

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 2 年 7 月 3 日現在

機関番号：13301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K06049

研究課題名(和文) 集団運動を反映する普遍的な統計的性質を用いた固体材料の機械的性質の統一的理解

研究課題名(英文) A unified understanding of mechanical properties of solids from the viewpoint of universal statistical properties related to collective motion of defects

研究代表者

下川 智嗣 (Shimokawa, Tomotsugu)

金沢大学・機械工学系・教授

研究者番号：40361977

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：本研究は、構造用材料の更なる高信頼性化に向けて、未解決問題である「変形素過程の協働的・連鎖的な集団運動と機械的性質の関係の解明」に挑んだ研究である。これまでのボトルネックであった集団運動の定量化は、固体塑性の集団運動を反映する固体材料に内在する普遍的な統計的性質に着目した。本研究では、分子動力学計算を用いて、(1)様々な構造や組織(合金、多結晶、非晶質)の固体材料に対する統計的性質の探求を行い、(2)その統計的性質を特徴付けるパラメーターと強度と延性の機械的性質の関係の系統的な調査を行い、(3)集団運動と機械的性質の関係に関係性があることを明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、これまでの未解決問題であった固体材料の機械的性質と欠陥の集団挙動の関係を、変形素過程の集団運動規模の発生頻度という統計的性質を通じて明らかにしたことが最大の成果である。また、この成果は、集団運動を考慮した新しい固体材料の機械的性質に関する理論体系の確立に貢献することが強く期待される。

研究成果の概要(英文)：The present study challenges the unsolved problem of "elucidation of the relationship between the mechanical properties and the collective motion of elementally deformation processes" for the further improvement of the reliability of structural materials. The quantification of collective motion, which has been a bottleneck in the past, focuses on the universal statistical properties inherent in solid materials that reflect the collective motion of solid plasticity. In this study, molecular dynamics calculations were used to explore the statistical properties of solid materials of various structures (crystal structures, amorphous structures, and mixed structures) and systematically investigate the relationship between the parameters that characterize these statistical properties and the mechanical properties of strength and ductility. Finally, we found the relationship between collective motion and mechanical properties.

研究分野：計算材料力学

キーワード：力学特性 集団運動 格子欠陥 間欠塑性 分子動力学法 非平衡物理

様式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19（共通）

1. 研究開始当初の背景

結晶材料の多くの機械的性質は、変形過程である転位の単独運動で上手く理解ができる。例えば、転位論は、周囲の転位群を平均場として孤立転位との相互作用を考え、降伏強度を説明できる確立した理論である[1]。しかし、変形の進行に伴い、転位群は協働的・連鎖的な集団運動によりその配置を変え、当初の平均場状態とは掛け離れながら、機能喪失（破壊）状態へと向かう。つまり、構造物材料の高信頼性化に強く関与する高じん性および高延性という機械的性質の発現機構の理解には、変形過程の集団運動と機械的性質の関係を明らかにする必要がある。しかし、未だに集団運動と機械的性質は未解明問題である。この最大の原因は、集団運動を定量的に見出す手段が全く確立していないことである。

このブレークスルーに成り得る現象が、2000年以降に非平衡物理の観点から報告され始めた。様々な金属結晶材料のマイクロピラーの圧縮実験により、間欠的な塑性応答が検出され、各塑性変形イベントにより生じる変位量 x とその発生頻度 $P(x)$ の関係が「ベキ分布 ($P(x) \propto x^{-a}$; a はベキ指数)」という統計的性質を示した[2][3] (図1右下参照)。各イベントで観察される x は、一つの転位により生じる変位量の 2~1000 倍程度であるため、これは明らかに転位の集団運動を反映している。興味深いことに、同様な統計的性質が、大きなサイズの試験片の示すアコースティックエミッション (AE) の音波の振幅[4]や、さらには、原子シャッフリングによる局所せん断変形を素過程とする金属ガラス (非晶質材料) のマイクロピラー[5][6]においても成立する。つまり、このベキ分布は様々な固体塑性に内在する普遍的な統計的性質である。その統計的性質を特徴づけるパラメーターは、「傾き a 」と「最大イベントサイズ x_{max} 」であり、これらを用いて、変形過程の集団運動の発生頻度を定量的に評価できる。つまり、この統計的性質を通じて、集団運動と機械的性質の関係を解明できる可能性がある。

しかしながらこれまで、主に非平衡物理の観点からこの普遍的な統計的性質の物理的な解釈は行われてきた。そこでは、結晶塑性が示す統計的性質は、転位間の長距離弾性場を介した連鎖現象 (転位雪崩[4]) により生じる自己組織化臨界現象として分類され、「傾き a 」は固体塑性に不変な固有値を持つと考えられている。そのため、統計的性質と機械的性質の関係については、ほとんど関心が示されていない現状である。

一方で、固体力学・材料科学の観点から材料の個別特性を考慮して「傾き a 」を考えると、大きなせん断帯が発生する脆性的な材料は、加工硬化能力の大きい延性的な材料に比べて、大規模な集団運動の発生頻度が高いと推測できるため、統計的性質は小さな a を示す可能性がある。つまり、統計的性質を特徴づける2つのパラメーター (a と x_{max}) は、固体塑性に不変な固有値ではなく、個々の材料の機械的性質を反映している可能性がある。

上記の観点の違いから生じる矛盾を明らかにするには、既報の様々な材料の実験や数値シミュレーションの結果を寄せ集めて比較・検討すれば良いが、一方で、既報の実験やシミュレーションの各種条件 (変形条件や観測量) が統一されていないことや、実験試験片のばらつきや測定誤差が、統計的性質と機械的性質の精緻な比較・検討を行うことの障害となっている。

このような背景のもと、これまでに我々は、分子動力学シミュレーションにより、転位の運動に影響を与える空孔形成エネルギーや積層欠陥エネルギーが異なる Al, Cu, Ni の各単結晶モデルに対して単軸引張変形を統一した条件の下で行い、転位の集団的な雪崩運動を確認し、その応力降下量に関する統計的性質を計算し、Al は Cu や Ni に対して明らかに大きな「傾き a 」を示すことを発見した[7]。さらに、粒径が異なる様々な Al 多結晶モデルの解析により、「傾き a 」は粒径に影響を受けないが、「最大イベントサイズ x_{max} 」は結晶粒径の減少に伴い小さくなることを発見した[8]。このように、統計的性質を特徴づける2つのパラメーター (a と x_{max}) は、固体材料の物性値や組織等の個別性を反映している可能性を見出している。分子動力学計算を用いて結晶塑性の普遍的な統計的性質を検討する試みは、世界的にも我々以外に例がない。上記の学術的背景と最近の研究成果に基づき、普遍的な統計的性質を用いれば、集団運動と機械的性質の関係を解明できるという独創的な着眼点に至った次第である。

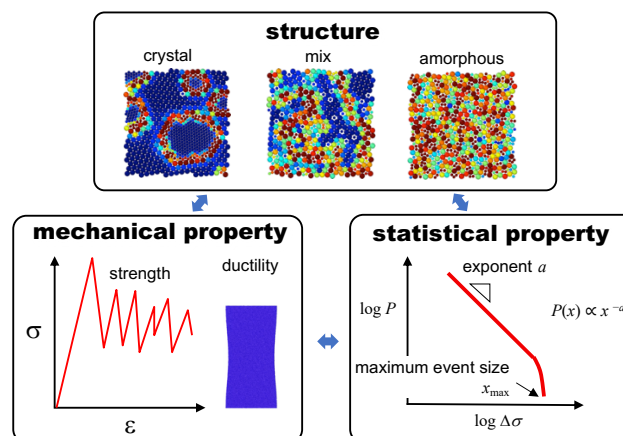


図1：様々な組織の機械的性質と統計的性質の関係

2. 研究の目的

そこで本研究の目的は、分子動力学計算を用いて様々な構造や組織 (単結晶, 合金, 多結晶, 非晶質) を有する固体材料のモデリングを行い、各材料内で生じる集団運動を反映する普遍的な統計的性質と機械的性質の関係を系統的に調査し、集団運動と機械的性質の統一的理解を行うことである。研究目的の概要図を図1に示す。

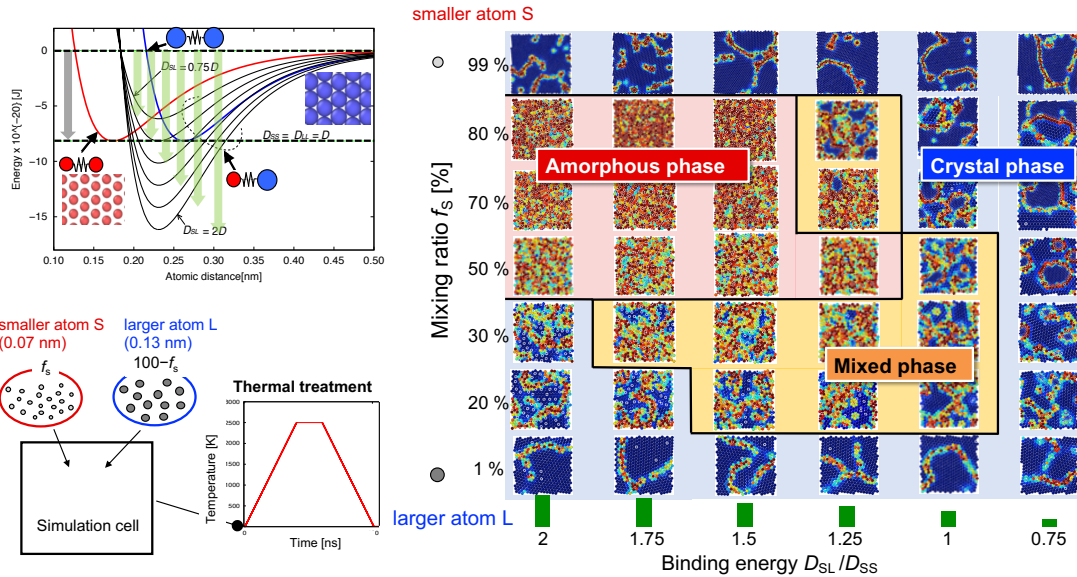


図 2：異なる原子半径を有する 2 原子系モデル

3. 研究の方法

本研究では、集団運動の可視化が容易な 2 次元構造を対象とする。原子間相互作用には 2 体力の shifted-force Morse ポテンシャルを用いる。図 2 左上に示すように、この関数形状を適切に制御することで、材料物性値を設計でき、結晶構造に固有な機械的性質を特徴づけられる。結晶構造から非晶質構造まで多様な原子構造を連続的に表現するために、原子半径の異なる二種類の原子 S と L をある割合 f_S で混ぜ合わせ、さらに異種原子間の結合力 D_{SL} を変化させる。ここで、S と L 原子の半径をそれぞれ 0.07 nm, 0.13 nm とする。そして図 2 左したに示す熱処理 (加熱→定温緩和→急冷) を実行することで様々な組織を有する固体材料を作製する。

熱処理によって得られた原子構造が、結晶構造をとるのか非晶質構造をとるのかを判別するために、無秩序変数[9]を用いる。本モデルの安定な格子構造は正三角形構造であるため、一つの原子の周りに正六角形状に 6 つの原子が存在することになる。無秩序変数はこの正六角形の配列からどれだけかけ離れているかを表す。すなわち、無秩序変数の値が高いほど非晶質構造をとっているといえる。各解析モデルに対してこの無秩序変数のヒストグラムを作成し、そのヒストグラムの概形から各解析モデルの原子構造を、規則 (結晶) 構造, 不規則 (非晶質) 構造, 規則不規則混在構造と分類する。

各モデルに全方向周期境界条件を適用し引張変形解析することで、応力ひずみ曲線が得られ、ここから機械的性質の流動応力を求め、そして応力降下量の確率密度を取ることで各モデルの統計的性質 (「べき指数 a 」と最大イベントサイズに関連する「カットオフサイズ」) を評価する。また、自由表面を有するナノサイズの試験片を作成し、引張変形解析を実施することで延性特性の評価を行なう。延性特性を評価は、同じ組成に対するナノ試験片の 10 ケースの結果の平均値とする。

4. 研究成果

図 2 右に本研究で得られた様々な原子構造モデルを示す。青原子が結晶構造を有し、赤原子が非晶質構造を有している。これより、S と L の原子数が偏っている場合や D_{SL} が小さい場合、結晶構造を示した。一方、 f_S が 40%~80% で D_{SL} が大きな場合、非晶質構造を示した。ここで、上記の結晶構造モデルから非晶質構造モデルへ遷移する領域に混在構造モデルが出現したことが確認できる。

図 3 左に各モデルに対して圧縮変形解析を実施したときの流動応力分布を示す。結晶・非晶質混在モデルの流動応力は、結晶や非晶質モデルよりも小さい値を示し、単純な複合則には従わず弱化傾向を示した。その原因の一つとして結晶と非晶質の異相界面に着目し、結晶と非晶

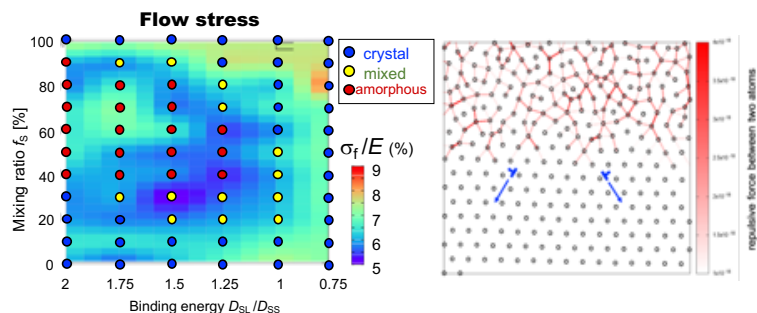


図 3：流動応力と組織の関係

質の積層モデルの変形シミュレーション解析を実施した。非晶質領域で形成されたフォースチェーン(原子間の力の繋がり)を起点として異相界面から転位が放出していることを見出し、そのことが混在構造モデルの弱化を引き起こす一つの要因であることを見出した。これは異相界面の高い転位源能力により大きな応力を材料組織内に蓄積することが難しいことから理解できる。

図4に機械的性質と統計的性質の関係を示す。図4左が、ナノ試験片の延性特性とベキ指数 a の関係を、図4右が流動応力とカットオフサイズの関係を示す。これより、両者の関係には相間が確認できる。つまり、ベキ指数 a が大きくなると局所変形は抑制されることから、ベキ指数 a には加工硬化特性に関連する情報が含まれている可能性があり、また、カットオフサイズが大きくなると流動応力も大きくなることから、カットオフサイズには材料の強度に関連する情報が含まれている可能性があることを見出した。

以上のことから、様々な組織の材料に対する統一条件における系統的な変形解析と統計解析を通じて、従来までは普遍性が強いと考えられていた間欠塑性に関する統計的性質には、材料の機械的性質の情報が含まれている可能性を初めて明らかにした。今後、これらの関係を活用することで格子欠陥の集団運動を考慮した固体材料の機械的性質に対する新しい理論体系が構築されることが期待できる。

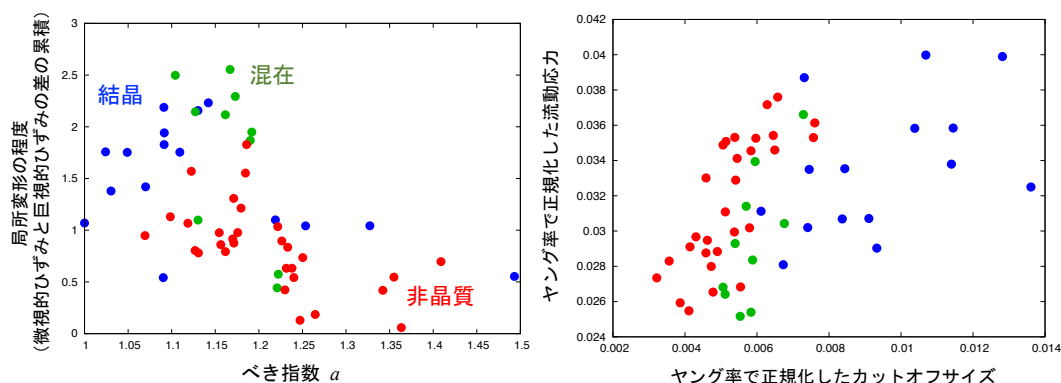


図4：機械的性質と統計的性質の関係

<引用文献>

- ① J. P. Hirth, Theory of Dislocations, 2nd ed. (McGraw-Hill, New York, 1968).
- ② D. M. Dimiduk, Science, 312(2006), 1188.
- ③ N. Friedman, Phys. Rev. Lett., 109 (2012), 095507.
- ④ M. Miguel, Nature, 410(2001),667.
- ⑤ B. A. Sun, Phys. Rev. Lett., 105 (2010), 035501.
- ⑥ J. Antonaglia, Sci. Rep. 4(2014),4382.
- ⑦ T. Niiyama and T. Shimokawa, Phys. Rev. E, 91 (2015), 022401.
- ⑧ T. Niiyama and T. Shimokawa, Phys. Rev. B, 94 (2016), 140102(R).
- ⑨ T. Hamanaka, et al., Physical Review E, 74 (2006), 011506(1-7).

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 0件）

1. 著者名 新山 友暁, 下川 智嗣, 藤元 大志	4. 巻 67
2. 論文標題 単結晶材料におけるモードI き裂の断続的な進展ダイナミクス	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 材料	6. 最初と最後の頁 222-228
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.2472/jsms.67.222	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 T. Niiyama, M. Wakeda, T. Shimokawa, S. Ogata	4. 巻 100
2. 論文標題 Structural relaxation affecting shear-transformation avalanches in metallic glasses	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 043002(1-9)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1103/PhysRevE.100.043002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計15件（うち招待講演 4件 / うち国際学会 4件）

1. 発表者名 園田郁未, 新山友暁, 下川智嗣
2. 発表標題 二原子混合固体材料における組織・強度の原子間ポテンシャル依存性
3. 学会等名 日本材料学会第3回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 原一輝, 新山友暁, 下川 智嗣
2. 発表標題 規則・不規則混合固体材料の強さと変形機構の検討
3. 学会等名 日本材料学会第3回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 下川智嗣
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによるナノ組織材料の変形・力学解析
3. 学会等名 日本機械学会 第8回材料力学における異分野融合に関する研究会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 園田郁未, 新山友暁, 下川智嗣
2. 発表標題 原子シミュレーションによる結晶と非晶質の混在組織における力学特性解析
3. 学会等名 日本機械学会M&M2018材料力学カンファレンス
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 下川智嗣, 新山友暁
2. 発表標題 結晶・非晶質混在構造の変形と強度に関する原子シミュレーション
3. 学会等名 日本金属学会2019年春季講演大会（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tomotsugu Shimokawa
2. 発表標題 Influence of Interface-mediated plasticity on mechanical properties of nanostructured materials
3. 学会等名 7th ESISM Workshop in Kyoto, "Fundamental Issues of Structural Materials"（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 藤元大志, 新山友暁, 下川智嗣
2. 発表標題 モード I き裂の進展現象に対する温度依存性と統計的性質
3. 学会等名 日本材料学会第2回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 原一輝, 新山友暁, 下川智嗣
2. 発表標題 二原子混合固体モデルにおける内部力学場の発展と変形機構の関係
3. 学会等名 日本材料学会第2回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 原一輝, 新山友暁, 下川智嗣
2. 発表標題 結晶と非晶質から成る材料の力学特性と変形挙動
3. 学会等名 第 31 回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 下川智嗣
2. 発表標題 ナノ組織材料の変形と強化機構の解明に向けた原子シミュレーション
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第3回若手研究グループ「多様な先端観察・測定法を用いた組織の定量と力学特性解析への適用」(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Shimokawa, T. Niiyama
2. 発表標題 Deformation mechanism and mechanical properties of a binary system through atomic simulations
3. 学会等名 ISAM4-2019 The fourth International Symposium on Atomistic and Multiscale Modeling of Mechanics and Multiphysics (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Shimokawa, T. Niiyama
2. 発表標題 Atomis simulation of mechanical properties of nanostructured materials -Mechanical properties vs. Statistical properties-
3. 学会等名 oint symposium of kanazawa university and Six Russian Universites on Advanced Sci. & Tech. (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 園田郁未, 下川智嗣, 新山友暁
2. 発表標題 固体材料に内在する統計的性質と力学特性の関係
3. 学会等名 日本機械学会第32回計算力学講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Shimokawa, T. Niiyama
2. 発表標題 Deformation Mechanism and Mechanical Properties of Mixed Amorphous-Crystalline System through Atomic Simulations
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 下川智嗣, 新山友暁, 尾方成信, 石井明男, 波多野恭弘
2. 発表標題 固体材料の機械的性質と統計的性質の関係
3. 学会等名 第9回材料系ワークショップ
4. 発表年 2019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
研究分担者	新山 友暁 (Niiyama Tomoaki) (00583858)	金沢大学・機械工学系・助教 (13301)	