

報道機関 各位

東北大学金属材料研究所

スパコンが明らかにする電子の状態、原子の配列と材料強度の関係
 - 材料の強さをマルチスケールで解析 効率的な材料設計を可能に -

【発表のポイント】

- 建物や輸送機器などの構造材料に不可欠な「強さ(強度)」の仕組みを、電子状態(ナノ)、原子配列(マイクロ)、微細組織(メソ)というマルチスケールで解析する手法を確立。
- 材料の強さに関わる原子配列の乱れ(欠陥)が生じたときの原子の動きを可視化することにも成功。
- 本成果はマルチスケール域で強度を解析した初の例であり、今後の材料設計の緻密化、効率化の促進が期待。

【概要】

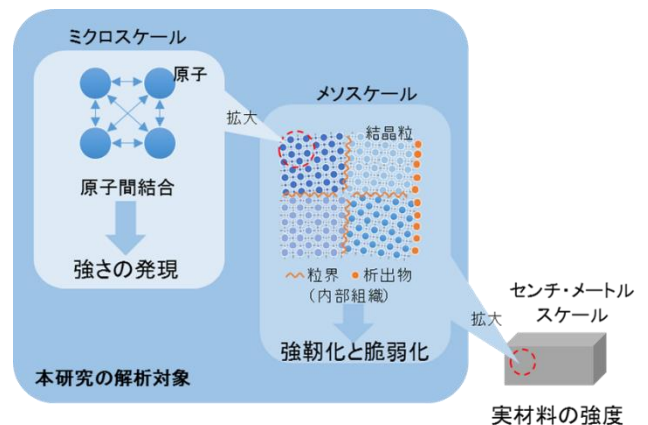
東北大学金属材料研究所の毛利哲夫教授、同大学工学研究科の陳迎教授、産業技術総合研究所の香山正憲首席研究員、大阪大学の尾方成信教授らによる共同研究グループは、スーパーコンピュータを用いて材料の強さに関わる解析・設計の手法を新たに開発しました。

材料の強さは、原子間の結合の強さと、もう少しスケールの大きな結晶粒界^{*1}や転位線^{*2}といった原子配列の乱れ(欠陥)にも大きく影響を受けます。しかし現在の材料設計は経験にもとづくところが大きく、労力・経済の面でも非効率的です。効率的な材料開発のためには、原子間の結合、原子配列の乱れといったマイクロレベルの現象を考慮した材料設計手法を確立することが必要不可欠ですが、今日まで十分には成し遂げられていませんでした。

そこで本研究グループは、材料の強さというマクロレベルの現象が発現する仕組みを、マイクロレベルから調べる、すなわちマルチスケールで材料の解析・設計する手法を開発すべく、スーパーコンピュータによる解析を行いました。これまで、原子の結合力に着目した材料の「強さ」は解析されてきましたが、本研究では、その「強さ」の背後に磁性の効果など、多様な物理が関与していることを初めて明らかにしました。さらに、最新の計算手法を用いて、これまでわからなかった欠陥の周囲の原子の位置や動きを可視化することに成功し、強さ、靱さ、弱さ、脆さを生じる原子配列の変化(素過程)を明らかにしました。

本研究では、電磁鋼板で有名な Fe-Si を対象にして解析を行いました。本手法は他の材料にも適用可能です。今後スーパーコンピュータを用いた、材料設計の緻密化、効率化の促進が期待されます。

本成果は「npj Computational Materials-Nature」に 2017 年 3 月 10 日に掲載されました。



概要図: 実材料の強度には、電子・原子のふるまいと内部組織の両方が影響する。

【詳細な説明】

○研究背景

「材料の強さ」は、電子の動きによる原子間結合がきっかけとなるが、「実材料の強度」には結晶粒の間の界面（粒界）や析出物などの原子構造よりも少しスケールの大きな内部組織が影響する（概要図参照）。このため、先端構造材料の強度の設計・制御は内部組織の制御を介して行われている。例えば、鉄鋼材料の強度を飛躍的に向上させるために結晶粒を超微細化したり、耐熱特性を改善するために高温材料の析出物を制御するという研究が挙げられる。結晶粒や析出物の典型的な大きさがマイクロンのレベル程度であることを考えると、これら内部組織は、電子・原子のスケールであるナノスケールと、実材料のスケールであるセンチ・メートルスケールの中間に位置し、強度の発現は、マイクロな電子・原子の挙動に端を発し、メソスケールの内部組織を介して支配される典型的なマルチスケール現象である。

しかし、材料開発の基本的な手法は実験式や蓄積データに基づいた経験的手法であり、新しい材料の開発に対してはそれらデータから導き出した計算式から予測することが一般的である。しかしこの手法では労力・経済の両面から非効率であり、基礎理論の集積とこれを具現化する高速・大容量の大規模計算に基づいた設計手法の確立が必要とされていた。

○成果の内容

研究グループは、各研究機関がそれぞれ得意とする計算材料科学手法を活かして主に2つ次のことを明らかにした。

1. 鉄(Fe)系材料の強さはFe原子の間の結合の強さに依存するが、これを決定しているのは原子よりもっと小さな電子の挙動である。しかし、電子の動きは原子の結合だけに影響を与えるのではなく、電氣的性質、磁氣的性質、光への応答など、材料の物性・機能とも関連している。特に、我々の研究では、一見関係のなさそうな磁氣的性質が強さと関連していることを明らかにした。
2. 結晶では原子が規則正しく配列しているが、配列の乱れた部分(欠陥)も必ず存在し、この原子配列の乱れが強さに大きく関与する。本研究ではその中でも結晶粒界と転位という特異な乱れを取り扱った。Feの中に、Feとは異なる原子Siを入れたときに、Siがどのように振舞うのか、そして、その振る舞いが、強さにどのように反映されるのか、これらを電子論と分子動力学法という最新の計算手法を用いて解析し、電子顕微鏡でも容易には見えない結晶粒界と転位の挙動を初めて可視化した。

可視化の一例を図1~3に示す(大阪大学 尾方グループの成果)。図1は結晶の中の線状の欠陥(乱れ)である転位の場所を示す。これを横(横断面)から見たものが図2であり、Fe原子の配置を示す。転位が動くと変形が生じるが、実際には図1の黄色い部分が一挙に動くのではなく、図3に示すように一部(キンクという)が動いて、それが横方向に伝播することによって前進する。動く前後の原子配列を図2に示した。

○意義・課題・展望

本研究では、実験データやパラメーターを用いずに、計算のみから強度を予測したり解析する手法を提案した。本成果は、基礎理論の集積とこれを具現化する高速・大容量の大規模計算に基づいた設計手法の確立に大きく貢献し、今後、現場の材料開発を支援する強力な新しい手法として注目され得る。今後は、さまざまな材料に適用して、より汎用的な手法へと詳細を調整することが課題である。

図1

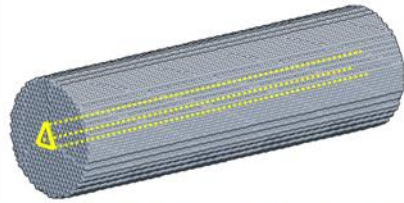
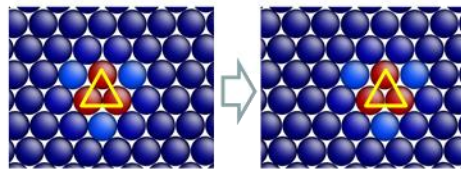


図1: 材料の内部における原子の配列と結晶中の転位(線状の原子配列の乱れ)を黄色で示す。

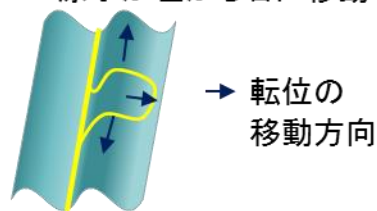
図2



原子が左から右に移動

図2: 図1の断面図。転位が動く前後の原子配列の変化を示す。

図3



→ 転位の移動方向

図3: 転位の運動。黄色で示した転位の一部分がエネルギーの山を乗り越え、隣接する部分が横方向に動くことで、転位の全体が前進し、変形が生じる。

○発表論文

雑誌名:npj Computational Materials-Nature (2017) 3:10

英文タイトル:Mechanical properties of Fe-rich Si alloy from Hamiltonian

全著者:Tetsuo Mohri, Ying Chen, Masanori Kohyama, Shigenobu Ogata, Arkapol Saengdeejing, Somesh Kumar Bhattacharya, Masato Wakeda, Shuhei Shinzato and Hajime Kimizuka

DOI:; doi:10.1038/s41524-017-0012-4

○専門用語解説

※1 結晶粒界:合金中の原子は整然と配列しているものではなく、配列に乱れがある。この乱れは合金の製造中に生じることが多く、液体状態から固体に固める(凝固)する際に、液体中のいろいろな場所にランダムに固体の核が生じ、これがランダムに成長することで、固体は原子の配列の方位が異なる領域(これを結晶粒という)の集合体になる。この領域の境界を結晶粒界という。結晶粒界では原子配列が大きく乱れているために、異なる原子が集まったり、電子が散乱されて電気抵抗の原因になったり、後述の転位の動きを阻害する。

※2 転位線:合金中の原子配列の乱れの典型例である。結晶粒界とは異なり、線状の乱れであることが特徴である。合金の変形は原子が集团的に動くことで生じるが、一挙に原子集団を動かすにはとても大きなエネルギーが必要である。これに対して、結晶中の原子配列の乱れである転位(転位線)が運動することで、原子が徐々に局所的に動くことができ、小さなエネルギーでも変形を可能にする。転位の動きを制御することが、変形を制御し強い材料を作る上での基本になる。

○共同研究機関および助成

本研究は、JST(科学技術振興機構)の「革新的構造用金属材料創製を目指したヘテロ構造制御に基づく新指導原理の構築」の採択課題「ハミルトニアンからの材料強度設計」の事業の一環としておこなわれました。本プロジェクトは東北大学金属材料研究所特任教授毛利哲夫が研究代表者となり、全国から計算材料科学を専門とする5機関が加わっています。本成果は特にマイクロからメソスケールを対象を絞り、このスケール域に取り組んだ4機関の成果です。

本件に関するお問い合わせ先

◆研究内容に関して

東北大学金属材料研究所 特任教授

毛利 哲夫

TEL:022-215-2327

Email:tmohri@imr.tohoku.ac.jp

◆報道に関して

情報企画室広報班

横山 美沙

TEL:022-215-2144 FAX:022-215-2482

Email:pro-adm@imr.tohoku.ac.jp