

## 材料の変形と強度 – 転位のモデリング

尾方 成信<sup>1</sup>

1: 大阪大学 基礎工学研究科 (ogata@me.es.osaka-u.ac.jp)

変形や強度など材料の機械的特性がどのようにして決定されているのかを根本的に理解することができれば、その制御指針が構築でき、優れた強度や靱性（ねばり強さ）を有する高性能構造材料の設計が可能になると期待されます。それでは、何が材料の変形や強度を支配しているのでしょうか？材料はつまるところ原子集団（多くは結晶性）ですので、その変形や強度はひとえに原子間結合の性質に依存していることは間違いありません。したがって、まず原子間結合そのものから変形や強度に関する重要な情報が得られます。例えば、弾性定数や強度の理論限界、すなわち理想強度です。これらは原子間結合のみに着目することで得られますので、現在では第一原理計算などを用いて比較的容易に理論予測することが可能です。しかしながら、これでは十分ではありません。なぜなら現実の材料で理想強度が実現されることはほとんどないからです。その理由は、一般的な構造材料では、材料中に必ず格子欠陥が存在するからです。格子欠陥の存在は結晶のエネルギーを上昇させますが、その一方でエントロピーの上昇を通じて全体の自由エネルギーを減少させます。つまり有限温度では一定の欠陥を材料中に含むことを自然は好みます。格子欠陥の存在は材料の強度を低下させますので、微小材料などのごく限られた場合を除いて、理想強度が実現されることはありません。このように格子欠陥をなくすことは不可能であるので、その存在をまず受け入れて、その上でそれをどううまく制御しより良い強度や靱性を達成するかというのが現実的な材料設計の戦略になります。変形や強度を支配する格子欠陥の代表として結晶格子の1次元の線欠陥である転位があります。転位は外部せん断応力場をその駆動力に変えて、結晶の特定の原子面運動することができ、それにより隣接する原子面間のすべりを発生させます。これが材料の塑性変形（永久変形）の重要メカニズムのひとつです。転位の動きを何らかの形で制限すると塑性変形は起きにくくなり、材料は専ら弾性変形をするため、応力が上昇します。これは強度上昇に寄与するように思えますが、あまりに転位の動きを制限しすぎると、材料中の応力集中部で応力が理想強度に達してき裂が発生し、破壊が生じますので、脆い材料となってしまいます。転位運動の制限の加減が構造材料で求められる高強度と高靱性を実現するために非常に大事になります。セミナーでは、計算による原子間結合が直接与える理想強度を通じて得られる重要な情報に加えて、転位の発生や運動を考慮したモデリングや計算によっていかに材料の変形と強度を予測できるのかについて説明します。