

令和元年5月27日現在

機関番号：44519

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2017～2018

課題番号：17K14826

研究課題名(和文) 一次元ナノ構造体-金属複合材料の機械強度の原子論からの予測的評価

研究課題名(英文) Investigation of mechanical properties of metal-one dimensional carbon nanotube composite by atomic simulation

研究代表者

森 英喜 (Mori, Hideki)

産業技術短期大学・その他部局等・講師

研究者番号：00456998

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：環境問題への対応やエネルギーコスト削減を強く求められる現代社会において、構造材料の軽量化および強度・延性などのさらなる機能向上は最重要課題である。本研究では、軽量のアルミ(Al)を母材として高機能なカーボンナノチューブ(CNT)を補強材として添加したAl-CNT複合材料の機械的特性を分子動力学(MD)法による数値実験を用いて解析を行った。CNTと塑性変形の担い手である転位との相互作用の評価を行い転位とCNTの一次元構造特有の相互作用を確認した、Al母材の機械的特性に与える影響を評価した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、カーボンナノチューブ(CNT)と転位との直接的な多段階に渡る相互作用の評価を行い、転位とCNTの一次元構造特有の相互作用を確認した。本研究で得られた結果は、アルミニウム(Al)-CNT複合材料における一次元ナノ構造体を有効活用した強度コントロール法の構築必要不可欠な成果である。さらに、一次元ナノ構造体による金属材料強化手法は、Al-CNT複合材料への適用のみならず次世代の高機能高強度な複合材料開発の指針となるものであり、社会的・工学的意義も高いものである。

研究成果の概要(英文)：To maintain the sustainable society, it is very important to develop the advanced structural material. In this work, we investigate the mechanical properties of metal-one dimensional carbon nanotube (CNT) composite in Aluminum (Al) matrix by using molecular dynamics (MD) simulation.

First, we calculate the direct interaction between single CNT and one dislocation, which cause the plastic deformation of metals, and also estimate the effect of CNT on mechanical properties of Al matrix, such as yield strength and work hardening. Furthermore, we calculate the multi-step interaction between single CNT and one dislocation, and found unique interaction between dislocation and CNT as one dimensional inclusion. These results are very important to develop the advanced composite materials.

研究分野：材料力学

キーワード：複合材料 カーボンナノチューブ アルミニウム 転位 分子動力学

1. 研究開始当初の背景

環境問題への対応やエネルギーコスト削減を強く求められる現代社会において、構造材料の軽量化および強度・延性などのさらなる機能向上は最重要課題である。金属材料、特にアルミニウム (Al) などの軽金属は、軽量であり加工性も良く、自動車や航空機の構造材料など様々な用途に用いられている。一方、炭素材料は優れた機械特性を持つ。特にカーボンナノチューブ (Carbon nanotube:CNT) はヤング率 1TPa 程度、引張強度 50GPa 程度であり、新規構造材料として注目を浴びている。近年、金属材料の汎用性と CNT の優れた特性の両方を活かし、金属材料中に CNT を補強材として添加することによる高強度・高機能な金属-CNT 複合材料 (Metal-CNT composite:MCC) の開発・実用化の動きが盛んである。このような状況の中、MCC が主要構造材料としての信頼性を獲得するためには強度向上特性の理論的基礎付けが重要である。本研究の予備実験として分子動力学 (Molecular dynamics:MD) 数値実験を用いて上記実験の原子モデリングを行った。その結果、CNT が転位の運動を直接抑制することが強度と延性の両立した主要因であることを示し、さらに強度向上特性を転位論によって理論的に評価し、次世代の高強度・高性能な構造用複合材料の可能性を示すことに成功した。さらに、CNT がチューブ状の一次元ナノ構造体として、析出物等の通常の粒状に存在する 0 次元障害物とは異なった形で転位の動きを抑制することを見出した。このことが優れた延性向上の一要因であることを示唆する結果を得た。

2. 研究の目的

本研究の目的は、柔軟な加工性能と高強度の両立を求められる自動車や航空機などの構造材料への適用のための MCC 設計の指針を得ることである。さらにこれらの主要構造材料として MCC を適用するためには高い信頼性が求められる。このための理論的基礎を構築することを目指す。本研究では、特に Al-CNT 複合材料に着目する。CNT はナノ構造体として Al 母材中に存在する。このため、従来の shear lag 理論のみでは十分ではなく、原子モデリングおよび転位論からのアプローチが重要となる。このため、MD 数値実験を用いて、Al 母材中における転位と一次元ナノ構造体障害物としての CNT の相互作用を原子レベルで定量的にモデリングし、その強度向上性能を評価する。さらに、MD 数値実験で得た評価予測を MIT の研究協力者が実施した実験結果と相互に連携して、次世代の MCC 設計の指針を発信する。個別の数値実験への検討課題としては、Al-CNT 複合材料の転位-CNT の多段相互作用の解析を行い、塑性変形中期および後期において CNT が転位進展に与える影響を詳細に明らかにする。得られた結果をもとに、CNT による加工硬化率の上昇などを定量的に評価すること。また、CNT 構造の差異や複数の CNT の不均一な分布などが Al-CNT 複合材料に与える影響を各種大規模 MD 数値実験および古典的転位論の援用によって明らかにする。得られた結果をもとに、一次元ナノ構造体を有効活用した強度コントロール法の探索を行う。

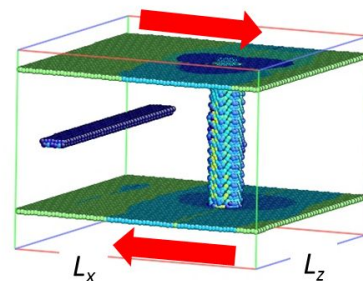


図 1: Al-CNT 複合材料 MD 数値実験用原子モデル。

3．研究の方法

本研究では、Al 母材中における転位と CNT の直截的な相互作用を MD シミュレーションによって、原子レベルより評価する。具体的には、図 1 に示すような Al 原子バルク原子モデルを用意し、転位と CNT を導入しせん断負荷を印加することによって、転位が CNT を通過する際に必要なせん断応力および転位の挙動を解析する。

4．研究成果

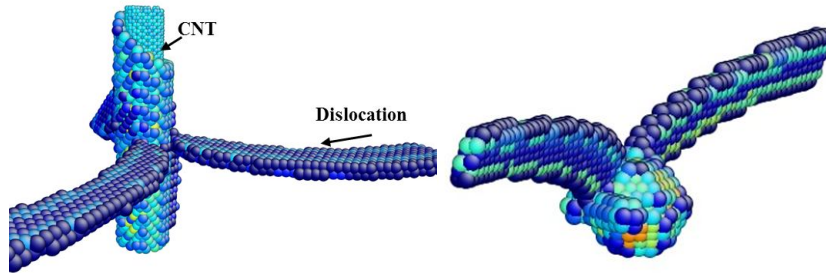


図 2：転位と CNT(上)およびフラレン(下)との相互作用の原子描像。

まず、初期数値実験として一本の CNT と転位との相互作用の評価を行い先行実験との整合性を確認およびモデルの妥当性を検証した。次に、数値実験をすすめ CNT と転位との多段階に渡る相互作用の評価を行い、転位と CNT の一次元構造特有の相互作用を確認した。さらに、図 2 示すように 0 次元の炭素ナノ構造体であるフラレンを導入し、転位との相互作用を評価し、CNT と転位との特有の相互作用の存在の妥当性を確認した。また、CNT 構造の差異などが Al-CNT 複合材料に与える影響を数値実験および古典的転位論の援用によって検討した。また、Al の高精度原子間ポテンシャルの開発も行った。これらの結果は、Al-CNT 複合材料における一次元ナノ構造体を有効活用した強度コントロール法の構築必要不可欠な成果である。さらに、一次元ナノ構造体による金属材料強化手法は、Al-CNT 複合材料への適用のみならず次世代の高機能高強度な複合材料開発の指針となるものであり、社会的・工学的意義も高いものである。

5．主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 0 件)

〔学会発表〕(計 7 件)

(1) 森英喜

金属固体中での不均一エネルギー場における不純物等の拡散挙動の数値解析法の検討
金属学会 2017 年春秋講演大会(2017)

(2) 森英喜

A Deep neural network atomic potential for investigation of lattice defects in Aluminum
2017 MRS Fall Meeting (Boston)(2017)

(3)森英喜

深層ニューラルネットワークの枠組みを用いた原子間ポテンシャルによるアルミ中の転位構造の解析

日本金属学会 2018 年春期講演大会(2018)

(4)森英喜、尾方成信

アルミ-カーボンナノチューブ複合材料における転位-ナノチューブ相互作用の原子論的解析
第 23 回計算工学講演会(2018)

(5)森英喜

Investigation of dislocation core structure in Aluminum by using a generalized Peierls-Nabarro model.

MMM2018(Osaka)(2018)

(6)森英喜、尾方成信

アルミニウム母材中における転位とカーボンナノ構造体との相互作用の解析
金属学会 2019 年春期講演大会(2019)

(7)森英喜

一般化されたパイエルス-ナバロモデルによるアルミニウム中転位芯構造の解析
日本物理学会第 74 回年次大会(2019)

〔図書〕(計 0 件)

〔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

6. 研究組織

(1)研究分担者

(2)研究協力者

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。