

令和 2 年 6 月 22 日現在

機関番号：13601

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K06052

研究課題名(和文) 計算科学的手法とマイクロ材料試験によるマグネシウム合金の変形機構解明

研究課題名(英文) Atomistic Computational and Micro-scale Experimental Studies on Deformation Mechanisms in Magnesium Alloys

研究代表者

松中 大介 (Matsunaka, Daisuke)

信州大学・学術研究院工学系・准教授

研究者番号：60403151

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,500,000円

研究成果の概要(和文)：第一原理計算や分子動力学法といった電子論的・原子論的な計算科学的手法による解析とナノインデンテーションやマイクロピラー圧縮試験などの微小スケールの実験を実施し、計算と実験の両面から、マグネシウム合金における変形機構を詳細に理解するとともに、それぞれの変形の素過程に対する合金元素の効果を議論した。主要な結果として、マグネシウムの塑性変形において重要な底面すべりや(10-12)双晶に対してY添加が臨界分解せん断応力を増加させることを明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、計算と実験の双方がマイクロなスケールを対象として実施されたことで、お互いを連携させて、マグネシウム合金の塑性変形に関する原子レベルでの理解を進めることができた。本研究で得られた各変形機構の原子レベルの挙動や合金元素の効果に関する基礎的な情報は、さらなる高性能マグネシウム合金の開発に貢献すると期待できる。

研究成果の概要(英文)：In this study, atomistic/electronic analyses such as first-principles calculations and molecular dynamics simulations, and micro-scale experiments such as nano-indentation and micro-pillar compression tests were carried out to obtain detailed understanding of deformation mechanisms in magnesium alloys and effects of alloying elements on each elementary event of plastic deformation. As an important result in this study, it has been found that Yttrium addition increases the critical resolved shear stress for basal slip and (10-12) twinning which are major deformation mechanism in magnesium.

研究分野：計算材料科学

キーワード：マグネシウム合金 マイクロピラー圧縮試験 ナノインデンテーション 分子動力学法 第一原理計算

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

マグネシウム (Mg) は実用金属中で最も軽量で、比強度・比剛性が高いことから、有望な軽量材料の候補として注目されている。しかし、室温域における延性や破壊じん性が低く、成形性に劣ることが、Mg 材料の幅広い実用化のための課題となっている。

HCP 構造を持つ Mg 材料においては、等価なすべり系の数は少なく、主すべり系である底面すべりのみでは多結晶材料の十分な塑性変形に求められるフォン・ミーゼスの条件を満たすことができない。柱面すべりや錐面すべりなどの非底面すべりは室温域では臨界分解せん断応力 (CRSS) が非常に大きいためほとんど駆動しない。一方、Y などの希少金属元素を添加したいくつかの Mg 合金では著しく延性が向上し、そこでは非底面すべりの活動が観察されている。非底面すべり活性化のメカニズムの解明はさらなる高延性合金の設計のために重要であり、実験・計算による精力的な研究が近年行われている。その中で、I₁ 型積層欠陥エネルギーの低下や、原子半径と電気陰性度に関する Mg と合金元素の関係などが議論されているが、非底面すべり活性化のメカニズムに関して未だ十分な理解に至っていない。また、Mg 材料では駆動するすべり系が限定されることから双晶変形も重要な役割を担っており、双晶変形の形成メカニズムやその成長挙動を解明することが機械的性質の理解には不可欠である。

2. 研究の目的

近年、計算機性能の著しい向上と解析手法の発展に伴って、第一原理計算や分子動力学法 (MD) といった計算科学的手法は材料研究における主要なアプローチとして用いられている。さらに、マイクロピラー圧縮試験やナノインデンテーションといった微小スケールの実験手法は、原子レベルの計算手法と相性が良くなるため、実験結果と MD 解析を対応づけることで Mg 合金の塑性変形の理解を進めることができる。そこで本研究では、電子論的・原子論的な計算科学的手法とマイクロスケールの実験力学的手法の両サイドから Mg 合金の変形機構を解明し、それぞれの変形の素過程に対する合金元素の効果を明らかにすることで、高性能 Mg 合金創製のための知見を得ることを目的とする。

3. 研究の方法

マイクロスケールの実験面に関しては、ナノインデンテーション試験と、集束イオンビーム (FIB) により加工したマイクロピラーの圧縮試験を行った。純 Mg および Mg-Y の多結晶材料に対して EBSD 観察を行って各結晶粒の結晶方位を解析し、選んだ結晶粒に対して試験を実施した。計算面では、EAM ポテンシャルや MEAM ポテンシャルを用いて変形の MD シミュレーションを実施した。特に、ピラー圧縮における変形挙動、押し込み直下の変形挙動など、実験と対応する解析を行い、実験・計算の両面から変形機構の考察を行う。

4. 研究成果

EBSD 観察から結晶方位を同定した結晶粒に対して FIB 加工で作製したマイクロピラーをフラット圧子により圧縮する試験を実施した。ピラーの形状は四角柱とし、上面の辺の長さは 4~5 μm、アスペクト比は 2~3 とした。フラット圧子による圧縮変形は変位制御で行い、押し込み速度は 5nm/s とした。圧縮試験後のピラー側面を走査型電子顕微鏡 (SEM) により観察し、2つの側面に現れたすべり線の組み合わせからすべり面の法線を求め、駆動した変形モードを同定した。底面が荷重軸に対して 45 度傾いた方位のピラーでは、主すべり系の底面すべりに最大の分解せん断応力がかかることから、全ての試験において底面すべりが活動した。応力-ひずみ曲線から 0.2%耐力を算出し、底面すべりの CRSS を評価した結果、純 Mg に比べて Mg-Y 合金では底面すべりの CRSS が上昇していることがわかった。また、純 Mg の応力-ひずみ曲線は降伏が明瞭でなく弾塑性的挙動を示しているのに対して、Mg-Y 合金の応力-ひずみ曲線では明確な降伏とともに大きな pop-in が現れ、応力-ひずみ曲線にも固溶強化を示唆する振る舞いが見られた。第一原理計算および原子間ポテンシャルを用いた底面転位と Y 原子間の相互作用の解析から、Mg 原子と Y 原子との原子半径の違いに起因しており、転位周辺の体積ひずみの分布に対応する相互作用が現れることを確認した。また、底面が荷重軸に対して平行な場合では、(10-12) 双晶が駆動し、その CRSS も同様にして評価した。底面すべりと同じく、(10-12) 双晶の CRSS も純 Mg に比べて Mg-Y 合金では上昇することが分かった。ピラー圧縮の変形挙動の MD 解析から、双晶境界の膨張サイト・圧縮サイトに対して合金元素が安定化・不安定化することが、双晶の核生成および成長に対して影響することを明らかにした。

各変形機構の解明に加えて、粒界近傍での力学挙動を調べるために、熱処理によって平均結晶粒サイズを 1mm 以上に成長させた純 Mg の鋳造材を用いて、粒界近傍のナノインデンテーション試験を行った。底面と柱面に近い方位を持つ結晶粒を選び、粒内と粒界近傍に対してそれぞれ押し込みを行った。押し込み速度は 1mN/s、最大荷重を 1mN とし、粒内と粒界の押し込み位置に対してそれぞれ 90 回以上と 50 回以上の試験を行った。押し込み初期に見られる変位の不連続な増加現象 (pop-in) を発生させる荷重が、粒界近傍では増加し (図 1)、一方でその活性化体積は粒内と粒界でほぼ同じであることを明らかにした。この結果は、粒界近傍でも粒内と同様のイベントによって pop-in が引き起こされていることを示している。また活性化体積の値が 1b³ 以下の非常に小さい値であったことから、pop-in の原因となるイベントが表面からの転位の不均一核生成など極めて局所的なイベントであることが示唆される。柱面に近い方位に対して押し

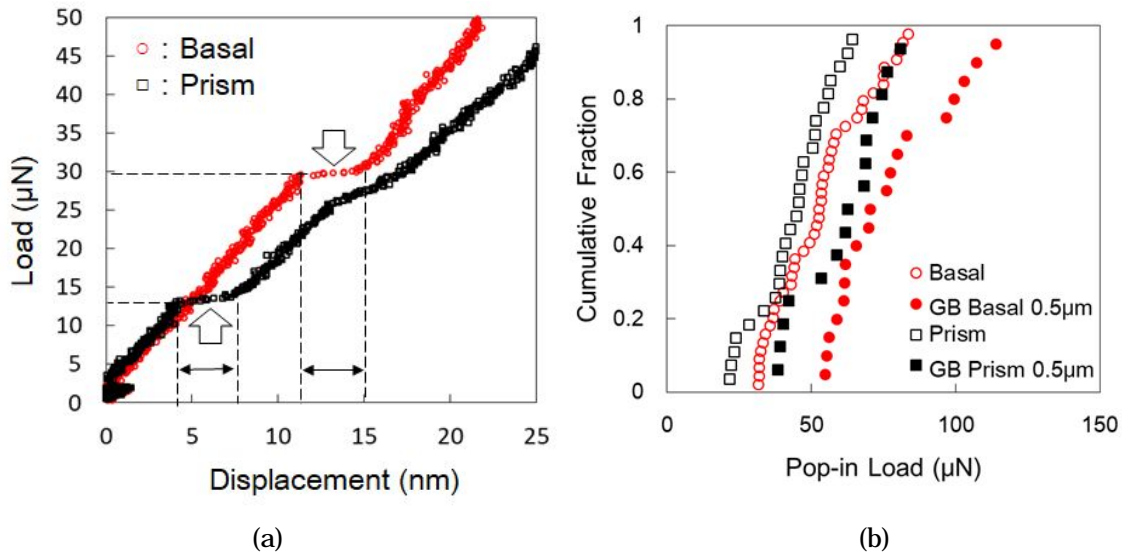


図1 純Mgのナノインデンテーションにおける pop-in 挙動. (a)底面および柱面に近い表面方位の結晶粒内での第一変位バースト (b) pop-in 荷重の累積分布. (引用文献)

みを行った場合、圧痕周辺に(10-12)双晶の形成が観察された。押し込みによって形成された双晶は圧痕から<11-20>方向に成長する様子が確認された。そして、押し込み位置が粒界に近づくにしたがって、形成される双晶は細く小さくなることがわかった。多結晶材料のマクロな変形過程において粒界は双晶の核生成サイトの一つとして考えられているが、押し込みによる局所的な変形においては圧子直下が核生成サイトとなり、その後の双晶の成長は、双晶転位と粒界との弾性的な相互作用から抑制されたと考えられる。これらのナノインデンテーション試験の結果を考察するために、押し込み直下の変形挙動の分子静力学解析を行った。1辺が約35nmの立方体の原子モデルに対して、モデル上面を押し込み面として自由表面とし、モデル下部の数原子層を固定し、他の方向には周期境界条件を適用した。そして、半径10nmの仮想球圧子を考え、Kelchnerによる斥力ポテンシャルを用いてモデルに押し込みを与えた。押し込み深さを0.01nmずつ増加させ、共益勾配法を用いてエネルギーの勾配のノルムが0.05eV/以下になるか、最大400ステップまで緩和計算を行うことで、与えられた負荷の下での平衡状態を解析した。底面と柱面のいずれの表面方位の場合でも、pop-inの前駆として底面転位の運動が生じており、底面転位と粒界との相互作用が後続のイベントに影響することを示した。また、柱面を表面方位とする場合では、押し込みが進行して押し込み直下に不均一構造が形成された後、双晶が核生成する挙動を観察することができた。

実験と対応する解析に加えて、Mg-Y合金において非底面すべり活性化の要因の一つとして議論されている I_1 型積層欠陥の近傍での欠陥のダイナミクスをMDシミュレーションにより解析した。 I_1 型積層欠陥の端部のバーガスベクトルは底面に垂直なc方向の成分を含み、負荷される応力状態に応じて、 I_1 型積層欠陥の端部から<c+a>転位や(11-21)双晶が形成する挙動が得られた。また1次錐面と2次錐面の一般化積層欠陥エネルギー曲面上に現れる極小点の位置に関して、 I_1 型積層欠陥の端部から生成する<c+a>転位の反応が異なることを明らかにした。

他には、Mgの<a>すべり系における非すべり応力の影響のMD解析、変形双晶の均一核生成のエネルギー論的評価を実施した。また、積層欠陥や転位など力学特性に重要な欠陥構造に対する合金の効果を第一原理計算により計算するとともに、そのような異種原子間の相互作用を表現するための原子間ポテンシャルに関してEAMポテンシャルの形式や人工ニューラルネットワークなどを検討した。

<引用文献>

須藤海志，修士論文（信州大学大学院総合理工学研究科），2019年3月。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 3件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 須藤海志, 松中 大介, 染川 英俊	4. 巻 -
2. 論文標題 ナノインデンテーションによるマグネシウムの粒界近傍での局所塑性特性	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 日本金属学会誌	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 So Yoshikawa, Daisuke Matsunaka	4. 巻 61
2. 論文標題 Molecular Dynamics Study of Influences of Non-Glide Stress on <a> Slips in Magnesium	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Materials Transactions	6. 最初と最後の頁 127-135
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.2320/matertrans.MT-M2019263	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 So Yoshikawa, Daisuke Matsunaka	4. 巻 179
2. 論文標題 Defect nucleation from a pre-existing intrinsic I1 stacking fault in magnesium by molecular dynamics simulations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 109644
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109644	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 松中 大介, 渋谷 陽二	4. 巻 56
2. 論文標題 マグネシウムの破壊挙動に関する分子動力学解析	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 まてりあ	6. 最初と最後の頁 493-497
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/materia.56.493	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計17件（うち招待講演 1件 / うち国際学会 3件）

1. 発表者名 松中 大介, 河原 克尚
2. 発表標題 マグネシウムの対称傾角粒界に関する原子論的解析
3. 学会等名 第4回マルチ スケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小細 浩輔, 藤岡 芳弥, 吉川 創, 松中 大介
2. 発表標題 ニューラルネットワーク原子間ポテンシャルを用いた分子動力学解析の検討
3. 学会等名 第24回計算工学講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松中 大介, 松井 将也, 渋谷 陽二, 染川 英俊
2. 発表標題 Mg合金のマイクロピラー圧縮変形におけるY 元素の効果
3. 学会等名 日本機械学会M&M2019材料力学カンファレンス
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松中 大介
2. 発表標題 電子・原子論的アプローチによる固体材料の力学挙動の解析
3. 学会等名 第160回機能創成セミナー（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 So Yoshikawa, Daisuke Matsunaka
2. 発表標題 Molecular Dynamics Simulation on Defect Nucleation from Pre-existing I1 Stacking Fault in Magnesium
3. 学会等名 The 7th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Daisuke Matsunaka, Irfan Dwi Aditya, Yoji Shibutani
2. 発表標題 First-principles Calculations of Interfacial Interaction between Carbon Nanotube and Ceramic Surfaces
3. 学会等名 The 4th International Symposium on Atomistic and Multiscale Modeling of Mechanics and Multiphysics
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 須藤海志, 吉川創, 松中 大介
2. 発表標題 マグネシウムのナノインデンテーションにおける変形挙動の原子論的解析
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 松中 大介, 木村文彦
2. 発表標題 EAMポテンシャルにおける異種原子間相互作用の検討
3. 学会等名 第23回計算工学講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 河原克尚, 松中 大介
2. 発表標題 マグネシウムにおける対称傾角粒界の原子論的評価
3. 学会等名 日本金属学会北陸信越支部日本鉄鋼協会北陸信越支部平成30年度連合講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 須藤海志, 松中 大介, 染川 英俊
2. 発表標題 ナノインデンテーションにおけるマグネシウムの変形挙動に関するMD解析
3. 学会等名 日本金属学会北陸信越支部日本鉄鋼協会北陸信越支部平成30年度連合講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Daisuke Matsunaka, Yoji Shibutani
2. 発表標題 Structural stability of long-period stacking ordered magnesium alloys
3. 学会等名 The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Daisuke Matsunaka, Ryosuke Amano
2. 発表標題 First-principles calculations of deformation twins in hexagonal titanium alloys
3. 学会等名 The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 日高真之介, 松中大介
2. 発表標題 第一原理計算を用いたMg合金の双晶変形に対する 表面解析の検討
3. 学会等名 第2回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 吉川創, 松中大介
2. 発表標題 マグネシウムの基本変形に関する応力状態を考慮した分子動力学解析
3. 学会等名 第22回計算工学講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 木村文彦, 松中大介
2. 発表標題 合金系のためのEAMポテンシャルパラメータの修正およびクロス項の検討
3. 学会等名 日本機械学会第30回計算力学講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 松中大介, 渋谷陽二
2. 発表標題 分子動力学法による多軸応力下でのマグネシウム合金の変形挙動解析
3. 学会等名 日本機械学会M&M2017材料力学カンファレンス
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 S. Hidaka, D. Matsunaka, and H. Somekawa
2. 発表標題 Incipient plastic deformation in indentation behavior of magnesium
3. 学会等名 NIMS WEEK 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

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
--	---------------------------	-----------------------	----