

令和 5 年 6 月 7 日現在

機関番号：13301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2020～2022

課題番号：20K03783

研究課題名(和文)変形素過程の異なる固体における臨界塑性現象の普遍性と多様性

研究課題名(英文) Numerical study on universality of critical behavior in solid plasticity with different deformation mechanisms

研究代表者

新山 友暁 (Niiyama, Tomoaki)

金沢大学・機械工学系・准教授

研究者番号：00583858

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：固体材料の塑性変形を、地震現象に代表される非平衡系の臨界挙動の視点から理解するために、異なる素過程を持つ固体(結晶・ガラスのような不規則構造・両者が混在した固体)の原子スケールのシミュレーションを行った。この結果、構造によっては脆性的な破断と延性を示すモデルがえられたが、全ての構造において臨界塑性に特有の統計分布に従った変形挙動を示した。この分布の特徴と構造・機械特性には明確な相関は見いだせず、材料種や構造に起因する固有性は明確には認められなかった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本課題で注目する臨界的な挙動は、固体塑性においては突発的に大規模な変形が発生することに対応する。これは、不規則構造固体においては突発的な変形集中による脆性破壊を誘引する。このことから本課題の結果は、金属結晶やガラス・アモルファス固体の延性・脆性の理解し、突発的な破壊の抑制につながる事が期待される。また、非平衡臨界挙動と材料機械特性の両学術領域間で、各分野で培われた知見の相互作用と発展が促進されるであろう。

研究成果の概要(英文)：To understand the plasticity in solids from the viewpoint of nonequilibrium critical behaviors, we conducted molecular dynamics simulations of two-dimensional solids with different elementary deformation processes. The simulations resulted in plastic behaviors with fragile and ductile features. The critical behavior characterized by power-law distributions of plastic deformation was obtained. The typical feature of the distributions, almost independent of the structures and mechanical properties, does not indicate apparent diversity in the plastic behavior obtained in the simulations.

研究分野：非線形物理学，非平衡物理学，材料科学

キーワード：塑性変形 自己組織化臨界現象 結晶 アモルファス固体 分子動力学シミュレーション

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、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

自然界の非平衡系の多くは、外部注入されるエネルギーを何らかの形で解放することで定常状態を形成するが、その放出形態には熱伝導のような連続的なモード・対流のような周期的なモード・乱流的な非周期モードに加えて、間欠的なエネルギー放出モードが存在する。この間欠的なモードは時空間でのスケール不変性を伴い、解放されるエネルギー規模 s の統計分布はベキ分布 $P(s) \propto s^{-\tau}$ に従う (τ はベキ指数で定数)。この分布の重要な特徴は、極めて大きな規模のイベントが無視できない確率で発生する点にある。このような挙動は臨界現象との類似性を持ち、自己組織化臨界現象 (self-organized criticality) として知られている [1]。このようなベキ分布で特徴付けられる臨界的なエネルギー解放挙動 (以下では臨界挙動と呼ぶ) は、地震・森林火災・強磁性体磁化過程など様々な自然現象に内在していることが知られているが [1]、固体の塑性変形現象においても同様の挙動が内包されていることが非平衡物理と材料科学を横断する文脈で注目されつつある [2, 3]。

塑性変形とは、外力に対して非可逆的な変形応答を示す変形現象であり、粘土のように連続的な応答 (連続的なモード) を示すとみなされていたが、実際には固着滑り的な不連続変形 (間欠的なモード) を内包していることが近年報告されている [2]。ここでは、外部から加える変形速度を一定に保つ条件下において、弾性的なエネルギー蓄積 (固着) と突発的な塑性変形によるエネルギー解放 (滑り) の繰り返しが発生し、このときの塑性変形イベントの規模統計がベキ分布にしたがう挙動を固体の臨界的な塑性挙動と呼ぶこととする。

類似のベキ分布で特徴付けられるものとして、平衡臨界現象における Ising モデルの相関や自己組織化臨界現象における sandpile モデルでのダイナミクスが挙げられるが、この文脈では臨界挙動は強い普遍性をもち、物質の詳細によらず系の対称性や次元などの根源的な特性によってのみ規定されるため、塑性現象を代表する唯一のクラスが存在するとされている [3]。しかしながら、実際には固体塑性ダイナミクスの根源的な特性は材料の詳細に大きく影響を受けるため、上記の認識は必ずしも自明ではない。固体材料は結晶に代表される“規則構造固体”とアモルファスのような“不規則構造固体”に分類される。両者は、その構造規則性・対称性が異なるだけでなく、塑性変形の素過程が完全に別種の機構によって担われる。規則固体 (結晶) の変形の素過程は格子上のトポロジカル欠陥の一種である転位 (dislocation) の運動であり、その運動自由度は結晶格子の対称性に強く依存する。例えば、結晶が面心立方格子構造を持つならば独立な 12 方向に滑りえるが、hcp 結晶では底面方向の滑りのみが支配的になるため、ダイナミクスの自由度はより小さくなるであろう。また、空孔生成エネルギーの違いは滑り変形の障害物濃度を左右し、積層欠陥エネルギーは滑りの方向転換の容易さに影響する。一方で、アモルファスのような不規則構造固体にはこのような拘束はなく、塑性を担う素過程そのものが根本的に異なる。格子構造の存在しない不規則構造固体の変形素過程はいわゆる shear transformation zone (STZ) における原子の局所再配置運動である [4]。このように多様な対称性や素過程をもつ固体塑性現象においては、その臨界挙動は単一のクラスによって代表されない可能性がある。

2. 研究の目的

本課題では、異なる素過程をもつ規則・不規則構造固体を同一の俎上に載せて取り扱うことが可能な粒子モデルを構築し、これを用いて両者の塑性変形現象の臨界挙動を原子スケールで再現する。そして、そのダイナミクスを特徴付ける臨界指数の評価を通じて、両者の固体塑性が同じクラスに分類されるのかを調べることで、固体構造と変形素過程が現象の普遍性に及ぼす影響を明らかにする。また、構造材料としての固体塑性における強度・延性などとの関係に注目し、えられた臨界挙動の特徴と機械特性の関係についても調べる。このようなアプローチによって、材料科学分野において固体の延性・脆性の起源の解明や突発的な破壊の抑制につながるだけでなく、非平衡臨界現象の持つ多様性と普遍性の関係についての重要な示唆をもたらすことが期待できる。

3. 研究の方法

臨界塑性挙動に対して素過程のあり方が及ぼす影響を明らかにするため、転位を素過程とする規則構造固体(結晶)と局所原子再配置運動を素過程とする不規則構造固体(アモルファス固体)の分子動力学(molecular dynamics, MD)シミュレーションを実行し、塑性変形の規模統計および機械特性の特徴を調べることで、それぞれの固体構造における統計的性質と機械的性質を評価しその関係を解析した。

分子動力学シミュレーションを実行するために、大きさの異なる2種類の原子からなる2次元固体系を考え、周期境界条件下の固体モデルおよび自由表面をもつナノピラーに相当する原子モデル(周期境界モデル・自由境界モデル)に対して引張変形のシミュレーションを実行した。前者のモデルに対するシミュレーションによって塑性挙動の統計分布を求め、後者に対するシミュレーション結果から延性などの機械特性を評価した。シミュレーションでは、

$$\phi(r) = \phi_M(r) - \phi_M(r_c) + (r_c - r) [d\phi_M(r_c)/dr] - (1/2)(r_c - r)^2 [d^2\phi_M(r_c)/dr^2]$$

で表される Morse 型 2 体間ポテンシャルを用いた。ここで、 $\phi_M(r)$ は Morse ポテンシャルである [5]。このポテンシャルにおける平衡原子間距離に影響するパラメータに適切な値を設定することで、原子半径の大きな原子種 L と小さな原子種 S を表現できる。さらに、その原子間結合力および組成比率を様々な組み合わせで与えることで結晶・非晶質および両者の混合構造を実現することができる。このようなモデルポテンシャルで構成される原子系を、以下で述べる周期境界条件下で熱処理することで構造の異なる複数の初期配置を作成した。

このようなモデルポテンシャルでモデル化した原子集団を、一辺の長さが 50 nm の正方形領域内部に数比率 f_s の S 原子と L 原子をランダムに配置し、その状態から 10 K で 1 ps の間緩和を行い、その後 1500 K まで 40 ps かけて加熱して液体状態にした。この液体状態で 20 ps の間温度一定の MD シミュレーションを行ったのち、40 ps かけて 10 K まで冷却し固体状態に戻すことで構造の異なる固体の自然な配置を作成した。

このようにして作成した原子集団を、同じ周期境界条件下でひずみ速度 $\dot{\epsilon} = 10^7 \text{ s}^{-1}$ の引張変形を加えることで塑性変形を発生させ、流動域の応力変動から統計的な性質を調べた(周期境界モデル)。一方で、熱処理で得られた原子配置を適切に並べ替えることで、自由表面をもつ自由境界モデルを作成し、これに引張変形を加えることで延性特性を評価した。

4. 研究成果

上述したモデルポテンシャルで表現された S 粒子と L 粒子間の結合強度パラメータ D/D_0 と数比率 f_s をそれぞれ $1/4 \leq D/D_0 \leq 8/4$ および $0.1 \leq f_s \leq 0.9$ の範囲で与え、構造緩和を行った結果、図 1 のように設定したパラメータ値に応じて結晶・非晶質および両者の混在構造をもつ原子配置がえられた。図では、六方対称性にもとづいて評価した構造規則性の度合いに従って着色している [6]。(規則構造をとる原子を青色で、不規則構造が黄色) とくに混合の f_s および D/D_0 が中間程度の範囲で非晶質構造が形成され、結晶構造をとる範囲との境界で混合構造が形成される傾向があった。

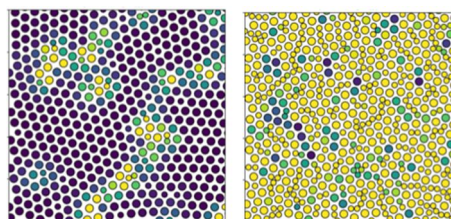


図 1: 2 次元原子モデルにおける結晶構造(左図)およびアモルファス構造(右図)の典型例

このようにしてえられた固体構造と機械特性の関係を調べるために、ナノピラー形状をもつ自由境界モデルの引張変形から強度および延性特性を評価した。この結果から、延性的な伸びを示すケースと脆性的に破断するケースが確認でき、延性的な材料と脆性的な材料をモデル内で作成することに成功した(図 2)。

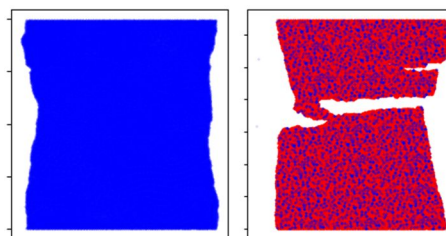


図 2: ピラーモデルに対する引張変形のスナップショット。延性的な伸びを示すモデル(左図)および破断したモデル(右図)の典型例

2) この延性・脆性特性を定量的に評価するために、

$$A = \int \sigma(\epsilon) d\epsilon$$

として応力ひずみ曲線の積分値からエネルギー吸収量を計算したところ、延性的なモデルは脆性的なモデルの2倍程度の吸収量をとることがわかった。これによって、両特性の特徴を定量的に区別して評価することが可能となった。

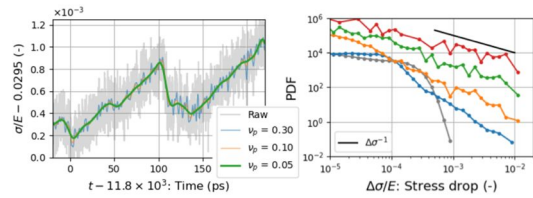


図3: 異なる阻止周波数でフィルタリングした応力時系列(左図)およびそれぞれの時系列からえられた応力降下量分布(右図)

周期境界モデルの引張変形シミュレーションでは、大小様々な規模の塑性変形が突発的・間欠的に発生し、その結果負荷応力は弾性変形による滑らかな増大と急減少を繰り返す挙動を示し、先行研究で報告されているものと類似の間欠的な塑性挙動が確認できた[7]。このときの個別の応力の急降下量(負荷応力の解放量)をその塑性イベントの規模 s として抽出しその統計分布を求めた。このとき、応力は原子振動に由来する熱ノイズを含んでいるため(図3, 左図の灰色線)、その中から塑性変形に起因する降下量 $\Delta\sigma$ を抽出する必要があった。このため、Butterworth フィルターを用いて時系列データの低周波成分をカットすることで、熱振動に由来すると考えられる早い振動を除去し、応力降下量 $\Delta\sigma$ を抽出した。図3の右図のようにこの統計分布はべき分布に従う裾部分を持っていることが確かめられたが、フィルターの阻止周波数に依存して分布の特徴指数が変化していた。とくに、阻止周波数帯を狭く取る場合には、指数は比較的大きな値を取るが $\Delta\sigma$ の小さな領域にノイズが乗りやすく、逆にこれを広く取る場合には、指数は小さく評価される傾向があった。これは、ノイズがより除去されることと引き換えに、 $\Delta\sigma$ の小さなイベントが検出されなくなることによると考えられる。

この阻止周波数の適切な設定値を検討するために、阻止周波数ごとに応力降下速度 $d(\Delta\sigma)/dt$ の平均値を計算し、その依存性を評価した。このとき、特徴的な周波数として降下速度が極大となる時間スケールの存在を想定したが、実際には極大だけでなく極小となる周波数も存在していた。しかし、どちらの周波数を適用するかによって、特徴指数 κ が縮退し、延性の度合いとの相関関係が大幅に変化する結果がえられた(図4)。

このような任意性を回避するために、シミュレーションでえられる時刻ごとの原子配置に対して構造緩和を行い、平衡配置(原子間の力が釣り合う配置)を求めることで、原子振動を除外した応力時系列を計算した。これによって、熱振動を除去することができるため、塑性変形による応力解放量を時間スケールと無関係に抽出することができる。実際に、図5左図にあるように、応力時系列が弾性変形による応力増大と塑性変形による急激な降下が明確に分離する形でえられており、さらに極小規模から大規模な降下イベントまでが解像できている。これによってえられた応力降下量分布は、時系列処理での結果と同様にべき的な裾部分をもち、特徴指数は1.5前後をとっていた(図5右図)。このアプローチによって、阻止周波数の設定値によらない塑性イベントの抽出と特徴指数の評価ができることが確かめられた。一方で、原子配置のサンプリングは1ps間隔であることや計算機のストレージ容量の制限から、解像度とサンプルサイズが相対的に低下したため、固体構造との系統的な関係を明らかにするには精度が不十分であった。これについては追加的なシミュレーションを実行することで精度向上が望めるため、特徴指数の評価は今後の課題である。

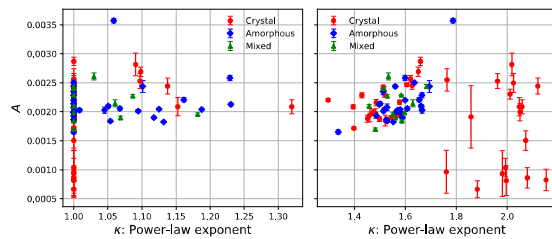


図4: ピラーモデルでの延性と応力降下量分布の特徴指数の関係。(左図) 特徴指数の多くが1.0と評価されてしまっている。(右図)

図5: 平衡構造緩和を行うことでえられた応力時系列の典型例(左図)と応力降下量分布(右図)。平衡構造緩和によってえられた応力及び降下分布は黒色で表示されている。

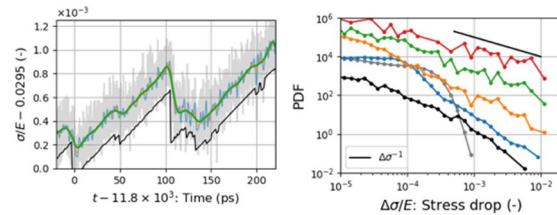


図5: 平衡構造緩和を行うことでえられた応力時系列の典型例(左図)と応力降下量分布(右図)。平衡構造緩和によってえられた応力及び降下分布は黒色で表示されている。

上述の異なる変形素過程を両方もつ場合に両者の相乗効果が機械特性に及ぼす影響についても解析した。結晶及びアモルファス構造をとる領域を接合した固体 (lamellar 構造固体) における塑性変形シミュレーションを行った結果 , アモルファス構造領域内で force chain 構造 [8] と類似した不均質な荷重抵抗分布が形成され , これが結晶領域では転位放出を容易にし , 全体として塑性変形を促進する効果を生み出すことが明らかになった。

さらに , ベキ分布の特徴指数を左右する因子について検討するために , 元計画とは異なる対象であるが遅延フィードバックを有する光学系での臨界挙動での普遍性を調査した。この結果 , 内部散逸が特徴指数を左右する因子であることが明らかになった。このことから , 材料塑性においては , 素過程の生み出すエネルギー散逸が臨界挙動に影響する可能性が示唆された。

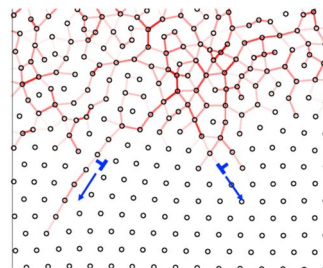


図 5: 構造緩和を行うことでえられた応力時系列の典型例 (左図 , 黒色) と応力降下量分布 (右図 , 黒色) 矢印は放出される転位方向と位置を示している。

- [1] H. J. Jensen. “Self-Organized Criticality: Emergent Complex Behavior in Physical and Biological Systems”. Cambridge University Press, (1998).
- [2] M. C. Miguel, A. Vespignani, S. Zapperi, J. Weiss, and J.-R. Grasso. Nature. **410**, 667 (2001).
- [3] M. Zaiser, Advances in Physics, **55**, 185 (2006).
- [4] M. L. Falk and J. S. Langer, Physical Review E, **57**, 7192 (1998).
- [5] P. M. Morse. Physical Review, **34**, 57 (1929).
- [6] T. Hamanaka and A. Onuki. Physical Review E, **74**, 011506 (2006).
- [7] T. Niiyama and T. Shimokawa. Physical Review E, **91**, 022401 (2015).
- [8] M. E. Cates, J. P. Wittmer, J.-P. Bouchaud, and P. Claudin. Physical Review Letters, **81**, 1841 (1998).

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 Tomotsugu Shimokawa, Kazuki Hara, Tomoaki Niiyama	4. 巻 71
2. 論文標題 Synergistic Effect of Different Plastic Deformation Modes: Molecular Dynamics Study on Strength of Crystalline/Amorphous Mixed Systems	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the Society of Materials Science, Japan	6. 最初と最後の頁 135 ~ 142
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.2472/jsms.71.135	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 Niiyama Tomoaki, Sunada Satoshi	4. 巻 4
2. 論文標題 Power-law fluctuations near critical point in semiconductor lasers with delayed feedback	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 43205
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevResearch.4.043205	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7件（うち招待講演 2件/うち国際学会 1件）

1. 発表者名 新山 友暁
2. 発表標題 微小スケールで顕在化する間欠的な塑性挙動とその統計的特徴
3. 学会等名 日本金属学会研究会No.82, 微小領域の力学特性評価とマルチスケールモデリング 2021（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 新山 友暁, 砂田 哲
2. 発表標題 遅延フィードバックによって引き起こされる間欠的なレーザー発振ダイナミクス
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Tomoaki Niiyama, Satoshi Sunada
2. 発表標題 Intermittent intensity bursts characterized by Power-law statistics in delayed feedback semiconductor lasers
3. 学会等名 Proceedings of International Symposium on Physics and Applications of Laser Dynamics 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 新山友暁, 下川智嗣
2. 発表標題 多様な構造を持つ固体塑性における avalanche 統計と機械特性の関係
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 新山友暁, 下川智嗣
2. 発表標題 非平衡臨界挙動からみたハイエントロピー合金の非弾性変形ダイナミクス
3. 学会等名 日本金属学会第172回春期講演大会 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 新山友暁, 塩谷光平, 下川智嗣
2. 発表標題 サイズ分散を持つ固体材料における非弾性変形の間欠ダイナミクス
3. 学会等名 第7回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 新山友暁, 塩谷光平, 下川智嗣
2. 発表標題 非弾性変形の間欠ダイナミクスにおける原子サイズ分散の効果
3. 学会等名 日本機械学会第35回計算力学講演会
4. 発表年 2022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
研究協力者	下川 智嗣 (Shimokawa Tomotsugu)	金沢大学	

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