

令和元年6月17日現在

機関番号：34416

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K05994

研究課題名(和文) 材料科学とマイクロ計算力学によるナノ伸線加工技術の開発

研究課題名(英文) Development of Nano-sized Wire Drawing Technology Using Materials Science and Microscopic Computational Mechanics

研究代表者

齋藤 賢一 (Saitoh, Ken-ichi)

関西大学・システム理工学部・教授

研究者番号：90294032

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,700,000円

研究成果の概要(和文)：本研究課題では、マイクロ計算力学(分子動力学法)による「ナノ伸線加工」の可能性について検討を加えた。非常に微細なワイヤ(線材)を作るための技術を開発するために、原子・分子レベルの力学法則に則った数値シミュレーションを構築し、「ナノ伸線加工」の実現可能性の予測および効果的な実現方法を提案するに至っており、加工によって得られる新たな材料強度などのマクロ的機械的特性、欠陥の形成過程等を含んだ材料組織変化の様相、およびそれらの関係性などが明確に把握できるようになった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

伸線加工は様々な産業を支えている鋼線・非鉄線、ファイバーなどの線材を作るための基礎技術である。本研究では、伸線加工をナノサイズに適用する「ナノ伸線加工」という革新的技術を追及している。まず、分子動力学法という原子・分子レベルの数値シミュレーション手法を駆使し、ナノ伸線加工の実現可能性および、材料に生じるマイクロレベルの変化、摩擦潤滑を軽減させる効果的な機構の解明などに関する新しい知見を得ている。

研究成果の概要(英文)：In this study, "nano-sized wire drawing" technique by using microscopic computational mechanics simulation (molecular dynamics) was investigated. The new technique of plastic working to fabricate very narrow/thin/fine wires was assessed by a way of cutting-edge simulation method and computational modeling in which mechanical theory was precisely applied to atoms or molecules were constructed. It was found that the new fabrication method is quite possible one, but some techniques (mitigating friction at the die, conditions for successful processing, and etc.) were understood as requirement for actual implementation of the process. In the course of the research, we were able to grasp novel macroscopic and mechanical properties which would be provided by "nano-sized wire drawing" method as for wire materials such as strength and ductility. Dynamic transition of microstructure was also recognized in detail, including nucleation and motion of lattice defects (dislocations).

研究分野：計算力学、材料工学、機械工学

キーワード：伸線加工 分子動力学 計算力学 鉄鋼材料 摩擦・潤滑 マルチスケール解析 Peridynamics 塑性加工

1. 研究開始当初の背景

金属材料を機器部品に適応させるために素形材創製後の2次加工が重要であり、塑性加工が有用である。圧延、押し出し、曲げ、深絞りなどの方法に並んで、棒・線材の伸線（引抜き）加工が広く用いられている。伸線で加工処理された線材（ワイヤ）は、例えば鉄鋼材料では自動車タイヤワイヤコード、各種機器のチェーンワイヤ、また橋梁の吊ワイヤ等の多種多様な用途をもつ。現在、伸線加工の分野では線材破壊を生じない引張やダイス形状の最適条件、ダイス材質および潤滑方法、疵（きず）がない良質な表面仕上げ条件、熱処理（パテンティング）の方法、材料内部での残留応力やひずみの分布の評価、加工による微視組織の造り込みなどの技術課題への理論的な研究アプローチが手つかずのまま残っている。そして、関連する技術開発はメーカー技術者および企業内個々に蓄積する実用的ノウハウ（職人技）に頼っているのが現状である。

一方、性能とともに金属ワイヤに要求される微小化への要望は近年さらに進み、現状で生産可能な最小線径は数マイクロメートルまでと言われているが、ナノメートル領域を目指す兆しがある。つまり、原子スケールで作製された金属ワイヤの需要が予測され、LSI用の配線材料、発光・放電機能性を持つ電子デバイス素子、強化ナノコンポジットの素材などの非常に小さな金属線材の需要がある。これまでは化学合成や自己組織化によるいわゆるボトムアップ的な製造方法が比較的多いが、塑性加工の原理に基づく伸線加工アプローチによる製造すなわち「ナノ伸線加工」の方法とその可能性については、理論上の検討も未だなされていない。しかし、これは今後進展すべき未来志向の革新的技術の一つである。

そこで、線材の塑性加工、すなわち、伸線加工の原理に基づいたナノスケールでの線材製造方法の可能性について、理論的アプローチからの吟味を進める必要がある。

2. 研究の目的

本研究での「ナノ伸線加工」は、現在の伸線加工の様式をそのままナノサイズにスケールダウンして適応させるものである。そのための技術的ブレークスルーが必要であり、今回の検討点は以下の通りである。

(1) ナノサイズの金属線の場合の、従来の伸線加工の様式であるダイス - 線材間の接触方式による塑性加工の原理的な可能性。また、ナノサイズでの摩擦増加などの克服方法の検討。

(2) 線材の形状変化、線材内の組織・特性のナノサイズでの変化の理解。

(3) ナノサイズ材料挙動の把握・制御の方法の開拓(シミュレーションによる予測による理解)。

これまでの塑性加工技術では連続体理論に基づく有限要素法(FEM)解析が主であったが、昨今では解像度を原子レベルまで上げたマイクロシミュレーションによる材料解析の方法が有用である。よって、マイクロシミュレーションによるナノ伸線加工での現象予測に関する研究を遂行する。具体的には、原子レベルの計算力学シミュレーションである分子動力学(MD)法・第一原理計算(量子力学を用いた解析)を用いて、上記の事項を検討し明らかにする。

3. 研究の方法

本研究課題では、マイクロ計算力学(分子動力学法)による「ナノ伸線加工」の可能性について検討を加える。以下の各項目の解明が必要である。

(1) 分子動力学(MD)法によるナノ伸線加工モデルの構築：ポテンシャルモデル(鉄鋼材料を想定)やダイスとの摩擦や引抜き負荷などの境界条件の設定についての検討。

(2) 鉄鋼材料(とくにパーライト鋼を想定)における微視組織変化(テキスチャの変化、固相相変態、結晶欠陥の生成・消滅、動的再結晶など)に関する解析方法の検討と実験との比較。

(3) ナノ伸線加工の解析モデルと、既存の伸線加工シミュレーション(FEMなど)との手法の融合化に関する検討。

具体的な(小)研究テーマの項目は以下の3つである。

分子動力学法によるナノ伸線加工モデルの構築

計算モデルのサイズ依存性や結晶欠陥の導入等を精度よく取り扱うためにさらなる多数の原子系を対象とする大規模計算が必要になる。よって、計算プログラムの並列化などによるより効率的な計算技術を検討する。

鉄鋼材料における微視組織変化の解析

企業の製造現場で用いられているパーライト鋼の伸線における組織変化などの実験に基づく知見を比較対象として、MDのポテンシャル関数などをより高精度化したパーライト伸線モデルの構築と伸線シミュレーションを行ない検討する。

MD計算を中心としたナノ伸線加工の解析モデルと既存の伸線加工シミュレーションの融合化の推進

連続体モデルとMDモデルを包括したいわゆる「マルチスケール解析」によるシミュレーションシステム構築のための基礎理論の検討を行う。なお、研究開始後、マクロ手法として粒子法である「Peridynamics」の導入が効果的であると考えられたため、この新手法を用いた種々の解析を進めることとしている。

4. 研究成果

本節では実施年度ごとに時系列での研究成果を示す。

- (1) 第一年度(2016年度)では以下の成果を得た。
まず、鉄鋼材料における微視組織変化の解析として、フェライトとセメンタイトの2層からなるパーライト鋼モデルを用いたMD計算モデルの解析を行った。また、ナノ伸線を実現するために必要な、ナノスケールにおける伸線ダイスと線材間の摩擦軽減の機構をMD法による解析で検討した。さらに、実際の伸線される鋼線材での強度評価・破壊の問題として重要な、水素脆化現象を対象にし、伸線加工時の応力分布における水素原子の拡散挙動のMD解析を遂行し、応力およびその勾配量と拡散係数量の相関を初めて見出した。一方、解析サイズのスケールアップを目指し、まずMDのマクロスケール版とも呼ばれるPeridynamics理論の理解と実装を試み、今後の利用の見通しが得られた。
- (2) 第二年度(2017年度)では以下の成果を得た。
パーライト組織中のセメンタイト分解過程などの具体的なミクロ機構を理解すべく、前年に引き続きフェライトとセメンタイトの各層からなるパーライト鋼モデルのMD解析を行った。とくに原子間相互作用の高精度化を目指し、従来の近似的な2体間ポテンシャルとより高精度な解析が可能な多体間ポテンシャルでの結果を比較検討した。また、ナノ伸線加工でのキー現象となる転位(結晶のずれ)構造の発生および伝播機構の解明とその制御に関して検討した。とくに、原子数を増やし線径をサイズアップしたMDモデルを用いて転位増殖・反応の機構を検討した。また、伸線ダイスヘナノテクスチャリングを付加したときの加工摩擦減少の可能性とその現象解明を行い、ナノ伸線加工の実現性を向上させるとともに現在の伸線加工にも適用できる新技術として提案した。さらに、Peridynamics理論の導入を進め、MDとの融合によるマルチスケール解析への発展を試みた。ナノインデンテーション試験などでMD計算と連携した弾塑性モデルの構築などを行い、今後の伸線加工への適用の見通しを得た。
- (3) 最終年度(2018年度)では以下の成果を得た。
まず、引き続きセメンタイト分解などのパーライト鋼で生じると考えられるミクロ機構をより詳細に理解すべく、新たにフェライトとセメンタイトの層からなるナノインデンテーションの塑性変形モデルを導入し、解析結果を検討した。内部界面でのミスフィット転位および圧子による転位ループの運動および相互作用を解析し、塑性変形機構を理解が進んだ。また、伸線加工における塑性変形による欠陥および組織形成の解明とその制御に関して、純鉄の数千万原子系からなる超大規模MDモデル化を成功した。これにより、転位増殖・反応の機構のサイズ依存性を検討した。さらに、引き続きPeridynamics理論の導入を進め、MDとの融合によるマルチスケール解析を試みた。ナノインデンテーション試験などでMD計算と連携した弾塑性モデルの解析を行い、本手法の理解を深めた。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計14件)

- (1) 齋藤賢一, “原子レベル理論解析による高分子複合化のための特性発掘(分子動力学シミュレーションによる機械的特性評価)”, プラスチックス(日本工業出版)(査読無), 7月号, (2019), 印刷中。
- (2) K.Saitoh, K.Oda, K.Yoshida, M.Takuma, Y.Takahashi and T.Sato, “Atomistic Simulation of Heavily Plastic Deformation of Pearlitic Steel: Nano-sized Processes of Wire Drawing and Indentation”, IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering (査読有), Vol.461, (2019), 012074, pp.1-6.
- (3) Y.Takai, Y.Terai, K.Saitoh, M.Takuma, Y.Takahashi, T.Sato, “Molecular Dynamics Simulation of Li-ion Coordination Structures and transport Properties in LIB Electrolytes: Influence of Molecular Size”, Science and Technology Reports of Kansai University (査読有), No.61, (2019), pp.1-10.
- (4) 齋藤賢一, “年間展望: 引抜き”, ぷらすとず(Bulletin of the JSTP)(査読有), Vol.2, No.9, (2019), 印刷中。
- (5) K.Saitoh, K.Kuramitsu, T.Sato, M.Takuma and Y.Takahashi, “Molecular Dynamics Study on Deformation Mechanism of Grain Boundaries in Magnesium Crystal: Based on Coincidence Site Lattice Theory”, Journal of Materials (査読有), Vol.2018, (2018), (Article ID:4153464), pp.1-10.
- (6) 齋藤賢一, “年間展望: 引抜き”, ぷらすとず(Bulletin of the JSTP)(査読有), Vol.1, No.9, (2018), pp.644-648.
- (7) K.Saitoh, K.Yoshida, K.Oda, T.Sato, M.Takuma and Y.Takahashi, “Molecular dynamics study on nano-sized wire drawing: possible atomistic process and application to pearlitic steel wire”, IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering (査読有), Vol.307, (2018), 012039, pp.1-6.
- (8) 齋藤賢一, “棒線材加工におけるシミュレーションの最新動向(小特集号 棒線材加工の最前線—金属組織制御と機械的特性および周辺技術—)” ぷらすとず(Bulletin of the JSTP)(査読有), Vol.1, No.2, (2018), pp.121-126.
- (9) 齋藤賢一, “年間展望: 引抜き”, 塑性と加工(査読有), Vol.58, No.680, (2017), pp.797-801.
- (10) Y.Takahashi, H.Kondo, K.Aihara, M.Takuma, K.Saitoh, S.Arai., S.Muto, Y.Yamamoto, K.Higuchi and N.Tanaka, “Interfacial fracture strength of micro-scale Si/Cu components with different

free-edge shape”, Key Engineering Materials (査読有), Vol.665, (2016), pp 169-172.

- (11) 齋藤賢一, “年間展望：引抜き”, 塑性と加工 (査読有), Vol.57, No.667, (2016), pp.774-778.
 - (12) H.Koga, K.Saitoh, M.Takuma, Y.Takahashi, T.Sato, “Mechanical Properties of alpha-Fe Crystals Including Hydrogen: Nano-scale Analysis Using MonteCarlo and Molecular Dynamics Methods”, Science and Technology Reports of Kansai University (査読有), No.58, (2016), pp.15-23.
- (他 2 件)

〔学会発表〕(計 64 件)

- (1) Ken-ichi Saitoh, Tomohiro Sato, Masanori Takuma, Yoshimasa Takahashi, "Elastic-Plastic and Fracture behaviour of glass materials in indentation process: Peridynamics simulation study based on molecular dynamics", 13th International Conference on the Mechanical Behaviour of Materials (ICM13, Melbourne, Australia), (2019/6/13).
- (2) Koki Yoshida, Ken-ichi Saitoh, Masanori Takuma, Yoshimasa Takahashi and Tomohiro Sato, "Molecular dynamics study on dislocation behaviour of α -Fe single crystal in wiredrawing process", 13th International Conference on the Mechanical Behaviour of Materials (ICM13, Melbourne, Australia), (2019/6/12).
- (3) Kosuke Oda, Ken-ichi Saitoh, Masanori Takuma, Yoshimasa Takahashi and Tomohiro Sato, "Atomistic study on plastic deformation of pearlite: Wiredrawing and nano-indentation models by MD", 13th International Conference on the Mechanical Behaviour of Materials (ICM13, Melbourne, Australia), (2019/6/12).
- (4) 吉田紘基, 齋藤賢一, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “大規模 MD を用いた伸線加工での転位強化メカニズムの検討”, 第 24 回計算工学講演会, (2019/5/29).
- (5) 尾田幸介, 齋藤賢一, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “ナノインデンテーション MD モデルによる伸線パーライト鋼の界面・原子挙動解析”, 第 24 回計算工学講演会, (2019/5/29).
- (6) 齋藤賢一, “鉄鋼線引抜きの微視的挙動に関する分子動力学シミュレーション (パーライト鋼と純鉄モデルでの転位解析)”, 材料とプロセス (日本鉄鋼協会第 177 回春季講演会, CAMP-ISIJ), (2019/3/22).
- (7) 吉田紘基, 齋藤賢一, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “分子動力学法を用いた伸線加工における強化メカニズムの探求”, 平成 30 年度日本塑性加工学会関西支部 若手技術交流会 (関西支部第 36 回先端塑性加工技術コロキウム), (2018/12/8)
- (8) 尾田幸介, 齋藤賢一, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “伸線パーライト鋼のナノインデンテーションモデルによる MD 解析”, 平成 30 年度日本塑性加工学会関西支部 若手技術交流会 (関西支部第 36 回先端塑性加工技術コロキウム), (2018/12/8)
- (9) 高田健太郎, 齋藤賢一, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “階層構造を有するセルロースナノファイバーの機械的性質に関する分子動力学解析”, 第 32 回分子シミュレーション討論会, 第 32 回分子シミュレーション討論会, (2018/11/29).
- (10) 齋藤賢一, 川村玲, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “Peridynamics によるガラス材料の強変形における弾塑性・破壊解析”, 日本機械学会第 31 回計算力学講演会 (CMD2018), (2018/11/25).
- (11) 吉田紘基, 齋藤賢一, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “転位による強化メカニズムの解明に向けた伸線加工の分子動力学解析”, 日本機械学会第 31 回計算力学講演会 (CMD2018), (2018/11/24).
- (12) 尾田幸介, 齋藤賢一, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “パーライト相内部の界面における原子メカニズムの解明～伸線加工とナノインデンテーションの分子動力学解析～”, 日本機械学会第 31 回計算力学講演会 (CMD2018), (2018/11/24).
- (13) Ken-ichi Saitoh, Kosuke Oda, Koki Yoshida, Masanori Takuma, Yoshimasa Takahashi, Tomohiro Sato, "Atomistic simulation of heavily plastic deformation of pearlitic steel: Nano-sized processes of wiredrawing and indentation", 5th International Conference on Recent Trends in Structural Materials (COMAT2018, Pilsen, Czech Rep.), (2018/11/14)
- (14) Kentaro Takada, Ken-ichi Saitoh, Masanori Takuma, Yoshimasa Takahashi, Tomohiro Sato, "Molecular dynamics study on transmission mechanism of torsional deformation in cellulose nanofibers with hierarchical structure", The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018, Osaka, Japan), (2018/10/31).
- (15) Ken-ichi Saitoh, Haruka Koga, Tomohiro Sato, Masanori Takuma, Yoshimasa Takahashi, "Molecular dynamics analysis of hydrogen diffusion behavior in alpha-Fe bi-crystal under stress gradient", The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018, Osaka, Japan), (2018/10/29).
- (16) 尾田幸介, 齋藤賢一, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “パーライトの塑性変形に関する MD 解析～伸線およびナノインデンテーションモデルによる考察～”, 第 69 回塑性加工連合講演会, (2018/10/27).
- (17) 高田健太郎, 齋藤賢一, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “セルロースナノファイバーのねじり変形に関する分子動力学解析 - 階層構造にともなう変形機構の解明 - ”, 日本機械学会 2018 年度年次大会, (2018/9/10).

- (18) 吉田紘基, 齋藤賢一, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “伸線加工メカニズムと格子欠陥挙動に関する MD 解析”, 日本機械学会 2018 年度年次大会, (2018/9/10).
- (19) Ken-ichi Saitoh, Koki Yoshida, Kosuke Oda, Tomohiro Sato, Masanori Takuma and Yoshimasa Takahashi, "Plastic deformation behavior in nano-sized metallic wires subjected to drawing process: Molecular dynamics simulation", The 13th world Congress of Computational Mechanics/2nd Pan American Congress on Computational Mechanics (WCCM2018, NewYork, U.S.A.). (2018/7/24).
- (20) 齋藤賢一, 太田直道, 西村憲治, 佐藤知広, 宅間正則, 高橋可昌, “Peridynamics と MD の連携による SiC の弾塑性・破壊シミュレーション”, 第 23 回計算工学講演会, (2018/6/6).
- (21) 吉田紘基, 齋藤賢一, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “伸線加工における転位メカニズムの分子動力学解析 - 伸線方位による転位と応力の関係 - ”, 第 23 回計算工学講演会, (2018/6/6).
- (22) 齋藤賢一, 尾田幸介, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “伸線パーライト鋼のマイクロダイナミクス～MD 解析における原子間相互作用の高精度化と界面モデルの検討～”, 平成 30 年度塑性加工春季講演会, (2018/6/2).
- (23) 高田健太郎, 齋藤賢一, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “セルロースナノファイバーの階層の変形構造と捻回特性に関する MD 解析”, 日本材料学会第 3 回マルチスケール材料力学シンポジウム, (2018/5/25).
- (24) 尾田幸介, 齋藤賢一, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “伸線パーライト鋼の MD モデルにおけるセメントイト分解現象”, 日本材料学会第 3 回マルチスケール材料力学シンポジウム, (2018/5/25).
- (25) 吉田紘基, 齋藤賢一, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “伸線加工によるナノワイヤの実現に向けた加工原理の探求”, 日本材料学会第 3 回マルチスケール材料力学シンポジウム, (2018/5/25).
- (26) 高田健太郎, 齋藤賢一, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “セルロースナノファイバーのねじり変形に関する分子動力学解析 - 水素結合の評価と形状記憶機能の検討 - ”, 第 31 回分子シミュレーション討論会, (2017/11/29).
- (27) Ken-ichi Saitoh, Koki Yoshida, Kosuke Oda, Tomohiro Sato, Masanori Takuma, Yoshimasa Takahashi, "Molecular dynamics study on nano-sized wiredrawing: Possible atomistic process and application to pearlitic steel wire", 2017 International Conference on Mechanical Engineering and Applied Composite Materials (MEACM2017, HongKong, China), (2017/11/24).
- (28) 齋藤賢一, 吉田紘基, 横濱一輝, 佐藤知広, 宅間正則, 高橋可昌, “分子動力学法による鉄鋼の伸線加工に関する研究 - ガイス表面性状変化による摩擦および塑性変形への影響 - ”, 第 68 回塑性加工連合講演会, (2017/11/10).
- (29) Ken-ichi Saitoh, Tomohiro Sato, Masanori Takuma, Yoshimasa Takahashi, Koki Yoshida, Kazuki Yokohama, "Molecular dynamics study on drawing process of metallic wire: Effect of nano-sized texture on friction and plasticity", Sustainable Tribology Conference 2017 Amami (STCA2017, Kagoshima, Japan) / Japan-Taiwan Tribology Symposium 2017 (JTTS2017), (2017/10/14).
- (30) Naomichi Ohta, Ken-ichi Saitoh, Kenji Nishimura, Tomohiro Sato, Masanori Takuma, Yoshimasa Takahashi, "Peridynamics study on elastic-plastic deformation behavior of SiC during indentation", Sustainable Tribology Conference 2017 Amami (STCA2017, Kagoshima, Japan) / Japan-Taiwan Tribology Symposium 2017 (JTTS2017), (2017/10/14).
- (31) 太田直道, 齋藤賢一, 西村憲治, 佐藤知広, 宅間正則, 高橋可昌, “Peridynamics による SiC 押込み試験の弾塑性・破壊モデル”, 日本機械学会第 30 回計算力学講演会 (CMD2017), (2017/9/18).
- (32) 高田健太郎, 齋藤賢一, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “セルロースナノファイバーの分子動力学解析 - ねじり変形に対する水素結合の評価 - ”, 日本機械学会第 30 回計算力学講演会 (CMD2017), (2017/9/17).
- (33) 太田直道, 齋藤賢一, 西村憲治, 山本勇一, 佐藤知広, 宅間正則, 高橋可昌, “Peridynamics 破壊力学と分子動力学の連携による SiC 押込み試験の解析”, 日本機械学会 2017 年度年次大会, (2017/9/4).
- (34) 齋藤賢一, 北谷彩人, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “分子動力学法による伸線パーライト鋼の微視界面における原子挙動の解析”, 平成 29 年度塑性加工春季講演会, (2017/6/10).
- (35) 齋藤賢一, 吉田紘基, 佐藤知広, 仁木貴之, 宅間正則, 高橋可昌, “鉄鋼線の引き抜きに関する分子動力学的考察: 内部結晶欠陥解析とナノテクスチャリングの影響”, 日本材料学会第 2 回マルチスケール材料力学シンポジウム, (2017/5/26).
- (36) 太田直道, 齋藤賢一, 西村憲司, 佐藤知広, 宅間正則, 高橋可昌, “Peridynamics 破壊力学による SiC 押込み試験での動的変形機構の考察”, 日本機械学会関西支部第 92 期定時総会講演会, (2017/3/13).
- (37) Ken-ichi Saitoh, Kenji Nishimura, Tomohiro Sato, Naomichi Ota, Yuuichi Yamamoto, Masanori Takuma and Yoshimasa Takahashi, "Multiscale deformation behavior of SiC crystal in indentation test: Toward scalable simulation by combining MD and peridynamics", The 4th International Symposium on Molecular Simulations (ISMS2016, Shanghai, China), (2016/10/24).

- (38) Ken-ichi Saitoh, Kenji Nishimura, Tomohiro Sato, Takuya Hanashiro, Masanori Takuma, Yoshimasa Takahashi, "Temperature-dependent atomistic plasticity in silicon carbide crystal: molecular dynamics model of nanoindentation", 8th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2016, Dijon, France), (2016/10/11).
- (39) 倉光航平, 齋藤賢一, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤 知広, “マグネシウム多結晶における塑性変形挙動の分子動力学解析 - 粒界からの転位生成および双晶形成メカニズム-”, 日本機械学会 第 29 回計算力学講演会 (CMD2016), (2016/9/23).
- (40) 仁木貴之, 齋藤賢一, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “鉄鋼材料の伸線加工に関する分子動力学シミュレーション - ナノスケール表面テクスチャリングによる影響 -”, 日本機械学会 第 29 回計算力学講演会 (CMD2016), (2016/9/23).
- (41) 古賀悠, 齋藤賢一, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “ α -Fe 結晶および粒界部の微視的応力場における水素挙動の分子動力学解析”, 日本機械学会第 29 回計算力学講演会 (CMD2016) (2016/9/23).
- (42) Kohei Kuramitsu, Ken-ichi Saitoh, Masanori Takuma, Yoshimasa Takahashi, Tomohiro Sato, "Molecular dynamics study on plastic deformation behavior of Mg polycrystal", The 10th International Conference On Fracture & Strength of Solids (FEOfS2016, Tokyo, Japan), (2016/9/1).
- (43) Ken-ichi Saitoh, Tomohiro Sato, Masanori Takuma, Yoshimasa Takahashi, Tetsuya Imanishi, "Molecular dynamics study of collagen fibrils: Relation between mechanical properties and molecular chirality", The 10th International Conference On Fracture & Strength of Solids (FEOfS2016, Tokyo, Japan), (2016/8/29).
- (44) 齋藤賢一, “材料工学研究室における Peridynamics 解析例と今後の展望”, 第 1 回 Peridynamics 情報交換会, (2016/7/19).
- (45) 古賀悠, 齋藤賢一, “分子動力学法による α -Fe 結晶中の水素拡散挙動～伸線材の残留応力場による影響～”, 日本塑性加工学会 第 80 回伸線技術分科会, (2016/7/1).
- (46) 齋藤賢一, 咲本大輔, 牧田智貴, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “分子動力学によるセルローズナノファイバー素材の力学的特性・機能の解明”, 第 21 回計算工学講演会, (2016/6/1).
- (47) 齋藤賢一, 西村憲治, 佐藤知広, 花城卓也, 宅間正則, 高橋可昌, “SiC 結晶の塑性挙動における温度の影響: ナノインデンテーションの分子動力学モデルによる検討”, 日本材料学会マルチスケール材料力学シンポジウム, (2016/5/27).
- (48) 齋藤賢一, 古賀悠, 宅間正則, 高橋可昌, 佐藤知広, “分子動力学法による鉄鋼材料の伸線加工シミュレーション: 残留応力の発生と水素拡散に関する検討” 平成 28 年度塑性加工春季講演会, (2016/5/22).
- (他 16 件)

〔図書〕(計 2 件)

- (1) 齋藤賢一, 日本能率協会総合研究所, “原子レベルでの理論解析による新規機能材料の物性予測技術” MDB 技術予測レポート, (2018), pp.1-11.
- (2) 日本塑性加工学会 編 (共著: 浅川基男, 齋藤賢一 (2 章のうち pp.17-46 の執筆, および, 執筆責任者) 吉田一也, 上井清史, 岩本隆, 増田智一, 三村正直, 奥井達也, 高杉直樹, 土屋昭則, 久保木孝, 中野元裕, 梶川翔平), コロナ社, 新塑性加工技術シリーズ・「引抜き」～棒線から管までのすべて, (2017), 339 ページ.

〔産業財産権〕

- 出願状況 (計 0 件)
○取得状況 (計 0 件)

〔その他〕

ホームページ等

関西大学システム理工学部機械工学科 材料工学研究室 (ナノ班) ホームページ
(研究代表者の大学研究室のホームページ)

<http://www2.memmm.mec.kansai-u.ac.jp/saitoh/nano>

6. 研究組織

(1) 研究分担者

研究分担者氏名: 該当なし

(2) 研究協力者

研究協力者氏名: 該当なし

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。