

Title	多結晶鋼材における結晶粒界近傍の変形挙動を考慮した微視的応力解析のためのFEM-MD結合数値解析法の提案
Author(s)	樋口, 良太
Citation	大阪大学, 2008, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/48626">https://hdl.handle.net/11094/48626</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	樋口良太
博士の専攻分野の名称	博士(工学)
学位記番号	第 22330 号
学位授与年月日	平成 20 年 3 月 25 日
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 2 項該当
学位論文名	多結晶鋼材における結晶粒界近傍の変形挙動を考慮した微視的応力解析のための FEM-MD 結合数値解析法の提案
論文審査委員	(主査) 教授 豊田 政男  (副査) 教授 座古 勝 教授 南 二三吉 准教授 望月 正人 准教授 大畑 充

### 論文内容の要旨

鋼材の力学的特性を支配する微視組織の不均一性とその影響を定量的に把握することは、構造物の高強度化や高性能鋼材の開発を進めるにあたって重要となる。本論文では、微視組織の不均一性と結晶粒界近傍での変形挙動を考慮した微視的応力解析のための数値解析手法として、有限要素法 (FEM) と分子動力学法 (MD) を結合させた FEM-MD 結合数値解析法を提案しその適用可能性を示した。

本論文は 8 章からなり、第 1 章では、本研究の背景と微視組織を考慮した力学的特性評価のための数値解析手法に関する従来の研究の調査から、微視組織の不均一性と結晶粒界近傍の変形挙動を考慮した数値解析手法の必要性を指摘した。

第 2 章では、結晶粒界近傍での変形挙動の観察より、結晶粒界近傍では隣接する結晶粒の変形量の差異から変位のミスマッチが生じていることを確認し、このような現象を考慮した数値解析手法を構築する上で必要となる情報やモデル化方法など基本的な考え方を整理した。

第 3 章から第 5 章では、第 2 章で示した考え方に従い、微視組織の不均一性と結晶粒界近傍での変形挙動を考慮した数値解析モデルについて検討した。

第 3 章では、微視組織を特徴づける結晶粒形状の不均一性を模擬するための 2 次元結晶粒形状モデルの作成方法として、結晶粒形状を表現する結晶粒径、アスペクト比、および結晶粒の向きを表す主軸角度を反映させた楕円を平面内に配置しボロノイ分割法を利用して結晶粒形状モデルを作成する手法を開発した。

第 4 章では、微視組織の強度不均質を把握するための方法として、三角錐圧子を用いた押し込み試験による結晶粒レベルの微小領域における応力-ひずみ関係の推定方法を提案した。

第 5 章では、結晶粒内の応力解析に FEM を適用し、結晶粒界近傍の原子構造の解析に MD を適用して、両者を結合させる FEM-MD 結合数値解析法を構築した。本解析手法により、実際の鋼材で観察される結晶粒界近傍での変形挙動が再現され、微視的な応力分布を捉えることが可能となった。

第 6 章と第 7 章では、FEM-MD 結合数値解析法を適用しその有用性を示した。

第 6 章では、結晶粒形状や材質が変化するような溶接部近傍での力学的諸現象のメカニズム解明や強度などの力学的特性を評価するための手段として FEM-MD 結合数値解析法が有用となる可能性を示した。

第 7 章では、結晶粒形状や構成相の体積分率および機械的特性を変化させた場合の応力分布特性の評価を試み、本

論文で提案する手法が材料開発の指標などを得るための、力学的特性の定量的な評価に適用することが可能となることを示した。第8章では、本論文を総括した。

## 論文審査の結果の要旨

本研究は、通常は多結晶構造を有し、また、微視的にも不均質な鉄鋼材料の機械的特性を制御し、より高性能な材料開発を行うための制御支配因子を明確にすることが望まれている現状に鑑みて、鋼材の結晶粒レベルでの不均質性を考慮した微視応力解析手法を提案するものである。本論文では、特に、鋼材の結晶粒の不均一分布特性に注目し、結晶粒界近傍での変形挙動を考慮した微視的応力解析のための数値解析手法として、有限要素法（FEM）と分子動力学法（MD）を結合させた FEM-MD 結合数値解析法を提案しその適用可能性を示したものである。本論文の主な新しい着目点と結論は以下の通りである。

- (1) 鋼材の結晶粒界における変形の不連続を実験的に明らかにし、結晶粒界近傍の変形特性をモデル化することの必要性を指摘し、それを数値解析に取り入れる手法として、結晶粒内の変形解析は有限要素法を、各粒の粒界における変形の不連続については分子動力学を用いた変形抵抗解析を行い、両者を組み合わせて鋼材の粒界近傍の変形解析を行う手法を新たに提案している。
- (2) 提案する解析手法の適用にあたって必要となる鋼材の持つ結晶粒の分布特性のモデル化と結晶粒レベルの材料特性の評価について検討し、結晶粒分布のモデル化では、結晶粒形状を表現する結晶粒径、アスペクト比、および結晶粒の向きを表す主軸角度を反映させた楕円を平面内に配置しボロノイ分割法を利用して結晶粒形状モデルを作成する手法を開発し、実際の適用例を示している。また、微視組織の強度不均質を把握するための方法として、三角錐圧子を用いた押し込み試験による結晶粒レベルの微小領域における応力-ひずみ関係の推定方法を新しく提案している。
- (3) 本論文で提案する手法を結晶粒レベルでの応力解析に適用し、結晶粒形状や材質が変化するような溶接部近傍での力学的諸現象のメカニズム解明や強度などの力学的特性を評価するための手段として FEM-MD 結合数値解析法が有用となる可能性を示すとともに、結晶粒形状や構成相の体積分率、および機械的特性を変化させた場合の応力分布特性の評価を試み、力学的特性の定量的な評価に適用することが可能となることを示している。

以上のように、本論文で提案している FEM-MD を結合した新しい解析法は、多結晶構造を持つ材料の微視的な応力・歪特性を把握するのに有効な手段であり、構造用材料の高強度化・高靱性化などの材料開発に有効な手段を与えるものである。本手法の三次元化などを進めることで、鋼材開発や鋼溶接部の性能改善のためへの新しい知見を与える可能性もあり、材料工学、溶接材料学、溶接力学などの発展に寄与するところが大きい。

よって、本論文は博士論文として価値あるものと認める。