

令和元年6月5日現在

機関番号：32660

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K05044

研究課題名(和文) マルチスケール材料モデリングによるBCC金属の離散転位塑性解析の実現

研究課題名(英文) Development of discrete dislocation plasticity analysis of BCC metals based on multiscale materials modeling

研究代表者

高橋 昭如 (Takahashi, Akiyuki)

東京理科大学・理工学部機械工学科・准教授

研究者番号：00366444

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：原子シミュレーションである分子動力学法を用いて、BCC鉄中の格子欠陥である転位の移動速度の結晶方位と温度依存性について調べた。その結果、転位を構成する原子の配列の特徴や、その特徴と転位の移動のメカニズムの関係が明らかとなった。その関係をモデル化し、転位を直接離散化して転位の運動をシミュレートする転位動力学法に実装した。直線転位を含む結晶のせん断変形解析を実施し、本モデルによりBCC鉄に見られる温度依存性が再現可能であることを確認した。さらに、本転位動力学法をスピノダル分解した鉄-クロム合金中の転位挙動解析に応用し、鉄-クロム合金の微視的な特徴と、転位の運動に対する抵抗の関係を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究によって、金属中の格子欠陥である転位の特徴を分子動力学法による計算結果からモデル化し、そのモデルを直接転位動力学法に入力することによって、現実的な塑性変形解析が実現可能になることを示すことができた。具体的には、本研究の成果によって、BCC鉄の変形に見られる温度依存性を考慮することが可能になり、転位動力学法を用いたBCC鉄の塑性変形解析の信頼性を著しく向上させることに成功した。この成果により、今後析出物などの微視的組織と転位の相互作用に基づく材料の強化・劣化のより現実的なシミュレーションが可能となり、材料の信頼性評価や設計に対し大きく貢献することができる。

研究成果の概要(英文)：The crystal orientation and temperature dependence of dislocation velocity in BCC iron is investigated using an atomistic simulation method. The results illustrate the atomic dislocation core structure and its relationship with the dislocation velocity. The relationship is modeled to implement the information about the crystal orientation and temperature dependence of dislocation velocity into a dislocation dynamics simulation code. As a benchmark test of the developed method, a crystal model with a straight dislocation is prepared, and is subjected to a shear deformation. The resultant shear stress-strain relationship tells us that the method has a capability to account for the temperature dependence, which can be seen in BCC iron. The developed method is then applied to the numerical simulation of dislocation behavior in a spinodally decomposed Fe-Cr alloys. By the application, the relationship between the microstructure of the Fe-Cr alloy and the critical resolved shear stress.

研究分野：材料力学，材料科学，材料強度学，計算力学

キーワード：転位動力学 分子動力学 転位 モビリティ スピノダル分解

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

供用期間中に中性子の照射に晒されることによって原子炉压力容器鋼は脆化することが知られている。中性子照射による脆化では、延性脆性遷移温度が上昇し、上部棚エネルギーが低下することから、機器の健全性評価を行う上で考慮すべき重要な因子である。中性子照射による材料の長期間の供用による機械的特性の変化のメカニズムを詳細に理解することができれば、材料の使用壽命を高精度に予測することが可能になる。中性子照射脆化のメカニズム研究として、実験的研究が大きく先行する一方で、ミクロ組織と機械的特性を繋ぐメカニズムの理解は十分ではなく、マルチスケール材料モデリングに基づくアプローチが必要である。マルチスケール材料モデリングにより中性子照射脆化のメカニズムを知ることができれば、ミクロからマクロに渡る脆化のメカニズムを知ることが可能になる。このようなマルチスケール材料モデリングに基づくアプローチの実現のためには、原子炉压力容器鋼のような体心立方 (BCC) 構造を有する鉄における転位の運動・特性の異方性に関する理解が必要である。刃状およびらせん転位の運動・特性について研究が盛んに行われる一方で、その中間的な性質である混合転位の運動・特性について定量的な理解が行われていないため、信頼性のある BCC 鉄中の転位運動に基づく塑性変形解析 (離散転位塑性解析) を実施することが不可能である。

### 2. 研究の目的

本研究では、BCC 金属の例として BCC 鉄を用い、1) BCC 鉄中における混合転位の運動・特性を、分子動力学法を用いて調べ、2) その結果から転位の移動速度と分解せん断応力・温度の関係を表す式をモデル化し、3) そのモデルを転位動力学法に実装することによって BCC 金属の離散転位塑性解析を実現する。

### 3. 研究の方法

#### (1) 混合転位を含む原子モデル作成法の考案

転位のすべり面上の原子配列を分析し、任意の方向に対して原子配列の周期性を見出す一般的な方法を交換し、任意の混合転位を含む原子モデルの作成を可能にする。

#### (2) 混合転位芯の構造およびエネルギー解析

分子動力学法を用いた混合転位の安定構造解析を実施し、混合転位の転位芯の構造 (原子配列) を調べる。さらに、転位が移動するために必要なせん断応力であるパイエルス応力を測定し、各混合転位が熱的または非熱的な運動をするかについて分類する。

#### (3) 混合転位の非熱的運動の分子動力学モデリング

転位の移動速度とせん断応力および温度との関係を、分子動力学法を用いて調べる。その結果から、転位の移動速度とせん断応力の関係を各混合転位、各温度についてモデル化する。

#### (4) 混合転位の熱的運動の分子動力学モデリング

転位の熱振動によるキンク対の形成と移動によって運動する混合転位の運動のモデル化を行う。具体的には、熱的運動をする各混合転位について、キンク対の活性化エネルギーを計算する。

#### (5) 混合転位の運動モデルの転位動力学法への実装

分子動力学シミュレーションの結果を用いてモデル化した混合転位の熱的および非熱的運動における転位の移動速度とせん断応力・温度の関係を転位動力学法に実装する。転位の運動モデルを実装した転位動力学法を用いた Frank-Read 源などの転位挙動シミュレーションを通じて、転位の運動モデルの実装による BCC 鉄の転位塑性解析の精度・信頼性について検証を行う。

#### (6) 開発した離散転位塑性モデルの応用

混合転位の運動モデルを実装した転位動力学法を用い鉄-クロム合金の強度解析を実施する。スピノーダル分解による内部応力の分布を考慮することによって、濃度ゆらぎの大きさ、混合転位の種類、転位のすべり位置等をパラメータとして、各条件における転位のすべり出しに必要なせん断応力である臨界分解せん断応力 (Critical Resolved Shear Stress: CRSS) を計算する。その結果から、各パラメータが CRSS に与える影響を明らかにする。

### 4. 研究成果

#### (1) 混合転位の転位芯構造および運動特性の分子動力学解析

分子動力学法を用いて混合転位の計算機シミュレーションを実施するためには、BCC 金属の主要なすべり面である  $\{110\}$  上の原子配列に見られる周期性を見つけ出し、その周期性を用いて適切に原子を配置した原子モデルを作成することが必要である。本研究では、 $\{110\}$  上の原子配列を分析し、原子を頂点とする三角形と、その相似を考えることで、原子配列の周期性を簡便に見つけることを可能にした。この方法を用いることで、例えば y 方向に垂直な面を  $\{110\}$  とし、x 方向および z 方向に対して任意の結晶方位与えた原子モデルを作成することができる。すなわち、 $\{110\}$  上の任意の混合転位を含む原子モデルを作成することが可能となった。この方法を用いて原子モデルを作成し、多様な種類の混合転位に対して安定構造計算を実施することによ

って、それぞれの混合転位の転位芯構造とパイエルス応力を取得することに成功した。その結果、らせん転位のみではなく、その他の特定の混合転位についてパイエルス応力が非常に高いことがわかった。さらに、転位芯の構造を調べた結果、パイエルス応力が低い混合転位では、転位がジグザグ形状を有しており、転位に沿って潜在的にキンクが並んでいることがわかった。一方、パイエルス応力が高い混合転位では、潜在的なキンクは確認することができず、転位芯は直線的であることがわかった。すなわち、潜在的にキンクを有する混合転位では、キンクが常に転位上にあり、そのキンクが転位に沿って移動することによって容易に転位の運動が作り出されることがわかった。一方、潜在的にキンクを有さない混合転位では、一度の転位が移動するのではなく、1組のキンク（キンク対）が転位上に形成し、そのキンク対がそれぞれ移動することによって転位の運動が行われる。したがって、転位の運動はキンク対の形成の頻度に依存することがわかる。一般的に、キンク対の形成は、熱活性化過程として知られており、高いパイエルス応力を有する転位の運動は熱活性化運動であり、キンク対の活性化エネルギーが重要なパラメータとなる。一方で、潜在的にキンクを有する混合転位は、せん断応力によってキンクの運動が促されるため、非熱的過程として転位は移動し、転位の移動速度とせん断応力の関係により転位の運動をモデル化することが可能である。

そこで、まず非熱的運動について、せん断応力条件下にある転位の移動速度を、分子動力学法を用いて調べた。この計算は温度条件を様々に変化させ、転位の移動速度とせん断応力の関係に見られる温度依存性についても調べた。その結果、いずれの温度およびせん断応力の条件においても転位の移動速度とせん断応力の間には線形の関係が見られ、その傾き（モビリティ）の混合転位の種類および温度に対する依存性調べることによって、モデル化することが可能であることがわかった。温度が100Kの場合、転位のモビリティが急激に小さくなる混合転位があることがわかった（図1(a)）。これは、パイエルス応力が非常に高い混合転位と一致しており、特に100Kのような低温において、熱活性化運動の影響が示唆される。一方、温度を300K以上にすると、モビリティは、らせん転位からを極小としてサイン関数に近い分布を示すことがわかった（図1(b)）。この時、モビリティの急激な低下は見られず、混合転位における熱活性化運動の影響はおよそ300K以上になると無視することが可能であることがわかった。ここで得られた各温度における各混合転位のモビリティを表現する経験式を考案し、分子動力学法によって得られたモビリティに対して式中のパラメータをフィッティングした。この式は転位動力学法に入力可能であり、転位動力学法に混合転位の種類と温度の影響を入力するものである。

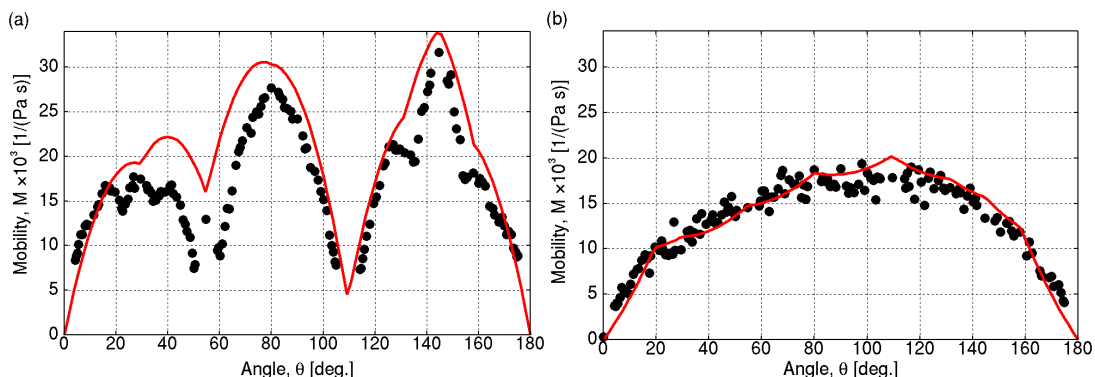


図1 (a)100K, (b)300Kの時の混合転位のモビリティの分子動力学計算結果。実線は、モデル化した式によって計算された近似曲線を示す。

一方、熱的運動であるキンク対の形成の活性化エネルギーは、Nudged Elastic Band (NEB) 法による最小エネルギー経路探索を用いて求めた。パイエルス応力が高い混合転位の移動前後の原子モデルをそれぞれ構造緩和し、それらの間のキンク対の形成と移動の過程を計算によって調べた。その結果、らせん転位のキンク対の形成の活性化エネルギーが飛躍的に大きく、その他の混合転位については、らせん転位の場合に比べて十分に小さいことがわかった。この事実は、実験で見られるらせん転位の移動が非常に遅いということを説明するものである。また、せん断応力を付加した場合のキンク対の活性化エネルギーも調べた。その結果、せん断応力を付加するにつれて、キンク対の活性化エネルギーは低下し、さらにこの結果から転位の運動に対する摩擦応力を推定可能であることを示すことに成功した。

## (2) 転位動力学法への転位の運動モデルの実装と検証

分子動力学法の結果を元にモデル化した転位の移動速度とせん断応力の関係に関するモビリティの式を転位動力学法に実装した。これにより、転位動力学法による計算機シミュレーションにおいて、BCC 金属に見られる結晶方位に依存した転位の運動の異方性や、温度に依存した転位の移動速度の変化を再現することが可能になった。モデルの検証として、中央部に直線の刃状またはらせん転位が1つある立方体結晶モデルを作成し、せん断応力を負荷した計算を実施した（図2）。その結果、らせん転位では、温度が低くなるにつれ変形応力が上昇する傾向が

見られた。これは、らせん転位の運動が熱活性化運動であり、温度の上昇とともに移動しやすくなる傾向にあることが原因である。一方、刃状転位がある場合は、温度の低下とともに変形応力が低下する傾向が見られた。分子動力学法で得られた転位の移動速度とせん断応力の関係においても、低温の方が、モビリティが高い傾向が観察されることから、低温において変形応力が低下する結果となったことが考えられる。すなわち、高温になると降伏応力が低下するなどの現象は、らせん転位の熱活性化運動が支配的に作用した結果として現れていることが考えられる。

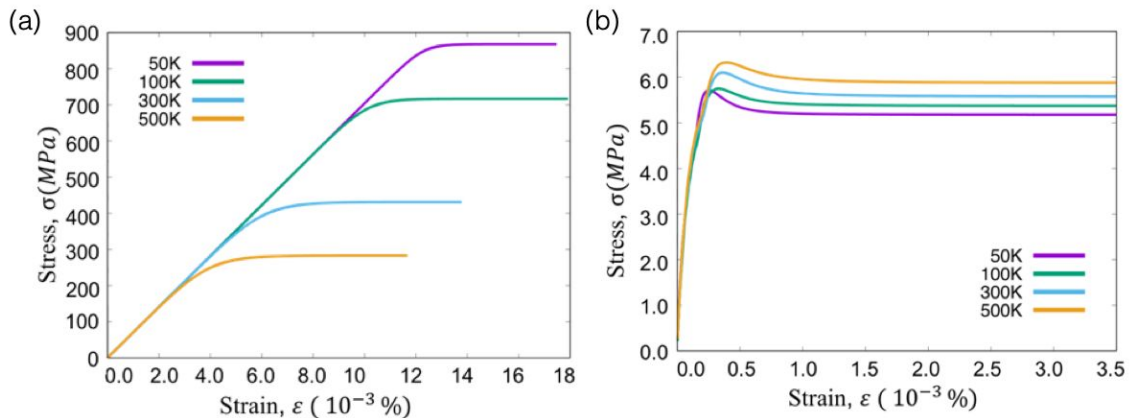


図2 モデル化した式を用いた転位動力学法によって計算された直線の(a)らせん転位,(b)刃状転位1つを含む結晶の応力ひずみ関係。

### (3) 開発した転位動力学法のスピノーダル分解のメカニズム解析への応用

開発した転位動力学法の応用例として、スピノーダル分解した鉄-クロム合金中の転位挙動とマイクロ組織の関係の計算機シミュレーションを実施した。鉄-クロム合金は熱時効の影響により、材料中のクロム濃度が周期的に変動するスピノーダル分解が発生することが知られている。本研究では、クロム濃度の揺らぎをコサイン関数を用いて周期的な揺らぎに近似し、そこから計算される内部応力の分布を転位動力学法で直接考慮することによって、クロム濃度の揺らぎの特徴量と転位が運動するために必要なせん断応力であるCRSSの関係性を調べた。{110}上に転位がある場合には、内部応力によって転位に作用する分解せん断応力 (Resolved Shear Stress: RSS) が、縞状の分布を示し、その結果、縞が転位と平行になる転位とバーガースベクトルの間の角が  $54^\circ$  において最大となり、その他の角度においては、RSS はほぼ0という結果になった (図3)。また、 $54^\circ$  の時のCRSSはクロム濃度揺らぎの大きさ  $A$  と比例関係にある。一方、{112}上に転位がある場合は、RSSの分布が異なり、円形の析出物が規則正しく配列した分布となる。また、転位の運動を促進するRSSと阻害するRSSが交互に配列しているため、転位の角度によって、転位のCRSSへの影響が様々に変化した。また、これまでにスピノーダル分解した材料の硬さとVariationと呼ばれるスピノーダル分解前後の濃度分布の統計の面積から計算されるパラメータの相関が知られているが、このVariationパラメータには、濃度揺らぎの波長の影響することができない。すなわち、硬さの変化と波長は無関係であることが予想されていたが、本研究により波長のCRSSへの影響はあることがわかった (図4)。また、そのメカニズムを、RSSの分布と転位の挙動から解明することに成功した。

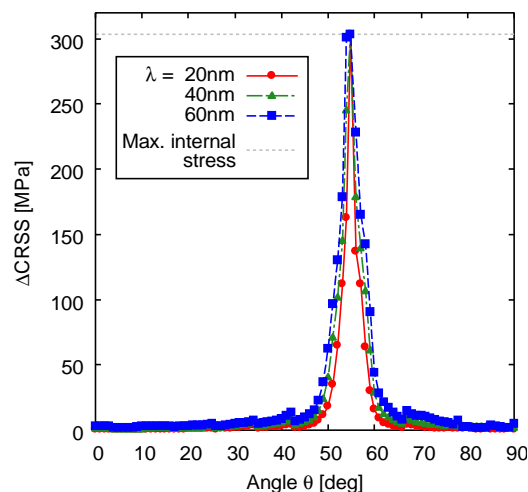


図3 {110}上の混合転位のCRSSの上昇と波長の関係の転位動力学計算結果

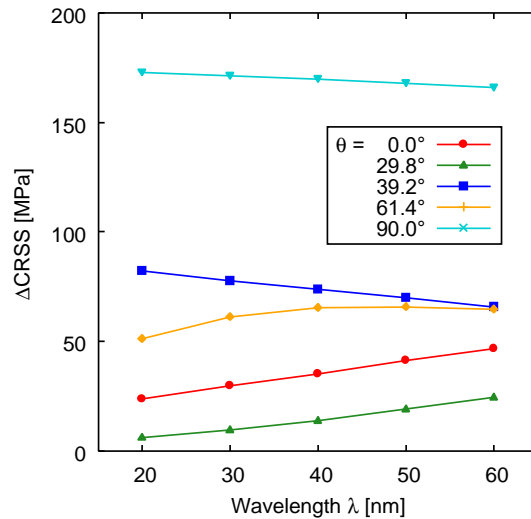


図4 {112}上の混合転位のCRSSの上昇と濃度揺らぎの転位動力学計算結果

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計4件)

1. A. Takahashi, T. Suzuki, A. Nomoto, T. Kumagai, Influence of spinodal decomposition structures on the strength of Fe-Cr alloys: A dislocation dynamics study, *Acta Materialia*, 査読有, 146, 2018, pp. 160-170
2. A. Takahashi, M. Kanazawa, Atomistic-continuum hybrid analysis of dislocation behavior in spinodally decomposed Fe-Cr alloys, *MATEC Web of Science*, 査読有, 101, 2017, 01018
3. 古谷拓万, 高橋昭如,スピノーダル分解したFe-Cr合金における転位挙動の異方性が機械的強度に与える影響, 日本機械学会第31回計算力学講演会講演論文集, 査読無, CD-ROM, 2018
4. 高橋一貴, 高橋昭如, 野本明義, 分子動力学法を用いたBCC鉄中の混合転位の挙動解析, 第21回計算工学講演会講演論文集, 査読無, CD-ROM, 2016

〔学会発表〕(計13件)

1. A. Takahashi, K. Takahashi, Multiscale modeling of dislocation behavior in BCC metals, The 4<sup>th</sup> Japanese-German Workshop on Computational Mechanics, 2017年3月27日, 東北大学(招待講演)
2. 高橋昭如, 転位の原子スケールモデリングによるマルチスケール塑性変形解析の高精度化に向けて, 第3回SIPコロキウム「マルチスケール力学の現状と課題」, 2016年7月13日, 東京大学(招待講演)
3. 高橋昭如, 分子動力学法を用いた金属中の転位挙動モデリング, 複合材料学会分子シミュレーション研究会第9回総会講演会, 2016年6月18日, 東京理科大学(招待講演)
4. T. Furuya, A. Takahashi, Influence of anisotropic dislocation mobility on mechanical strength in spinodally decomposed Fe-Cr alloys, 2018 International Workshop on Computational Science and Engineering Applications, 2018年11月30日, National Chung-Hsing University, Taiwan
5. A. Takahashi, T. Suzuki, A. Nomoto, Influence of Spinodal Decomposition on Dislocation Behaviors in Fe-Cr Alloys, The 2<sup>nd</sup> International Conference on Computational Engineering and Science for Safety and Environmental Problems, 2017年10月17日, Chengdu, China
6. A. Takahashi, K. Takahashi, Multiscale Modeling of Dislocation Kinetics in BCC Iron, The 14<sup>th</sup> U.S. National Congress on Computational Mechanics, 2017年7月17日, Montreal, Canada
7. A. Takahashi, K. Takahashi, Multiscale Modeling of Dislocation Kinematics in BCC Iron, JSME-KSME Joint Symposium on Computational Mechanics & CAE 2017, 2017年5月26日, BEXCO, Korea
8. T. Suzuki, A. Takahashi, A. Nomoto, Dislocation Dynamics Modeling of Material Strength Change in Spinodally Decomposed Ferritic Fe-Cr Alloys, *Dislocations*, 2016年9月19日, Purdue University, USA

9. K. Takahashi, A. Takahashi, A. Nomoto, Temperature Dependence of Mixed Dislocation Mobility in BCC Iron, The 10<sup>th</sup> International Conference on Fracture & Strength of Solids, 2016年8月31日, Tokyo University of Science, Japan
10. T. Suzuki, A. Takahashi, A. Nomoto, Evaluation of the Influence of Spinodal Decomposition on Material Strength in Fe-Cr Binary Alloys, The 10<sup>th</sup> International Conference on Fracture & Strength of Solids, 2016年8月31日, Tokyo University of Science, Japan
11. A. Takahashi, M. Kanazawa, Atomistic and Continuum Study on Dislocation Behavior in Spinodally Decomposed Fe-Cr Alloys, The 10<sup>th</sup> International Conference on Fracture & Strength of Solids, 2016年8月31日, Tokyo University of Science, Japan
12. 古谷拓万, 高橋昭如, スピノーダル分解した Fe-Cr 合金における転位挙動の異方性が機械的強度に与える影響, 日本機械学会第 31 回計算力学講演会, 2018 年 11 月 23 日, 徳島大学
13. 高橋一貴, 高橋昭如, 野本明義, 分子動力学法を用いた BCC 鉄中の混合転位の挙動解析, 第 21 回計算工学講演会, 2016 年 6 月 1 日, 朱鷺メッセ

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、研究者個人に帰属されます。