

## 塑性物理学の創出

### Plastic Physics of Defect Mechanics

澁谷 陽二 (SHIBUTANI YOJI)

大阪大学・大学院工学研究科・教授



#### 研究の概要

固体材料の塑性変形の基礎メカニズムである転位を素欠陥とし、その素欠陥と素欠陥の相互作用、および素欠陥と結晶粒界や表面・界面といった周囲欠陥との相互作用に代表される塑性物理現象を実験力学および計算力学の両面から解明し、従来より体系化されてきたマクロな塑性現象と論理的に関連付けることにより、新たに塑性物理学という学理の創出をめざす。

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・機械材料・材料力学

キーワード：ナノインデンテーション、欠陥間相互作用、マイクロ材料力学

#### 1. 研究開始当初の背景

固体力学における非可逆な塑性変形は、欠陥の生成とその発展挙動につく。従来から、結晶性材料の塑性変形を導く素欠陥である転位の運動学と、その集団化・統計平均化された結果としての現象論的塑性力学の発展が推し進められてきた。一方、転位の原子論的な描像が、分子動力学シミュレーション(MD)といった新たな計算力学手法の拡充により、明確な物理現象として記述されるようになった。しかしながら、素欠陥の転位は単独で振る舞うことに意味はなく、転位間の相互作用、転位と面欠陥である結晶粒界あるいは表面・界面との相互作用等、不均質な周囲欠陥との相互作用の結果としてスケールの上位階層の変形場が実現される。近年、そのような欠陥の振る舞いが直接的に大域的な応答に現れたりするサイズ効果とともに、マクロ場と時空間的にマッチングさせるマルチスケールモデリングの研究が、世界的に推し進められてきた。

#### 2. 研究の目的

本研究では、固体材料の塑性変形の基礎メカニズムである転位を素欠陥とし、その素欠陥と素欠陥の相互作用、および素欠陥と結晶粒界や表面・界面といった周囲欠陥との相互作用に代表される塑性物理現象を、実験力学および計算力学の両面から解明し、従来より体系化されてきたマクロな塑性現象と論理的に関連付けることにより、新たに塑性物理学という学理の創出を目的とするものであ

る。とりわけ、強度発現の観点から、転位と結晶粒界の力学的相互作用が最も重要であり、古くから Hall-Petch(H-P)の関係として報告されている。ここでは、ナノインデンテーションによる粒界近傍の不均質な領域における押し込み変形挙動と、結晶学的な解析の両面から、粒界の持つパイルアップ効果、シンク効果、射出源といった役割を明確にする。そして、マクロな H-P 効果に通じるメカニズムを解明し、塑性の物理について検討する。

#### 3. 研究の方法

粒界を挟んだ結晶粒の方位関係を後方散乱電子回折像(EBSP)による結晶方位解析を行い、粒内と粒界近傍の位置を明確に同定したナノインデンテーションを行う。従来の単結晶の研究より、その特性が明らかにされている変位バースト挙動を、いわば粒界と相互作用させる試行転位群として位置づけ、その変位バーストから引き出される特性を用いて、粒界の力学的役割について実験力学的に解明する。そして、材料内部で生じている欠陥群の相互作用を明らかにするため、次のような計算力学的アプローチにより、そのメカニズムを解明する。

- (1) MD による素欠陥と粒界の相互作用のダイナミクス
- (2) 最小エネルギー経路(MEP)探索シミュレーションによる相互作用のエネルギー論的評価
- (3) レベルセット法転位動力学シミュレーションによる内部応力場の評価。

#### 4. これまでの成果

(A)転位と粒界のエネルギー論的相互作用の評価①: MEP探索シミュレーションを用いて, 1個の刃状転位と $\Sigma 3$ 対称傾角粒界(双晶)との相互作用の活性化障壁を評価した(図1参照). 双晶と転位が十分に離れた状態を初期状態, 双晶との反応後の平衡状態を終状態として, その反応経路を探索した結果が図2である. この相互作用の場合には明らかな活性化障壁が存在し, その大きさは転位の単位長さあたり0.116[eV]ほどある. これは, fcc材料中のパイエルスポテンシャル・バリアーの10,000倍に相当する, という新たな知見が得られた. この特性を活かしたのが, 最近報告されたナノツイン(nano-twin)構造の材料である.

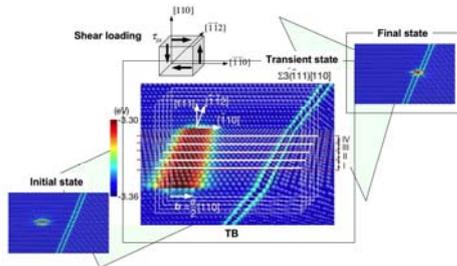


図1 NEB法によるMEP解析

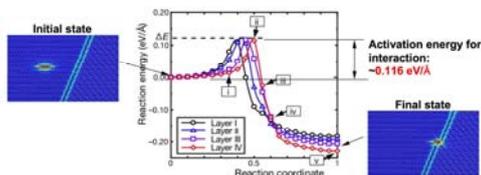


図2 活性化エネルギーの評価

(B)ナノインデンテーションによる粒界相互作用の計測: 銅(Cu)を再結晶させることにより, 双晶を優先的に作り出した試料を用いて, 押し込み試験を実施した. まず, 結晶方位解析をした結果, 再結晶過程で得られた直線上の粒界は, すべて対称傾角粒界 $\Sigma 3A$ ( $\{111\}$ 面)の最も安定な双晶であることがわかった.  $\Sigma 3A$ を介した比較的low indexの組み合わせを選択して(図3参照), ナノインデンテーションを行った(図4参照). 従来の単結晶を用いた結果と比較検討した結果, 単結晶と類似した変位バースト特性の示す組み合わせがある一方, 限界バースト荷重が大きく, 押し込み変位の小さな組み合わせもあり, 直接的な粒界のピルアップ効果を見いだした.

#### 5. 今後の計画

転位と粒界間の力学的相互作用を表すために, 力学的特性と結晶学的特性を考慮した新たな指数を提案する. そして, より平易なモデル化が可能な, 粒界を含む微小2結晶粒

ピラー型試験片に対するフラット圧子による押し込み等を行い, 不均質構造体におけるサイズ効果を見だし, 塑性の物理としてまとめる.

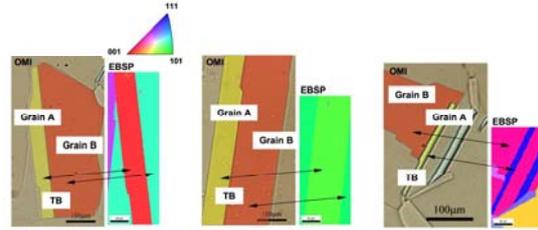


図3 結晶方位解析と低指数組み合わせの抽出

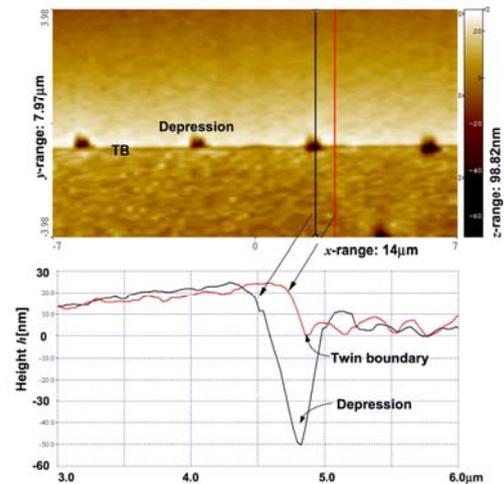


図4 粒界近傍でのナノインデンテーション

#### 6. これまでの発表論文等 (受賞等も含む)

##### 【学術論文】

(1)T. Tsuru, Y. Kaji, D. Matsunaka and Y. Shibutani, Incipient plasticity of twin and stable/unstable grain boundaries during nanoindentation in copper, Phys. Rev.B, Vol.82, pp.024101-1-6, (2010).

(2)T. Tsuru, Y. Shibutani and Y.Kaji, Fundamental interaction process between pure dislocation and energetically stable grain boundary, Phys. Rev. B, Vol.79, pp.012104, (2009).

##### 【著書】

(1)塑性の物理 -素過程から理解する塑性力学-, 渋谷陽二, 森北出版, (2011).

##### 【受賞】

(1)日本材料学会学術貢献賞, 2010.

(2)日本機械学会計算力学部門賞(業績賞), 2009.

(3)日本材料学会技術賞, 2008.

ホームページ等

<http://www-comec.mech.eng.osaka-u.ac.jp/>