

2023 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	都留 智仁
研究機関名	日本原子力研究開発機構
所属部署名	原子力基礎工学研究センター
役職名	研究主席
研究課題名	欠陥ダイナミクスに基づく力学機能設計と材料開発への挑戦
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

金属材料の力学機能は最も古くからある材料機能であるにもかかわらず、材料開発は今でも経験的な知見に基づいて行われている。これは、力学機能が転位などの欠陥構造を介した複雑な過程によって決定されるという特徴を持つためであり、学理に基づく設計を阻む要因となってきた。すなわち、合金系の電子状態や基礎特性が明らかであっても、強度や延性は予測することはできない。本研究では、電子状態に基づき、欠陥構造の動的挙動から力学応答を予測することが可能な元素戦略による新しい材料開発手法の開発を目指している。

金属の力学機能の本質である転位は、遠距離弾性場をもつため電子状態の計算は困難である。そこで当該年度では、周期系の転位の弾性場を数値的に解析することで電子状態計算を可能にするとともに、合金系の転位芯の平均エネルギーを評価する枠組みを構築した。そして、本手法の応用に 2 つの代表的な耐火ハイレントロピー合金 (RHEA) である、TiZrHfNbTa と VNbMoTaW 合金を対象として力学機能の本質を検討した。

HEA では多様な元素が高濃度で含まれるため結晶格子が大きくひずみ、これが強度と相関する。そこで、各原子の変位から格子ひずみを評価する指標 (MSAD) を用いて評価した結果、TiZrHfNbTa は VNbMoTaW の 3 倍程度大きく、転位運動に必要な応力を上昇させることがわかった。すなわち、TiZrHfNbTa は低い弾性係数であるにもかかわらず相対的に高い強度を持つことが明らかになった。また、二つの RHEA に対して、転位のエネルギーの分布を解析し、周期系の理論解析で求めた転位芯の平均エネルギーで規格化すると、TiZrHfNbTa の転位芯のエネルギーは著しく低いことがわかった。これは、結晶中に転位が導入されやすいことを示しており、TiZrHfNbTa の優れた延性の要因であることが明らかになった。さらに、これらの特徴は BCC 合金中の第 IV 族元素の弾性不安定性によってもたらされることを見だし、元素戦略に基づく優れた合金開発の有効な指針が得られた。