

都留 智仁

日本原子力研究開発機構原子力基礎工学研究センター
研究主幹
／京都大学構造材料元素戦略研究拠点
拠点准教授

転位芯の局所自由度を有する力学理論に基づく新奇機能の創出

§ 1. 研究成果の概要

結晶系の金属材料の変形は、転位と呼ばれる格子欠陥の運動によって生じる。結晶構造による格子の違いによる転位構造は大きく異なり、その結果、変形挙動も結晶構造によって様々な特徴をもつ。とりわけ体心立方格子(BCC)をもつ合金の変形は温度や濃度に依存して複雑に変化することが知られている。本年度は、このような BCC 合金を対象として、転位モデルの第一原理計算と固溶強化機構に基づく力学モデルを組み合わせて合金元素の影響を検討した。BCC 金属の転位運動はキンク機構に基づく熱活性化過程であることに着目し、転位と合金元素の相互作用を第一原理計算によって計算し、合金元素の影響を力学モデルに組み込むことで温度と濃度および合金元素の種類に依存した降伏応力(CRSS)などの力学特性を計算から非経験的に評価する方法を構築した。

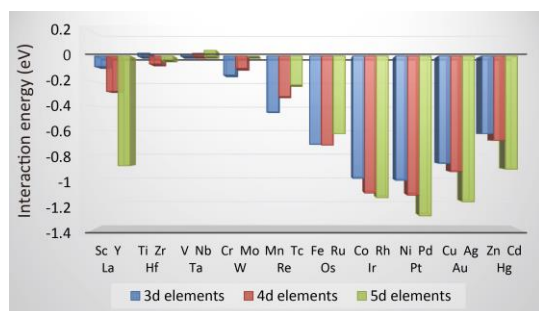


図 1. 転位と合金元素の相互作用

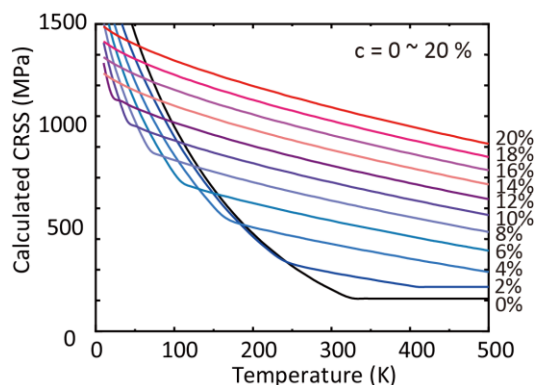


図 2. 温度と濃度に依存した CRSS の変化