

革新的力学機能材料の創出に向けたナノスケール動的挙動と力学特性機
構の解明

2019 年度採択研究代表者

2020 年度 年次報告書

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

これまで、アルミニウムの粗大粒子が半自発的剥離という特異挙動を呈し金属強度を損なうという仮説を実験的に追求してきた。アルミニウムのほぼ全ての実用合金に対し、広範な試験条件で、そして実用上極端な条件も含め試験を繰り返した。その結果、Al-Mg 系と Al-Cu 系合金で実用的な水素濃度範囲において、高水素化が最大 20%の力学特性低下をもたらすことがわかった。これを改善すれば 20%の特性改善が可能になる。20%という値は実用上決して小さな数字ではないが、CREST プロジェクトのインパクトとしては物足りない。そこで、本年度は研究戦略を見直し、思い切った研究内容のスクラップアンドビルドにより、粗大粒子の正の効果と負の効果という切り口に再編成した。前者は、粗大粒子による水素脆化防止という視点で、後者はこれまで訴求してきた半自発的剥離である。いずれも、ナノ粒子中心のこの分野の学術では、新しい切り口である。

正の効果に関し、特定の化学組成を持つ粒子内部は、最近見つけた Al₇Cu₂Fe 以上に水素を強くトラップし、アルミニウムの水素脆化を強力に防止できることを突き止めた。領域会議では、領域アドバイザーから粗大粒子自体の水素脆化の可能性が指摘されたが、粒子損傷解析により、粒子自体の水素脆化は生じないと確認された。この他、さらに次の有力な正の効果の候補(T 相)も見出すことができた。一方、負の効果に関しては、Mg₂Si 粒子/母相の非整合界面は、これまで知られたアルミニウムのどのトラップサイトよりも強く水素をトラップすることを見出した。これは、実験的に未だ見つかっていない半自発的剥離が生じ得ることを示唆する。今後、界面剥離シミュレーションを通じ、半自発的剥離が生じる条件が明らかになると期待される。また、粒子/母相の非整合界面は、ナノレベルでは両側の結晶格子が低次の面指数同士で対応するという特徴も明らかになった。

§ 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
 - ・粒子界面解析(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)
 - ・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)
 - ・粗大粒子の水素トラップ解析(マイクロ・ナノモグラフィー/イメージベースモデル作成と第一原理計算)

(2)「松田」グループ

- ① 研究代表者:松田 健二 (富山大学大学院理工学研究部、教授)
- ② 研究項目
 - ・粗大粒子界面解析(高分解能TEM/電子線トモグラフィーによるナノ構造観察)
 - ・粗大粒子内部解析(高分解能TEMによるナノ構造観察)

(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
 - ・粗大粒子界面解析(イメージベースモデル作成と第一原理計算)
 - ・粗大粒子半自発的剥離解析(イメージベースモデル作成と第一原理計算)
 - ・粒子内部への水素拡散解析(イメージベースモデル作成と拡散シミュレーション)

【代表的な原著論文情報】

- 1) M. Yamaguchi, T. Tsuru, K. Ebihara, M. Itakura, M. Kenji, K. Shimizu, and H. Toda, Hydrogen Trapping in Mg_2Si and Al_7FeCu_2 Intermetallic Compounds in Aluminum Alloy: First-Principles Calculations, *Materials Transactions*, 61(2020)1907-1911.
- 2) M. Yamaguchi, M. Itakura, T. Tsuru, K. Ebihara, Hydrogen-trapping energy in screw and edge dislocations in aluminum: First-principles calculations, *Materials Transactions* 62(2021)582-589.
- 3) T. Tsuru, K. Shimizu, M. Yamaguchi, M. Itakura, K. Ebihara, A. Bendo, K. Matsuda, H. Toda, Hydrogen-accelerated spontaneous microcracking in high-strength aluminium alloys, *Sci. Rep.* 10 (2020) 1998-8.
- 4) H. Su, H. Toda, K. Shimizu, K. Uesugi, A. Takeuchi, Y. Watanabe, Assessment of hydrogen embrittlement via image-based techniques in Al-Zn-Mg-Cu aluminum alloys, *Acta Mater.* 176 (2019) 96-108.