

2023 年度  
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	徳 悠葵
研究機関名	名古屋大学
所属部署名	大学院工学研究科
役職名	准教授
研究課題名	周期的電子風力を利用した原子再配列法の開拓
研究実施期間	2023 年 4 月 1 日～2024 年 3 月 31 日

### 研究成果の概要

本年度も引き続き、目的達成のため次の3項目「1. 薄膜の強度試験・導電率マッピングの実施」「2. 原子配列変化の動的挙動の可視化」「3. 高周波高密度電流と原子の力学的相互作用に関する理論モデルの構築」を研究目標として推進した。また、追加の研究項目として、バルク材料に対する電流印加効果の調査を実施した。

項目1では、各種金属材料における電流印加効果を調べたところ、Ptのみ密着強度と電気抵抗が最適化される電流印加条件が異なることがわかった。これは、Pt原子が電子風力よりも電界によって支配的に拡散する（実効原子価が正）ことが関係していると予想される。また、項目2については、種々の元素を含むチタン合金（Ti-6Al-4V）を対象とし、電流印加によって生じる相変態の動的挙動の観察を実施し、 $\beta$ 相（BCC）から $\alpha$ 相（HCP）が析出する様子を捉えることに成功した。また、電子線回折およびEBSDによる分析の結果、チタン合金に含まれるV元素の濃度ゆらぎによってマルテンサイト相が形成される可能性を確認した。項目3については、完全結晶のバルク構造と、欠陥を持つ構造の中で最も単純なものである点欠陥構造における電子風力を調査した。電子風力は電圧下および非電圧下での原子にかかる力として定義した。第一原理計算と非平衡グリーン関数法を用いて、電圧下および非電圧下の原子にかかる力を計算し、電子風力を求めた。完全結晶領域には電子風力は作用せず、点欠陥周囲には電子風力が作用するという結果が得られた。この結果は古典弾性論における電子風力の概念と一致しており、電子論によりこれを確認した。追加の項目では、電流処理によってバルク二層ステンレス鋼中のフェライトとオーステナイト間をCr, Mn, Ni元素が拡散する現象に着目し、相変態を引き起こす際に重要な役割を果たすことを明らかにした。