

## 審査の結果の要旨

氏名 高橋 昭如

金属材料内部に多数存在する転位は、金属材料の塑性変形において重要な役割を果たし、転位の挙動を精度良く理解することは金属材料の変形および強度を知る上で重要である。強化機構を施した金属の材料強度の変化を詳細に把握することや、中性子照射による材料脆化に代表される材料強度の経年変化の本質的なメカニズムを理解する上で、転位と障害物の相互作用および障害物が多数存在する金属材料中を移動する転位の挙動を十分に理解することが重要である。

そこで本論文では、分子動力学法と転位動力学法を用いた金属材料強度のマルチスケールシミュレーション手法を提案する。本手法は分子動力学法と転位動力学法の長所を生かし、分子動力学法で転位論では記述されていない転位と転位の障害物であるクラスターの相互作用を計算し、その結果のモデル化を通じて、転位動力学法で用いることが可能な形の相互作用のローカルルールを作成し、そのローカルルールを取り入れた転位動力学法によって、多数のクラスターを含む金属材料内部の転位挙動の計算を可能とする方法である。すなわちシミュレーションベースによる転位挙動のマルチスケールシミュレーションを可能とする方法である。本手法の具体的な適用例を通じて転位組織や材料強度の評価を行い、妥当な結果を本手法から導き出している。特に金属のミクロ組織形成のシミュレーション手法である分子動力学法とキネティック・モンテカルロ法と、本手法を組み合わせて用いることにより、原子レベルの情報から転位組織の情報や巨視的な材料強度の情報を導き出すことが可能となることを示している。さらに本手法は様々なミクロ組織を持つ金属に適用することが可能である。本論文は6章で構成されている。

第1章では、本研究の背景として金属材料の研究における課題の指摘とシミュレーションに対する期待を述べ、さらに本研究の目的を述べている。

第2章では、特に金属材料に関するマルチスケールシミュレーションに関してのこれまでの研究を紹介し、提案する手法の位置付けおよび優位性について議論している。

第3章では、分子動力学法と転位動力学法の基礎について述べると共に、分子動力学法と転位動力学法のマルチスケールシミュレーション手法を提案して

いる。

第4章では、提案する手法の適用例として行った原子炉圧力容器鋼の材料強度の経年変化の解析について述べている。本適用例では、点欠陥生成から材料強度変化までのマルチスケールシミュレーションを行い、点欠陥の基礎的な特性のモデル化においては、様々な新しいメカニズムの発見および提案を行っている。また新たなメカニズムを実装したキネティック・モンテカルロ法により様々な照射環境下における点欠陥・銅原子クラスター形成の様子の違いについて述べている。本手法を用いた銅濃縮クラスターと転位の相互作用のシミュレーションにおいては、本手法が原子レベルの相互作用の情報から転位組織や巨視的な材料強度の変化を導き出せることを示すと共に、従来の分子動力学法とキネティック・モンテカルロ法と組み合わせて用いることにより、さらに大きなスケールへのスケールアップが可能であることを示している。

第5章では、ニッケル基超合金に対して提案する手法を適用し、材料中の $\gamma'$ 相の影響を評価し、材料中の転位組織の様子や材料強度の情報を導き出している。すなわち本適用例は、提案する手法が様々な他の金属へも適用可能であることを示している。

第6章では結言をまとめると共に、本研究の今後の発展性について述べている。

以上を要約すれば、本研究の成果は従来から行われていた点欠陥生成からクラスター形成までのマルチスケールシミュレーションのスケールを転位密度や材料強度の評価へつなげるさらなるスケールアップを可能としている。さらに構造信頼性評価への接続までの展望も付け加えられており、点欠陥生成という原子レベルの現象から構造信頼性評価という工学的に重要な評価を、マルチスケールシミュレーションという考え方を基に実現する方法の確立に貢献するものである。

よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。