

2023 年度年次報告書
力学機能のナノエンジニアリング
2021 年度採択研究代表者

譚田 真人

物質・材料研究機構 構造材料研究拠点
主任研究員

多自由度界面での変形伝播制御に基づく強化指針創出

研究成果の概要

金属材料の界面近傍におけるナノスケールでの変形・破壊現象は界面構造の影響を受け、その制御は力学特性改善の一つのアプローチ手法となる。界面近傍で生じる塑性変形現象の一つとして界面からの転位生成があり、これは結晶構造・偏析元素の影響を受ける。界面近傍での変形・破壊現象の理解を目的として、原子論解析に基づき BCC 金属と FCC 金属の自由表面からの転位生成のエネルギー障壁と活性化体積を、転位のすべり面に作用するせん断応力の関数として獲得した。BCC 金属と FCC 金属では転位生成の活性化エネルギーの大きさが異なり、さらに転位生成過程での欠陥構造の相違に関する知見を獲得した。これらの情報は界面からの転位生成が重要となる変形・破壊現象を数理モデル化する際の基礎となる。

さらには、FCC 多元系合金を対象として、粒界からの転位生成現象に対する合金効果の影響を原子論解析の枠組みを用いて評価した。ここではエネルギー論的解析から、合金元素が積層欠陥エネルギーと原子スケールでの格子ひずみ、さらには転位生成の活性化エネルギーと活性化体積に及ぼす影響を定性的に獲得した。

また、FCC 多元系合金を対象として粒界で割れる際のエネルギーと粒界からの転位生成応力の関係を、界面特性および材料物性の観点から定性的に評価した。割れのエネルギーと転位生成応力に影響を及ぼす材料物性を相関解析から抽出し、粒界での割れのエネルギーと転位生成を合金化によって制御するための知見を獲得した。

また、第一原理計算による粒界エネルギー・粒界での割れのエネルギーに対する複数偏析元素の影響評価、ランダム粒界構造を対象にナノスケールの原子配置とエネルギー分布の特徴を抽出する枠組み構築を実施し、金属材料粒界に関する原子論的知見を獲得した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Wakeda, M. Ohmura, T. Atomistic evaluation of the dislocation transmission across tilt and twist low-angle grain boundaries in body-centered cubic iron, *Computational Materials Science*, **228**, 112335 (2023).