

マルチスケール材料モデリング ー金属の変形をナノスケールから調べるー

東京理科大学 理工学部 機械工学科 准教授 **たかはし 高橋** **あきゆき 昭如**

はじめに

電化製品や自動車など我々の身の回りにある多くの機器や部品には金属が用いられています。金属は、加工性や強度などに優れ、原子炉の炉心構造物の材料としても用いられるなど、古典的な材料ではありますが、今日の工業を支える重要な材料です。金属は長期間使用されると、その使用環境によって、その性質が変化することがあります。例えば、原子炉では、原子炉圧力容器鋼が核分裂により放出された中性子によって長期間にわたり照射されると、本来延性（大きく伸びて変形することができる性質）に富んだ鋼材が、脆く

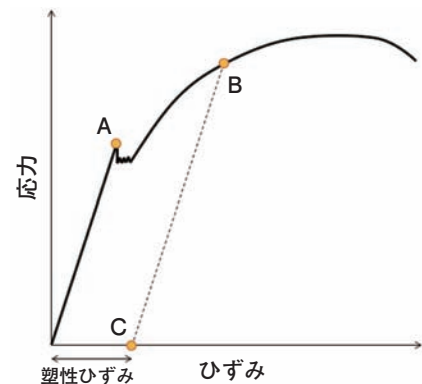


図1 鋼材の典型的な応力-ひずみ関係

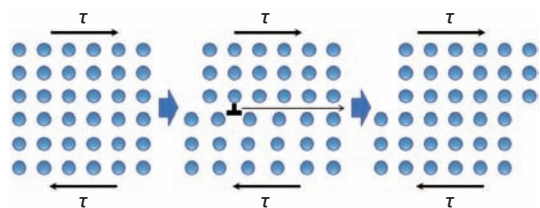


図2 転位の移動によるすべり変形 塑性変形

なる（脆化する）ことが知られています。このような金属の変形や破壊に関連する性質の変化は、構造物の健全性を評価する上で重要な問題であるため、健全性評価の信頼性向上のためには、現象の本質的なメカニズムの理解が必要です。

筆者はこれまでに、金属の（塑性）変形を担う欠陥である転位の性質や運動に注目し、マルチスケール材料モデリングアプローチを用いて、微視的組織を持った金属（合金）の強化メカニズムや、破壊靱性値の温度や微視的組織依存性について研究を行ってきました。本稿では、このような金属の経年劣化現象のメカニズム解明の一つのアプローチであるマルチスケール材料モデリングについて紹介します。

金属の変形を担う欠陥：転位

図1に鋼材の典型的な応力とひずみの関係を示します。

負荷する応力が小さい領域（点A以下の領域）では、線形的な弾性変形（応力とひずみの間に比例関係のある変形）を示し、応力を除荷すると、線形的な関係を維持したまま、元の形状に戻ることができます。一方、負荷する応力がA点を超えてさらに大きくなると、応力とひずみの間には非線形な関係が見られます。このような変形を塑性変形と呼びます。例えば、材料がB点まで変形し、その後除荷すると、図中に点線で示したように弾性変形と並行に移行し、応力が0の状態にお

いてもひずみが残ります（点C）。この残ったひずみを塑性ひずみと呼びます。この塑性ひずみは、図2に示すように転位と呼ばれる格子欠陥が金属中の特定の原子面（すべり面）を移動し、すべり面上下に対して相対的な変形（すべり変形）を与えることに

よって蓄積されることが知られています。すなわち、転位の運動の特性を知ることによって、塑性変形のメカニズムを知ることができます。さらに、転位の運動を制御することによって材料の変形特性を制御（デザイン）することも可能になります。実際の金属中では、 1 m^3 当たり $10^9 \sim 10^{16}$ 程度の転位が存在するため、塑性変形のメカニズムの詳細な理解のためには、個々の転位の運動の特性のみではなく、多数の相互作用する転位の運動を理解することが必要です。

金属の変形や破壊に関連するマルチスケール材料モデリング

前述の通り、金属の塑性変形は、巨視的に見れば塑性ひずみの蓄積ですが、ミクロに見れば格子欠陥である転位の移動ということになります。すなわち、金属の経年劣化による材料特性の変化のメカニズムを知るためには、破壊靱性値や延性脆性遷移温度など巨視的な材料特性の変化のみに注目するのではなく、微視的なメカニズムの変化による巨視的な材料特性への変化を捉える必要があります。

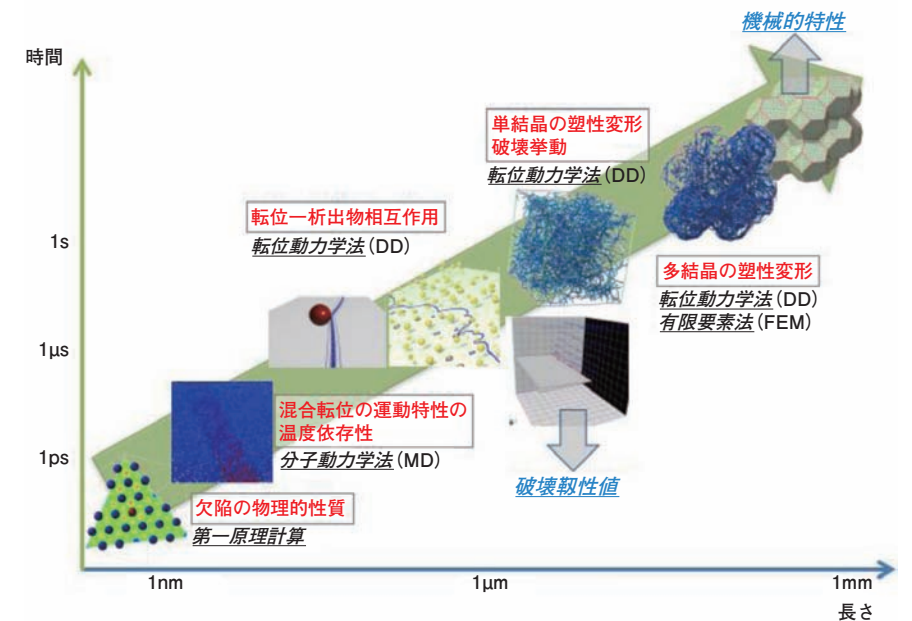


図3 計算機シミュレーションを応用したマルチスケール材料モデリングの概略図

す。しかし、微視的なメカニズムである転位の運動は、転位の物理的性質に関連するため、転位の周りの電子状態や原子の配列に関わる微視的な分析が必要であり、例えば、第一原理計算や分子動力学法を用いた数値解析を応用して調べる必要があります。一方、材料の巨視的な変形は、連続体力学に基づいた有限要素法などを応用する方法が挙げられます。このような量子力学から連続体力学に渡る現象を一度に調べることは困難です。

このような問題に対するアプローチとして、マルチスケール材料モデリングがあります。図3に金属材料の変形や破壊に関わるマルチスケール材料モデリングの概略図を示します。マルチスケール材料モデリングでは、金属の変形や破壊に関連するメカニズムを長さや時間スケールごとに分類し、各スケールに適した計算機シミュレーション手法を用いて、そのスケールにおける現象を調べます。また、注目するスケールの下のスケールで得られた情報は、注目するスケールで用いることによって、下のスケールのメカニズムを考

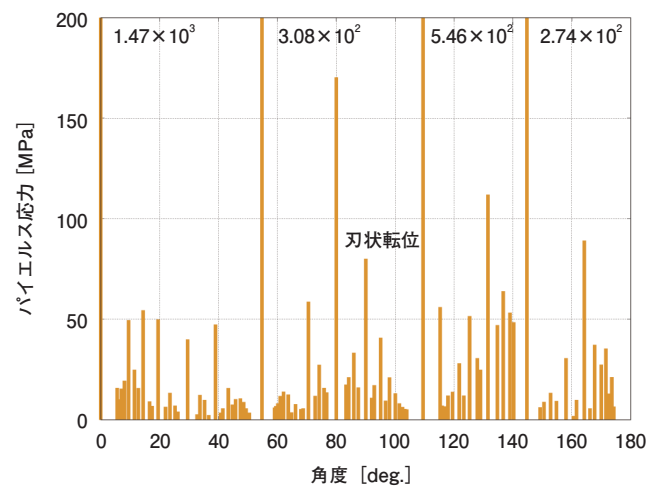


図4 分子動力学法を用いて計算したBCC鉄中の転位のパイエルス応力

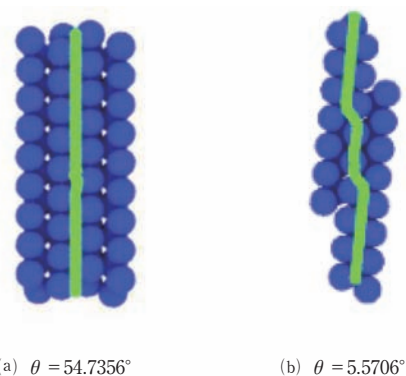


図5 分子動力学法によって得られたBCC鉄中の転位の転位芯構造
(a) パイエルス応力が高い転位
(b) パイエルス応力が低い転位

慮した計算機シミュレーションが可能になります。

このようなモデリングを欠陥の物理的性質のような最も小さい長さおよび時間スケールのモデリングから始め、ボトムアップ式に巨視的なスケールの計算機シミュレーションに繋げていくことによって、微視的なスケールにおけるメカニズムから巨視的な材料特性を導き出すことが可能になります。

以下では、筆者が行ってきたマルチスケール材料モデリングを用いた金属の変形に関する研究の具体的な例について紹介します。

分子動力学シミュレーションを用いた転位の運動のモデリング

転位には種類があり、転位の移動によりすべり面の上下の結晶がすべり変形する大きさと方位を表すバーガスベクトルと、転位の線の向きを表すベクトルの間の角度で表現されます。特に、バーガスベクトルと転位の線の向きのベクトルが平行の時をらせん転位と呼び、直角の時を刃状転位と呼びます。それ以外の角度は、らせんと刃状が混ざった混合転位と呼ばれます。

鋼材中では、らせん転位の移動が、その他の転位に比べて非常に遅いことが知られています。しかし、らせん転位や刃状転位、さらに混合転位のすべてについて転位の運動の特性は詳細に分かっていないため、マルチスケール材料モデリングに基づいて、転位動力学シミュレーションにより塑性変形解析を実現するためには、すべての転位の運動についてその特性をモデル化し、転位動力学法に実装することが必要です。

筆者らは、分子動力学法を用いてBCC（体心立方格子）鉄中の転位について、その運動の特性について調べました。分子動力学法とは、原子間に作用するポテンシャルを簡単な関数で定義し、その空間微分から力を計算し、原子を質点と見立てて運動方程式を時間方向に数値的に積分することによって、原子の運動を追跡する方法です。転位は格子欠陥なので、分子動力学シミュレーションにおいては、原子配列の乱れた場所が転位となります。したがって、分子動力学シミュレーションによって原子の運動を調べ、その中にある格子の乱れを調べることによって転位の運動を調べることができます。

まず、転位の移動に必要な応力であるパイエルス応力について分子動力学シミュレーションを用いて調べました。その結果を図4に

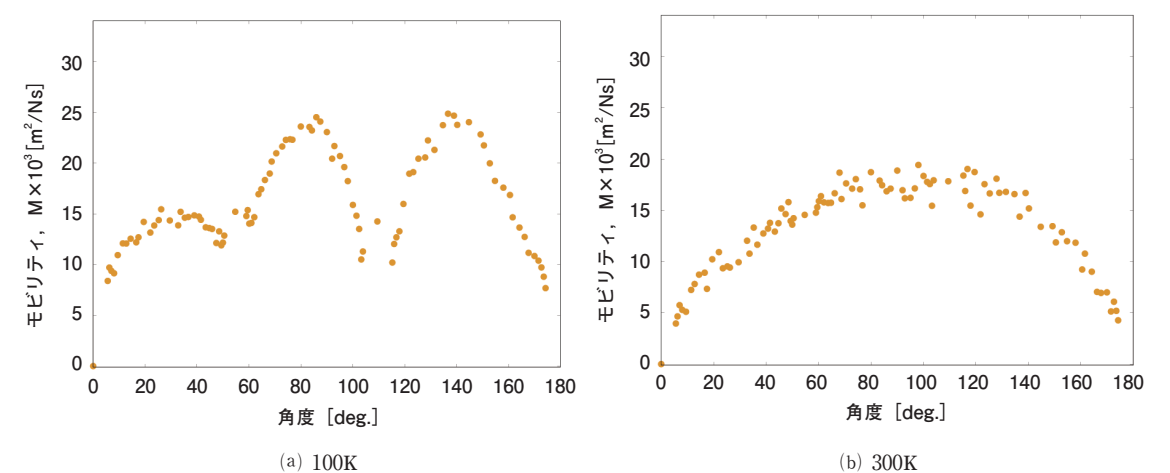


図6 分子動力学法を用いて計算したBCC鉄中の転位のモビリティ

示します。図4を見ると、らせん転位のパイエルス応力がその他の転位のパイエルス応力に比べて非常に大きいことが分かります。これは実験的研究によって観察されていた転位の運動の傾向と一致する結果です。その一方で、らせん転位以外の混合転位の幾つかにおいても比較的高いパイエルス応力が計算されました。このような高いパイエルス応力が生まれる原因について調べるために、転位付近の原子配列（転位芯の構造）について調べてみました。

図5に転位芯の構造を示します。示しているのは、各原子について局所的な構造解析を行い、BCC構造になっていないと判断された原子であり、転位付近の原子配列と一致します。さらに、図中に示した緑色の実線は、転位抽出アルゴリズム（Dislocation eXtraction Algorithm : DXA）を用いて求めた転位線の形状を表す線です。パイエルス応力が高い転位の場合、転位線が直線的であるのに対し、パイエルス応力が低い転位の場合は、斜めの直線に段差があることが分かります。このような段差をキンクと呼び、パイエルス応力が低い転位は潜在的にキンクを含んでいることが分かります。さらに、転位の移動の様子を調べると、パイエルス応力が高い転位の場合は、直線形状を保ったまま転位が一度に次の

位置に移動するのに対し、パイエルス応力が低い転位の場合は、キンクが斜めの転位線に沿って移動し、その結果転位が前進することが分かりました。

すなわち、高いパイエルス応力は転位を一度にジャンプさせるために必要な応力であり、低いパイエルス応力はキンクを移動させるために必要な応力であることが分かり、これらのパイエルス応力の意味が異なることが分かりました。

一般的に、転位の移動速度は転位の位置における分解せん断応力と比例関係があり、転位の運動の特性をモデル化する上で、この比例係数（モビリティ）を決定する必要があります。そこで、分子動力学法を用いて、一定温度条件下で、さまざまなせん断応力を負荷した場合の転位の移動速度を調べ、せん断応力と転位の移動速度の間の比例関係からモビリティを算出しました。その結果を図6に示します。

室温が300Kの時は、らせん転位のモビリティが低く、刃状転位のモビリティが最大となり、山形の分布をしていることが分かります。一方、低温である100Kの場合は、らせん転位のみではなく他の混合転位においても低いモビリティが算出されました。この低いモビリティを持つ転位は、図4に示した高い

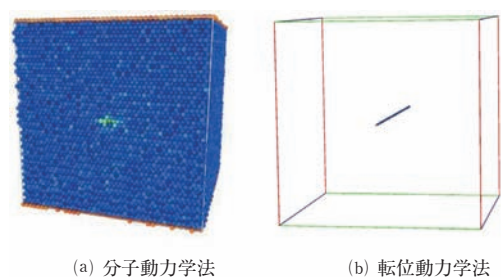


図7 分子動力学法と転位動力学法による転位の運動シミュレーションモデル

パイエルス応力を持つ混合転位と一致するため、特に低温において転位の運動が転位芯の構造に強く依存することが分かりました。このようなモビリティの情報は、転位動力学法における速度の計算の重要なパラメータです。ここで得られたモビリティを転位動力学法に実装することによって、BCC鉄中における転位の運動の転位の種類に対する依存性や温度依存性を考慮した転位動力学シミュレーションが可能になります。

転位動力学シミュレーションを用いた塑性変形解析

図7に分子動力学法と転位動力学法における転位が1つの運動のシミュレーションモデルを示します。転位動力学法は、原子配列の乱れである転位を線として捉え、転位線を線分要素で分割し、転位の動きを直接取り扱うシミュレーション方法です。分子動力学法では、転位のシミュレーションを行うために、計算コストは領域に含まれる原子の総自由度によって決まりますが、転位動力学法では、転位を表現する線分要素の自由度で決まるため、多数の互いに相互作用する転位の運動をシミュレートすることが可能です。

転位動力学法は、均質な単結晶材料中の転位の運動をシミュレートすることで塑性変形の数値解析を行うことができる方法です。

具体的には、転位が物体中に作る応力を計算し、その応力によって転位が受ける力を計算します。転位が受ける力と転位の移動速度

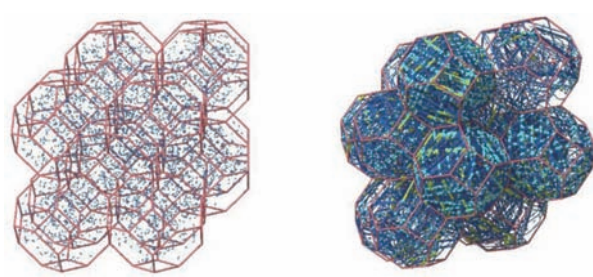


図8 転位動力学法を用いた多結晶金属の塑性変形解析
結晶粒直径：8 μm

の関係から転位の移動速度を計算し、その移動速度を時間方向に積分することによって転位の運動をシミュレートします。転位が受ける力から転位の移動速度の計算には、モビリティを用いて計算されるため、分子動力学法で得られたモビリティに関する知見を転位動力学法に実装することが可能です。転位が物体中に作る応力は、物体境界のない無限体中における理論解を用いて計算しますが、多結晶金属中の転位の運動をシミュレートするためには、多結晶金属中において転位が作る応力を計算する必要があります。多結晶金属を構成する単結晶は一般的に弾性異方性を持つため、結晶方位によって異なる弾性的な性質を持ち、さらに多結晶金属では、それぞれ異なる結晶方位の単結晶が集まってできていることから、一種の異種材料の塊として理解することができます。

著者らは、重ね合わせの原理を応用し、多結晶金属中における転位の応力を計算することを可能にしました。さらに、多結晶金属が本来持つ特性を調べるためには、多結晶金属のバルク特性を理解する必要があるため、材料が無限体であることを仮定し、適切な境界条件を与える必要があります。著者らは、均質化理論を転位動力学法に応用し、解析対象とする計算モデルが周期的に配列したバルク材料の変形特性の転位動力学シミュレーションを可能にしました。

図8に転位動力学法を多結晶金属の塑性変形解析に応用した例を示します。図中の赤い

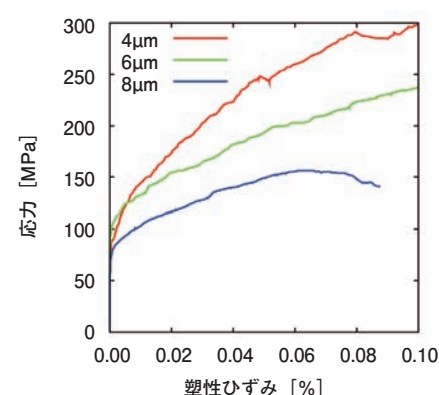


図9 異なる大きさ（直径：4, 6, 8 μm ）の結晶粒を持つ多結晶金属の応力－塑性ひずみ関係

線は、結晶粒の稜線を表し、青い線は、転位線を表しています。上下に引っ張り荷重を負荷する数値解析を、結晶粒の直径を4, 6, 8 μm に変化させて行いました。引っ張り荷重によって、転位が増殖し、各結晶粒中に多数の転位が堆積していることが分かります。転位の移動は結晶にすべり変形を与えるため、転位の移動量から塑性ひずみを計算することができます。したがって、与えた引っ張り荷重から応力を計算し、転位の移動から計算された塑性ひずみを計算することによって、転位動力学法による転位の運動のシミュレーションから金属の巨視的な応力－ひずみ関係を計算することが可能です。

図9に多結晶金属の転位動力学シミュレーションによって得られた、応力－塑性ひずみ関係を示します。およそ80MPaの応力から塑性変形が開始し、その後非線形な挙動を示していることが分かります。また、結晶粒の大きさを小さくすると、変形に必要な応力が増加していることが分かります。一般的に、多結晶金属には“Smaller is stronger”の関係があり、結晶粒のサイズを小さくすると強度が上がるのが知られ、寸法によって材料の強度が変化する寸法効果の一つとして知られています。すなわち、多結晶金属は結晶粒を微細化することにより強化することが可能であり、実際の材料設計においても重要な強化

機構として用いられています。転位動力学法では、転位線がバーガースベクトルを持ち、バーガースベクトルの大きさが現象の寸法パラメータとなり、多結晶の塑性変形における寸法効果を再現しています。

このように転位動力学法を用いることで、計算可能な長さスケールを分子動力学法における長さスケールから大幅に大きくすることができ、金属の巨視的な特性である応力－ひずみ関係を導き出すことが可能です。さらに、分子動力学法によって得られたモビリティの情報を転位動力学法に実装することによって、転位の運動に対する温度や転位の種類による依存性を考慮することが可能になり、転位の原子スケールにおける特徴から巨視的な金属の変形挙動を導き出すことが可能になります。

まとめ

本稿では、筆者が行っているマルチスケール材料モデリングによる金属の変形の数値解析について紹介しました。

マルチスケール材料モデリングという考え方は決して新しい枠組みではなく、古くから考えられてきたアプローチです。しかし、これまでのマルチスケール材料モデリングに関する研究は、各スケールにおける計算機シミュレーションに止まり、スケール間を繋ぐ真の意味でのマルチスケール解析には至っていませんでした。近年の計算機の進歩や計算機シミュレーション手法の発展、さらに各スケールにおける現象の理解によって、スケール間を繋いだマルチスケール解析が実現されつつあります。

このようなマルチスケール材料モデリングの発展は、材料の原子スケールの情報と巨視的な破壊や変形特性を繋げることを可能にし、将来の新材料開発や経年劣化メカニズムの解明のための有力な研究アプローチとなることが期待できます。