべり系のみに限定しており実際の結晶で生じる二重すべりが考慮されていないこと、の3点を指摘し、新たなモデルの構築を行っている。このモデルでは、1. 応力の荷重方向に対する転位の運動方向の依存性を導入するためにバーガースベクトルの符号を考慮し、さらに、動転位の長距離相互作用を拡散理論の枠組みの中で捉えることから、動転位の保存運動挙動を記述した。又、2. 変形初期の塑性変形挙動を再現するために、動転位の増殖や双極子の形成の寄与を転位密度の発展方程式に導入した。さらに、3. 複数のすべり系に対して転位密度の発展方程式を記述し、すべり系間の相互作用を新たに考慮することにより、多重すべりが生じる変形条件を表現した。このようなモデルに基づく転位密度の発展方程式を、巨視的な応力-歪みの関係式と連立して解くことにより、応力-歪み曲線に沿った転位組織の形成過程を再現し得た。特に、本モデルにより得られた応力-歪み曲線は FCC 単結晶の引っ張り試験の結果と定性的な一致を示し、さらに、動転位密度と不動転位密度が塑性歪みの進行に伴って相乗的に発展していく様子や、セル壁の形成に対する両転位密度の寄与、さらには、主すべり系から二次すべり系への変形の進行に伴う両転位密度とシュミット因子の変化について、詳細を議論した。

第6章は本論文の総括である。

学位論文審査の要旨

主 査	教 授	毛 利 哲 夫
副 査	教 授	石 井 邦 宜
副 査	教 授	大 貫 惣 明
副 査	助教授	三 浦 誠 司

学 位 論 文 題 名

拡散－反応方程式を用いた

FCC 単結晶の塑性変形挙動の解析

近年の急速な計算機技術の発展に伴い、計算機を用いた塑性変形に関する研究が盛んに行われている。このような研究分野においては、取り扱うスケールの階層化が進んでおり、大きく、マクロ、メソ、及びミクロの3つの階層に分類される。特に、メソスケールの領域では、原子や転位の集団挙動から金属組織や転位組織の形成過程を再現する研究が顕著である。この中で転位組織の形成過程に関する研究に着目すると、これまでの研究は、疲労試験を対象としたものが大半を占めており、引っ張り試験のような一軸応力に対する研究はほとんど見られないのが現状である。本論文では、FCC 単結晶に対して、引っ張り試験の進行過程における転位組織の形成過程と応力－歪挙動を動的に解析できるモデルを提案した。

本論文の構成は全6章より成り立っている。

第1章は緒言であり、転位論におけるこれまでの転位の集団挙動および転位組織の形成過程の研究を概括し、本研究の位置づけ及び目的について述べている。

第2章では、転位の集団運動に対する先駆的な研究である Gilman-Johnston モデルと Alexander-Haasen モデルに言及し、その意義を紹介した上で、これらが均一系に対するモデルであることから生じる難点を列挙している。そして実験事実との対応をとるためには、不均一系に対するモデルの構築が必要であることを指摘した。

第3章では、本研究の基盤をなす拡散－反応方程式についての基礎理論を述べている。空間的に不均一な転位密度の発展挙動を記述する有力な手法として、拡散－反応方程式が提唱されているが、この解の数学的な構造を予測するためには、より単純な反応系を用いることが肝要である。本章では、Brusselator モデルの背景を紹介し、線形化解析を用いて解の安定－不安定性を論じた上で、不安定解の時間発展挙動を詳述した。又、数値計算により線形化解析が導く解を検証すると共に、非線形領域の解の挙動についても議論を試みた。

第4章では、拡散－反応方程式を転位密度の発展挙動に応用した先駆的研究である Walgraef-Aifantis のモデルを詳述している。但し、このモデルは疲労試験のような繰り返し応力下での組織の形成過程を記述するものであり、引っ張り試験のような典型的な塑性変形に対しては直接応用することができない。そこで、引っ張り試験を対象にした一次元モデルを提案した。このモデルでは、有効応力を、系の塑性変形の進行状態を制御するパラメータとして採用した。そして、線形化解析、及び数値計算から、転位セル壁の形成・発展過程が有効応力の関数として記述できることを明らかにした。

第5章は本論文の中核を成す。第4章で論じた従前のモデルでは、1. 動転位のすべり運動を拡散現象として取り扱うことの妥当性に欠けること、2. フランクーリード源などの転位源の活性化による動転位の増殖や双極子の形成が考慮されていないために、変形の初期挙動が再現できないこと、3. すべりを単一のすべり系のみに限定しており実際の結晶で生じる二重すべりが考慮されていないこと、の3点を指摘し、新たなモデルの構築を行っている。このモデルでは、1. 応力の荷重方向に対する転位の運動方向の依存性を導入するためにバーガースベクトルの符号を考慮し、さらに、動転位の長距離相互作用を拡散理論の枠組みの中で捉えることから、動転位の保存運動挙動を記述した。又、2. 変形初期の塑性変形挙動を再現するために、動転位の増殖や双極子の形成の寄与を転位密度の発展方程式に導入した。さらに、3. 複数のすべり系に対して転位密度の発展方程式を記述し、すべり系間の相互作用を新たに考慮することにより、多重すべりが生じる変形条件を表現した。そして、このようなモデルに基づく転位密度の発展方程式を、巨視的な応力-歪みの関係式と連立して解くことにより、応力-歪み曲線に沿った転位組織の形成過程を再現し得た。特に、本モデルにより得られた応力-歪み曲線はFCC単結晶の引っ張り試験の結果と定性的な一致を示し、さらに、動転位密度と不動転位密度が塑性歪みの進行に伴って相乗的に発展していく様子や、セル壁の形成に対する両転位密度の寄与、主すべり系から二次すべり系への変形の進行に伴う両転位密度とシュミット因子の変化、さらには、組織形成の必然性について詳細を議論した。

第6章は本論文の総括である。

これを要するに、著者は、引っ張り試験における転位組織の形成過程について、転位の集団運動理論から新知見を得たものであり、材料科学と塑性変形理論に対して貢献するところ大なるものがある。よって著者は、北海道大学博士（工学）の学位を授与される資格あるものと認める。