



躍動

若手研究者・技術者の取り組みと将来の夢

格子欠陥の振る舞いに学ぶ

下川智嗣

Tomotsugu Shimokawa

金沢大学
理工研究域 機械工学系
准教授

筆者は、原子シミュレーションを用いて、格子欠陥の振る舞いを研究している。そして、構造用材料が示す変形や破壊現象を、計算機内で表現される格子欠陥の振る舞いから理解することが研究の目的である。ここでは、筆者のこれまでに取り組んできた研究テーマと最近の考えについて紹介させて頂く。

1 格子欠陥の役割

あるモノの役割は、それを取り巻く環境により変化する。例えば、筆者について整理すると、図1 (a) (b) に示すように、職場では、教員・研究者としての役割があり、家に帰ると、父親・夫として、また両親から見れば息子としての役割がある。さらに筆者の住んでいる地域では、小太りのおじさ

んとしての役割がある。筆者自身は本質的に変身できないが、筆者を取り巻く環境に応じて何とか役割をこなしている。ちなみに、皆様も同じであると思うが筆者の役割の割合は、図1 (a) に示すような均等な場合はほとんどない。

それでは、これまで筆者が職場で研究を続けている構造材料を構成する原子について上記の話を当てはめてみる。原子についても、図1 (c) に示すように、それを取り巻く環境で、その役割は大きく変化する。原子群が三次元的にある周期性を持って並んでいる場合、その原子は結晶構造を取り、主に弾性ひずみエネルギーを効率良く蓄える役割を担う。しかしながら、全ての原子が同じ結晶構造を取った場合、蓄える弾性ひずみエネルギーを解放するメカニズムがないため、その結晶材料は例えば理想強度まで負荷を耐えられることになる。しかしながら実際には、構造用材料において、このような負荷まで耐えられないことは経験上明らかであり、このことが欠陥を対象とした材料強度の理論の発展へ繋がることになる。点欠陥領域（空孔）に存在する原子は、ある程度の熱振動を用いれば、空孔サイトへ移動することが可能であり、材料中の質量を移動させる役割を担う。つぎに線欠陥領域（転位芯）に存在する原子は、ある力学環境下において、隣接する原子と結合を繋ぎ換えることにより、転位を移動させることができ、結果的に材料中にバーガースベクトルの大きさの塑性変形を生じさせる役割を担う。一方で、他の転位の運動に対してこの転位は影響を与えることも可能であり、材料は強化することができる。最後に、面欠陥領域（ここでは特に粒界に注目する）に存在する原子の役割について考えるが、それを表現するために必要な自由度が大きいいため、粒界領域内に存在する原子を取り囲む環境は、点欠陥や線欠陥よりも複雑であり、そのため、粒界領域内に存在する原子の役割は多様である。それに加えて、図1 (c) に示す原子の役割の割合は、結晶粒径に応じて大きく変化する。つまり、結晶粒径が小さくなるほど、粒界領域に存在する原子の割合は多くな

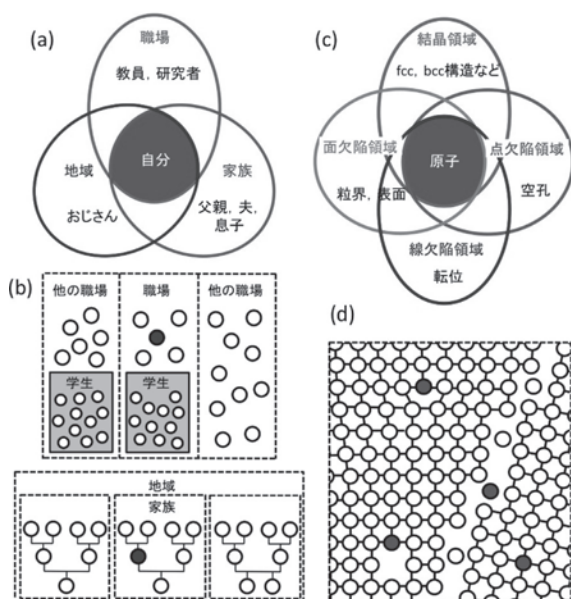


図1 環境により変化する色々な役割

る。そのため、結晶粒径を小さくした超微細粒材料は特異な力学特性を示すことが報告されているが^{1,2)}、その発現メカニズムを理解するためには、既に確立した格子欠陥の理論の枠組だけでは不十分なときが多く、粒界領域に存在する原子の振る舞いを理解する必要がある。これが、現在筆者が行っている研究の中心である。

2 原子シミュレーションによる 格子欠陥の振る舞い解析

筆者が粒界内の原子の振る舞いを理解するために用いる方法は、計算機シミュレーションの一種である分子動力学法である³⁾。粒界内の原子の振る舞いを解析するとき分子動力学法が他の手法に比べて優れているところは、欠陥領域に存在する原子を含めて個々の原子の運動を（ここでは簡単のために、単相構造を考える）、同一の原子間ポテンシャルのみで表現できることである。すなわち、解析者は解析モデル中の原子がどのような領域を構成しているかについて予め区別する必要はなく、欠陥領域に存在する原子の運動も、結晶領域に存在する原子の運動と全く同一に取り扱うことになる。両者の違いは、図1 (d) に示すように自分を取り囲む環境（原子配置）のみである。そのため、粒界領域に存在する原子の運動は、解析者の意思を導入する必要はなく、通常は原子間ポテンシャルのみにより決定される。このことから、分子動力学計算で取り扱う材料は、原子間ポテンシャルの形状のみにより表現される仮想材料として考える。

図2に分子動力学シミュレーションにより得られたアルミニウム多結晶の強度と粒径の関係の結果を示す^{4,5)}。原子間相互作用として積層欠陥エネルギーの値を定量的に良く再現できるMishinらの原子埋め込み法を用いる⁶⁾。先ほどの言葉を用いれば、これから紹介する材料は、Mishinらの原子間ポテンシャルにより表現されるアルミニウムを模擬した仮想材料である。図2 (a) (b) に解析モデルの概要を示す。AからHの結晶粒の配置を変えることで、集合組織を保ちつつ、異なる粒界方位差分布を有する多結晶を作製する。全ての結晶粒の x 方向は、 $\langle 110 \rangle$ 方向とするため、全ての粒界は傾角粒界となる。図2 (a) (b) の粒界上の値は粒界方位差であり、括弧の中の値は対称粒界面からのずれ角度である。つまり、各粒界領域に存在する原子の配置は、粒界方位差やずれ角度に応じて異なっている。また、図2 (c) に方位差分布を示す。白色がcase-1であり、黒色がcase-2である。本解析では、結晶粒径が5nmから80nmの範囲のモデルを考える。各モデルに対して、解析温度は300K一定条件で z 軸方向引張変形解析を、 z 方向にひずみ0.0004を500fs毎に与えることで実

行する。図2 (e) にcase-1とcase-2における粒径5~80nmまでの平均流動応力と結晶粒径 $d^{-1/2}$ の関係を示す。平均流動応力は、単軸引張変形におけるひずみ0.1から0.2の間の変形応力の平均した値を用い、エラーバーはその分散を示す。結晶粒径が80nmから小さくなるにつれて流動応力の値は増加しており、Hall-Petchの関係に従うように結晶粒微細化に伴う強化機構が生じていることが確認できる。つまり、この粒径の範囲では、粒界領域の原子は、転位の運動に対して障害物として振る舞っている。また今回の解析モデルには、初期状態において粒内に転位源を配置していないため、粒界領域の原子が集団的に動くことにより、初期転位源として機能していることが理解できる。一方で、結晶粒径をさらに小さくしていくと、流動応力の値が減少していることが確認でき、結晶粒微細化に伴う軟化機構が生じていることが理解できる。つまり、この結晶粒の範囲では、粒界領域の原子が粒界すべりや粒界移動という集団的な振る舞いをすることにより塑性変形を促進していることが理解できる。ここで、興味深いことは、結晶粒微細化に伴い強化する領域では、case-2の方がわずかであるがcase-1よりも変形抵抗が大きいことであり、一方で、結晶粒微細化に伴い軟化する領域ではcase-2の方がcase-1よりも変形抵抗が小さくなっていることである。つまり、粒界の役割は粒径と共に遷移することが確認できるが、それぞれの能力は粒界領域の原子の配置に強く影響を受けていることがわかる。

それでは、どのような原子配置のとき、その粒界はどのような役割を得意とするだろうか？ 図3 (a) (b) は、亀裂から発生した転位と粒界の相互作用を解析した一例である⁷⁾。図3 (a) に示すように、亀裂から発生した1番目と2番目の転位は粒界に侵入し、後続の3番目の転位以降は粒界にパイルアップする。その結果、転位パイルアップの先頭領域に大きな応力集中を形成し、粒界から転位を放出することで、塑性変形を隣接粒に伝ばしていることが確認できる。このとき、図3 (b) に示すように、粒界領域の原子の振る舞いを詳細に解析すると、外部から粒界領域に侵入した2つの格子転位の幾何学的なミスフィットは、粒界に存在する粒界転位の運動により緩和されることが理解できる。特に、粒界面に平行なバーガースベクトル成分を有する粒界転位のすべり運動が重要であり、このことは、対称粒界よりも非対称粒界の方が外部から侵入する転位を緩和できる能力が高いことを示唆している。つぎに図3 (c) (d) は、様々な対称傾角粒界から転位が放出する現象を解析した一例である⁸⁾。図3 (c) に示すように、粒界面に垂直な方向に変形を加えたとき、粒界面から転位が発生していることが確認できる。これは、図3 (d) に示すような粒界構造、特に粒界転位に密接に関係している。さ

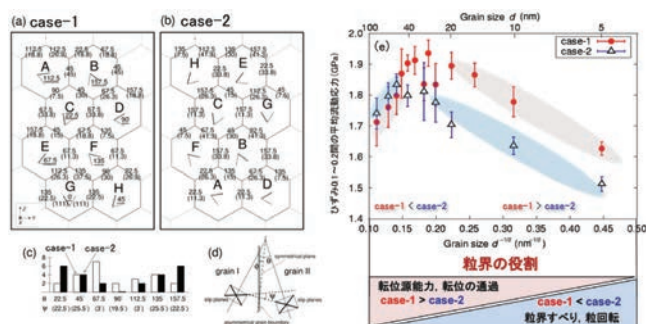


図2 原子シミュレーションによるアルミニウムナノ結晶の強度と粒径の関係

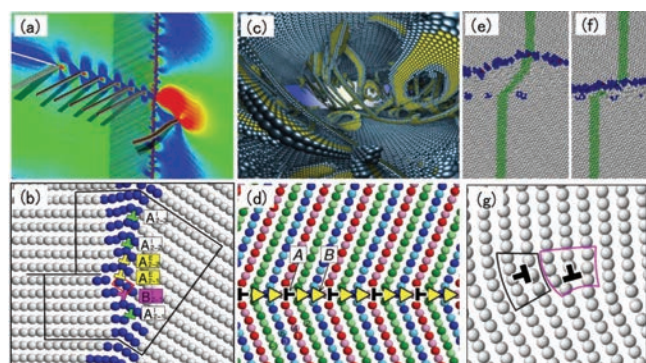


図3 粒界領域の原子の振る舞い。(a) (b) 外部から侵入する転位に対する粒界の役割。(c) (d) 転位源としての粒界の役割。(e) (f) (g) 粒界移動・粒界すべりにより塑性変形を促進する粒界の役割 (e) 300k, (f) 800k

らに、図3 (e) (f) (g) は、粒界面に対してせん断変形を加えたときに生じる粒界移動・粒界すべりの解析をした一例である。ここで、図3 (e) (f) の結果は、図3 (g) に示す同じ粒界構造によるものであるが、解析温度が異なることで、粒界領域の原子の振る舞いが異なることが理解できる。図3 (e) に示すように解析温度が低いとき (300K)、図3 (g) に示す粒界転位の運動に基づく粒界移動が生じていることがわかり、また図3 (f) に示すように解析温度が高い場合 (800K)、粒界領域の原子拡散が支配的となり、粒界すべりが生じていることが理解できる。以上のように粒界領域の原子配置により粒界の振る舞いは大きく変化するが、その原子配置から粒界転位を表現し、その粒界転位を通じて粒界の振る舞いを理解することが有効であると考え、現在研究を進めている。

3 粒界は和して同ぜず

原子シミュレーションを通じて原子の振る舞いを16年間眺め続けている。常に思うことは、力学に基づいている自然は美しいということである。このことは筆者の恩師 (北川 浩 大阪大学名誉教授、大阪大学 中谷彰宏教授) による教え

を通じて身についた感覚であり (残念ながら定量的な力学の知識は未だに修行中である)、筆者の一生の財産である。原子は決して己のエゴを出さず、粛々と自分の役割をこなしている。特に粒界領域の原子は、「和して同ぜず」の精神を持っているかのようなのである。粒界に格子転位が侵入してくる場合、1バーガスベクトル分の幾何学的なミスフィットが生じるが、粒界領域の原子達は最も効率良く、そのミスフィットを緩和している。また、粒内に弾性ひずみエネルギーを解放する起点がないとき、粒界はそれに倣うのではなく、自ら塑性変形の起点の役割を担い、構造材料の力学特性に貢献している。最初に述べたように筆者にも様々な役割があるが、粒界領域の原子のように異なる文化や考え方に板挟みになるときも多々ある。そのとき、どのように振る舞っているだろうか? 「同じて和せず」になっていないだろうか? 多様な環境におかれる原子の気持ちが理解できるように、もっと精進していこう。そのことを通じて、構造用材料分野に対して少しでも貢献をすることができ、また筆者自身の成長に繋がると信じている。最後に、これまでの人生、多くの人々に支えられて生きてきた。そして、研究人生を歩み出し、多くの素晴らしい人々に出会えて、とても楽しい。全ての人々に感謝の気持ちで一杯です。筆者自身も先輩方のような役割を将来できるように頑張ります。

参考文献

- 1) N.Kamikawa, X.Huang, N.Tsuji and N.Hansen : Acta Mater., 57 (2009) , 4198.
- 2) M.Tanaka, K.Higashida, T.Shimokawa and T.Morikawa : Mater. Trans., 50 (2009) , 56.
- 3) 北川浩, 北村隆行, 瀧谷陽二, 中谷彰宏 : 初心者のための分子動力学法, 養賢堂, (1997) .
- 4) T.Shimokawa, A.Nakatani and H.Kitagawa : Phys. Rev. B, 71 (2005) , 224110.
- 5) 下川智嗣, 喜成年泰, 新宅救徳 : 材料, 57 (2008) , 761.
- 6) Y.Mishin, D.Farkas, M.J.Mehl and D.A.Papaconstantopoulos : Phys. Rev. B, 59 (1999) , 3393.
- 7) T.Shimokawa, T.Kinari and S.Shintaku : Phys. Rev. B, 75 (2007) , 144108.
- 8) T.Shimokawa : Phys. Rev. B, 82 (2010) , 174122.

(2012年8月3日受付)

先輩研究者・技術者からのエール

九州大学 大学院総合理工学研究院 融合創造理工学部 教授

中島 英治

「何と理解の早い、優秀な人間であろう」と下川先生と結晶粒界のことを話していて思った。九州大学の堀田先生が代表をされた文部科学省の特定研究の研究会で下川先生は大規模分子動力学法による結晶粒界からの転位放出や吸収過程を、いとも簡単に我々に見せてくれた。我々は力学的な方法や電子顕微鏡で、粒界の関わる現象を調べ、粒界の原子構造を探ってきた。10年ぐらいかかってやっと理解できたことを、数分間しゃべっただけで理解してしまう。なんという、理解力だろうか。

下川先生は大阪大学の中谷彰宏先生の門下生である。中谷先生は機械工学が専門で、下川先生も当然、機械工学の基礎を学んでいる。多分、力学という共通の言葉で我々材

料の格子欠陥の分野に入って来たのであろう。ご存知のように、格子欠陥は機械学会の分野では嫌われ、物理学会でも非常にマイナーな分野として取り扱われている。機械工学出身の方々が鉄鋼協会や金属学会に参加されるのは、相当な覚悟が必要であったと思う。ただ、今日、真の意味での学際性が必要とされており、下川先生を筆頭として、機械系と材料系の融合が望まれる。また、分子動力学など原子一つ一つを取り扱う研究分野は個別の問題を解くことは得意であるが、これらの研究成果を体系化し、マルチスケール格子欠陥論のような分野を開拓されることを強く望むところである。

新日鐵住金(株) 顧問

松宮 徹

「恥ずかしながら、下川氏を知るようになったのはごく最近である。それは材料の機械的性質への分子動力学法の適用について、暫く筆者のウオッチが甘くなっていたためである。眼を開けてみると、金属学会報「まてりあ」の粒界と転位についての氏の「最近の研究」に纏められているが、粒界の構造、転位との関わりについて、分子動力学法を用いて素晴らしい研究を精力的に積み重ねてきている。阪大北川浩先生一門と伺って合点が行った。加えて、破壊亀裂進展過程のシミュレーションにおいて、亀裂先端から放出された転位が粒界に到達してパイルアップする場合は、亀裂先端に応力場が形成されて更なる転位放出が抑制され、亀裂先端は鈍化せずに、亀裂は進展するが、一方、粒界が転位を放出してこのパイルアップを生じない場合は、亀裂先端は鈍角化して進展が止まる等の解析は印象的である。

氏と計算機シミュレーションを実施するにあたっての姿勢について話し合ったことがあったことがある。その結果、漫然とシミュレーションに掛るのではなく、導き出したい結果が得られるように設計されたシミュレーションを行うべきだと意見が一致したように記憶している。そのような立場をとるには解析対象に対する事前の十分な考察が

必要であり、そのことが機構解明にとって極めて効率的だと考える。

さて、材料の機械的性質を理解するには、マルチスケール・マルチフィジックスにわたる現象を観察しなければならない。原子間ポテンシャルの下での原子の振る舞いを観察することにより、粒界に入り込んだ転位に及ぼす粒界転位の影響、粒界からの転位放出機構等がモデル化されれば、転位動力学のPF法等のメソスコピック・シミュレーションに適用して、より大きな現象の解析に威力になると期待される。また、一方、第一原理分子動力学法によるシミュレーションにも取り組んで、原子間ポテンシャルが作り出す世界に留まらず、電子構造の観点からも材料の変形下での転位や粒界の挙動の理解を進めることも期待したい。その場合にも予測を持ってシミュレーションに臨んで貰いたい。

コンピューターの性能向上は目覚ましく、これを背景に、欧米では計算科学を駆使した材料開発の動きが急である。日本こそこれに打ち勝って、材料立国を堅持したい。構造用材料においては、機械的性質が第一の関心事であり、機械工学を基盤に持つ氏の材料研究の益々の発展と後進の輩出に期待するところ極めて大である。