

機関番号：14401

研究種目：基盤研究（S）

研究期間：2008～2012

課題番号：20226004

研究課題名（和文） 塑性物理学の創出

研究課題名（英文） Plastic Physics of Defect Mechanics

研究代表者

澁谷 陽二 (SHIBUTANI YOJI)

大阪大学・工学研究科・教授

研究者番号：70206150

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・機械材料・材料力学

キーワード：ナノインデンテーション、欠陥間相互作用、分子動力学シミュレーション、最小エネルギー経路探索、マイクロ材料力学

1. 研究計画の概要

本研究では、固体材料の塑性変形の基礎メカニズムである転位を素欠陥とし、その素欠陥と素欠陥の相互作用、および素欠陥と結晶粒界や表面・界面といった周囲欠陥との相互作用に代表される塑性物理現象を、実験力学および計算力学の両面から解明し、従来より体系化されてきたマクロな塑性現象と論理的に関連付けることにより、新たに塑性物理学という学理の創出を目的とするものである。とりわけ、強度発現の観点から、転位と結晶粒界の力学的相互作用が最も重要であり、古くから Hall-Petch(H-P)の関係として知られている。ここでは、ナノインデンテーションによる粒界近傍の不均質な領域における押し込み変形挙動と、結晶学的な解析の両面から、粒界の持つパイルアップ効果、シンク効果、射出源といった役割を明確にする。そして、マクロな H-P 効果に通じるメカニズムを解明し、塑性の物理について検討する。

2. 研究の進捗状況

粒界を挟んだ結晶粒の方位関係を後方散乱電子回折像(EBSP)による結晶方位解析を行い、粒内と粒界近傍の位置を明確に同定したナノインデンテーションを行う。従来の単結晶の研究より、その特性が明らかにされている変位バースト挙動(押し込み変形場における転位の集団的射出挙動)を、いわば粒界と相互作用させる試行転位群として位置づけ、その変位バーストから引き出される特性を用いて、粒界の力学的役割を実験力学的に解明する。そして、材料内部で生じている欠陥群の相互作用を明らかにするため、(1)分子動力学シミュレーション(MD)による素欠陥と粒

界の相互作用のダイナミクス、(2)最小エネルギー経路(MEP)探索シミュレーションによる相互作用のエネルギー論的評価、(3)レベルセット法転位動力学シミュレーションによる内部応力場の評価といった計算力学的アプローチにより、そのメカニズムを解明する。

これまでに得られた成果は、以下のとおりである。

(A)転位と粒界のエネルギー論的相互作用の評価： MEP探索シミュレーションを用いて、1個の刃状転位と $\Sigma 3$ 対称傾角粒界(双晶)との相互作用の活性化障壁を評価した。その結果、この相互作用には明らかな活性化障壁が存在し、その大きさは転位の単位長さあたり0.116[eV]ほどある。これは、fcc材料中のパイエルスポテンシャル・バリアーの10,000倍に相当する。この特性を活かしたのが、最近報告されたナノツイン(nano-twin)構造の材料である。

(B)複数の転位群と粒界の相互作用ダイナミクス： インデンテーションの押し込み応力場の下で、生成した転位群と面欠陥との相互作用のダイナミクスをMDにより調べた。(110)軸を回転軸とする対称傾角粒界と表面が垂直に会合するモデルを考える。粒界から一定の距離離れた表面に剛体球圧子を押し込んだ結果、粒界の持つ内部応力場との相互作用が大きな影響を持ち、特に粒界真上ではなく、そこから2 nm程度離れたところで、その影響が最も大きく現れることがわかった。

(C)ナノインデンテーションによる粒界相互作用の計測： 無酸素銅(Cu)を再結晶させることにより、双晶を優先的に作り出した試料

を用いて、押し込み試験を実施した。まず、結晶方位分析を実施した結果、再結晶過程で得られた直線上の粒界は、すべて対称傾角粒界 $\Sigma 3A$ ($\{111\}$ 面) の最も安定な双晶であることがわかった。 $\Sigma 3A$ を介した比較的low indexの組み合わせを選択して、押し込み試験を行った結果、結晶粒の組み合わせによっては、単結晶と類似した変位バースト特性の示すことを見いだした。

3. 現在までの達成度

②おおむね順調に進展している。

(理由) 従来から実績のある計算力学的研究の成果は十分に得られている。特に、相互作用を活性化エネルギーで評価した成果、ダイナミクスを直接的に取り扱うことにより、その詳細な力学的そして結晶学的なメカニズムを明確にした成果は、ともに当該分野で高く評価されている雑誌(インパクトファクター; 3.475)に掲載されている。これは、幅広い読者に対して成果の公開を行うとともに、学術的なインパクトを与えている。また、本研究に関わる基礎学問分野をまとめた書籍(「塑性の物理 - 素過程から理解する塑性力学」, 森北出版)が、本研究期間の3年目で出版できたことも、当初の研究目的に対する達成度を自己評価する上で、重要な加点であると考えられる。これらの理由から、当初の目標に向けて順調に研究が進展しており、予定どおりの成果が見込まれていると判断できる。

4. 今後の研究の推進方策

(1) 平易なモデル化が可能で、かつシミュレーションとの整合性に優れている微小2結晶粒ピラー型試験片をマイクロ加工技術により試作し、先端のみフラットな特注圧子により押し込み試験を実施する。そして、転位と粒界の相互作用に関する従来の塑性力学の見解との比較検討から、新たなサイズ効果の調査を行う。そして、力学的特性と結晶学的特性の両者を考慮した従来からの指数(N 値(2結晶粒間の分解せん断応力の比), M 値(粒界でのすべり面の幾何学的な差異を考慮))に加えて、新たな指数を提案する。これらの検討を通じて、当初目的の塑性物理学の学理の創出をめざす。

(2) 粒界のつくる内部応力場と、押し込みによる外部応力場の相互作用をレベルセット法転位動力学シミュレーションにより明確にし、ナノインデンテーションにより得られた粒界の役割との対応を検討する。また、 $\Sigma 3$ 以外の粒界のエネルギー論的MEP探索シミュレーションを行い、活性化障壁についてさらに検討する。

5. 代表的な研究成果

[雑誌論文] (計8件)

(1) Incipient plasticity of twin and stable/unstable grain boundaries during nanoindentation in copper, T. Tsuru, Y. Kaji, D. Matsunaka and Y. Shibutani, Phys. Rev. B, Vol.82, pp.024101-1-6, (2010).

(2) Nondestructive Thermal Wave Detection of Internal Micro-defects using Scanning Electron-induced Acoustic Microscope, Y. Shibutani, J. Fujita and A. Koyama, Proc. of SPIE, Vol.7522, pp.752200O-1-7, (2010).

(3) Nanoscale contact plasticity of crystalline metals: Experiment and analytical investigation via atomistic and discrete dislocation models, T. Tsuru, Y. Shibutani and Y. Kaji, Acta Mat., Vol.58, pp.3096-3102, (2010).

(4) Fundamental interaction process between pure dislocation and energetically stable grain boundary, T. Tsuru, Y. Shibutani and Y. Kaji, Phys. Rev. B, Vol.79, pp.012104, (2009).

(5) Theoretical Investigation of the Displacement Burst Observed in Nanoindentation by Collective Dislocation Loops Nucleation Model, T. Tsuru, Y. Shibutani, J. Comp. Sci. & Tech., Vol.2, pp.559-567, (2008).

[学会発表] (計10件)

(1) 結晶性・非晶性のディフェクトダイナミクスシミュレーション(基調講演), 渋谷陽二, 日本機械学会2010年度年次大会, 名古屋工業大学(名古屋), (2010-9).

(2) Behaviors of Dislocations emitted near Grain Boundary under Nanoindentation, Y. Shibutani, M. Kosuge and T. Tsuru, 1st International Conference on Material Modelling (ICMM), Dortmund, Germany, (2009-9).

(3) Heterogeneous Grain Boundary Effect using Displacement Burst of Nanoindentation (招待講演), Y. Shibutani and M. Kosuge, 4th International Symposium on Designing, Processing and Properties of Advanced Engineering Materials (ISAEM), Noyori Conference Center, Nagoya Univ., Nagoya Japan, (2008-11).

[図書] (計1件)

(1) 塑性の物理 - 素過程から理解する塑性力学, 渋谷陽二, 森北出版, (2011).

[その他]

ホームページ

<http://www-comec.mech.eng.osaka-u.ac.jp/>