

力学機能のナノエンジニアリング
2019年度採択研究者

2021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

構造材料として用いられる合金系の変形挙動や力学特性は、転位密度や粒径、第二相といった材料内部の組織によって大きく異なるが、マトリクス自体の変形の特徴は、結晶構造によって特徴づけられる。例えば、実用合金は BCC 構造や、面心立方格子 (FCC)、六方最密格子 (HCP) などの様々な結晶構造を取るが、FCC 合金が古典的な強化機構に比較的よく従うのに対して、BCC 合金や HCP 合金は変形の温度依存性が強く、特異な挙動を示すことが知られている。

本年度は、BCC 合金と HCP 合金の転位構造と運動の違いを検討した。まず、純 BCC 金属と HCP 金属の転位構造解析から、BCC 金属の転位芯構造はマトリクス元素によってほとんど違いがなく、コンパクトな構造をとる一方、HCP 金属の転位は、Mg では底面、Ti では錐面、Zr では柱面に拡張した構造をとるように、元素によって全く異なる構造をとることが分かった。Ti に着目して、転位構造と運動のエネルギーランドスケープを評価した結果、転位のすべり運動の障壁は柱面上を運動する際が最も低い一方、柱面から底面への遷移に必要なエネルギー障壁は非常に大きく、純 Ti では底面すべりはほとんど生じないことを示した。

次に、合金元素の転位構造に対する影響に関して検討した。昨年度までの研究から、BCC 金属における合金元素は、転位芯構造を変化させないが、キンク形成の活性化エンタルピーを変化させることで、合金元素による強化・軟化機構を生じることが明らかになっていた。これに対して、HCP 金属では、合金元素が転位芯構造そのものを大きく変化させることで、すべりの異方性や温度の依存性を生じる要因となることがわかった。このように、合金元素が転位構造に及ぼす影響は対象によって異なるため、包括的にモデル化することは困難であるが、結晶構造に基づいて整理することで体系的に議論できると考えられる。

【代表的な原著論文情報】

- (1) T. Tsuru, M. Itakura, M. Yamaguchi, C. Watanabe, H. Miura, “Dislocation core structure and motion in pure titanium and titanium alloys: A first-principles study”, *Comput. Mater. Sci.* 203 (2022) 111081.
- (2) T. Tsuru, I. Lobzenko, D. Wei, “Synergetic effect of Si addition on mechanical properties in face-centered-cubic high entropy alloys: A first-principles study”, *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* 30 (2022), 024003. (Emerging Leaders 2021 collection)
- (3) I. Tanaka, N. Tsuji, H. Inui, “The Plaston Concept: Plastic Deformation in Structural Materials”, Springer, 1st ed., 2022. (T. Tsuru, Part II 4, “Descriptions of Dislocation via First Principles Calculations”)