

令和 5 年 6 月 19 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2017～2021

課題番号：17H01238

研究課題名(和文)強度と延性を両立する材料設計のための学理構築

研究課題名(英文)Materials design to satisfy both of strength and ductility

研究代表者

尾方 成信 (Shigenobu, Ogata)

大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授

研究者番号：20273584

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 33,300,000円

研究成果の概要(和文)：第一原理計算および古典力場を用いた原子論的解析を用いて、様々な結晶材料、ガラス材料における塑性変形の素過程の活性化の温度、応力、化学環境依存性の解析を実施し、得られた情報からマイクロメカニクスによってマクロ強度や延性を予測した。そしてこれらの知見から、強度と延性を高次元で両立するための材料の設計指針を構築し、その妥当性の検証を行った。その過程において、ナノインデンテーションなどの特異な応力場中で活性化する塑性変形素過程のマルチスケール解析手法や活性化エネルギーの温度依存性の評価手法などの新しい解析手法が構築できた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

構造物を構成する構造材料には強度と延性と靱性の高次元でのバランスが要求される。しかしながら、一般的には強度と延性・靱性はトレードオフの関係にある。高強度構造材料開発という強い社会的要求に応じて材料強度を高めるとどうしても延性・靱性が犠牲になり、構造材料としての信頼性が低下してしまう。高強度と高延性(および高靱性)を両立した新奇材料が発見されているが、これまでこのような材料の明確な設計指針がなく、開発は研究者のひらめきや、試行錯誤に頼っていた。本研究で得られた強度と延性の両立指針は、まさにこの設計指針を与えるものであり、その社会的インパクトは大きい。

研究成果の概要(英文)：Using first-principles calculations and atomistic modeling methods with force fields, we analyze the temperature, stress, and chemical environment dependences of the activation of elementary processes of plastic deformation in various crystalline and glass materials, and predict its strength and ductility with the help of micromechanics theory. Based on these analysis, we developed a design guideline for materials having both high strength and ductility simultaneously, and verified the validity of the guideline by experiments. In addition, we also developed new computational methods in the research process, such as a multi-scale method for activation of elementary process of plastic deformation in highly localized stress field, such as stress field in nanoindentation and at crack tip, and a method for evaluating the temperature dependence of activation energy.

研究分野：計算材料科学、計算力学

キーワード：強度と延性 塑性変形 熱活性化過程

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

構造物を構成する構造材料には強度と延性と靱性の高次元でのバランスが要求される。金属が構造材料として多用されている最も大きな理由はこれらが比較的高次元でバランスしているためである。一般的に、セラミックスは金属より強度が高いが延性・靱性に乏しい。他方、ポリマーは延性・靱性は比較的高いが、強度が低い。強度と延性・靱性がほど良くバランスしているのが金属である。このように、一般的には強度と延性・靱性はトレードオフの関係にある。高強度構造材料開発という強い社会的要求に応じて材料強度を高めるとどうしても延性・靱性が犠牲になり、構造材料としての信頼性が低下してしまうというジレンマがある。

近年強ひずみ加工やナノ加工をはじめとする、材料のナノ組織やナノ構造創製技術や、合金化技術を駆逐することで、高強度と高延性(および高靱性)を両立した新奇材料が発見されている。しかしながらその一方で、それをデザインするための設計指針や学理が全くなく、これまでの新奇材料の発見は研究者のひらめきや、試行錯誤に頼っているのが現状である。この現状を打破するには、塑性変形の素過程の活性化条件を電子論・原子論から予測的かつ定量的に獲得し、それをもとに、設計指針と学理を構築することが不可欠であると考えられる。

2. 研究の目的

強度と延性・靱性のトレードオフというジレンマを打ち破るための指針を与える普遍的な学理を構築し、理論計算および実材料の実験を通して、学理を実証することが目的である。具体的には、申請者が研究をしてきた強度と延性を高次元で両立する新奇ナノ材料を題材に、そこで発生している様々な塑性変形の素過程の活性化条件を原子・電子論的解析で定量化し、その知見に基づく数理モデルを通じて、高強度・高延性両立の原理を解明し、さらなる高強度・高延性両立達成への足がかりとする。

3. 研究の方法

第一原理計算および古典力場を用いた原子論的解析を用いて、結晶材料、ガラス材料における塑性変形の素過程の活性化の温度、応力、化学環境依存性の解析を実施し、得られた情報からマイクロメカニクスによってマクロ強度や延性を予測する。そしてこれらの知見から、強度と延性を高次元で両立する材料の設計指針を構築する。

具体的には、1) BCC 材料の変形特性を支配するらせん転位運動の温度、応力、化学環境依存性と強度予測、2) ガラス材料の変形を支配する STZ (Shear Transformation Zone) や原子拡散の温度、応力依存性と強度予測、3) ナノインデンテーションなどの特異な高応力場中で活性化する塑性変形素過程(転位ループ形成)の温度や応力(変形速度)依存性のマルチスケール解析手法の新規構築、4) ナノ材料で特に重要になる原子拡散による変形素過程の原子論的解析の実施、5) マグネシウムの各種塑性変形素過程の活性化の温度、応力依存性解析の実施とその知見を用いた、強度と延性の両立のための設計指針の構築、さらには微細マグネシウム結晶材料を用いた実験による設計指針の検証を実施する。

4. 研究成果

1) BCC 金属である Fe および Nb の変形を支配しているらせん転位の運動の熱活性素過程である、キック対形成、キック移動の活性化エネルギーの応力や温度依存性、さらには Si や O などの置換型および侵入型合金元素がこれらの素過程の活性化に与える影響を Nudged Elastic Band 法などの原子論による活性化エネルギー評価法を用いて評価した[1][2][3][4]。さらにはこれらの情報を用いて、降伏応力の温度依存性や、置換型および侵入型合金元素種依存性を原子論に基づく転位運動モデル(動的モンテカルロ法)を構築することで理論的に評価し、実験と整合する結果を得た[1][2][4]。これらの一連の解析を通じて、強い固溶強化や強い脆化をもたらす固溶元素を理論的に示すことができたが[2][3]、その一方で、合金化による転位運動の制御だけでは強度と延性の両立が難しいこともわかった。その後、FCC の高エントロピー合金に関する研究を行い、合金化がもたらす塑性変形時の微細組織(ナノ双晶やナノ HCP 構造)形成の制御が、強度と延性の両立をもたらす可能性があることを示した[5]。

2) 金属ガラスの変形の素過程である STZ の活性化と、その活性化によって発生する熱を考慮したマイクロメカニクスによるマルチスケールモデルを開発し、実験で得られた STZ の連鎖によるせん断帯の進展や、それによる温度変化、さらにはマクロな応力ひずみ関係を完全に再現できた。特にマクロな応力ひずみ関係に表れるセレーションを再現することができた[6]。さらには、冷却速度によって制御することができるガラスの緩和度が、STZ の連鎖すなわち、せん断帯の進展の様相を大きく変えることを明らかにした。緩和度が小さい(エネルギーの高い)ガラスは全体として均一変形をする傾向があり、局所的なせん断帯が生じにくく、延性的な挙動を示すことがわかった。その一方で緩和度が低いことによる強度低下は限定的であり、強度と延性のバランスを押し上げることが示唆された[7]。

3) ナノインデンテーションなどの特異な高応力場中で活性化する塑性変形素過程(転位ループ形成)の温度や応力(変形速度)依存性を、原子論に立脚したマルチスケールモデルを構築することによって解析可能とした。本手法は、例えばナノインデンテーションであれば、インデンテーション試験中に材料内部に発生する応力場を原子シミュレーションによってまず評価する。そして、得られた応力場を別の塑性変形素過程解析用原子モデルにスーパーインポーズし、その下で塑性変形素過程の活性化エネルギー評価解析を実施する[8]。これにより、き裂先端近傍やナノインデンテーション時の発生する特異な応力場中での熱活性化過程の解析を大規模な原子モデルを用いることなく解析することを可能とした[8]。さらには、得られた活性化エネルギーから、降伏応力やナノインデンテーションの pop-in 応力予測とその温度や変形速度依存性予測も可能とした[8]。この予測はナノインデンテーションの実験とも良く整合することが示された[9]。さらにこの研究を通して、ナノインデンテーションの pop-in 加重の統計分布が、特異なべき指数を有するべき分布を示すことも発見できた[9]。

4) 超微細結晶やナノ部材では、結晶粒界や表面の体積分率が大きく、さらには粒界や表面の平均曲率が大きくなるため、粒界や表面での拡散が変形を支配するようになる。結晶粒サイズや部材が大きくなると、一般的な転位などが支配する塑性変形を示す。こういった変形様式のサイズによる変化やそのメカニズムの根源的理解は、のちに示すように、強度と延性の両立を、材料寸法を制御して達成しようとする場合には不可欠となる。これまでに、超微細結晶では、結晶粒サイズが小さくなると、結晶粒の塑性変形が不活性になり、結晶粒界の拡散支配の変形が材料全体の変形を支配することが知られている。その際には、結晶粒が変形する場合に適用できるホールペッチ則(粒径が小さくなると強度が上昇する)が成立せず、粒径が小さくなると強度が低下する現象が見られるようになることが知られている。本課題では、ナノ部材でも同様に、あるサイズを境にサイズが小さくなるにつれ強度が低下するようになることを、実験と計算の両面から明らかにした[10]。

5) マグネシウムの各種塑性変形素過程(転位、双晶変形)の活性化の温度、応力依存性解析を実施した。特に、双晶の成長素過程である、disconnection ループの形成過程の活性化エネルギーを、projected average force integrator 法を用いて解析し、活性化エネルギーに非調和効果に起因する強い温度依存性があることを発見した[11]。また、双晶面に対するせん断応力以外の応力も活性化エネルギーに影響する非シュミット効果を発見した[11]。これらの変形素過程に対する知見、さらには4)で得られた拡散支配の変形に関する知見を統合し、強度と延性を両立するための戦略を打ち立てた。それは、異なる応力レンジで稼働する変形素過程を複数用意し、それらが順次、活性化後に不活性となるように仕組むというものである[12]。マグネシウム微細結晶材料に対する実験によって、双晶変形、異なる転位による変形、粒界拡散の各変形様式が関与することで、結晶粒サイズがマイクロメートル付近で強度と延性が高い次元で両立することを示した[13]。強度と延性の両立は構造材料分野で最も重要な課題のひとつであり、その戦略を打ち立てたことの今後の構造材料開発に与えるインパクトは大きい。

<引用文献>

- [1] Tetsuo Mohri, Ying Chen, Masanori Kohyama, Shigenobu Ogata, Arkapol Saengdeejing, Somesh Kumar Bhattacharya, Masato Wakeda, Shuhei Shinzato and Hajime Kimizuka, "Mechanical properties of Fe-rich Si alloy from Hamiltonian", npj Computational Materials, 3 (2017) 10-1-14.
- [2] Masato Wakeda, Tomohito Tsuru, Masanori Kohyama, Taisuke Ozaki, Hideaki Sawada, Mitsuhiro Itakura, Shigenobu Ogata, "Chemical misfit origin of solute strengthening in iron alloys", Acta Materialia, 131 (2017) 445-456.
- [3] Ping-Jiong Yang, Qing-Jie Li, Tomohito Tsuru, Shigenobu Ogata, Jie-Wen Zhang, Hong-Wei Sheng, Zhi-Wei Shan, Gang Sha, Wei-Zhong Han, Ju Li, Evan Ma, "Mechanism of hardening and damage initiation in oxygen embrittlement of body-centred-cubic niobium", Acta Materialia, 168 (2019) 331-342.
- [4] Shuhei Shinzato, Masato Wakeda, Shigenobu Ogata, "An atomistically informed kinetic Monte Carlo model for predicting solid solution strengthening of body-centered cubic alloys", International Journal of Plasticity, 122 (2019) 319-337.
- [5] Peijun Yu, Rui Feng, Junping Du, Shuhei Shinzato, Jyh-Pin Chou, Bilin Chen, Yu-Chieh Lo, Peter K. Liaw, Shigenobu Ogata, Alice Hu, "Phase transformation assisted twinning in a facecentered-cubic FeCrNiCoAl0.36 high entropy alloy", Acta Materialia, 181 (2019) 491-500.
- [6] Xie Xie, Yu-Chieh Lo, Yang Tong, Junwei Qiao, Gongyao Wang, Shigenobu Ogata*, Hairong Qi, Karin A. Dahmen, Yanfei Gao, and Peter K. Liaw, "Origin of serrated flow in bulk metallic glasses", Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 124 (2019) 634-642.
- [7] Tomoaki Niiyama, Masato Wakeda, Tomotsugu Shimokawa, Shigenobu Ogata, "Structural relaxation affecting shear transformation avalanches in metallic glasses", Physical

Review E, 10 (2019) 043002-1-10.

[8] Yuji Sato, Shuhei Shinzato, Takahito Ohmura, Shigenobu Ogata, "Atomistic prediction of the temperature- and loading-rate-dependent first pop-in load in nanoindentation", *International Journal of Plasticity*, 121 (2019) 280-292.

[9] Yuji Sato, Shuhei Shinzato, Takahito Ohmura, Takahiro Hatano, and Shigenobu Ogata, "Unique universal scaling in nanoindentation pop-ins", *Nature Communications*, 11 (2020) 4177-1-9.

[10] Xiang Wang, Sixue Zheng, Shuhei Shinzato, Zhengwu Fang, Yang He, Li Zhong, Chongmin Wang, Shigenobu Ogata, Scott X. Mao*, "Atomistic processes of surface-diffusion induced abnormal softening in nanoscale metallic crystals", *Nature Communications*, 12 (2021) 5237-1-9.

[11] Yuji Sato, Thomas Swinburne, Shigenobu Ogata, and David Rodney, "Anharmonic effect on the thermally-activated migration of $\{10^{-12}\}$ twin interfaces in magnesium", *Materials Research Letters*, 9(5) (2021) 231-238.

[12] Nobuhiro Tsuji, Shigenobu Ogata, Haruyuki Inui, Isao Tanaka, Kyosuke Kishida, Si Gao, Wenqi Mao, Yu Bai, Ruixiao Zheng, Jun-Ping Du, "Strategy for Managing Both High Strength and Large Ductility in Structural Materials ~ Sequential nucleation of different deformation modes based on a concept of plaston", *Scripta Materialia*, 181 (2020) 35-42.

[13] Ruixiao Zheng, Jun-Ping Du, Si Gao, Hidetoshi Somekawa, Shigenobu Ogata, Nobuhiro Tsuji, "Transition of dominant deformation mode in bulk polycrystalline pure Mg by ultra-grain refinement down to sub-micrometer", *Acta Materialia*, 198 (2020) 35-46.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計29件（うち査読付論文 29件 / うち国際共著 13件 / うちオープンアクセス 8件）

1. 著者名 Yuji Sato, Thomas Swinburne, Shigenobu Ogata & David Rodney	4. 巻 9
2. 論文標題 Anharmonic effect on the thermally activated migration of {10-12} twin interfaces in magnesium"	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Materials Research Letters	6. 最初と最後の頁 231-238
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/21663831.2021.1875079	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Yuji Sato, Shuhei Shinzato, Takahito Ohmura, Takahiro Hatano, and Shigenobu Ogata	4. 巻 11
2. 論文標題 Unique universal scaling in nanoindentation pop-ins	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 4177-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-020-17918-7	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Jun-Ping Du, W. T. Geng, Kazuto Arakawa, Ju Li* and Shigenobu Ogata*	4. 巻 11
2. 論文標題 Hydrogen-enhanced Vacancy Diffusion in Metals	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 7015-7020
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.0c01798	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する
1. 著者名 Ruixiao Zheng, Jun-Ping Du, Si Gao, Hidetoshi Somekawa, Shigenobu Ogata, Nobuhiro Tsuji	4. 巻 198
2. 論文標題 Transition of dominant deformation mode in bulk polycrystalline pure Mg by ultra-grain refinement down to sub-micrometer	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 35-46
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2020.07.055	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Yangen Li, Rui Li, Qing peng, Shigenobu Ogata	4. 巻 31
2. 論文標題 Reduction of dislocation, mean free path, and migration barriers by high entropy alloy: insights from atomistic study of irradiation damage of CoNiCrFeMn	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nanotechnology	6. 最初と最後の頁 425701-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6528/ab9cf5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 伊藤一真, 澤田英明, 尾方成信	4. 巻 84
2. 論文標題 ナノ多結晶粒界モデルを用いた粒界偏析予測	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 日本金属学会誌	6. 最初と最後の頁 237-243
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/jinstmet.J2020005	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Md. Lokman Ali, Shuhei Shinzato, Vei Wang, Zeqi Shen, Jun-ping Du, Shigenobu Ogata	4. 巻 61
2. 論文標題 An Atomistic Modeling Study of the Relationship between Critical Resolved Shear Stress and Atomic Structure Distortion in FCC High Entropy Alloys	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Materials Transactions	6. 最初と最後の頁 605-609
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.MT-MK2019007	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Tomohito Tsuru, Masato Wakeda, Tomoaki Suzudo, Mitsuhiro Itakura, and Shigenobu Ogata	4. 巻 127
2. 論文標題 Anomalous solution softening by unique energy balance mediated by kink mechanism in tungsten-rhenium alloys	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 025101-0-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5131279	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Peijun Yu, Rui Feng, Junping Du, Shuhei Shinzato, Jyh-Pin Chou, Bilin Chen, Yu-Chieh Lo, Peter K. Liaw, Shigenobu Ogata, Alice Hu	4. 巻 181
2. 論文標題 Phase transformation assisted twinning in a face-centered-cubic FeCrNiCoAl _{0.36} high entropy alloy	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 491-500
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2019.10.012	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Tomoaki Niiyama, Masato Wakeda, Tomotsugu Shimokawa, Shigenobu Ogata	4. 巻 100
2. 論文標題 Structural relaxation affecting shear-transformation avalanches in metallic glasses	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 043002-1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.100.043002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Shuhei Shinzato, Masato Wakeda, Shigenobu Ogata	4. 巻 122
2. 論文標題 An atomistically informed kinetic Monte Carlo model for predicting solid solution strengthening of body-centered cubic alloys	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 International Journal of Plasticity	6. 最初と最後の頁 319-337
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ijplas.2019.03.004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 De-Gang Xie, Zhi-Yu Nie, Shuhei Shinzato, Yue-Qing Yang, Feng-Xian Liu, Shigenobu Ogata, Ju Li, Evan Ma, Zhi-Wei Shan	4. 巻 10
2. 論文標題 Controlled growth of single-crystalline metal nanowires via thermomigration across a nanoscale junction	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 4478-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-019-12416-x	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Yuji Sato, Shuhei Shinzato, Takahito Ohmura, Shigenobu Ogata	4. 巻 125
2. 論文標題 Atomistic prediction of the temperature- and loading-rate-dependent first pop-in load in nanoindentation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 International Journal of Plasticity	6. 最初と最後の頁 280-292
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ijplas.2019.06.012	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hiroshi Miyoshi, Hajime Kimizuka, Akio Ishii, Shigenobu Ogata	4. 巻 179
2. 論文標題 Temperature-dependent nucleation kinetics of Guinier-Preston zones in Al-Cu alloys: An atomistic kinetic Monte Carlo and classical nucleation theory approach	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 262-272
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2019.08.032	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Gurcan Aral, Md Mahbubul Islam, Yun-Jiang Wang, Shigenobu Ogata, and Adri C. T. van Duin	4. 巻 125
2. 論文標題 Atomistic insights on the influence of pre-oxide shell layer and size on the compressive mechanical properties of nickel nanowires	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 165102-1-13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5080640	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Ping-Jiong Yang, Qing-Jie Li, Tomohito Tsuru, Shigenobu Ogata, Jie-Wen Zhang, Hong-Wei Sheng, Zhi-Wei Shan, Gang Sha, Wei-Zhong Han, Ju Li, Evan Ma	4. 巻 168
2. 論文標題 Mechanism of Hardening and Damage Initiation in Oxygen Embrittlement of Body-Centred-Cubic Niobium	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 331-342
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2019.02.030	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Xie Xie, Yu-Chieh Lo, Yang Tong, Junwei Qiao, Gongyao Wang, Shigenobu Ogata, Hairong Qi, Karin A. Dahmen, Yanfei Gao, Peter K. Liaw	4. 巻 124
2. 論文標題 Origin of serrated flow in bulk metallic glasses	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Mechanics and Physics of Solids	6. 最初と最後の頁 634-642
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jmps.2018.11.015	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kazuma Ito, Hideaki Sawada, and Shigenobu Ogata	4. 巻 3
2. 論文標題 First-principles study on the grain boundary embrittlement of bcc-Fe by Mn segregation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 013609-1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.3.013609	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Guo-Jie Jason Gao, Yun-Jiang,Wang, Shigenobu Ogata	4. 巻 9
2. 論文標題 Incorporating a soft ordered phase into an amorphous configuration enhances its uniform plastic deformation under shear	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 015329-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5064499	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Liang Wan, Wen Tong Geng, Akio Ishii, Jun-Ping Du, Qingsong Mei, Nobuyuki Ishikawa, Hajime Kimizuka and Shigenobu Ogata	4. 巻 112
2. 論文標題 Hydrogen embrittlement controlled by reaction of dislocation with grain boundary in alpha-iron	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 International Journal of Plasticity	6. 最初と最後の頁 206-219
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ijplas.2018.08.013	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yun-Jiang Wang, Jun-Ping Du, Shuhei Shinzato, Lan-Hong Dai and Shigenobu Ogata	4. 巻 157
2. 論文標題 A free energy landscape perspective on the nature of collective diffusion in amorphous solids	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 165-173
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2018.07.029	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 W.T. Geng, Vei Wang, Jin-Xu Li, Nobuyuki Ishikawa, Hajime Kimizuka, Kaneaki Tsuzaki, and Shigenobu Ogata	4. 巻 149
2. 論文標題 Hydrogen trapping in carbon supersaturated iron and its decohesion effect in martensitic steel	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Scripta Materialia	6. 最初と最後の頁 79-83
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.scriptamat.2018.02.025	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 新里秀平, 糟谷瑛, 尾方成信	4. 巻 67-2
2. 論文標題 ケモメカニカルポテンシャルに基づく拡散方程式を用いたナノワイヤ中の格子間原子拡散シミュレーション	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 材料	6. 最初と最後の頁 263-268
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2472/jsms.67.263	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yuji Sato, Chiaki Nakai, Masato Wakeda, and Shigenobu Ogata	4. 巻 7
2. 論文標題 Predictive modeling of Time-Temperature-Transformation diagram of metallic glasses based on atomistically-informed classical nucleation theory	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 7194-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-017-06482-8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Masato Wakeda, Tomohito Tsuru, Masanori Kohyama, Taisuke Ozaki, Hideaki Sawada, Mitsuhiro Itakura, and Shigenobu Ogata	4. 巻 131
2. 論文標題 Chemical misfit origin of solute strengthening in iron alloys	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 445-456
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2017.04.017	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tsuji Nobuhiro, Ogata Shigenobu, Inui Haruyuki, Tanaka Isao, Kishida Kyosuke, Gao Si, Mao Wenqi, Bai Yu, Zheng Ruixiao, Du Jun-Ping	4. 巻 181
2. 論文標題 Strategy for managing both high strength and large ductility in structural materials - sequential nucleation of different deformation modes based on a concept of plaston	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Scripta Materialia	6. 最初と最後の頁 35 ~ 42
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.scriptamat.2020.02.001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Wang Xiang, Zheng Sixue, Shinzato Shuhei, Fang Zhengwu, He Yang, Zhong Li, Wang Chongmin, Ogata Shigenobu, Mao Scott X.	4. 巻 12
2. 論文標題 Atomistic processes of surface-diffusion-induced abnormal softening in nanoscale metallic crystals	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 5237
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-021-25542-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Yang Ping-Jiong, Li Qing-Jie, Tsuru Tomohito, Ogata Shigenobu, Zhang Jie-Wen, Sheng Hong-Wei, Shan Zhi-Wei, Sha Gang, Han Wei-Zhong, Li Ju, Ma Evan	4. 巻 168
2. 論文標題 Mechanism of hardening and damage initiation in oxygen embrittlement of body-centred-cubic niobium	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 331 ~ 342
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2019.02.030	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Mohri Tetsuo, Chen Ying, Kohyama Masanori, Ogata Shigenobu, Saengdeejing Arkapol, Bhattacharya Somesh Kumar, Wakeda Masato, Shinzato Shuhei, Kimizuka Hajime	4. 巻 3
2. 論文標題 Mechanical properties of Fe-rich Si alloy from Hamiltonian	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 npj Computational Materials	6. 最初と最後の頁 10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41524-017-0012-4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

[学会発表] 計13件 (うち招待講演 13件 / うち国際学会 9件)

1. 発表者名 Shigenobu Ogata
2. 発表標題 HYDROGEN AND DISLOCATION ASSISTED GRAIN BOUNDARY CRACK INITIATION ~ A MOLECULAR DYNAMICS STUDY ~
3. 学会等名 International Conference on Plasticity, Damage, and Fracture 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shigenobu Ogata and Wei Wang
2. 発表標題 Universal one to one relation between critical resolved shear stress and mean square atomic displacement in random high entropy alloys
3. 学会等名 2018 Materials Research Society (MRS) Fall Meeting & Exhibit (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Jun-Ping Du, Shigenobu Ogata
2. 発表標題 Vacancy diffusion in metals in hydrogen environment
3. 学会等名 Asian Consortium on Computational Materials Science - on "Multiscale Modelling of Materials for Sustainable Development", (ACCMS-TM2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Shigenobu Ogata
2. 発表標題 First-principles study of energetics of deformation twinning in pure Mg
3. 学会等名 International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials (THERMEC'2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Shigenobu Ogata, Takahito Ohmura, and Yuji Sato
2. 発表標題 Atomistic prediction of temperature and loading-rate dependent critical indentation load of the onset of homogeneous dislocation nucleation
3. 学会等名 The Sixth International Indentation Workshop (IIW6) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Shigenobu Ogata
2. 発表標題 Modeling of Deformation and Strength of Structural Materials
3. 学会等名 International Seminar series on Time Dependent Multiscale Phenomena of Materials, Institute of Metal Research (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Shigenobu Ogata
2. 発表標題 Predictive Multiscale Modeling of Deformation and Strength of Structural Materials
3. 学会等名 IUMRS-ICA 2017 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Shigenobu Ogata
2. 発表標題 Predictive Multiscale Modeling of Deformation and Strength of Nanostructured Structural Materials
3. 学会等名 The 9th Conference of Asian Consortium of Computational Materials Science (ACCMS) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Shigenobu Ogata
2. 発表標題 Atomistic prediction of pressure-promoted thermal rejuvenation and high pressure phase of metallic glass
3. 学会等名 2017 International symposium on multi-scale modeling and simulation of materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 尾方 成信
2. 発表標題 変形子 (プラストン) の物理と力学特性
3. 学会等名 日本金属学会セミナー (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 尾方 成信
2. 発表標題 ここまで来た。シミュレーションを使った材料設計
3. 学会等名 nano tech 2018 第17回 国際ナノテクノロジー総合展・技術会議 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 尾方 成信
2. 発表標題 計算材料科学による構造材料の力学特性の予測と設計
3. 学会等名 平成29年度・大阪大学「物質・材料科学研究推進機構」総会・講演会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 尾方 成信
2. 発表標題 塑性現象の素過程の原子論的理解
3. 学会等名 日本学術振興会第133委員会第238会研究会（原子スケールでの材料強度論）（招待講演）
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分 担 者	石井 明男 (シャードンバオ)	大阪大学・基礎工学研究科・特任講師(常勤)	
	(Ishii Akio)		
	(80773340)	(14401)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------