

転位動力学法の概説とこれから

九州大学先導物質化学研究所；助教
井原史朗

2021年4月から九州大学先導物質化学研究所にて勤めております。井原と申します。所属先は主として化学を専門とされる方々が多い附置研であるため、金属学会員の皆様にとってはあまり聞き慣れないかもしれません。私は学生時代には転位動力学法や場の理論を中心とした研究(例えば⁽¹⁾)を、現在は主に電子顕微鏡に関わる機械学習を行っております⁽²⁾。本小記事においては、転位動力学法について概説し、それに関連した研究の展望についても述べさせていただきます。

塑性変形が転位の運動によって担われることは多くの方がご承知だと思われま。変形の素過程である因子が解明されているのであれば、金属の変形は全て予測できるのではないかと考えてしまいますが、未だに単結晶であっても物理的描像に基づく、特に大変形域の予測モデルの確立は困難です。その原因の一つに、転位同士が相互作用することで組織化し、転位運動の様相を変えてしまうことが挙げられ、転位動力学法は、組織としての転位を解析する際に有効となります。

転位動力学法では転位を張力のある弦としてモデル化し、転位の応力場や外力等も考慮した運動方程式を解くことで、転位の運動を予測します。転位が掃いた面積と塑性ひずみとの関係性を利用して、クリープ曲線や応力-ひずみ曲線等を作ることができ、これを基にして転位組織が与えるマクロ応答への影響を考えることができます。解析例を図1に示します。ここでは、傾角粒界モデル(図中破線)および回位対モデル(図中実線)を作成し、一定の応力を加え、それぞれの組織が転位の運動に与える影響を、ひずみ速度の差異から検証しています。図1より、同じような刃状転位列同士であっても、回位対モデルの方では転位運動が抑制され、その影響がマクロなひずみ速度の低下に表れていることがわかります。この結果だけで回位対が硬化に寄与すると結論付けることはできませんが、例えばこのような解析を通して、転位組織が力学的応答に与える影響を定量化できます。分子動力学法でも似たことはできるかもしれませんが、転位動力学法はより大きな時間・空間スケールを取り扱えるため、幅広い転位組織や現象を解析しやすいという長所があります。

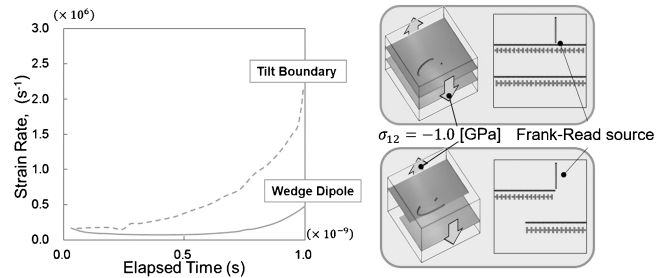


図1 転位動力学による解析例。

では転位動力学法で塑性変形の全てを解析できるかと言うと、そう簡単ではありません。例えば、転位が増殖すると計算量もそれに比例して増大するため、数%のひずみを超える解析は困難になります。また、転位の生成を自然に扱える訳ではなく、加えて転位間相互作用は転位同士のBurgersベクトルや線方向の組み合わせで決まるため、解析結果は初期に設定した転位に依存しやすいです。このことから組織形成の過程から解析することは容易ではありません。

結局の所、現状の転位動力学法も万能な解析手法ではないため、短所と向き合いつつ長所を生かしていく必要があります。本手法の場合、その長所は転位組織の応力場といった、マクロ応答に寄与するミクロな場を低コストで計算でき、更に転位運動の予測もできる点にあると考えられます。また、実験的に転位の3次元分布を手に入れられれば、上に挙げた初期設定依存性の問題を克服できると推察されます。

冒頭にある通り、現在の所属では電子顕微鏡像と機械学習をテーマとした研究を中心としております。電子顕微鏡観察技術の発展は目覚ましく、例えば試料内の転位の3次元再構成も一般的な技術になりつつあります。さらに、透過電子顕微鏡内その場力学試験や加熱試験も普及していると言っても過言では無いです。また、画像処理と機械学習との相性が良いことから、電子顕微鏡像においても機械学習を適用する研究が盛んに行われています。我々のグループでも機械学習を用いた電子顕微鏡像のノイズ除去等も行っております⁽²⁾。こうした観察・画像処理技術を組み合わせることで、転位の3次元形状およびその時間発展も観察可能になるでしょう。さらにこの観察結果を、例えば転位動力学法に反映させることで、電子顕微鏡観察だけでは解析困難なミクロの力学場の観点から、組織としての転位をより詳細に解析できると期待されます。このように、実験と計算とを直接結びつけていくことが、今後の転位組織における力学解析においても可能になってくると考えられます。その潤滑油としての機械学習も上手く活用していくことが今の自分にとっての課題だと認識し、まだまだ発展途上ではありますが、日々精進しております。

文 献

- (1) S. Ihara and T. Hasebe: Int. Jnl. of Multiphysics, **13**(2019), 253-268.
- (2) Y. Zhao, S. Koike, R. Nakama, S. Ihara, M. Mitsuhara, M. Murayama, S. Hata and H. Saito: Sci. Rep., **11**(2021), 20720. (2022年2月1日受理)[doi:10.2320/materia.61.291] (連絡先: 〒816-8580 春日市春日公園6-1)