



Title	ナノ多結晶体の力学特性と変形機構の分子動力学法による研究
Author(s)	下川, 智嗣
Citation	大阪大学, 2002, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/408">https://hdl.handle.net/11094/408</a>
rights	
Note	

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

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

The University of Osaka

氏 名	しも かわ とも つぶ 下 川 智 嗣
博士の専攻分野の名称	博 士 (工 学)
学 位 記 番 号	第 17088 号
学 位 授 与 年 月 日	平成14年3月25日
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第4条第1項該当 工学研究科知能・機能創成工学専攻
学 位 論 文 名	ナノ多結晶体の力学特性と変形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 南 埜 宜 俊    教 授 久 保 司 郎    教 授 澁 谷 陽 二 助教授 中 谷 彰 宏

### 論 文 内 容 の 要 旨

本論文は、ナノ多結晶体の力学特性と変形機構の解明を目的として行なった、原子集合体モデルを用いた研究の成果をまとめたものであり、以下の6章からなっている。

第1章では、多結晶体の一般的な力学特性と力学モデルについて述べ、続いて、ナノ多結晶体が示すユニークな力学特性の分析とまとめを行なった。また、これまでの国内外のナノ多結晶体に関する研究動向について展望した。

第2章では、アルミニウムの多体原子間相互作用を評価するための基礎となる原子埋め込み法と有効媒質理論から誘導される2つの原子間ポテンシャルについて述べ、分子動力学シミュレーションで獲得されるミクロ量から構造特性およびマクロ特性を評価する方法について述べた。

第3章では、ポテンシャルの選択に起因するアルミニウムの基本力学特性の評価の違いを検討することを目的として、双結晶モデルを用いた粒界エネルギーと方位差の関係、および、空孔近傍と $\Sigma 5$ 粒界の拡散特性、積層欠陥エネルギーや拡張転位の幅について検討を加えた結果をまとめた。

第4章では、ナノ多結晶体の内部構造変化と力学特性を評価するために行なった、周期境界条件を適用したバルクモデルを用いた変形シミュレーションの結果をまとめた。モデルに含まれる粒界特性と方位差の関係を調べ、小角粒界と大角粒界とに本質的な構造の違いがあることを示し、粒界構造と力学特性の関係を示した。また、巨視的な力学特性の粒径依存性を検討し、結晶粒微細化に伴う粒界体積比の増加が軟化現象の原因の一つであることを示した。さらに、積層欠陥エネルギーの違いに起因する変形メカニズムについて検討し、拡張転位の幅が粒径と同程度の場合、部分転位による結晶すべりが発生し、粒内に多数の積層欠陥が残存することを示した。

第5章では、自由表面を有するナノ多結晶体の変形の局所化と破壊メカニズムを検討するために行なった、棒状の微小試験片モデルを用いた単軸引張解析の結果について述べた。積層欠陥エネルギーが大きい材料モデルの場合、粒界すべりにより局所変形が進行し、粒界部で破断するが、積層欠陥エネルギーの小さい材料モデルでは、部分転位による結晶すべりが主となり、粒内に残存する積層欠陥が二次すべり系の活動を抑制することを示した。その結果、変形の局所化が抑制され材料全体の延性が向上することを示した。

第6章では、得られた結果を総括し、今後の展望について述べた。

## 論文審査の結果の要旨

結晶粒をナノメートルオーダーまで微細化したナノ多結晶体は、通常の粗大な多結晶体とは異なる特有な力学特性を示す。そうしたナノ多結晶体の力学特性発現機構や変形機構を解明することは、今後のナノスケールの材料設計や開発に対して重要である。本論文では、分子動力学シミュレーションにより、アルミニウム・ナノ多結晶体の力学特性と変形機構を検討した研究の成果をまとめたものであり、得られた知見を要約すると以下の通りである。

- (1) ナノ多結晶体の粒界特性と巨視的力学特性の関係を追求し、原子モデルにより粒界制御を考慮した材料設計の可能性を示している。
- (2) ナノ多結晶体の強さが粒径の減少に伴って低下する、結晶粒微細化に伴う軟化現象（逆 Hall-Petch の関係）が見出されている。この関係は、強さと欠陥体積率の関係に置き換えて表現できることが示されており、ナノ多結晶体では、粒界領域で生じる変形が支配的になることを示している。
- (3) 拡張転位の幅と結晶粒径が同じスケールとなる場合、結晶すべりは部分転位のみで生じ、その結果、粒内を貫く形で積層欠陥が形成されることを示している。
- (4) 粒内の積層欠陥の形成による構造異方性の発現が、力学異方性を引き起こす一つの要因となること、また、積層欠陥は変形の可逆的な要素となることが見出されている。
- (5) 微小径の棒状ナノ多結晶体の変形の局所化は、表面の粒界すべりにより生じることを明らかにしている。また、粒内に積層欠陥が形成されると、二次すべり系の活動が抑制され材料全体の延性が向上することを示している。

以上のように、本論文は、分子動力学法を用いて、ナノ多結晶体の力学特性と変形機構を原子レベルから検討し、原子シミュレーションによる微小構造材料の開発・設計の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。