

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 23 日現在

機関番号：14301

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2015

課題番号：26820008

研究課題名(和文)原子シミュレーションによる金属の変形素過程の定量的評価手法の確立

研究課題名(英文) Establishment of a framework for quantitative evaluation of elementary process of deformation of metals using atomistic simulations

研究代表者

浦長瀬 正幸 (Uranagase, Masayuki)

京都大学・工学(系)研究科(研究院)・特定研究員

研究者番号：00512766

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,300,000円

研究成果の概要(和文)：原子シミュレーションにより代表的な塑性変形素過程のひとつであるすべり転位生成の定量的評価を実施する手法を確立した。その手法を主にマグネシウムに対して適用し、転位生成の応力・温度依存性について検討を実施した。特に、転位生成を熱活性化過程として捉えた際に"エンタルピー-エントロピー補償"と呼ばれる関係が底面・柱面すべりにおいて成立すること、また[11-20]方向への圧縮応力が底面転位生成に必要な分解せん断応力を低下させることを示した。また、ナノピラーや双結晶の一軸変形の分子動力学シミュレーションにより面欠陥を核とする塑性変形に対する検討も実施した。

研究成果の概要(英文)：The methodology for quantitative evaluation of dislocation nucleation using atomistic simulations is established. Then, dependence of the dislocation nucleation on stresses and temperature for magnesium is studied. In particular, I showed that "enthalpy-entropy compensation" is satisfied for basal and prismatic dislocation nucleations in a magnesium single crystal and the compressive stress in [11-20] can decrease the resolved shear stress for basal dislocation nucleation. In addition, molecular dynamics simulations on uniaxial deformation of magnesium nano pillar and bicrystal in order to study plastic deformations from plane defects.

研究分野：材料力学

キーワード：原子シミュレーション 転位 マグネシウム

1. 研究開始当初の背景

(1) 金属の塑性変形メカニズム解明のための実験はすでに膨大になされているが、現在においても解明されていない部分は特に非FCC金属において多く残されており、この解明のために計算機シミュレーションが果たすべき役割は非常に大きい。特にすべりや双晶形成のような変形の素過程の解明には個々の原子の運動を陽に取り扱う原子シミュレーションを利用することが最適であると考えられるが、通常の原子シミュレーションで取り扱える時間スケールで塑性変形を生じさせるには相当大きな歪み速度で金属を変形させねばならず、現実の実験で観察される現象と乖離している可能性が考えられるため、塑性変形素過程を定量的に評価するための手法の構築が必要とされていた。

(2) 21世紀に入り新たに開発された Mg-Zn-Y 合金は従来の Mg 合金の強度を大幅に上回り、構造材料への活用が期待されている。この Mg-Zn-Y 合金を変形した際に形成されるキンク帯は合金の圧的強度に大きく関係しているとされており、キンク帯形成のメカニズムの解明が重要な課題の一つとされている。現在提案されているメカニズムでは結晶内の多くのすべり面での転位生成が素過程となっており、塑性変形の素過程の定量的な評価手法の確立することでメカニズムの妥当性の検討に大きな貢献が期待できた。

2. 研究の目的

(1) 転位生成を中心とする塑性変形の素過程を原子シミュレーションにより定量的に評価する手法を確立し、種々の温度・応力環境下で評価を実施する。

(2) 定量的に評価した結果を単にデータベースとして活用するのではなく、その関係性について物理的な観点を重視した検討を実施する。

(3) 金属中に欠陥が存在する際の塑性変形メカニズムは複雑になることが予想されるため、特に面欠陥からの変形に着目し、分子動力学シミュレーションを実施してどのような変形が生じるかの観察を実施し、上で述べた定量的評価に必要なデータを得る。

3. 研究の方法

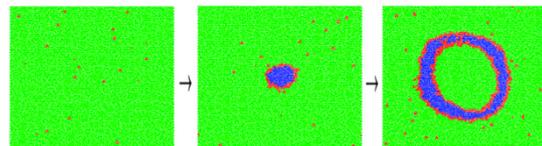
(1) 活性化自由エネルギーは有限温度における熱活性化過程の定量的指標であり、活性化自由エネルギーを原子シミュレーションにより評価する手法は既に種々提案されている。本課題ではその一つであるメタダイナミクス法を用いて転位生成の活性化自由エネルギーを評価する手法を確立し、多様な環境下での評価を実施した。

(2) Mg 双結晶やナノピラーに対して一軸引

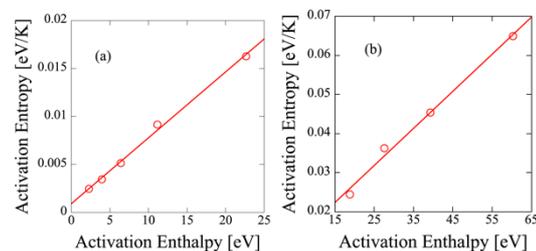
張・圧縮試験の分子動力学シミュレーションを実施し、面欠陥が存在する状況での塑性変形過程について結晶方位差や表面形状に対する依存性を調べた。

4. 研究成果

(1) メタダイナミクス法で用いる変数を転位生成箇所の上下に存在する原子グループの重心位置の差として定義することで実際にメタダイナミクス法により転位ループが生成されることを確認した(下図参照、緑、青、赤は局所構造がそれぞれHCP、FCC、その他であることを示している)。また、Mg 単結晶のすべり方向にせん断応力をかけた際の転位生成に必要な活性化自由エネルギーを評価し、せん断応力の関数として解析的な式によりフィッティングすることで現実の実験に対応する転位生成に必要なせん断応力を見積もる手法を確立した。

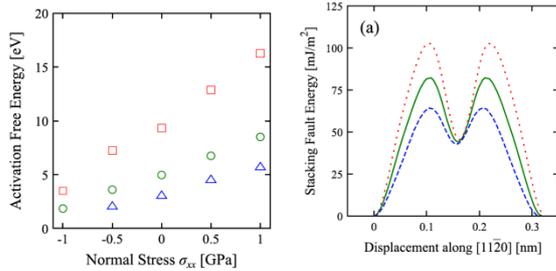


さらに、活性化自由エネルギーの温度依存性を底面すべりと柱面すべりに対して評価し、両すべり系においてせん断応力一定の下での活性化自由エネルギーが温度に対して線形的に減少することを見出した。この関係性から、活性化自由エネルギーをエンタルピー的寄与とエントロピー的寄与に分割することができ、両すべり系においてその二つの間に線形的関係が成立していることを明らかにした(下図参照、(a)、(b)はそれぞれ底面すべり、柱面すべりに対する結果を示している)。この関係は“エンタルピー-エントロピー補償”として種々の熱活性化現象に対して観察されている関係であり、金属中の転位生成においてもその関係が発見されたのは成果の一つとしてあげられる。本成果の詳細は下の〔雑誌論文〕④に公表されている。

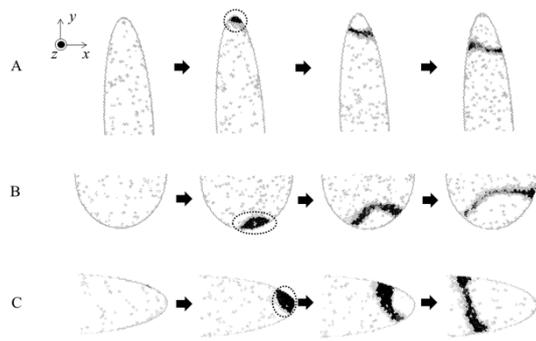
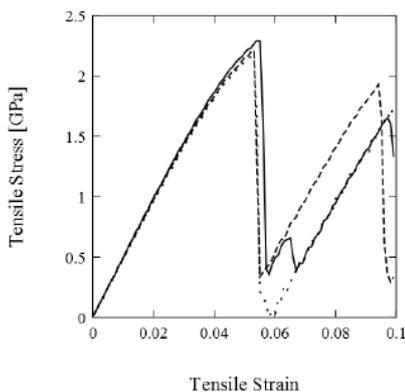


(2) 金属のすべりの定量的評価として一般的に用いられている臨界分解せん断応力 (CRSS) では金属内での垂直応力の影響を無視している。上の研究開始当初の背景において記した Mg-Zn-Y 合金では、キンク帯が形成される際に底面に平行な方向に非常に大きな応力がかかっているため、垂直応力の影響が無視できない可能性が指摘されており、その影響を調べることは十分な意義を有している。

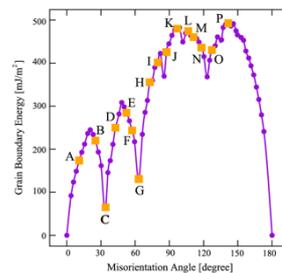
そこで、Mg 単結晶において同一せん断応力の下で[11-20]方向に垂直応力を負荷した条件で活性化自由エネルギーを評価したところ、圧縮応力が付加された際に活性化自由エネルギーが減少し、逆に引張応力が負荷された際には増加していることを見出した（下図左参照）。それに対し[-1100]方向への垂直応力に対する依存性は非常に小さかった。この原因を推察するために一般化 Γ -surface を用いて調べたところ、[11-20]方向に圧縮応力を負荷した際の不安定積層欠陥エネルギーが減少していることが分かった（下図右参照）。本成果の詳細は下の〔雑誌論文〕③に公表されている。



(3) 近年、非常に小さなサイズの金属単結晶であるナノピラーを生成することが可能となっている。ナノピラー内にはあらかじめ存在している転位が不十分であるため、塑性変形を生じさせるにはその変形を担うための転位を生成することが必要となる。ナノピラーの自由表面は面欠陥であり、転位生成の核となりうる。そこで、表面形状の異なる 3 種類の楕円柱型 Mg ナノピラーの一定ひずみ速度での引張試験を分子動力学シミュレーションにより実施したところ、降伏するまでの応力ひずみ曲線や降伏応力自体に大きな違いは見られなかった（下図参照）。ところが、表面の降伏時に転位が生成する箇所はモデルにより異なることを見出された（右段上図参照、黒い部分が積層欠陥であり、底面すべりが発生していることを示している）。具体的には表面の曲率が大きい箇所から転位が生成された。また本課題で確立した手法により転位生成の活性化自由エネルギーを評価したところ、実際に転位が生成した箇所における活性化自由エネルギーが他の箇所比べて低くなっていることが分かった。本成果の詳細は〔雑誌論文〕②に公表されている。



(4) 超微細粒金属やナノ多結晶体などは個々の結晶粒が非常に小さくなっており、新たな可能性を秘めた材料として非常に注目を集めている。これらの材料の変形では結晶粒界が果たす役割が非常に大きくなる。結晶粒界が変形に及ぼす影響の基礎的研究は双結晶モデルを用いて既になされているが、その多くは FCC 金属に対するものであり、Mg などの HCP 金属に対する系統的な研究はこれまでほとんどなされていなかった。そこで本課題では{1100}を回転軸とする対称傾角粒界を有する Mg 双結晶の一定ひずみ速度での一軸圧縮・引張試験の分子動力学シミュレーションを実施し、変形機構の結晶方位差依存性について系統的に評価を行った（用いたモデルの結晶方位差ならびに粒界エネルギーは下図参照）。



降伏応力や活動する変形モードは圧縮と引張において非対称性を示し、結晶方位差に対しても敏感に依存していることが分かった（下表参照）。特に、弾性変形に伴う方位差の増減に対し粒界エネルギーが減少するときに粒界から底面転位が生成しやすくなることを見出された。これは粒界からの転位生成が弾性変形に伴う方位差の変化に対し適応する過程で生じていると捉えられることを示している。さらに、準安定な粒界を有する双結晶についても圧縮・引張変形の分子動力学シミュレーションを実施したところ、結晶方位差が同じでも粒界構造が異なれば降伏応力や活動する変形モードに違いが生じることが明らかになった。本成果の詳細は下の〔雑誌論文〕①に公表されている。

Model	σ_{yield} (GPa)	Active deformation mode for compression	σ_{yield} (GPa)	Active deformation mode for tension
A	2.836	{1 2 0} Basal slip (GB)	1.306	{0 1 1} Twin, {0 1 1} twin
B	1.916	{1 2 0} Basal slip (GB)	1.410	{0 1 1} Twin
C	1.870	{1 2 0} Basal slip (Bulk)	1.513	{0 1 1} Twin, {0 1 1} twin
D	1.518	{1 2 1} Twin	1.227	{1 2 0} Basal slip (GB)
E	1.249	{1 2 0} Basal slip (GB)	1.780	{0 1 1} Twin, {0 1 1} twin
F	1.012	{1 2 0} Basal slip (GB)	1.923	{0 1 1} Twin
G	1.577	{1 2 0} Basal slip (Bulk), {1 2 1} Twin	2.166	{0 1 1} Twin
H	1.496	{1 2 1} Twin, {1 2 0} Basal slip (GB)	1.703	{1 2 0} Basal slip (GB)
I	1.533	{1 2 0} Basal slip (GB), {1 1 2 1} Twin	1.584	{1 2 0} Basal slip (GB)
J	1.493	{1 2 0} Basal slip (GB)	1.820	{1 2 0} Basal slip (GB)
K	1.571	{1 2 0} Basal slip (GB)	2.041	{1 2 1} Twin, {1 2 0} Basal slip (GB)
L	1.603	{1 2 0} Basal slip (GB)	1.931	{1 2 1} Twin, {1 2 0} Basal slip (GB)
M	1.785	{1 2 0} Basal slip (GB)	1.883	{1 2 1} Twin, {1 2 0} Basal slip (GB)
N	1.631	{1 2 0} Basal slip (GB)	1.948	{1 2 1} Twin, {1 2 0} Basal slip (GB)
O	2.173	{1 2 0} Basal slip (GB)	1.881	{1 2 0} Basal slip (GB), {1 1 2 1} Twin
P	2.480	{1 2 0} Basal slip (GB)	2.061	Intergranular cracking

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 4 件)

- ① Masayuki Uranagase, Ryosuke Matsumoto, Tension-compression asymmetry in uniaxial deformation of a magnesium bicrystal with $\{\bar{Y}100\}$ symmetric tilt grain boundary, Computational Materials Science, 査読有, Vol. 116, 2016, 124-132, 10.1016/j.commatsci.2016.03.012
- ② 浦長瀬 正幸, 松本 龍介, だ円柱形 Mg 単結晶の自由表面からの底面転位生成, 材料, 査読有, 65 巻, 2016, 135-140, 10.2472/jsms.65.135
- ③ Masayuki Uranagase, Ryosuke Matsumoto, Effects of normal stresses on the homogeneous nucleation of a basal dislocation in magnesium, Computational Materials Science, 査読有, Vol. 113, 2016, 143-147, 10.1016/j.commatsci.2015.11.031
- ④ Masayuki Uranagase, Ryosuke Matsumoto, Thermal activation analysis of enthalpic and entropic contributions to the activation free energy of basal and prismatic slips in Mg, Physical Review B, 査読有, Vol. 89, 2014, 224103 1-7, 10.1103/PhysRevB.89.224103

[学会発表] (計 11 件)

- ① 浦長瀬 正幸, 松本 龍介, 対称傾角粒界を有するマグネシウム双結晶の一軸変形の分子動力学解析, 日本機械学会 M&M2015 材料力学カンファレンス, 2015 年 11 月 21-23 日, 慶應義塾大学 (神奈川県横浜市)
- ② Masayuki Uranagase, Ryosuke Matsumoto, Quantitative Study on Dislocation Nucleation as an Elementary Process of Kink Band Formation, Mg 2015, 2015 年 10 月 11-16 日, Jeju (Korea)
- ③ Masayuki Uranagase, Ryosuke Matsumoto, Quantitative evaluation of dislocation nucleation as thermal activation process via atomistic simulations, ICM 12, 2015 年 5 月 10-14 日, Karlsruhe (Germany)
- ④ 浦長瀬 正幸, 松本 龍介, Mg 結晶中における転位生成の温度・応力依存性の原子シミュレーションによる検討, 第 58 回日本学術会議材料工学連合講演会, 2014 年 10 月 27-28 日, 京都テルサ (京都府京都市)
- ⑤ Masayuki Uranagase, Ryosuke Matsumoto, Atomistic Simulation Study of the Dependence of Thermal Activation of Dislocation Nucleation in Mg on Temperature and Applied Stresses, LPSO 2014, 2014 年 10 月 5-8 日, Hotel Nikko Kumamoto (Kumamoto)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

浦長瀬 正幸 (URANAGASE, Masayuki)
京都大学大学院工学研究科・特定研究員
研究者番号: 00512766