



| | |
|--------------|---|
| Title | Defects Mechanics using Computational Dislocation Dynamics by Level Set Method |
| Author(s) | Pan, Jun |
| Citation | 大阪大学, 2012, 博士論文 |
| Version Type | VoR |
| URL | https://hdl.handle.net/11094/27572 |
| rights | |
| Note | |

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

【17】

| | |
|---------------|---|
| 氏 名 | 潘 俊 (Pan Jun) |
| 博士の専攻分野の名称 | 博 士 (工学) |
| 学 位 記 番 号 | 第 2 5 6 3 1 号 |
| 学 位 授 与 年 月 日 | 平 成 24 年 9 月 25 日 |
| 学 位 授 与 の 要 件 | 学位規則第4条第1項該当 工学研究科精密科学・応用物理学専攻 |
| 学 位 論 文 名 | Defects Mechanics using Computational Dislocation Dynamics by Level Set Method (レベルセット法を用いた計算転位動力学に基づく欠陥力学の研究) |
| 論 文 審 査 委 員 | (主査) 教 授 澁谷 陽二 (副査) 教 授 笹井 秀明 教 授 森川 良忠 |

論 文 内 容 の 要 旨

Dislocations considered as the line defects in crystalline materials are the microscopic carriers of plastic deformation. A wide range of applications from atomistic to continuum views are utilized for describing dislocation evolutions. We proposed level set method (LSM) to solve the topologically complicate dislocation evolutions without any artificial local rule in a relative large material volume and time interval. LSM originally designed for modeling codimension-one objects can represent curves in two dimensions and surfaces in three dimensions, while attempts have been made to enable level set technique to represent codimension-two geometry by the intersection of the zero level surfaces from two level set functions. Therefore, LSM associated with fast marching method (FMM) successfully represents the curved intersection as a dislocation line in three dimensions from two hypersurfaces evolving under the prescribed extension velocities according to the interface. Spatial internal stress distributions in the region containing complex topological dislocation configurations can be easily calculated by the elastic field equations with dislocations in the infinite body. This stress field is solved efficiently using fast Fourier transformation (FFT), assuming a periodic boundary condition.

We successfully demonstrated dislocation/dislocation interactions under the complex internal stress fields caused by defects with the definition of mobility tensor containing climb and glide mobility constants. A prismatic dislocation loop

(PDL) shrinks automatically at an equivalent high temperature. And an Orowan loop expands and/or rotates from its original slip plane under applied shear stress fields. We also successfully demonstrated the formation of an Orowan loop from a gliding linear edge dislocation under an applied stress when it meets and bypasses an impenetrable particle.

In general, a screw dislocation tends to move in a certain crystallographic plane, but it can switch from one slip plane to the other with the same slip direction which is known as the cross-slip. The onset of the second stage in the work hardening of an fcc single crystal is associated with the onset of cross-slip. However, there are a number of possible mechanisms for cross-slip working in the final stage of work hardening. Since the determination of the activation energies for these processes is very complicated, the detailed analysis of stage II remains uncertain. We showed the process of cross-slip and double cross-slip of an initial Orowan dislocation loop and evaluated the internal stress field of the double cross-slipped dislocation loop by level set dislocation dynamics (LS-DD). We also investigated how the change of the dislocation configuration produced different internal stress field in the material and affected the other dislocations as a Peach-Koehler force.

As the other complex defect interaction, the punching of coaxial PDLs in crystalline materials at precipitate-matrix interfaces without long-range applied stress is often observed by experiments. Precipitates employed in strengthening technique of quench-aging process generate misfit strain in the vicinity and constitute nucleation sites for PDLs. These misfit stresses associated with internal stresses from PDLs can be the barriers for mobile dislocations in matrix phase, and thus they are the reasons for precipitation hardening. With creating constrained cylindrical slip surface where the inclusion-matrix interface meets the maximum resolves shear stress, LS-DD successfully realized the complete formation of PDL from two initial small half dislocation loops. As a result, we explained the change of elastic strain energy during this nucleation phenomenon quantitatively.

In summary, instead of utilizing local rules to re-enact the already known phenomena, LS-DD gives us demonstrations of dislocation evolutions that topological changes happen naturally and thus the explanations of the mechanisms for unclear phenomena become more convincing. The stress field obtained in three dimensions also gives us the facilities for discussing elastic properties during the whole process of the dislocation evolution.

論文審査の結果の要旨

本論文は、原子面のずれとして材料中に存在する線欠陥の転位を2曲面の交差する線として表現し、物理的に意味のある曲面の移動速度のもとで交差線を追跡するレベルセット法を用いた転位動力学法による欠陥力学問題を検討したものである。レベルセット法は、境界線の多様な変化を幾何学的に表現する数学的モデルとして、これまで最適化問題における形態の変化や、2相体の界面移動等に適用されてきた。このレベルセット法により転位線を表し、周期条件を課した転位を含む異方性弾性体により応力場を求め、その応力場のもとで転位に働くピーチ・ケラー力により2曲面を移動させる。この手法により、複雑な3次元の転位線の発展挙動を求める転位動力学の計算力学モデルを確立し、材料欠陥場に適用している。その主な成果は以下のとおりである。

- (1) Fast Marching Method を本モデルに取り込むことで、形態の複雑な超平面の交差を首尾良く表すことができ、高速フーリエ変換 (FFT) を導入することにより欠陥を含む周期条件を課した弾性場を高速に計算することができた。このモデリングにより、無限体に一個の球形介在物があり、それに対して初期に直線状の転位線が適当な外部応力場のもとで接近し、介在物と転位の相互作用を厳密に評価しながら、介在物まわりに一個のオロワン転位ループが本手法により形成できることを示している。
- (2) 一すべり面上に存在する転位ループは、複雑な応力状態のもとでそのすべり面を変えることができる。この挙動を交差すべりと言い、転位間の複雑な力学挙動を産み出す基礎メカニズムの一つである。提案した計算力学モデルを用いて、交差すべりを生じさせる応力場を変化させ、特別な局所ルールを設定することなく交差すべりの生成できることを示している。転位ループ内の力学的相互作用と外部応力場のもとで、必ずしも単純な形状ではない転位線をレベルセット法により表現が可能になり、直線転位を仮定する解析モデルとの差異を明確にしている。

- (3) 一個の球形介在物とマトリクスとのミスフィットひずみから生じる内部応力場を弾性力学により厳密に表し、その応力場のもとで3次元のプリズマティック転位ループを生成させる力学モデルを提案している。2円筒の交差により表した曲線のうち、マトリクス側に拡張する部分と介在物内部の部分に分ける手法を考案し、前者のせん断ループが応力場のもとで交差すべりを起こし、最終的には異符号のセグメントの会合と消滅により、一個のプリズマティック転位ループをはじめて形成させている。また、この一連の過程における系全体の弾性ひずみエネルギーの変化を計算し、転位の生成過程との対応を明確にしている。

以上のように、本論文はレベルセット法という数学モデルと、材料の線欠陥である転位の力学モデルをあわせ込んだ転位動力学法により、3次的に複雑な形態を持つ転位の発展挙動を明らかにしたものである。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。