

平成 21 年 5 月 18 日現在

研究種目：特定領域研究  
 研究期間：2006 ～ 2008  
 課題番号：18062004  
 研究課題名（和文） 高密度格子欠陥を有する物質・材料のマイクロダイナミクス解析  
 研究課題名（英文） Microdynamic Analysis on Advanced Materials Containing Ultra-High Density Lattice Defects  
 研究代表者  
 中谷 彰宏（NAKATANI AKIHIRO）  
 大阪大学・大学院工学研究科・教授  
 研究者番号：50252606

研究成果の概要：金属が大きく変形させられると内部に結晶格子の不整合が導入され、結晶の粒が細分化されます。この格子不整合や結晶粒は金属の持つ性質を変化させ、高い機能を持つ環境に優しい材料を創り出す可能性を秘めています。この課題では原子レベルから格子不整合の集合体レベル、さらには、結晶粒の集合体について最先端の計算力学理論に基づいたコンピューターシミュレーションを駆使し、内部構造変化のメカニズムと特性の関係を解明しました。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	6,900,000	0	6,900,000
2007年度	13,300,000	0	13,300,000
2008年度	9,200,000	0	9,200,000
年度			
年度			
総計	29,400,000	0	29,400,000

研究分野：変形体力学

科研費の分科・細目：機械工学・機械材料・材料力学

キーワード：巨大ひずみ、計算力学、分子動力学法、格子欠陥、多結晶体、離散転位動力学法、粒子法、結晶粒界

## 1. 研究開始当初の背景

巨大ひずみの導入による結晶粒微細化機構、および巨大ひずみ材料が示す特異な力学特性の発現機構の理解は緒についたばかりである。理論・実験を補完する計算力学モデルの提案とコンピューターを駆使したシミュレーションの実施が焦眉の急で望まれている。

## 2. 研究の目的

原子レベルの分子動力学シミュレーションから格子欠陥レベルのメゾシミュレーションさらにはマクロ力学に基づく粒子法(SPH)シミュレーションを実施して結晶粒微細化機構と巨大ひずみ材料の力学特性発現

機構を解明する。同時に、今後発展させるべきマルチスケール解析の学理を探究する。

## 3. 研究の方法

巨大ひずみ材料中の格子欠陥のマルチスケールダイナミクスと離散系の力学を機軸にマルチスケール計算力学手法の確立を目指した研究を実施する。

## 4. 研究成果

(1) 原子スケール計算機実験による巨大ひずみ材料が示す特異な 1 次、2 次メカニクスの発現メカニズムの検討  
 ①巨大ひずみを材料に与えることで結晶粒径が数 100nm オーダーまで微細化する一つの

要因として、ひずみこう配近傍に現れる幾何学的に必要な転位 (GN 転位) に注目する。図 1 は強制的に試験片に移動するひずみこう配を導入した解析結果である。ひずみこう配近傍に同符号のバーガースベクトルを有する GN 転位が多数発生していることが確認でき、これらの転位構造の回復を含めた運動性が微細化メカニズムに強く影響を与えていることがわかる。

②巨大ひずみを導入することで得られる超微細粒材料は従来知られている結晶粒径と強度の関係と全く異なることが報告されている。また結晶粒が小さくなるほど粒界構造の割合が急増するため、微細粒になるほど粒界特性の違いが全体の力学特性に影響を及ぼすと考えられる。図 2 は粒界方位差分布の異なる 2 つの結晶配置を有する多結晶モデルを原始モデルにより表現し、粒径と強度の関係を調べた結果である。これより結晶粒径が 40nm 程度までは、微細化に伴う強度の上昇が確認できるが、それよりも小さくなると強度が低下することが確認できる。これは、粒界の主な役割が、粒内変形に対する抵抗としての役割から、粒界移動やすべりにより変形を担う役割に遷移するためであると考えられる。また、結晶粒微細化に伴う強化領域と軟化領域において多結晶モデルの変形抵抗が逆転していることから、粒界の機能は粒界構造に強く影響を受けていることが確認できる。実際の実験では、計算機実験のように粒界方位差関係を維持したまま結晶粒径の異なる多結晶の試験片を作製することは困難であり、様々な因子の影響を受けてしまうことから、計算機実験が粒界を考慮した材料設計に対して重要な役割を担うことが確認できる。

③結晶粒径が小さくなると粒界の体積比が急増し、転位と粒界の相互作用が超微細粒材の力学特性に対して重要な役割を担うと理解できる。このような問題を効率良くシミュレーションするために原子・連続体結合モデルを開発し、転位と粒界の相互作用シミュレーションを行ない、粒界に侵入した転位の緩和メカニズムの粒界構造依存性を解明する。図 3 はき裂より発生した転位が粒界に蓄積し、その後隣接する結晶粒に転位を放出した状態と、そのときの粒界部の構造変化の詳細を示している。これより、粒界を構成している粒界転位と侵入してきた転位の相互作用により、粒界の転位緩和能力が影響を受けていることが確認でき、超微細粒材の示す力学特性を正確に把握するためには個々の粒界構造の違いに起因した転位と粒界の相互作用メカニズムを理解する必要があると理解できる。ここで新たに提案し、用いているマルチスケール原子シミュレーションはこのような問題を解明するために非常に有効な

道具であることが理解できる。

④超微細粒材の示す特異な力学特性として延性ぜい性遷移温度が低温側に移ることが報告されている。この現象を理解するために、粒界近傍にき裂を有する双結晶モデルを作製し、引張変形シミュレーションを実行した。図 4 は応力-ひずみ曲線であり、モデル A とモデル B は異なる粒界構造を有しており、モデル A' はモデル A からき裂を取り除いたモデルである。これより、モデル B ではき裂から転位を放出し続けていることが確認できるが、モデル A ではき裂から粒界に転位の放出する場所が変化しており、急激に転位密度が上昇していることが理解できる。き裂のないモデル A' から、粒界から転位を放出するために必要な応力は非常に高いことが理解でき、モデル A では内部応力場の発展により局所的に粒界近傍の応力場が高くなり、粒界から転位を放出していることが確認できる。すなわち、粒界が転位源として機能していることが理解でき、結果は粒界領域の相対的割合が大きい超微細粒材では可動転位密度を急激に増加させる新たな機構の可能性を示唆している。

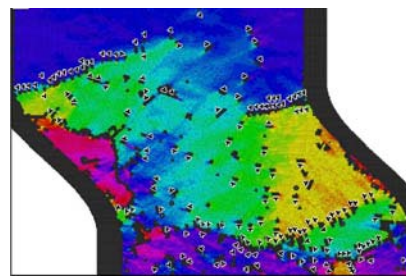


図 1 ひずみこう配近傍の GN 転位構造

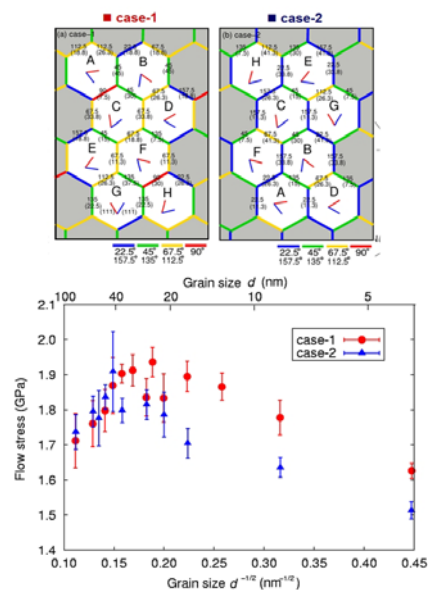


図 2 強度と粒径の関係とその粒界構造の影響

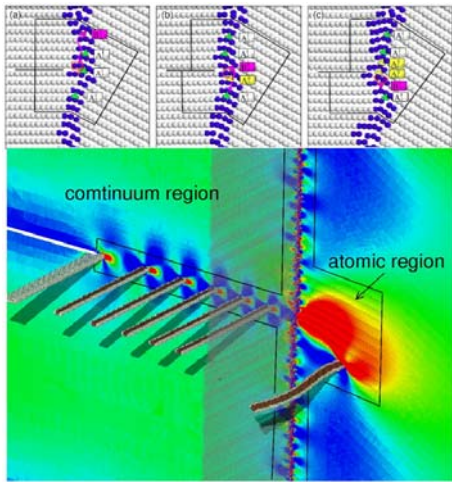


図3 転位と粒界の相互作用

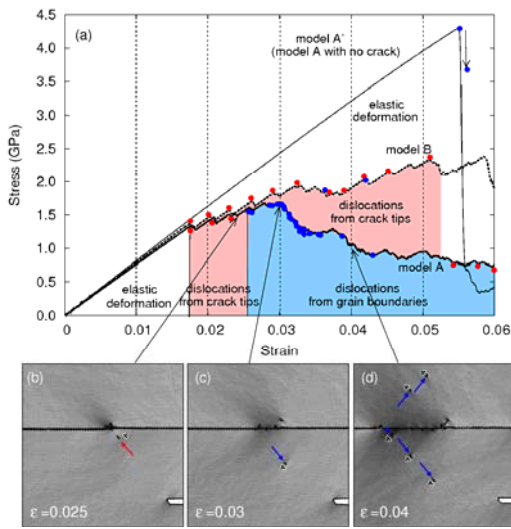


図4 き裂から粒界への転位源の遷移現象

(2) 巨大ひずみ場における対称粒界の挙動に関する分子動学的研究

HPT (High-pressure torsion) による巨大ひずみ加工中には、せん断と圧縮が共に強く負荷された状態になり、比較的低エネルギーで安定な粒界でも複雑な結晶構造変化を起す。系の応力場を規定する Parrinello-Rahman 法による分子動力学法を修正し、系のひずみ場を直接規定する手法を定式化し用いる。原子間ポテンシャルには Mishin らのアルミニウムに対する EAM 法を用いる。図5のように周期的な  $\Sigma=3$  (112) 粒界にせん断のみを負荷した場合 (図上) と粒界面に垂直方向に圧縮ひずみを入れつつ (圧縮応力値で最大約 7GPa) 単純せん断を加える場合 (図下) では、粒界構造および転位射出の挙動が大きく異なる。

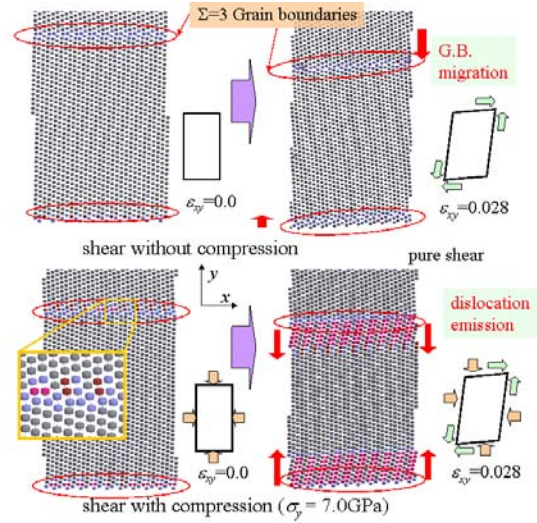


図5 ひずみを制御する分子動力学法による対応格子粒界の解析 (A1) : 圧縮の有無で粒界挙動が大きく変化

(3) 単結晶のねじり変形によって導入される欠陥構造の解析

HPT による巨大ひずみ付与を模擬したナノ細線のねじり変形シミュレーションを実施する。ここでは、[111]軸まわりの円柱状試験片のねじり変形について考える。図6(a)、(b)はそれぞれ、アルミニウム、銅のある断面での欠陥構造のスナップショットを示している。いずれも表面から欠陥構造が導入されるが、積層欠陥エネルギーの違いにより赤色で示した拡張転位 (積層欠陥面) の広がり方に差がみられることがわかる。また、ひずみ速度を小さくすると回復が生じ、その結果変形の局所化が起こる。図7は銅が(111)面の一層での局所化されたせん断変形により相対回転している様子と温度分布の時間発展を示している。せん断層の非弾性による発熱の結果、温度が局所的に上昇し、全体に熱伝導が生じている様子がわかる。

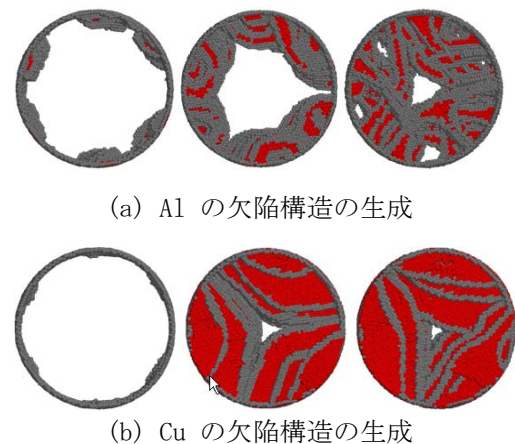


図6 ねじり変形による欠陥構造の導入



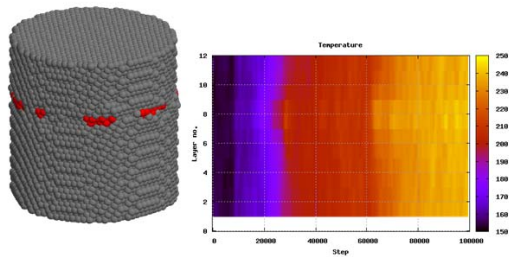


図7 Cu(111)面での局所変形と温度分布の時間発展

(4) 階層的格子欠陥モデルによる粒界と転位の相互作用場の解析

微細粒多結晶体の巨視的力学特性は、粒内変形機構と粒界の相互作用に強く依存すると考えられる。また強ひずみ加工によって得られる粒界においても粒界構造単位の組み合わせによってその構造が表現されることが報告されている。ここでは、格子欠陥の階層性に着目した粗視化モデルを構築する目的で転位・回位モデルを用いた粒界と転位の相互作用場を解析する。

図8は[110]軸を傾角軸とする133°傾角粒界近傍のせん断応力分布を示している。原子モデルと回位モデルによって得られる分布が良く一致している。図9は粒界エネルギーの傾角依存性を示している。回位の相互作用を考慮したモデルを用いて局所構造の異なる粒界エネルギーを計算した結果は原子モデルの結果と定性的に良い一致を示している。図10、11は孤立転位と転位列からなる粒界との相互作用によるせん断応力場とひずみエネルギーを拡張有限要素法により解析した結果を示している。ひずみエネルギーを孤立転位の位置の関数とみたときの傾きはPeach-Koehler力に対応しており、孤立転位の符号や境界条件の差異(表面力フリーと固定(fix))により、粒界と転位の相互作用力に違いが現れる。ここで扱った手法や知見を離散転位塑性モデルに応用することにより粒界構造の変化や多結晶の粒回転モデルなどの解析の可能性が見出される。

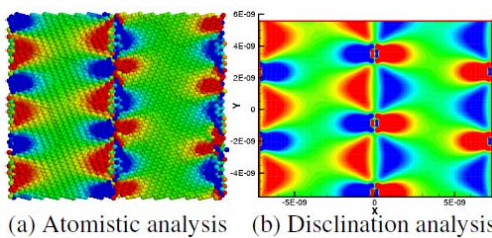


図8 133°傾角粒界の近傍のせん断応力分布

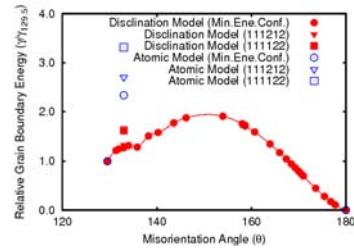


図9 粒界エネルギーの傾角依存性

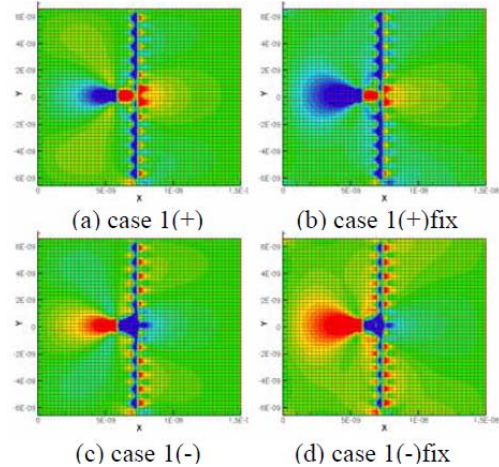


図10 粒界と転位の相互作用によるせん断応力分布

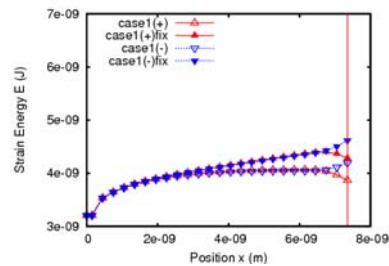


図11 粒界と転位の相互作用によるせん断ひずみエネルギー

(5) 結晶粒微細化過程を組み込んだ巨大ひずみ加工のSPHシミュレーション

SPH(Smoothed particle hydrodynamics)法はマクロ粒子法の一つであり、有限要素法のようなメッシュを必要とせず、物質の分裂(破壊)や接触の問題に有効である。SMAC(Simplified marker and cell)法により塑性変形における体積一定則を実現できる。結晶粒微細化の至極単純なモデルとして、材料に為された塑性仕事が一一定割合で粒界残余エネルギーとなり、粒界面積の増加に寄与して結果として微細化に至るものを考案した。図12のようなECAP(Equichannel angular pressing)加工の計算モデルでは、塑性変形ゾーン(Plastic deformation zone; PDZ)の大きさを決める外角の角度 $\phi$ を変化させる。図のように角度 $\phi$ が小さいときには微細化は横チャンネルの下壁部分近傍で最大

となる。一方、 $\phi$ が大きくなると流れはスムーズになり壁面での微細化の程度が相対的に弱まり、チャンネル中央部での微細化が最も進むという結果となる。微細化モデルを導入すると、材料の流れは実験結果と近くなる。

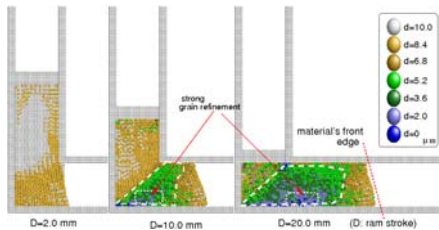


図 1 2 結晶粒微細化モデルを導入した SPH 法による ECAP 加工の解析: 外角の角度  $\phi=0^\circ$  の場合。色は平均粒径を表す。

#### (6) 強ひずみ加工多結晶金属の降伏応力増加に対する SPH 解析

多結晶金属の強ひずみ加工解析に、メッシュレス法の一つである SPH 法を適用した。SPH 法は連続体力学に基づく解析手法であるため、通常の引張り試験片の解析、強ひずみ加工の全体解析のほか、結晶レベルの相互作用解析なども行うことができる。また、ひずみこう配項等の高次項を比較的容易に取り込める利点もある。ここでは、結晶粒の粒径や形状などが強度増進に及ぼす影響を考慮するため、結晶すべりこう配理論をベースに、GN 転位の自己エネルギーを考えるモデルを用いて SPH 解析を実施する。従来実施されている結晶粒の平均的な降伏応力が粒径が減少するとともに上昇する関係の導出だけでなく、一つの結晶粒内を SPH 粒子で離散化し、粒内の各すべり面における面内すべりこう配を直接計算する。こう配の計算は SPH の離散化手法に従う。また、先行研究では面内すべりこう配と共役な高次応力がステップ関数で関連づけられているが、その場合、降伏せん断応力の上昇分となる高次応力の空間こう配が無限大になり、計算が不可能であることから、高次応力集中の緩和長さをバーガースベクトル長さの定数  $\alpha$  倍として与える。これよりこう配の最大値は有限の値で与えられることになる。

図 13 は互いに  $90^\circ$  で交わる 2 つのすべり系を持つ単一結晶の単純せん断シミュレーション結果を示している。一つのすべり系はせん断方向と一致しているため、得られるマクロなせん断応力-せん断ひずみ関係は、すべり面の回転による影響を除けば、すべり面で与えたものとほぼ同一となる。単一結晶ではあるが、両端固定条件のために端部付近にすべりこう配が卓越し、その結果粒径(この場合試験体幅)依存性が現れる。こう配を考慮しないモデルを用いた場合には、このよう

な粒径依存性は現れない。図 1 4 は、異なるすべり系を持つ多結晶体の単純せん断シミュレーション結果である。多くの粒子のすべり系は、せん断方向と異なっていることにより、巨視的な応答では加工硬化が現れている。ここでもこう配効果により、降伏応力が増加しており、その大きさは緩和長さに依存していることがわかる。本手法は、様々な粒形状やバイモーダル結晶などの強化機構の検討などに利用可能であると考えられる。

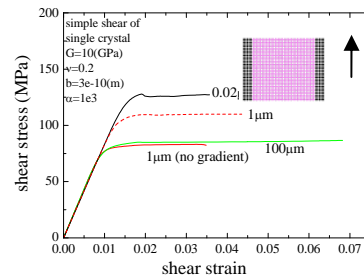


図 1 3 単一結晶の単純せん断試験シミュレーション

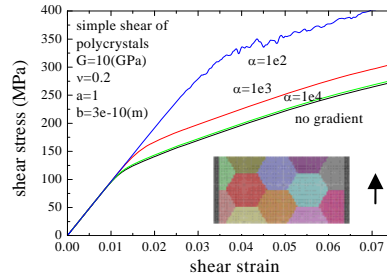


図 1 4 多結晶の単純せん断シミュレーション

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 49 件)

- ① T. Shimokawa, T. Hiramoto, T. Kinari, and S. Shintaku, Effect of Extrinsic Grain Boundary Dislocations on Mechanical Properties of Ultrafine-Grained Metals by Molecular Dynamics Simulations, Materials Transactions, 査読有, 50(1), (2009), pp.2-10.
- ② M. Tanaka, K. Higashida, T. Shimokawa, and T. Morikawa, Brittle-ductile transition in low carbon steel deformed by the accumulative roll bonding process, Materials Transactions, 査読有, 50(1), (2009), pp.56-63.
- ③ Ken-ichi Saitoh and Yuuki Ohnishi, SPH Analysis of ECAP Process by Using Grain Refinement Model, Materials Transactions, 査読有, 50(1), (2009), pp.19-26.
- ④ 政家利彦・土井祐介・中谷彰宏, 分子動力学法による Ni 結晶中の水素拡散挙動とその素過程の解析, 材料, 査読有, 57(8), (2008),

pp.774-779.

⑤ 下川智嗣・喜成年泰・新宅救徳, 原子スケール計算機実験による積層欠陥エネルギーの異なるナノ結晶体の粒界構造と力学特性の関係材料, 査読有, 57(8), (2008), pp.761-767.

⑥ T. Sato, K. Saitoh and N. Shinke, Atomistic modelling of reversible phase transformations in Ni-Ti alloys: A molecular dynamics study, Materials Science and Engineering A, 査読有, 481-482, (2008), pp.250-253.

⑦ 中谷彰宏, 機械工学年鑑(3.計算力学 3.2 計算固体力学), 日本機械学会誌, 査読無, 111(1077), (2008), pp.646-647.

⑧ 下川智嗣・喜成年泰・新宅救徳, 弾性剛性係数を用いた準連続体モデルの自動要素分割に関する研究

日本機械学会論文集A編, 74, 査読有, (2008), pp.27-33.

⑨ A. Nakatani and T. Shimokawa, Microstructural evolution in crystalline metal induced by plastic deformation-Atomistic study of grain subdivision in tension, torsion and rolling- Solid Mechanics and its Applications, 査読有, 144, (2007), pp.25-35.

⑩ T. Shimokawa, T. Kinari and S. Shintaku, Dislocation-Grain Boundary Interactions by the Quasicontinuum Method, Key Engineering Materials, 査読有, 340-341, (2007), pp.973-978.

⑪ T. Shimokawa, T. Kinari and S. Shintaku, Interaction mechanism between edge dislocations and asymmetrical tilt grain boundaries investigated via quasicontinuum simulations, Physical Review B, 査読有, 75 (2007), pp.144108.

⑫ T. Shimokawa, T. Kinari and S. Shintaku, Atomic simulations on the grain subdivision of a crystalline metal, Materials Science Forum, 査読有, 561-565, (2007), 1983-1986.

⑬ 下川智嗣・平本知之・喜成年泰・新宅救徳, 原子シミュレーションによるAlおよびCuナノ結晶中の欠陥構造に関するエネルギー論的研究, 材料, 査読有, 56(2007), pp.1068-1075.

[学会発表] (計 19 件)

① A. Nakatani and Y. Mukudai, A Multiscale Modeling of Grain Boundary Characteristics in Aluminum, International Symposium on Giant Straining Process for Advanced Materials (GSAM-2008), November 21-24, 2008, Fukuoka.

② C. Urabe, T. Ogawa, and A. Nakatani, Molecular dynamics study of ductile fracture near crack tip field in nanocrystalline aluminum,

International Symposium on Giant Straining Process for Advanced Materials (GSAM-2008), November 21-24, 2008, Fukuoka.

③ K. Higashida, M. Tanaka, S. Horiuchi and T. Shimokawa, The Effect of Severe Plastic Deformation on the Brittle-Ductile Transition in Low Carbon Steel, International Symposium on Giant Straining Process for Advanced Materials (GSAM-2008), November 21-24, 2008, Fukuoka.

④ H. Nakashima, T. Isobe, S. Hata, K. Ikeda and T. Shimokawa, Grain Boundary of SPD Material - TEM and MD Structures -, International Symposium on Giant Straining Process for Advanced Materials (GSAM-2008), November 21-24, 2008, Fukuoka.

⑤ K. Saitoh and Y. Ohnishi, SPH analysis of ECAP process by using grain refinement model, International Symposium on Giant Straining Process for Advanced Materials (GSAM-2008), November 21-24, 2008, Fukuoka.

⑥ A. Nakatani and Y. Shobatake, Study on Deformation of Vesicle Membrane based on Evolution of Topological Defects, XXII International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM2008), August 24-29, 2008, Adelaide, Australia.

⑦ T. Matsushima and T. Kameda, SPH Simulation of Severe Plastic Deformation Process of Polycrystals, International Conference in Plasticity, 2008 and its Current Applications, January 2008, Kailua-Kona, Hawaii, U.S.A.

[その他]

ホームページ等

<http://www.md.ams.eng.osaka-u.ac.jp/giantstrain/>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

中谷 彰宏 (NAKATANI AKIHIRO)  
大阪大学・大学院工学研究科・教授  
研究者番号：50252606

### (2) 研究分担者

下川 智嗣 (SHIMOKAWA TOMOTSUGU)  
金沢大学・機械工学系・講師  
研究者番号：40361977  
齋藤 賢一 (SAITOH KEN-ICHI)  
関西大学・システム理工学部・准教授  
研究者番号：90294032  
松島 亘志 (MATSUSHIMA TAKASHI)  
筑波大学・大学院システム情報工学研究科・准教授  
研究者番号：60251625

### (3) 連携研究者