有限要素法結晶塑性解析と第一原理計算による脆性ー延性挙動の解明

研究代表者：田中將己（九州大学）　研究副代表者：奥山彫夢（木更津高専）

緒　言

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性する．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．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検討する．

研究計画・研究方法

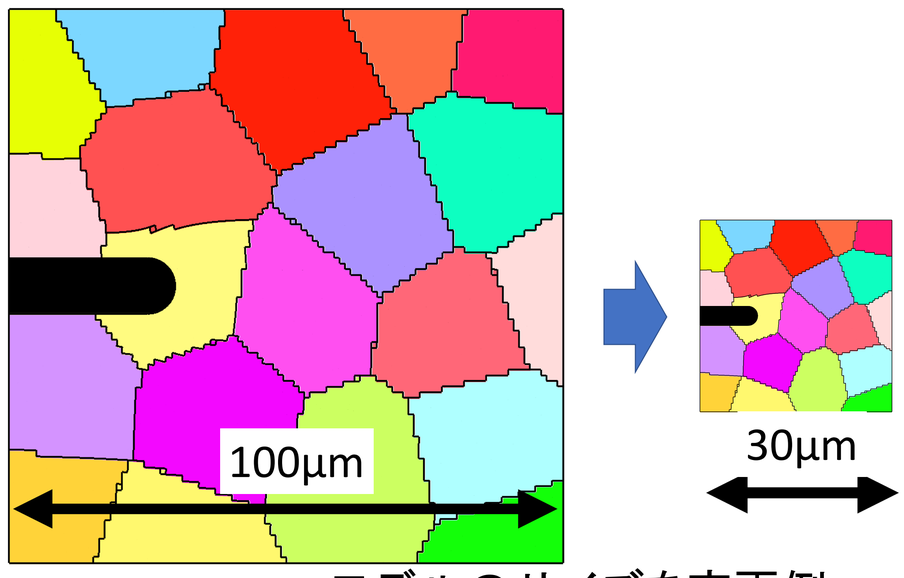
➢ 有限要素法結晶塑性解析を用いた応力遮蔽効果に対する結晶粒微細化効果の検討

- Uノッチを有する多結晶モデルの引張解析
- 結晶粒サイズは数十μmから数百nmとする

応力遮蔽効果に対する結晶粒微細化効果の検討方法

モデルのサイズを変更

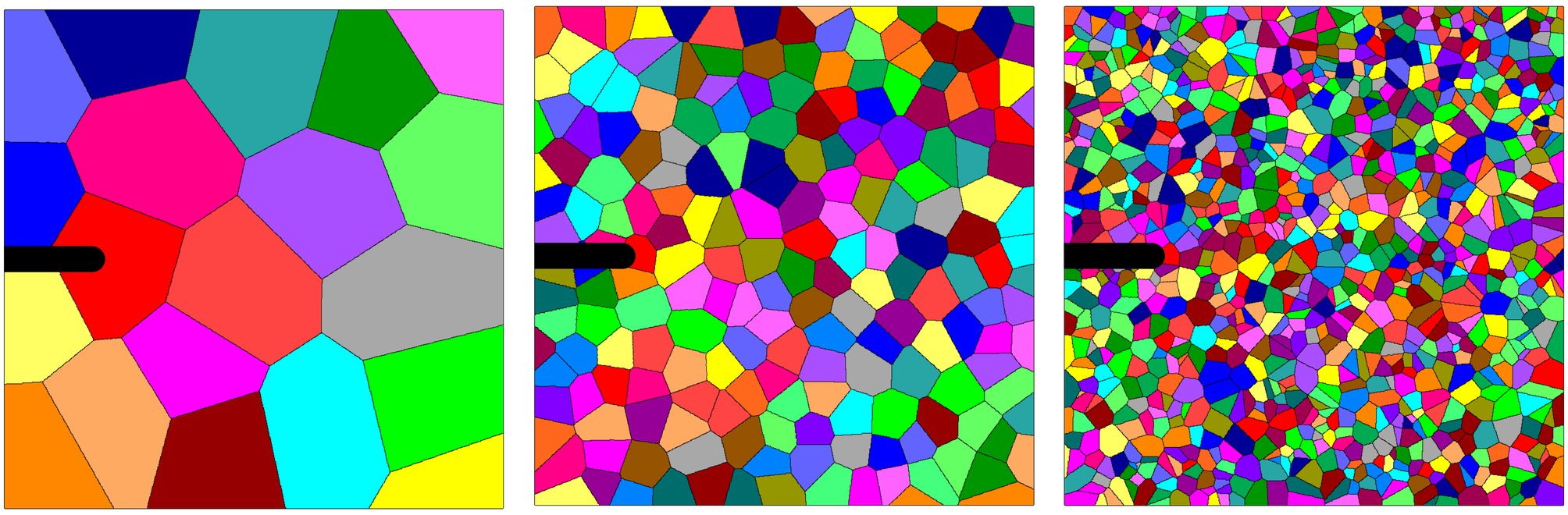
- 容易に結晶粒サイズの変更が出来、計算コストも低
- Uノッチに対して結晶粒界の数は変わらずそれらの効果が陽に発現することはない



モデルのサイズを変更例

HPCIの利用による高度化

- 大規模モデルを用いて，モデルサイズを変えずに結晶粒サイズを小さく
- 数十μmから数百nmのマルチスケールを同一メッシュモデルで計算し，結晶粒微細化効果を直接検討



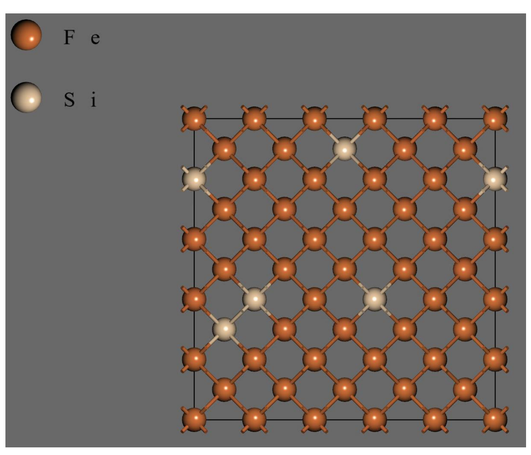
➢ 第一原理計算を用いた高精度ポテンシャルMDによる転位移動度の検討

- 転位のMD計算には精度の高いポテンシャルが必要．
- 合金系では，母相と添加元素の相互作用を考慮する必要．➡第一原理計算で転位と溶質原子の相互作用を計算することが出来るが，転位運動を計算するには計算コストが莫大となり現状では不可能．

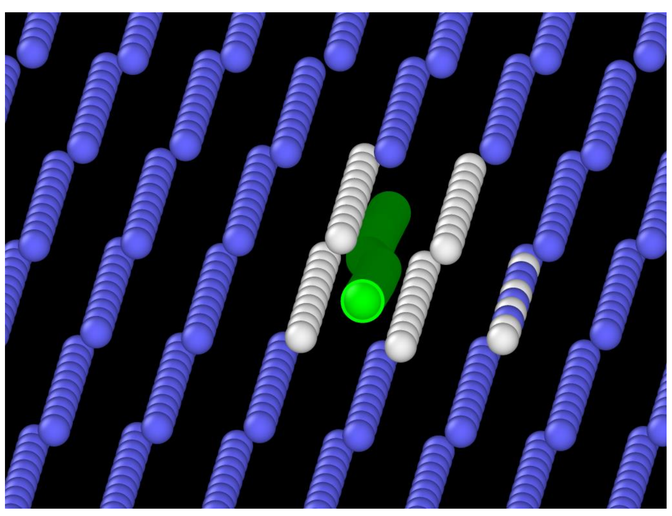
- 第一原理計算で，MDのポテンシャルを作成しMDで転位と溶質原子の相互作用を計算．
- 自己学習ハイブリッドモンテカルロ(SLHMC)法を用いてMDのポテンシャルを作成し，第一原理分子動力学法と同じ精度で転位のMD計算を実施．➡　添加元素があると，計算の系が大きくなる

→　HPCIの利用による計算時間の短縮

Fe-5.8at%Si
原子数：250個
約5200モデル



MDによる転位の運動(Fe)



第一原理計算と転位のMD計算例

特徴

- MDポテンシャルを原子間距離と角度の関数とする
- 各モデルでは，それぞれの原子に変位を与えて第一原理計算を実行
- 機械学習は教師データがたくさん必要であるが，モデル中の各二原子間のポテンシャル変化を使うことで一度に多数の教師データーを取得．
- モンテカルロ法を使うことで，第一原理MDと同じ精度のポテンシャルを最終的に取得(第一原理MDと機械学習ポテンシャルを比較し一致するまで計算)．