

力学機能のナノエンジニアリング
2019年度採択研究者

2020年度 年次報告書

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
／京都大学 構造材料元素戦略研究拠点
研究主幹／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

体心立方格子 (BCC) をもつ合金の変形挙動や力学特性は、温度や合金元素の濃度に依存して複雑に変化し、古典的な強化理論で説明できない特異な性質をもつ。本研究では、有限温度のもとで応力が負荷された際のらせん転位の運動を、ナノスケールの力学モデルに基づいて記述するための枠組みを構築することを目的とした。

昨年度報告した合金元素の濃度がマクロな材料特性に与える影響を評価するための力学モデルでは、キンク過程の活性化エネルギー ΔH_{kn} 、 ΔH_{km} を実験値で求めた純金属における値を用いており、力学モデルの定式化で現れる幾つかの物性値には実験値や仮定を必要とする。本年度は、キンク過程の活性化エネルギーを実験によらず、第一原理計算の精度で直接評価するためのスキームについて検討した。このようなキンク機構を再現するため、線張力モデルを用いて転位運動を記述した。Peierls ポテンシャルとばね定数は第一原理計算から直接計算することができ、大規模な原子モデルを用いることなく、第一原理計算の物性に基づき転位線全体のエネルギーを表現できる。さらに、遷移状態解析として用いられている Nudged elastic band (NEB) 法を応用し、対象とする自由度を原子の位置でなく、線張力モデルの自由度に適用することで、線張力モデルに基づく目的関数を記述した。この方法を用いて、線張力モデルに基づく目的関数を最適化することで、直線転位が一周分移動する間の転位運動の最小エネルギー経路を評価した。その結果、キンク形成の活性化エネルギー ΔH_{kn} は 2.4 eV、キンク移動の活性化エネルギー ΔH_{km} は無視できるほど小さいことがわかった。以上のように、線張力モデルと遷移状態解析を組み合わせた手法を構築し、第一原理計算によって得られた物性を用いてキンク機構の活性化エネルギーを評価することを可能にした。

【代表的な原著論文情報】

- (1) 都留智仁, 「原子シミュレーションに基づく力学特性評価と材料設計」, あたりあ, 60-1 (2021), 25-29.
- (2) 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.