



Title	金属結晶体の破壊機構の分子動力学法による研究
Author(s)	中谷, 彰宏
Citation	大阪大学, 1993, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://doi.org/10.11501/3065884">https://doi.org/10.11501/3065884</a>
rights	
Note	

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏 名 なか たに あき ひろ  
中 谷 彰 宏

博士の専攻分野の名称 博 士 (工 学)

学 位 記 番 号 第 1 0 7 1 3 号

学 位 授 与 月 日 平成 5 年 3 月 25 日

学 位 授 与 の 要 件 学位規則第 4 条第 1 項該当

工学研究科機械工学専攻

学 位 論 文 名 金属結晶体の破壊機構の分子動力学法による研究

論 文 審 査 委 員 (主査)  
教 授 北 川 浩

(副査)  
教 授 久 保 司 郎 教 授 土 屋 和 雄 教 授 片 岡 俊 彦

## 論 文 内 容 の 要 旨

本論文は、分子動力学法を用いた、最も微細な物質組織と考えられる原子集合体の動的過程の直接シミュレーションにより、金属結晶体中に生じる破壊機構の検討を行なった研究の成果をまとめたものであり、以下の 5 章からなっている。

第 1 章では、研究の目的と意義、および分子動力学法の歴史的背景、き裂進展問題への応用の有効性と問題点について述べている。

第 2 章では、分子動力学法の基本的事項について、シミュレーション手法としての位置づけ、解析の基礎となる方程式、および具体的な解析方法を示し、あわせて、第 4 章で用いる原子間ポテンシャルが持つべき静力学的な特性について検討している。

第 3 章では、き裂先端場の連続体モデルによる取り扱いについて述べている。まず、分子動力学解析において、初期原子配置の決定と境界条件の評価に用いるためのき裂先端近傍の線形弾性場について、その解析解と特異要素を用いた有限要素解析結果を示している。続いて、連続体モデルに結晶塑性論を組み込むための定式化を行ないモード I 型き裂の解析を行なっている。すべり系を等方的に配置した結晶塑性モデルによる解析結果が、現象論的構成式である  $J_2$  流れ理論の解析結果とよく対応することを示している。

第 4 章では、き裂開口様式 (モード I, II, III)、結晶構造 (体心立方晶, 面心立方晶)、結晶配向の異なる金属単結晶中のき裂先端場の破壊機構に実体論的考察を加えるために分子動力学解析を行ない、結果を結晶塑性論に基づく解析と比較することにより検討している。へき開破壊 (原子間結合の切断) によるき裂進展、および転位の発生・移動によるき裂の鈍化、双晶変形のような応力により誘起される変態などが、き裂先端場に最も基本的な微視的非弾性変形機構として分子動力学解析結果に出現し、転位の発生・移動のようなき裂先端が転位源となって生じる原子構造の変化は、結晶塑性論におけるすべり変形と対応することを明らかにしている。さらに微視的応力と線形弾性解の比較を通じて原子集合体モデルと連続体モデルの対応付けを行なうとともに、き裂先端からの転位の発生の条件を評価した結果、および、転位の合体によるき裂核発生機構のシミュレーション結果を示している。

第 5 章では、本研究で得られた主要な結果を総括し、今後の展望を述べている。

## 論文審査の結果の要旨

材料の特性は、原理的には微視的構造のダイナミクスの詳細な力学的検討により評価することができる。本論文は、そのような視点に立って、分子動力学法を用いた、最も微細な物質組織と考えられる原子集合体の動的過程の直接シミュレーションにより、金属結晶体中に生じる破壊機構を検討した研究の成果をまとめたものであり、得られた成果を要約すると次の通りである。

- (1) 原子集合体モデルにより得られる知見を巨視的レベルから検討するため、連続体モデルに結晶塑性理論を組み込んで、き裂の解析を行なっている。その結果から、すべり系を等方的に配置した結晶塑性モデルによる解析結果が、降伏条件のなめらかさと法線法則を仮定した現象論的構成式 ( $J_2$  流れ理論) を用いた解析結果とよく対応することを示している。
- (2) 原子間ポテンシャルが持つべき静力学的な特性について検討した上で、安定な原子構造を構成する種々のポテンシャルを用いてき裂先端部の原子構造に対する分子動力学解析を行なっている。その結果より、き裂開口様式、結晶構造、および、結晶配向と微視的な破壊機構の関連について調べ、へき開破壊 (原子間結合の切断) によるき裂進展、および転位の発生・移動によるき裂の鈍化、双晶変形のような応力により誘起される変態などが、き裂先端場の最も基本的な微視的非弾性変形機構であることを示している。
- (3) 分子動力学解析の結果得られるき裂先端が転位源となることから生じる原子構造の変化と、結晶塑性論を用いて得られるすべり変形との対応を明らかにしている。また、原子集合体に対して評価される微視的応力と線形弾性解の比較を通じて、原子集合体モデルと連続体モデルの対応付けを行なうとともに、き裂先端からの転位の発生の条件を評価している。
- (4) 転位の合体が、き裂核発生機構の基本的な過程の一つであることを明らかにしている。

以上のように、本論文は破壊の本質である微視的な原子配置の組み替えの動的な過程について直接的シミュレーションによって検討を加え、材料強度を原子間の結合強度から力学の枠組を通じて評価できる可能性を示しており、機械工学や材料工学に貢献するところは大きい。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。