

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 17 日現在

機関番号：13301

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2012～2014

課題番号：24560091

研究課題名(和文) ナノスケール複合材料中の格子欠陥力学場解析

研究課題名(英文) Mechanical field analysis of lattice defects in nanoscale composite materials

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

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,900,000円

研究成果の概要(和文)：ナノスケール複合材料中の格子欠陥の非線形力学場を準連続体法と原子モデルを用いて検討した。まず、転位の力学場を解析解を用いずに表現できる準連続体法の開発を行った。それを用いて転位の自己エネルギーの粒径依存性と粒界の剛性率の関係を弾性論的に検討した。つぎに、原子モデルを用いて、粒界構造を直接表現し、粒界内の原子移動が格子転位の力学場を遮蔽できることが明らかになった。さらに、異相界面の結合力の強さが積層構造体の力学特性に与える影響を検討し、界面に侵入した格子転位の芯構造の分解は界面結合力に強く影響を受け、結果的に積層構造体の延性特性に対して界面結合力は重要な設計因子であることを見出した。

研究成果の概要(英文)：Non-linear mechanical fields around lattice defects in nano-scale composite materials was investigated by using the quasicontinuum (QC) and atomic simulations. First, the relationship between the grain size dependence of dislocation self-energy and the shear modulus of grain boundary (GB) regions was examined based on an elastic approach by the newly developed QC model. Next, GB structures were directly expressed by using atomic models and it was found that atomic shuffling in GB regions could shield the mechanical field caused by lattice dislocations. Furthermore, the influence of hetero-interface strength on the mechanical properties of multilayered composites was investigated by using atomic simulations. The decomposition of the lattice dislocation core structure at the hetero-interface is strongly affected by the interface strength; hence, the hetero-interface strength is one of the important factors to design an excellent material with high strength and high ductility.

研究分野：計算材料力学

キーワード：格子欠陥 計算力学 準連続体法 転位 粒界 原子シミュレーション 複合材料

1. 研究開始当初の背景

近年、製造技術の飛躍的な向上により、ナノスケールの寸法を有する構造を組み合わせた材料が盛んに開発されている。例えば、高強度・脆性的であるセメンタイトと低強度・延性的であるフェライトの層状組織からなる微細パーライトは、近年、フェライト層の間隔は 20 nm から 100 nm まで小さくなり、セメンタイト層は数ナノメートルの寸法に達している。このような微細パーライト鋼は、従来トレードオフとして考えられてきた強度と延性が両立できる材料として期待されている。また、単元系の多結晶金属においても結晶粒径を数 100 nm 以下まで微細化することが可能となっており、粒界の幅を 1 nm 程度と考えたとき、粒界の体積率の影響を決して無視することはできない。そして超微細粒材は、強度と靱性が両立できる材料として期待されている。これらの材料が示す特異な力学特性は、これまでに確立されてきた理論体系の延長上では表現することが難しく、まだ変形機構が明らかになっていないのが現状である。その理由の一つとして、このような材料は、ナノスケールの寸法を有する構造を組み合わせた「ナノスケール複合材料」であり、その塑性変形を担う格子欠陥の力学場を正しく理解することが困難であることが考えられる。つまり、ナノスケール複合材料中の個々の欠陥の力学場を正しく評価することが、この種の材料の力学挙動を理解するまず第 1 歩となると考えられる。

2. 研究の目的

本研究では、準連続体法と原子モデルを用いて、ナノスケール複合材料の格子欠陥の非線形力学場を正しく理解することが第 1 の目的である。その後、ナノスケール構造材料として、微細パーライトや超微細粒材中の転位の力学場を解析し、ナノスケール複合材料中に転位が存在することでどの程度単相材中に存在する場合に比べて影響を受けているかを定量的に評価し、このような材料が示す特異な力学特性との関係性を検討することが第 2 の目的である。

3. 研究の方法

研究の第 1 の目的を検討するために、超微細粒材の転位の自己エネルギーに対する粒界の影響を、準連続体 (QC) 法と原子モデルを用いて検討する。

(1) QC モデルによる転位の自己エネルギーの粒径依存性の検討

①QC 法は、連続体領域の力学特性を原子間ポテンシャルを用いて表現するため、原子シミュレーションと全く同じ弾性異方性や非線形弾性特性を扱うことができる。シミュレーションのセルサイズは 200 nm×200 nm とする。モデル中央の結晶中に刃状転位を導入し、2 つ目の転位は任意の粒界上に設置する。本解析では図 1 に示すように問題 1 : 1 つの転

位 α のみ粒内中央に設置、問題 2 : 粒内中央の転位 α と同すべり面上の粒界に設置した転位 β 、問題 3 : 粒内中央の転位 α と平行なすべり面上で垂直な粒界の位置に設置した転位 γ の 3 種類の設置条件でシミュレーションを行う。表 1 に結晶料理期と粒界領域の材料特性を示す。粒界は凝集エネルギー E_c 、弾性定数 C_{11} 、 $C_{12} = C_{44}$ を変更した 6 つのモデルを用いる。粒界の剛性率は GB1 から GB6 の順に小さくなる。ただし、界面近傍で生じるミスフィットひずみを無視するために格子定数 a_0 は一定とする。問題 1 により格子転位の力学場に対する粒界の影響を検討し、問題 2, 3 により格子転位と粒界転位の弾性相互作用を検討する。そのため、問題 1 については、GB1 から GB6 を適用し、問題 2 については、結晶と同じ弾性定数の GB1 のみを適用する。

表 1 : 材料特性

	E_c eV	C_{11} GPa	$C_{12} = C_{44}$ GPa	a_0 nm
Crystal	-1.57	206.6	68.9	0.2493
GB1	-1.57	206.6	68.9	0.2493
GB2	-1.49	155.6	51.9	0.2493
GB3	-1.32	114.7	38.2	0.2493
GB4	-1.02	80.6	28.9	0.2493
GB5	-0.21	36.0	12.0	0.2493
GB6	0	0	0	0.2493

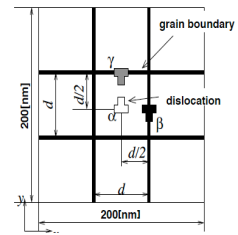


図 1 : 解析モデル

②QC モデルを用いて転位の自己エネルギーを評価する方法について述べる。系全体のエネルギーを E_{all} 、転位芯を含む要素のエネルギーを E_{core} 、無負荷時の結晶の凝集エネルギーを E_c^{cr} 、粒界領域の凝集エネルギーを E_c^{gb} 、シミュレーションモデルの厚さを a_0 とすると 1 つ当たりの転位の自己エネルギー E_{self}^{QC} を求めることができる。問題 1 のとき $N=1$ 、問題 2, 3 のとき $N=2$ とする。

$$E_{self}^{QC} = \frac{(E_{all} - E_{core}) - (E_c^{cr} + E_c^{gb})}{Na_0} \quad (1)$$

つぎに、各転位の自己エネルギーと弾性相互作用エネルギーを、転位論の理論式を用いて計算し、その全エネルギーを各転位に等分配することで、複数転位が存在する場合の転位の自己エネルギーと見なしてみる。問題 2, 3 においては、自己エネルギーと弾性相互作用エネルギーの影響範囲 R_0 は粒界に影響を受けないと考え、粒径に比べて十分大きく取る。

問題 1 : 転位 α から粒界までの距離 $d/2$ を転位の自己エネルギーの積分範囲 R と考える。

$$E_{self}^1 = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_0} = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{d}{2r_0} \quad (2)$$

問題 2 : 転位 α と β の自己エネルギーと弾性相互作用エネルギーの和を 2 で割る。

$$E_{self}^2 = E_{self}^\alpha + E_{self}^\beta + E_{int}^{\alpha\beta} = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{d}{2r_0} \quad (3)$$

問題 3 : 転位 α と γ の自己エネルギーと弾性相互作用エネルギーの和を 2 で割る.

$$E_{\text{self}}^3 = E_{\text{self}}^{\alpha} + E_{\text{self}}^{\gamma} + E_{\text{int}}^{\alpha\gamma} = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \left\{ \ln \left(\frac{R_0(d/2)}{\sqrt{R_0^2 + (d/2)^2} r_0} \right) - \frac{(d/2)^2}{R_0^2 + (d/2)^2} + 1 \right\} \quad (4)$$

(2) 原子モデルによる格子転位の力学場に対する粒界の影響

① 解析対象はアルミニウムとし、原子間ポテンシャルとして Mishin らの多体ポテンシャル (原子埋め込み法) を用いる. 転位の自己エネルギーに対する粒界の影響を検討するため、以下の 4 つのモデルを考える (図 2 参照).

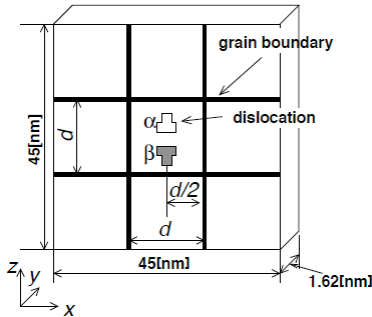


図 2 : 原子モデルの解析モデル

- model 1 : 単結晶モデル (転位対なし)
- model 2 : 単結晶モデル (転位対あり)
- model 3 : 多結晶モデル (転位対なし)
- model 4 : 多結晶モデル (転位対あり)

全てのモデルの y 軸方向は $[100]$ とし、全方向に周期境界条件を適用する. モデルの寸法は、 $l_x = l_z = 45 \text{ nm}$ 、 $l_y = 1.62 \text{ nm}$ である. model 1 は完全結晶であり、model 2 は単結晶中に刃状転位対を 1 つ含んでいる. この 2 つのモデルより、単結晶中の転位の自己エネルギーを評価する. 多結晶モデルは 9 つの結晶粒から構成されており、転位対を導入する中央の結晶粒は単結晶モデルと同じ結晶方位とし、その他の結晶粒の方位はランダムに設定したものを使用する. まず転位対を含まない多結晶モデルを 500 K で緩和計算を行い、粒界構造を熱的平衡状態に近づける. その後、0.1 K まで冷却する. この状態を model 3 と呼ぶ. また、model 3 に対して中央の粒に転位対を導入した状態を model 4 と呼ぶ. なお、本研究では転位芯を含む半径 0.5 nm の領域を取り除き、転位がすべり運動を生じさせないようにする.

転位の力学場に対する粒界の影響を確認するために、model 3 と model 4 に対して、0.1 K、100 K、200 K、300 K、400 K、500 K の 6 種類の解析温度で構造緩和を行ない、その後、0.1 K に急冷し、転位の自己エネルギーを算出する. 今回、転位の自己エネルギーに対して、粒界領域のエネルギーの影響を除外するために、3 nm の幅の粒界を含む領域を取

り除き、転位の自己エネルギーを算出する.

4. 研究成果

(1) QC モデルによる転位の自己エネルギーの粒径依存性の検討

① 格子転位の力学場に対する粒界の影響

まず、問題 1 について検討する. 図 3(a)~(c) に粒径 80 nm のときの α 転位のせん断応力場に対する粒界の影響を示す. これより、粒界の弾性定数が小さくなるほど α 転位の応力場は影響を受け、収縮していることが確認できる. このとき、式(1)で求めた α 転位の自己エネルギーを図 4 に示す. 粒界の弾性定数が結晶と等しい GB1 では、自己エネルギーは粒径依存性を示していないことがわかり、粒界の弾性定数が小さくなるほど、式(2)に示す粒径依存性に近づくことが確認できる. 特に、粒界の弾性定数をゼロとした GB6 では、式(2)に一致している. しかしながら、金属材料中の粒界の弾性定数は今回検討したような小さな値を持つことはないため、粒界が格子転位の応力場に強くは影響しないことが考えられる. 今回は QC 法を用いたため、粒界領域は弾性変形のみをする材料となり、粒界領域の局所的な塑性変形による応力緩和は考慮できていない. そのため、粒界における応力緩和を考慮する場合の検討が必要である.

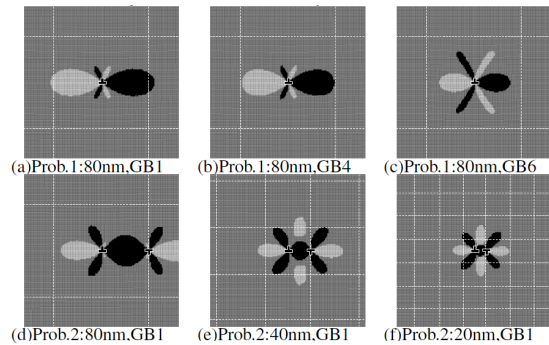


図 3 : 粒界近傍の格子転位のせん断応力

② 格子転位と粒界転位の弾性相互作用

つぎに、問題 2, 3 について検討する. 問題 2 における α と β 転位のせん断応力場を図 3(d)~(f) に示す. ここでは、粒界の弾性定数は結晶と同じもの (GB1) として考える. 粒径が小さくなるほど転位対の応力場の範囲が狭くなっていることが確認できる. このときの QC モデルで得られる α 転位の見かけの自己エネルギーと、式(3)と(4)で評価できる見かけの自己エネルギーを図 4 に示す. 問題 2 と問題 3 のいずれにおいても理論式と同じ傾きを確認でき、自己エネルギーの粒径依存性が確認できる. このことより、超微細粒材料の場合、粒内の孤立転位は、その対となる粒界転位と弾性相互作用することで、自己エネルギーが粒径依存性を示すことを考えることができる.

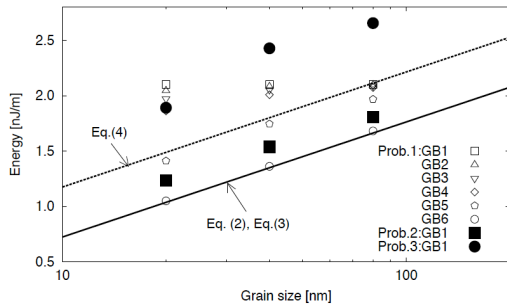


図 4: 転位の自己エネルギーの粒径依存性

(2)原子モデルによる格子転位の力学場に対する粒界の影響

図 5(a)(d)に単結晶中の転位対近傍の τ_{xz} と σ_x の応力場を示し、図 5(b)(e)に 0.1 K、図 5(c)(f)に 500 K で緩和した多結晶中の各応力場を示す。ここで、多結晶モデルでは、転位の応力場を理解しやすくするために、model 4 から model 3 の応力場を差し引いて示している。緩和温度が高くなるほど、粒界領域で応力場が確認できるが、これは、転位を含んでいない model 3 と含んでいる model 4 の粒界構造が緩和計算により変化したためである。単結晶モデルに比べて多結晶モデルでは、粒界領域を境に転位の応力場が小さくなっていることが分かる。つまり、粒界の存在が転位の力学場に影響を与えていることを表している。また、多結晶中の格子転位の応力場の形状が単結晶中に比べて、対称的ではないことが確認できる。これは、格子転位の応力場は、個々の粒界構造に影響を受けていることを示唆している。

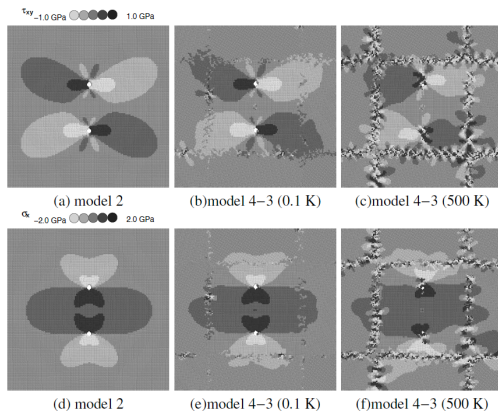


図 5: 原子モデルによる転位近傍の力学場

図 6 に EP の温度依存性を示す。まず、0.1 K では ES よりも EP の方が転位の自己エネルギーが高いことが確認できる。これは、粒界領域の欠陥エネルギーの寄与が取り除けていないことに起因している（つまり、粒界の影響領域を 3 nm と設定したが、粒界の応力場はそれ以上の影響範囲を持っていることを意味している）。100 K から 300 K では転位の自己エネルギーは、ほぼ一定値を示し、その後、400 K、500 K で大きく減少していること

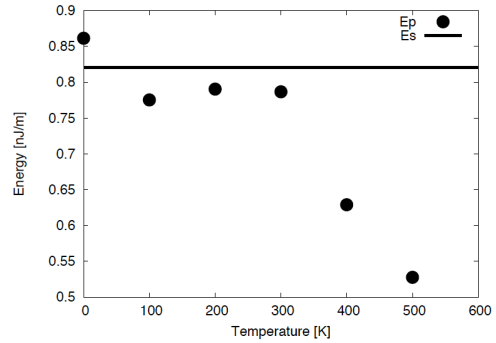


図 6: 転位の自己エネルギーの温度依存性

が確認できる。今回は、各温度の緩和時間が 100 ps と短いため、粒界領域の緩和機構が生じることが困難であると推測できるが、緩和温度の上昇に伴い、転位の自己エネルギーが減少していることが確認できる。

図 7 に各温度における、解析モデルの全体のエネルギー値と、その値の内訳（結晶領域と粒界領域）を示す。つまり、粒内領域のエネルギーの温度依存性は、図 6 の結果と同じ傾向になる。ここでは、0.1 K の結果を基準値とし、0.1 K の結果からの差を表示している。まず系全体のエネルギーに注目すると、温度の上昇とともに減少していることが確認できる。ただし、500 K では 400 K に比べるとエネルギーが上昇していることに注意が必要である。つぎに、この系全体のエネルギーの内訳を確認する。300 K までは、粒界領域のエネルギーは大きく減少していることが確認できるが、粒内のエネルギー変化はほとんど確認できない。このことは、粒界は緩和過程において構造緩和が生じているが、この緩和現象は、粒内の転位の力学場には強く影響を与えていないことを意味している。これは、図 5(b)(e)の力学場が、図 5(a)(d)の力学場と違いが小さいことから確認できる。これに対して、緩和温度が 400 K、500 K の場合には、粒界領域のエネルギー減少量が低下していることが確認できる。このとき、粒内領域のエネルギーは明確に減少している。

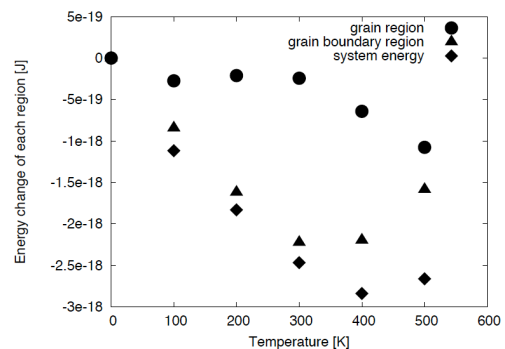


図 7: 各領域エネルギーの温度依存性

系全体のエネルギーは、ほとんど変化していないことから、システム中のエネルギー分布が、粒内領域から粒界領域にシフトし、結果として、転位の自己エネルギーは減少したと理解できる。

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 5 件)

- ① T. Shimokawa and T. Tsuboi, Atomic-scale intergranular crack-tip plasticity in tilt grain boundaries acting as an effective dislocation source, *Acta Materialia*, 査読有, Vol. 87, 2015, 233-247
DOI: 10.1016/j.actamat.2015.01.002
- ② T. Shimokawa and M. Okabe, Atomic simulation of the role of the interface on mechanical properties of pearlite steel, *Proceedings of the 4th International Symposium on Steel Science(ISSS2014)*, 査読有, Vol. 4, 2015, 69-78
<http://www.steelscience.org>
- ③ T. Shimokawa and S. Kitada, Dislocation Multiplication from the Frank-Read Source in Atomic Models, *Materials Transactions*, 査読有, Vol. 55, 2014, 58-63
<http://www.jim.or.jp/journal/e/55/01/58.html>
- ④ T. Shimokawa, T. Oguro, M. Tanaka, K. Higashida and T. Ohashi, A Multiscale Approach for the Deformation Mechanism in Pearlite Microstructure: Atomistic Study of the Role of the Heterointerface on Ductility, *Materials Science and Engineering A*, 査読有, Vol. 598, 2014, 68-76
DOI: 10.1016/j.msea.2013.12.100
- ⑤ 下川智嗣, 転位と粒界の相互作用に関する分子動力学解析, ふえらむ, 査読有, 第 19 巻, 2014, 751-757
<http://www.isij.or.jp/fournal/ferrum>

[学会発表] (計 20 件)

- ① 岡部雅史, 下川智嗣, フェライト・セメンタイト間の界面転位と応力分配によるパーライト鋼の力学特性への影響: 原子モデルによる検討, 日本機械学会北陸信越支部第 52 期総会・講演会, 2015 年 3 月 7 日, 新潟工科大学, 柏崎市, 新潟県
- ② 下川智嗣, 粒間き裂における回位の遮蔽効果, 日本金属学会 2014 年秋期講演大

会, 2014 年 11 月 29 日, 名古屋大学, 名古屋市, 愛知県

- ③ 森貴志, 下川智嗣 他, 複合組織材料の力学特性に対する整合・半整合界面の影響, 日本機械学会第 27 回計算力学講演会, 2014 年 11 月 23 日, 岩手大学, 盛岡市, 岩手県
- ④ 岡部雅史, 下川智嗣 他, 原子シミュレーションによるフェライト・セメンタイト異相界面近傍の塑性変形の検討, 日本機械学会第 27 回計算力学講演会, 2014 年 11 月 23 日, 岩手大学, 盛岡市, 岩手県
- ⑤ T. Shimokawa, Atomic simulation of the role of the interface on mechanical properties of pearlite steel, *The 4th International Symposium on Steel Science*, 2014 年 11 月 3 日, 関西セミナーハウス, 京都市, 京都府
- ⑥ 下川智嗣, パーライト鋼の力学特性に対する異種界面の役割: 原子シミュレーションによる検討, *ISSS プレシンポジウム*, 2014 年 9 月 24 日, 名古屋大学, 名古屋, 愛知
- ⑦ 下川智嗣, 原子シミュレーションによるナノスケール構造体の力学特性解析, 企業研究会 CAMM フォーラム, 2014 年 6 月 6 日, 渋谷区, 東京都
- ⑧ 下川智嗣, 粒内・粒界転位源の臨界応力に関する一考察: 非すべり応力依存性, 日本材料学会第 19 回分子動力学シンポジウム, 2014 年 5 月 16 日, 福岡大学, 福岡市, 福岡県
- ⑨ 下川智嗣, 積層構造体の延性特性に対する異相界面の役割, 日本機械学会北陸信越支部第 51 期総会・講演会, 2014 年 3 月 8 日, 富山県立大学, 射水市, 富山県
- ⑩ はの木澤亮, 下川智嗣, 格子転位の力学場に対する粒界の影響-原子モデルによる検討-, 日本機械学会第 26 回計算力学講演会, 2013 年 11 月 2 日, 佐賀大学, 佐賀市, 佐賀県
- ⑪ T. Shimokawa, et al., A multiscale approach for investigation of the ductility of pearlitic steel, *KIM-JIM Symposium*, 2013 年 9 月 16 日, Kanazawa University, Japan
- ⑫ T. Shimokawa, Atomic Simulation of Pressure Dependence of Intragranular and Intergranular Dislocation Source

Operations, International Symposium on Strength of Fine Grained Materials – 60 years of Hall-Petch, 2013年7月16日, SANJO Conference Hall, The university of Tokyo, Japan

- ⑬ T. Shimokawa, Influence of Interfacial Mechanical Properties on Elongation of Multilayered Composite Metals, 13th International Conference on Fracture, 2013年6月16日, Beijing, China
- ⑭ 岡部雅史, 下川智嗣 他, 原子モデルによるフェライト-セメンタイト異相界面構造の解析, 日本機械学会北陸信越支部学生会第42回学生員卒業研究発表講演会, 2013年3月8日, 福井大学, 福井市, 福井県
- ⑮ 宮木智也, 下川智嗣 他, 分子動力学法を用いたナノスケール構造体の変形メカニズム, 日本機械学会北陸信越支部学生会第42回学生員卒業研究発表講演会, 2013年3月8日, 福井大学, 福井市, 福井県
- ⑯ T. Shimokawa, et al., Atomic Simulations of Mechanical Properties of Multilayered Composites with Brittle and Ductile Phases, ICCM2012, 2012年11月27日, Gold Coast, Australia.
- ⑰ はの木澤亮, 下川智嗣 他, 転位の自己エネルギーに対する粒界の影響, 日本機械学会第25回計算力学講演会, 2012年10月6日, 神戸大学, 神戸市, 兵庫県
- ⑱ 小黒拓真, 下川智嗣 他, 延性脆性積層複合材の力学特性に対する積層方向依存性, 日本機械学会第25回計算力学講演会, 2012年10月6日, 神戸大学, 神戸市, 兵庫県
- ⑲ はの木澤亮, 下川智嗣 他, 転位の自己エネルギーの粒径依存性に関する一考察, 日本材料学会分子動力学シンポジウム, 2012年6月5日, 東京大学生産技術研究所, 目黒区, 東京都
- ⑳ 小黒拓真, 下川智嗣 他, 延性脆性積層構造体の力学特性に関する研究, 日本材料学会分子動力学シンポジウム, 2012年6月5日, 東京大学生産技術研究所, 目黒区, 東京都

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

○出願状況(計 0 件)

○取得状況(計 0 件)

〔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