

jh230051

マルチスケールモデリングによる材料力学研究の高度化

田中将己（九州大学）

概要体心立方金属材料は、結晶粒微細化によって脆性-延性遷移温度が低下する。そのメカニズムを検討するために、U 型ノッチを有する大規模有限要素分割モデルを多結晶化し、直接的に結晶粒微細化の効果を結晶塑性解析によるシミュレーションで検討した。その結果、結晶粒微細化によって、ノッチ先端における応力遮蔽効果の増大と、多結晶微視組織内において残留応力がネットワーク化することが示された。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同利用・共同研究を実施している拠点名

九州大学 情報基盤研究開発センター

(2) 課題分野

超大規模数値計算系応用分野

(3) 共同研究分野 (HPCI 資源利用課題のみ)

(4) 参加研究者の役割分担

田中将己: 研究総括

奥山彫夢: 大規模有限要素法結晶塑性解析による結晶粒微細化による脆性延性遷移挙動改善機構の解明

2. 研究の目的と意義

体心立方金属材料は、変形温度の低下に伴い破壊挙動が延性的から脆性的に遷移する。これは脆性-延性遷移挙動と呼ばれる。この遷移挙動を律速しているのは、塑性変形を担う転位の易動度であり、その易動度は温度に依存する。ところで、破壊の起点となるき裂先端での局所応力は極めて高いが、き裂先端で発生・運動する転位が応力集中を緩和する事で脆性-延性遷移温度が低下する。また、結晶粒が微細化すると遷移温度が低下する事が知られているが、そのメカニズムについて

は未だ明らかになっていない。遷移温度低下のメカニズムを理解することは、低温環境での安全な金属材料利用のためには重要な課題となっており、学術的・社会的意義は高い。そこで本課題では、結晶粒微細化と脆性延性遷移挙動の関係を大規模有限要素解析および第一原理計算による高精度ポテンシャルを用いた分子動力学解析を用いて検討する。

有限要素法結晶塑性解析を用いた大規模解析では、U 型ノッチを有する多結晶モデルを用いて、応力遮蔽効果に対する結晶粒微細化効果について検討する。結晶粒微細化を有限要素モデルで表現する方法としてはモデルサイズの変更による方法が計算コストを低減できるため最も簡単である。しかしこの方法では、結晶粒微細化による結晶粒界面積の増加の効果が表れず、結晶粒微細化と応力遮蔽効果の関係を直接的に検討することが出来ない。そこで大規模な有限要素分割モデルを用いて同じサイズのモデルでオーダーの異なる結晶粒径モデルの解析を行い結晶粒微細化と応力遮蔽効果の関係をダイレクトに検討することが本研究の目的である。

脆性延性遷移挙動は転位の移動度に大きく依存する。転位の移動度を検討する手法として分子動力学法が有効である。しかし転位の移動度について分子動力学法を用いて検

討するためには、精度の高いポテンシャルが必要となる。とくに合金系では、母相と添加元素の相互作用を考慮する必要がある。そこで第一原理計算を用いて添加元素を有する合金系の高精度なポテンシャルをまず作成する必要がある。第一原理計算を用いた添加元素を含む系のポテンシャル同定には莫大な計算コストを必要とするため本課題の HPCI の利用により計算時間の短縮を行い、高精度ポテンシャルを用いた分子動力学解析による転位の移動度の検討を行う。

3. 当拠点の公募型共同研究として実施した意義

本申請課題を共同研究として実施する必要性として、材料科学研究者（九大）と計算科学を主体とする研究者（木更津高専）が共同して実施する点がまず上げられる。材料研究においてはマルチスケールの重要性が認識され始めてからそれ相当の時間が経っているが、近年ようやく実用的な程度まで計算コストが下がってきた。これまで力学特性に関連する計算科学の対象は、原子スケールの極めて微細な問題か、メートルスケールのマクロな問題を主な対象としてきた。しかし、近年の材料の高品質化に伴って、それらの中間のメゾスケールにおける現象が力学特性を理解する上での鍵となってきている。これには、原子スケールでの現象をメゾスケールまで展開して計算することが肝要となる。そのために必要な大規模計算のメソロジー開発および、材料内部での現象を再現・予言しうる計算科学の発展は、このような材料科学を得意とする研究者と計算科学を得意とする研究者との共同研究を通して実現できると考えられる。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

該当なし

5. 今年度の研究成果の詳細

400 万要素の大規模要素分割 U 型ノッチモデルを作成し、結晶粒数 10~5000 までの種々の U 型ノッチを有する多結晶モデルを作成した。ここで、平均結晶粒径は、 $36\mu\text{m}\sim 1.6\mu\text{m}$ となっている。図 1 に 20 結晶粒モデルと 1000 結晶粒モデルを示す。材料は鉄とした。結晶塑性解析では、すべりの活性化条件となる臨界分解せん断応力 (CRSS) に拡張 Bailey-Hirsch モデルを用いており、寸法効果が表れる。そのため、結晶粒径 $36\mu\text{m}\sim 1.6\mu\text{m}$ における CRSS は約 52MPa~102MPa となっている。解析は、モデルの上下端面に均一強制変位を与えて 0.1% の公称ひずみとなるまで引張解析を行い、その後、上面に荷重 0 の分布荷重を与えて除荷を行った。

図 2 は、引張解析により得られた公称応力—公称ひずみ曲線である。公称ひずみ 0.1% における公称応力は、10 結晶粒モデルで 106MPa、5000 結晶粒モデルで 160MPa となっている。また 10 結晶粒モデルでは、弾性直線から外れ巨視的な降伏が表れている。しかし、結晶粒数が増加するとともに、弾性直線が長くなり巨視的な降伏が表れなくなっている。これは結晶粒数が増えるほど、平均結晶粒径が小さくなり、寸法効果が顕著に表れているためである。同一のモデル寸法で、結晶粒数を変化させることで結晶粒径 $36\mu\text{m}\sim 1.6\mu\text{m}$ の寸法効果を直接的に解析した事例は無く、本共同利用による大規模解析の成果である。20 結晶粒モデルのみ弾性直線が他のモデルから外れているのは、結晶粒数が少ないことにより、偶然的に塑性ひずみの伝播しにくい方位関係が支配的になってしまったためであると考えられる。

図 3 は、除荷後における相当塑性ひずみ分布である。公称ひずみ 0.1% からの除荷中における逆すべりによる塑性せん断ひずみの増加は微小であるため、公称ひずみ 0.1% 時における相当塑性ひずみ分布とほぼ同じである。巨視的な降伏挙動が見られた、100 結晶粒数

までの結果では、ノッチから伸びる塑性ひずみの集中帯がおおよそ 45° 方向に見られる。結晶粒数が少ない場合にははっきりとした集中帯が見られるが、結晶粒数が増えるほど、塑性ひずみを担う粒が分散している。例外として 20 結晶粒モデルでは、ノッチ先端粒の周りの方位関係によって 45° より浅い角度で塑性ひずみが伝播しており、公称応力ひずみ曲線で他のモデルから外れた挙動を示す要因になったと考えられる。500 結晶粒モデルでは、ノッチ先端領域に見られる塑性ひずみの集中領域から離れた粒で塑性ひずみが生じている。1000 結晶粒モデル以降では、結晶粒微細化に伴う CRSS の増加によってほぼノッチ先端領域に塑性ひずみがとどまっている。一部ではあるが、ノッチから離れた粒で、塑性ひずみが生じていることから、さらに負荷を加えていくと、至る所で塑性ひずみが生ずるものと考えられる。

図 4 は、除荷後における引張方向垂直応力分布である。つまり残留応力分布である。ノッチ先端には、圧縮の残留応力が生じている。圧縮の残留応力は、引張変形時に生ずる引張応力を低減しており応力遮蔽効果を観察した結果となる。可視化範囲を $-50\text{MPa} \sim 50\text{MPa}$ としているが、最大の圧縮応力値は $-200\text{MPa} \sim -340\text{MPa}$ となっている。圧縮応力値は、結晶粒が微細化するほど高い値となっており、応力遮蔽効果が顕著に増加している。また $10 \sim 500$ 結晶粒モデルを比較すると、結晶粒が微細化するほどノッチから離れた領域においても高い圧縮の残留応力が分布している。これらの高い圧縮の残留応力が組織全体にネットワークを組むことで、ノッチ先端の応力遮蔽効果と共に脆性-延性遷移温度の低下が期待される。

第一原理計算においては、Fe および Fe-4.8at% の MD ポテンシャルを自己学習モンテカルロ法を用いて作成した。この時のスーパーセル中の原子数は 250 個とした。次に、Fe 結

晶中に格子欠陥の一つであるらせん転位を約 3000 原子中導入し、作成した Fe のポテンシャルを適用して、計算セルに一定の変位を与える MD 計算を行った。その結果、図 5 が示すようにらせん転位が運動する際には、これまでのレナード・ジョーンズ型のポテンシャルでは再現できないキック対形成運動にて転位が運動する挙動を再現できた。今後は、原子間ポテンシャルの存在しない組み合わせにおいても計算が可能になることが期待される。

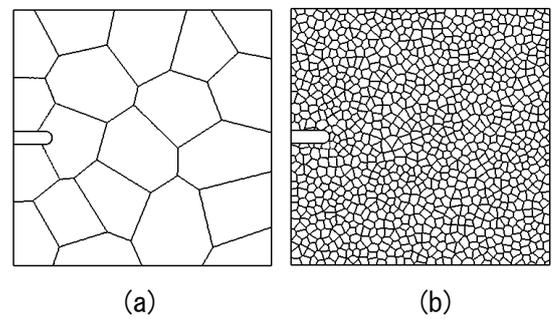


図 1 大規模有限要素分割された U 型ノッチを有する多結晶モデル。(a) 20 結晶粒モデル、(b) 1000 結晶粒モデル

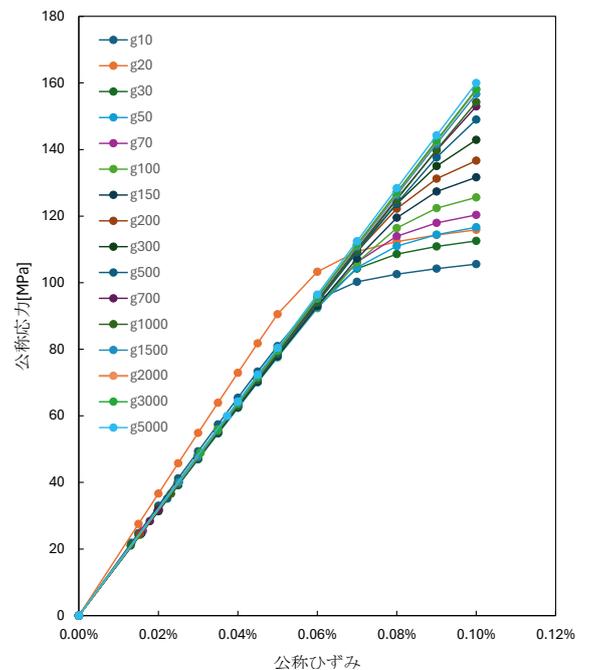


図 2 公称応力—公称ひずみ曲線. 10 結晶粒モデル (g_{10}) ~ 5000 結晶粒モデル (g_{5000}).

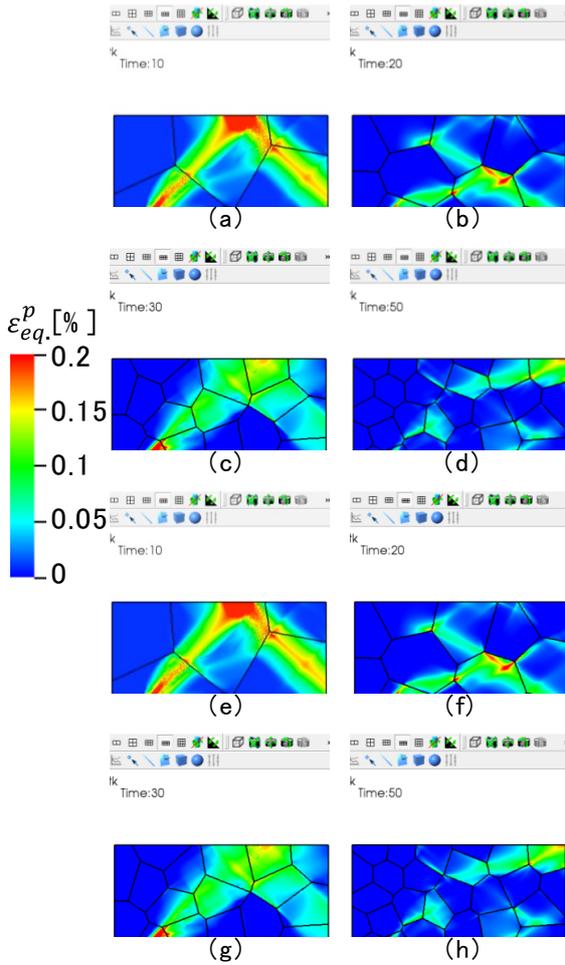


図 3 除荷後における相当塑性ひずみ分布。
 (a) 10 結晶粒モデル, (b) 20 結晶粒モデル,
 (c) 30 結晶粒モデル, (d) 50 結晶粒モデル,
 (e) 70 結晶粒モデル, (f) 100 結晶粒モデル,
 (g) 500 結晶粒モデル, (h) 1000 結晶粒モデル

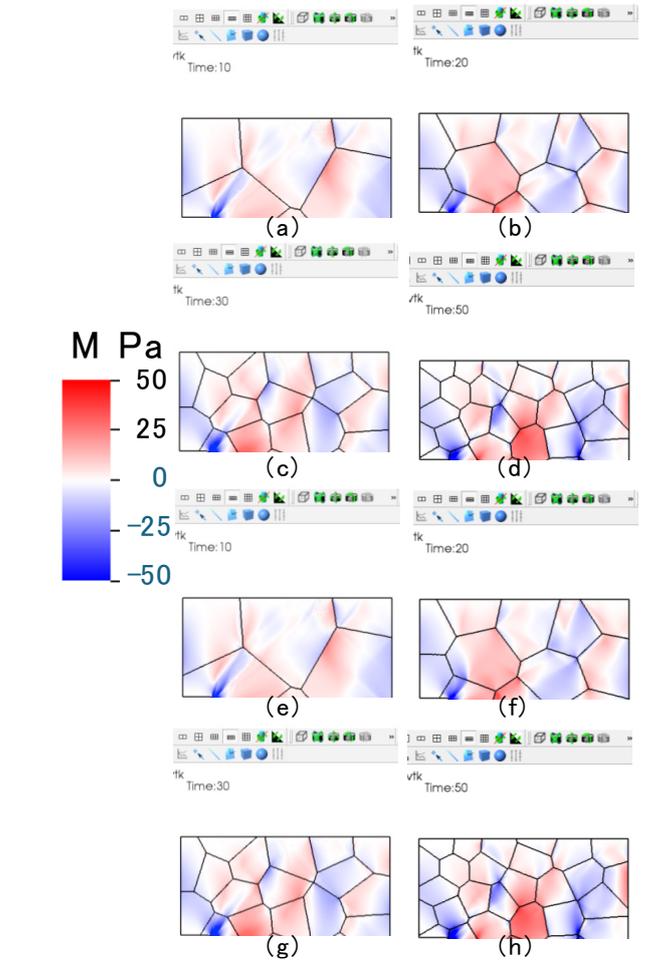


図 4 除荷後における, 引張方向垂直応力分布。
 (a)~(h)は図 3 と同一。

6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

今回, 初めてスパコンの共同利用による大規模計算に挑戦し, 大規模モデルの解析を行うことで, 予定していた計算を達成でき, 概ね本研究の目的とする結果も得られた。今後は, 得られた大規模な計算結果を効率的に解析する手法を確立することで, 高い分解能をもって結果を抽出できるようにしたい。今後は, 得られた結果の解析を進め, 研究成果を発表していく予定である。

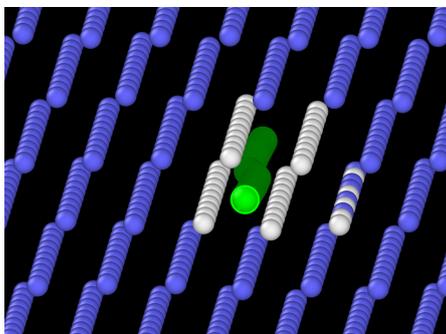


図 5 第一原理計算で作成したポテンシャルを用いたらせん転位運動の MD 計算

7. 研究業績

(1) 学術論文 (査読あり)

奥山 彰夢, 大橋 鉄也, 純鉄多結晶体の繰返し疲労に伴うひずみの局所化と損傷形成素過程の結晶塑性解析, 鉄と鋼 110(3) 321-332

2024 年 2 月 15 日.

(2) 国際会議プロシーディングス (査読あり)

(3) 国際会議発表 (査読なし)

(4) 国内会議発表 (査読なし)

奥山彫夢, 田中將己, 結晶粒微細化による不均一変形挙動と応力遮蔽効果の結晶塑性解析, 金属学会 2023 年秋 (第 173 回) 季講演大会, 富山, 9 月.

(5) 公開したライブラリなど

(6) その他 (特許, プレスリリース, 著書等)