

力学機能のナノエンジニアリング  
2021 年度採択研究代表者

2022 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

## 研究成果の概要

金属材料の界面近傍での変形挙動は巨視的な力学特性に影響を与える。転位の粒界伝播に関する解析を実施するとともに、原子スケールの計算機解析に基づき界面近傍での変形挙動を扱う数理モデルの検討と支配因子の評価を行った。界面で自由表面を形成して割れる変形モードと、界面から転位が生成する変形モードについて、これを同時にあつかう基礎的な数理モデルを作成した。本モデルは、変形時の温度やひずみ速度の他に、界面で静的な割れが生じるのに必要な応力と、熱活性化現象である界面からの転位生成のエネルギー障壁を主な影響因子としている。本モデルは、界面構造や材料種がこれらの応力とエネルギー障壁を介して界面近傍で生じる変形挙動に影響を及ぼすとの考え方を基にしている。数理モデルの主要な影響因子を原子論から評価することを目的として次の解析を実施した。FCC 構造をもつ金属を対象に、変形現象の最小エネルギー経路を獲得する原子論的手法を用いて界面から転位が生成する現象のエネルギー障壁を評価した。また負荷応力(負荷ひずみ)を変化させてエネルギー障壁を計算することで、転位生成現象の活性化体積等を求める解析を実施した。さらには積層欠陥エネルギーを低下させる固溶元素を材料中に一定量だけランダムに置換し、この固溶元素が転位生成のエネルギー障壁に及ぼす影響を原子論から評価した。界面で割れが生じる変形モードに対しても、電子論に基づく第一原理計算から偏析元素が同時に存在する場合の影響を評価した。界面での変形現象を扱う数理モデル、転位生成と割れ変形に関する電子論・原子論的評価は、金属材料の界面近傍で生じる変形現象に与える界面特性の影響を、ナノスケールから明らかにするうえで有効となる。