

戸田裕之

九州大学大学院工学研究院
教授

ナノ～マクロを繋ぐトモグラフィー：界面の半自発的剥離

§ 1. 研究成果の概要

本研究では、粒子界面の剥離による延性破壊という古典的な問題を最先端のシンクロトロン放射光イメージング技術と原子レベルの観察結果を忠実に反映したシミュレーションとを組み合わせ、て解明する。

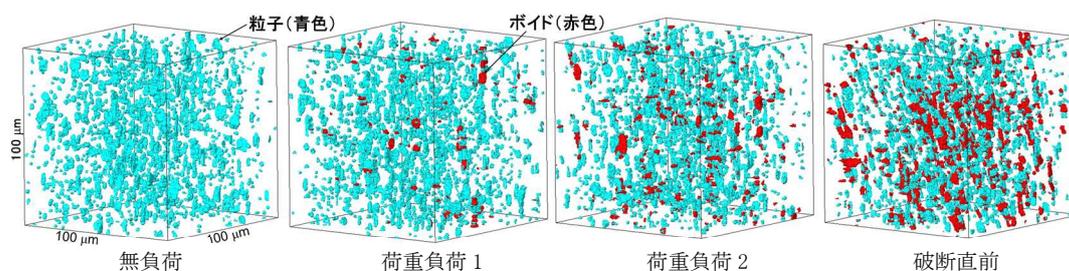


図1 シンクロトロン放射光トモグラフィーによるアルミニウム破壊の連続観察

前者に関し、本年度は、図1に示す様に多数のアルミニウム材料の材料試験やその4Dイメージングを予備実験として行った。1 mm³という微小な体積当たりで**数十万**個ものボイド(微小な穴)が発生し、それらが成長合体して材料の破壊が生じるという、材料のマイクロレベルの挙動が可視化された。来年度以降は、個々のボイドの挙動を追跡して評価する高度な解析に挑戦する。

一方、原子レベルシミュレーションに関し、いわゆる非整合界面の原子レベル直接観察は、世界でも類を見ない試みである。現在、様々なアプローチでこのための試料作製に挑戦している。図2は、直径50 nmまで細くしたTEM(透過型電子顕微鏡)観察用試料である。アルミニウム/粒子界面が明瞭に認められる。これを20 nmまで細くしてダメージを除去することで、これまで誰も見たことのない界面構造の観察が可能になる。

界面のシミュレーションは、図3に示すモデルを用い、先行して実施している。アルミニウムとMgZn₂粒子が含まれるユニットセルモデルを作り、非整合界面における水素捕捉エネルギーを恐らく世界で初めて計算した。界面の乱れた構造を反映し、中には顕著な水素捕捉能をもつサイトも見つかった。今後、これを詳細に解析して界面の物理を極めたい。

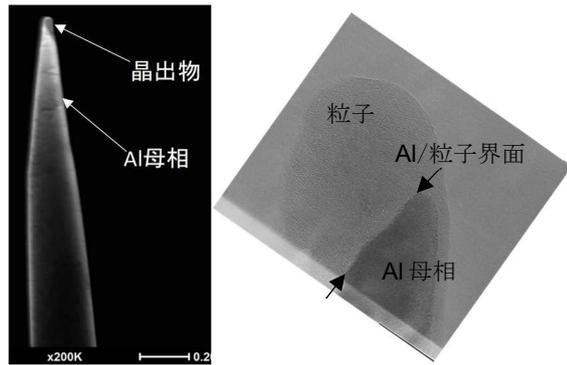


図2 φ 50 nm 針状観察試料。右は先端部拡大

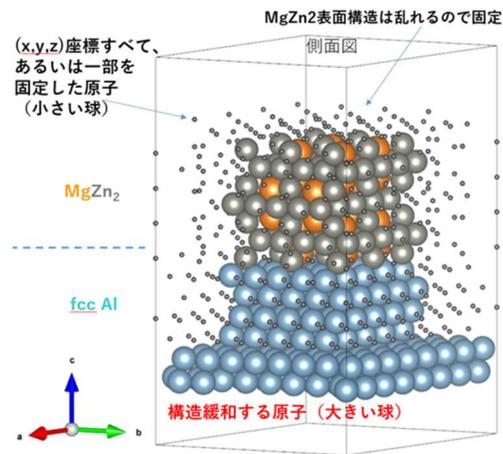


図3 アルミニウム/粒子界面計算モデル

§ 2. 研究実施体制

(1)「戸田」グループ

- ① 研究代表者:戸田 裕之 (九州大学大学院工学研究院、教授)
- ② 研究項目
 - ・析出物界面解析(界面損傷のマイクロ・ナノモグラフィー／イメージベース解析)
 - ・晶出物界面解析(界面損傷のマイクロ・ナノモグラフィー／イメージベース解析)
 - ・介在物界面解析
 - ・特異界面解析・制御(界面損傷のマイクロ・ナノモグラフィー／イメージベース解析)

(2)「松田」グループ

- ① 主たる共同研究者:松田 健二 (富山大学大学院理工学研究部、教授)
- ② 研究項目
 - ・析出物界面解析(高分解能TEMによるナノ構造観察)
 - ・晶出物界面解析(高分解能TEMによるナノ構造観察)
 - ・介在物界面解析(高分解能TEMによるナノ構造観察)
 - ・特異界面解析・制御(高分解能TEMによるナノ損傷・構造観察)

(3)「山口」グループ

- ① 主たる共同研究者:山口 正剛 (日本原子力研究開発機構システム計算科学センター、研究主幹)
- ② 研究項目
 - ・析出物界面解析(イメージベースモデル作成と第一原理計算)
 - ・晶出物界面解析(イメージベースモデル作成と第一原理計算)
 - ・介在物界面解析(イメージベースモデル作成と第一原理計算)
 - ・特異界面解析・制御(第一原理計算による特異界面解析)