

令和 6 年 6 月 21 日現在

機関番号：44519

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21K04631

研究課題名（和文）第一原理計算精度での大規模転位動力学解析

研究課題名（英文）Atomistic modeling of dislocation dynamics with first principles accuracy

研究代表者

森 英喜（Mori, Hideki）

産業技術短期大学・その他部局等・准教授

研究者番号：00456998

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、機械学習技術に基づいた高精度なBCC鉄用原子間ポテンシャルを用いて鉄中転位進展と障害物との相互作用の分子動力学解析を行った。ポテンシャル計算の高速化を成功したことで100万原子規模の分子動力学解析が可能となった。刃状転位とボイドとの相互作用解析では従来用いられてきた経験的ポテンシャルの結果とは異なっており、これは従来の経験的ポテンシャルが一部の転位の易動度を大幅に過小評価していることが原因であることが分かった。また、刃状転位と剛体球との相互作用解析ではオロワングループの形成を確認した。さらに解析を進めた結果、オロワングループからハッシループの形成も観測した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、機械学習技術に基づいた高精度なBCC鉄用原子間ポテンシャルを用いて鉄中転位進展と障害物との相互作用の100万原子規模の分子動力学解析を行うことに成功した。その結果、従来の経験的ポテンシャルを用いた解析では十分に信頼性のある解析を行うことは困難であり、機械学習技術などを用いた高精度な原子間ポテンシャルを用いることが重要であることを示した。また、今回改善した原子間ポテンシャルは様々な第一原理計算や実験結果などと良く整合しており、大規模高精度な鉄中欠陥の解析を可能とするものである。これらの解析結果およびポテンシャル構築は関連分野に大きな意義を持つものであると考える。

研究成果の概要（英文）：In this study, we conducted molecular dynamics analysis to investigate the interaction between dislocation propagation and obstacles in iron. We used a high-precision interatomic potential based on machine learning for BCC iron. The improved potential calculation speed allowed us to analyze 1 million atomic-scale interactions. Interestingly, our results differ from those obtained using conventional empirical potentials, which tend to underestimate the mobility of certain dislocations. Specifically, when analyzing the interaction between edge dislocations and voids, we observed the formation of Orowan loops. Further analysis revealed the transformation of Orowan loops into Hirsch loops.

研究分野：材料力学

キーワード：分子動力学 転位論 機械学習原子間ポテンシャル BCC鉄 障害物

様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

1. 研究開始当初の背景

環境問題への対応やエネルギーコスト削減を強く求められる現代社会において、構造材料の軽量化および強度・延性などのさらなる機能向上は最重要課題である。金属材料は、経済性および加工性の良さから自動車や航空機の構造材料など様々な用途に用いられている。鉄鋼材料をはじめ、これまでの金属材料開発は、発見的・経験的に行われてきた。しかしながら、これからの継続可能な社会の構築に向けての革新的な材料開発を行うためには、材料の物性を非経験的に評価し、その結果に基づいて開発指針を予測的に示すことが必須である。密度汎関数法 (Density functional theory: DFT) に基づいた高精度な第一原理計算や大規模で柔軟な条件設定が可能な経験的分子動力学法 (Molecular dynamics: MD) による原子モデリングは、材料の基本的な機械的特性のみならず変形・破壊過程を素過程から解析を行うことが可能である。非経験的・予測的な原子モデリングを行うためには、原子間相互作用をいかに高精度に評価できるかが重要となる。DFT による第一原理計算は、系の電子状態を決定し各原子に働く力を算出するため、弾性定数などの基礎的な物性値のみならず材料の力学応答なども実験データに頼ることなく解析・評価することが出来る。しかしながら、電子状態を決定するための計算コストは非常に大きく現実的に扱える原子数は数十～数百個程度であり、構造材料における変形および破壊の動的挙動を直接解析するのは困難である。一方で原子間相互作用を原子間距離などのポテンシャル関数と近似して解析を行う解析では、原子間相互作用は一意に決まるため、計算負荷は第一原理計算と比較して格段に低くなり、数十万～数百万原子の自由度の高い解析が可能となる。これらの経験的原子間ポテンシャル関数は一部の系では比較的精度の高い解析が出来る場合があるが、第一原理計算の結果と整合しない場合が多い。このため、様々な構造材料の変形および破壊の大規模な動的挙動の MD による解析が行われているが、その本質を捉えられているかは不明であり、転位進展の詳細およびその進展に空孔などの格子欠陥が与える影響といった基礎的特性を高精度に決定することが急務である。

2. 研究の目的

上記の学術的問題を克服する一つの方法として、原子間相互作用を AI (人工知能: artificial intelligence) 技術開発分野で成功を収めているニューラルネットワーク (artificial neural network: ANN) の枠組みを用いて表現するアプローチ法がある。ANN は普遍性定理と呼ばれる性質によって、原理的に任意の関数を任意の精度で近似可能である。DFT に基づいた高精度な第一原理計算によって作成された多数の訓練データを再現できるよう ANN を最適化することによって、グローバルかつ高精度な原子間ポテンシャル関数の構築が可能となる。現在では、材料および化学分野において様々な適用例が存在し、原子モデリングの重要な手法としての地位を確立している。研究実施者は、DFT 訓練データを用いて高精度な BCC (体心立方) 鉄の ANN を基礎とした原子間ポテンシャル (ANN 原子間ポテンシャル) 関数の開発に成功している。以上のような学術的背景および実績を踏まえ、本研究では、構築した BCC 鉄 ANN 原子間ポテンシャル関数を用いて BCC 鉄中の転位芯構造およびその進展を第一原理計算精度で詳細に解析を行う。特に DFT による第一原理計算では現実的に不可能な転位進展の基礎的な解析およびその進展に空孔などの格子欠陥が転位進展に与える影響の解析を大規模原子モデリングによって詳細に行う。

3. 研究の方法

まず、大規模計算の実施に向けてすでに構築した高精度な BCC 鉄用 ANN ポテンシャルの高速化を行うとともに、その精度の検証を行う。次に障害物 (ポイドなど) が転位進展に与える影響を MD 法によって解析を行う。

4. 研究成果

(1) ポテンシャルの高速化: 初年度はこれまでに開発した BCC 鉄用 ANN ポテンシャル[1]の高速化を中心に行った。ANN ポテンシャルにおいて ANN 自体の計算は非常に高速であり、原子環境を表現する記述子の計算が主な計算コストとなる。記述子の定式化や遠距離の原子の影響を近距離に限定するためのカットオフ関数の工夫を行った[2]。この結果、表 1 に示すように先行開発したものに対して精度を維持したまま計算コストを 95%削減することに成功した。この計算速度は、従来の簡便な原子埋め込み法 (EAM) ポテンシャル[3]の 50 倍程度の計算速度であり、十分に大規模計算に適用できるものである。

Table1. 一原子あたりの計算時間の比較

Units	ANN (2023)	ANN (2020)	EAM
μs	103	2070	1.8

(2) MD 法による大規模転位動力学解析 : 開発に成功した高速な ANN ポテンシャルを用いて 100 万原子規模の大規模転位動力学解析を実施した。ターゲットとして刃状転位と障害物(ポイド)の相互作用の解析を行った。まず、図 1 に示すように刃状転位とポイドを配置し、せん断応力を印加することによって転位を進展させる。転位が進展しポイドを横切る際にどのような形状変化を起こすのかを詳細に解析した。特に従来の解析に用いられていた EAM との比較を行った。その結果、図 1 に示すようにそれぞれのポテンシャルでポイドからの転位の張り出し形状が大きく異なることが確認できた。さらにこの違いの原因を検証するために、転位の最も基本的な力学特性であるパイエルス応力(転位が動き出すのに必要な最低限の応力)の評価を ANN および EAM ポテンシャルで行った。この結果、EAM は一部の混合転位のパイエルス応力がらせん転位と同等になることが分かった。それに対して、ANN ではらせん転位のみが高い応力を示しており、混合転位は刃状転位のパイエルス応力と同等となっており、実験事実と整合している。これにより EAM では精度の高い解析は困難であることが確認された。

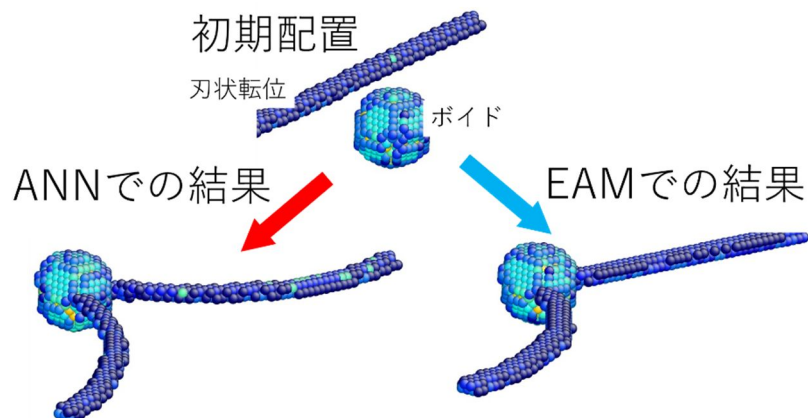


Fig.1 刃状転位の障害物(ポイド)からの張り出し

(3) MD 法による大規模転位動力学解析 : 次にポイドとの対比として転位の進展と剛体球との相互作用の解析を行った。その結果、剛体球まわりにオロワングループとして知られる転位ループが残留することが分かった。さらに転位の進展を進めて、このオロワングループと刃状転位との相互作用の解析を行った。その結果、図 2 に示すようにオロワングループを転位が横切る際にオロワングループがハッシループと呼ばれる二つの小ループに分離することが確認された。障害物の周囲にオロワングループが残留した場合、進展してきた転位とオロワングループとの相互作用はそれぞれの弾性場によって強く反発しあうことになる。このため、オロワングループを特に刃状転位が横切る際には非常に強い応力が必要とされてきた。それに対して、オロワングループがハッシループに変化することによってポイドや剛体球と同程度のせん断応力で横切ることが可能であることが分かった。

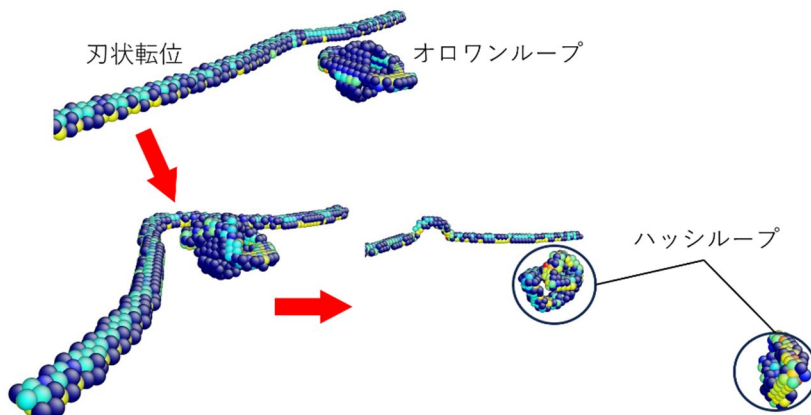


Fig.2 刃状転位とオロワングループの相互作用

参考文献 :

[1] H. Mori and T. Ozaki, Phys. Rev. Mater. 4, 040601 (2020).
 [2] H. Mori, et al., Phys. Rev. Matter. 7, 063605 (2023).
 [3] M. Mendeleev, et al., Philos. Mag. 83, 3977 (2003).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 6件）

1. 著者名 Mori Hideki, Tsuru Tomohito, Okumura Masahiko, Matsunaka Daisuke, Shiihara Yoshinori, Itakura Mitsuhiro	4. 巻 7
2. 論文標題 Dynamic interaction between dislocations and obstacles in bcc iron based on atomic potentials derived using neural networks	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 063605-1-8
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevMaterials.7.063605	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 Suzudo T., Ebihara K., Tsuru T., Mori H.	4. 巻 135
2. 論文標題 Emergence of crack tip plasticity in semi-brittle α -Fe	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 075102-1-7
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1063/5.0178940	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 -

1. 著者名 鈴木 知明, 海老原 健一, 都留 智仁, 森 英喜	4. 巻 73
2. 論文標題 機械学習ポテンシャルを用いたBCC鉄へき開の大規模原子シミュレーション	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 材料, Journal of the Society of Materials Science, Japan	6. 最初と最後の頁 129 ~ 135
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.2472/jsms.73.129	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 -

1. 著者名 森 英喜	4. 巻 73
2. 論文標題 BCC鉄中らせん転位エナジクス解析における新しい境界条件のLAMMPS への実装	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 材料, Journal of the Society of Materials Science, Japan	6. 最初と最後の頁 136 ~ 140
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.2472/jsms.73.136	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 -

1. 著者名 Lobzenko Ivan, Tsuru Tomohito, Mori Hideki, Matsunaka Daisuke, Shiihara Yoshinori	4. 巻 64
2. 論文標題 Implementation of Atomic Stress Calculations with Artificial Neural Network Potentials	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 MATERIALS TRANSACTIONS	6. 最初と最後の頁 2481 ~ 2488
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.MT-M2023093	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 -

1. 著者名 Suzudo Tomoaki, Ebihara Ken-ichi, Tsuru Tomohito, Mori Hideki	4. 巻 12
2. 論文標題 Cleavages along {110} in bcc iron emit dislocations from the curved crack fronts	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 19701-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-022-24357-5	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 -

1. 著者名 Shiihara Yoshinori, Kanazawa Ryosuke, Matsunaka Daisuke, Lobzenko Ivan, Tsuru Tomohito, Kohyama Masanori, Mori Hideki	4. 巻 207
2. 論文標題 Artificial neural network molecular mechanics of iron grain boundaries	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Scripta Materialia	6. 最初と最後の頁 114268 ~ 114268
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.scriptamat.2021.114268	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 -

〔学会発表〕 計5件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 Hideki Mori
2. 発表標題 Investigation of mobility of screw dislocation in BCC iron by using neural network atomic potential
3. 学会等名 The International Conference on PROCESSING & MANUFACTURING OF ADVANCED MATERIALS Processing, Fabrication, Properties, Applications (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 森英喜
2. 発表標題 材料強度の解析および予測的評価に向けた高精度ニューラルネットワーク型原子間ポテンシャルの開発と適用
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 Hideki Mori, Mitsuhiro Itakura, Masahiko Okumura, Tomohito Tsuru, Yoshinori Shiihara, Daisuke Matsunaka
2. 発表標題 Investigation of interaction between dislocations and obstacles in BCC iron by using neural network atomic potential
3. 学会等名 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 森英喜，板倉充洋，奥村雅彦，椎原良典，松中大介
2. 発表標題 ニューラルネットワーク原子間ポテンシャルを用いた BCC鉄中の転位とボイドの相互作用解析
3. 学会等名 日本金属学会2021年秋期講演（第169回）大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 鈴木知明，海老原健一，都留智仁，森英喜
2. 発表標題 機械学習ポテンシャルを用いた BCC 鉄における破壊の分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 日本金属学会2022年春期講演（第170回）大会
4. 発表年 2022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
---------	---------