

(続紙 1)

京都大学	博士 (エネルギー科学)	氏名	Ek-u Thammakornbunjut
論文題目	Inhomogeneities Effects on Possible Debonding Modes of Coated Materials: Numerical Analysis Study (被覆材料の剥離可能性に関する不均質性の影響 : 数値解析的研究)		
(論文内容の要旨)			
本論文は、熱負荷を受ける薄膜被覆材料における薄膜の剥離可能性について、主に数値解析的立場から論じた結果をまとめたもので、6章からなっている。 第1章は序論で、研究の背景ならびに研究の目的を論じている。機能や強度を向上させることを指向して、基材上に薄膜を創成／付与して用いることがしばしばなされる。しかし、このような被覆材料においては熱的あるいは機械的負荷に伴う剥離が、被覆材料にとって致命的な問題となり、その定量的評価が重要となる。そこで、第1章ではまずこれまで行なわれている薄膜の剥離に関する研究を検討し、薄膜の座屈問題としての取り扱いや破壊力学的な取り扱いに関する研究の動向を調査している。ついで、本論文での研究目的を、薄膜の剥離の可能性に関わる変形モードと界面における不均質力の発展に絞り込み、基材や薄膜における種々の不均質性の影響、すなわち微視的な不整合の影響について数値解析的に論じる旨をモデルとともに示している。 第2章では、本論文で用いる材料モデルを記述している。まず連続体力学における基礎理論を応用して、解析に必要な平衡方程式、構成式、変位－ひずみ速度関係式などを、薄膜被覆材料に適用することを視野に入れて新たに定式化している。その上で、材料不均質を記述するために必要な材料異方性の表現について表現定理としてまとめるとともに、形態力の概念を用いた不均質力を定式化して破壊力学におけるエネルギー解放率との関係や意義を論じている。 第3章では、数値解析に用いる有限要素法についてまとめている。仮想仕事の原理式をはじめ、座屈解析で必要となる更新ラグランジュ表示による定式化、有限要素解析に必要な離散化操作、特に3次元での立体要素の効率的な数値積分法を取り上げるとともに、第4章以下で用いる解析手法の概要を示している。ついで、温度上昇を既知パラメーターとして薄膜の変形モードを逐次解析するアルゴリズムを作成して、解析途上での薄膜の剛性と固有モードの解析に適用できることを示しているほか、界面での不均質力を計算するための手法を新規に構築している。 第4章および第5章では数値解析結果を示している。まず第4章においては、熱負荷に伴う薄膜の変形と剥離可能性について論じている。解析対象を簡単な系に限定して、多結晶体を模擬した基材に薄い膜が完全に接合されている場合を解析している。温度上昇に伴って薄膜層には熱応力が発生するが、熱応力下での薄膜の剛性を逐次解析している。さらに、解析対象の結晶学的な意味でのばらつきや界面の粗さ（凹凸）に起因する接合力のばらつきと空間上のスペクトル分布を計算して、薄膜の変形モードの空間分布と接合力の相関を検討している。比較的高次までの固有値解析を行なう			

ことで、基本変形経路である等二軸変形よりも低いエネルギーレベルで面外への変形の可能性を指摘している。このことは、薄膜が力学的な意味で剥離する可能性を示唆するもので、有用な知見が得られている。

第5章では、界面における剥離の駆動力について解析的に検討している。第4章での変形モードの解析によって剥離する可能性は示されたが、接合した材料が剥離するためには、その駆動力が必要となる。そこで界面における不均質力を算出し、剥離に必要な駆動力が誘起されるかどうかについて議論している。不均質力は、界面をはさむ領域でのエネルギー落差として定義され、通常は界面に垂直な方向に誘起される。まず、不均質力とエネルギー解放率の類似性を数値的に議論した上で、界面での不均質力を検討している。検討の結果、接合界面での粗さと結晶のばらつきによって、界面に平行な不均質力が誘起されることを見いだしている。さらに、完全に接合された単純な系であっても界面上でエネルギー落差が生じることも明らかにしている。このことは、界面剥離のための駆動力となり得ることを示唆している。

第6章は本論文のまとめであり、各章での主な結果を述べるとともに、構築した解析手法を実用レベルに適用するための方策について、基本的な課題を抽出して議論している。

(論文審査の結果の要旨)

本論文は、薄膜被覆材料の熱負荷に伴う薄膜の剥離可能性について連続体力学的観点から数値解析研究を行なった結果をまとめたものであり、得られた主な成果は次のとおりである。

(1) 基材に接合された薄膜の接合力や不均質力を解析し、空間的なうねりについて検討した。その結果、空間的なうねりは界面における基材と薄膜の異方性軸のばらつきに起因することを明らかにした。

(2) 薄膜の変形モードを解析したところ、単純な基本経路でのエネルギーよりも低いレベルで面外変形やせん断が生じることがわかった。

(3) 基材と薄膜の異方性軸の形態を変更して同様の解析を行った結果、解析条件に依存して特定の変形モード成分が大きくなることが判明した。このことは、剥離に際して薄膜のモードと結晶学的な因子の空間分布が一致するために生じた変形挙動であることが示唆された。

(4) 界面での粗さ(凹凸)によって不均質力の面内成分が大きくなることが明らかになった。完全に接合された単純な系ではあるが、き裂がない異材界面においても、き裂先端と同程度のエネルギー落差が生じ、界面剥離の駆動力になり得ることが示された。

(5) 界面に初期欠陥を導入して不均質力を解析したところ、通常の子裂先端での特異性をほぼ再現できることがわかった。このことは、本論文で提案した解析手法に普遍性があることを示すものである。

本論文は、これまで扱われてこなかった界面での被膜の変形に着目して剥離可能性を論じたものであり、実用上重要な問題となる剥離を回避するような設計方法の構築に向けて寄与することが少なくない。

よって、本論文は、エネルギー関連機器や電子機器において重要な役割を演じている被覆材料の健全性に関する重要な知見を与えており、博士(エネルギー科学)の学位論文として価値あるものと認める。また、平成23年8月24日実施した論文内容とそれに関連した試問の結果合格と認めた。

論文内容の要旨及び審査の結果の要旨は、本学学術情報リポジトリに掲載し、公表とする。特許申請、雑誌掲載等の関係により、学位授与後即日公表することに支障がある場合は、以下に公表可能とする日付を記入すること。

要旨公開可能日： 年 月 日以降