

# 結晶塑性の原子過程に関する国際シンポジウム — 結晶強度の定量的理解に向けて —

東京大学 生産技術研究所  
助教 上村 祥史

(平成 29 年度 国際会議等開催準備助成 AF-2017049)

キーワード：結晶塑性，転位，原子レベル解析

## 1. 開催日時

2018 年 10 月 25 日（木）～10 月 27 日（土）

## 2. 開催場所

東京大学情報学環・福武ホール  
東京都文京区本郷 7-3-1

## 3. 国際会議報告

「結晶塑性の原子過程に関する国際シンポジウム—結晶強度の定量的理解に向けて（International Symposium on Atomistic Processes of Crystal Plasticity —Toward quantitative understanding of crystal strength, 略称 APCP）」と題する会議を 2018 年 10 月 25 日から 10 月 27 日にかけて、日本学術振興会産学協力第 133 委員会の主催で、東京大学本郷キャンパス内の福武ホールで開催した。

開催趣旨は、1934 年<sup>1)</sup>に結晶転位の概念が提唱されてから結晶塑性は転位論を基礎に 84 年に亘って議論されてきたが、結晶塑性の原子レベルの素過程について定量的説明が困難であり、さらに結晶塑性現象が複雑系であることから定性的な議論しかなされてこなかった。しかし、20 世紀末から、理論の面では第一原理計算技術の進歩、実験の面では原子レベル分解能の電子顕微鏡の開発により結晶塑性の素過程を原子レベルで解明することが可能になり、定量的な理解が可能になった。このような状況を踏まえて、理論及び実験両分野の研究者の参加をえて、結晶強度の定量的理解に貢献することを目的として標記の国際シンポジウムを企画した。

参加者は 56 名（日本人 37 名、外国からは 9 か国 19 名）で、2 日半に亘ってポスターセッションを含む 8 セッションにおいて計 45 件の研究発表が行われた。内訳は、招待講演 16 件、一般講演 14 件、ポスター発表 15 件であった。研究対象は多岐にわたっていたが、実験研究と理論研究（主としてコンピュータによる第一原理シミュレーション）に分けるとほぼ 1 : 1 の件数であったので、開催目的の一つであった実験研究者と理論研究者の情報交換、交流という点を十分に満足するものであった。



図 1. 会場エントランス

今回の研究発表で得られた特徴的な結果と問題点をいくつか挙げる。

(1) 従来塑性のコンピュータ・シミュレーションは得られた結果を実験結果と比較して妥当性を検討することが多かったが、転位・固溶原子相互作用、粒界への偏析と粒界強度の関係などについては、系統的な理論計算が行われてそれを実験で検証する必要性が生じるなど、理論計算が先行する傾向が見られた。一方、近年塑性の実験は主として実用材料開発を目的とする研究も多いが、さらなる基礎研究の推進が望まれる。

(2) 第一原理コンピュータ・シミュレーションによって、未解決であった六方晶金属の双晶形成機構の明快な説明が行われるなど、塑性の原子過程の解明にコンピュータが極めて有効であることが示された。一方、第一原理計算によって転位の関与する素過程について信頼性における結果を得るには、かなり多数の原子によるモデル計算が必要であるが、現在のコンピュータの能力ではまだ必ずしも十分でなく、今後コンピュータ能力の更なる向上が望まれる。

(3) しかし、転位と粒界の相互作用などの多数の原子が関与する現象を、Embedded-Atom Method を用いて分子動力学計算でシミュレートする第一原理計算ではない近似的方法を用いた研究も、実験事実を解釈する手法として十分有意義なものとして研究発表が行われた。今後、コンピュータの能力が各段に進歩するまで、当分の間その意義は失われたいと思われる。



図2. 招待講演者 D. Caillard 博士とのディスカッション

(4) 今回、我が国で開催したシンポジウムの特徴として、我が国で開発された長距離積層型規則相 (LPSO 相) の Mg 合金<sup>2)</sup>の変形機構について一つのセッションが設けられた。この相の変形はすべりや変形双晶ではなくキンク形成によってもたらされるのが特徴である。結晶のキンクによる変形は1940年代から知られていたがマイナーな変形機構として殆ど研究が進んでいなかった。今後、その変形機構の解明が我が国でなされることが望まれる。

(5) 高分解能 (走査) 電子顕微鏡 (HR(S)TEM)<sup>3)</sup>を用いた研究発表は、体心立方金属中の転位運動のその場観察、双結晶法で作成したさまざまな粒界についてのすべり転位と粒界の相互作用の解明、酸化物結晶の双晶形成機構の解明などの明快な実験結果が報告された。しかし、残念ながらこの種の HR(S)TEM による研究発表は少なかった。それは収差補正 HR(S)TEM による転位解析がまだ普及しておらず、電子顕微鏡先進国のわが国でも同分野の研究グループが未だ少ないことに起因している。



図3. 講演会の様子

(6) 30年以上前に盛んに研究された bcc 結晶の異方塑性現象、半導体結晶の特異な塑性挙動など古いテーマもその機構が必ずしも十分解明されているわけではない<sup>4)</sup>。今日、多くの研究者が流行のテーマを追う中、古い未解決の問題も取り上げられたことは意義深いことであった。

転位論研究が20世紀終わりに衰退したのち、結晶塑性の原子レベル研究がようやく世界的に盛んになりつつあり、今後の発展が大いに期待される。しかし、これらの研究は世界で散発的に行われていて、結晶塑性の包括的な研究は殆ど見られず、定量的理解への道はまだ遠い。この分野の計画的かつ系統的研究の推進が強く望まれる。

### 謝 辞

本国際シンポジウムの開催にあたり、開催費用の援助を頂いた公益財団法人天田財団に対し深甚なる感謝の意を表す。

### 参考文献

- 1) G. I. Taylor: *Proc. Roy. Soc.*, **A145** (1934), 362; E. Orowan: *Z. Phys.*, **89** (1934), 634; M. Polanyi: *Z. Phys.*, **89** (1934), 660.
- 2) 阿部英司: 未発表, **54** (2015), 50.
- 3) 表面科学, 特集: 収差補正による原子分解能電子顕微鏡の最前線 **34(5)** (2013).
- 4) 竹内伸: 結晶塑性論, (2013), 内田老鶴圃.



図4. シンポジウム参加者