

# 第13回 物質科学談話会

日時：令和元年 12 月 9 日(月) 15:30～17:00

場所：工学部 5 号館 2 階 521 講義室

講師：都留 智仁 博士（日本原子力研究開発機構）

題目：第一原理計算による転位構造の計算：  
転位運動に関する特性の評価方法

内容：HCP 合金や BCC 合金では、合金元素の添加によって従来の欠陥挙動に基づく古典的な強化機構だけで説明できない、固溶軟化などの特異な力学特性の変化が生じることが知られている。これは、溶質元素が弾性相互作用だけでなく転位近傍の電子の結合に影響しているためであると予測されるが、このような特性を評価するには第一原理計算による転位構造の解析が不可欠となる。本研究では、まず、準離散変分 Peierls-Nabarro モデルと第一原理計算による積層欠陥エネルギーから転位芯構造を推定する手法を検討した。さらに、周期境界中にある転位双極子に対して、変位場・弾性エネルギーを評価する手法を検討し、周期境界の弾性場を満たすらせん転位の原子モデルを構築した。本発表では、これらを用いた実際の転位構造の解析から得られた一連の結果を紹介する。

問合先：中村篤智（anaka@nagoya-u.jp, 内線 3366）