

令和 6 年 6 月 21 日現在

機関番号：32660

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21K11924

研究課題名（和文）転位-析出物相互作用を基礎とするマルチスケール合金強度シミュレータの構築

研究課題名（英文）Development of multiscale alloy strength simulator based on dislocation-precipitate interactions

研究代表者

高橋 昭如 (Takahashi, Akiyuki)

東京理科大学・創域理工学部機械航空宇宙工学科・教授

研究者番号：00366444

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）：整合析出物を作る内部応力を計算する重合メッシュ法と、内部応力中での転位の挙動をシミュレートする転位動力学法を組み合わせた合金強度シミュレータを開発した。内部応力中での転位挙動を精度良く計算するための条件および転位動力学法への実装の条件を明らかにした。さらに、析出物の体積分率を変化させた合金モデルを作成し、析出物の体積分率と分布の影響を調べた。析出物の体積分率が大きいほど、転位が移動するために必要な臨界分解せん断応力が大きくなることを確認した。析出物を分布させたモデルにおいても、球状の析出物が分布した場合の方が円盤状の析出物が分布した場合よりも臨界分解せん断応力が高くなることがわかった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究で開発した合金強度シミュレータは、様々な析出物の形状および分布を有する合金強度評価の可能性を飛躍的に向上させることが期待できる。重合メッシュ法を用いてローカルメッシュで析出物をモデル化することにより、析出物のモデル化の労力を著しく低下させることに成功した。さらに重合メッシュ法で計算した内部応力を転位動力学法で用いることによって、転位と析出物の相互作用を精度良く計算可能であることを示すことに成功した。本シミュレータを応用することによって、合金の強度に対する析出物の形状と分布の影響の理解が深化し、今後更なる強度を有する合金設計への貢献が期待できる。

研究成果の概要（英文）：An alloy strength simulator has been developed that combines the s-version finite element method, which calculates the internal stresses created by precipitates with coherency strain, and the dislocation dynamics method, which simulates the behavior of dislocations under internal stress. The conditions for accurately calculating dislocation behavior under internal stress and the conditions for implementing the dislocation dynamics method were clarified. Furthermore, alloy models with different volume fractions of precipitates were developed and the effects of volume fractions and distribution of precipitates were investigated. It was confirmed that the larger the volume fraction of precipitates, the larger the critical resolved shear stress required for dislocation migration. In the model with distributed precipitates, the critical resolved shear stress was higher for the case with spherical precipitates than for the case with disk-shaped precipitates.

研究分野：材料強度学，材料力学，計算力学

キーワード：重合メッシュ法 転位動力学法 転位-析出物相互作用 合金 微視的組織 臨界分解せん断応力

様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

1. 研究開始当初の背景

金属材料の析出強化は、合金の製造過程において添加元素を添加し、熱処理を施すことにより析出物(第二相析出)を形成させることで転位の運動を妨げ、塑性変形を起こし難くする強化方法である。析出強化における主要なメカニズムとして、1)析出物内部と母相における積層欠陥エネルギーの違い、2)析出物と母相の格子定数の違いによる整合ひずみによる影響が考えられている。合金中の析出物の形状や分布は、合金の種類や成長段階によって大きく異なっていることが知られている。したがって、合金材料の開発・設計を行うためには、転位と様々な形状・分布を有する析出物との相互作用のメカニズムを理解し、材料の応力ひずみ応答への影響を定量的に把握することが必要である。しかし、実験観察によってこれらの析出物と転位の相互作用の詳細を調べることは極めて困難である。さらに、分子動力学法をはじめとした現在の計算機シミュレーションによるアプローチにおいても、合金の原子間ポテンシャルの開発や、複雑な形状を持つ析出物のモデル化の困難さが障壁となり、詳細な研究を実施することができないという現状がある。

2. 研究の目的

本研究では、重合メッシュ法を用いた合金中の内部応力の計算と、転位動力学法による転位の運動の計算機シミュレーションを融合させ、複雑に分布する析出物と転位の相互作用を考慮することを可能にすることによって、ミクロな析出物の形状や分布が与える合金のマクロな応力ひずみ関係を予測することが可能なマルチスケール合金強度シミュレータの開発を目的とする。本シミュレータの実現は、これまで取り扱うことができなかった複雑な形状を有する析出物と転位の相互作用の数値計算を可能にし、転位と析出物の相互作用メカニズムの解明に向けた新しいアプローチを創出する。

3. 研究の方法

(1) 重合メッシュ法による高精度な内部応力計算法の検討

提案する合金強度シミュレータでは、析出物を作る内部応力を、重合メッシュ法を用いて計算する。重合メッシュ法では物体全体をグローバルメッシュでモデル化し、析出物を個別にローカルメッシュでモデル化する。析出物を作る内部応力を高精度に計算するために、グローバルメッシュの要素サイズとローカルメッシュの析出物の外側の領域の大きさの関係を検討する。内部応力の解析解が存在する球状析出物を対象とし、その精度を検証する。また、様々な形状の析出物を、ローカルメッシュを用いて容易にモデル化するために、プレートメッシュを作成する。プレートメッシュは、立方体、球状、円盤状などの形状を用意し、これらのアスペクト比を変化させることで要素分割を変えずに様々な形状の析出物の作成を容易に行うことを可能にする。

(2) 内部応力の転位動力学法への実装と検証

本研究では、転位動力学法を高速に実行するために、重合メッシュ法の解析領域全体をボクセル要素に分割し、重合メッシュ法によって計算した内部応力のデータをボクセル要素にマッピングすることによって、高速に任意の座標における内部応力の値を取得することを可能にする。転位動力学法の内部応力を、解析解を直接計算した場合と、ボクセル要素から取得した場合の計算結果を比較し、十分な精度を与えるボクセル要素の大きさについて検討する。

(3) 転位 析出物相互作用における析出物の形状の影響

開発したシミュレータを、転位 析出物相互作用のメカニズム解明に応用する。特にこれまでに扱うことが困難であった、ジュラルミン中の円板状析出物と転位の相互作用等に適用し、転位がせん断する過程を調べる。これと並行して、転位が析出物をせん断し進行するために必要な臨界の応力である臨界分解せん断応力と析出物の形状との関係をまとめる。

(4) 合金単結晶の応力ひずみ応答の数値解析の実現

合金の微視的組織である様々な形状の析出物の分布を重合メッシュ法でモデル化し、合金の応力ひずみ関係を開発したシミュレータを用いて予測する。析出物の形状や分布を様々な変化させることによる応力ひずみ関係の変化を調べる。

4. 研究成果

(1) 重合メッシュ法を用いた高精度内部応力計算条件の検討

本研究では、重合メッシュ法を用いて整合ひずみを有する析出物を作る内部応力を計算する。この内部応力を高精度に計算するための条件を検討した。図 1 に立方体形状の領域の中央に球状析出物を 1 つ配置した重合メッシュ法の解析モデルを示す。(a)から(d)においては、グローバルメッシュの要素サイズを L_g 、ローカルメッシュの析出物の外側のモデル化した長さ(リガメ

ント長さ)を r_l としたとき, r_l/L_g を0, 0.2, 0.6, 1.0と変化させた場合を示している。

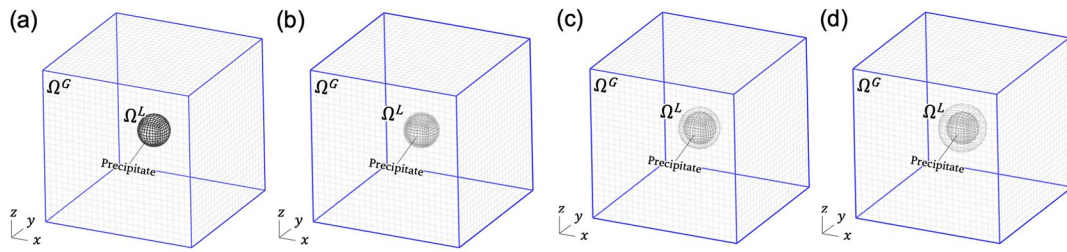


図1 球状析出物を1つ含む重合メッシュ解析モデル

図2に計算結果を示す。図2においては、析出物の中心を原点とした座標 x を設定し、析出物の半径方向のせん断応力の分布を示している。なお、 x_b は析出物の半径に等しい。図より、析出物のみをモデル化した場合($r_l/L_g=0$)は、析出物と母材の境界付近において解析解よりも低いせん断応力が計算されていることがわかる(図2(a))。この傾向は、 r_l/L_g が大きくなることによって改善される傾向にあることがわかる。

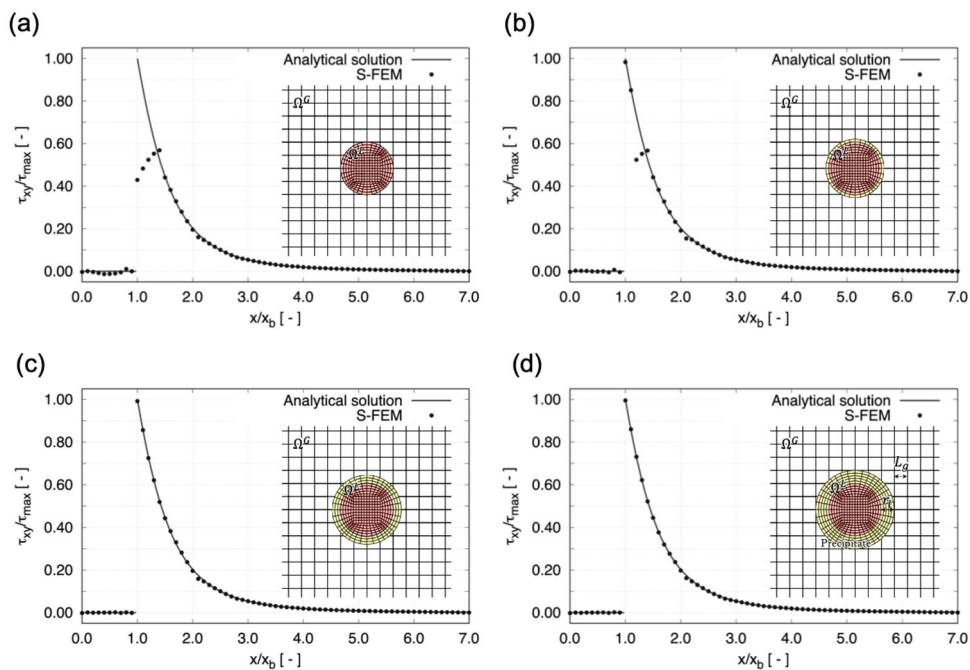


図2 析出物の半径方向のせん断応力の計算結果と解析解

r_l/L_g の変化とせん断応力の計算結果の収束性を確認するために、 r_l/L_g を様々に変化させて計算を行った。図3にせん断応力の計算精度を示す。 r_l/L_g が小さい場合においては解析解からの誤差が大きくなっているが、 r_l/L_g が大きくなるにつれて、計算精度が向上していることが定量的に確認することができる。特に、 r_l/L_g が1.5以上になると計算結果の精度が収束していることから、重合メッシュ法を用いて析出物を作る内部応力を精度良く計算するためには、 r_l/L_g が1.5以上であれば良いことがわかった。

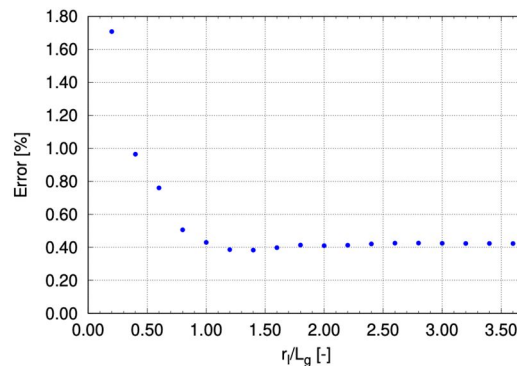


図3 r_l/L_g と内部応力の計算精度

(2) 転位動力学法への内部応力の実装

本研究では、重合メッシュ法で計算した析出物を作る内部応力を転位動力学法で用いることで、析出物と転位の弾性相互作用を考慮する。転位動力学法の計算速度を向上させるため、領域を囲む空間に立方体(ボクセル)要素を作成し、重合メッシュ法で計算した内部応力の情報をボクセル要素の頂点にマッピングを行う。これにより、転位動力学法における転位に作用する力の計算において、内部応力の値をボクセル要素の形状関数を用いて計算を行う。このような方法を用いて転位と析出物の相互作用の数値解析を高精度に実施するためのボクセル要素の大きさの条件を検討した。図4に解析モデルを示す。立方体領域の中央に析出物を配置し、外部からせん断応力を与え、転位が析出物をせん断する様子をシミュレートする。この時、転位が析出物をせん断して進むために必要なせん断応力(臨界分解せん断応力:CRSS)を計算し、その計算精度を検討した。図5にボクセル要素の例を示す。析出物の直径を D とし、ボクセル要素一つの大きさを L_v とした。

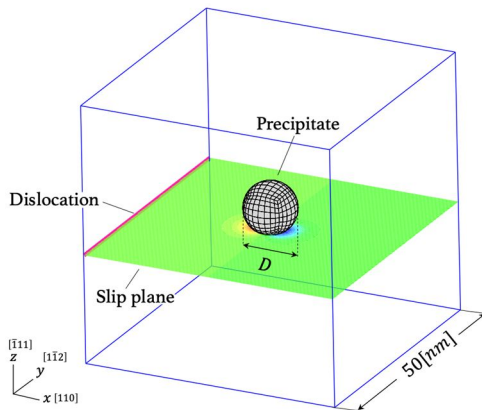


図4 転位と球状析出物の相互作用解析の
転位動力学解析モデル

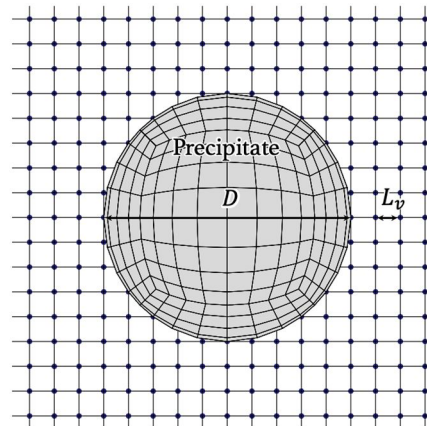


図5 ボクセル要素による分割例

図6にボクセル要素の大きさと析出物の大きさを変化させた時のCRSSの計算精度を示す。CRSSの計算精度は、整合ひずみを有する球状析出物と転位の相互作用の解析解と比較することによって計算した。横軸のボクセル要素の大きさは析出物の直径で無次元化している。図より、ボクセル要素の大きさを小さくするほど、計算精度が向上する傾向にあることがわかる。また、許容する計算誤差を1%以下とすると、ボクセル要素の大きさが析出物の直径に対しておよそ0.1以下であれば良いことがわかる。したがって、本研究で提案する手法においては、ボクセル要素の大きさを析出物直径の0.1以下にすることによって精度良く転位と析出物の相互作用(CRSS)を高精度に計算可能であることがわかった。

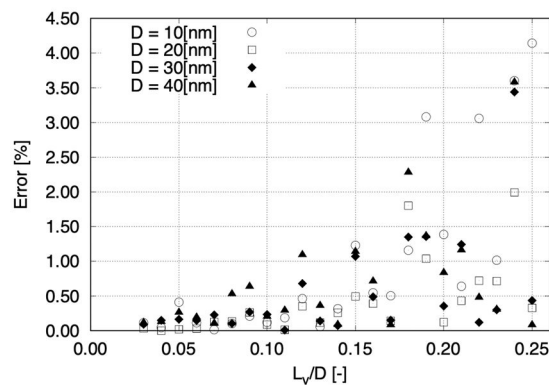


図6 ボクセル要素の大きさとCRSSの計算精度

(3) 転位と析出物の相互作用における析出物の形状の影響の評価

図4で示した転位と球状析出物の相互作用に加えて、図7に示す円盤状析出物との相互作用の計算を行った。これにより、析出物の形状の違いにより転位-析出物相互作用への影響を調べる。図8にCRSSの計算結果を示す。本計算では、転位のすべり面の位置(z)を変化させた。図中の灰色の領域は転位が析出物と直接接触する領域で、 h は析出物のすべり面の同方向の半長に等しい。図より、球状と円盤状のいずれの場合においても、転位が析出物と直接接触する領域に最大のCRSSが現れていることがわかる。また、CRSSの大きさは、析出物から離れるに従って小さくなる傾向にある。球状析出物と円盤状析出物のCRSSを比較すると、球状析出物の方が高いCRSS

であることがわかった．

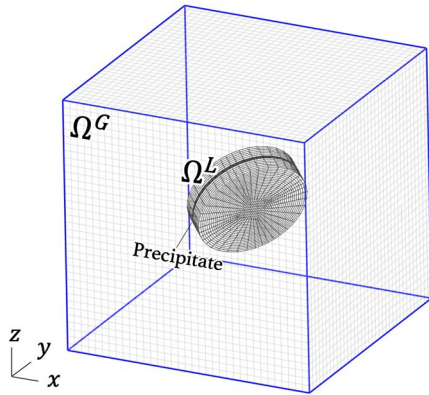


図7 円盤状析出物の重合メッシュモデル

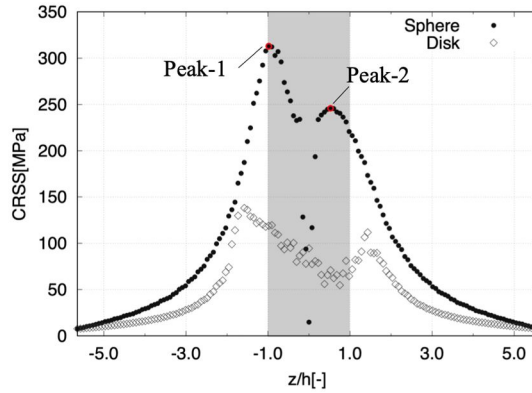


図8 転位と球状析出物・円盤状析出物との相互作用における CRSS の計算結果

(4) 転位と析出物の相互作用における析出物の分布の影響の評価

析出物が分布する中を転位が移動するために必要な CRSS を計算することによって、析出物の体積率と CRSS の関係を調べた．図 9 に円盤状析出物を分布させた転位動力学解析モデルを示す．図の体積率は 1% である．本計算では、体積率を 0.1% から 1% に変化させて体積率の影響を調べた．CRSS の計算では、転位は 1 つのみ配置し、その転位が移動を継続させるために必要な CRSS を計算した．同一の体積率のモデルにおいてもすべり面の位置を変化させることによって様々な分布の影響を計算することが可能である．本研究では、1 つの体積率のモデルにおいて、すべり面の位置を 50 ケース変化させて計算を行った．

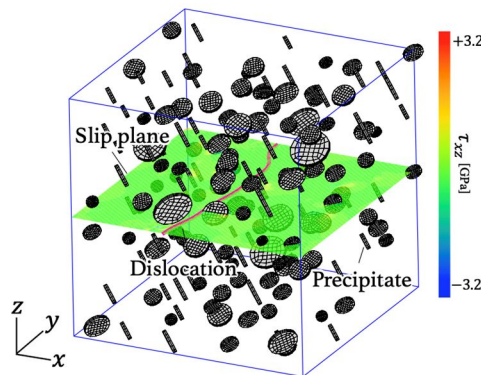


図9 分布する円盤状析出物中を進む転位挙動の転位動力学解析モデル

図 10 に計算結果を示す．図中の誤差棒は、各体積率で 50 ケース計算した時の CRSS の最大と最小値を示し、プロットはその平均値を表している．図から分かるように、体積率が上昇するに伴って CRSS の値も上昇していることがわかる．また、体積率が上昇すると、誤差棒の幅も広がっている．このように体積率が上昇するとすべり面の位置によって CRSS が大きく異なり、CRSS の値が平均的に上昇することが分かった

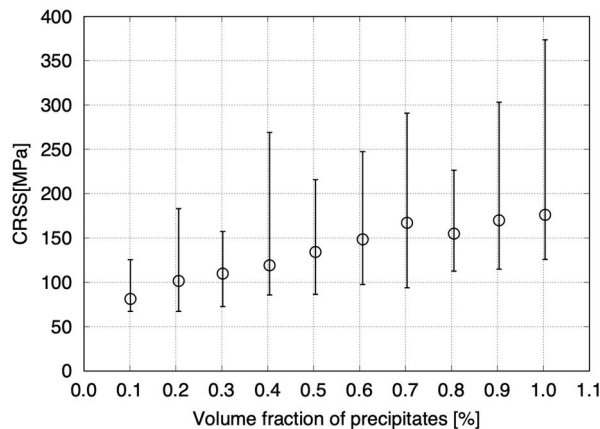


図10 円盤状析出物の体積率と CRSS の計算結果

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Takahashi A., Kasuya T., Ghoniem N. M.	4. 巻 125
2. 論文標題 Stress field and interaction forces between dislocations and precipitate distributions	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 International Journal for Numerical Methods in Engineering	6. 最初と最後の頁 e7468
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/nme.7468	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計6件（うち招待講演 1件/うち国際学会 1件）

1. 発表者名 高橋昭如
2. 発表標題 転位 析出物相互作用に基づく合金強度シミュレータの開発
3. 学会等名 第2回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 A. Kazama, R. Sakata, A. Takahashi
2. 発表標題 Virtual Dislocation Core Model for Dislocation Dynamics Simulation of Dislocation-precipitate Interactions
3. 学会等名 15th World Congress on Computational Mechanics and 8th Asia-Pacific Congress on Computational Mechanics（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 坂田陸，高橋昭如
2. 発表標題 簡易的な転位芯構造モデルを用いた転位 析出物相互作用の転位動力学解析手法
3. 学会等名 日本機械学会第34回計算力学講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 粕谷太地, 高橋昭如
2. 発表標題 転位動力学法と重合メッシュ法を用いた転位 析出物相互作用の転位動力学解析手法
3. 学会等名 日本機械学会第34回計算力学講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 粕谷太地, 高橋昭如
2. 発表標題 重合メッシュ法と転位動力学法を用いた転位 析出物相互作用解析手法
3. 学会等名 第26回計算工学講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 奥田健斗, 平能敦雄, 高橋昭如
2. 発表標題 転位-析出物相互作用における析出物形状の影響の転位動力学解析
3. 学会等名 日本機械学会第36回計算力学講演会
4. 発表年 2023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

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------