

平成 21 年 5 月 7 日現在

研究種目：若手研究（スタートアップ）

研究期間：2007～2008

課題番号：19860088

研究課題名（和文） 転位と粒界の相互作用とマクロ特性に関する原子・転位論的研究

研究課題名（英文） Atomistic and dislocation studies of the macroscopic characteristics and the interaction between dislocation and grain boundary

研究代表者

都留 智仁（TSURU TOMOHITO）

独立行政法人 日本原子力研究開発機構・原子力基礎工学研究部門・研究員

研究者番号：80455295

研究成果の概要： 低 Σ 値の粒界に対する第一原理計算により，内殻が閉殻な金属に比べて方向性の強い結合を持つものの方が安定な粒界を形成することを示した。転位と $\Sigma 3$ 粒界の相互作用の状態遷移解析により，エネルギー障壁を定量的に示し DSC 転位と粒界に垂直なステップ転位に分解して低エネルギー障壁で粒界すべりを引き起こすことがわかった。また，離散転位法と境界要素法のマルチスケールモデルを構築しメゾスケールの変形特性の評価を行った。

交付額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2007 年度	1,120,000	0	1,120,000
2008 年度	860,000	258,000	1,118,000
年度			
年度			
年度			
総計	1,980,000	258,000	2,238,000

研究分野：

科研費の分科・細目：

キーワード：転位・粒界・状態遷移解析・離散転位力学法・マルチスケールモデル

1. 研究開始当初の背景

転位と結晶粒界は，材料の塑性変形に大きく寄与する。互いの相互作用は材料全体の性質を決定する最も重要な因子であるが，実験による経験則が基本となっており，メカニズム解明に関する定量的な評価はなされていない。

2. 研究の目的

対応粒界や小傾角粒界，ランダム粒界を含めた粒界構造における特性について，原子論的解析手法を用いて，粒界構造や変形メカニズムの定量的な評価を行う。また，DD - BEM 法によるマルチスケールモデルによって，基本特性がメゾからマクロスケールの機械的特性に与える影響を総合的に理解する。

3. 研究の方法

低 Σ 値の粒界の第一原理計算により局所的な結合状態を評価する。安定な $\Sigma 3$ 粒界と転位の相互作用に対する NEB 解析により，エネルギー障壁を定量的に評価する。また，DD - BEM 法によるマルチスケールモデルを構築し，メゾスケールの特性を評価する。

4. 研究成果

低 Σ 粒界の第一原理計算により，電子の結合状態と粒界特性の関係を示した。転位と $\Sigma 3$ 粒界の相互作用の状態遷移解析により，エネルギー障壁を定量的に示し，相互作用メカニズムを明らかにした。また，DD - BEM のマルチスケールモデルを構築しメゾスケールの変形特性の評価を行った。

5. 主な発表論文等
(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計 6 件)

- (1) T. Tsuru, Y. Shibutani and Y. Kaji, Physical Review B, 79 (2009), 012104.
- (2) T. Tsuru and Y. Shibutani, J. Comput. Sci. Tech., 2 (2008), 559-567.
- (3) T. Tsuru and Y. Shibutani, J. Comput. Sci. Tech., 2 (2008), 459-467.
- (4) 都留智仁・渋谷陽二, 日本機械学会論文集(A編), 74 (2008), 933-938.
- (5) 都留智仁・渋谷陽二, 日本機械学会論文集(A編), 73 (2007), 877-882.
- (6) 都留智仁・渋谷陽二, 日本機械学会論文集(A編), 73 (2007), 738-743.

〔学会発表〕(計 13 件)

国際会議

- (1) T. Tsuru, Y. Shibutani and Y. Kaji, The 3rd Asian-Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM 07) in conjunction with EPMESC XI, December 3-6, 2007, Kyoto, Japan.
- (2) T. Tsuru, C. Suzuki, M. Yamaguchi and Y. Kaji, 4th International Conference on Multiscale Materials Modeling, October 27-31, Florida, USA.

他、連名 2 件

国内会議

- (1) 都留智仁・渋谷陽二, 日本機械学会 2007 年度年次大会, 2007 年 9 月.
- (2) 都留智仁・鈴木知史・加治芳行, 日本金属学会 2009 年春期(第 144 回)大会, 2009 年 3 月.

他、連名 6 件

依頼講演

- (1) 都留智仁, 「インデンテーションの力学と計算材料科学」, 第 229 回 材料力学談話会, 材談 07-15, 2008 年 2 月 4 日, 大阪科学技術センター.

〔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〕

6. 研究組織

(1) 研究代表者

都留 智仁 (TSURU TOMOHITO)

独立行政法人 日本原子力研究開発機構・

原子力基礎工学研究部門・研究員

研究者番号: 80455295

(2) 研究分担者

(3) 連携研究者