

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

栃木 栄太

東京大学 生産技術研究所
准教授

変形・破壊現象の原子スケール解析

§ 1. 研究成果の概要

結晶性材料の変形・破壊現象は、荷重負荷に伴い結晶内部に生じる転位や双晶、亀裂といった格子欠陥の形成過程や動的挙動に密接に関連している。そこで本研究では、微小電気機械システム(MEMS)技術により作製した小型荷重負荷デバイスと原子分解能透過型電子顕微鏡法(TEM)を組み合わせた、その場 TEM 荷重負荷試験法を中心とした手法により、結晶性材料中の格子欠陥の力学的挙動を原子レベルにて観察し、変形・破壊現象の素過程を探究することを目的としている。

本年度は次に述べる3項目の研究を実施した。

(1)亀裂開口変位の原子分解能計測に基づいた破壊靱性値評価法の検討:TEM 内にて SrTiO₃ 単結晶の[110]方向に荷重を負荷することにより、試料端より亀裂の形成過程を原子レベルで観察した。荷重負荷時における亀裂先端の位置からの距離と開口変位を計測し、線形弾性論に基づいて破壊靱性値を見積もった。この破壊靱性値の実験値は、破面の原子構造から第一原理計算によりへき開エネルギーを算出し破壊靱性値へと換算した値とよく一致したことから、本破壊靱性値の評価方法は妥当なものであると考察された。

(2)刃状転位の上昇運動機構の解析:TEM 内にて SrTiO₃ 単結晶の[100]方向に荷重を負荷することにより刃状転位を導入した。その後、荷重の負荷/除荷を繰り返し転位の挙動を原子レベルで解析した。実験結果、引張荷重を負荷することにより転位は半原子面を伸ばすようすべり面と垂直方向へ、除荷すると反対方向に運動する様子が観察された。これは刃状転位の上昇運動に対応しており、上昇運動の開始は転位コア直下の格子間隔の拡張幅に相関していることが示唆された。

(3)fcc 結晶における不動転位の力学的応答の解析:fcc 単結晶中に形成された 1/3[110]不動転位のコア原子構造を観察しながら荷重を負荷したところ、2本の部分転位へと分解する様子が観察された。このことは、1/3[110]不動転位は力学的負荷に対し必ずしも不動ではないことを示しており、fcc 結晶の強度特性を検討する上で重要な知見であると言える。