

原子・電子論的研究に基づく金属材料の力学特性に及ぼす欠陥組織と合金化の影響評価

P34

Mechanical properties based on defect structures and alloying in metals:
Atomistic and electronic structure calculations

都留智仁 tsuru.tomohito@jaea.go.jp

(国)日本原子力研究開発機構

1. 緒言

強さ(強度)と伸び(延性)・粘り強さ(靱性)は構造材料において最も重要な性質ある。強度と延性・靱性はトレードオフの関係にあり両立することは困難であるが、これらの特性の機能向上は、構造材料における普遍的な課題として今日まで多くの研究がなされてきた。これまで、加工による

組織制御と合金化による機能向上が広く行われてきたが、その多くが経験的な知見に基づくものである。加工によって欠陥組織と機械特性が変化するが、力学応答の基礎となる内部の欠陥の動的挙動を直接捉えることは困難である。また、合金化による物性への影響として、熱力学的特性に関しては優れた方法が開発されてきた一方、力学特性への影響を評価するための体系的な方法は確立されていない。構造材料の戦略的な機能向上のためには、このような材料の変形機構を解明し機械特性を正しく評価することが不可欠である。本研究では、組織制御(I)と合金化(II)に基づく機能構造のため、スーパーコンピュータを活用した大規模原子解析によって欠陥挙動を直接解析する手法を構築するとともに、転位と合金元素の相互作用に基づく電子状態解析から材料特性を予測する一連のスキームを開発した。

2. 解析結果

(I) 組織制御に基づく力学特性

材料内部の構造を再現するために、多結晶モデルと同時に、内部に欠陥として転位源や粒界を有する現実の材料を模擬した原子モデルを構築し(図 a)、数億規模の原子モデルを解析する独自の並列原子解析手法を構築した。これにより変形を加えた際の転位や粒界の直接解析が可能になり、系の力学応答との関係から欠陥のダイナミクスに基づく機械特性を評価した。この方法を超微細粒材料に適用し、粒内転位の活動に必要な力が通常の材料に比べて大きくなるため強度が増大すること、引張・圧縮異方性という微細粒材料特有の特性が、転位構造の基礎となる積層欠陥エネルギーに対する引張・圧縮異方性によることを明らかにした。

(II) 合金化による力学特性への影響

第一原理計算で評価が可能なバルク特性と転位論を基礎とした理論的な枠組みを組み合わせ、転位構造や合金

元素の影響を評価する手法を検討した。まず、合金元素のすべりの活性化への影響を評価するため、合金元素が底面と柱面に対する積層欠陥エネルギーに与える影響を評価し、離散変分 Peierls モデルを六方晶に応用する枠組みを構築した。また、転位芯構造の原子シミュレーションのため、転位双極子の拘束条件下で弾性場をフーリエ空間上で解くことにより、周期条件を満たす原子モデルを構築した。結果の一例として、これらの方法を Mg 合金における元素影響について応用した。Mg 中の合金元素として、Al と Y が添加された際の転位芯構造を示す(図 b)。合金元素の周囲では Al と Y の違いによって転位構造が大きく異なることが確認される。電子状態解析によって、Mg と Y の強い相互作用により底面に拡張した転位が収縮し、非底面すべりを活性化することでマクロな力学特性として、延性が改善されることを発見した。このように転位論に基づく力学理論と電子構造計算を組み合わせ、合金系の力学特性を評価するスキームを構築することで、合金元素の役割を計算科学によって予測することが可能になった。

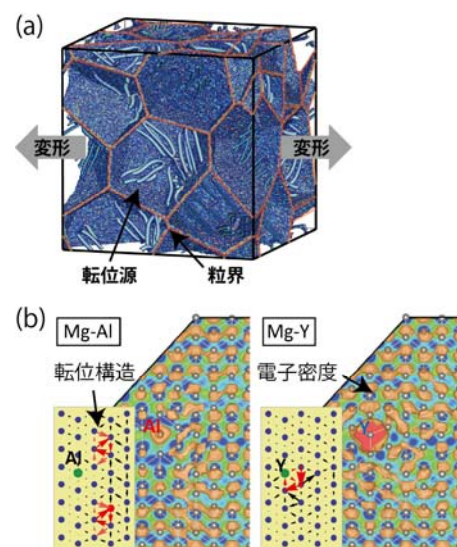


図 欠陥構造に基づく原子・電子論的研究 (a) 大規模多結晶モデルと(b)転位と合金元素の相互作用

【参考文献】

- [1] T. Tsuru, Phys. Rev. Mater. 1 (2017), 033604.
[2] T. Tsuru and D. C. Chrzan, Sci. Rep. 5 (2015), 8793.