

|          |                                |              |
|----------|--------------------------------|--------------|
|          | に っ た   じ ゅ ん                  |              |
| 氏 名 (本籍) | 新 田 淳                          | (沖 縄 県)      |
| 学位の種類    | 博 士                            | (情報科学)       |
| 学位記番号    | 情 博 第 274 号                    |              |
| 学位授与年月日  | 平成16年3月25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   | 東北大学大学院情報科学研究科 (博士課程) 情報基礎科学専攻 |              |
| 学位論文題目   | FCC 結晶の局所せん断帯形成に関する研究          |              |
| 論文審査委員   | (主 査)                          |              |
|          | 東北大学教授 伊藤 耿一                   | 東北大学教授 猪岡 光  |
|          | 東北大学教授 渡邊 忠雄                   | 東北大学教授 横堀 壽光 |
|          | (工学研究科)                        | (工学研究科)      |

## 論 文 内 容 要 旨

### 第1章 序論

本章では本研究で対象とする結晶学的せん断帯について、他のせん断帯現象との比較からその特徴について言及する。また結晶学的せん断帯の発生予測に関しての工学的意義を述べる。

結晶学的せん断帯 (crystallographic shear band) は結晶粒径のスケールで発生が知られているせん断ひずみが集中する帯状領域であり、またその発生方位は結晶学的に規定されるすべり線とは異なる。結晶学的せん断帯は金属材料の延性破壊の予兆現象として、あるいは大塑性変形下での塑性変形機構の一つと捉えられるので、その発生予測は金属塑性加工の技術に貢献する部分が多い。結晶学的せん断帯は結晶粒サイズの非常に狭い領域に発生するため、粒の結晶方位やすべり系の加工硬化率等の結晶学的因子がせん断帯の発生に強く影響すると考えられる。そのため、これらの結晶学的因子を巨視的な連続体塑性力学の枠組みに取り入れる必要がある。そのための理論的な道具として結晶塑性論を採用することとした。この結晶塑性論は巨視的な固体力学の概念と微視的な結晶学的な概念の両方を取り扱うので、メゾ・スケールの塑性力学理論であると言える。

『せん断帯 (shear band)』という学術用語は様々な研究分野で幾つかの異なる現象を指すのに使用されているのが現状である。例えば、高速変形時に発生する断熱せん断帯、疲労破壊の事前に発生する固執すべり帯、板材成形時の局所くびれ、圧延加工の際に見られるせん断帯、土質力学における斜面の崩壊現象等々である。これら様々な種類のせん断帯の包括する一般的・共通的な定義とは、「大変形下の固体中に発生する帯状のひずみ集中域」ということになろう。本研究で調査対象とする結晶学的せん断帯もこの定義の範疇に入るが、以下の特徴的性質を有する。(1) 発生する領域の大きさは結晶粒レベルである。(2) 単結晶体・多結晶体の両方での発生が確認されている。(3) 室温または低速変形でも発生し、熱力学的には等温過程と考えられる。(4) 多結晶体に発生する場合には結晶粒界を越えて隣接粒にまで到達する場合と粒界で遮られる場合とがある。本研究ではこのような特徴を備えたせん断帯を結晶学的せん断帯と名付け、他のせん断帯と区別して扱う。

### 第2章 従来のせん断帯解析に関する研究手法の検討

本章では結晶学的せん断帯の発生予測に関する従来の研究を概観し、それらの分析と検討を踏まえてせん断帯発生予測の最適な方法について議論する。

従来の研究手法は2種類に大別される。一つはせん断帯発生の臨界条件についての解析的研究、もう一つは結晶材料の局所変形場の数値シミュレーション研究である。前者の解析的研究はせん断帯が発生し得る限界を理論的に厳密に同定できる利点があるが、従来のほとんど全ての研究では対象2重すべり単結晶等の単純な結晶モデルを対象としているために一般的かつ現実的な結晶構造に拡張できない。後者のシミュレーション研究ではせん断帯領域の内部及び周辺部の非一様変形場を取り扱うことが可能であり、かつ一般的な材料モデルと境界条件を容易に導入できる。しかしながらその結果は生じた局所変形場を提示するがせん断帯発生時点の同定は困難である。

このように2種の従来研究手法はそれぞれに利点・欠点を有するため、これらを組み合わせた混合型の手法がせん断帯解析には適切であると考えられる。この混合型の研究事例としては菅野モデルが挙げられる。菅野モデルでは12すべり系を有する3次元FCC単結晶モデルに基づいて定式化が進められる。せん断帯の発生時点はHillの一般分岐理論に基づいたせん断帯分岐解析により求められる。ある要素で分岐条件が満たされると、仮想的な13番目のすべり系が有限要素解析に導入され、せん断帯の局所変形を計算するための分岐後解析が実行される。この菅野モデルには現実的な潜在硬化が導入できない欠点が存在する。潜在硬化モデルは異なるすべり系間の相互作用のモデル化であり、金属学的な実験結果や転位論はその妥当性を支持しているため、その導入は不可欠である。従って潜在硬化導入可能なせん断帯発生予測理論が要求される。

### 第3章 Al-Cu合金単結晶におけるせん断帯の実験観察

本章ではAl-Cu合金単結晶における結晶塑性学的せん断帯の発生状況を実験観察し、その結果が報告される。

結晶学的せん断帯が単結晶内部における変形状態に及ぼす影響を明らかにするため、Al-mass3% Cu合金単結晶のチャンネル・ダイ圧縮試験を行った。単結晶試験片はブリッジマン法で作成され、結晶方位はエッチピット法で測定された。初期試験片形状は6mm立方に切り出された。圧縮試験の前に試験片は2分割され、分割面には後の顕微鏡観察のために鏡面処理が施された。またこの分割面には予め水平方向と鉛直方向に直線上にけがき線を描いておき、試験後の変形の概況を把握できるようにした。

結果、試験片全体としては平面ひずみ圧縮を受ける試験を行ったことになるが、実際には2つの異なる方向の帯状領域内に多数の結晶学籍せん断帯が集中して発生することが確認できた。これら2つの帯状領域の方向は試験片と拘束方向に対して対称であるが、その内部に見られる個々のせん断帯の方位は単結晶の強い塑性異方性のために非対称になっている。帯状領域以外では変形が小さく、せん断帯領域における局所変形が試験片全体の平面ひずみ圧縮の進行に大きく寄与していることが判明した。また、けがき線の変形から判断される変形状況はせん断帯界面上での速度の差の存在を示している。これはAsaroや菅野のせん断帯発生条件の定式において基本的仮定として用いられている条件であり、その妥当性が実験的に確認されたことになる。

### 第4章 摂動法によるせん断帯発生予測理論

本章の前半では結晶塑性論の基本概念が解説され、また菅野モデルで採用された速度独立型単結晶弾塑性構成式が検討される。この構成式の有する最も重大な問題点はその低い正定値性に起因して潜在硬化モデルの導入が困難な点である。具体的に述べると、この構成式の計算中には硬化マトリクス $h_{\alpha\beta}$ を含む行列の逆行列計算が含まれる。 $h_{\alpha\beta}$ に現実的な強さの潜在硬化の値を代入すると、その逆行列計算が不可能になる場合が発生する。この構成式はそのような数学的構造を有するため、潜在硬化の導入には不適であることが判明した。

本章後半部では前半で提示した速度独立型単結晶構成式の問題点を克服するため、摂動法に基づくせん断帯発生予測理論の定式を行った。この摂動法に拠ると現実的な潜在硬化の導入が可能になる。ここでの定式では一般的な3次元変形を対象とし、また材料モデルにも3次元方位を持った12すべり系を有するFCC結晶モデルを採用した。剛塑性近似が導入され、またCauchy応力の釣合式が基礎式として評価された。ここで応力速度の釣合式の採用を回避したことにより潜在硬化導入が可能な数学的構造を獲得できた。この釣合式に線形安定解析を施すことにより、最終的にせん断帯発生の臨界条件を導出した。得られた臨界条件では硬化マトリクス $h_{\alpha\beta}$ を含ん

だ行列の逆行列計算を行わないので、潜在硬化の導入が容易になった。また定式過程において、摂動分配比  $B^{(\alpha)}$  の概念が提案され、導入された。 $B^{(\alpha)}$  は外部から導入された速度摂動が12のすべり系のすべり速度の摂動量として分配される比率を意味する。また摂動分配比  $B^{(\alpha)}$  が満たすべき拘束条件とその物理的意味についても詳細な検討が加えられた。

## 第5章 単一要素におけるせん断帯発生予測解析

本章では前章の摂動法により導出されたせん断帯発生条件を多結晶有限要素モデルに組み込むことにより、せん断帯発生予測システムを構築した。またその数値計算例として単結晶を想定した単一要素の解析を行った。

結晶材料の変形解析モデルとして高橋の提案による多結晶有限要素モデル (Finite Element Polycrystal Model; FEPM) が利用された。この FEPM では結晶粒界での変位の連続性が保証される。また、活動すべり系は逐次累積法により変形解析の結果として定まるので、活動すべり系の組合せを変形解析の事前を選択する必要がない。摂動法の定式により得られたせん断帯発生予測ルーチンは FEPM のサブルーチンとして実装された。摂動分配比  $B^{(\alpha)}$  の絶対値は線形計画法の一種であるシンプレックス法で求められた。この線形計画問題では最大塑性仕事の原理が目的関数として、またひずみ速度の適合条件が5つの拘束条件として用いられた。FEPMにより単結晶の変形状態と結晶方位が同定された後、それらの解析結果はせん断帯発生予測ルーチンに入力される。発生予測ルーチンはせん断帯発生の臨界条件の最小値を計算し、これが正值から零に到達した時点をもってせん断帯が発生したものと認める。

この予測システムを用いて単結晶を想定した単一要素のせん断帯発生予測解析を実行した。第1の例として、数値材料試験のための境界条件を利用したの単軸引張試験を解析し、せん断帯発生に及ぼす潜在硬化比  $q$  の影響を調査した。結果、強い潜在硬化にはせん断帯発生を遅延させる効果があることを確認した。第2の計算例として、変形経路変更試験を解析した。始めに予ひずみ過程として単純せん断変形を加え、続いて逆方向の単純せん断変形を加える。この時点で要素形状は初期形状に一致しているが、加工硬化は進行している。せん断予ひずみを与えた後、平面ひずみ圧縮を加え、その際のせん断帯発生を数値解析した。解析結果はせん断帯発生時点が予ひずみ量に影響を受けて変化し、またその効果の強さは潜在硬化比  $q$  の値に依存することを示した。

## 第6章 結論

本章では本論文全体に関する包括的な議論を行った。本文で詳細な検討が加えられなかった以下の点についての再検討を行った。(1) 摂動法の剛塑性近似の導入の是非について、(2) せん断帯発生予測システムの多結晶体への適用拡大について、(3) せん断帯発生予測解析の計算効率について。

最後に全論文の要約が示された。

## 論文審査の結果の要旨

大塑性変形下で発生するせん断帯に関する理論を確立することは、金属材料の塑性加工限界となる延性破壊を事前予測する上で重要な課題である。せん断帯は結晶粒オーダーのサイズであり、その発生と成長には材料の結晶構造と集合組織の影響を強く受けるので、結晶塑性学的観点からの理論の確立が必要である。本論文は積層欠陥エネルギーの特に低いFCC結晶を対象として、せん断帯の発生と成長に関してアルミ合金による実験観察に基づいて、その予測理論の構築数値解析手法の提案を行ったものであり全編6章よりなる。

第1章は序論であり本研究の背景と目的を述べている。

第2章では、結晶学的せん断帯に関して種々の観点から展開されてきた従来理論を概観し、それらの特徴と問題点を分析している。特にせん断帯を変形の局所分岐として取り扱う従来理論では結晶の硬化モデルとして潜在硬化を取り扱えないという欠陥を指摘して本研究の方向性を明確にしている。

第3章では、Al-Cu合金単結晶のチャンネルダイ圧縮試験を行ない、結晶学的せん断帯の発生状況の光学顕微鏡観察により、せん断帯は結晶固有のすべり系とは異なることおよびせん断帯内部の変形は速度勾配の不連続により生ずる単純せん断変形であることを確認している。これはせん断帯発生予測に関する理論モデルを構築する上で重要な知見である。

第4章では、第3章で得られた知見に基づき摂動法によるせん断帯発生予測のための理論モデルを構築している。提案された理論は通常に分岐解析で用いられているところの構成式を応力速度テンソルについて陽に解いた形式の採用を回避することで、潜在硬化を考慮した結晶モデルの取り扱いを可能としている。これは従来理論の問題点を克服する新たな提案である。

第5章では、前章で提案した理論モデルと多結晶有限要素法を組み合わせることにより、せん断帯発生予測解析システムを構築し、潜在硬化を考慮できるこのシステムによるFCC単結晶の解析結果から負荷方向ならびに負荷履歴がせん断帯発生に及ぼす影響を明らかにしている。

第6章は結論である。

以上要するに本論文は金属結晶の延性破壊の予測のために重要な結晶学的せん断帯発生予測に関する従来理論の問題点を克服する新たな理論の構築とその有用性の検証を行ったものであり、機械工学を対象とした情報科学の発展に寄与するところが少なくない。

よって、本論文は博士(情報科学)の学位論文として合格と認める。