

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成25年 4月 11日現在

機関番号：14401

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2010～2012

課題番号：22656030

研究課題名（和文） 材料変形のナノスケールスローダイナミクスモデリング

研究課題名（英文） Slow dynamics modeling of nano-scaled materials deformation

研究代表者 尾方成信（SHIGENOBU OGATA）

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）：

材料変形のナノスケールスローダイナミクスのモデリング手法の構築とその有効性の検証に関して、具体的に以下の6項目にわたる成果を得た。

(1) 時間拡張粒子モデリング理論の構築、(2) 時間拡張粒子モデリング理論に基づく並列マルチレプリカ MD 計算機コードの開発、(3) 改良時間拡張粒子モデリング手法（Adaptive boost 法）の構築、(4) ナノ金属多結晶の変形特性の解明、(5) 金属ガラスの局所構造と局所力学特性の関係の評価、(6) 転位と拡散原子の相互ダイナミクス解析

研究成果の概要（英文）：

We developed modeling methods for nanoscale slow dynamics in materials and confirmed its availability by applying them to actual slow dynamics problems. We achieved the following six objectives. (1) Development of accelerated molecular dynamics modeling theory, (2) Development of multi-replica molecular dynamics simulation code, (3) Development of improved accelerated molecular dynamics method (adaptive boost method), (4) Understanding of deformation mechanism of nanocrystalline metals, (5) Understanding of relation between local atomic structure and local mechanical properties in metallic glass systems, (6) Modeling of dislocation – solute atom coupling dynamics.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	1,400,000	0	1,400,000
2011年度	1,100,000	330,000	1,430,000
2012年度	600,000	180,000	780,000
年度			
年度			
総計	3,100,000	510,000	3,610,000

研究分野：工学

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：スローダイナミクス・時間スケール粗視化・分子動力学法・自由エネルギー・炭素・鉄・拡散

1. 研究開始当初の背景

ナノスケールでの材料加工・試験・計測技

術・材料創成の発達は目覚ましい。ナノインデンテーション試験、MEMS 技術を応用し

たナノ金属ピラーやカーボンナノチューブの創成、およびその引張り・圧縮・曲げ試験、FIB(Focused Ion Beam) ナノ加工によるナノ部材の創成、AFM (Atomic Force Microscope)、STM (Scanning Tunneling Microscope) を用いた原子操作、強ひずみ加工による微細結晶の創成等が実現されている。また、近年このようなナノスケール空間に強く束縛された材料の変形には特異性があり、そのスケール依存性に注目が集まっている。一方、微小スケール事象のモデリング手法の発達も著しく、空間スケールに関しては、原子の振る舞いを直接獲得しつつも、上記スケール依存性の解明に必要な十分な領域の解析が可能になっている。分子動力学法(MD) や各種空間マルチスケール法がその代表である。しかし、空間スケールが十分な解析でも、多くの場合、定性的な議論にとどまっている。その要因は、実験とモデリングの時間スケールの乖離にある。両者で空間スケールが対応していても、多くの場合、時間スケールには通常  $10^{10}$  以上の開きがあり、実験の時間スケールで起こる熱活性化過程に律速されたスローダイナミック事象を捉えることができていない。この時間スケールの問題により、多くの興味深い長時間ナノスケール現象の解明が手つかずの状態になっている。

## 2. 研究の目的

本研究では、原子スケールレベルの解像度を保ちつつ、時間的には、たとえば秒のオーダーのナノスケールスローダイナミック材料変形プロセスを追うことができる普遍的モデリング手法の構築を目的とする。また、その有効性を検証する。

## 3. 研究の方法

任意時間スケール現象に対応できる時間拡張粒子モデリング理論を確立し、これに基づき、原子位置と原子運動量、もしくは原子位置で張られる相空間の高効率並列サンプリングを可能とする加速MD法を開発する。さらには、本理論・手法を長時間現象が変形の重要素過程となっているナノスケールスローダイナミクス問題に適用し、その有効性を示す。

## 4. 研究成果

### (1) 時間拡張粒子モデリング理論の構築

原子モデリングを基本とし、原子位置と原子運動量もしくは原子位置で張られる相空間の並列サンプリングによって、系の持つ全自由度から、任意に選択された自由度に対する自由エネルギー曲面を高速に獲得するた

めの理論構築を行った。これにより、変形に関与するまたは興味の対象となる任意自由度に関する自由エネルギー変化を獲得できるようになった。また、得られた自由エネルギー曲面とその外部応力・温度依存性から、変形を支配している素過程の発生頻度を評価し、材料変形の時空間スケールを特定するための理論を統計力学に基づき構築した。

### (2) 時間拡張粒子モデリング理論に基づく並列マルチレプリカMD計算機コードの開発

(1) で構築した理論に基づき、並列計算機で効率よく計算が可能な並列マルチレプリカMDコードを開発した。なお、ここで開発したコードは、従来からある自由エネルギー曲面を獲得する手法のほとんどを包含する汎用性を持っている。具体的には、反応経路探索法として知られる Nudged Elastic Band 法およびその派生手法、たんぱく質の自由エネルギー曲面探索に使われる Replica Exchange MD 法およびその派生手法、複雑な系のすべての準安定状態をくまなく探索できる Multi Walker Metadynamics 法、粒子の量子性を考慮しながら系の時間発展を獲得する Path Integral MD 法等の方法は、プログラム構造を変更することなくパラメータ変更レベルで実施できる。(図1参照)

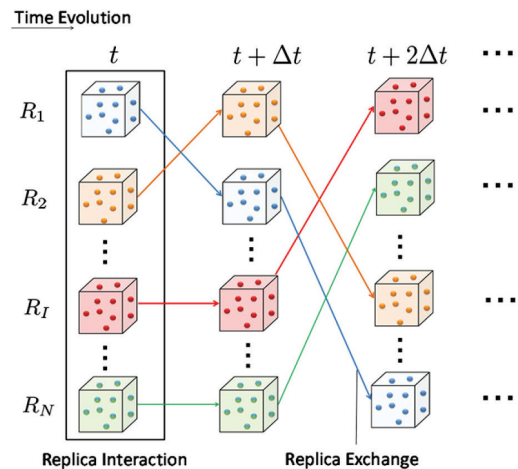


図1 マルチレプリカ分子動力学法概念 (雑誌論文③)

### (3) 改良時間拡張粒子モデリング手法 (Adaptive boost 法) の構築

本研究課題で構築した時間拡張粒子モデリング手法の計算効率をさらに向上させることを目的として、自由エネルギー曲面を求めるためのアルゴリズムに大幅に改良を加えた Adaptive boost 法を新たに構築した。この手法を用いることで、最初に開発した手法にくらべて自由エネルギー曲面を数十倍高速に獲得することができることがわかつ

た。加えて、これまでの手法ではできなかった、系のダイナミックな発展をも自動的に獲得可能であることがわかった。実際に、これを鉄中の炭素拡散現象に適用して、炭素の拡散を加速させて、その拡散係数を求めたところ、実験値と極めて良い一致を示すことがわかり、手法の有効性が確認できた。(図2参照)

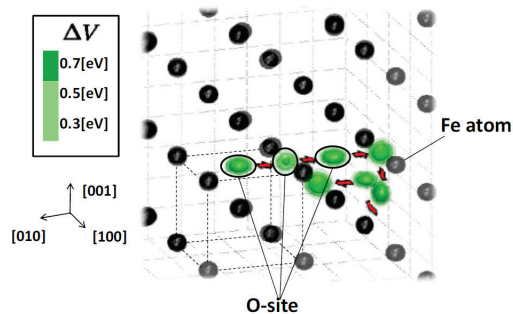


図2 Adaptive boost 法による原子拡散解析 (雑誌論文④)

#### (4) ナノ金属多結晶の変形特性の解明

ナノ結晶の一定応力下での変形解析を行い、ある臨界応力レベル以上において、変形の素過程が結晶粒界での拡散から転位の運動へと遷移することがわかった。特に、転位の運動は、粒界部からの転位生成に支配されていることがわかった。(図3参照)

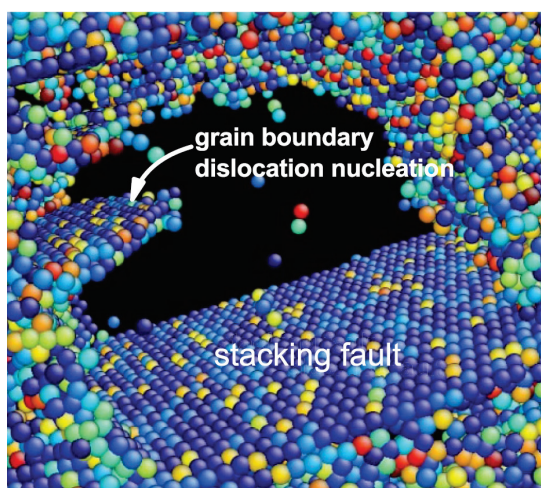


図3 ナノ結晶粒界からの転位発生 (雑誌論文②)

#### (5) 金属ガラスの局所構造と局所力学特性の関係の評価

金属ガラスモデルの局所ひずみに対する自由エネルギー曲面を求めることにより、金属ガラスの局所構造の力学的安定性と局所構造との関連を明らかにした。

#### (6) 転位と拡散原子の相互ダイナミクス解析

Adaptive boost 法を用いて、合金材料の機械的特性を論じる上で不可欠な知見である、金属材料中の不純物と欠陥との相互作用およびそれらの運動の同時解析を行った。具体的には、鉄中の炭素が転位との相互作用下において、いかに拡散するかの解析を実施した。その結果、転位の性格に依らず、転位中での炭素の高速拡散方向は結晶方位によって唯一に決まる共役バーガスベクトル方向であることを発見した。(図4参照)

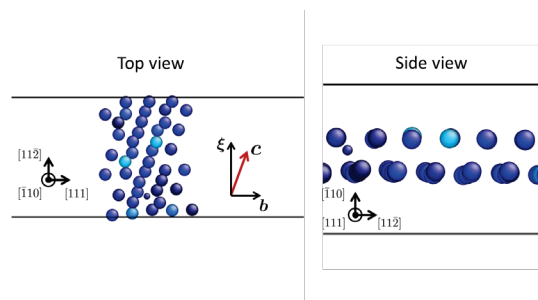


図4 転位と拡散原子との相互ダイナミクス (雑誌論文④)

#### 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6件)

- ① A.Ishii, J. Li and S.Ogata, Conjugate channeling effect in dislocation core diffusion: carbon transport in dislocated BCC iron, PLoS ONE, Vol. 8, (2013), pp. e60586-1-7.
- ② Y. J. Wang, A. Ishii and S.Ogata, Grain Size Dependence of Creep in Nanocrystalline Copper by Molecular Dynamics, Materials Transactions, Vol.53, (2012), pp. 156-160
- ③ A. Ishii, H. Kimizuka and S.Ogata, Multi-replica molecular dynamics modeling, Computational Materials Science, Vol. 54, (2012), pp. 240-248
- ④ A. Ishii, S.Ogata, H.Kimizuka and J.Li, Adaptive boost molecular dynamics simulation of carbon diffusion in iron, Physical Review B, Vol. 85, (2012), pp. 064303-1-7
- ⑤ 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、日本金属学会誌, 査読有, Vol. 60、(2011)、 pp. 71-78.
- ⑥ Y. J. Wang, A. Ishii and S.Ogata, Transition of creep mechanism in

nanocrystalline metals, Physical Review B, Vol. 84, (2011), pp. 224102-1-7

〔学会発表〕(計 12 件)

- ① 尾方成信、格子欠陥における原子拡散と材料変形のモデリング、日本物理学会春期大会(招待講演)、2013.3.26、広島大学
- ② S.Ogata, Atomistic modeling of diffusion dynamics, Nuclear Materials Conference (NuMat2012) (招待講演), 2012.10.21, 大阪国際交流センター
- ③ S.Ogata, H.Kimizuka, Y.J.Wang, G.J.Gao, A.Ishii, Atomistic modeling of diffusion dynamics in metals, 6th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2012) (基調講演), 2012.10.15, シンガポール
- ④ S.Ogata, H.Kimizuka, A.Ishii, Modeling and simulation of diffusion behavior of hydrogen and carbon in iron, The 3rd International Symposium on Steel Science, (ISSS2012) (招待講演), 2012.5.27, 関西セミナーハウス
- ⑤ A. Ishii, S. Ogata, and H. Kimizuka, Adaptive boosting method for accelerated molecular dynamics, International Symposium on Atomistic Modelling for Mechanics and Multiphysics of Materials, 2011.7.22, 東京大学
- ⑥ 石井明男、尾方成信、君塚肇、Adaptive Boost 法の開発とそれを用いた鉄中炭素拡散の解析【MD 賞受賞】、材料学会第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム、2011.5.23、大阪大学
- ⑦ 林雄一郎、石井明男、尾方成信、君塚肇、レプリカ交換分子動力学法による鉄中炭素拡散現象、材料学会第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム、2011.5.23、大阪大学
- ⑧ 尾方成信、材料のナノスケール力学とその数値解析、関西大学第 15 回先端技術シンポジウム(招待講演)、2011.1.13、関西大学
- ⑨ S.Ogata, Dynamic Process in Nanoscale Systems, Seminar of School of Mater. Sci. and Eng., Shanghai Jiaotong Univ. (招待講演), 2010.9.29, 中国・上海
- ⑩ S.Ogata, Modeling of Slow Dynamics in Nanoscale System, IUMRS-ICA2010 IUMRS 11<sup>th</sup> Int. Conf. in Asia (招待講演), 2010.9.26, 中国・青島
- ⑪ S.Ogata, Modeling of Dynamic Process in Nanoscale Systems, Int. Symp. on Multi-scale Modeling and Simulation of Materials (招待講演), 2010.7.10、中国・瀋陽
- 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(招待講演)、2010.7.26、東北大学金属材料研究所

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

尾方 成信 (SHIGENOBU OGATA)  
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 (HAJIME KIMIZUKA)  
大阪大学・基礎工学研究科・准教授  
研究者番号：60467511