

# 粒界性格を制御した金属材料設計・開発に対する原子シミュレーションによる基礎的研究

メタデータ	言語: Japanese 出版者: 公開日: 2021-11-25 キーワード: 作成者: メールアドレス: 所属:
URL	<a href="https://doi.org/10.24517/00061039">https://doi.org/10.24517/00061039</a>

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial-ShareAlike 3.0 International License.



# 粒界性格を制御した金属材料設計・開発に対する原子シミュレーションによる基礎的研究

Research Project

All

## Project/Area Number

16760063

## Research Category

Grant-in-Aid for Young Scientists (B)

## Allocation Type

Single-year Grants

## Research Field

Materials/Mechanics of materials

## Research Institution

Kanazawa University

## Principal Investigator

下川 智嗣 金沢大学, 自然科学研究科, 講師 (40361977)

## Project Period (FY)

2004 - 2006

## Project Status

Completed (Fiscal Year 2006)

## Budget Amount \*help

**¥2,900,000 (Direct Cost: ¥2,900,000)**

Fiscal Year 2006: ¥1,000,000 (Direct Cost: ¥1,000,000)

Fiscal Year 2005: ¥800,000 (Direct Cost: ¥800,000)

Fiscal Year 2004: ¥1,100,000 (Direct Cost: ¥1,100,000)

## Keywords

分子動力学法 / Quasicontinuum法 / 転位 / 粒界構造 / マルチスケールモデル / ナノ結晶 / 力学特性 / 計算力学 / 粒界

## Research Abstract

非対称傾角粒界の粒界構造と変形メカニズムについて詳細な検討を行ない,以下の結果を得た.

1)対称粒界面からのずれ角度と粒界エネルギーの関係を原子モデルを用いて計算し,ずれ角度増加に伴い粒界エネルギーが増加することを確認した.また,非対称傾角粒界において対称面からのずれを緩和するために導入される欠陥構造(DSC転位)が,結晶方位によっては,転位源としての役割を示すことを確認した.

2)同じ粒界方位差,異なる対称粒界面からのずれ角度を有するアルミニウムの粒界モデルを作成し,せん断変形シミュレーションを実行することで,粒界変形とそのずれ角度依存性を検討した.300K一定の条件では,解析モデルにせん断変形を与えると,粒界移動が生じ,結晶方位が隣接結晶方位に変化することにより,せん断ひずみを稼ぐことを確認した.また,この粒界移動量は対称面からのずれ角度に強く依存し,粒成長等の粒界移動を伴う現象に対してずれ角度を考慮することは重要であることを見出した.また,高温でせん断変形を加えた場合,ずれ角度の小さ

な粒界では,前述した粒移動を生じるが,ずれ角度の大きな粒界では粒界すべりが生じることを確認し,粒界変形モードが粒界構造に伴ない遷移することを示した.

3)刃状転位と非対称傾角粒界の相互作用シミュレーションを原子・連続体結合モデルで行ない,(a)パイルアップによる応力集中の粒界構造依存性は大きくないこと,(b)粒界より転位を放出するための臨界力が粒界構造に依存し,転位論で見積もれる臨界力とは異なること,(c)粒界に侵入してくる転位のアコモデーション機構は粒界構造に強く依存し,特に非対称傾角粒界を構成する粒界転位の運動が重要であることを示した.

## Report (3 results)

2006 Annual Research Report

2005 Annual Research Report

2004 Annual Research Report

## Research Products (17 results)

All	2007	2006	2005	2004
		All	Journal Article	

[Journal Article] Microstructural evolution in crystalline metal induced by plastic deformation-Atomistic study of grainsubdivision in tension, torsion and rolling-	2007	▼
[Journal Article] Dislocation-Grain Boundary Interactions by the Quasicontinuum Method	2007	▼
[Journal Article] Interaction mechanism between edge dislocations and asymmetrical tilt grain boundaries investigated via quasicontinuum simulations	2007	▼
[Journal Article] Atomistic Simulations of Interface Properties in Metals	2007	▼
[Journal Article] Collective grain deformation of nanocrystalline metals by molecular dynamics simulations	2006	▼
[Journal Article] 分子動力学法によるナノ多結晶体の変形・局所くびれ解析(ナノ多結晶体の粒内変形と粒間変形の関係)	2005	▼
[Journal Article] Grain-size dependence of the relationship between intergranular and intragranular deformation of nanocrystalline Al by molecular dynamics simulations	2005	▼
[Journal Article] Defect-induced anisotropy in mechanical properties of nanocrystalline metals by molecular dynamics simulations	2005	▼
[Journal Article] Atomistic Study of Plastic Deformation of Nanostructured Materials	2005	▼
[Journal Article] Influence of the grain boundary structure on the crystal slip transmission by the quasicontinuum simulations	2005	▼
[Journal Article] Temperature Dependence of a Grain Size of the Maximum Strength of Nanocrystalline Metals by Molecular Dynamics Simulation	2005	▼
[Journal Article] 分子動力学法によるナノ多結晶体の変形・局所くびれ解析-ナノ多結晶体の粒内変形と粒間変形の関係-	2005	▼
[Journal Article] Mechanical Properties Depending on Grain Sizes of Fcc Nanocrystalline Metals by Using Molecular Dynamics Simulation (Investigation of Stacking Fault Energy's Influence)	2004	▼
[Journal Article] Matching conditions in the quasicontinuum method : Removal of the error introduced at the interface between the coarse-grained and fully atomistic region	2004	▼
[Journal Article] Atomistic Study on Ideal Strength of Nanocrystal and Deformation Induced Nanostructures	2004	▼
[Journal Article] A seamless coupling of atomistic and continuum fields in the quasicontinuum method	2004	▼
[Journal Article] Quasicontinuum法による転位と粒界の相互作用シミュレーション	2004	▼

