

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

| |
|-----------------|
| 2021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

これまで困難だった非整合界面の半自発的剥離の第一原理計算を実現し、非整合界面の初期界面凝集エネルギーは整合界面等と比べて高く、また水素濃化による界面凝集エネルギー低下も緩やかなため、非整合界面の半自発的剥離は生じ難い事が明らかになった。これは、非整合界面の半自発的剥離によるアルミニウムの力学特性低下は生じにくいという放射光実験の結果と整合する。

2020 年度に特許申請した $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ に加え、より強力に水素脆化を防止できる他の粗大粒子を放射光実験と第一原理計算の両面から見出すとともに、それら粒子の 1/100 以下と非常に小さなナノ析出粒子がアルミニウムの強化と水素脆化防止という 2 つの機能を併せ持つことも明らかにした。粗大粒子による水素脆化防止法に関しては、粒子自体の水素脆化の有無、粒子内部への水素拡散速度、実用合金での効果の程度等の検証を行い、その実用水素脆化防止技術としての有効性を確認した。

さらに、回折コントラストモグラフィ法により 3D 可視化したアルミニウム多結晶組織と、X 線 CT 法で 3D 可視化した亀裂やマイクロ組織とを忠実に計算モデルに取り入れたマルチモーダル・3D イメージベースシミュレーションを実施した。また、大規模 3D データの統計的粗視化解析も併せて実施した。これらにより、ナノ析出粒子界面の局所水素濃度とマクロな亀裂進展挙動とを直接結び付けることに成功した。その他、ミュオン計測と第一原理計算とを連携させたアルミニウム内部の水素挙動の解析を実施した。

§ 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) Y. Wang, H. Toda, Y. Xu, K. Shimizu, K. Hirayama, H. Fujihara, A. Takeuchi, M. Uesugi, “In-situ 3D observation of hydrogen-assisted particle damage behavior in 7075 Al alloy by synchrotron X-ray tomography”, *Acta Mater.*, 227(2022)117658.
- 2) K. Hirayama, H. Toda, T. Suzuki, M. Uesugi, A. Takeuchi, W. Ludwig, “Crystallographic Analysis of Hydrogen Embrittlement Behavior in Aluminum Alloy Using Diffraction Contrast Tomography”, *Mater. Trans.* 63(2022)586-591.