

力学機能のナノエンジニアリング
2021 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書

譯田 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

§ 1. 研究成果の概要

原子シミュレーション手法を用いて体心立方(BCC)鉄粒界での変形伝播の系統的解析、および面心立方(FCC)金属粒界での伝播解析、そして原子構造モデルと統計的解析手法による粒界構造評価を実施した。BCC 鉄の多結晶モデルを作成し、大角粒界を対象に粒界構造を多様に変化させ、かつ粒界と反応する転位成分も変えることで、ナノメートルスケールで生じる粒界での変形伝播の有無と必要な応力条件の系統的な評価を行った。その結果、伝播の有無と必要な応力、粒界構造、反応転位成分などに関する知見を得た。BCC 鉄の大角粒界における転位伝播の有無は粒界構造に依存しており、さらに転位成分やひずみ蓄積の影響を受けていた。また BCC 金属粒界の小角粒界における変形伝播についても、粒界と相互作用する転位の物性、粒界構造などに基づき、伝播機構と伝播に必要な応力を説明する力学モデルを提案した。さらに FCC 金属粒界での変形伝播についても粒界構造を変えて転位との相互作用の基礎的解析を実施した。本原子論解析において BCC 金属と FCC 金属では伝播時の転位挙動に違いが見られており、粒界と相互作用する転位の特性、面欠陥エネルギーなどが伝播挙動に影響することを示唆する知見を得た。さらには FCC 金属粒界での変形伝播と材料の構成元素との相関解析に向けて、FCC 金属について合金系での面欠陥エネルギーの評価を実施した。粒界構造と粒界特性の相関についても、傾角粒界やねじり粒界、ランダム粒界の原子構造モデルを複数作成し、粒界特性と粒界構造に関する評価を行った。これは各粒界についてナノメートルスケールでの構造を特徴づける量と粒界特性の関係を評価する枠組みにつながるものである。