

TSUBAME 共同利用 令和6年度 学術利用 成果報告書

利用課題名 極限環境構造材料の原子論解析に資する構造材料用ニューラルネットワーク原子間相互作用を用いた変形・破壊解析

英文: Deformation and fracture analysis based on atomistic simulation using neural network interatomic potential for structural materials under harsh environment

利用課題責任者
Shigenobu Ogata

大阪大学大学院基礎工学研究科
Graduate School of Engineering Science, University of Osaka
<https://tsme.me.es.osaka-u.ac.jp/>

邦文抄録(300 字程度)

本課題では、第一原理計算、分子動力学法、モンテカルロ法などの原子論的手法を用い、実験が困難な極限環境下における構造材料内部の塑性変形、組織変化、破壊現象の定量的理解を目指した。特に、炭素を含む鉄鋼材料に適用可能な高精度ニューラルネットワーク原子間相互作用を構築し、変形・破壊挙動の解析を行った。その結果、鉄中らせん転位の移動に対し、炭素原子が移動を阻害しつつも、応力上昇により炭素雰囲気から転位が離脱する現象が繰り返されることを明らかにし、これが炭素鋼の変形試験において観察されるセレーションの起源であることを定量的・原子論的に示した。

英文抄録(100 words 程度)

This study investigates plastic deformation and fracture mechanisms in carbon steels under extreme conditions using atomistic simulation methods, including first-principles calculations, molecular dynamics, and Monte Carlo simulations. A high-accuracy neural network interatomic potential was developed for the iron-carbon system. Using this interatomic potential, we analyzed screw dislocation behavior with and without carbon content. The results revealed that screw dislocation motion is repeatedly impeded by carbon atoms, followed by detachment due to increasing applied stress. This alternate behavior was quantitatively and atomistically identified as the origin of serrated flow observed in experimental deformation tests of carbon steels.

Keywords: Atomistic simulations, Neural network interatomic potential, steel, dislocation, plastic deformation

背景と目的

鉄鋼材料は最も一般的な構造材料であり、様々な合金元素の添加や組織制御により高強度、高靱性を実現できることから、高温環境や高圧水素環境など極限環境での利用に供する構造材料としても期待されている。しかしながら、その微細構造の発達と構造性能の関係に関する理解はまだ完全とは言いがたい。炭素は鉄鋼材料の最も主要な元素であり、わずかな量の炭素添加でも大きな力学特性の変化をもたらす。鉄鋼において炭素原子が果たす役割を根本的に理解するためには、その熱力学と動力学を原子レベルで特徴づけることが重要である。第一原理電子状態計算は、精度が高い反面、計算コストが高い。一方経験的原子間ポテンシャルを用いれば、計算コストを大幅に削減できるため、長期間にわたる広範な系のシミュレーションが可能に

なるが、その信頼性には疑問が残る。

本課題では、ニューラルネットワークに基づく機械学習原子間相互作用を構築することで、鉄—炭素系材料の変形における高速かつ高精度な動力学解析を実施し、変形・破壊過程における炭素の影響を原子レベルから理解することを目的とする。

概要

本課題では、大規模な第一原理計算、分子動力学法、モンテカルロ法などの原子論的手法を駆使し、実験・計測で取得困難な極限環境下での構造材料内部の塑性変形、組織変化、破壊の各現象に関する定量データを創出することを目的とした。そのために、本年度は炭素を含む鉄鋼材料に適用可能な高精度ニューラルネットワーク原子間相互作用を構築し、これを用い

た変形解析を行い、材料特性発現のメカニズム解明に取り組んだ。

結果および考察

鉄—炭素系のニューラルネットワーク原子間相互作用の構築を行い、これを用いて炭素が鉄中のらせん転位の運動に与える影響を解析した。図 1 に純鉄および炭素鋼モデルにおけるせん断変形試験の応力ひずみ線図(上)と、転位芯における炭素濃度の推移(下)を示す。純鉄においては、らせん転位の運動が開始すると、流動応力は一定値で推移することに対して、炭素を含むモデルでは一度大きな応力降下が発生した後、増加と急激な減少を繰り返し、セレーションを生じている。この傾向は炭素濃度が大きいほど顕著になっている。また、転位芯における炭素濃度の推移より、応力上昇は炭素が転位芯に取り込まれ高濃度になっているときに生じ、応力降下とともに濃度が急激に変化していることから、セレーションの発生は転位に取り込まれた炭素原子によるピン止めによると考えられる。

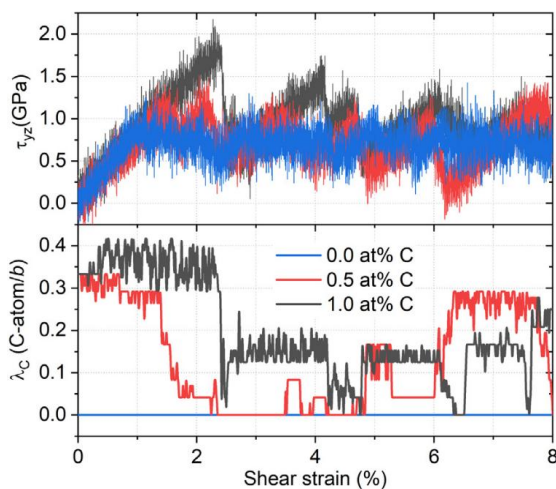


図 1. せん断変形シミュレーションにより得られた応力-ひずみ線図(上)と転位芯の炭素濃度(下)。

まとめ、今後の課題

本課題では鉄-炭素系ニューラルネットワーク原子間相互作用を構築し、これを用いた塑性変形解析を行った。その結果、炭素鋼で見られるセレーションの原因が炭素原子による転位のピン止めであることを定量的に明らかにした。今後は構築した原子間相互作用を用い

た大規模変形・破壊解析を実施することで、粒界や第二相といった異なる欠陥、組織における変形およびそれらと転位との相互作用における炭素の影響について原子レベルからの理解を目指す。