



Title	Thermal effects on microstructure in fracture and dynamics of a grain boundary
Author(s)	山本, 敦志
Citation	大阪大学, 2012, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/59446
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、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

氏 名	山 本 敦 志
博士の専攻分野の名称	博 士 (理学)
学 位 記 番 号	第 2 5 2 2 6 号
学 位 授 与 年 月 日	平 成 24 年 3 月 22 日
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第4条第1項該当 理学研究科学宇宙地球科学専攻
学 位 論 文 名	Thermal effects on microstructure in fracture and dynamics of a grain boundary (破壊におけるミクロ構造および粒界のダイナミクスに対する熱の影響)
論 文 審 査 委 員	(主査) 教 授 川村 光 (副査) 教 授 菊池 誠 准教授 湯川 論 准教授 山本 千博 日本大学准教授 中原 明生

論 文 内 容 の 要 旨

破壊強度などの材料特性は材料の微視構造に強く影響をうけるため、微小なスケールで起こる現象を理解することは非常に重要である。それらの現象が理解できたとき、我々は材料特性を制御できるようになる。微視構造に影響を与える原因の一つとして熱が考えられる。近年、破壊過程や結晶粒界の運動が盛んに研究されているが、熱が破壊過程での微視構造に与える影響や粒界の運動に与える影響は未だ完全に理解されていない。本論文は、分子動力学(MD)シミュレーションを用いて、熱ゆらぎが結晶やアモルファス固体のクリープ破壊において微視構造へ与える影響と多結晶中の粒界の運動に与える影響を調べた。

最初に、Lennard-Jones (LJ) ポテンシャルを用いて亀裂を含む2次元結晶のクリープ破壊の MD シミュレーションを行い、熱ゆらぎが亀裂先端の構造に与える影響を調べた。その結果、亀裂先端は非常に歪み、その歪んでいる領域は熱ゆらぎのため広がることを確認した。次に、**Damage** の概念を導入し、亀裂先端の構造の解析を行った。**Damage** が集中した領域の特徴的な長さは温度と共に増加することを明らかにし、我々が定義した**Damage**はミクロな構造を良くとらえられていることを示した。

次に、変形された LJ ポテンシャルを用いて亀裂を含む2次元のアモルファス固体のクリープ破壊シミュレーションを行い、亀裂先端の構造を調べた。アモルファス固体でも、歪んだ領域は熱ゆらぎのため広がることを確認した。また、結晶で定義された **Damage** とは別の **Damage** を定義し、亀裂先端の構造の解析を行った。その結果、**Damage** が集中した領域は温度とともに増加することを明らかにした。次に、結晶とアモルファス固体の内部構造の違いを調べた。結晶は亀裂先端に **Damage** が集中するが、アモルファス固体は亀裂先端だけでなく系全体に**Damage**が広がることを明らかにした。

最後に、熱が結晶粒界の運動に及ぼす影響、特に温度勾配がある系での粒界の運動を調べた。その結果、粒界の動く方向は温度勾配の方向によって制御できることを明らかにした。また、温度一定の平衡系の場合でも粒界は特定の方向に動くことが確認された。つぎに、遷移状態理論を用いて粒界の運動の解析を行った。解析の結果、温度勾配は粒界の駆動力として働くことが示された。また、平衡系においては、各結晶粒の表面自由エネルギーの差によって動くことが明らかとなった。

物の破壊現象に対し工学的な観点から様々な研究が行われてきた。その結果、材料工学などでは材料の強度設計や破壊の制御がある程度可能になりつつある。一方理学的な観点から破壊現象を見てみると、破壊現象が非線形性をともなう非平衡現象であるという性質のため、問題の社会的重要性にもかかわらずその物理的本質の理解はまだまだ満足できる状況にはない。

そのような状況を踏まえ、山本敦志氏の博士論文では破壊の物理的理解を目指して研究が行われた。特に破壊現象のなかでも、亜臨界条件下でのクリープ破壊における熱的效果を統計物理学的観点から調べている。主要な結果として、クリープ破壊で重要な役割を果たすと考えられる破壊進展領域の特徴的サイズの温度依存性を、二次元材料の分子動力学シミュレーションにより詳細に調べ、破壊進展領域が温度増加と共に増加すること、また同時に応力拡大係数が温度増加と共に減少することを示した。さらに破壊進展領域を微視的観点から特徴づける二つの異なる特性をもつ物理量を提案し、この物理量から測定した破壊進展領域の大きさと、臨界応力測定からもとめた巨視的な破壊進展領域の大きさが矛盾なく結びついている事を明らかにした。

また本論文では、上記のクリープ破壊における熱的效果の研究に加え、結晶粒界の非平衡環境下での運動も調べられている。二次元材料の分子動力学シミュレーションにより得られた結果によると、融点以下の温度領域で、温度勾配によって結晶粒界の運動方向を制御できることが明らかになった。この運動の易動度は粒界を構成する二つの結晶の軸がなす角度に依存することが明らかとなり、易動度の温度と温度勾配依存性が遷移状態理論をもちいて現象論的に求められている。これらの成果は、破壊の物理的理解および制御にむけての大きな成果であり、本論文は博士（理学）の学位論文として十分価値あるものと認める。