

主 論 文 要 旨

報告番号	甲 第 号	氏 名	青柳 吉輝
主 論 文 題 目： 転位パターンニングおよび GN 転位の蓄積に基づく マルチスケール結晶塑性モデルとそのシミュレーション			
(内容の要旨)			
<p>金属結晶の塑性変形は結晶内の転位運動を、また加工硬化は転位堆積を素因としており、近年こうした転位場の情報を硬化則に取り込んで変形場と連成させて解析する試みが盛んに行われている。一方、強ひずみ温間・冷間圧延などによって創製される超微細粒金属は、卓越した強度を有する構造材料として注目が集まっており、これらの製造法の開発に計算材料科学と計算固体力学の分野で得られる知見を融合して反映させることが材料組織制御の分野において期待されている。しかしながら、転位挙動に基づいて超微細粒金属の創製プロセスを計算力学的に再現した例はみられないのが現状である。そこで本研究では、まず集団転位の自己組織化現象を記述する反応-拡散方程式を導出するとともに転位の微分幾何学的描像に基づく幾何学的に必要な(GN)結晶欠陥を定義し、これらの転位場の情報と変形場の情報を連成させたマルチスケール結晶塑性モデルを構築する。また、本モデルに基づく数値解析から、強ひずみ加工による結晶粒微細化のプロセスを再現することを試みる。</p> <p>第1章は序論であり、本研究の背景と従来の問題点を概説するとともに本論文の構成について述べる。</p> <p>第2章では、本研究で用いる運動学について論じる。まず、結晶塑性論の体系に適するよう、孤立転位に対応するGN転位密度および転位対に対応するGN不適合度を新たに定義し、それらをGN結晶欠陥と称する。また、幾何学的状態量であるGN結晶欠陥に整合するよう、転位対の消滅に起因する動的回復現象のモデルを新たに提案する。</p> <p>第3章では、自由エネルギーの引数として内部変数を決定し、それらに共役な内力を定義して、諸釣合い方程式を導出する。また、転位組織の秩序形成に寄与する転位拡散の影響を拡散のエントロピー流束として導入した熱力学第2法則からエントロピー不等式を導出する。</p> <p>第4章では、エントロピー増大則を満足するように、エネルギー共役量の仕事率を保存部分と散逸部分に分離して諸構成式を導出する。また、転位密度流束の構成式を第3章で得た釣合い方程式に適用することで、セル構造やサブグレインなどの転位パターンを表現する反応-拡散方程式を構築する。さらに、反応-拡散方程式に対して線形安定性解析を行い、時間的リズムを形成するHopf分岐および空間不均一構造を発現するTuring分岐の発生条件を調べるとともに、転位組織の自発的特性長さを求める。</p> <p>第5章では、第4章で得た異方性弾性構成式から、結晶塑性タイプの弾粘塑性構成式を導出し、結晶の硬化則に転位密度の情報を反映させるための一般論を展開する。さらに、変形場の応力情報を転位場に与えるために、反応-拡散方程式における各速度係数を分解せん断応力の関数としてモデル化する。また、第7章と第8章で実行する転位-結晶塑性FEM解析の準備として、数値解析上の注意点について詳述する。</p> <p>第6章では、反応-拡散方程式を差分近似して2次元FDM解析を行い、得られた転位パターンに基づいて、反応-拡散方程式の各速度係数および自発的特性長さに対して定量的な検討を加える。</p> <p>第7章では、第5章で提案した反応-拡散方程式における応力効果係数モデルに変形場の情報を与えるとともに、反応-拡散方程式から得られる不動転位密度を転位場の情報として結晶の硬化係数に反映させることで転位-結晶塑性連成解析を行う。解析対象をAI単結晶平板とし、平面ひずみ問題に対する変形場のFEM解析と反応-拡散方程式を用いた転位場のFDM解析を同時に実行する。得られた結果から、不動転位密度やすべりの分布および結晶方位の変化を可視化し、単結晶の3段階硬化に適合するようにセル組織形成およびサブグレイン形成が再現されていることを論じる。</p> <p>第8章では、転位場の情報としてGN結晶欠陥の蓄積状況を結晶の硬化係数に反映させた転位-結晶塑性解析を行う。AI多結晶平板を対象とした強圧縮解析の結果から、動的回復現象が転位場および変形場に及ぼす影響について考察し、本研究で提案した動的回復モデルならびに転位密度依存形の転位平均飛行距離モデルの妥当性について検討する。また、GN粒界が粒内に誘起される過程を再現し、GN粒界によって初期結晶粒が複数の粒に微細化されるメカニズムを明らかにする。</p> <p>第9章は結論であり、本研究で得られた成果を要約する。</p>			
以上			