

Title	分子動力学法と転位論的解析によるナノインデンテーションにおける転位の集団的力学挙動の研究
Author(s)	都留, 智仁
Citation	大阪大学, 2006, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/48564
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"〉 大阪大学の博士論文について 〈/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	都 留 智 仁
博士の専攻分野の名称	博 士 (工 学)
学 位 記 番 号	第 2 0 7 2 2 号
学 位 授 与 年 月 日	平成 18 年 10 月 31 日
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第 4 条第 1 項該当 工学研究科機械システム工学専攻
学 位 論 文 名	分子動力学法と転位論的解析によるナノインデンテーションにおける転位の集団的力学挙動の研究
論 文 審 査 委 員	(主査) 教 授 澁谷 陽二 (副査) 教 授 久保 司郎 教 授 中谷 彰宏 助教授 尾方 成信

論 文 内 容 の 要 旨

本論文では、ナノインデンテーションによる荷重-変位関係において、延性材料のナノスケール特有の変形挙動である変位バースト現象のメカニズムを調査するとともに、材料内部の微視的な欠陥構造の発展挙動との関連を明らかにした。

第 1 章では、序論として研究の目的・背景を記述した後、原子・転位論的シミュレーションの重要性と本論文の意義について述べた。

第 2 章では、実験による単結晶アルミニウム (Al) と銅 (Cu) の押し込み挙動を検討し、ナノスケールの押し込み特有の現象について検討した。そして、ナノスケールの押し込みに現れる変位バースト現象の特徴を抽出するとともに、バースト現象に関する Al と Cu の相違点について述べた。

第 3 章では、始めに分子動力学法の基礎的な解析手法を述べた。つぎに、Al と Cu に対して提案されている数種類の原子間相互作用ポテンシャルについて、実験や第一原理計算によって得られた力学特性との比較を行った。そして、実際の変形に重要な役割を果たす、積層欠陥エネルギーや理想せん断強度などの特性について評価を行い、Al と Cu の特性の相違点を示した。

第 4 章では、原子シミュレーションを用いて Al と Cu の押し込みを行った。まず、異なる曲率半径の球圧子を用いて得られた荷重-変位関係に対して、立方体を仮定した線形弾性解を用いて理想せん断強度を推定した。そして、線形弾性解とシミュレーションから直接計算される最大せん断応力との比較を行い、圧子直下の応力状態に関して、異方性と非線形性の影響について検討した。つぎに、押し込みによって射出される転位の生成過程を明らかにし、すべり系解析による圧子直下の応力状態に特有の転位間相互作用とプリズマティック転位の形成メカニズムを明らかにした。

第 5 章では、転位論的手法を用いて押し込み下の転位挙動の評価を行った。三次元離散転位動力学法 (DD) を導入し、その解析方法と転位の運動を支配する基礎式を説明した。つぎに、DD を押し込み問題に適用するために、重ね合わせの原理に基づく境界要素法との連結手法について提案した。そして、実際の押し込みシミュレーションを行い、転位の運動とそれらの挙動が押し込み荷重に与える影響について検討した。また、線形弾性解と古典転位論を用いて、押し込み下で射出される転位の数理モデルを提案し、実験のバースト現象をよく説明できることを示した。

第 6 章では、第 2 章から第 5 章までに得られた結果を総括し、実験とシミュレーションの両方の視点により、押し込み問題における塑性物理現象について結論を述べた。

論文審査の結果の要旨

本論文は、単結晶アルミニウム (Al) と銅 (Cu) を対象にして、分子動力学法等を用いた原子論的手法と転位動力学法の古典転位論に基づく方法により、ナノインデンテーションによる圧子直下に生じる転位群の集団的な射出とその発展挙動を解析している。そして、押し込み荷重-変位関係に見られる延性材料のナノスケール特有の変形挙動である変位バースト現象のメカニズムを考察している。これらの異なる方法論を用いて、押し込み荷重-変位関係の変形挙動と材料内部の微視的な欠陥構造の発展挙動との関連を詳細に検討している。その主な成果は以下のとおりである。

- (1) 原子論的手法により、Al と Cu の材料的・機械的特性の違いに関して、積層欠陥エネルギーや外部負荷応力に依存した理想せん断強度の特性を詳細に評価している。
- (2) 分子動力学法による押し込みシミュレーションから、Hertz の線形接触理論による評価と異なる点として、圧子直下の非線形特性が転位の射出に大きく影響し、内部の圧縮応力が臨界せん断応力を大きく上昇させることを確認している。
- (3) 球圧子による押し込みでは、多重すべりを生じやすい応力状態を生成し、材料内部で射出された転位はエネルギー的に不安定な転位間相互作用と交差すべりを生じながらプリズマティック転位を形成することを示している。
- (4) 重ねあわせの原理に基づき、転位動力学法と境界要素法のマルチスケールモデル (DD-BEM) を構築し、押し込み下の転位の運動を記述している。そして、転位が表面に抜けた際生じるステップを導入することで、押し込み変位が急激に増大する変位バーストのような非線形な押し込み荷重-変位関係の得ることを示している。
- (5) Al と Cu の押し込み実験により、変位バースト現象が結晶学的な表面方位や材料特性に大きく関与していることを確認している。そして、Hertz の接触理論と古典転位論に基づく数理モデルを構築し、実験で見出される第一バースト荷重とバースト幅の線形関係を定量的に説明するとともに、変位バーストは、数百もの転位がほぼ同時に射出され、それによって生じる転位双極子のステップにより引き起こされることを示している。

以上のように、本論文はナノインデンテーションによる圧子直下に生じる転位の射出とその発展挙動を、原子論的・転位論的な立場から詳細に検討し、微視的な欠陥の内部構造を理解するとともに、ナノスケールでの特有な塑性変形挙動である変位バースト現象のメカニズムを解明したものであり、その学術的価値は高い。よって本論文は、博士論文として価値あるものと認める。