

## 主 論 文 要 旨

報告番号	甲 第 号	氏 名	黒澤 瑛介
主 論 文 題 目： FCC 超微細粒金属の力学特性に関するトリプルスケール転位-結晶塑性モデリング および大変形 FEM シミュレーション			
(内容の要旨)			
<p>強ひずみ加工により創製される粒径が <math>1\mu\text{m}</math> 以下の超微細粒金属は、卓越した強度を有する構造材料として近年注目を集めている。FCC 金属においては、粒径のサブミクロン化に伴って強度が飛躍的に向上する一方で、延性が急激に低下する。さらに、FCC 超微細粒金属に焼鈍処理を施すことで得られる FCC 超微細粒焼鈍材においては、通常 BCC 焼鈍材で観察される降伏点降下現象および Lüders 帯の伝ばが起ることも報告されている。このように、FCC 超微細粒金属は特異な力学特性を示すことが知られているが、その微視的メカニズムについては十分に解明されていないのが現状である。そこで本研究では、FCC 超微細粒金属におけるミクロからマクロにわたる力学挙動を一つの計算力学的手法によって統一的に再現することを目的とし、転位組織、結晶粒構造および巨視構造という 3 階層を橋渡しするトリプルスケール転位-結晶塑性モデルを構築する。また、本モデルを用いた大変形 FEM 解析を行い、FCC 超微細粒金属に発現する特異な材料挙動の微視的メカニズムを解明することを試みる。</p> <p>第 1 章は緒言であり、本研究の背景、従来の研究の問題点および本研究の目的について述べる。</p> <p>第 2 章では、結晶塑性論における運動学について論じ、結晶塑性論の体系に適合するよう定義された幾何学的に必要な (Geometrically Necessary : GN) 転位密度テンソルおよび GN 不適合度テンソルを紹介する。また、GN 転位密度および GN 不適合度はそれぞれ結晶粒内における孤立転位および転位対の密度に対応することを示す。</p> <p>第 3 章では、GN 転位密度および GN 不適合度を内部変数として全自由エネルギーの引数に導入し、各引数に共役な内力を定義する。次に、内部変数を陰に含んだ形で力学的釣合い方程式、エネルギー方程式およびエントロピー不等式を導出する。さらに、Clausius-Duhem の不等式を保存部分と散逸部分に分離し、保存部分から速度形弾性構成式を導出するとともに、散逸部分を用いて GN 転位密度および GN 不適合度を結晶の硬化則へ導入することの熱力学的整合性を示す。</p> <p>第 4 章では、まず幾何学的に導出された転位の対消滅モデルを採用し、動的回復を考慮した全転位密度を定義する。次に、第 3 章で導出した速度形弾性構成式に基づいて結晶粒スケールにおける弾粘塑性構成式を導出するとともに、転位密度の情報を結晶の硬化則に反映させるための手法について言及する。さらに、超微細粒内に特有な転位の枯渇状態に起因する流れ応力の一時的な増加を表現するために、転位源としての粒界の役割を考慮した新たな臨界分解せん断応力モデルを提案する。その際、本モデルを用いれば臨界分解せん断応力の粒径依存性についても表現できることを示す。以上のモデルを用いて、転位スケールおよび結晶粒スケールの橋渡しを可能とする転位-結晶塑性モデルを構築する。</p> <p>第 5 章では、結晶粒スケールと巨視的スケールの橋渡しを可能とする結晶塑性均質化理論に基づいて、巨視的スケールにおける均質化結晶塑性構成式および両スケールにおける支配方程式を導出する。</p> <p>第 6 章では、上述のモデルに基づくトリプルスケール転位-結晶塑性 FEM 解析を行うための離散化処理を行い、本 FEM 解析のアルゴリズムを示す。</p> <p>第 7 章では、転位組織-結晶粒構造-巨視的試験片に跨がるトリプルスケール転位-結晶塑性 FEM 解析を初期平均粒径および初期転位密度の異なる FCC 多結晶体に対して実施し、結晶粒微細化に伴う初期降伏応力の増加や延性の急激な低下といったマクロな試験片に発現する寸法効果を数値解析的に再現する。また、転位源としての粒界の役割を考慮した臨界分解せん断応力モデルを用いれば、FCC 超微細粒焼鈍材に発現する降伏点降下現象および Lüders 帯の伝ばを再現できることを示す。さらに、超微細粒金属における試験片レベルでの巨視的降伏および結晶粒レベルでの微視的降伏状況について考察するとともに、粒径のサブミクロン化に伴う FCC 金属の急激な延性低下のメカニズムについて言及する。</p> <p>第 8 章は結言であり、本研究によって得られた知見を要約する。 以上</p>			

## SUMMARY OF Ph.D. DISSERTATION

School Integrated Design Engineering	Student Identification Number	SURNAME, First name KUROSAWA, Eisuke
<p>Title</p> <p style="text-align: center;">A Triple-scale Dislocation-crystal Plasticity Modeling and FE Simulation of Large Deformations on Mechanical Properties of FCC Ultrafine-grained Metals</p>		
<p>Abstract</p> <p>Ultrafine-grained metals (UFGMs) whose grain size is less than 1 <math>\mu\text{m}</math> have attracted interest as high strength structural materials. Although the strength of FCC metal increases significantly as the grain size reduces to submicron scale, its tensile ductility decreases abruptly. In addition, yield point drop and propagation of Lüders band that are usually observed in annealed BCC metals also occur in annealed FCC UFGMs. However, microscopic mechanisms of these peculiar mechanical behaviors of FCC UFGM are not yet explained enough. In this thesis, a triple-scale dislocation-crystal plasticity model bridging three hierarchical material structures, i.e., dislocation structure, grain aggregate and macroscopic structure is developed in order to reproduce computationally mechanical behaviors of FCC UFGM. Using the present material model, a multiscale finite element (FE) analysis of large deformations is conducted and mechanisms generating the particular material properties of UFGMs are clarified.</p> <p>Chapter 1 describes backgrounds of this field, current problems and aims of this study.</p> <p>Chapter 2 is devoted to kinematics for crystal plasticity theory in which geometrically necessary (GN) dislocation density and GN incompatibility suitable for crystal plasticity theory are employed so as to represent isolated dislocations and dislocation pairs, respectively.</p> <p>In chapter 3, balance laws for mechanical quantity and energy, and the law of increase in entropy are formulated using the internal variable theory. The thermodynamic consistency of hardening law dependent on dislocation density is investigated through the entropy inequality.</p> <p>In chapter 4, a model of dislocation annihilation based on a geometrical consideration is adopted, and the total dislocation density considering dynamic recovery is introduced into the hardening law of a crystal. Then the constitutive equation of dislocation-crystal plasticity is derived, that bridges between dislocation structure and grain aggregate. In addition, a new critical resolved shear stress model considering role of grain boundary as a dislocation source is proposed so that the temporal increase of flow stress can be expressed due to exhaustion of dislocation in an ultrafine-grain (UFG). This model also enables to express the grain size dependency of critical resolved shear stress.</p> <p>In chapter 5, the homogenization theory connecting grain aggregate with macroscopic structure is applied to the dislocation-crystal plasticity model in chapter 4.</p> <p>Chapter 6 shows a FE discretization and a computational procedure of the triple-scale dislocation-crystal plasticity FE analysis based on the present models.</p> <p>In chapter 7, a triple-scale FE simulation is carried out for FCC polycrystals with different mean grain size and different initial dislocation density. Size effects occurring in a macroscopic specimen consisting of UFGs are numerically reproduced. It is also shown that yield point drop and propagation of Lüders band observed in annealed FCC UFGM can be seen in the result calculated by this model. Moreover, the relationship between macroscopic yielding of specimen and microscopic grain yielding is investigated, and the microscopic mechanism decreasing tensile ductility of FCC UFGM with decrease of grain size is clearly explained.</p> <p>Chapter 8 summarizes the conclusions obtained in this study.</p>		