

2023 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	宮本吾郎
研究機関名	東北大学
所属部署名	金属材料研究所
役職名	准教授
研究課題名	界面組成の高度制御法確立による構造用金属材料の力学特性向上
研究実施期間	2023 年 4 月 1 日～2024 年 3 月 31 日

研究成果の概要

これまで、 α -Fe 粒界における C, N, P 偏析を三次元アトムプローブ測定を用いた定量評価により調査してきた。本年度は、偏析挙動の本質的理解のため、創発の場の議論で得た着想を元に、侵入型元素の粒界偏析の機構解明を目指して、原子論的モデリングに取り組んだ。従来、整合性のよい対応格子粒界を対象に置換型溶質元素の粒界偏析が第一原理計算により調査されている。一方、侵入型元素の偏析を扱うための偏析サイトの同定は難しく、構造用金属材料を構成するランダム粒界への侵入型溶質偏析を扱うことのできる方法論は構築されていない。そこで、本項目は空隙を検出できるトポロジー的手法、パーシステントホモロジー (PH), を粒界に適用して、粒界構造解析と侵入型元素の偏析のモデリングを行った。

譯田真人氏 (NIMS) と連携して分子動力学法で対応格子粒界を作製し、PH 解析を行った。その結果、図1に示すように、粒界にはバルク材にはない粒界空隙ユニットが検出できることが分かった。この粒界空隙ユニットの特徴は、粒界を隙間なくかつ重複なく埋める通常の粒界構造ユニットとは異なり、空隙ユニット同士が空間的に重複する場合があることである。これは一つの粒界構造ユニット(多面体)には複数の種類の空隙が存在し得ることに対応する。粒界偏析との関係を調査したところ、PH で検出された空隙(図中 Group 1,2)は、報告されているCの優先偏析サイトと一致することから、本手法は侵入型溶質の偏析位置の検出に有効であると考えられる。本手法を活用して侵入型溶質偏析の支配因子を解明するため、榎木勝徳氏(島根大学)と連携し、種々の粒界の粒界空隙における粒界偏析エネルギーを計算し、粒界空隙ユニットの幾何学的因子との相関を調査している。

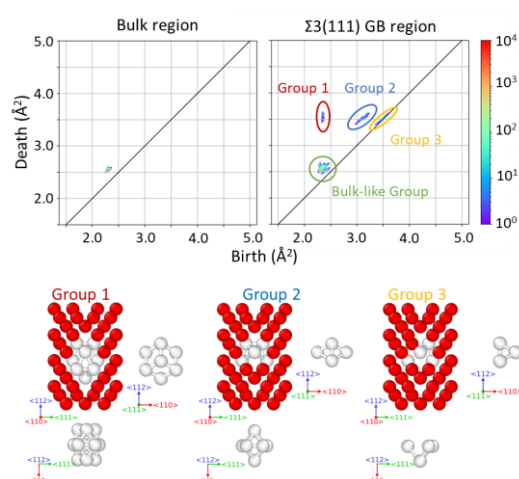


図 1 $\Sigma 3(111)$ 粒界のパーシステントホモロジーを用いた粒界空隙ユニット解析