

企画にあたって

大塚 誠¹ 木口賢紀² 國枝知徳³ 篠原百合⁴ 高山直樹⁵
塚田祐貴⁶ 森谷智一⁷ 山崎由勝⁸ 山田 亮⁹

近年、集束イオンビーム装置(FIB)/走査型電子顕微鏡(SEM)を用いた3次元アトムプローブ(3DAP)試料の作製技術が確立されたこともあり、様々な材料について結晶粒界を含む局所領域の3DAP解析事例が報告されている⁽¹⁾。材料の粒界偏析に関するデータが蓄積されれば、粒界偏析と材料特性の関係が定量的に明らかになるとともに、粒界偏析制御を実現するための計算科学的手法・アプローチの必要性・重要性がますます高まっていくことが予想される。本特集では、粒界偏析における最近の計算科学研究に焦点を当て、5名の研究者に最近の研究成果について解説していただいた。それぞれの記事間で計算手法・アプローチ、あるいは計算対象とする材料が異なるので、すべての記事を一通り読んでいただくと幸いである。

日本原子力研究開発機構の山口正剛氏には、「液体金属脆化の元素選択性と脆化メカニズム：第一原理計算」と題して、第一原理計算により得られる溶解・吸着エネルギーに基づいて液体金属脆性の元素選択性を解釈した結果について解説していただいた。液体金属脆化の原子論的描像から水素脆化メカニズムについても考察されている。

京都大学の宮澤直己氏には、「 α -Tiにおける酸素偏析した双晶境界とすべりの相互作用」と題して、分子動力学計算により酸素偏析した双晶境界近傍における転位反応を解析した結果について解説していただいた。双晶の種類、酸素の偏析濃度、および酸素の偏析サイトによって異なる転位反応パターンが現れることが示されている。

金沢大学の塩谷光平氏等には、「ハイレントロピー合金の粒界偏析と粒界からの転位放出」と題して、モンテカルロ法と分子動力学計算によりハイレントロピー合金の粒界偏析、および粒界からの転位放出を解析した結果について解説していただいた。構成原子種のサイズの違いに起因して粒界偏析

が生じると粒界から転位が放出しにくくなることが示されている。

日本製鉄の伊藤一真氏には、「鉄鋼材料における粒界偏析の計算科学的解析」と題して、主に高精度の原子間ポテンシャルとナノ多結晶粒界モデルを用いて粒界偏析エネルギーの原子サイト依存性、および粒界偏析量の粒界性格依存性を解析した結果について解説していただいた。実験結果との比較により計算手法の妥当性が示されている。

名古屋大学の塚田祐貴氏等には、「多成分系合金の粒界偏析計算と組成設計への応用」と題して、計算状態図(CALPHAD)データベースと粒界相モデルを用いた粒界偏析計算の結果について解説していただいた。多成分系合金における計算例を挙げて、粒界偏析計算が粒界偏析・粒界析出制御を念頭に置いた組成設計に有用であることが示されている。

以上の各記事の中で用いられている粒界偏析予測の計算手法・アプローチは、程度の差はあるものの、いずれも互いに異なっている。しかし、いずれの計算手法・アプローチも、粒界偏析やその材料特性との関係を理解・予測・制御する上で有用であることが示されている。

本特集が本誌の読者にとって粒界偏析計算の理解の一助となり、さらに粒界偏析制御による材料の高機能化の実現に向けて粒界偏析計算を活用するきっかけとなれば幸いである。最後に、本特集の企画にあたり、記事のご執筆をご快諾下さいました著者の皆様に心より御礼申し上げます。

文 献

- (1) 佐々木泰祐, 埋橋 淳, 大久保忠勝, 宝野和博: まてりあ, **61**(2022), 72-77.

¹東北大学多元物質科学研究所 ²熊本大学 ³日本製鉄株式会社技術開発本部鉄鋼研究所 ⁴東京工業大学フロンティア材料研究所
⁵JFE スチール株式会社スチール研究所 ⁶名古屋大学大学院工学研究科 ⁷名古屋工業大学工学部 ⁸宇部工業高等専門学校

⁹北海道大学大学院工学研究院

Preface to Special Issue on "Cutting Edge of Computational Materials Science on Grain Boundary Segregation"; Makoto Ohtsuka¹, Takanori Kiguchi², Tomonori Kunieda³, Yuri Shinohara⁴, Naoki Takayama⁵, Yuhki Tsukada⁶, Tomokazu Moritani⁷, Yoshikatsu Yamazaki⁸, Ryo Yamada⁹

Keywords: computational materials science, grain boundary segregation

2023年8月30日受理[doi:10.2320/materia.62.645]