Kobe University Repository : Kernel

PDF issue: 2025-08-03

FTMP場の理論に基づく離散転位系の連続像

井原，史朗

(Degree)
博士（工学）

(Date of Degree)
2021-03-25

(Date of Publication)
2022-03-01

(Resource Type)
doctoral thesis

(Report Number)
甲第8070号

(URL)
https://hdl.handle.net/20.500.14094/D1008070

※ 当コンテンツは神戸大学の学術成果です。無断複製・不正使用等を禁じます。著作権法で認められている範囲内で、適切にご利用ください。

（別紙様式 3）

論文内容の要旨

氏　名　井原　史朗

専　攻　機械工学専攻

論文題目（外国語の場合は，その和訳を併記すること。）

FTMP 場の理論に基づく離散転位系の連続像

指導教員　長谷部　忠司

（注）2，000 字～4，000 字でまとめること。

本論文は，FTMP（Field Theory of Multiscale Plasticity）という近年提唱されている不均質場の取り扱いに関する理論を，種々の転位系に対して適用し，それらの定量評価を試みることで，離散転位系を連続像に還元する道筋を示すことを目的としている．これまで FTMP は，主に結晶塑性論に基づく連続体モデルに活用され，有限要素解析においても変形誘起の不均質場の表現・評価が可能であることを示してきた．本論文では，現象論的仮定が少ない，物理シミュレーションに基づく解析結果に対して FTMP 的観点を適用する．これによって，これまでに無い観点からのメゾスケールにおける知見を示すだけでなく，連続体モデルへ還元する新たな術を見出していく．対象とする離散転位系として，転位壁に関する 4 つの課題を取り上げる．すなわち，(a) 転位の可逆的な張り出し運動に伴う見かけの弾性定数の低下（第 3 章），(b) 疲労き裂発生過程に関わる固執すべり帯（Persistent Slip Bands: PSBs）における転位運動（第 4 章），(c) 変形誘起下部組織の代表例である幾何学的に必要な境界（Geometrically Necessary Boundaries: GNBs），および (d) その他の安定・不安定な転位壁（第 6 章）である．これらの対象はいずれも，従来からその重要性は認識されて来たが，実験観察を超えての本質的理解やモデル化が困難であったものである．

第 1 章では，金属材料におけるマルチスケール問題について概説し，FTMP および転位下部組織の立ち位置を示した後に，本論文で取り扱う転位下部組織や工学的問題について述べた．さらに，転位系を数値的に取り扱う転位動力学法，転位系の評価法，FTMP による定量評価について述べることで，本論文の目的や意義を示した．

第 2 章では，FTMP およびそれに基づく評価法について述べ，本論文で用いる転位動力学コードの詳細についても示した．

第 3 章では，金属材料の塑性加工における，負荷・除荷過程での見かけの弾性定数の低下が，転位の可逆的な運動に起因すると考え，この転位系を作成し，FTMP による評価を行った．離散転位動力学法によって，刃状転位をすべり面に対して水平および垂直に並べた場合のモデルを作成し，これらに負荷および除荷を与えた所，転位列の並び方によって転位の張り出し方は異なり，こうしたエネルギ・不適合度の変換過程が双対線図によって定量的に可視化された．さらに，いずれのモデルにおいても，不適合度およびひずみエネルギの比を取った，双対係数と見かけの弾性定数の低下とは良好な相関が見られた．この影響を FTMP に基づいた結晶塑性モデルに導入することで，負荷・除荷過程における見かけの弾性定数の変化を適切に表現し得ることが示された．このことは，FTMP に基づいた転位系の連続像が，マクロな解析に対しても活用可能であることを示していると考えられる．また，析出物を含む崩壊した転位壁から作成した転位モデルにおいても解析および評価を行った所，応力－ひずみ線図の傾きの変化や，残留ひずみに対しても双対係数による整理が可能であることがわかった．

第4章では，PSBs（Persistent Slip Bands）に対する解析およびFTMPに基づく相空間トラジェクトリ（Phase Space Trajectory: PhS-T）による安定性評価を行った．転位双極子が並んだ転位壁モデルを作成し，周期負荷を掛け，応力レベルの差異および交差すべり頻度の差異について検討を行った．転位壁から転位が張り出すことによってChannel 部に転位双極子が形成され，低い応力レベルではこれが残り続けたが，応力レベルが高いケースでは転位間相互作用が頻繁に生じたため，この転位双極子は解消された．こうした転位間相互作用の差異によって，PhS-T 上で示される閉軌道（安定状態）に至る過程が変化し，特に不適合度速度にその影響が表れることがわかった．一方，交差すべりが生じる系では，負荷方向が反転した際にChannel部に微小転位ループが生成され，通常は閉軌道を示すPhS-T上の振る舞いに変化が生じた．微小転位ループを詳細に分析すると，刃状転位が主体的な転位ループであることがわかり，PhS-T 上の軌道の変化と合わせて検討することで，微小転位ループの生成数と不適合度速度との間に相関があることが示された．この関係は，4次元時空に拡張した不適合度テンソルの無発散性からも示されることである．本解析で生成された微小転位ループは原子空孔と見做し得ることから，交差すべりによって原子空孔が生成され，その量は不適合度速度によって測られることが示唆された．

第 5 章では，詳細構造が近年報告された 4 種類の GNBs（Geometrically Necessary Boundaries）を離散転位動力学法によって再現し，FTMPに基づく評価を行った．初期に配置した転位は，転位間相互作用によって理論配置と同様の形態を見せた．こうして得られたGNBsのShannonエントロピーを求め，不適合度と比較することで，両者の間の良好な相関が得られた．さらに，双対線図表現によって，各GNBの最終形態は特定の曲線上に並ぶことが示され，運動エネルギゆらぎを仮想的に加えた双対線図における議論と合わせることで，安定な組織ほど，外乱に対して大きな形態変化で対処することが示唆された．この仮説を検証するために，GNB2 に対して，運動する転位と相互作用を生じさせた．その結果，GNB2 の形態変化が生じ，その変化後の形態は，双対線図上でGNBsの最終形態が並ぶ曲線上に位置することがわかり，同仮説が一部検証された．

第 6 章では，混合転位壁およびLath 壁のモデル化および評価を行った．混合転位壁は，格子状に転位を配置してそれぞれにBCCに属するBurgersベクトルを与えて作成した．このような混合転位壁モデルは，人工的に作成したため，緩和計算によって不安定的な崩壊挙動を見せたものの，一部のモデルはジャンクションを形成して準安定的な挙動を示した．こうした緩和挙動の様相は，双対線図上で定量的に分類された．Lath 壁の解析では，転位との相互作用を検証し，相互作用後の形態を双対線図によって評価した．Lath壁を構成する転位とは異なるBurgersベクトルを有する転位との相互作用では，Lath壁は形態変化を示した．一方，Lath壁と同種のBurgersベクトルを有する転位との相互作用では，Lath 壁で対消滅等が生じ，最終的に壁の欠損が見られた．双対線図上では，一

部形態変化したモデルでは不適合度のみの大幅な上昇が見られた一方で，欠損が生じたモデルでは，エネルギゆらぎが大きく上昇した．このことは，欠損によってLath壁が低エネルギ構造から逸脱したことを示している．さらに，第5章で行ったGNBsの双対線図と合わせ，GNBs，混合転位壁およびLath壁に対する統一的な評価を試みた．各種転位壁の双対線図上での位置関係から，転位壁の特徴を捉えることができた．一般的に大きな方位差を有し，低エネルギ構造を示すGNBsは，高い不適合度および低いエネルギを有すると考えられる．小さな方位差で長範囲の応力場を発生させるCell壁は，混合転位壁の結果から類推され，高い不適合度およびエネルギを有すると推測される．本解析で対象としたLath壁は高密度のらせん転位で構成されることから，双対線図上では低い不適合度で，高いエネルギを有する．こうした転位壁の描像は，FTMP に基づいた転位下部組織が自発的に形成される有限要素モデルにおいて，得られた形態がどのような転位壁としての性質を有するのかといった検証や，不適合度，エネルギをどのように制御すれば転位下部組織を実現できるのか，といった検討に繋げられると期待できる．

第7章では，本論文の意義を再度示した後に，各章の総括を行った．

（別紙１）　　論文審査の結果の要旨

氏名	井原史朗		
論文題目	FTMP 場の理論に基づく離散転位系の連続像		
審査委員	区　分	職　名	氏　　名
	主　査	准教授	長谷部忠司
	副　査	教授	田中克志
	副　査	教授	向井敏司
	副　査		
	副　査		印

要　　旨

本研究は，(a)FTMP(Field Theory of Multiscale Plasticity)という近年提唱されている新しい独自の理論体系を，離散転位度力学法という，基本的に現象論的仮定を用いない物理シミュレーション手法に基づく各種解析結果に対して適用することでその有用性を定量的に示したという側面に加え，(b)対象とする課題の広範囲性にその特徴がある．前者の適用は必然的に"複雑な離散系"を"連続系の言葉"で表現する道筋を示してくれる．一方後者では，各現象の実験観察を越えての理解やモデル化が困難であった当該分野における重要課題が対象とされ，前者の文脈で定量的に分析・評価されている．すなわち，まず Bauschinger 効果における遷移軟化の発現機構にも関わる弾性定数の未錆掛上の低下，疲労き裂発生過程に関わる固執すべり帯(PSB)の下部構造である転位ラダー組織中での転位運動，および変形誘起下部組織の代表例である幾何学的に必要な転位壁(GNBs)といった広範囲に渡っているという側面，の 2 点がとりわけ特徴的である．前者では，FTMP の妥当性が検証されるだけでなく，従来に無い独自の観点からの各種分析や評価法が新たに提唱され，さらに，例えば結晶塑性有限要素法を用いた現象論シミュレーションなどへのさらなる展開への橋渡しが一部ではあるが具体的な形で提示されている．

本研究で主となる解析手法である離散転位動力学法の概要，FTMP(Field Theory of Multiscale Plasticity)の概要，および前者のシミュレーション結果を後者の理論で評価するための方法がそれぞれ整理されている．とりわけ本論文にて重要な役割を担う"双対線図"の基盤となる"Flow-Evolutionary"則および関連する"Phase-Space Trajectory"についてについて詳述されている．続く計四章が研究内容である．

第三章では，転位のダンピング運動に起因する"見かけの弾性定数減少の解析および評価"を課題とし議論されている．転位動力学シミュレーションの結果に対し，系の不適合度テンソルおよびひずみエネルギ変化を評価し，両量の関係を図示した"双対線図"上での各挙動を分析することで，そうした対比的な挙動が，負荷中および除荷中に系に蓄積された，あるいは蓄積されようとしている弾性ひずみエネルギが，転位セグメント群の形状変化の形で不適合度場へ移行あるいは解放される様子が"可視化"され，さらに最大負荷時の両量の比より評価される"双対係数"によって，モデルの違いおよびセグメント数に依らず一本の直線で整理されることが示されている．このことは，双対線図係数を介して転位の"離散像"から，マクロ量である弾性定数の低下という，いわば"連続像"への橋渡しが可能であることを明示しており，本論文では実際に FTMP を導入した結晶塑性有限要素解析への適用例として具体的に示している．

第四章では，金属材料の疲労破壊の起点となる"き裂発生過程"の起源となる"固執すべり帯(PSBs)"における転位運動を対象としている．ここでは，同組織の主要構成要素である刃状転位双極子の往復運動を各種条件下でシミュレートし，とくに不適合度テンソル場に対する相空間トラジェクトリー(PhS-T)の方法による分析・評価が行われている．ラダー組織中のチャンネル部に張り出したらせん転位群の往復運動が PSB における集中的なせん断変形を担っているのであるが，らせん転位群はチャンネル内で行き交う運動中に相互の弾性相互作用の結果時折ダイポール(双極対)を形成し，他の運動転位の障害物として働くため，負荷応力レベルにより PhS-T へ及ぼす影響が異なることが示されており．その違いは，いわゆる安定運動に対するリミットサイクルに至る過程に主として現れることが明らかにされた．一方，PhS-T 上では主として不適合度テンソルの変化速度に関係することが明らかにされ，さらに，不適合度テンソル変化速度とデブリ・ループ生成数との間に正の相関がみられることが示された．

第五章では，変形中の金属材料の機械的性質を支配する転位下部組織において，その詳細構造が近年系統的な形で同定された，幾何学的に必要な転位壁構造(Geometrically-Necessary Boundaries: GNBs)を対象とし，DD シミュレーションによるその再現と FTMP 的観点からの安定性評価を行っている．外部からの擾乱に対し，安定な転位壁では，大きなひずみエネルギ変化を示すことなく自身の形態を大きく変化させること，すなわち不適合度の大きな変化により同擾乱を吸収する，という機構が確認され，上記仮説が一部ではあるが検証されたと結論付けている．

氏名	井原史朗

第六章では，第五章で議論した GNBs 以外の転位壁について同様のアプローチを行っている．すなわちラス壁および混合転位壁である．前者はそれ自身は極めて安定な構造を有しており，ここでは F-R 源から射出された転位との相互作用が主として論じられている．後者では，完全崩壊など基本的に不安定な構造からのシミュレーション結果に対する分析・評価を行っている．最終的には，第五章で扱った GNB を含め，双対線図上で統一的な可視化が可能であることを結論付けている．

第七章は，本論文で得られた結果の総括および今後の展望について言及している．

以上，独自の理論体系である FTMP 場の理論を用い，他方でそれとは独立した物理シミュレーション手法である離散転位動力学法に駆使することで，複数の重要課題，すなわち，連続体モデルでは取り扱いが困難な転位下部組織に関連する四つの課題を取り上げ，それぞれの文脈に対するモデル設定の下解析を実施すると同時に，FTMP 場の理論に基づく統一的な観点からの評価，およびそれらを通じて FTMP 場の理論の検証と連続体モデルへの還元に関する検討を系統的に行っており，博士学位論文内容として首尾一貫した研究構成となっている．

以上の内容より，提出された論文は工学研究科学位論文評価基準を満たしており，学位申請者の井原史朗は，博士（工学）の学位を得る資格があると認める．