

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 5 日現在

機関番号：14401

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2013～2014

課題番号：25630266

研究課題名(和文) ゲージ理論を用いた転位組織形成機構の解明

研究課題名(英文) Gauge theoretical analysis on the formation of dislocation microstructure

研究代表者

垂水 竜一 (Tarumi, Ryuichi)

大阪大学・工学(系)研究科(研究院)・准教授

研究者番号：30362643

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：結晶性金属材料の塑性変形は転位の運動により担われるが、その後期過程で現れる転位組織の形成機構は未だ不明である。本研究では格子欠陥のゲージ理論とモンテカルロ法を併用することでこの形成過程を解析した。その結果、らせん転位組織には異方的なパターン形成が認められ、転位群は特定の安定配置を取る傾向が確認された。これに対して、同一条件下で古典転位論に基づいたシミュレーションでは多くの転位は対消滅し、特定のパターンが形成されることはなかった。この結果は、転位芯におけるミクロな応力場が、転位群によるパターン形成というマクロな転位組織にまで、マルチスケールに影響を与えることを意味している。

研究成果の概要(英文)：In this study, we investigated the formation of dislocation microstructure on the basis of gauge theory of dislocation. Stress field around a dislocation is derived using T(3) translational gauge theory. We also evaluated Peach-Koehler force as well as the corresponding potential in an analytical form. Numerical analysis based on the Monte Carlo method revealed that dislocations, which interact via the gauge theory, form dislocation microstructure as a metastable state. On the other hand, however, dislocations interacting via classical theory did not form any microstructure under the same simulation condition. This result can be understood as a realization of multi-scale phenomena. That is, the microscopic stress field around a dislocation core affect the formation of macroscopic dislocation microstructure.

研究分野：弾性理論、固体力学、材料科学

キーワード：転位組織 ゲージ理論 応力場 モンテカルロ法

1. 研究開始当初の背景

結晶性金属材料の塑性変形は、主として転位の運動によって担われている。通常、塑性変形の初期過程では転位はほぼ単独で運動するが、転位密度が急増する塑性変形の中・後期過程に入ると、その運動は徐々に隣接転位間の相互作用を介した集団的な形態へと変化し、やがて転位組織の形成へと繋がっていく。こうした転位組織の形成過程は金属材料の塑性変形過程そのものであり、したがってその理解と制御は構造用金属材料の設計上極めて重要な意味を持つ。そのため、転位組織の理論的な予測問題は材料科学分野における主要研究課題の一つである。ところが、従来の古典転位論では隣接転位間の相互作用を取り扱うことができず（転位芯における応力発散のため）、また MD 法では計算可能な時・空間スケールが不足する。そのため、この問題は現在においても解決されていない材料科学の難題である。

材料科学分野におけるこうした停滞の一方で、応用数学分野では格子欠陥のゲージ理論に関する研究が進められ、近年になってその解析解が導出された。驚くべきことに、ゲージ理論が導く応力場は転位芯においても連続で（図 1 参照）、その学術的意味は徐々に理解され始めている。ところが、我が国の材料科学分野ではこの数学的成果は十分には認識すらされておらず、その応用研究に至ってはこれまでのところ見当たらない。

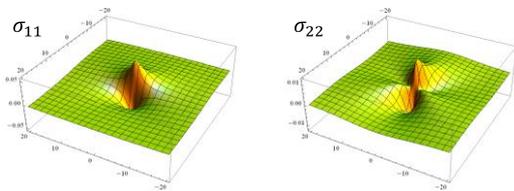


図 1. ゲージ理論によって導かれた刃状転位芯近傍の応力場

2. 研究の目的

こうした学術的な背景を踏まえて、本研究では材料科学と応用数学の協働により、ゲージ理論に基づいて転位組織の予測を図ることを研究目的とする。具体的には、次の二点の達成を研究目標とする。

- (i) ゲージ理論に基づいた転位間相互作用ピーチ・ケラーポテンシャル場を導出する
- (ii) (i)をモンテカルロ計算へ組み込み、転位組織の形成過程を二次元問題としてミュレートする

先述のように、ゲージ理論によって導かれる転位の応力場は転位芯においても連続で、古典転位論に見られる非物理的な発散現象は生じない。そのため、ゲージ理論を用いることで転位芯に対する人為的な介入なしに、塑性変形によって生じる転位組織の形成過程を解析することが可能となる。

3. 研究の方法

本研究ではヤン・ミルズ型の並進ゲージ理論を用いる。これは変位の局所並進ゲージ変換

$$u_i(x) \rightarrow u_i(x) + \tau_i(x)$$

についてゲージ共変微分を $\beta_{ij} := u_{i,j} + \phi_{ij}$ と定義する minimal replacement と、エネルギー汎関数を

$$I[\beta_{ij}] = \int (W_{el} + W_{dis} - W_{bg}) dx$$

と定める minimal coupling により構成される ($W_{el} = \sigma_{ij}\beta_{ij}/2$ は転位の弾性ひずみエネルギー密度、 $W_{dis} = H_{ijkl}T_{ijkl}/4$ は自己エネルギー密度、 W_{bg} は古典転位論による応力場とゲージ共変微分 β_{ij} の積として定義される null Lagrangian で境界条件を与える)。ここで線形構成関係式を用いれば、全エネルギー汎関数 $I[\beta_{ij}]$ のオイラー・ラグランジュ方程式は非同次ヘルムホルツ方程式となり、これを応力関数法で解くことで、上記の全変数が解析的に求められる。また得られた σ_{ij} と T_{ijk} を全空間で畳み込み積分すると、転位間相互作用のピーチ・ケラー力 F_i を求めることができる。こうして得られたピーチ・ケラー力 F_i を積分することで転位間に働く弾性的相互作用エネルギーを決定することができ、これを用いることでモンテカルロ法等の計算力学的手法によって転位の安定組織をシミュレートすることができる。

4. 研究成果

図 2 にモンテカルロ法によって得られたらせん転位組織を示す。図は系の温度を変えて得られたシミュレーション結果を表しているが、シミュレーション後の安定配置では直線状のパターン形成の確認が認められた。また、温度が高温になると同符号の転位が互いに集合する傾向も確認された。

次に、温度を $k_B T / U_0^{PK} = 2$ で固定し、転位芯の幅 l_t を仮想的に変化させながら計算することで得られた転位組織を図 3 に示す。この結果を見ると、 $l_t = 3$ の条件下では特徴的なストライプ状組織の形成が確認されたが、転位の応力場が従来の古典転位論に近づく $l_t = 20$ の条件下では特定の転位組織形成は認められず、転位は対消滅を繰り返して消失した。この結果は、転位芯の応力場というミクロな力学特性が、転位組織の形成というマクロな物理現象に対して、マルチスケールに影響を及ぼすことを意味している。

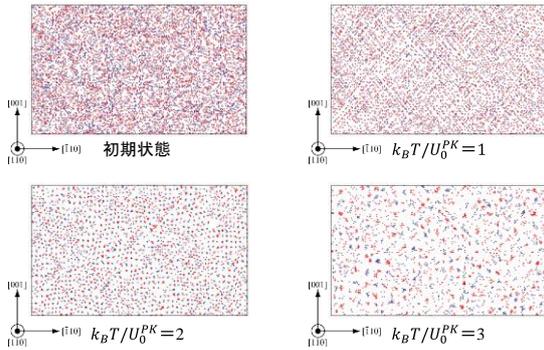


図 2. モンテカルロ法によって得られたらせん転位組織. $k_B T / U_0^{PK}$ は規格化温度を表しており, この値が大きいほど高温でのシミュレーションが行われたことを意味している.

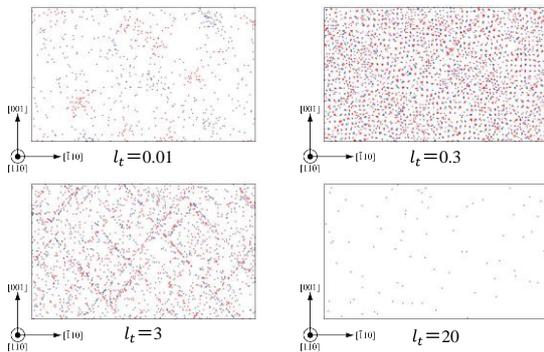


図 3. モンテカルロ法によって得られたらせん転位組織. l_t は転位芯の幅の広さを表しており, l_t が大きくなると (転位芯が小さく古典弾性理論に近づく), 転位は分散する傾向にある.

研究目標に示した通り, 本研究の主目的はゲージ理論に基づいた転位組織形成過程の解析であるが, この解析はモンテカルロ法を用いることで実行可能となり, 当初の目標は達成されたが, この研究を進める過程で, 転位の応力場を応用することで, 転位と結晶粒界の相互作用解析が可能であることが明らかとなった. 結晶粒界は金属材料の強度を向上させるための主たる要因の一つであり, その強化機構の一部をゲージ理論を用いることで説明できれば, 構造用金属材料の研究開発において有益な知見をもたらすものと考えられる. そこで本研究では転位組織の解析に加えて, 転位と結晶粒界の相互作用解析も進めたので, その結果についても合わせて報告する.

解析対象は, 図 4 に示すように二次元平面内に平行に間隔 d で存在する一組の対称傾角粒界対とし, これを結晶粒径 d の結晶粒とみなす. 各粒界はそれぞれ上下方向へ等間隔 h で整列した 100 個の刃状転位列によってモデル化した. この転位壁 (結晶粒界) を挟んだ結晶粒間の方位差は $\theta = \tan^{-1}(b/h)$ と表される (図 5 参照). このようにして作成した粒界による応力場は, 転位壁を構成する 200 個の刃状転位による応力場の重ね合わせで近似した.

一方, 粒内の中心にも刃状転位を 1 つ配置し, 粒界との相互作用をゲージ理論に基づいて導出した Peach-Koehler 力 $F_n = \sigma_{ij} \epsilon_{jmn} b_i \xi_m$ によって評価した. ここで b_i と ξ_m はそれぞれ粒内転位の Burgers ベクトルと転位線方向ベクトルであり, 本研究では $b_i = (b, 0, 0)$ と $\xi_i = (0, 0, 1)$ とした.

結晶粒界が刃状転位の運動に与える影響を解析するため, 得られた Peach-Koehler 力を結晶粒中心から粒界直上まですべり面に沿って線積分し, これを積分長と粒界長で規格化した転位運動の過剰仕事率 ΔW を数値積分によって評価した.

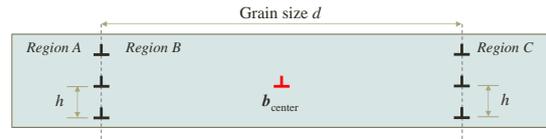


図 4. 結晶粒界モデル

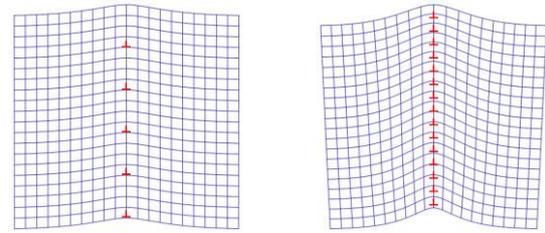


図 5. ゲージ理論によって求められた刃状転位列による小傾角粒界

図 6 に角度 $\theta = 20^\circ$ において得られた過剰仕事率 ΔW の計算結果を示す. この解析では $d \approx 10^2 b \sim 10^7 b$ の幅広いオーダーのマルチスケールな解析を行うことができた. $d > 10^3 b$ の領域では, d の減少に伴って過剰仕事率 ΔW は増加することがわかる. これは結晶粒の微細化に伴って転位の運動が困難になることを示している. しかしながら, $d < 10^3 b$ の領域では, d の減少に伴って過剰仕事率 ΔW が減少することがわかる. これは結晶粒の微細化に伴って転位の運動が逆に容易になることを示している.

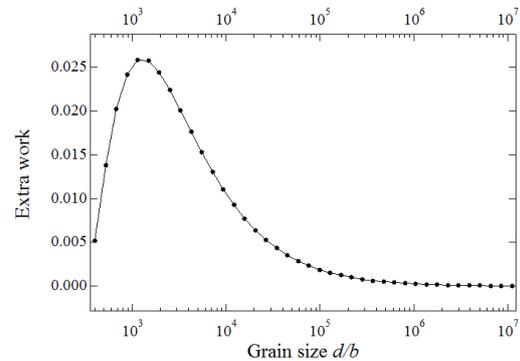


図 6. 過剰仕事率 ΔW の結晶粒径依存性

この結果は次のように解釈することができる. 今回のモデルでは, 対称傾角粒界対を構

成する左右の転位壁は同符号の b_i を持つ刃状転位列により構成されている。この場合、粒内転位を一方の結晶粒界まで移動させるとエネルギー増加が生じるが、この運動は他方の結晶粒界に対しては相互作用エネルギーの減少を引き起こしている。結晶粒径が大きい場合には後者の効果が無視できるが、結晶粒径の微細化に伴って結晶粒界が互いに接近すると、こうした効果が顕在化する。また、過剰仕事率 ΔW は $d \approx 10^3 b$ 程度の臨界粒径で最大となるようなピークを持つことがわかる。

図7に角度 $\theta = 2 \sim 20^\circ$ において得られた過剰仕事量 ΔW の結晶粒依存性を示す。この図の過剰仕事量 ΔW は粒径の $-1/2$ 乗に対してプロットされており、全ての回転角 θ において過剰仕事率 ΔW はピークを持つことがわかる。また、このピークを挟んでホール・ペッチ則（HP則）とその逆則に極めて類似した傾向が確認される。また、 θ の増加に伴って過剰仕事率 ΔW は増加傾向にあり、臨界粒径も θ 依存性を持っている。一方、比較のために古典転位論を用いて同様の解析を行った場合には、全領域において ΔW は横軸の増加とともに単調に増加することが明らかとなった（図8参照）。この結果からは、HP則とその逆則を同時に説明することはできない。この結果は、 ΔW が降伏点に一定の寄与を持つならば、（逆）HP則の示す定性的な振る舞いは転位のゲージ理論に基づく静力学の範囲内で表現可能であることを意味している。転位と結晶粒界の相互作用は当初の本研究の目的とは異なるものであったが、ゲージ理論に基づく解析によって得られた知見は、従来の結晶粒微細化強化機構とは異なる解釈を与える、新しい視点をもたらしている。

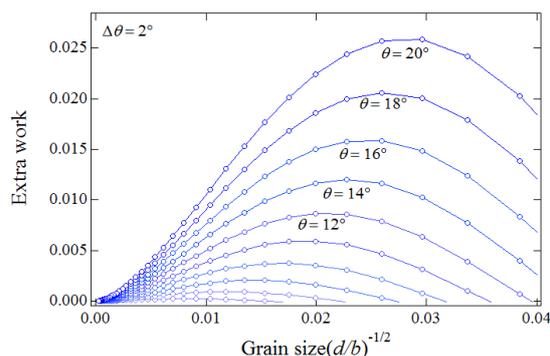


図7. 角度 $\theta = 2 \sim 20^\circ$ において得られた過剰仕事量 ΔW の結晶粒依存性（ゲージ理論）

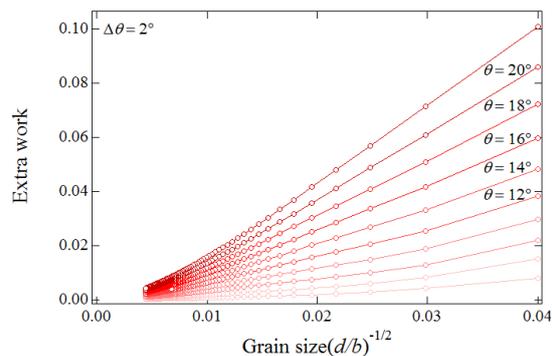


図8. 角度 $\theta = 2 \sim 20^\circ$ において得られた過剰仕事量 ΔW の結晶粒依存性（古典弾性理論）

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 1 件）

- ① マルチスケール解析のすすめ 一大阪大学 渋谷・垂水研究室—
垂水竜一, 松中 大介, 渋谷陽二
超音波 TECHNO (in press), 査読無。

〔学会発表〕（計 5 件）

- ① 稲葉 築, 垂水 竜一, 渋谷 陽二
ゲージ理論に基づく転位—粒界相互作用のマルチスケール解析
関西支部第 90 期定時総会講演会
(2015. 3. 16-17, 京都大学)
- ② 稲葉 築, 垂水 竜一, 渋谷 陽二
格子欠陥のゲージ理論に基づいた転位—粒界相互作用の評価
(日本機械学会 第 27 回計算力学講演会,
2014. 11. 22-24, 岩手大学)
- ③ 稲葉 築, 垂水 竜一, 渋谷 陽二
ゲージ理論に基づく対称傾角粒界と刃状転位の相互作用解析
日本金属学会 2014 秋期講演大会
(2014. 9. 24-26, 名古屋大学)
- ④ 本上 菜花, 垂水 竜一, 稲葉 築, 渋谷 陽二
ゲージ理論を用いた刃状転位群の安定配置解析
関西学生会平成 25 年度学生員卒業研究発表講演会
(2014. 3. 17, 大阪府立大学)
- ⑤ 垂水 竜一, 稲葉 築, 渋谷 陽二
モンテカルロ法によるゲージらせん転位群の安定組織解析
日本金属学会 2013 秋期講演大会
(2013. 9. 17-19, 金沢大学)

〔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

6. 研究組織

(1) 研究代表者

垂水 竜一 (TARUMI, Ryuichi)

大阪大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号：30362643