



降伏現象への原子論的 アプローチ

九州大学大学院工学府 材料物性工学専攻
修士課程2年

兵頭克敏

1. はじめに

私は2017年3月に九州大学工学部物質科学工学科を卒業しました。現在、同大学の修士課程2年生として、学部4年生の頃から所属している研究室で日々研究に励んでいます。まだ研究を始めて3年も経過していない未熟者ではありますが、これまでの研究内容と最近の取り組みについて紹介したいと思います。

2. 研究内容

私の所属している研究室は鉄鋼材料における力学特性の改善を目指した合金設計・組織制御技術について研究しています。従って研究室の多くの学生は、焼入れ、焼戻しのような熱処理、光学顕微鏡や電子顕微鏡を用いた組織観察、そしてシャルピー試験や引張試験による力学特性の調査などを行っています。私もそれをイメージして研究室に配属されました。ところが、配属当日に発表された研究テーマが「極低炭素・窒素が粒界偏析した降伏現象の解析」で、研究手法が分子動力学法という原子シミュレーションでした。一般的な低炭素鋼において、明瞭な上降伏点と下降伏点の見られる降伏現象が生じる事はよく知られていますが、この現象の原因については未だに決定的な結論が出ていません。当研究室では、これまでに実験的手法を用いて降伏現象に関する数多くの研究を行ってきましたが、降伏現象が高速かつ原子レベルの現象であるために実験的手法の限界を迎えていました。そこで登場するのが分子動力学法です。分子動力学法は原子間の結合を再現することができるため、設定条件によってナノサイズの拡散現象や変形挙動をシミュレーションすることも可能で、降伏現象の解明のブレイクスルーとなり得ます。上記のような理由で分子動力学法を用いて研究する事になったのですが、当研究室には分子動力学法を扱える人は誰もいませんでした。そこで共同研究者である本学の宗藤伸治准教授にマンツーマンでご指導して頂き、研究室で初めてのシミュレーション担当者になりました。

最初の研究テーマは、降伏現象の発現機構として最も知られているコットレル固着に関する研究でした。具体的には、コットレル固着の単純なモデルである侵入型固溶原子(窒素原子)1原子と1本の刃状転位との相互作用の解析です。この研究により窒素原子と刃状転位との相互作用範囲は従来提唱されていた数nmよりもさらに狭い約0.4nmである事が分かり、またピン止め力の定量評価に成功しました⁽¹⁾。

現在は、下降伏点を支配している現象であるとされる転位



図1 国際学会に向かう途中の筆者、金海国際空港にて。

のピルアップモデルのシミュレーションを分子動力学法により行っています。また、この計算には時間が掛かるので、計算の合間に解析手法の論文を読んで解析ソフトを自分でプログラミングしたり、分子動力学法の新たなポテンシャルパラメーターを作成するために密度汎関数法の勉強をしながら第一原理計算を用いた研究を行ったりしています。

3. 今後の展望

来年度からも引き続き博士課程に進学して、今の研究を続けたいと考えています。現在は分子動力学法と第一原理計算を用いて研究を行っていますが、第一原理計算の勉強に一区切りついたら、有限要素法の勉強とプログラミングにも挑戦したいと考えています。第一原理計算、分子動力学法、有限要素法の3つのシミュレーション手法を習得できれば、原子レベルの現象とマクロな現象を繋げる事のできる研究ができると考えているからです。さらにシミュレーションだけでなく、分子動力学法による研究結果からやってみたい実験が出来たので、時間が許されれば、実験の方もやってみたいと考えています。

4. おわりに

たったの3年間ではありますが、修士1年生の頃から後輩を付けてシミュレーション部門を一任して頂き、また国内学会や国際学会(図1)、研究会への参加など本当に色々な事を経験させて頂きました。研究室に配属された当時は全く想像していませんでしたので、今の研究生活があるのも偏に先生方のお陰だと思っています。まず、研究室で初となるシミュレーション担当者にして頂き、また研究だけでなくお酒の飲み方についてもご助言下さる高木節雄特任教授、研究についてのご指導や議論を時間の許す限りして頂いた宗藤伸治准教授、そして、現在の指導教員であり、研究についての議論や研究発表の仕方、論文の書き方など数多くのご指導を頂いた土山聡宏教授には厚く御礼申し上げます。これからの博士課程3年間も先生方に負けないような研究者になれるよう精進致しますので、ご指導ご鞭撻の程よろしくお願い致します。

文 献

- (1) K. Hyodo, S. Araki, S. Munetoh, T. Tsuchiyama and S. Takaki: Proceedings of the 5th International Symposium on Steel Science, (2017), 175-178.

(2019年1月25日受理) [doi:10.2320/materia.58.159]
(連絡先: 〒819-0395 福岡市中区元岡744)