

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： ゆらぎ誘起原子シャッフリングの格子動力学と変形挙動との相関

2. 個人研究者名

多根 正和（大阪公立大学大学院工学研究科 教授）

3. 事後評価結果

統計的ゆらぎによって合金中の局所的な組成は位置によって異なっている。このような空間的な組成ゆらぎによって生じる安定化元素の少ない領域に原子シャッフリングが生じ、それを起点とした相変態が進行する場合がある。本研究では、Ti 合金のオメガ変態を対象として、動的な原子シャッフリングが力学特性に及ぼす影響や、それに起因する相転移プロセスを明らかにすることを目的としている。さらに、弾塑性変形とその相転移の関係性を明らかにして、力学モデルを構築する。

内部摩擦の温度依存性から、動的な原子シャッフリングの活性化エネルギーはガウス分布に従ってブロードに分布していることを明らかにした。そして、これらの空間的ゆらぎに起因する原子シャッフリングや相変態のメカニズム・メカニクスを解明して力学モデルとすることに成功した。この成果を高く評価する。また、添加元素による合金組成の空間ゆらぎに関する熱力学解析より、これらの構成元素依存性が原子間相互作用に起因することも明らかにした。

上記の動的原子シャッフリングが弾性変形特性に強く影響するメカニクスを解明したことも、高く評価する。

さらに、塑性変形が動的な原子シャッフリングによるオメガ変態を促進することを示すとともに、シャッフリングの低活性化エネルギー領域は双晶変形が生じやすいことから、ゆらぎに起因する双晶変形の力学モデルを導出した。

今後の展開と期待

本研究によって得られた空間ゆらぎに関する微視的メカニズム・メカニクスは、今後の材料力学の発展方向のひとつである統計力学的視点に基づく考え方の基盤形成に寄与するものである。原子レベルの視点からの直接的な解析への深化など、学術的に多くの派生が大いに期待できる。また、Ti 合金以外の材料における空間的なゆらぎに起因する強度等の特性・機能に関するメカニクスへの発展が望まれる。ゆらぎと微視組織・微視構造との関係など、金属材料に限らない視点もある。材料力学への深い理解とバランスのよい実験・解析能力を有しており実行力にも優れていることから、他材料の研究者との協働による発展が強く望まれる。

また、本研究で確立したモデルに基づいて、合理的な材料設計法としての定着が必要である。そのためには、添加元素等を考慮した原子シャッフリングの制御に繋がるきめ細かい条件設定による実証実験や原子レベル解析が大切である。また、これは変態を通じた微細組織制御や変形制御への発展性も期待できることも示している。