

機関番号：32660
 研究種目：若手研究（B）
 研究期間：2009～2010
 課題番号：21760084
 研究課題名（和文） 原子論-連続体ハイブリッドシミュレーションによる析出強化機構の
 新展開
 研究課題名（英文） New development of precipitation strengthening mechanism using
 atomistic-continuum hybrid simulation
 研究代表者
 高橋 昭如（TAKAHASHI AKIYUKI）
 東京理科大学・理工学部・講師
 研究者番号：00366444

研究成果の概要（和文）：

転位動力学法と境界要素法を組み合わせた析出物と転位の相互作用のシミュレーション手法に、転位芯モデルを実証することに成功した。その新しいシミュレーション手法を用いて、析出強化機構における転位芯の影響を明らかにし、特に整合強化による寄与については高精度な理論式を提案した。さらに、析出物の内外に転位芯内部のエネルギーの違いによる新しい強化機構を発見し、その強化を評価する式の導出に成功した。

研究成果の概要（英文）：

A new computational method for studying both the atomistic and continuum interaction between dislocation and precipitate was developed, which is a combination of the dislocation dynamics method and the boundary element method. To enable us to investigate the dislocation core influence on the precipitation strengthening, a continuum model for dislocation core was implemented into the computational method. Using the developed computational method, the role of dislocation core in the precipitation strengthening could be clarified, and a new equation of great precision for the coherency strengthening was established. Furthermore, a new strengthening mechanism based on the dislocation core energy difference in and around precipitates could be found, and a new equation for the strengthening was successfully derived.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	1,900,000	570,000	2,470,000
2010年度	1,500,000	450,000	1,950,000
年度			
年度			
年度			
総計	3,400,000	1,020,000	4,420,000

研究分野：

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：析出強化，転位，転位動力学

1. 研究開始当初の背景

ナノサイズの粒子を分散または析出物を形成させることによる金属材料の強化機構は先進的な材料開発や次世代エネルギーの実現において極めて重要である。分散強化・析

出強化の理論として、析出強化機構理論が古くから研究されてきた。その理論の構築においては、転位と粒子・析出物の相互作用を理論的に取り扱うことが極めて複雑であることから転位は直線、転位芯の幅は無微小など

の極端な近似が用いられているため、定量性に大きな問題がある。したがって、転位と粒子・析出物の複雑な相互作用を近似することなく取り扱うことができる計算機シミュレーションを可能とし、転位の形状変化や、転位芯の影響を含めた、定量的な析出強化理論を再構築することは、材料設計の高度化や高精度化、さらに多様化に対し多大に貢献するものである。

2. 研究の目的

転位芯に関連する原子論的情報を用いて転位芯構造を転位動力学法によって調べる方法を、弾性論に基づいた転位-析出物相互作用の計算手法である転位動力学法と境界要素法を連成させた方法に実装し、これまで不可能であった任意の形状と転位芯の詳細な構造の情報を有する転位と任意の形状・弾性定数・整合ひずみを有する析出物の相互作用のまるごと計算機シミュレーションを実現する。その手法を用いて、積層欠陥強化、整合強化、剛性率強化などの析出強化機構を構成する各々の強化機構の計算機シミュレーションを実施する。その結果を分析し、相互作用における転位の形状の変化の重要性、転位芯幅の定量的な影響を詳細に理解する。その結果に基づき、古典的析出強化理論では評価することが不可能であった転位の形状変化と、転位芯の幅を直接取り入れた析出強化機構の理論式の導出を行い、定量性のある新しい析出強化機構理論の構築を行う。

3. 研究の方法

(1) 原子論-連続体ハイブリッドシミュレーション手法の開発

研究代表者らがこれまでに提案した転位動力学法と境界要素法を連成させたコードに、転位芯に関わる原子論的情報を用いた手法を実装し、原子論-連続体ハイブリッドモデルを実装する。

(2) 一般化積層欠陥計算環境の構築

原子論-連続体ハイブリッドモデルへの入力情報として、金属結晶の一般化積層欠陥エネルギーの入力が必要である。そこで、一般化積層欠陥エネルギーの計算環境として、信頼性の高い第一原理計算や、簡便な古典分子動力学法コードを準備し、計算対象となる材料の一般化積層欠陥エネルギーのデータベースを作成する。

(3) 転位芯構造解析手法の開発

原子論-連続体ハイブリッドモデルが与える転位芯の情報は、転位芯内部の等変位線である。この結果から転位芯の原子構造を導く方法を開発し、転位芯構造の詳細な分析を可能にする。

(4) 大規模計算に向けた高速化とシステム化

実際の合金の微視的組織を模擬して、多くの析出物を同時に取り扱う場合、計算量および計算時間は非常に大きくなる。そこで、原子論-連続体ハイブリッドシミュレーションコードを並列化し、大規模化を行う。

(5) 積層欠陥強化機構の計算機シミュレーション

主に fcc 合金を取り扱い、転位芯内部の積層欠陥のエネルギーが母材と析出物内部で異なる場合の強化機構である積層欠陥強化機構を、転位芯内部の詳細な情報を用いて調べる。

(6) 整合強化機構の計算機シミュレーション

析出物の結晶格子の格子定数と母材の格子定数の違いによる整合ひずみによる影響である整合強化機構における転位芯の影響を調べる。

(7) 剛性率強化機構の計算機シミュレーション

母材の弾性定数と析出物の弾性定数が異なることによる影響である剛性率強化機構における転位芯の影響の有無について調べる。

(8) 新しい積層欠陥強化機構の構築

転位芯の影響による新しい強化機構を調べる。また、これまでに得られた各強化機構における転位芯の影響を考慮し、これまでの理論式に対してさらに高精度な（定量的な）理論式の導出を行う。

4. 研究成果

(1) 転位芯の連続体モデルの転位動力学法と境界要素法を連成させたシミュレーション手法への実装に成功した。さらに境界要素法の代わりにボクセル有限要素法を用いる転位-析出物相互作用のシミュレーション手法を開発し、複数の析出物と転位の相互作用の計算機シミュレーションを実現した。これらの方法は析出強化機構の構成要素全てを考慮し、さらに転位芯の影響を含めることのできる世界的に全く新しい機能を持つコードの実装に成功した。

(2) 本シミュレーションコードから転位芯の原子構造を導く方法の開発に成功した。鉄および銅中における転位ループの芯構造の解析に本研究で開発した方法を適用し、芯構造を解析することができた(図1)。転位芯の原子構造を導く方法により求められた原

子構造と分子動力学法による原子計算から導かれる芯構造を比較した結果、両者は良好に一致した(図2)。このように転位芯の連続体モデルから原子構造を導き解析することは本研究により初めて実現された解析方法である。

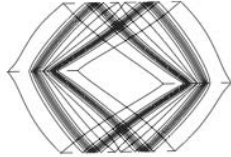


図1 銅中の転位ループの芯構造の原子論-連続体ハイブリッド計算結果

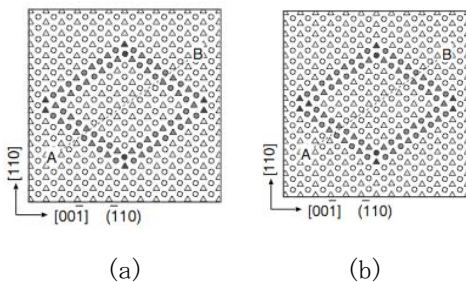


図2 (a)原子論-連続体ハイブリッド計算結果から導かれた芯の原子構造と(b)分子動力学法による計算結果

(3) 積層欠陥強化機構を調べるために、ニッケル基超合金中の超転位と γ 析出物の相互作用の計算機シミュレーションを原子論-連続体ハイブリッドモデルを用いて実施した。計算結果を古典的な積層欠陥強化の理論による結果と比較し、古典的な理論が精度良い強化の予測を与えることを確認した(図3)。さらに転位の形状の変化による影響は小さい。同様のシミュレーションを、分子動力学法を用いて実施し、同様に理論式が精度良い強化の予測を与えることが分かった。

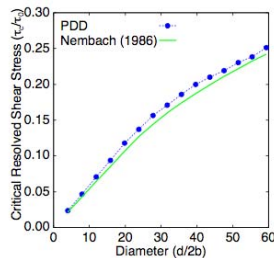


図3 積層欠陥強化機構のシミュレーション結果(PDD)と理論式の結果(Nembach)

(4) 整合強化機構における転位芯の影響を、ニッケル基超合金中の超転位と整合ひずみを有する γ 析出物の相互作用のシミュレーションにより調べた。比較的広い転位芯の幅を持つ超転位ではなく、転位芯の幅の無い完全転位を用いてシミュレーションを行った

結果は、古典的な理論式を用いた結果と定量的に一致した。しかし、超転位を用いてシミュレーションを行った結果は、古典的な理論式の与える結果を大きく下回った(図4)。すなわち、整合強化機構に置いて転位芯の影響は極めて大きく、転位芯が幅を持つことによって強化が弱まることが明らかになった。

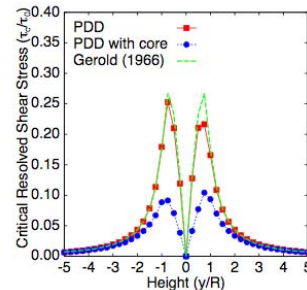


図4 完全転位(PDD)と超転位(PDD with core)モデルを用いたシミュレーション結果および理論式の結果(Gerold)

(5) 剛性率強化を、鉄に銅析出物を形成させた合金と、ニッケル基超合金を用いて調べた。いずれの場合においても、剛性率強化は他の強化機構による強化に比べ、その影響は弱く、母材と析出物の現実的な剛性率の違いの範囲においては無視することが可能であることが明らかになった。

(6) これまでの各強化機構についての本研究成果から、整合強化機構について転位芯の影響、特に幅の影響が極めて重要であることが明らかとなった。そこで、古典的な理論式を拡張し、転位芯幅について積分する操作を付加させた新しい理論式の導出を行った。この新しい理論式の結果は、超転位を用いた計算結果と定量的に一致した結果を与えた。すなわち新しい理論式は、転位芯の影響を考慮し、転位芯の幅が大きな影響を与えていることを明らかにしている(図5)。また、銅析出物を含む鉄のシミュレーションから、母材と析出物中の転位芯のエネルギーの差によって極めて大きな強化が得られることが本研究で初めて明らかになった。この強化機構の詳細を分析し、その強化を予測可能な理論式の定式化に成功した。これらの成果は合金設計における理論的な予測の高精度化につながり、転位芯のエネルギーによる新しい強化機構による材料開発の新しい可能性を与えている。さらに複数の析出物が分散することによる効果を取り入れることにより、さらに実用的な理論の展開が期待できる。

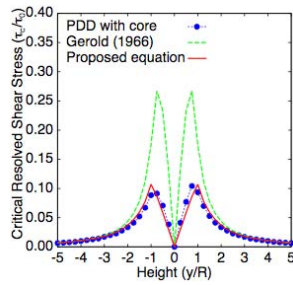


図5 転位芯を考慮した新しい理論式と超転位モデルを用いたシミュレーション結果 (PDD with core)

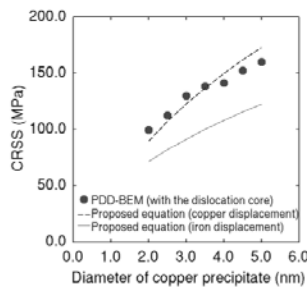


図6 超転位モデルを用いた場合 (PDD-BEM) と本研究で導いた新しい理論式による転位芯エネルギー強化機構の計算結果.

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 17 件)

- ① 高橋昭如, 川鍋充, ニッケル基超合金中の γ 析出物による析出強化機構の数値解析, 日本機械学会論文集A編, 査読有, 75 巻, 2009, pp.595-603
- ② A. Takahashi, N.M. Ghoniem Structure of Self-Interstitial Atom Clusters in Iron and Copper, Physical Review B, 査読有, 80, 2009, 174104
- ③ A. Takahashi, K. Kurata, Dislocation dynamics-based modeling of dislocation-precipitate interactions in bcc metals, Materials Science and Engineering, 査読有, 10, 2010, 012081
- ④ A. Takahashi, M. Kawanabe, N.M. Ghoniem, γ -precipitate Strengthening in Nickel-based Superalloy, Philosophical Magazine, 査読有, 90, 2010, pp. 3767-3786
- ⑤ A. Takahashi, Y. Terada, Numerical Simulation of Dislocation-Precipitate Interactions using Dislocation Dynamics Combined with Voxel-based Finite Elements, 査読有, Key Engineering Materials, 462-463, 2011, pp. 395-400
- ⑥ A. Takahashi, Y. Terada, Molecular

Dynamics Simulation of Dislocation- γ -precipitate Interactions in γ '-precipitates, Key Engineering Materials, 査読有, 462-463, 2011, pp. 425-430

- ⑦ 倉田和幸, 高橋昭如, 中島健一, 大沼敏治, 曾根田直樹, 鉄中の転位と銅析出物の相互作用の転位動力学解析, 計算工学講演会講演論文集, 査読無, 14 巻, 2009, pp. 959-962
- ⑧ 寺田祐太郎, 高橋昭如, ニッケル基超合金中における超転位と γ 析出物の分子動力学解析, 計算工学講演会講演論文集, 査読無, 14 巻, 2009, pp. 1011-1014
- ⑨ 林翔太郎, 高橋昭如, 転位と複数の空孔集合体の材料強化・劣化の数値解析, 計算高価講演会講演論文集, 査読無, 14 巻, 2009, pp. 1015-1018
- ⑩ 高橋昭如, 寺田祐太郎, 転位動力学法とボクセル有限要素法を用いた転位-析出物相互作用の数値解析, 日本機械学会第 22 回計算力学講演会講演論文集, 査読無, CD-ROM, 2009
- ⑪ 寺田祐太郎, 高橋昭如, γ 析出物のせん断変形が転位運動に与える影響の分子動力学解析, 日本機械学会第 22 回計算力学講演会講演論文集, 査読無, CD-ROM, 2009
- ⑫ 林翔太郎, 高橋昭如, 転位と空孔の相互作用における空孔の空間的分布の影響の転位動力学解析, 日本機械学会第 22 回計算力学講演会講演論文集, 査読無, CD-ROM, 2009
- ⑬ A. Takahashi, N.M. Ghoniem, Structure of Self-Interstitial Atom Clusters in Iron and Copper, Proceedings of 5th International Conference Multiscale Materials Modeling, 査読無, 2010, pp. 733-736
- ⑭ 佐藤将太, 高橋昭如, 酸化物粒子分散強化型フェライト鋼の強化機構の転位動力学解析, 計算工学講演会講演論文集, 査読無, 15 巻, 2010, pp. 643-646
- ⑮ 高橋昭如, bcc中のらせん転位芯構造の転位動力学モデリング, 日本機械学会第 23 回計算力学講演会, 査読無, CD-ROM, 2010
- ⑯ 倉田和之, 高橋昭如, 転位-析出物相互作用における転位芯の影響の転位動力学解析, 日本機械学会第 23 回計算力学講演会, 査読無, CD-ROM, 2010
- ⑰ 寺田祐太郎, 高橋昭如, ニッケル基超合金中の γ 析出物と超転位の相互作用機構の分子動力学解析, 日本機械学会第 23 回計算力学講演会, 査読無, CD-ROM, 2010

[学会発表] (計 20 件)

- ① A. Takahashi, Atomistic and Continuum Interaction in Dislocation Dipoles: A Molecular and Dislocation Dynamics Study, 2009 International Workshop on Students' Experience Exchange, 2009 年 12 月 10 日, 龍華科技大学 (台湾)
- ② A. Takahashi, N.M. Ghoniem, A

- computational method for dislocation dynamics in inhomogeneous materials, 2nd International Workshop on Advances in Computational Mechanics, 2010年3月31日, パシフィコ横浜
- ③ A. Takahashi, Atomistic-Continuum Interaction in Dislocation Dipoles, FEOFS mini-symposium, 2009年6月10日, Copthorne Orchid Hotel マレーシア
- ④ A. Takahashi, M. Kawanabe, K. Kurata, K. Nakashima, N. Soneda, Atomistic-Continuum Modeling of Precipitation Strengthening in Alloys, 10th U.S. National Congress on Computational Mechanics, 2009年7月18日, オハイオ州 コロンバス (アメリカ)
- ⑤ A. Takahashi, Z. Chen, N. Ghoniem, N. Kioussis, Atomistic/Continuum Modeling of Dislocation Interactions with Y2O3 Particles in Iron, 14th International Conference on Fusion Reactor Materials, 2009年9月8日, 札幌コンベンションセンター (札幌)
- ⑥ 倉田和幸, 高橋昭如, 中島健一, 大沼敏治, 曾根田直樹, 鉄中の転位と銅析出物の相互作用の転位動力学解析, 第14回計算工学講演会, 2009年5月13日, 東京大学 (東京)
- ⑦ 寺田祐太郎, 高橋昭如, ニッケル基超合金中における超転位と γ 析出物の分子動力学解析, 第14回計算工学講演会, 2009年5月13日, 東京大学 (東京)
- ⑧ 林翔太郎, 高橋昭如, 転位と複数の空孔集合体の材料強化・劣化の数値解析, 第14回計算工学講演会, 2009年5月13日, 東京大学 (東京)
- ⑨ 高橋昭如, 寺田祐太郎, 転位動力学法とボクセル有限要素法を用いた転位-析出物相互作用の数値解析, 日本機械学会第22回計算力学講演会, 2009年10月10日, 金沢大学 (金沢)
- ⑩ 寺田祐太郎, 高橋昭如, γ 析出物のせん断変形が転位運動に与える影響の分子動力学解析, 日本機械学会第22回計算力学講演会, 2009年10月10日, 金沢大学 (金沢)
- ⑪ 林翔太郎, 高橋昭如, 転位と空孔の相互作用における空孔の空間的分布の影響の転位動力学解析, 日本機械学会第22回計算力学講演会, 2009年10月10日, 金沢大学 (金沢)
- ⑫ A. Takahashi, N. Ghoniem, Dislocation Dynamics in Heterogeneous Materials, 9th World Congress on Computational Mechanics, 2010年7月19日, Sydney Convention and Exhibition Centre (オーストラリア)
- ⑬ A. Takahashi, K. Kurata, Dislocation dynamics-based modeling of dislocation-precipitate interactions in bcc metals, 9th World Congress on Computational Mechanics, 2010年7月19日, Sydney Convention and Exhibition Centre (オーストラリア)
- ⑭ A. Takahashi, N.M. Ghoniem, Structure of Self-Interstitial Atom Clusters in Iron and Copper, 5th International Conference Multiscale Materials Modeling, 2010年10月5日, University of Freiburg (ドイツ)
- ⑮ A. Takahashi, Y. Terada, Molecular Dynamics Study on Interaction Between Super-dislocation and Spherical Precipitate in Ordered Alloys, International Conference on Clean Nano Process, Green Energy, Nano Technology and Computational Mechanics, 2010年12月8日, 東南科技大学 (台湾)
- ⑯ A. Takahashi, T. Kogure, Y. Ueki, Dislocation Dynamics in Polycrystalline Materials, International Conference on Clean Nano Process, Green Energy, Nano Technology and Computational Mechanics, 2010年12月8日, 東南科技大学 (台湾)
- ⑰ 佐藤将太, 高橋昭如, 酸化物粒子分散強化型フェライト鋼の強化機構の転位動力学解析, 第15回計算工学講演会, 2010年5月28日, 九州大学 (福岡市)
- ⑱ 高橋昭如, bcc中のらせん転位芯構造の転位動力学モデリング, 第15回計算工学講演会, 2010年5月28日, 九州大学 (福岡市)
- ⑲ 倉田和幸, 高橋昭如, 転位-析出物相互作用における転位芯の影響の転位動力学解析, 日本機械学会第23回計算力学講演会, 2010年9月22日, 北見工業大学 (北見市)
- ⑳ 寺田祐太郎, 高橋昭如, ニッケル基超合金中の γ 析出物と超転位の相互作用機構の分子動力学解析, 日本機械学会第23回計算力学講演会, 2010年9月22日, 北見工業大学 (北見市)

[図書] (計0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計0件)

名称：
 発明者：
 権利者：
 種類：
 番号：
 出願年月日：
 国内外の別：

○取得状況 (計0件)

名称：
 発明者：

権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕
ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

高橋 昭如 (TAKAHASHI AKIYUKI)
東京理科大学・理工学部・講師
研究者番号：00366444

(2) 研究分担者

()

研究者番号：

(3) 連携研究者

()

研究者番号：