

Title	アモルファス金属の変形と破壊機構の分子動力学解析
Author(s)	松本, 龍介
Citation	大阪大学, 2003, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/44241">https://hdl.handle.net/11094/44241</a>
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉</a> 大阪大学の博士論文について <a>〉</a> をご参照ください。

***Osaka University Knowledge Archive : OUKA***

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

Osaka University

氏名	まつもと りょう すけ 松 本 龍 介
博士の専攻分野の名称	博 士 (工 学)
学位記番号	第 1 7 8 2 3 号
学位授与年月日	平成 15 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	アモルファス金属の変形と破壊機構の分子動力学解析
論文審査委員	(主査) 教授 北川 浩 (副査) 教授 南埜 宜俊 教授 菅沼 克昭 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、アモルファス金属の変形と破壊機構の解明を目的として行った、原子集合体モデルを用いたシミュレーション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、アモルファス金属の特性および開発の歴史的背景について述べるとともに、コンピューターシミュレーションによる研究の現状について展望した。

第2章では、解析手法として用いる分子動力学法および有限要素法の基礎理論について述べ、分子動力学法についてはデータ解析の手法や高速化、大規模化の方法について言及した。さらに、本研究で解析対象とするモデルアモルファスの生成シミュレーションについて述べた。

第3章では、アモルファス金属中のき裂の初期開口挙動について評価した。分子動力学法により板厚の異なる試料に対してき裂進展特性を検討し、力学状態の違いに起因して現れる変形挙動の違いを解明した。さらに、原子モデルを用いた分子動力学シミュレーションの結果と、微小な代表体積要素の分子動力学シミュレーションによってパラメーターを決定した弾粘塑性構成式を用いた連続体モデルに対する有限要素解析の結果を比較し、連続体近似による粗視化アプローチの有効性と問題点を明らかにした。

第4章では、アモルファスブロックの単軸引張変形下で生じる変形誘起ナノ結晶化過程の解明を目的として分子動力学シミュレーションを実施し、結晶化前後の体積変化と応力変化の関係および温度変化について検討を加え、変形によって誘起される結晶化による材料組織制御の可能性を示した。

第5章では、両側切欠きを有する試料の単軸引張解析を実施し、切欠き前縁近傍に生じる強変形領域の形状および力学状態、温度分布と結晶化前後の切欠き成長機構の違いを明らかにした。また、第4章の結果に照らし合わせて、ナノ結晶化のクライテリオンは、温度のみに依存するのではなく、応力にも依存する可能性があることを示した。マクロな強変形域としてのせん断帯の内部に現れる微小せん断帯の存在および、その変形挙動を明らかにした。また、アモルファス金属の構造健全性評価において、内部構造変化に着目した検討の重要性について述べた。

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

アモルファス金属は、結晶性金属とは異なって構造的に準安定であるために、微視的に極めて複雑な応答をするが、その詳細は明らかにされていない。今後、高機能化材料としての利用度を高めていくためには、その変形・破壊のメカニズムを解明することが求められている。本論文は、大規模な分子動力学シミュレーションを行うことにより、鉄原子からなるアモルファス金属モデルに対して、き裂進展特性と変形誘起ナノ結晶化挙動について検討した研究成果をまとめたもので、得られた成果を要約すると以下の通りである。

- (1) アモルファス金属中を進展するき裂挙動の解析結果に基づいて、局所的には延性的な変形特性を有しているにもかかわらず、大域的には脆性的に破壊するアモルファス金属特有の特性発現の基本メカニズムを明らかにしている。
- (2) き裂開口問題に対して、大規模な分子動力学シミュレーションと弾粘塑性モデルを用いた有限要素シミュレーションを行ない、両者の結果の比較から、アモルファス金属の変形挙動を、弾・完全塑性材料としてモデル化することの有効性と限界を明らかにしている。
- (3) 強変形下で結晶核を生成しナノ結晶化する変形誘起ナノ結晶化現象の詳細を明らかにしている。そして、変形条件と得られるナノ結晶の方位や粒径との関係を調べることで、アモルファス金属の変形誘起ナノ結晶化をナノメタルの開発に応用することの可能性を示している。
- (4) 結晶核が生成・成長するとアモルファス金属の変形挙動が顕著に変化することを明らかにしており、局所的な大変形を受けるアモルファス金属の変形機構の解明において、結晶化の影響を考慮に入れることの必要性を示している。
- (5) アモルファス金属中に現われるせん断帯が互いに最大せん断応力の方向に生成した微小せん断帯の集合によって形成されることを見出している。

以上のように、本論文は大規模な分子動力学シミュレーションにより、アモルファス金属の基本的な変形・破壊機構を明らかにすると共に、原子シミュレーションを用いたナノスケール構造を持つ材料の開発・設計の可能性を示しており、機械工学および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。