

平成 22 年 5 月 19 日現在

研究種目：若手研究（B）
 研究期間：2007～2009
 課題番号：19760061
 研究課題名（和文） 結晶・非晶質構造体の局所塑性変形の連結・伝ばメカニズムに関する原子・分子論的研究
 研究課題名（英文） Atomic- and Molecular-level study of connection and propagation mechanisms of local plastic deformations in crystal and polymer structures
 研究代表者
 下川 智嗣（SHIMOKAWA TOMOTSUGU）
 金沢大学・機械工学系・准教授
 研究者番号：40361977

研究成果の概要（和文）： ナノ結晶や非晶質ポリマー等の様々な構造の固体材料が示す類似した速度に依存する変形・破壊モードの遷移現象を、各原子・分子構造に基づいて理解することを目的とし、分子動力学法を用いた計算機実験を行なった。その結果、格子欠陥や分子鎖形状の局所的な形態変化（例えば、面欠陥と線欠陥の形態変化）に対する容易さが、局所塑性変形の発生や伝ばに強く関係していることを解明した。

研究成果の概要（英文）： In order to elucidate the transition mechanism from homogeneous to inhomogeneous of deformation and fracture modes related to the strain rate and temperature in nano structured materials, we perform deformation tests for nanocrystal and polymer models using molecular dynamics simulations. It can be concluded that the difficulties for structural transitions of local lattice defects, e.g., structural changes from line defects to plane defects, strongly affect the generation of local plastic deformations and its propagations.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007 年度	600,000	0	600,000
2008 年度	1,400,000	420,000	1,820,000
2009 年度	1,200,000	360,000	1,560,000
年度			
年度			
総計	3,200,000	780,000	3,980,000

研究分野：計算材料力学

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：分子動力学法，塑性変形，力学特性，転位，粒界，高分子材料，ナノ結晶，計算力学

1. 研究開始当初の背景

1988 年、Kalthoff と Winkler により、二つの切り欠きを有する金属薄板に、円柱形状の物体を切り欠きの間に高速で衝突させた場合、破壊モードの脆性－延性遷移が生じ

ることが報告された。つまり、ある臨界速度 V_c までは、き裂の発生により脆性破壊を生じるが、その V_c よりも速い場合は、せん断帯が形成され延性破壊が生じる。この現象は一つの切り欠きの場合においても成り立ち、

その後多くの研究者らにより金属ガラスやポリマー等においても同様な破壊モードの遷移現象が確認されている。通常、破壊や変形は構造敏感性を示すにも関わらず、原子・分子構造の異なる固体材料が、試験片レベルで破壊・変形に関して類似した変形速度依存性を示すことは、大変興味深い現象だと考えられる。このようなアナロジーは、変形モードにおいても確認されている。例えば、Ni ナノ結晶体の引張変形において、低ひずみ速度下では均質変形を示し、高ひずみ速度下ではせん断帯を発生し不均質変形を生じ、これと同様に、非晶質性であるポリエチレンテレフタレート (PET) のせん断変形において、低ひずみ速度下では均一なすべり線模様が確認され、高ひずみ速度下では顕著なせん断帯の発生により変形が進行することが報告されている。上記の破壊モードの遷移メカニズムを再現するために、様々な構成則を用いた連続体力学に基づく計算機シミュレーションが試みられている。その中において、材料のひずみ速度依存性を考慮するために、熱軟化する熱弾粘塑性体を用いた研究では、破壊モードの遷移メカニズムや、き裂やせん断帯の発生する角度等を忠実に再現することに成功している。このような試験片レベルの現象を構成則を用いて再現することにより、その材料特性を現象論的に表現することは、この材料を構成要素とする構造体の力学応答を予測できる点で大変実用であると考えられるが、原子・分子レベルの構造に起因する変形プロセスを陽に考慮していないため、異なる構造を有する固体材料がどのような変形メカニズムにより破壊・変形モードの遷移を生じているのかを本質的に理解することは困難である。そのため分子動力学シミュレーションを通じて上記の結晶・非晶質構造体の局所塑性変形の連結・伝ばメカニズムを解明する必要性に思い立った。

2. 研究の目的

本研究では、様々な構造の固体材料が示す類似した速度に依存する変形・破壊モードの遷移現象を、分子動力学法を用いた計算機実験を行なうことにより、各原子・分子構造に基づいて理解することを目的とする。具体的には、解析対象として原子・分子構造の全く異なるナノ結晶と非晶質ポリマーに注目し、同じ形状をした解析モデルに対して異なるひずみ速度・温度で変形を与えたときに、どのように局所せん断塑性変形が生じ (stage-I)、その局所変形がどのように成長、連結し (stage-II)、最終的に均質・不均質変形モードが生じるか (stage-III) を詳細に調べる。つまり、各構造における局所塑性変形の生成・連結・伝ばメカニズムの速度・温度依存性を調べることが最終目的となる。

3. 研究の方法

本研究では、大きな解析領域を必要とするため、2次元的な解析モデルを用いることにする。金属ナノ結晶体の擬2次元シミュレーションは複数のすべり系を拘束するものの、その有効性は国内外の研究者から報告されている。そこで、まず高分子材料の2次元モデルの開発を行なう。高分子材料の変形・力学特性に関する2次元原子シミュレーションが多くは行なわれていない原因として、高分子

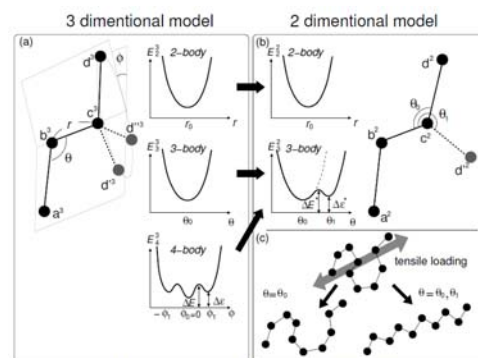


図1: 2次元ポリマーモデルの概略図

鎖が有する配置の多様性を表現できないことが考えられる。図1(a)に一般的な高分子の3次元モデルの概略図を示す。本研究では、CH₂やCH₃を一つの質点として扱う united atom モデルを用いる。共有結合である高分子鎖は、二体力、三体力、四体力により表現される。特に四体力により高分子鎖は3次元的な形状を多様に変化することができ、エントロピー弾性等の特性を引き起こすことになる。2次元モデルではこの四体力であるねじり角を陽に表現できないが、本研究では、三体力を拡張することにより、高分子鎖の配置の多様性を表現することを試みる。

金属ナノ結晶モデルについては、マクロ変形モードの解析条件依存性に加え、結晶粒径・積層欠陥エネルギー依存性を考える。これまでの研究より、5~30 nm までは粒界変形が支配的となり、30~80 nm では粒内変形が支配的となることを報告しているの、ミクロ変形モードとマクロ変形モードの違いについて考察する。また近年、粒界構造を積極的に制御することで材料特性を改善する試みが行なわれており、粒界方位差分布とマクロ変形モードの関係についても検討を行なう。

4. 研究成果

高分子鎖を表現するために開発した拡張3体ポテンシャルを用いて、高分子モデルの圧縮変形解析を行った。ここで、高分子鎖のト

ラスとゴーシュのエネルギー差を変えた3つの高分子モデルを適用する。図2は変形後の内部構造の一例を示している。色は変形前後での分子鎖の方位の差を示しており、色が一番濃い部分は分子鎖の右回転を、色が一番薄い部分は分子鎖の左回転を示している。図2の右図は1区画を 2×2 (nm²)で分割し、変形量に対する分子数の空間平均を表している。そして変形した部分を除いた未変形領域を評価することで局所変形か均質変形かを検討することができる。未変形領域と温度、空孔の関係を図3に示す。ここで変形時の温度は100 K, 300 K, 400 Kの3種類で行いプロットの大きさが大きくなるにつれて温度も大きくなることを意味している。この図から温度が高くなるにつれ未変形領域が小さくなることを確認できる。これは低温では局所変形であるのに対し、高温では全体的に変形し均質変形のような状態であることを意味している。低温では外力により分子鎖が変形し、それがせん断方向に伝ばすることで変形が進行しせん断帯が形成されると考えられる。これに対し、高温における変形はせん断帯の伝ばよりも個々の分子鎖の配座の変化が支配的だと考えられる。また空孔の割合と未変形領域との間にはあまり相関がないことから内部変形は温度依存性が支配的だと考えられる。model A, B, Cを比較して、エネルギー障壁が小さくなるにつれ分子鎖の配座の変化は容易になるので未変形領域が小さくなり均質変形に近くなることを確認できる。

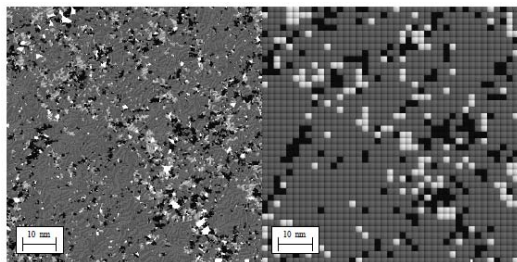


図2：ポリマーモデルの局所変形

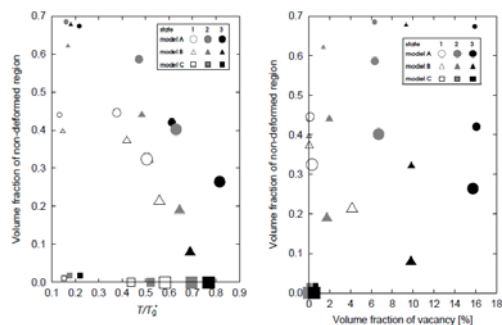


図3：局所変形領域と変形温度、空孔の関係

ナノ構造材料の示す特異な力学特性として延性脆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製作し、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。つまり、粒界が転位源として機能していることが理解でき、粒界領域が急増する超微細粒材ではモバイル転位密度が急激に増加することが可能であることが示せた。

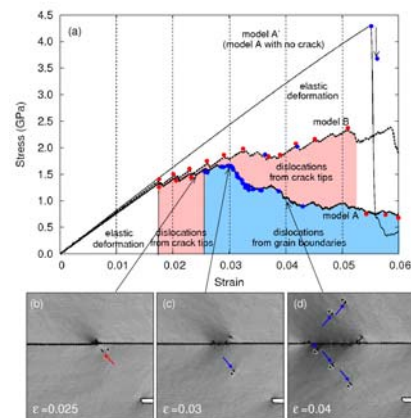


図4：ナノ構造体の局所塑性変形の伝ばメカニズム

当初の転位源であったき裂から粒界に転位源が遷移することが理解できたが、粒界の性格によりこの現象は強く影響を受けることも確認した。そこで、粒界の転位源としての能力を考える。図5に示すように、ある安定な参照構造（ここでは $\Sigma 11$ 粒界）の粒界近傍の方位差を有する粒界（ここでは $\Sigma 15$ や $\Sigma 21$ ）は、その参照構造に対して粒界転位が導入される。その粒界転位成分に起動できる格子転位のすべり系成分が近い場合、すなわち転位放出後の残留バーガスベクトルの大きさが小さい場合、その粒界転位成分に含まれる格子転位成分に応じて荷重を加えることで、格子転位を粒界転位から放出することが可能であることが理解できる。このことは図6より確認できる。図6は安定な $\Sigma 11$ 粒界近傍の傾角粒界において引張・圧縮負荷を加

えた場合、最初の転位を放出するときの応力値を示している。明らかに、 $\Sigma 11$ 構造を挟んで引張りと圧縮に強い異方性が確認できる。このことから局所変形の伝ばには強く欠陥の個々の特性が関与していることが理解できる。

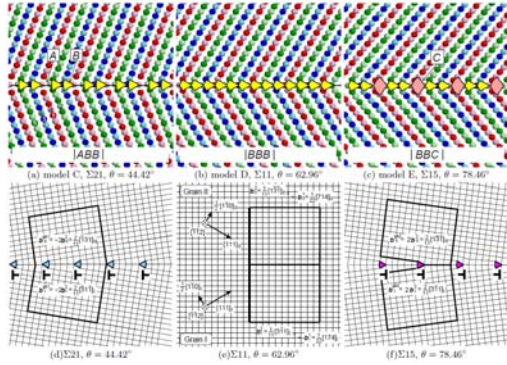


図 5：粒界転位による粒界構造の表現

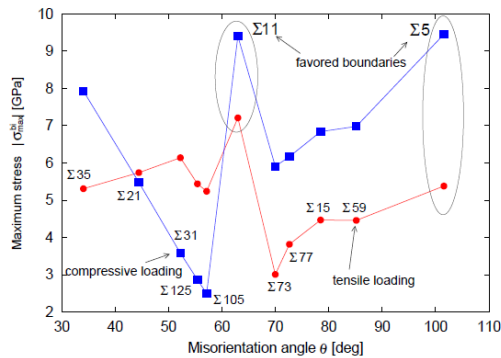


図 6：転位を放出するために必要な応力

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10件)

1. 木下恵介, 下川智嗣, 喜成年泰, 原子シミュレーションにおける粒界近傍のき裂先端から連続転位放出する現象に対するJ積分による評価, 材料, (2010), 掲載決定, 査読有
2. M. Tanaka, K. Higashida and T. Shimokawa, The Effect of Severe Plastic Deformation on the Brittle-Ductile Transition in Low Carbon Steel, Materials Science Forum, 633-634 (2010), 471-480, 査読有
3. T. Shimokawa, T. Kinari, and S. Shintaku, Adaptive Mesh Refinement with Elastic Stiffness Coefficients in the Quasicontinuum Model, Journal of Computational Science and Technology, 3 (2009), 40

8-416, 査読有

4. 下川智嗣, 喜成年泰, 新宅救徳, 弾性脆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, 738巻(2008), 27-33, 査読有

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, 57巻(2008), 761-767, 査読有

6. 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, 50(2008), 2-10, 査読有

7. 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, 50(2008), 56-63, 査読有

8. T. Shimokawa, T. Kinari and S. Shintaku, Interaction mechanism between edge dislocations and asymmetrical tilt grain boundaries investigated via quasicontinuum simulations, Physical Review B, 75(2007), 144108(1-11), 査読有

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

10. 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, 56巻(2007), 1068-1075, 査読有

[学会発表] (計39件)

1. Tomotsugu Shimokawa, Keisuke Kinoshita and Toshiyasu Kinari, Structural unit dependence of the dislocation emissions from <112> tilt grain boundaries by atomic simulations, 2nd International Workshops on Advances in Computational Mechanics, 2010. 3. 31, パシフィコ横浜(神奈川県)
2. 下川智嗣, 格子欠陥の形態遷移現象に関する原子スケール計算機実験, 第19回日本MRS学術シンポジウム, 2009年12月8日, 横浜情報文化センター(神奈川県)
3. 下川智嗣, 粒界の転位源能力に関する原子スケール解析, 日本金属学会2009年度秋期大会, 2009年9月15日, 京都大学(京都府)

-)
4. 下川智嗣・木下恵介, 原子シミュレーションによる内部欠陥応力場の発展に基づく粒内から粒界への転位源遷移現象, 日本材料学会 第14回分子動力学シンポジウム, 2009年5月22日, 愛媛県民文化会館(愛媛県)
 5. 下川智嗣・木下恵介・田中将己・東田賢二, UFG 材の内部欠陥応力場の発展による転位源遷移と DBTT の関係に関する原子シミュレーション, 日本金属学会2009年度春期大会, 2009年3月30日, 東京工業大学(東京都)
 6. 下川智嗣, 超微細粒材料の延性脆性遷移温度に関する分子動力学解析, 日本機械学会北陸信越支部第46期総会・講演会, 2009年3月7日, 富山大学(富山県)
 7. 下川智嗣・喜成年泰・新宅救徳, 分子動力学法による超微細粒材の延性特性と粒径Bimodal分布の関係, 第13回計算工学会講演会, 2008年5月21日, 仙台市民会館(宮城県)
 8. 下川智嗣, 原子スケールの計算機実験によるマクロ力学特性の解明, 日本学術振興会「材料の微細構造と機能性 第133委員会」第197回研究会, 2008年4月18日, 東京理科大学(東京都)
 9. 下川智嗣・平本知之・喜成年泰・新宅救徳, 原子スケール計算機実験による超微細粒材の力学特性とextrinsic粒界転位の関係, 日本金属学会2008年度春期大会, 2008年3月28日, 武蔵工業大学(東京都)
 10. T. Shimokawa, T. Kinari and S. Shintaku, Atomic Simulations on the Grain Subdivision of a Crystalline Metal, PRIC M6--The Sixth Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing, 2007. 11. 7, 済州島(韓国)
 11. 下川智嗣, 原子スケール計算機実験によるナノ構造体の欠陥構造と力学特性の関係, 日本機械学会2007年度年次大会, 2007年9月12日, 関西大学(大阪府)
 12. 下川智嗣・野島嗣晋・喜成年泰・新宅救徳, 局所擬連続体法の自動要素分割と非局所構造遷移のしきい値に関する研究, 第12回日本計算工学会講演会, 2007年5月23日, 国立青少年オリンピック記念センター(東京都)
 13. 下川智嗣・喜成年泰・新宅救徳, 拡張した三体力を有する2次元モデルを用いた高分子材料の変形メカニズムに関する研究, 日本材料学会第12回分子動力学シンポジウム, 2007年5月18日, 名城大学(愛知県).
 14. T. Shimokawa, Atomistic Simulations of Interface Properties in Metals, EuroSimE 2007--Thermal, Mechanical and Multiphysics Simulation and Experiments in

Micro-Electronics and Micro-Systems--, 2007. 4. 16, ロンドン(イギリス)

[その他]

ホームページ等

<http://mechs.ms.t.kanazawa-u.ac.jp/~simokawa/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

下川 智嗣 (SHIMOKAWA TOMOTSUGU)

金沢大学・機械工学系・准教授

研究者番号：40361977