種々の階層における塑性理論の発展

7. 分子動力学法による塑性変形のシミュレーション†

中谷 彰 宏*

Recent Advances and Multi-Hierarchical Perspectives in Plasticity Theory VII : Simulation of Plastic Deformation by Using Molecular Dynamics

by

Akihiro NAKATANI*

Key words : Computational mechanics, Simulation, Molecular dynamics, Mechanical property, Plastic deformation, Dislocation, Phase transition, Ductile fracture

1 はじめに

マクロ的に見て「塑性」という特性が発現する時、その起源をミクロに遡って考えてゆくと、「材料を構成する個々の原子の配置の変化」という事象に辿り着く。ただし、要素還元論的にひとつひとつの原子の運動を調べても塑性の素過程となる情報が得られるわけではなく、ここで重要なことは原子が多数集まって起こる多様な現象の中にその起源を見出すことができるということである。原子/分子の運動を支配する法則から材料のマクロ特性を導き出す方法論は古くからいくつかの理論的アプローチにおいて成功しているけれども、非平衡不均質系については、昨今のコンピュータの高速化・大容量化の支援を受けたシミュレーションにより、新たな展開が生まれたといっても過言ではない。

本稿では、まず分子動力学 (Molecular Dynamics ; MD) 法の基本的な考え方と塑性変形に関連する解析の具体的方法について説明した後、最近の具体的事例について紹介する。

2 分子動力学法¹⁾

2・1 分子動力学法の基礎

2・1・1 運動方程式と数値積分 MD法は、多数の粒子からなる集合体としての物質の性質を調べる統計力学的な解析手法の一つである。目的と対象に応じて、実に様々なバリエーションが存在するが、ここでは、最もオーソドックスな例として、並進運動の自由度のみを持つ原子核の運動を扱う場合について説明する。原子配置の変化は原子核の周囲の電子状態の変化と密接に関係しているが、まず、原子核の質量は電子に比べ大きく、原子核の運動と電子状態の変化を分離して考え、さらに、原子核 (以下、単に原子と呼ぶ) の運動は古典力学的であると近似的に考えるところから話を進める。

N 個の原子からなる系を考えると、運動方程式は次式で表される、

$$m^{\alpha} \frac{d^2 \mathbf{q}^{\alpha}}{dt^2} = \mathbf{F}^{\alpha}(t) = - \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{q}^{\alpha}} \quad (\alpha = 1, 2, \dots, N). \quad (1)$$

ここで、 m^{α} 、 $\mathbf{q}^{\alpha}$ は、それぞれ、 α 番目の原子の質量、位置ベクトルである。また、 $\mathbf{F}^{\alpha}(t)$ は時刻 t において α 番目の原子が受ける力であり、系のポテンシャルエネルギー Φ の空間勾配として評価される。

式 (1) に加えて、時刻 $t = 0$ における全ての原子の位置と速度の初期条件を規定すると、時間に関する 2 階の連立常微分方程式の初期値問題となる。そして、任意の時刻での原子配置と各々の原子の速度は決定論的に定まるが、多体問題を解析的に解くことはできないので、原子の質量と原子間の力定数から決まる最小周期の格子振動が追跡できる程度に小さい 1fs (フェムト秒 = 10^{-15} s) のオーダーの適切な時間ステップで陽的に数値積分する。

その際に、Verlet の方法と呼ばれる以下のような差分公式 (あるいは、その改良型) を用いるのが一般的である。

$$\mathbf{q}^{\alpha}(t + \Delta t) = 2\mathbf{q}^{\alpha}(t) - \mathbf{q}^{\alpha}(t - \Delta t) + (\Delta t)^2 \frac{\mathbf{F}^{\alpha}(t)}{m^{\alpha}} + O((\Delta t)^4), \quad (2)$$

$$\mathbf{v}^{\alpha}(t) = \frac{\mathbf{q}^{\alpha}(t + \Delta t) - \mathbf{q}^{\alpha}(t - \Delta t)}{2\Delta t} + O((\Delta t)^2). \quad (3)$$

さらに、固体系の解析では、効率の良い計算を実施するために粒子登録法やブロック分割法などの工夫がなされる。

2・1・2 獲得される情報 式 (1) を、長時間にわたって積分を行なった結果、考えている系の位相空間の状態 (全ての原子の位置と運動量) の正確な時系列データが得られる。一般に、平衡系に対して我々が測定するマクロ特性 X は、次式で表されるある瞬間のミクロ量 $x(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t)$ (スナップショットでの値) の長時間平均として評価することができる (ここで、 $\mathbf{q} = (\mathbf{q}^1, \mathbf{q}^2, \dots, \mathbf{q}^N)$ とし、原子 α の運動量 $\mathbf{p}^{\alpha}$ についても、 $\mathbf{p} = (\mathbf{p}^1, \mathbf{p}^2, \dots, \mathbf{p}^N)$ としている)。

† 原稿受理 平成 11 年 4 月 2 日 Received Apr. 2, 1999

* 正会員 大阪大学大学院工学研究科知能・機能創成工学専攻 〒565-0871 吹田市山田丘, Dept. of Adaptive Machine Systems, Osaka Univ., Yamadaoka, Suita, 565-0871

$$\bar{x} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T x(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t) dt. \quad (4)$$

一方、統計力学では、分布関数 $\rho(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ で表される状態に対するマクロ特性 X はミクロ量 x のアンサンブル平均 $\langle x \rangle$ として次式によって与えられる。

$$\langle x \rangle = \iint \rho(\mathbf{q}, \mathbf{p}) x(\mathbf{q}, \mathbf{p}) d\mathbf{q} d\mathbf{p}. \quad (5)$$

多数の粒子系の平衡状態では、時系列データの中にその中にアンサンブルの要素ひとつひとつが適切な頻度で出現することが知られており、アンサンブル平均は長時間平均と $X = \langle x \rangle = \bar{x}$ のように等置できる。

ある体積 V の閉じた箱（あるいは後述の周期境界条件を仮定した状態）で式 (1) の積分を実行すれば、 N 、および、体系の体積 V 、体系の全エネルギー E が全ての時間を通じて一定に保たれた条件（NVE アンサンブル）のもとでの時系列記録を作成していることに対応する。1980年代ごろから、式 (1) の運動方程式を修正することによって、温度 T が一定、または圧力 p が一定などの様々なアンサンブルに相当する時系列記録を作成する方法に対する提案が次々となされている。Andersen²⁾ によって導入された圧力一定の MD 法は Parrinello と Rahman^{3), 4)} により応力一定の MD 法に一般化され、また、温度一定の MD 法については Woodcock⁵⁾ が提案した速度のスケールリング法を Hoover⁶⁾ らが束縛法に発展させている。これらの方法は能勢⁷⁾ によって拡張ラグランジアンによる MD 法として集大成され、等温等圧のもとでの解析⁸⁾ が可能となっている。

各種のアンサンブルに対する MD 計算では、例えば、次のような情報が得られる。まず、原子配置の時系列データから、動径分布関数、構造因子などの構造に関する情報が得られる。同時に、ボロノイ多面体解析やアニメーションによる評価⁹⁾ を通じて液体、非晶質などの構造とその変化を調べることができる。また、圧力、応力、弾性定数、あるいは、温度は、その他の熱力学的性質を求めることができる。さらに、久保の線形応答理論を用いて、変動する量の流束の時間相関関数の積分から、各種の輸送係数（拡散係数、粘性係数、熱伝導率）が求められる。

2.2 固体の力学特性・変形挙動の解析

2.2.1 原子間ポテンシャル 電子の非定常状態を考慮する量子分子動力学法 (Quantum Molecular Dynamics ; QMD) などを除いて、慣用的な MD 法では、原子配置の変化に応じて電子状態が一意的に対応すると考え、結果的に式 (1) の原子に働く力が原子配置のみの関数として表されると考える。このような近似の下で、最も理想的ものは、経験的データを一切用いず、原子番号と原子配置だけの情報で量子力学に基づく電子状態計算により系全体のポテンシャルエネルギー、および、個々の原子に働く力を評価する方法である。Car-Parrinello (CP) 法の名に代表される第一原理 MD (First Principles MD ; FPMD) 法、あるいは、非経験的 MD (*ab initio* MD) 法と呼ばれる方法がそれにあたり、現実の材料の定量的な特性予測を可能にする。¹⁰⁾

一方、最も単純化した近似では、ポテンシャルエネルギー Φ が、

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=1, \beta \neq \alpha}^N \phi(q^{\alpha\beta}) \quad (6)$$

のように、任意の 2 個の原子 α, β 間の距離 $q^{\alpha\beta}$ にだけ依存する球対称な 2 体ポテンシャル $\phi(q^{\alpha\beta})$ の和で与えられると考える。このとき、 F^α は、

$$F^\alpha = - \sum_{\beta=1, \beta \neq \alpha}^N \left. \frac{d\phi(r)}{dr} \right|_{r=q^{\alpha\beta}} \frac{\mathbf{q}^\alpha - \mathbf{q}^\beta}{q^{\alpha\beta}} \quad (7)$$

となる。剛体球、ソフトコア、あるいは、提案者の名のついた Born-Mayer, Morse, Lennard-Jones (LJ) ポテンシャルなど、目的に応じて 2 体の相互作用にはさまざまな関数形が導入される。たとえば、12-6 LJ ポテンシャルは、

$$\phi(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (\epsilon, \sigma \text{ は定数}) \quad (8)$$

で与えられる。近距離で反発力、遠距離で引力がはたらく、ある距離以上隔たると相互作用力が減衰するという特徴を持っている。また、シリコンなど共有結合性材料については、結合角依存性を考慮した Tersoff 型ポテンシャル¹¹⁾（とその改良型）などが汎く用いられる。

このように、形式的に 2 体、3 体、多体（多くは、2 体の汎関数）などに分類されるが、その導出の基礎となる理論に応じて、経験的、半経験的、非経験的といった分類もなされる。経験的ポテンシャルは、実験などでわかっている安定構造の再現¹²⁾ と材料の基本的特性のいくつか（弾性定数、格子定数、凝集エネルギー、原子空孔の形成エネルギーなど）を再現できるように決定される。一方、半経験的ポテンシャルは、理論的考察からポテンシャルの関数形を導出しておいて、その係数などを経験値によるフィッティングで定める。代表的なものとして埋め込み原子法 (Embedded Atom Method ; EAM)^{13), 14)} や多体ポテンシャル¹⁵⁾ があり、2 体ポテンシャルにおける限界¹⁶⁾ を克服でき、粒界・表面などの不均一場にも有効であるとされる。また、有効媒質理論 (Effective Medium Theory ; EMT) は、理論的に関数を簡素化して得られた実用レベルでの最も単純な非経験的ポテンシャルである。

2.2.2 境界条件と初期条件

(1) **周期境界条件とスーパーセル** MD 法によって扱う限られた数 N からなる集団の様相から巨視的特性の本質を説明するための方法として、しばしば周期境界条件 (periodic boundary condition) が用いられる (図 1 (a))。そこでは、巨視的試料の内部に立方体あるいは斜方体の基本枠 (ユニットセル) を想定し、内部に N 個の原子を配置し、基本枠の各面に接して基本枠と（その形と内部の原子配置と運動が）全く同一の仮想的枠が三次元的に並んでいると考える方法である。元来は均質な系のバルク特性を把握する目的で導入されるが、図 1 (b) に示すように、局所的な不均一構造を含む系にも適用され、スーパーセル法と呼ばれる。

(2) **その他の境界条件** その他の境界条件として、微

図1 周期境界条件とスーパーセル法

図2 境界条件に関連するさまざまなモデル化

図3 境界条件に関連するさまざまなモデル化

小試験片を考える方法 (図 2(a)), 特定の方向にのみ周期性を仮定する方法, 系の部分領域の原子の運動を (表面が崩れないように) 剛体的に拘束する方法 (図 2(b)) などが用いられる. また, き裂進展や, 切削の解析などでは, 特定の方向に注目点を移動し, 前方での新たな原子の流入と後方での消去をモデル化する方法などが用いられることもある. また, 図 2(c) のように系の温度上昇を原子の動力学的性質を損なわないように取除くために, 部分的に温度を制御するサーモスタット領域を設ける方法がある.

外力を加える方法としては, 一般化された自由度に対して, 変位を制御する方法と, 荷重を制御する方法に大別できる. 図 3 はき裂先端場の解析の例である. (a), (b) はそれぞれ, 変位規定, 荷重規定による方法を模式的に示したものである. また, 両者の中間的なより現実に近い条件として, 図 3(c) のような連続体との結合解法が有効である.

(2) 初期条件 結晶固体の解析において, 結晶構造が予め分かっている場合には, 格子点に原子を配置する. 速度を目的の温度に対応するマクスウェル分布に従うように乱数を用いて与え, 重心補正により系全体の運動量が零になるように修正する. その後, しばらく放置するとやがて平衡状態に落ち着く. この計算過程を緩和計算とよぶ.

図4 加熱・急冷による非晶質の生成

2・2・3 MD 法以外の方法 固体の原子レベル解析でモンテカルロ (Monte Carlo ; MC) 法といえば, 多くは, Metropolis により提案された方法を指す. この方法は, 乱数を用いて目的のアンサンブルに対応する重み付きサンプリングを行ない, 式 (5) の積分を実行する方法である. 一方, 絶対零度のポテンシャルエネルギーを停留させる配置を求めるための方法を分子静力学 (Molecular Statics ; MS) 法と呼ぶことがある. この方法では, 具体的な数値計算アルゴリズムとして共役勾配 (Conjugated Gradient ; CG) 法や焼きなまし (Simulated Annealing ; SA) 法が用いられる.

2・3 非晶質金属の塑性変形解析

MD 法を用いて行なわれた非晶質 Fe の生成・モデル作成・変形の一連の解析¹⁷⁾ を例にとり, 具体的な実行手順を追ってみよう.

まず, 立方体の基本セルの bcc 格子点に Fe 原子を配置し, 常温に対応する速度を個々の原子に与える. そして, 温度をコントロールすることにより, 圧力一定の MD 法で, 加熱・急冷し, 融解・凝固の解析¹⁸⁾ を行なう. 図 4 は, その過程での体積と温度の関係を示している. 加熱時に融点付近で体積変化に不連続が現れるが, 急冷時には現れないことがわかる.

次に, 急冷後生成された構造について検討する. 原子配置の微視的情報から得られた動径分布関数の検討とボロノイ多面体解析などを通じて典型的な非晶質であることが確認される. また, 内部の不均一構造と原子レベルでの残留応力との関連¹⁸⁾ が調べられる.

さらに, 単軸引張変形試験によって, 得られた応力ひずみ曲線などのデータから, 弾性特性, 異方性の有無, 降伏強度が調べられ, 同時に, 原子レベルでの変形機構が議論される. また, 荷重負荷の途中で除荷することにより得られた構造について, エネルギーの安定性や弾性定数などの評価を行なった結果, 損傷を受けていることが確認される. 図 5(a) のように損傷を受けた試料の二軸変形解析を実施し, 得られた応力の変化から評価した降伏応力を図 5(b) のように Π 面にプロットすることによって損傷がほぼ等方的に起こっていることなどが確認される.¹⁹⁾

図5 塑性変形解析 (M1, M2 ~ M5の順に予負荷の程度が大きい材料に対する結果を示している)

図6 自由表面を有するモデル (濃淡は非均一変位量を意味する。濃い色ほど値が大きいことを示す)

一方、得られた非晶質構造を図6のように自由表面を有する微小試験片に、「加工」して、引張変形の解析を実行することによって周期境界条件を用いたモデルでは見られなかった表面近傍から斜め方向への局所的なせん断帯が出現することがわかる。

また、き裂を有するモデルに加工しMD解析を実施した結果、変形の増大に伴ってき裂先端に損傷域が広がり、その応力分布に損傷モデルに基づく連続体力学の解析と定性的な一致が見られることが示される。²⁰⁾

以上のように、ミクロな原子/分子レベルの解析では、変形メカニズムの解明だけでなく材料特性の獲得が同じ理論の枠組の中で同時に行なうことが可能であるということが、前回までの講座で述べられてきた理論に基づくマクロ解析と異なる点である。

3 最近の解析事例

力学特性・変形挙動のミクロ解析は、まだ発展の途上にあり学問的に体系化されているわけではないので、以下では、読者の修得の一助となることを願って、マクロな塑性の発現の基礎となる原子の非弾性的な組み変わりを論じた最近の研究を幾つかのキーワード別に分類して紹介する。なお、幾つかの解説記事^{21)~24)}以降のものを努めて取り上げている。

ただし、MD法は、前述したように、さまざまな現象を統一的視点で扱うのが一つの長所であり、個々のミクロ事象のカテゴリーに分離することは困難であること、

図7 転位速度とせん断応力の関係 (○はMD解析の結果、実線はその回帰曲線、△と▲はそれぞれ刃状転位らせん転位に対する実験結果⁴⁰⁾)

また、紹介は全ての分野を網羅しているわけではないことをお含み願いたい。

3・1 転位の芯構造と転位運動

山口の解説²⁵⁾にあるように、1970年代からMS法を使って転位芯の構造が精力的に研究されているが、最近の研究は、大規模計算による多数転位の3次元的な転位間の相互作用にまで発展している。^{26), 27)}

例えば、Ni₃AlのPPV型のロックのエネルギー評価²⁸⁾、C₆₀クラスター結晶中のらせん転位の構造²⁹⁾、Cu/Agが偏析しているAl内の拡張転位双極子³⁰⁾、bcc-Feの刃状転位近くの重鈴状の格子間原子の安定性と拡散のメカニズム³¹⁾、Ni中の転位の応力依存性³²⁾、Cu内の刃状転位に沿ったパイプ拡散³³⁾、自由表面とAl中の刃状転位との相互作用³⁴⁾、すべり転位内の原子の自己拡散³⁵⁾、刃状転位の運動特性³⁶⁾などがMD、MC、MS法などさまざまな方法で調べられている。

図7は、完全結晶中の転位の運動のMD解析を行ない、せん断応力と転位速度の関係を調べた結果を実験値と比較したものである。^{37), 38)} 定性的には、低応力域での線形関係と高応力での飽和といった特徴に良い一致がみられる。最近、さらに高応力下では転位の速度が音速を越えることがMD解析により示され³⁹⁾ 話題をよんでいる。

3・2 粒界・異材界面の強度と非弾性変形

粒界の解析の多くは、構造と粒界エネルギーの評価による安定性・引張やせん断に対する強度評価を目的として実施されてきたが、近年は、粒界移動、粒界と表面の会合部のストレスマイグレーションや、有限温度の原子構造、拡散係数の評価にも応用されている。また、異材界面については、材料ごとに格子定数が異なることによって生じるミスフィット構造とその安定性、残留応力を調べたり、界面強度評価が主なターゲットとなっている。

結晶粒界に関わる最近の解析では、Ag粒界に現れる欠陥9R構造の安定性⁴¹⁾、双結晶の粒界すべり・粒界移動⁴²⁾、せん断変形⁴³⁾、積層欠陥と空孔や格子間原子との相互作用⁴⁴⁾、Agの大傾角粒界移動⁴⁵⁾、CuのΣ=3双晶境界におけるFCCから9R構造へのせん断型相変態⁴⁶⁾、粒界を横切る刃状転位⁴⁷⁾、粒界転位が粒界すべり抵抗に及ぼす影響⁴⁸⁾、3C-SiC(001)/Si(001)の界面の緩和メカニズムおよび熱的安定性⁴⁹⁾、対応粒界の強度と傾角との関係⁵⁰⁾などがある。その他、齋藤の学位論文⁵¹⁾を参照されたい。

3・3 相変態と変形

相変態の原子レベルの解析は、大きく分けて、系全体が全く別の相に移行する状態を再現し、熱・応力などのクライテリオンを評価したりあるいはトリガーとなる現象の発見を目標に行なわれるものと、表面・界面・き裂や内部の不均一構造や不均一な力学状態を起点に起こる局所的な相変態現象を調べるものがある。

前者は、古典的には、Milstein⁵²⁾や、Hill⁵³⁾の結晶格子不安定性に関する理論が基礎になっており、Parrinelloと、Rahmanによって提案された応力一定のMD法によって、熱、あるいは応力によって誘起される相変態のプロセスが、原子集団挙動による系の不安定性として、扱うことが可能である。近年では、大規模系を扱うことによりこのような周期境界条件を用いた系においても空間の一部分に起こる相変態によって出現するサブ構造のパターンを見出すことも可能になってきている。後者は、き裂先端や自由表面を有するモデルに、温度変化や外部負荷を与えることによって、変形双晶の発達や、界面との関係などについて検討がなされている。

例えば、Ti-at 15% V β 相のマルテンサイト変態と γ -TiAlの界面はく離⁵⁴⁾NiAlの熱・応力誘起マルテンサイト変態⁵⁵⁾Ti-V合金のマルテンサイト変態⁵⁶⁾応力誘起相変態におけるフォノンのソフト化と弾性不安定性⁵⁷⁾Niの変形双晶⁵⁸⁾衝撃波によって誘起される塑性変形⁵⁹⁾などの研究がある。

3・4 き裂と破壊

1991年以前のもは、澤村ら⁶⁰⁾による解説で網羅されているので、ここでは、それ以降のもので、特に、塑性に関係が深いき裂先端場に延性的に起こる転位発生や相変態を扱ったものを紹介する。

最近のものでは、Ti-V合金系のマルテンサイト変態やすべり・双晶変形のV添加量依存性⁶¹⁾き裂先端からの転位生成と運動・弾性論との比較⁶²⁾Mo結晶の変形双晶発生メカニズム配向・応力状態依存性⁶³⁾CoAl/FeAl⁹⁴⁾TiAl⁶⁵⁾NiAl⁶⁶⁾などの2元系合金の破壊、臨界応力拡大係数とBDT⁶⁷⁾、⁶⁸⁾き裂先端から発生する転位群と粒界の相互作用⁶⁹⁾は、荷重負荷条件依存性⁷⁰⁾モードII⁷¹⁾、⁷²⁾・モードIII⁷³⁾の転位生成条件、連続体結合モデルによるき裂先端からの発生転位の力学的寄与の考慮⁷⁴⁾高速破壊⁷⁵⁾下限界近傍の疲労き裂進展挙動⁷⁶⁾複数転位による応力拡大係数を遮蔽⁷⁷⁾などの議論がある。

図8 延性破壊の大規模解析（サイトエネルギーの大きい原子のみを表示）

図8(a), (b)は、それぞれ、Zhouらによる約35 000 000原子からなる楕円状のき裂を有する銅の薄板の延性破壊の解析⁷⁸⁾と、Abrahamらによる100 509 696原子からなる原子系の30 000時間ステップの解析⁷⁹⁾の結果を示している。いずれも、き裂先端から発生する多数の転位が複雑に相互作用している様子を見事に再現した現行の最大規模の計算結果である。

3・5 表面・微小切削とナノトライボロジー

マイクロ切削解析として、原子レベルでの表面創成⁸⁰⁾、⁸¹⁾の解析が精力的になされている。例えば、工具形状や非削材料・切削速度依存性⁸²⁾原子空孔の存在の影響⁸³⁾などが調べられている。また、SPMの探針と基板の離脱⁸⁴⁾NiおよびAuの表面に吸着したAuのクラスターの安定性と崩壊プロセス⁸⁵⁾膜上の原子間力顕微鏡像⁸⁶⁾ダイヤモンド表面間の破片分子が表面の摩耗に与える影響⁸⁷⁾原子スケールの摩耗、摩擦のメカニズム⁸⁸⁾などの研究がある。

3・6 微小材料試験

Doyama⁸⁹⁾は、材料科学/工学へのコンピューターの応用と題した記念講演で、微小材料の塑性変形や破壊に対する自らの先駆的研究をまとめている。微小材料モデルによるシミュレーションは、平衡系のバルク特性を知るというMD法本来の考え方とは異なるが、有意義な知見が導かれることが多い。例えば、Huら⁹⁰⁾は、試験片寸法や条件の異なる様々なモデルに対して、 α -Feの引張変形MD解析を系統的に実施し、得られる多様な現象を整理している。

最近の研究は、ナノインデンテーションによる構造変化、力の評価、振動などの評価⁹¹⁾微小試験片の引張変形⁹²⁾ナノ結晶Alの引張変形⁹³⁾Niナノ単結晶の引張変形と破壊⁹⁴⁾・拘束の影響⁹⁵⁾履歴効果⁹⁶⁾変形機構/応力ひずみ関係の温度/初期欠陥依存性⁹⁷⁾ナノ結晶体内の粒界移動⁹⁸⁾C₆₀⁺とC₆₀の衝突における分子融合と分裂の衝突エネルギー依存性⁹⁹⁾グラファイト平面で圧縮された球形のC₆₀クラスターの力学特性と変形機構¹⁰⁰⁾ナノ結晶の粒径依存性や粒界特性¹⁰¹⁾など多岐にわたっている。

図9は、約550 000原子からなるナノ多結晶モデルの塑性変形の解析結果を示している。原子配置の詳細な検討により、内部に発生した転位が粒界との相互作用下で

図9 ナノ多結晶体の変形（濃淡は初期配属粒ごとの色分け）

運動したり、結晶が回転する機構が観察されている¹⁰²⁾。

4 お わ り に

MD法の基礎から力学特性評価と塑性変形に関連する分野への適用例といくつかの最近の事例について概説した。本連載講座では、様々な切口でもって塑性理論の説明がなされてきたが、本講で扱った内容は、ミクロな立場からの、そして、最近のコンピュータの支援を受けて急速に広がりつつある計算力学的理論であり、塑性理論の中では萌芽的であり、発展途上にあると言える。

なお、第一原理計算¹⁰³⁾、加速化・高速化¹⁰⁴⁾、熱・力学特性¹⁰⁵⁾ほか、衝撃破壊、有機化合物、高分子材料、液晶などの粒子解析、あるいは、個別要素法¹⁰⁶⁾、¹⁰⁷⁾、離散転位動力学¹⁰⁸⁾などを導入したマルチレベル解析やハイブリッド的方法においても、塑性工学に関連する重要なトピックスが含まれているにも関わらず本稿では紙面の制約もあり言及できなかった、別の機会に紹介したい。今後のこの学問分野の発展を祈念してここで筆をおく。

本稿に関連して、大阪大学大学院 北川 浩教授のご指導をいただいた。また、大阪府立大学 中谷敬子博士、ならびに、分子動力学部門委員会委員諸氏からは有益なご意見をいただいた。また、文献調査に際して、学生諸氏との議論が役立った。記して謝意を表す。

参 考 文 献

- 1) 例えば、北川 浩、北村隆行、渋谷陽二、中谷彰宏、“初心者のための分子動力学”(1997) 養賢堂。
- 2) H. C. Andersen, J. Chem. Phys., **72**, 2384 (1980).
- 3) M. Parrinello and A. Rahman, Phys. Rev. Lett., **45**, 1196 (1980).
- 4) M. Parrinello and A. Rahman, J. Appl. Phys., **52**, 7182 (1981).
- 5) L. V. Woodcock, Chem. Phys. Lett., **10**, 257 (1971).
- 6) W. G. Hoover, Phys. Rev. A, **31**, 1695 (1985).
- 7) S. Nosé, J. Chem. Phys., **81**, 511 (1984).
- 8) S. Nosé and F. Yonezawa, J. Chem. Phys., **84**, 1803 (1986).
- 9) 例えば、高坂延良、栢木良典、中谷敬子、杉山吉彦、日経サイエンス, **29**, A13 (1999).
- 10) D. K. Remler and P. A. Madden, Mol. Phys., **70**, 921 (1990).
- 11) J. Tersoff, Phys. Rev. Lett., **56**, 632 (1986).
- 12) R. Najafabadi and G. Kalonji, Acta Metal., **36**, 917 (1988).
- 13) M. S. Daw and M. I. Baskes, Phys. Rev. Lett., **50**, 1285 (1983).
- 14) M. S. Daw and M. I. Baskes, Phys. Rev. B, **29**, 6443 (1984).
- 15) M. W. Finnis and J. E. Sinclair, Philos. Mag. A, **50**, 45 (1984). (Erratum ibid, **53**, 161 (1986)).
- 16) C. Kittel, "Introduction to Solid State Physics (2nd E d.)", p.95 (1975) 丸善。
- 17) 中谷敬子, 大阪大学学位論文 (1996)。
- 18) 中谷敬子, 北川 浩, 中谷彰宏, 日本機械学会論文集, A-**62**, 259 (1996)。
- 19) 中谷敬子, 北川 浩, 中谷彰宏, 材料, **46**, 244 (1997)。
- 20) K. Nakatani, A. Nakatani and H. Kitagawa, Adv. Mat. Res., **1**, 88 (1998)。
- 21) 松宮 徹, 鉄と鋼, **74**, 753 (1988)。
- 22) 松宮 徹, 材料, **40**, 509 (1991)。
- 23) 松宮 徹, 日本機械学会誌, **97**, 73 (1994)。
- 24) 松宮 徹, 日本機械学会誌, **97**, 454 (1994)。
- 25) 山口正治, 日本金属学会会報, **15**, 427 (1976)。
- 26) V. Bulatov, F. F. Abraham, L. Kubin, B. Devincere and S. Yip, Nature, **391**, 669 (1998)。
- 27) S. J. Zhou, D. L. Preston, P. S. Lomdahl, and D. M. Beazley, Science, **279**, 1525 (1998)。
- 28) T. A. Parthasarathy and D. M. Dimiduk, Acta Mater., **44**, 2237 (1996)。
- 29) S. Tamaki, N. Ide, I. Okada and K. Kojima, Jpn. J. Appl. Phys. I, **37**, 2608 (1998)。
- 30) R. C. Lane, J. Mater. Res., **10**, 578 (1995)。
- 31) H. Kamiyama, T. H. Rafii, Y. Kawazoe and H. Matsui, J. Nucl. Mater., **212**, 231 (1994)。
- 32) M. I. Baskes, R. G. Hoagland and T. Tsuji, Model. Simul. Mater. Sci. Engng., **6**, 9 (1998)。
- 33) J. Huang, M. Meyer and V. Pontikis, Philos. Mag. A, **63**, 1149 (1991)。
- 34) A. Aslanides and V. Pontikis, Philos. Mag. Lett., **78**, 377 (1998)。
- 35) R. G. Hoagland, A. F. Voter and S. M. Foiles, Scr. Mater., **39**, 589 (1998)。
- 36) A. T. Maylybayev, V. V. Kirsanov and T. E. Turkebayev, Phys. Met. Metal., **70**, 176 (1990)。
- 37) H. Kitagawa, A. Nakatani, K. Nakatani and Y. Shibutani, Book of Abst. ICM7, 460 (1995)。
- 38) 中谷彰宏, 北川 浩, 中谷敬子, 材料, **46**, 619 (1997)。
- 39) P. Gumbsch and H. Gao, Science, **283**, 965 (1999)。
- 40) N. Urabe and J. Weertman, Mater. Sci. Engng., **18**, 41 (1973)。
- 41) D. Hofmann and M. W. Finnis, Acta Met. Mater., **42**, 3555 (1994)。
- 42) 岩崎富生, 佐々木直哉, 千葉矩正, 阿部康夫, 日本機械学会論文集, A-**59**, 2723 (1993)。
- 43) 岩崎富生, 佐々木直哉, 千葉矩正, 阿部康夫, 日本機械学会論文集, A-**60**, 819 (1994)。
- 44) L. E. Kar'kina, Phys. Met. Metal., **68**, 38 (1989)。
- 45) R. J. Jhan and P. D. Bristowe, Scr. Met. Mater., **24**, 1313 (1990)。
- 46) G. H. Campbell, D. K. Chan, D. L. Medlin, J. E. Angelo and C. C. Barry, Scr. Met. Mater., **35**, 837 (1996)。
- 47) H. L. Heinisch, R. G. Hoagland, R. J. Kurtz and J. P. Hirth, Scr. Mater., **39**, 451 (1998)。
- 48) R. J. Kurtz and R. G. Hoagland, Scr. Mater., **39**, 653 (1998)。
- 49) V. Chirita, L. Hultman and L. R. Wallenberg, Thin Solid Films, **294**, 47 (1997)。
- 50) 齋藤賢一, 北川 浩, 中谷彰宏, 尾方成信, 材料, **46**, 238 (1997)。
- 51) 齋藤賢一, 大阪大学学位論文 (1996)。

- 52) F. Milstein, Phys. Rev. B, **3** 1130 (1971).
- 53) R. Hill, Math. Proc. Camb. Phil. Soc., **77**, 225 (1975).
- 54) M. Grujicic and S. G. Lai, J. Mater. Sci., **33**, 4389 (1998).
- 55) Y. Shao, P. C. Clapp and J. A. Rifkin, Met. Mater. Trans. A, **27**, 1477 (1996).
- 56) P. Dang and M. Grujicic, Model. Simul. Mater. Sci. Engng., **4**, 123 (1996).
- 57) 渋谷陽二, 鳥生純一, 富田佳宏, 日本金属学会会報, **61**, 696 (1997).
- 58) 米田知行, 飛田守孝, 榊原 精, 材料, **46**, 228 (1997).
- 59) B. L. Holian and P. S. Lomdahl, Science, **280**, 2085 (1998).
- 60) 澤村明賢・山本良一, 日本金属学会会報, **31**, 19 (1992).
- 61) P. Dang and M. Grujicic, Acta Mater., **45**, 75 (1997).
- 62) F. Cleri, D. Wolf, S. Yip and S. R. Phillpot, Acta Mater., **45**, 4993 (1997).
- 63) Q. H. Tang and T. C. Wang, Acta Mater., **46**, 5313 (1998).
- 64) V. Shastri and D. Farkas, Intermetallics, **6**, 95 (1998).
- 65) J. Panova and D. Farkas, Met. Mater. Trans. A, **29**, 951 (1998).
- 66) D. Farkas, Scr. Mater., **39**, 533 (1998).
- 67) K. S. Cheung and S. Yip, Model. Simul. Mater. Sci. Engng., **2**, 865 (1994).
- 68) L. Hua, T. H. Rafii and M. Cross, Philos. Mag. Lett., **75**, 237 (1997).
- 69) Y. W. Zhang and T. C. Wang, Model. Simul. Mater. Sci. Engng., **4**, 231 (1996).
- 70) 柳田信義, 渡部 修, 日本機械学会論文集, A-**61**, 1248 (1995).
- 71) 北川 浩, 中谷彰宏, 渋谷陽二, 日本機械学会論文集, A-**59**, 1834 (1995).
- 72) 中谷彰宏, 北川 浩, 中谷敬子, 材料, **46**, 625 (1997).
- 73) 北川 浩, 中谷彰宏, 日本機械学会論文集, A-**59**, 256 (1993).
- 74) 野口博司, 古谷佳之, 日本機械学会論文集, A-**63**, 725 (1997).
- 75) F. F. Abraham and H. Gao, Philos. Mag. Lett., **78**, 307 (1998).
- 76) 久保司郎, 吉川正盛, 日本機械学会論文集, A-**65**, 582 (1999).
- 77) Y. W. Zhang, T. C. Wang and Q. H. Tang, Scr. Met. Mater., **33**, 267 (1995).
- 78) URL <http://cnls-www.lanl.gov/People/sjzhou/>
- 79) URL <http://www.almaden.ibm.com/st/>
- 80) 稲村豊四郎, 鈴木裕幸, 竹澤伸浩, 精密工学会誌, **56**, 1480 (1990).
- 81) 島田尚一, 井川直哉, 田中宏明, 大森義市, 打越純一, 精密工学会誌, **59**, 2015 (1993).
- 82) J. D. Kim and C. H. Moon, Int. J. Adv. Manufact. Tech., **11**, 319 (1996).
- 83) 前川克廣, 材料, **46**, 250 (1997).
- 84) U. Landman, W. D. Luedtke, J. Ouyang and T. K. Xia, Jpn. J. Appl. Phys. I, **32**, 1444 (1993).
- 85) W. D. Luedtke and U. Landman, Phys. Rev. Lett., **73**, 569 (1994).
- 86) T. Bonner and A. Baratoff, Surf. Sci., **377-379**, 891 (1997).
- 87) M. D. Perry and J. A. Harrison, Thin Solid Films, **290-291**, 211 (1996).
- 88) L. Zhang and H. Tanaka, Wear, **211**, 44 (1997).
- 89) M. Doyama, Mater. Trans. JIM., **32**, 105 (1991).
- 90) S. Y. Hu, M. Ludwig, P. Kizler and S. Schmauder, Model. Simul. Mater. Sci. Engng., **6**, 567 (1998).
- 91) V. V. Pokropivny, V. V. Skorokhod and A. V. Pokropivny, Model. Simul. Mater. Sci. Engng., **5**, 579 (1997).
- 92) 佐々木直哉, 岩崎富生, 千葉矩正, 阿部康夫, 石川雄一, 日本機械学会論文集, A-**57**, 1992 (1991).
- 93) 岩崎富生, 佐々木直哉, 千葉矩正, 阿部康夫, 日本機械学会論文集, A-**60**, 2377 (1994).
- 94) 北村隆行, 屋代如月, 大谷隆一, 日本機械学会論文集, A-**62**, 1813 (1996).
- 95) 屋代如月, 北村隆行, 大谷隆一, 日本機械学会論文集, A-**63**, 2380 (1997).
- 96) 北村隆行, 屋代如月, 宅原雅人, 大谷隆一, 材料, **46**, 232 (1997).
- 97) 泉 聡志, 小竹 進, 日本機械学会論文集, A-**59**, 263 (1993).
- 98) J. Schiotz, T. Rasmussen, K. W. Jacobsen and O. H. Nielsen, Philos. Mag. Lett., **74**, 339 (1996).
- 99) F. Rohmund, E. E. B. Campbell, O. Knospe, G. Seifert and R. Schmidt, Phys. Rev. Lett., **76**, 3289 (1996).
- 100) D. W. Brenner, J. A. Harrison, C. T. White and R. J. Colton, Thin Solid Films, **206**, 220 (1991).
- 101) A. Nakatani and H. Kitagawa, Proc. IMMM97, 71 (1997).
- 102) 中谷彰宏, 北川 浩, 下川智嗣, 日本機械学会論文集, 掲載予定.
- 103) 川添良幸・相原智康, 材料, **47**, 1099 (1998).
- 104) 三上益弘, 川田正晃, 材料, **48**, 189 (1999).
- 105) 例えば, 上原拓也, 京都大学学位論文 (1998).
- 106) 例えば, T. Aizawa, Mater. Sci. Forum, **233-234**, 37 (1997).
- 107) 例えば, 島 進, 小寺秀俊, 氏江勇貴, 日本機械学会講演論文集, No. 954-1, 203 (1995).
- 108) 例えば, 中谷彰宏, 北川 浩, 杉崎 誠, 日本機械学会論文集, A-**65**, 575 (1999).