

審査の結果の要旨

論文題目 Effects of nanoscale deformation mechanism on structural reliability
(ナノスケールでの変形機構が構造信頼性に及ぼす影響に関する研究)

論文提出者 藤田 智

本論文は、高い汎用性を持った基礎理論及び解析技術の整備を指向した結晶性材料における分子動力学法 (MD) と有限要素解析 (FEM) の連成解析技術の開発と評価を行うとともに、数十年以上の長期使用を経た発電用軽水炉におけるオーステナイト系ステンレス鋼製炉内構造物の照射誘起応力腐食割れという具体的問題に対して、特に重要な劣化・変形過程を抽出し、局所化塑性変形が構造信頼性に及ぼす影響に連成解析技術を適用した研究成果をとりまとめている。

本論文は4章で構成されており、第1章では材料強度に対する理論的アプローチの重大な障害が、塑性及び脆性が転位などの各種の結晶欠陥の密度及び空間的分布に強く依存する点であることを指摘している。さらに結晶欠陥の挙動が本質的に原子論的な数値解析を要求する一方で、転位等の結晶欠陥間の相互作用が必ずしも短距離に収まらないことと、結晶欠陥が長距離の構造を有していることが解析の困難性を増すことをとりまとめ、本研究の目的を将来にわたるロードマップの中で位置づけている。

第2章は、開発した分子動力学法と弾性力学結合手法であるDual Resolution Element Method (DREM) について論じている。本手法はMD領域とFEM領域の間に、新たに導出した概念である二重解像度要素 (DRE : Dual Resolution Element) からなるメッシュを配置し、DREに対しては節点の座標がそのDRE内の原子の座標から、一定の一次変換によって必ず定められるという拘束条件を課している。この拘束条件の下で、解析力学に基づいて系の運動方程式を導出して、MD領域とFEMそしてDREが結合した系において、原子及び節点の運動を解析するアルゴリズムを設計することに成功している。また、FEMでは再現されない短波長の熱的格子振動がDREを通してMD領域とFEの間を往来する過程を模擬するため、DRE中の原子の運動のうち節点の運動に直接寄与しない成分を抽出している。これらを熱振動成分とみなして揺動散逸定理及びフォノンの分散関係から理論的に決定できる粘性力及びランダム力を与えることによって、DRE内部で熱振動を減衰及び発生させることに成功している。さらにこれらの結合手法によって結晶の挙動が適切に再現されることを、純粋なMD計算による結果と比較して検証している。

第3章は、局所化塑性変形が構造信頼性に及ぼす影響に関する研究について、発電用軽水炉炉内構造物の照射誘起応力腐食割れ (IASCC) を取り上げ、照射硬化した金属の塑性変形初期に特徴的に観察される局所化塑性変形モードである転位チャネリングの結晶粒界での挙動を、前章で開発したDREMを活用して明らかにしている。転位チャネリングが進行して粒界に多数の転位が接近もしくは衝突する場合に、粒界を挟んだ反対側の結晶粒へ塑性変形が伝達される過程を、多様な構造を同時に持つ大傾角ランダム粒界の挙動を適切に再現し、かつチャンネル内において堆積する転位の遠距離応力・ひずみ場を適切に解析することを可能としている。また転位の衝突・吸収の後に隣接結晶粒が塑性変形を開始するプロセスの場合には、粒界において吸収された複数の転位が粒界近傍に局所的な高い応力を印加し、粒界割れのしきい応力を実効的に大幅に下げ得ることを明らかにしている。さらに塑性変形の伝達に対して特に高い抵抗を示し大きな応力集中を生じうる粒界の構造を特定することにも成功している。

第4章は結論であり、本研究の成果をとりまとめるとともに、今後の発展性について論じてい

る。

以上を要するに、本論文は全く新しく汎用性を持った分子動力学法と有限要素解析の連成解析技術を高い汎用性を持った基礎理論に基づいて構築することに成功しており、オリジナリティの高い成果を得ている。さらにこの手法を軽水炉の高経年化対策として最も重要な課題である照射誘起応力腐食割れ現象の解明に適用し、割れの発生に関するメカニズムを解明している。

これらは、原子力材料工学とそのマルチスケール評価技術の進展に寄与するところが極めて大きい。

よって本論文は、博士（工学）の学位請求論文として合格であると認められる。