

令和 3 年 5 月 19 日現在

機関番号：14401

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2019～2020

課題番号：19K23487

研究課題名（和文）時間拡張モデリング手法を用いた原子論に基づく転位の上昇運動機構の解明

研究課題名（英文）Atomistic investigation for understanding dislocation climbing using timescale extending atomistic modeling

研究代表者

新里 秀平（Shinzato, Shuhei）

大阪大学・基礎工学研究科・助教

研究者番号：10853202

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,200,000円

研究成果の概要（和文）：本課題では、ナノスケール結晶金属材料中の転位上昇プロセスを対象とした時間拡張原子モデリングを実施し、転位上昇の律速過程の原子論的メカニズムについて検討した。具体的には、異なる2種類の時間拡張原子モデリング手法を用いて段階的に転位上昇プロセスにおける原子の運動に関する知見を得ることで、ナノスケール材料において従来の転位上昇プロセスとは異なるメカニズムでの転位上昇が発生する可能性が示唆された。本課題の遂行により得られたナノスケール結晶金属材料における転位上昇プロセスの原子描像に関する知見は、ナノスケール材料に特異な塑性変形プロセスの解明において役立つものと期待する。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ナノスケール材料はその優れた化学特性から近年エレクトロニクス分野やエネルギー分野で広く応用が試みられており、また力学特性に関しても従来のマクロ材料と比べ優れていることから実用化が期待されている。したがって、力学的負荷を受ける環境下での挙動を予測することはナノスケール材料を利用するうえで重要である。本課題では、近年実験において観察されたナノスケール材料特有の特異な変形現象である室温での転位上昇に着目し、その原子論的メカニズムの調査を実施した。本課題で得られた成果は実用環境下におけるナノ材料の強度や寿命を予測するうえで役立つ知見となる。

研究成果の概要（英文）：In this study, the atomistic mechanism of the peculiar dislocation climbing process in nanoscale crystalline material was investigated using timescale extended atomistic modeling. Atomistic simulations based on two different methods were performed to obtain atomistic detail of the dislocation climbing process as the time evolution of concentration distribution and direct atomic motion near dislocation. The results obtained in this study will be basic information for understanding the mechanism of peculiar dislocation climbing in nanoscale material.

研究分野：計算材料力学

キーワード：転位上昇 時間拡張モデリング ナノ構造材料 原子モデリング

1 . 研究開始当初の背景

結晶材料中の結晶線欠陥である転位の運動は材料の塑性変形の主たる素過程である。通常、転位はある臨界応力(降伏応力)以上の荷重が負荷されたときに、結晶のすべり面と呼ばれる結晶中の特定の面内を移動することによって材料に塑性変形をもたらすが、高温では原子空孔や自己侵入原子の拡散によりすべり面外に移動する特異な上昇運動をすることで、降伏応力以下の荷重条件下においてもクリープ変形と呼ばれる高温特有の変形をもたらすことが知られている。しかし昨年申請者が海外の実験研究者と行った共同研究 2 件において、金属材料のサイズをナノスケールにまで小さくすると、室温環境下でも転位の上昇が発生するというこれまでの常識を覆す非常に特異な現象が発見された。これは、室温下ではこれまで全く予測されていなかった変形機構であり、室温下でのナノ構造材料の強度や寿命の予測を従来の知見に基づき行うことが困難であることを示している。したがって、このような塑性変形プロセスは、ナノ構造物を実用環境下で利用する上で解明すべき非常に重要な新奇現象である。その解明のためには転位の上昇運動のメカニズムの原子論的詳細を明らかにすることが不可欠である。

2 . 研究の目的

転位の上昇運動は、転位近傍の原子空孔の拡散により進行すると説明されてきたが、ナノ構造物に限らずマクロ材料においてすらその原子論的描像はいまだ明らかになっていない。近年、電子顕微鏡技術の進歩により材料の変形挙動を原子スケールで観測する技術が発達しており、これまで理論的な推測や原子シミュレーション上でしか示されていなかった塑性変形の素過程を実際に観察することが可能となってきている。しかしながら、転位の上昇運動における原子ひとつひとつの動きを直接観察することは未だ達成されていない。転位の上昇運動は転位付近の原子個々の運動をもたらす現象であるため、分子動力学法に代表される原子シミュレーションが有効である。しかし、分子動力学法の解析可能な時間スケールと転位の上昇運動の時間スケールとの間に大きな隔りがあり、そのまま適用することはできない。本研究では、空間解像度を原子スケールに保ったまま時間スケールのみを拡張する時間拡張原子モデリングを用いて、ナノスケール金属結晶材料における転位上昇プロセスのモデル化を検討することを目的とする。

3 . 研究の方法

本課題では、転位の上昇運動をモデル化するために、(1) Diffusive Molecular Dynamics (DMD) 法、および(2) 従来の加速分子動力学法の一つである Bond-boost hyperdynamics 法の 2 種類の時間拡張原子モデリング手法を用いて転位上昇プロセスの解析を実施した。DMD 法では原子の熱振動による空間分布を粗視化し、隣接する原子サイト間での質量輸送をモデル化することで、通常の加速分子動力学法において適切なモデル化が必須となる集団変数が不要であるため、本課題で対象とするナノ構造材料中の転位上昇のように事前に加速すべきプロセスが特定できない場合に有効である。そこで、はじめに、DMD 法を用いて転位を含むバルク材料およびナノワイヤを一定圧縮応力下に保持する試験を行い、原子濃度分布や原子構造の時間発展を追うことで DMD 法が転位上昇プロセスの解析に適用可能か検討した。DMD 法では各原子座標における原子の濃度(存在確率)分布の時間発展を追跡することはできるものの、得られる原子描像は平均場的なものとなり、個々の原子の運動を評価することはできないため、得られた知見をもとに集団変数を構築し、Bond-boost hyperdynamics 法による一定圧縮応力下でのナノワイヤ保持試験を行うことで、転位上昇プロセスにおける各原子の運動を評価した。なお、本課題で用いた原子モデリング手法では、原子間の相互作用として、先行研究の実験と同じ材料である金(Au)の経験的ポテンシャルを使用した。

4 . 研究成果

成果の概要は次のとおりである。

- DMD 法によるバルク材料中の転位上昇プロセスの解析により、通常のクリープ変形が発生する高温条件下においては原子空孔の拡散による転位上昇運動のモデル化が可能であることを確認した。
- ナノワイヤを用いたシミュレーションにおいては、原子空孔が転位周囲よりも表面に向かい拡散することで、通常の転位上昇は確認できなかった。しかしながら、転位近傍の原子サイトからも表面へと移動することが示唆された。
- Bond-boost hyperdynamics 法を用いてナノワイヤにおける転位上昇プロセスのモデル化を検討した。この解析により、転位近傍の原子がすべり方向とは異なる方向に向かい協調的に

変位することで原子空孔の拡散を介さずに転位上昇が発生することが観察された。これは、ナノ材料において従来とは異なるメカニズムで転位の上昇が起こりうることを示唆している。

研究成果の詳細を上記の手法ごとに説明する。

(1) DMD 法を用いた転位上昇プロセスのモデル化

はじめに、転位上昇プロセスのシミュレーションに際して DMD 法が適用可能であるかを確認するために、従来の原子空孔拡散に基づく転位上昇シミュレーションを検討した。転位の近傍に表面を持たない十分に大きなバルク結晶材料中に刃状転位を導入し、すべり方向に対して垂直な方向に圧縮応力を負荷する。また、刃状転位の遠方に原子空孔の供給源として転位近傍と比べて原子空孔濃度の高い原子サイトを配置した。さらに、原子空孔の供給源となる原子サイトの化学ポテンシャルを常に転位近傍の原子より小さく保つことにより、原子空孔が転位に向かって移動し、転位近傍の原子サイトに吸収されることで転位の上昇が発生する従来の転位上昇メカニズムを再現することを確認した。次に、同様のシミュレーションを、刃状転位を含むナノワイヤ構造に対して実施した。ナノワイヤモデルを用いたシミュレーションでは、原子空孔は表面へ移動することが観察され、上記のバルク中のように従来のメカニズムによる転位上昇は発生しなかった。しかしながら、転位近傍の原子サイトにおいては、ナノワイヤ内部の原子サイトに比べて表面近傍の原子サイトのほうが空孔の濃度がわずかに低くなることが確認でき、圧縮応力下において転位近傍の原子が内部から表面へと移動する可能性が示唆された。

(2) Bond-boost hyperdynamics 法を用いた転位上昇プロセスのモデル化

(1)のシミュレーション結果に基づき集団変数を構築することで、従来の加速分子動力学法による転位上昇プロセスにおける個々の原子の運動の評価を行った。本課題では転位近傍の隣接する原子同士の結合距離に関して、平衡距離から逸脱する長さを集団変数（加速対象）として転位上昇運動のモデル化を検討した。得られた原子描像より、転位近傍の原子列が転位線に沿って協調的に変位することにより、転位がすべり面に対して垂直な方向に移動することを確認した。Bond-boost hyperdynamics 法によるシミュレーションにおいても DMD 法によるシミュレーションと同様に原子空孔はシミュレーション初期にナノワイヤ表面へと移動しており、この転位上昇は原子空孔の拡散を介さずに発生していると考えられる。今回のシミュレーションにおいてはこの協調的な原子の運動による継続的な転位上昇運動は見られなかったため、このプロセスがナノ材料における転位上昇の律速過程であるかについてはまだ検証が必要であるが、この成果はナノ材料中の転位上昇運動においては従来とは異なるメカニズムが存在することを示唆している。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Ali Md. Lokman, Shinzato Shuhei, Wang Vei, Shen Zeqi, Du Jun-ping, Ogata Shigenobu	4. 巻 61
2. 論文標題 An Atomistic Modeling Study of the Relationship between Critical Resolved Shear Stress and Atomic Structure Distortion in FCC High Entropy Alloys - Relationship in Random Solid Solution and Chemical-Short-Range-Order Alloys -	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 MATERIALS TRANSACTIONS	6. 最初と最後の頁 605 ~ 609
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.2320/matertrans.MT-MK2019007	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 Sato Yuji, Shinzato Shuhei, Ohmura Takahito, Hatano Takahiro, Ogata Shigenobu	4. 巻 11
2. 論文標題 Unique universal scaling in nanoindentation pop-ins	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 4177
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1038/s41467-020-17918-7	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3件（うち招待講演 0件／うち国際学会 1件）

1. 発表者名 Shuhei Shinzato, Rodrigo P. Campos, and Shigenobu Ogata
2. 発表標題 Monte Carlo study on atomic arrangement around crystal defect in multi-principal element alloys
3. 学会等名 TMS2020 149th annual meeting & exhibition (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 新里秀平, 尾方成信
2. 発表標題 グランドカノニカルモンテカルロ法を用いたMedium Entropy Alloy中の粒界偏析の原子論的解析
3. 学会等名 日本金属学会2020年春期(第166回)講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 新里秀平、Rodrigo Campos、石井明男、尾方成信
2. 発表標題 合金中の偏析解析のためのデータベース駆動型モンテカルロ法の構築
3. 学会等名 日本金属学会2021年春期(第168回)講演大会
4. 発表年 2021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

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関