

科学研究費助成事業（基盤研究（S））公表用資料
〔平成29年度研究進捗評価用〕

平成26年度採択分
平成29年3月13日現在

形状可変材料のドメインホモ界面ダイナミクスの学理究明と
高機能化原理の確立

Quest for Fundamental Dynamics of Domain Homo Interface in
Shape Change Materials and Principles for High Performance
Materials

課題番号：26220907

細田 秀樹 (HOSODA HIDEKI)

東京工業大学・科学技術創成研究院・教授



研究の概要

医療やエネルギーに用いられる形状記憶合金や強圧電材料などの形状可変材料は形状と外場と機能が相互に可逆的に連動する。高機能化のためには外場でドメイン界面がスムーズに移動する必要がある。このドメインホモ界面の構造とダイナミクスの学理を異分野融合で追究し、摩擦を界面構造と格子軟化制御により低減できる高機能化指導原理と新材料創成を追究する。

研究分野：材料工学

キーワード：相変態、第一原理計算、界面制御、医療・エネルギー材料、多機能材料

1. 研究開始当初の背景

形状記憶合金や圧電材料は金属材料と無機材料として別個に研究されていたが、共に低温相の低結晶対称性に起因する異方性を活かした代表的な多機能材料であり、同じ指導原理で共に高機能化できると期待できる。

2. 研究の目的

応力、電場、磁場などの外場に高速可逆的に反応しドメイン変換を起こすために必要となる形状可変材料のドメインホモ界面の構造と移動ダイナミクスを金属、無機、プロセス、計算という異分野の専門家チームが協働することで材料に依らない共通学理を導く。また、それにより高機能化発現の指導原理を打ち立てる。実際に材料設計により革新的新材料を創成し、応用することを目指す。

3. 研究の方法

ドメインホモ界面の構造とそのダイナミクスを本質的に解明し、高機能化の学理を構築し、新材料創成を実現するために、以下の課題を設定する。

- (1) ドメインホモ界面幾何学
- (2) 相安定性によるホモ界面
- (3) ホモ界面の構造と解析
- (4) ホモ界面と力学・圧電・磁気特性
- (5) ホモ界面の原子・界面ダイナミクス

材料は形状記憶合金、圧電材料、磁性形状記憶合金を扱い、また、異分野チームで材料によらない共通原理を究明する。特に、実験的に材料研究を行うだけで無く、第一原理計

算も駆使し格子軟化挙動や相安定性を評価する。および単一ホモ界面易動度の評価のため、単結晶や微小材料試験機を用いる。

4. これまでの成果

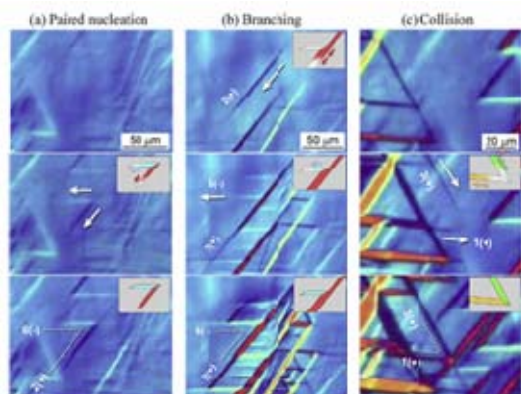
(1) 立方晶－（斜方晶、単斜晶、正方晶、菱面体晶）変態におけるホモ界面の幾何学を格子定数をパラメーターとして理論解析した。ホモ界面でのねじれの大きさと軸を評価して、数学的に可能な全ドメインホモ界面の評価を行い、ねじれの残留する界面が必ず存在することを明らかにした。また立方晶－斜方晶、立方晶－単斜晶変態において、特定のねじれが完全に消滅する格子定数比が存在することを見出した。これにより、摩擦ゼロの材料設計指針が確立できた。

(2) 相安定性について Ti-Nb、Ti-Mo 合金の α 相と β 相の相境界近傍での第一原理計算により相安定性と変態ひずみに及ぼす第三元素の影響を定量的に評価した。これにより、形状可変材料の変態ひずみの向上のための合金設計を可能にし、相定性と変態温度に相関性を見出し、合金に寄らない普遍的な設計原理を提示できた。格子軟化挙動については β 型 Ti 合金のフォノンの第一原理計算を行い、Nb、Mo 濃度の低下に伴いソフトモードが見られることを見出した。

(3) ホモ界面・ドメイン構造を、高分解能透過型電子顕微鏡、各種その場観察アタッチメント搭載の走査型電子顕微鏡および高速ビデオカメラ搭載の光学顕微鏡を用いて静的・動的に解析した結果、ねじれが実在すること、ねじれた界面は成長するドメイン同士

の衝突によって生じ、核形成の起点となるホモ界面にはねじれが存在しないことなどを、立方晶-斜方晶・単斜晶変態において明らかにし、ドメイン構造の学理を深化できた。

代表的圧電体 $\text{Pb}(\text{Zr},\text{Ti})\text{O}_3$ 単結晶膜の作製に成功し、本グループで測定方法を確立した時間分解 X 線回折により、電圧印加時の結晶構造解析の解析を行い基礎特性を明らかにできた。ドメインホモ界面の圧電性に及ぼす効果を明らかにする道筋がつけられた。また、XRD による結晶構造の直接観察から、ナノ秒までの高速応答が可能であることが明らかになった。さらに分極処理を行い、大きなホモ界面の移動とそれに伴うドメイン構造変化が起きることを世界で初めて解明した。



ドメイン形成のその場観察結果

(4) 応力下においては、ねじれたホモ界面の易動度が、ねじれないものに比べて低くなることを SEM 内 in-situ 引張試験によって初めて実験的に明らかにし、本研究の着眼点の妥当性を示すことができた。材料の機械的特性におけるドメイン構造の寄与に関しては、マクロ材料から方位解析により特定の結晶方位を有する 5~数十 μm 寸法の単結晶や双結晶からなる微小機械試験片を集束イオンビームで作製する技術を確認させ、現在、本試験片により単ドメイン界面易動度の評価を行うことができるようになった。

(5) 力学挙動としては結晶異方性とドメイン易動度を考慮した新 Ti 合金や TiNi を超える合金の開発に成功した。近日中に公表する予定で、大きなブレークスルーが期待できる。

5. 今後の計画

- (1) ホモ界面ダイナミクスの学理究明、またそれによる高機能化指導原理の抽出
 - (2) 原子構造・界面ダイナミクスの解明
 - (3) これらによる高機能化設計原理の確立
 - (4) 本設計原理による新材料創成
 - (5) 新材料の医療・エネルギー応用
6. これまでの発表論文等 (受賞等も含む)

[1] T. Inamura, M. Ii, M. Tahara and H.

Hosoda, "Formation process of the incompatible martensite microstructure in a beta-titanium shape memory alloy", *Acta Mater.*, 124 (2017) pp. 351-359.

[2] Kazuki Endoh, Masaki Tahara, Tomonari Inamura and Hideki Hosoda, "Effect of Sn and Zr addition on the martensitic transformation behavior of Ti-Mo shape memory alloys", *J. Alloy and Comp.*, 695 (2017) pp.76-82.

[3] T. Teramoto, M. Tahara, H. Hosoda and T. Inamura, "Lattice parameter dependence of kinematic compatibility in martensite microstructure of cubic-orthorhombic transformation", *Mat. Trans.*, 57 (2016) pp. 751-754.

[4] Yoshitaka Ehara, Shintaro Yasui, Takahiro Oikawa, Takahisa Shiraishi, Naoya Oshima, Tomoaki Yamada, Yasuhiko Imai, Osami Sakata, and Hiroshi Funakubo, "Large irreversible non-180° domain switching after poling treatment in $\text{Pb}(\text{Zr}, \text{Ti})\text{O}_3$ films", *Appl. Phys. Lett.*, 108 (2016) 212901-1-5.

[5] Sari Yanagida, Akiyoshi Araki, Tso-Fu Mark Chang, Chun-Yi Chen, Takashi Nagoshi, Equo Kobayashi, Hideki Hosoda, Tatsuo Sato, Masato Sone, "Deformation Behaviors of Pure Cu and Cu-Ni-Si Alloy Evaluated by Micro-Tensile Testing", *Mat. Trans.*, 57 (2016) pp.1897-1901.

[6] D. Minami, T. Uesugi, Y. Takigawa and K. Higashi, "Effect of Alloying Element X on Transformation Strains and Phase Stabilities between α'' and β Ti-Nb-X (X = Al, Sn, Zr, Ta) Ternary Alloys from First-Principles Calculations", *Mat. Trans.* 57 (2016) pp. 263-268.

など、論文 76 報 (査読付き国際会議含む)、招待講演 23 件、国際会議発表 125 件、国内学会発表 149 件

ホームページ等

<http://www.mater.pi.titech.ac.jp/>

<http://www.ames.pi.titech.ac.jp/index.html>

<http://f-lab.iem.titech.ac.jp/f-lab.htm>

<http://www2.mtr.osakafu-u.ac.jp/>

<https://www.youtube.com/user/HosodaInamuraLab>