

機関番号：14401

研究種目：基盤研究（B）

研究期間：2008 ～ 2010

課題番号：20360055

研究課題名（和文） 次世代高強度鋼の変形のマルチスケールモデリング

研究課題名（英文）

Multi-Scale Modeling of Deformation of Next Generation High Strength Steel

研究代表者

尾方 成信 (OGATA SHIGENOBU)

大阪大学・基礎工学研究科・教授

研究者番号：20273584

研究成果の概要（和文）：

第一原理計算法、分子動力学計算法、フェーズフィールド計算手法を用いて、次世代高強度鋼の変形を第一原理的に解析するためのマルチスケールモデリングの枠組みを構築し、これを用いて、鋼の組織形成、鋼中の不純物拡散、変形時の内部構造および不純物分布の時間発展、鉄の延性・脆性・靱性の数値解析を行い、次世代鋼開発に必要な基礎的知見を獲得した。

研究成果の概要（英文）：

We developed a first principles multiscale modeling framework for designing next generation high strength steels based on first principles density functional theory method, accelerated and path integral molecular dynamics methods, and macroscopic and microscopic phase field modeling methods. By using the framework, we analyzed structure formation of steels, diffusion behavior of impurities in iron, evolution of internal structure and impurity diffusion in deforming iron, and ductility, brittleness, toughness of iron and then we eventually obtained fundamental knowledge necessary for designing next generation steels.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	5,600,000	1,680,000	7,280,000
2009年度	5,000,000	1,500,000	6,500,000
2010年度	2,500,000	750,000	3,250,000
年度			
年度			
総計	13,100,000	3,930,000	17,030,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・ 機械工学・材料力学

キーワード：マルチスケールモデリング・変形・高強度鋼・フェーズフィールド法・不純物拡散・分子動力学法・第一原理計算法

## 1. 研究開始当初の背景

次世代鋼の開発には、要求された強度・延性・コストを満足するために微細組織や強化機構を定量的に制御することが求められる。材料のモデリング・シミュレーション手法はここ20年間、原子スケールにまで踏み込ん

だ変形メカニズムの理解や予測能力において大きな進歩を遂げており、このように実用的な問題に取り組むための素地が出来上がってきた。

## 2. 研究の目的

本研究は、これら近年発達してきた各種モデリング・シミュレーション手法を有機的に融合させたマルチスケールモデリング手法を用いることによって、鋼の微細組織生成メカニズムと強化機構を定量的に理解し、それに基づき、目的の強度や延性を持った鋼の生成プロセスを提案、さらには鋼の強度や延性の理想値を実験以前に評価することを目的とする。具体的には、鉄鋼材料の組成や微細組織が強化機構へ及ぼす影響を総合的かつ定量的に検討するために、まず、電子状態計算に基づく第一原理計算 (First-Principles calculation)、原子モデル計算 (atomic calculation)、そしてフェーズフィールド計算 (Phase Field calculation) を有機的に結合させ、実験的な知見がなくても全体として、モデリング・シミュレーションの枠組みが成立する方法論を確立する。そして、鉄鋼産業における開発実験に要する時間とコストの大幅な削減を期し、次世代高強度鋼の変形特性を実験以前に予測的に評価するとともに、より強く安全な鋼を創成するための指針を提供する。

## 3. 研究の方法

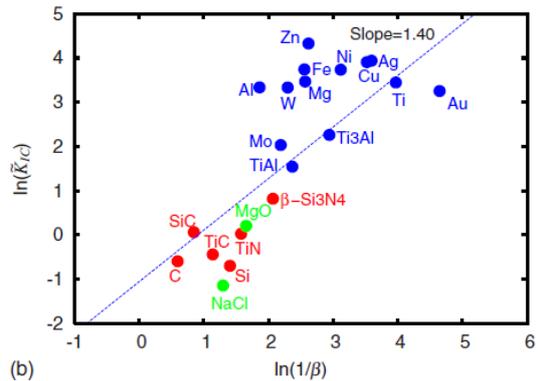
以下の数値計算によるモデリングおよびシミュレーション手法により研究を実施した。

- (1) 第一原理密度汎関数法による第一原理計算により、鉄および鉄と不純物との相互作用、さらには、それらの力学的特性を獲得した。
- (2) 第一原理計算結果に立脚した古典分子動力学計算およびそれを時間加速できるように改良した時間加速分子動力学法により、鉄中の不純物拡散、鉄と不純物との相互作用による強化機構を獲得した。
- (3) 第一原理計算および古典分子動力学計算の結果を導入した、フェーズフィールド計算により、鋼の組織形成および応力下での不純物を有する鉄の変形メカニズムを獲得した。

## 4. 研究成果

- (1) 第一原理計算による変形解析から、鉄を含む様々な結晶固有の脆性・延性・靱性の程度を見積もる理論および手法を確立した。この評価手法では有限応力下でのこれらの程度を見積もることもできる。さらに、これらの知見をベースとして、非線形弾性変形の構成式を構築した。本構成式を一般的な有限要素計算に導入することにより、第一原理計算では取り扱うことの困難な大規模モデルの解析をも可能とした。本成果は、最近注目されている鉄を含むナノサイズの材料

変形に対する高精度な力学解析をも可能とする。



(b) 図 各種結晶の延性・靱性の評価 (縦軸靱性、横軸延性)

- (2) 古典分子動力学計算により、鉄中の炭素の拡散挙動および拡散係数を定量的に獲得した。これまで、分子動力学シミュレーションでは時間スケールの問題により取り扱うことが困難であった本現象を、分子動力学を加速する新たなアルゴリズム (adaptive boost 法) を開発することによって可能とした。特に本手法では、実験でも困難な低温での拡散をも精度よく解析でき、シミュレーションにより実験不可能な条件下での予測を可能とした点が特筆すべき点である。これにより鉄中の不純物拡散をその拡散速度に依らず扱うことが可能となった。

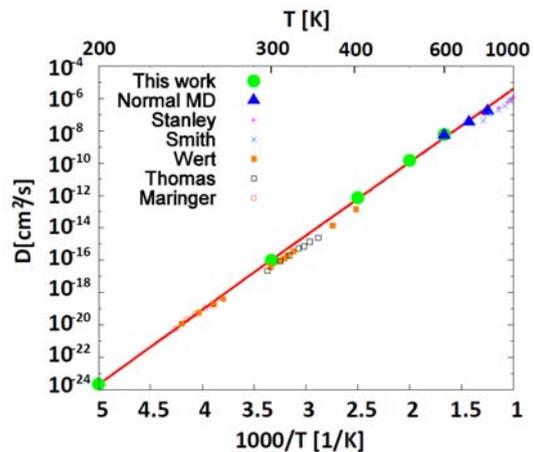


図 鉄中炭素の拡散係数の温度依存性 (実験との比較)

- (3) 経路積分に基づく古典分子動力学計算により、鉄中の水素の拡散挙動および拡散係数を定量的に獲得した。通常の分子動力学法では考慮することができない、水素の量子効果を陽に考慮することにより、水素の拡散経路が温度によって大きく変化することを発見した。また、水素が鉄中の格子欠陥である、転位、粒界、ボイドにトラップされる現象について

も定量的に評価した。今まで具体的な鉄中水素の動的挙動については十分に理解されておらず、本研究において初めて明らかになった。

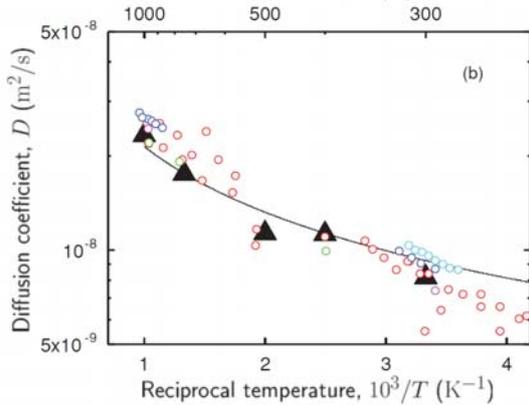


図 鉄中水素の拡散係数の温度依存性 (実験との比較)

- (4) 分子動力学計算により鉄中の析出物であるセメンタイトと変形を支配している転位の相互作用を解析し、鉄のセメンタイトによる強化機構について具体的に獲得した。

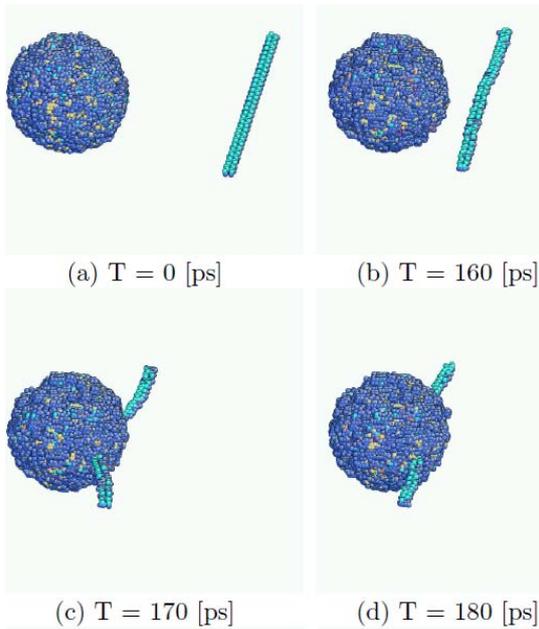


図 鉄中セメンタイトと転位との相互作用の分子動力学解析

- (5) 分子動力学法により同定したパラメータを導入したフェーズフィールド法により、鋼の組織形成シミュレーションを実施した。フェーズフィールド法による組織形成シミュレーションは多数実施されているが、分子動力学法を用いてパ

ラメータを決定することで、定量的な議論が初めて可能となった。

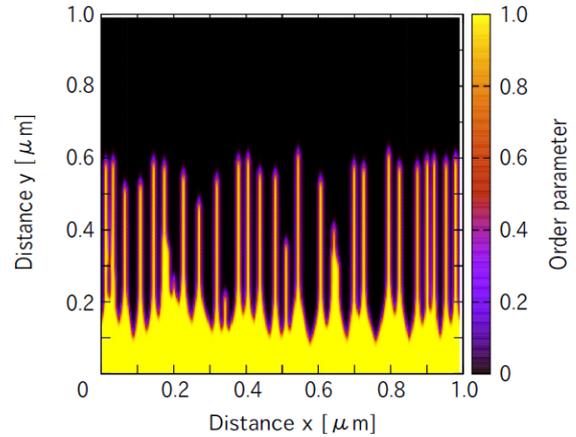


図 フェーズフィールド法による  $\gamma \rightarrow \alpha$  変態解析

- (6) 転位を直接取り扱うことができるミクロスケールフェーズフィールド計算法を開発し、外部応力下における鉄中の転位の生成、複数の転位の相互作用の解析を行い、変形下での鉄中の転位組織の発展を定量的に獲得した。本フェーズフィールド解析では、転位の生成、運動を定量的に扱うために必要な積層欠陥エネルギーなどのパラメータを第一原理計算より求めた。

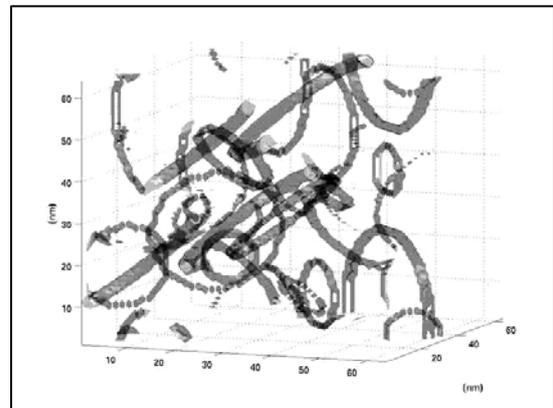


図  $\alpha$  鉄中の転位網発展解析

- (7) ミクロスケールフェーズフィールド解析を進展させ、転位組織の発展と不純物拡散場を同時解析できるようにし、炭素や水素などの不純物が転位の運動に与える影響や粒界にどのように集積するかを解析した。これにより、不純物が存在する場合の変形過程の詳細を定量的に獲得できるようになった。なお、必要なパラメータはすべて第一原理計算および分子動力学計算により求めた。

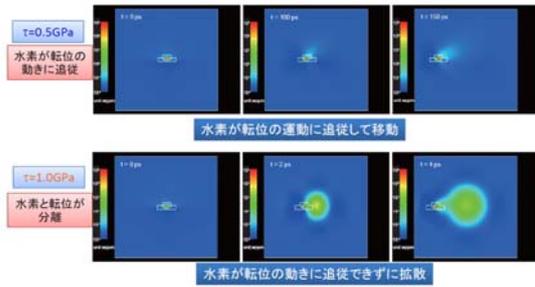


図 せん断応力下における鉄中水素と転位の相互ダイナミクス解析

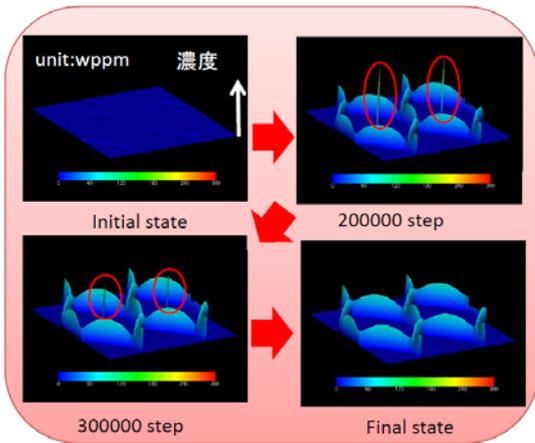
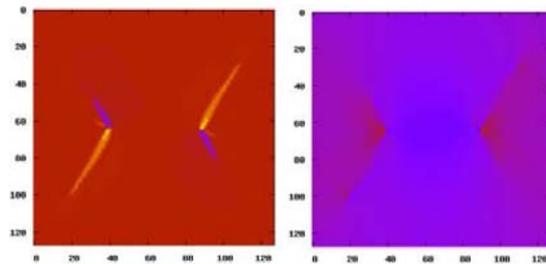


図 粒界および転位への水素集積のダイナミクス解析

- (8) ミクروسケールフェーズフィールド解析を転位発展に加えてき裂の進展を同時解析できるように発展させ、応力下における塑性変形だけでなく同時に破壊の解析を実施可能とした。



(a) 転位 (b) き裂  
図 転位とき裂の同時発展解析

## 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 8 件)

- ① H.Kimizuka, H.Mori, S.Ogata, Effect of Temperature on Fast Hydrogen Diffusion in Iron, Physical Review B,

査読有, Vol 83, No. 16 (2011), 094110

- ② 森英喜, 君塚肇, 尾方成信, Microscopic Phase Fieldモデルを用いたBCC鉄の刃状およびらせん転位芯構造とパイエルスポテンシャルの評価, 日本金属学会誌, 査読有, Vol. 75, No. 2 (2011), pp. 104-109.
- ③ 牛田裕己, 尾方成信, 君塚肇, 分子動力学法によるFCC材料の局所せん断変形に対する安定性の評価, 材料, 査読有, Vol. 60, No. 1 (2010), pp71-78.
- ④ S. Takebayashi, T. Kunieda, N. Yoshinaga, K. Ushioda, S. Ogata, Comparison of the Dislocation Density in Martensitic Steels Evaluated by Some X-ray Diffusion Methods, ISIJ International, 査読有, Vol. 50, No. 6 (2010), pp. 875-882.
- ⑤ 尾方成信, 固体材料におけるモデリングとシミュレーション, 応用数理, 査読有, Vol. 20, No. 1 (2010), pp. 57-63.
- ⑥ S.Ogata and J.Li, Toughness scales from first-principles, 査読有, Vol. 106, No.11 (2009), 113534.
- ⑦ 君塚肇, 森英喜, 牛田裕己, 尾方成信, 経路積分セントロイド分子動力学法によるBCC 金属中の水素拡散性とその温度依存性の評価, 日本金属学会誌, 査読有, Vol. 73, No. 8 (2009), pp.571-576.
- ⑧ 森英喜, 君塚肇, 尾方成信, 第一原理計算によるBCC 鉄の一般化積層欠陥エネルギー表面に基づいた転位構造とパイエルス応力の評価, 日本金属学会誌, 査読有, Vol. 73, No. 8, (2009), pp. 565-600.

[学会発表] (計 20 件)

- ① 君塚肇, 山田和弘, 尾方成信, BCC鉄における水素の粒界・転位・表面拡散の量子動力学, 第20回日本MRS学術シンポジウム, 2010.12.21, 横浜.
- ② 森英喜, 竹中唯太, 君塚肇, 尾方成信, 欠陥場-拡散場相互作用系のマイクロスコピックフェーズフィールドモデリング, 第20回日本MRS学術シンポジウム, 2010.12.21, 横浜.
- ③ H.Mori, Y.Takenaka, H.Kimizuka, S.Ogata, Microscopic Phase Field Study of Hydrogen Transport by Dislocation in BCC Iron, MRS Fall Meeting, 2010.12.2, 米国・ボストン.
- ④ S.Ogata, H.Kimizuka, First Principles Constitutive Equation for Nonlinear Elasticity, MRS Fall Meeting, 2010.12.2, 米国・ボストン.
- ⑤ S.Ogata, Dynamics Process in Nanoscale Systems, IUMRS-ICA2010

- 11<sup>th</sup> Int. Conf. in Asia, 2010.9.26, 中国・青島.
- ⑥ 森英喜, 竹中唯太, 君塚肇, 尾方成信, フェーズフィールド法を用いた転位の運動と水素拡散の相互作用解析, 日本金属学会 2010 秋季大会, 2010.9.25, 札幌.
- ⑦ 山田和弘, 君塚肇, 尾方成信, 経路積分分子動力学法による鉄中の転位近傍における水素挙動解析, 日本機械学会第 23 回計算力学講演会, 2010.9.24, 北見.
- ⑧ 森英喜, 竹中唯太, 君塚肇, 尾方成信, フェーズフィールドモデルを用いた転位の運動に水素が与える影響の解析, 日本機械学会第 23 回計算力学講演会, 2010.9.24, 北見.
- ⑨ 毛利圭佑, 森英喜, 君塚肇, 尾方成信, 鉄中炭素挙動と炭素が鉄の力学的特性に与える影響の原子レベル解析, 日本機械学会第 23 回計算力学講演会, 2010.9.24, 北見.
- ⑩ 君塚肇, 森英喜, 尾方成信, 量子揺らぎを考慮した Fe 結晶中の格子欠陥近傍における水素状態解析, 日本物理学会 2010 年秋季大会 (物性関係), 2010.9.23, 大阪.
- ⑪ H.Kimizuka, H.Mori, S.Ogata, Quantum Dynamics Study of Hydrogen Diffusion in Iron with Lattice Defects, Conference on Multiscale Materials Modeling, 2010.9.6, ドイツ・フライブルグ.
- ⑫ 尾方成信, 構造材料の力学挙動のナノスケールからの理解, 東北大学金属研究所シンポジウム, 2010.7.26, 東北.
- ⑬ S.Ogata, Modeling of Dynamic Process in Nanoscale Systems, Int. Symp. on Multi-scale Modeling and Simulation of Materials, 2010.7.10, 中国・瀋陽.
- ⑭ H.Kimizuka, H.Mori, H.Ushida and S.Ogata, Quantum and Thermal Effects in Hydrogen Diffusion in BCC iron, MRS Fall Meeting, 2009.12.1, 米国・ボストン.
- ⑮ 石井明男, 牛田裕己, 君塚肇, 尾方成信, マルチレプリカ分子動力学モデリング法とその応用, 日本機械学会第 22 回計算力学講演会, 2009.10.10, 金沢.
- ⑯ 君塚肇, 森英喜, 尾方成信, 有限温度における  $\alpha$  鉄中の水素挙動の量子ダイナミクス解析, 日本材料学会第 14 回分子動力学シンポジウム, 2009.5.22, 松山.
- ⑰ 牛田裕己, 君塚肇, 尾方成信, メタダイナミクス法による材料中の熱力学的局所安定性の評価, 日本材料学会第 14 回分子動力学シンポジウム, 2009.5.22, 松山.
- ⑱ 松野喬幸, 君塚肇, 尾方成信, 原子密度汎関数理論による原子スケールにおける長時間現象の解析, 日本材料学会 第 14 回分子動力学シンポジウム, 2009.5.22, 松山.
- ⑲ 君塚肇, 牛田裕己, 森英喜, 尾方成信, 経路積分分子動力学法による BCC 鉄中の格子間水素の拡散挙動, 日本材料学会第 14 回計算工学講演会, 2009.5.12, 東京.
- ⑳ S.Ogata, Modeling of Slow Dynamics Process in Nanoscale System, ICCES09, 2009.4.8, タイ・プーケット.

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

尾方 成信 (OGATA SHIGENOBU)  
大阪大学・基礎工学研究科・教授  
研究者番号: 20273584

### (2) 研究分担者

君塚 肇 (KIMIZUKA HAJIME)  
大阪大学・基礎工学研究科・准教授  
研究者番号: 60467511