

氏 名	屋 代 如 月
学位(専攻分野)	博 士 (工 学)
学 位 記 番 号	工 博 第 1763 号
学位授与の日付	平 成 10 年 9 月 24 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 4 条 第 1 項 該 当
研究科・専攻	工 学 研 究 科 機 械 物 理 工 学 専 攻
学 位 論 文 題 目	金属結晶の変形と破壊の分子動力学シミュレーション並びに局所格子不安定性解析 (主査)
論文調査委員	教 授 大 谷 隆 一 教 授 島 進 教 授 立 花 明 知

論 文 内 容 の 要 旨

電子デバイスやマイクロマシンの微小材料では、原子配置の不整や原子オーダーの欠陥が部材全体の破損をもたらす可能性がある。しかし、その評価には、従来の構造材料に対する巨視的な破壊の概念が適用できず、原子レベルの破壊機構を明らかにする必要がある。本論文では、機械的負荷によって金属結晶に発生する欠陥の生成機構を原子オーダーの力学に基づいて解析することを目的とした。そのために分子動力学法によるニッケルの変形・破壊シミュレーションを行い、欠陥の生成プロセスを詳細に観察するとともに、その発生クライテリオンを局所のエネルギー不安定性から評価する方法を提案した。その結果、欠陥の発生は結晶格子の崩壊として統一的に解釈できることを示した。

緒論である第1章では、関連する研究の中での本研究の位置づけおよび目的を示すとともに、本論文の構成を述べた。とくに、従来の金属結晶に関する微視的変形・破壊の研究において原子レベルのダイナミクスに関する力学的視点が欠如していることを指摘し、本研究で行う解析との相違を明確にした。また、本論文で用いる分子動力学法、原子間ポテンシャル、および格子不安定性解析の基礎について説明した。

第2章では、せん断型の欠陥生成機構について検討した。ニッケル単結晶細線の一方向引張シミュレーションを行い、部分転位が表面からすべり面上に発生する過程を観察した。転位発生の前駆現象として、部分転位発生方向の分解せん断ひずみが局所的に急増するひずみ集中現象が生じることを明らかにするとともに、格子不安定性解析により、それが局所的なせん断変形に対するエネルギー的不安定性に誘起されていることを示した。すなわち、転位の発生は結晶格子のせん断不安定崩壊であり、その力学的クライテリオンは局所不安定性解析によって定量的に評価できることを示した。

第3章では、引張型の欠陥生成機構について検討した。引張軸に対して垂直方向に強い変形拘束がある場合には、せん断型の格子崩壊が抑制され、へき開破壊が生じ易くなる。本章では、分子動力学シミュレーションによってこの条件下でへき開破壊を発生させた。その結果、引張ひずみがエネルギー的不安定条件を満足した時に発生することを明らかにした。すなわち、へき開破壊は結晶格子の引張不安定崩壊であると解釈でき、その力学的クライテリオンは引張変形に対する不安定性解析より定量的に評価できる。変形モードに差はあるものの、転位やへき開破壊の発生のような局所破壊は結晶格子の崩壊として一般化でき、格子不安定性によって統一的に理解できることを明らかにした。

第4章では、格子不安定条件の一般化について力学的視点から検討した。弾性係数と弾性剛性係数による2種類の不安定性評価があることを説明し、その原子レベルにおける評価法について議論した。また、せん断不安定性(第2章)と引張不安定性(第3章)のシミュレーション結果に基づき、それらのパラメータによる不安定性評価法の妥当性について検討した。その結果、両不安定条件は局所弾性剛性係数によって定量評価できることを明らかにした。

第5章ではせん断不安定性に関する温度の影響について検討した。温度が上昇して原子の熱揺動が大きくなると、弾性剛性係数を含む力学量にゆらぎを生じる。本章では有限温度下で部分転位発生方向に純粋せん断を受けるニッケル単結晶の分子動力学シミュレーションを行い、等温過程におけるゆらぎの影響を考慮した弾性剛性係数を定量評価した。弾性剛性係数

は温度の上昇とともに小さくなり、変形に対してエネルギー不安定となるひずみも低下することを明らかにした。

微小材料の変形・破壊をより一般的に理解するためには、多数の欠陥による乱れた原子配置からの変形・破壊や複雑な負荷条件における変形・破壊の微視的条件について検討する必要がある。そこで、第6章では、多数のすべり変形によってもたらされる延性破壊およびすべり変形の可逆／非可逆性が重要となる繰返し変形をとりあげて分子動力学シミュレーションを行い、そのプロセスを観察するとともに、その変形進行の微視的過程について局所不安定性の観点から検討を加えた。いずれの場合も、前章までに検討した局所不安定性によって変形の進行をかなり良好に記述できることを示した。

第7章ではこれらの知見をまとめて結論とした。計算機能力の向上を背景に数値シミュレーションによる原子レベルの材料設計や材料評価が活発になりつつある。しかし、微小材料における局所の力学的挙動の評価に関する研究例は少なく、今後の発展が期待されている。本研究は、変形・破壊現象を原子レベルから統一的に理解する際の指針となるものとして価値のある成果を得た。

論文審査の結果の要旨

本研究は、電子デバイスやマイクロマシンを構成する微小材料の信頼性評価を行うことを目的として実施されたものであって、その第一段階として、機械的負荷によって金属材料に発生する原子レベルの破壊のダイナミクスを明らかにするため、ニッケルのナノ結晶に引張荷重が作用する場合の欠陥発生過程を分子動力学法によってシミュレーションし、その原子配置の動的・連続的な変化を観察した。さらに、その結果に基づき欠陥発生の際の力学的クライテリオンを局所格子の変形に対するエネルギー不安定条件から導出することを試みた。得られた結果を要約すると以下のとおりである。

(1) 部分転位の発生過程を観察し、発生の前駆現象としてせん断ひずみの集中があること、また、格子不安定性解析よりひずみ集中は局所格子のせん断変形に対する不安定性に起因するものであることを明らかにした。すなわち、転位発生は結晶格子のせん断不安定崩壊である。

(2) 結晶側面の横変形を拘束することによりへき開破壊を起こさせ、その局所条件について検討した。へき開破壊のクライテリオンは局所格子の引張変形に対する不安定性から定量評価できる。上記(1)の転位発生と合わせて、原子オーダーの欠陥の発生過程は局所結晶格子のエネルギー不安定性による連続的崩壊であると一般化することができる。

(3) 格子不安定性の定量評価法の一般化を試み、局所の応力と弾性係数によって評価される弾性剛性係数とその力学量として適切であることを示した。

(4) 分子動力学法による弾性剛性係数の評価に基づいて、原子の熱揺動による力学量のゆらぎがせん断不安定性に及ぼす影響を評価した。温度とともに弾性剛性係数が低下し、せん断不安定が生じ易くなることを定量的に明らかにした。

(5) 多数のすべり変形によって生じる延性破壊および可逆的なすべり変形が生じる繰返し変形についても、局所格子不安定性に基づく解析が有効であることを示し、微小材料の変形・破壊を統一的に理解できる可能性を示した。

以上要するに、本論文は結晶材料の原子レベルの変形および破壊に関する力学的性質について検討したものであって、局所格子不安定性の観点から統一的解釈が可能なことを示したところに新規性がある。微小材料の機械的特性を評価し、理解する際の指針となり得るものであって、学術上、實際上寄与するところが少なくない。よって本論文は博士（工学）の学位論文として価値あるものと認める。また、平成10年7月24日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行った結果、合格と認めた。