

MedeA MT (Mechanical and Thermal properties) モジュールは原子スケールのシミュレーション技術を基に機械物性を推算することができます。本モジュールで推算可能な物性にビッカース硬さが新たに加わりました。本稿では、第一原理計算を基にビッカース硬さを推算する機能とその適用事例を紹介します。さらなる展開として、インフォマティクス機能やそのための支援機能もあわせて紹介します。

■ ビッカース硬さ

ビッカース硬さ (Vickers hardness, HV) は、材料の硬さを表す指標の一つです。押し込み硬さ試験の一種で、図1のように試験材にダイヤモンド圧子を押し込み、試験面にできるくぼみの面積によって硬さを評価します (図1、式1)。

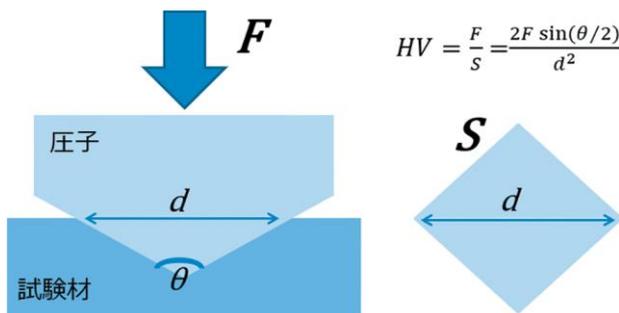


図1. ビッカース硬さ試験の模式図

$$\text{ビッカース硬さ}(HV) = \frac{\text{試験力}(F)}{\text{くぼみ面積}(S)} \quad \text{式1}$$

ビッカース硬さは、剛性率 (shear modulus, G) や体積弾性率 (bulk modulus, B) と相関があることが経験的に知られていましたが、2011年に Chenら¹⁾は塑性変形による効果を考慮して、経験式を改善し式2としました。

$$HV = 2(k^2 G)^{0.585} - 3 \quad \text{式2}$$

ここで、 $k = G/B$ (Pugh 比) です。これにより、剛性率と体積弾性率を用いることで多くの材料でビッカース硬さを精度良く推算することができるようになりました。

剛性率や体積弾性率は、いずれも第一原理計算か

ら算出することができますので、Chenらの経験式を用いることで、第一原理計算からビッカース硬さを推算することができるようになったと言えます。本推算式によるビッカース硬さを推算する機能が MedeA MT に搭載されています。

■ 計算手法

MedeA MT でビッカース硬さを計算する過程を示します。MedeA MT ではユーザーが入力として用意するのは、モデル構造 (単位格子の構造情報) のみです。あとはソフトウェアがすべての処理をバックグラウンドで行い、最終的にビッカース硬さを出力します。

バックグラウンドの処理としては、MedeA MT はまず計算対象のモデルに小さな歪みを与え第一原理計算を行い、応力変化を計算します (分子動力学計算によって応力を計算することも可能です)。さらに、格子に与えた歪みと応力との関係式3から最小自乗フィッティングによって弾性定数テンソルを求めます。

$$\sigma = C \epsilon \quad \text{式3}$$

ここで σ は応力テンソル、 C は弾性定数テンソル、 ϵ は歪みテンソルです。この手法²⁾の利点は、モデル構造が安定構造でなくても良いことです。また、第一原理計算を用いることで未知の組成・構造に対しても適用できます。弾性定数テンソルが求めれば、それを基に各種機械物性値も算出できます。MedeA MT では自動的に以下のような物性値を出力します。

- ・ 弾性定数テンソル、コンプライアンステンソル
- ・ 剛性率、体積弾性率、ヤング率

- ・ Grüneisen定数、Poisson比、Pugh比
- ・ ビッカース硬さ
- ・ 音速、デバイ温度
- ・ 熱力学関数(デバイ近似による比熱、線膨張係数、エントロピー、エンタルピー、自由エネルギー)

■ 計算結果

上記の機能によって、各種材料に対するビッカース硬さを計算した結果を図2 に示します。計算時間は、16コアの計算機1台で半日程度です。図2では実験と同様の傾向が第一原理計算でも得られていることがわかります。また、本稿では詳細は割愛しますが、ビッカース硬さのみでなく、ヤング率等の各種機械物性も同様に実験との良い一致がみられています。

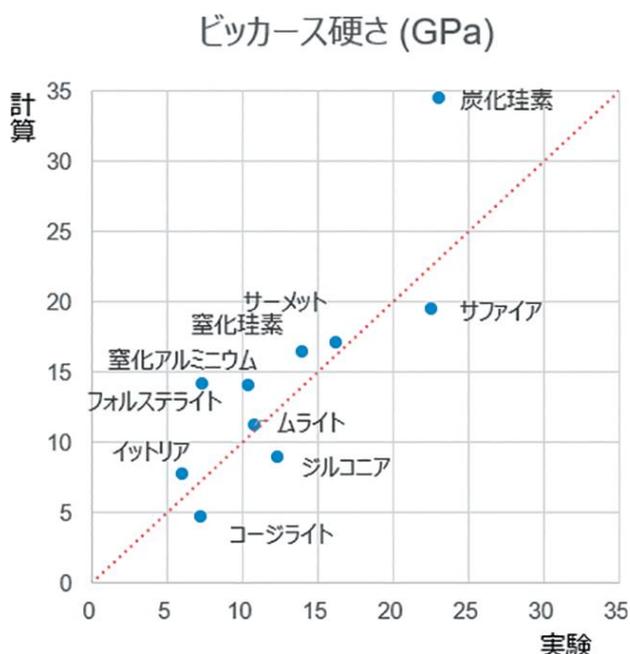


図2. ビッカース硬さの計算結果: MedeA MTによる計算値と実験値の比較

今回評価した材料は、図3に示す10種のファインセラミックスです。図中の結晶構造図は、計算で使用したモデル構造です。簡単なモデル構造(単位格子)からビッカース硬さを実用的な精度で推算できたことがわかります。さらに不純物による影響や組成の違いによる変化もモデリングして推算することができます。未知の構造や合成が難しく実測が簡単でないような構造に対しても適用可能です。

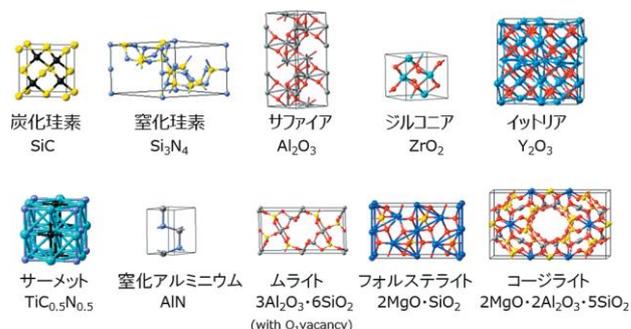


図3. 評価に用いたファインセラミックスのモデル構造

■ インフォマティクスへの展開

このようにMedeA MT はさまざまな材料に対して、さまざまな物性値を算出することができます。多様な物性値が得られると、物性値間の相関を解析することに活用できます。いわゆるマテリアルズインフォマティクスへの活用が期待できます。

MedeAには構造物性相関を行うためのモジュールMedeA QT(QSPR Toolbox)も用意されています。このモジュールでは、回帰分析(Partial Least Squares Regression)によって物性値間の相関を簡単に解析できます。例えば今回の適用事例ですと、ビッカース硬さを目的変数、各種構造情報や物性値を説明変数として、回帰分析を行うことができます。これにより、ビッカース硬さに対してどのような物性が強い相関を示すのか(あるいは相関が弱いのか)を解析できます(図4)。

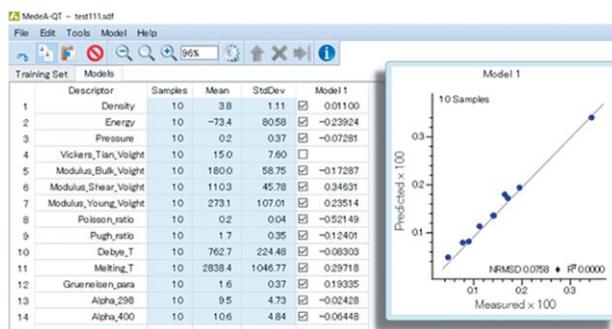


図4. MedeA QTによる回帰分析

■ ハイスループット機能

インフォマティクスのように大量のデータ(構造や物性値)を取り扱うには、煩雑な処理(大量の入力生成や計算投入、結果のとりまとめ)が必要になってきますが、MedeAはこれらの処理をハイスループット機能により自動化できます。実際にユーザーが行うのは入力(計算対象となるモデル構造)を用意するのみですが、既知の構造であれば結晶構造データベースから一括して読み込むこともできます。

ハイスループット機能の中心となるのは、Structure list 機能です(図5)。Structure list は、構造情報・計算条件・計算結果を一つのファイルとして扱うためのMedeA独自のファイル形式です。これにより、計算投入や結果の解析が一つのファイルの処理として一括して扱えるようになります。また、一つのファイルに必要なデータがすべて収納されているので、Python等の外部ツールで活用しやすくなります。



図5. Structure list機能: 一つのファイルで構造情報や物性値を一括して扱える

■ まとめ

本稿では、ビッカース硬さに着目して評価事例を紹介しました。MedeA MTでは第一原理計算を基にさまざまな材料に対して、精度良くビッカース硬さ(および各種機械物性)を推算できます。さらにインフォーマティクスによる解析も可能です。本事例では、以下のようなMedeAの多様な機能が活用されています。

- ・ モデル構造を用意するうえで有用な結晶構造データベース機能(InfoMaticA)
- ・ 複数の構造データと計算結果を一つのファイルとして扱うための機能(Structure list)
- ・ 複数の構造と計算を一括して処理するためのハイスループット機能(HighThroughput Launchpad)
- ・ ソルバーとなる第一原理計算機能(MedeA VASP)
- ・ 第一原理計算から弾性定数やビッカース硬さを推算するための物性推算機能(MedeA MT)
- ・ 物性を回帰分析する機能(MedeA-QT)

MedeA はこれらの機能を一つのプラットフォーム内で使用することのできる強力な統合支援環境です。

- 1) Chen, X.-Q. et al. *Intermetallics* **2011**, 19, 1275.
- 2) Le Page, Y. and Saxe, P. *Phys. Rev.* **2002**, B 65, 104104.