

機関番号：82110
 研究種目：若手研究（B）
 研究期間：2009～2010
 課題番号：21760090
 研究課題名（和文） 原子・電子論的解析による粒界偏析メカニズムの解明と評価法の構築
 研究課題名（英文） Evaluation of grain boundary segregation based on atomistic/electronic nonempirical analysis
 研究代表者
 都留智仁（TSURU TOMOHITO）
 独立行政法人 日本原子力研究開発機構・原子力基礎工学研究部門・研究員
 研究者番号：80455295

研究成果の概要（和文）：原子・電子シミュレーションを用いて、多様な粒界構造や不純物元素に関して粒界偏析メカニズムを調査するとともに、粒界偏析の包括的な評価法の構築を行った。不純物の評価にはフェライト系ステンレスを対象として、マトリクス中に含まれる多様な不純物について Bragg-Williams 近似に基づく偏析傾向を予測する手法を提案し、不純物の粒界偏析による自由エネルギー変化についても検討を行った。その結果、銅やマンガンは析出した状態が安定であるが、ニオブやタンタルは固溶状態が安定であるという結果を得た。偏析傾向が第一隣接間に広がる d 軌道間の相互作用に起因していることを定量的に示した。

研究成果の概要（英文）：The segregation of impurities were investigated by Bragg-Williams approximation combined with first principle density functional theory calculations. The segregation tendencies of various elements observed in reactor pressure vessels were considered and the interaction characteristics between α -Fe and each impurity element were estimated by mean field approximation. Stable N -atom impurity clusters were subsequently chosen to evaluate the changes in free energy for clustering. These calculations show that Cu and Mn impurities embedded in α -Fe are more stable when they are in the segregated state. Conversely, Nb and Ta are stable in the separately solute state. The present estimates provide reliable suggestions for the segregation characteristics.

交付決定額

（金額単位：円）

| | 直接経費 | 間接経費 | 合計 |
|--------|-----------|---------|-----------|
| 2009年度 | 1,500,000 | 450,000 | 1,950,000 |
| 2010年度 | 700,000 | 210,000 | 910,000 |
| 年度 | | | |
| 年度 | | | |
| 年度 | | | |
| 総計 | 2,200,000 | 660,000 | 2,860,000 |

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・機械材料，材料力学

キーワード：材料設計・プロセス・物性・評価

1. 研究開始当初の背景

構造材料の脆性破壊は、き裂の進展が結晶粒内で生じる粒内割れと粒界に沿って生じる粒界割れ大別されるが、粒界割れが支配的となり破壊が進行することがわかっている。粒界での結合力が弱くなることにより材料

の破壊じん性が低下するためであるが、不純物元素による粒界偏析がその要因となると考えられる。実験観察では、材料の広範囲の領域を対象とすることは困難であり、粒界偏析抑制に関する総合的な指針が今後の材料設計において重要である。

2. 研究の目的

本研究では、原子・電子シミュレーションを用いて多様な粒界構造や不純物元素に対して粒界偏析メカニズムを調査し、これらの知見を導入した粒界偏析の包括的な評価法を構築することを目的とする。

3. 研究の方法

不純物の評価にはフェライト系ステンレスを対象として、マトリクス中に含まれる多様な不純物について Bragg-Williams の概念を用いて、不純物一原子が固溶したモデルのみで混合のエンタルピーを予測する手法を提案し、複数の不純物の粒界偏析の自由エネルギー変化についても検討を行った。

4. 研究成果

鉄中の不純物元素の偏析に関して、三次元アトムプローブ (3DAP) 観察で見られるように、銅やマンガン不純物は析出した状態が安定である一方、ニオブやタンタルは固溶状態が安定であるという結果が得られた (図 1)。偏析傾向の異なる不純物の鉄中の結合状態は $-4.0 \sim -2.0$ eV のエネルギー状態の第一隣接間に広がる d 軌道間の相互作用に起因していることを示し、結合状態がマトリクスからの偏析傾向と大きく相関があることを示した (図 2)。また、対称性の高い対応粒界モデルを用いて粒界偏析に関する検討を行った結果、原子半径の大きな Mo や Nb は Ni や Cr と比べて偏析のドライビングフォースが大きいことに加えて拡散係数が大きくなることを示した。この結果も、3DAP 観察を支持する結果となり、不純物偏析を評価する一連のスキームを構築できた。

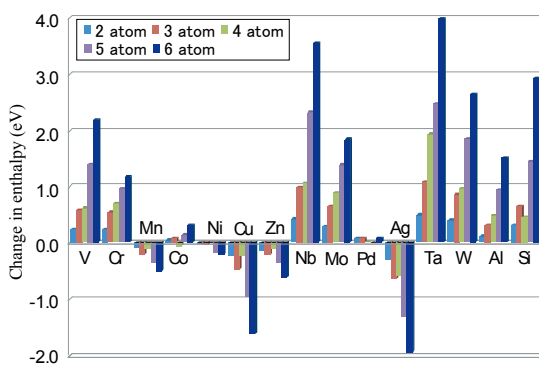


図 1 偏析のエンタルピー変化

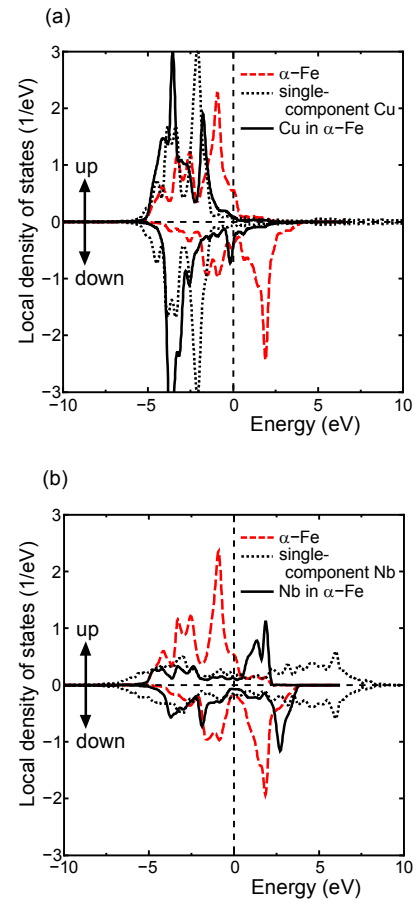


図 2 偏析における局所状態密度

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 9 件)

- ① T. Tsuru, Y. Kaji and Y. Shibutani, "Minimum energy motion and core structure of pure edge and screw dislocations in aluminum", *Journal of Computational Science and Technology*, 4-3 (2010), 185-193. (査読有り)
- ② T. Tsuru, Y. Kaji, D. Matsunaka and Y. Shibutani, "Incipient plasticity of twin and stable/unstable grain boundaries during nanoindentation in copper", *Physical Review B*, 82 (2010), 024101. (査読有り)
- ③ 都留智仁・阿部陽介・加治芳行・塚田隆・實川資朗, 「 α -Fe 中での Cu 析出物の相変化と障害物強度への影響に関する原子論的検討」, *材料*, 第 59 巻 第 8 号, (2010), 583-588. (査読有り)
- ④ H. Shibata, T. Tsuru, M. Hirata and Y. Kaji, "First principles study on elastic properties and phase transition of NpN", *Journal of Nuclear Materials*, 401 (2010), 113-117. (査読有り)
- ⑤ T. Tsuru, C. Suzuki, Y. Kaji and T. Tsukada,

“Non-empirical prediction of impurity segregation in alpha-Fe from first principles”, Journal of Applied Physics, 107 (2010), 061805. (査読有り)

- ⑥ T. Tsuru, Y. Kaji and Y. Shibutani, “Nanoscale contact plasticity of crystalline metal: Experiment and analytical investigation via atomistic and discrete dislocation models”, Acta Materialia, 58 (2010), 3096-3102. (査読有り)
- ⑦ T. Nakazawa, T. Igarashi, T. Tsuru, Y. Kaji, “Ab initio calculations of Fe-Ni clusters”, Computational Materials Science, 46 (2009), 367-375. (査読有り)
- ⑧ T. Tsuru, Y. Aoyagi and Y. Kaji, “Hierarchical computational approaches of the effects of interstitial and vacancy loops on the plastic deformation”, Proceedings of 2010 MRS Fall Meeting. (査読無し)
- ⑨ Y. Kaji, T. Tsuru and Y. Shibutani, “Grain Boundary Characteristics Evaluation by Atomistic Investigation Methods”, Proceedings of 2009 MRS Fall Meeting. (査読無し)

[学会発表] (計7件)

- ① T. Tsuru, Y. Abe, et al., “First principle calculations of solution stability of solute element in reduced activation ferritic steel”, 14th International Conference on Fusion Reactor Materials, Sep. 6-11, 2009, Sapporo, Japan.
- ② 都留智仁・加治芳行・塚田隆・渋谷陽二, 「原子・電子および転位論的手法による粒界特性評価」, 日本機械学会 第22回計算力学講演会, 2009年10月10~12日、金沢.
- ③ Y. Kaji, T. Tsuru, Y. Shibutani, “Grain Boundary Characteristics Evaluation by Atomistic Investigation Methods”, MRS 2009 Fall Meeting, Nov. 30-Dec. 4, 2009, Boston, MA, USA.
- ④ T. Tsuru, Y. Kaji, et al., “Atomistic simulations of strain localization in irradiated polycrystalline metals”, The 5th International Conference on Multiscale Materials Modeling, Oct. 4-8, 2010, Freiburg, Germany.
- ⑤ T. Tsuru, Y. Kaji, et al., “Atomistic Simulations of Stress Concentration and Dislocation Nucleation at Grain Boundaries”, Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo 2010, Oct. 17-21, 2010, Tokyo, Japan.
- ⑥ T. Tsuru, Y. Aoyagi and Y. Kaji, “Hierarchical computational approaches of the

effects of interstitial and vacancy loops on the plastic deformation”, 2010 MRS Fall Meeting, Nov. 29-Dec. 3, 2010, Boston, MA, USA.

- ⑦ 都留智仁・加治芳行, 「照射欠陥の機械的特性への影響に関する原子論的検討」, 日本機械学会 第23回計算力学講演会, 2010年9月23-25日, 北見工業大学. 他 連名6件

[図書] (計0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計0件)

名称 :
発明者 :
権利者 :
種類 :
番号 :
出願年月日 :
国内外の別 :

○取得状況 (計0件)

名称 :
発明者 :
権利者 :
種類 :
番号 :
取得年月日 :
国内外の別 :

[その他]

<http://nsedwww.tokai-sc.jaea.go.jp/fme/index.htm>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

都留 智仁 (TSURU TOMOHITO)

独立行政法人 日本原子力研究開発機構
原子力基礎工学研究部門・研究員

研究者番号 : 80455295

(2) 研究分担者

()

研究者番号 :

(3) 連携研究者

()

研究者番号 :