

令和 2 年 6 月 11 日現在

機関番号：11501

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K06042

研究課題名(和文) 結晶粒界ダイナミクスのナノスケール解析とマイクロスケール理論の構築

研究課題名(英文) Nano-scale analysis and micro-scale formulation on crystal grain dynamics

研究代表者

上原 拓也 (Uehara, Takuya)

山形大学・大学院理工学研究科・教授

研究者番号：50311741

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,700,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、結晶粒界の挙動に着目し、ナノスケールとマイクロスケールのギャップを埋めるマルチスケール解析理論を構築することを目的とした研究を行った。分子動力学解析では、4つの結晶粒から構成される多結晶モデルを作成し、引張りまたは圧縮の負荷を加えることによって多結晶体の降伏時の原子挙動を詳細に検討した。その結果、塑性変形の起点と進展がおこる様子を再現するとともに、結晶方位や粒界の形態によって、降伏現象や塑性変形進展の様子が異なることを示した。また粒子モデルとフェーズフィールド法を融合した界面モデルを提案し、粒界挙動のマルチスケール解析モデルの基礎を築いた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ナノスケールとマイクロスケールをつなぐマルチスケールモデルについては、依然として確立されたモデルは見られないが、本研究では、簡単な分子動力学モデルを作成して解析することによって、様々な降伏および塑性変形機構が観察できることを示したことから、今後は同様な解析をより多く進めることによって、マイクロスケールにつなげる知見を得ることが期待できる。また、粒子モデルとフェーズフィールドモデルを融合した計算モデルを提案した。これに実際の粒界とマクロ力学特性をリンクさせれば、マルチスケールな解析が可能となると期待できる。新材料の開発にはこのようなモデルが不可欠であり、社会的な意義も大きいといえる。

研究成果の概要(英文)：The construction of a multi-scale analysis on the dynamic behavior of grain boundaries, which are expected to fill the gap between nano- and micro-scales, are targeted. On the nano-scale, a polycrystalline model consisting of four grains were constructed, and tensile or compressive simulations were carried out. The motion of atoms at grain boundaries upon yielding were observed in detail. As a result, an initiation of plastic deformation and the expansion occurred, and it revealed that the yielding and plastic deformation behaviors depend on the orientation and geometric characteristics of the grain boundaries. Also, a combined model of particle and phase-field models was proposed, leading to the complete construction of a multi-scale grain-boundary model.

研究分野：材料力学，計算力学，計算材料科学

キーワード：分子動力学 結晶粒界 塑性変形

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

金属やセラミックスなどの工業材料は複雑な微視組織や微視構造をもち、それらが材料に特有の物理的性質を生み出している。このような材料の特性を数値解析で表現するため、様々な力学解析手法の開発が進められており、とくに最近では、微視組織形成を再現できるモデルとして、フェーズフィールド (Phase field; PF) モデルを利用した解析手法の進展がめざましい。この手法は、Landau-Ginzburg や Cahn-Hilliard モデルをベースとし、1990 年代にデンドライトの複雑な形態が再現できることから材料学分野で注目され、Steinbach らによるマルチフェーズフィールドモデルによって多相系や多結晶組織の計算が可能となったことによって、金属材料の微視組織予測手法としての利用が広まった。さらに、市販ソフトウェア (MICRESS など) の開発・改良も進められ、工学的な利用が進められている。

また、力学特性との関連については、研究代表者 (上原) が弾塑性力学と連成して微視組織内の応力解析を行う手法を提案したほか、マイクロメカニクス理論を適用して微視的弾性論を構築し、マルテンサイト変態などに適用した解析や、均質化法や結晶塑性解析などを連成してマクロ特性の解析を行う手法などが提案されている。これらによって、フェーズフィールドモデルは、マイクロスケールとマクロスケールをつなぐモデルとして有力なツールであることが認められてきた。しかしながら、この手法は基本的に連続体モデルであり、パラメータも熱力学的なマクロパラメータをベースとしており、結晶構造などのナノスケールに由来するパラメータについては、経験的に同定 (あるいは仮定) されて用いられることが多い。多結晶組織では結晶粒界特性の入力が必要となるが、粒界エネルギーという明確な指標があるものの、計算上の煩雑さとともに、複雑な異方性を計算モデルとして組み込むことが難しく、すべての粒界について同等な値が用いられることがほとんどである。したがって、フェーズフィールド解析における結晶粒形状の変化や粗大化は、原子配列の乱れである結晶粒界の構造や再配列およびその移動といったナノスケールのメカニズムに基づいたものとはいえないのが現状であった。

このように、マイクロスケールとマクロスケールのブリッジングについては、ある程度の見通しが立ちつつあるのに対し、ナノスケールとマイクロスケールの間については、未だ有効な手法が開発されておらず、革新的なモデルの構築が必要とされていた。

一方、ナノスケールの粒界挙動については、電子顕微鏡や原子間力顕微鏡による観察から粒界の構造が明らかになり、構造を制御することによって材料に優れた特性をもたせようとする、粒界工学や粒界制御といった研究分野の発展がめざましい。また、計算機シミュレーションについては、分子動力学法が古くから適用され、多くの研究がなされてきた。申請者も粒界エネルギーの算出を行い、フェーズフィールドパラメータの同定を試みたが、限定的な結晶面の粒界構造のみが対象となり、十分にはできなかった。最近では、第一原理解析も盛んに行われてはいるが、マイクロスケールの粒界挙動とは、長さや時間のいずれのスケールにおいても、依然として大きなギャップが存在し、直接的な関係は明らかになっていないのが現状であった。

2. 研究の目的

そこで本研究では、結晶粒界の挙動に着目し、ナノ-マイクロのギャップを埋める連成解析理論を構築することを目的とした。そのために、まずは分子動力学法によるナノスケール解析によって粒界のダイナミックな挙動をシミュレートし、モデル化したその挙動を、フェーズフィールド法をベースとする解析手法に組み込むことによって、マイクロスケールにおける粒界挙動の解析を行う手法を目指すこととした。ナノスケールモデリングにおいては、まず任意の形態や構造をもつ粒界モデルを作成した後、温度変化および力学的負荷による粒界の移動 (結晶粒の粗大化、再結晶) とそのときの粒界構造の変化をシミュレートし、結晶方位差と粒界エネルギーとの関係のみならず、粒界構造によって特性が異なることを示すこととした。また、マイクロスケールの粒界ダイナミクスについては、フェーズフィールドモデルの界面領域に、ナノスケール挙動を組み込んだ新奇な粒界挙動解析モデルを構築することとした。粒界構造の違いを組み込み、構造変化も表現可能なモデリングを行うことによって、結晶粒の粗大化や形状変化などの動的挙動をシミュレートできるような、粒界の動的挙動に関する理論体系を構築することを目的とした。

3. 研究の方法

本研究では、(1) 結晶粒界のナノスケールモデリング、(2) 粒界挙動のナノスケール解析と動的挙動のモデリング、および (3) 粒界のマイクロスケールダイナミクスの構築を行うこととした。以下に各方法の概略を記す。

(1) 結晶粒界のナノスケールモデリング

様々な結晶粒界のナノスケールモデルを作成した。この項目自体は新奇なものではないが、従前の分子動力学解析で通常作成される二結晶粒界だけではなく、マイクロスケール解析では重要な因子となる三重点や四重点などの粒界を作成する。また、方位差のみではなく、粒界の構造も作り込む必要があり、視覚的にも簡便な粒界モデル作成ツールを開発することを目指した。

(2) 粒界挙動のナノスケール解析と動的挙動のモデリング

項目 (1) によって作成した粒界モデルを用い、粒界挙動の分子動力学解析を行った。初期条件から、基本的には温度・圧力一定での計算を行い、粒界の緩和挙動を解析して、各粒界の安定性を調べた。同じマイクロスケール情報をもった粒界（同じ方位差）でも、ナノスケール特性の違い（異なる粒界構造）によって安定性が異なると考えられるため、これらについて、まずは網羅的に解析を行った後、蓄積されたデータの分析から特徴を見だし、系統的な解析にシフトすることによって、効率的な解析を行い、研究項目 (3) として掲げるマイクロスケールダイナミクス構築への基礎データを得ることを目指した。

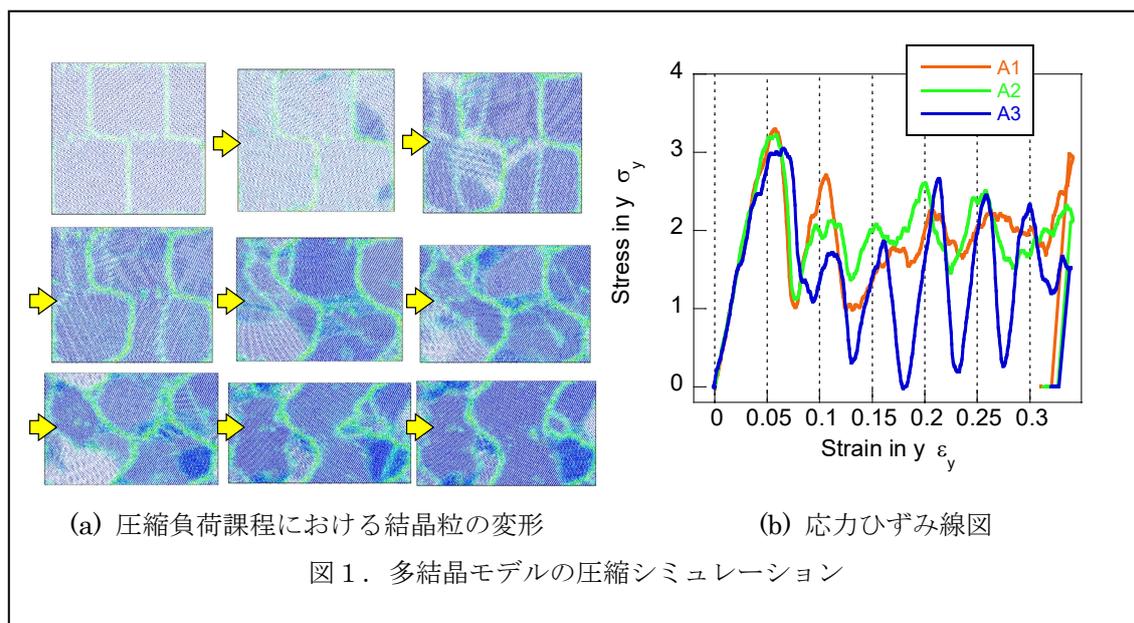
(3) 粒界のマイクロスケールダイナミクスの構築

上述したナノスケール解析の結果を基に、粒界挙動をマイクロスケールで表現するダイナミクスモデルを構築することを目指した。結晶粒界における方位差はパラメータの一つであるが、それに加えて粒界構造を表す内部変数を導入して、粒界特性の相違を表現するとともに、粒界構造の変化を表現可能とすることを想定した。また、このモデルを用いて様々な粒界に対するシミュレーションを行い、粒界移動や安定化する粒界構造等について、ナノスケール解析の結果と比較し、ナノスケール解析にフィードバックしながらモデルの精度を向上し、粒界のマイクロスケールダイナミクスに関する理論体系を構築することを目指した。

4. 研究成果

まず、結晶粒界のナノスケールモデリング、および粒界挙動のナノスケール解析として、4結晶粒から成る多結晶モデルを作成し、引張りおよび圧縮負荷をかけたときの变形挙動について、分子動力学シミュレーションを行った。粒界モデルの作成については、結晶構造はfcc、結晶粒の形状はx-y断面において正方形を4つの正方形小領域に分割したモデルを想定し、x、y方向、および厚さ方向となるz方向のすべてに周期境界条件を与えることとした。結晶方位については、(001)面内の回転角度により、任意に設定可能とし、それぞれの結晶粒に異なる方位を与えることによって粒界が作成されることとした。

粒界挙動のシミュレーションとしては、いくつかの代表的な方位を設定し、様々な組み合わせによって異なる性質をもつ粒界を作成して解析を行った。このモデルに引張りまたは圧縮の負荷をかけた結果、いずれの場合にも弾性変形の後、応力が急激に減少する降伏現象がみられた。このとき、結晶粒界を起点として転位とみられる線状の欠陥が発生し、すべりとみられる面上の欠陥に発展する様子が観察された。また、このようなメカニズムは粒界モデルによって異なり、明確な線欠陥がみられないまま、面欠陥が進展することもあり、全体の応力変化に大きく影響していることを明らかにした。図1はその計算結果 (T. Uehara, Mat. Sci. Appl. 8) であり、初期の結晶粒が圧縮によって変形していることがわかる。図 (a) で色が濃く見えるのは、奥行き方向に整列していた結晶内の原子列にずれが生じたことを表しており、原子配列の乱れや結晶方位の変化が生じたことを示している。また、図 (b) の応力ひずみ線図は、各結晶粒に異なる方位を与えたモデルでの計算結果を示しており、結晶方位によって降伏応力が異なることや、降伏後の塑性変形の進展に大きな相違が現れることを示している。



次に、前述のようにモデル化した4結晶粒モデルについて、より多様な条件での解析を行った。これによって、塑性変形の基点が結晶粒界にみられ、線状の欠陥や面状の欠陥が導入され、粒内に進展していく様子を再現することができた。また、モデル全体の応力ひずみ線図からは、この塑性変形の開始時に大きな応力緩和が生じるが、この応力緩和は急激ではあるものの瞬間的ではなく、ある程度の時間経過を経ており、この際に欠陥が進展していることを示した。また、こ

のような粒界挙動の理解を容易にするビジュアライゼーションについても工夫し、欠陥あるいは塑性変形の進展が明示することに成功した。さらに、結晶粒の組み合わせによって降伏挙動が異なることを示し、ナノスケール解析での特徴に関するデータを収集した。図2 (ICCM2018 発表資料) は、弾性変形後に応力がピークを迎え、急激に低下する課程、すなわち降伏が起こるときの原子挙動を詳細に示した図であり、原子のうち、ポテンシャルエネルギーが高いもののみをプロットした図である。この図では、結晶粒内の無欠陥部分は省略されており、欠陥が線状に広がることを示している。ただし、滑り変形の場合、完全に滑った領域は再び向け間となるため、ここで表示されているのはすべり領域が進展する先端部も表現しており、弓状の領域が観察される。また、応力ひずみ線図は異なるモデルでの線図の相違を表しており、降伏時の挙動によって、鋭いピークをもつ場合と、鈍化する場合があることを示している。

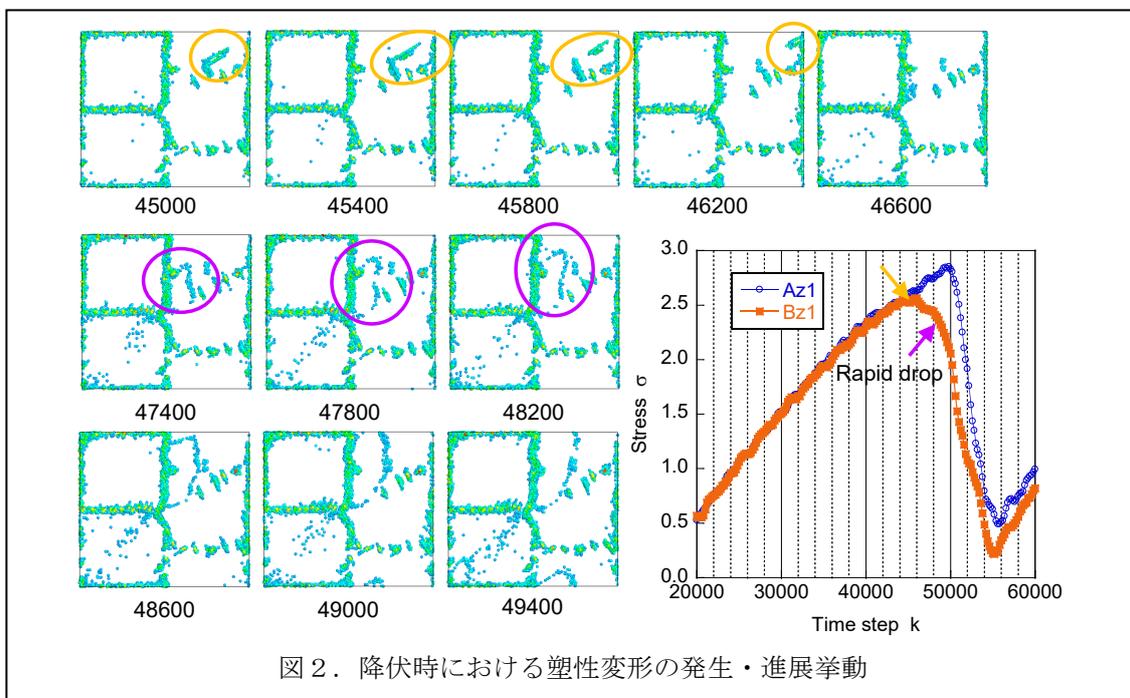


図2. 降伏時における塑性変形の発生・進展挙動

また、関連した解析として、相変態モデルにおける欠陥の影響の解析を行い、欠陥部との界面が相変態に及ぼす影響も解析した。さらに、マイクロスケールとのつながりを想定し、粒子モデルを用いた構造体の安定性解析も行い、圧縮負荷で構造が崩れ、局所的な構造が変化することを再現した。この局所的な構造を多面体として捉えて考察する一方、フェーズフィールドモデルによる多面体解析を行った。これらのモデル解析と分子動力学解析の結果を融合し、ナノマイクロをつなぐ解析モデルの構築にすすむ準備を進めた。

最終年度には、自由表面をもつナノピラー型の圧縮試験片を用い、すべり挙動の発生と進展の解析を行った。これによって、粒界をなくしたモデルの計算によって、これまでの粒界モデルの計算結果における粒界の効果を抽出することができる。自由表面をもつ場合には表面から対となる表面まで貫通する様子が観察され、複数のすべりが交差する場合や、平行にすべり面が形成されることを確認した。また、すべりの起点については、表面のほか、すべりの交差面上に生じることがあることを示した。フェーズフィールドモデルについては、多様な界面特性をもつ粒子系のモデル化を試みた。粒子法をベースにしながら、界面特性をフェーズフィールドで表現し、様々な界面特性を表現可能とした。図3 (計算力学講演会 2019 発表資料) はその計算例であり、様々な粒子配置と界面特性の組み合わせで界面形態を表現できることを示した。このモデルは、マルチスケールモデルに有効な粗視化した結晶モデルの作成に適用可能である。

以上のように、本研究期間内においては、分子動力学によるナノスケール解析の結果からフェーズフィールドモデルに適用可能なキーパラメータを抽出して粒界ダイナミクスの構築を完成するまでには至らなかったが、当初目的とした、マルチスケール手法の基礎的なモデリングと方法論を示すことはできたといえる。

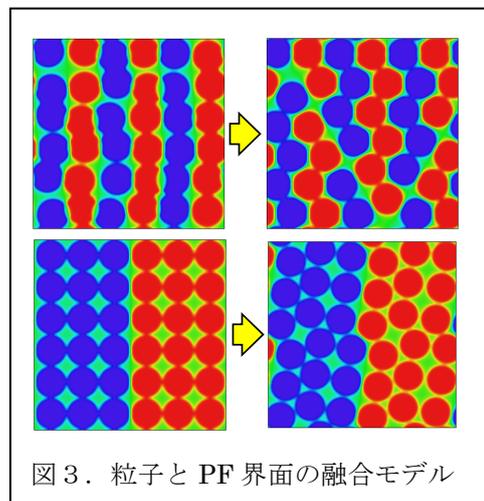


図3. 粒子と PF 界面の融合モデル

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Takuya Uehara	4. 巻 8
2. 論文標題 Molecular Dynamics Simulation of Grain Refinement in a Polycrystalline Material under Severe Compressive Deformation	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Materials Sciences and Applications	6. 最初と最後の頁 918-932
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.4236/msa.2017.812067	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Takuya Uehara	4. 巻 6
2. 論文標題 Modeling and Simulation of Particle-Packing Structures and Their Stability Using the Distinct Element Method	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Open Journal of Modelling and Simulation	6. 最初と最後の頁 59-70
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.4236/ojmsi.2018.64005	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Takuya Uehara	4. 巻 10
2. 論文標題 A Molecular Dynamics Study on the Effects of Lattice Defects on the Phase Transformation from BCC to FCC Structures	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Materials Sciences and Applications	6. 最初と最後の頁 543-557
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.4236/msa.2019.108039	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Takuya Uehara	4. 巻 8
2. 論文標題 Modeling of Adhesive Particles Using a Combination of the Two-Body Interaction and Phase-Field Methods	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Open Journal of Modelling and Simulation	6. 最初と最後の頁 35-47
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.4236/ojmsi.2020.82003	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

〔学会発表〕 計6件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 3件）

1. 発表者名 上原拓也
2. 発表標題 二体間相互作用とフェーズフィールドによる 粒子凝着過程のシミュレーション
3. 学会等名 日本機械学会第31回計算力学講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takuya Uehara
2. 発表標題 Molecular Dynamics Simulation of the Influence of Lattice Defects on Bcc-Fcc Phase Transformation
3. 学会等名 The 13th Int. Conf. on the Mechanical Behaviour of Materials (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takuya Uehara
2. 発表標題 Molecular dynamics simulation of the initiation of plastic deformation in nanocrystalline material
3. 学会等名 The 9th International Conference on Computational Methods (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 上原拓也
2. 発表標題 粒子充填構造の幾何学的特徴と安定性に関するシミュレーション
3. 学会等名 日本材料学会第3回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 上原拓也
2. 発表標題 多面体構造形成過程のフェーズフィールドシミュレーション
3. 学会等名 日本機械学会第31回計算力学講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takuya Uehara
2. 発表標題 Molecular dynamics simulation of microstructural change in a polycrystalline FCC metal under compression
3. 学会等名 XIV Int. Conf. on Computational Plasticity (国際学会)
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

http://uhlab.yz.yamagata-u.ac.jp

6. 研究組織		
氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考