

令和 5 年 6 月 8 日現在

機関番号：13901

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2018～2022

課題番号：18H05480

研究課題名（和文）モデリングによるキンク形成・強化のメカニズム解明

研究課題名（英文）Modeling-based investigation of mechanism of kink deformation and strengthening

研究代表者

君塚 肇（Kimizuka, Hajime）

名古屋大学・工学研究科・教授

研究者番号：60467511

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 66,100,000円

研究成果の概要（和文）：ミルフィーユ構造を有する新規高強度構造材料の創製を目指す上で、ミルフィーユ材料におけるキンク形成の微視的様態ならびにキンク形成から強化に至る硬質・軟質層状構造の要件を明らかにすることは、当該材料の強化原理を解明する上で不可欠である。本研究では、ミルフィーユ構造特有の硬質・軟質層状構造の変形過程ならびにキンク形成・強化のメカニズムを明らかにすることを目的に、電子・原子論と結晶塑性論に基づく計算力学モデリングにより金属系、セラミックス系、高分子系のミルフィーユ構造におけるキンク形成の過程を微視的・巨視的にモデル化するとともに、キンク形成の様態ならびにキンク形成から強化に至る因子の解明を進めた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ミルフィーユ構造の強化原理の解明に向けて、未だ詳細が明らかにされていないキンク形成・強化のメカニズムを明らかにすることは重要な課題であり、当該構造を有する新規材料創製への展開を図る上で不可欠である。本計画研究では、大規模電子状態計算から種々の原子レベルシミュレーション、幾何学的に必要な転位や回位の密度を導入した高次の結晶塑性論など、スケールをまたがる新しい計算力学手法を取り入れて、多様なミルフィーユ構造のミクロ～メソスケールにおけるキンク形成の微視的支配因子およびメソ～マクロスケールにおけるキンク形成・強化の様態を解明した。これは当該材料において優れた力学特性を制御する上での基礎的知見となる。

研究成果の概要（英文）：In order to understand the strengthening principles of materials with mille-feuille structures, it is essential to elucidate the microscopic aspects of kink formation in mille-feuille materials and the requirements for hard and soft layered structures for strengthening by kink formation. In this study, kink formation processes in mille-feuille structures of metals, ceramics, and polymers were investigated by computational mechanics modeling based on electronic, atomic, and crystal plasticity theories. As a result, details of the deformation processes of hard and soft layered structures and the kink formation and strengthening mechanisms specific to mille-feuille structures were clarified.

研究分野：計算材料科学

キーワード：硬質・軟質層状構造 キンク形成・強化 原子論的解析 大規模第一原理計算 高次勾配結晶塑性論 結晶塑性有限要素解析

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、研究者個人に帰属します。

## 1. 研究開始当初の背景

従来の Mg 合金はもとより、高強度 Al 合金を超越する強度と延性を兼ね備えた Mg 合金が我が国で開発 (Kawamura et al., *Mater. Trans.* 2001) され、世界的に注目されている。当該合金の強化相は、構造変調と濃度変調が同期したシンク口型 LPSO 構造を有することを特徴としており、加工時に結晶回転を伴うキンク形成が生じることで、高強度が発現 (キンク強化) するという特異な現象を示す。「シンク口 LPSO 新学術」(平成 23~27 年度) の成果により、シンク口型 LPSO 構造は添加元素が濃化した硬質層と Mg による軟質層が、ナノメートルオーダーで周期的に秩序配列した層状構造であること、さらには、必ずしも周期性を持たない「硬質層が希薄分散した構造」においてもキンク形成が生じ、強度が発現することが明らかとなった。この事実に着目して、キンク強化される層状構造をシンク口型 LPSO 構造の上位概念として「ミルフィーユ構造」として統一的に取扱い、Mg 合金だけに留まらないミルフィーユ構造物質群のキンク形成制御を積極的に行うことで新たな高強度・高延性構造材料創製を目指すという道標が掲げられ、本領域が立ち上がった。

キンク強化現象は実験事実として確認されているものの、キンク形成に由来して発現する高強度の起源は未解明である。キンク形成の初期核は、原子レベルの協調的集団運動が起点となるためマイクロ~メゾスケールの理解が必要となる。一方、成長したキンク領域はせん断成分と回転成分の両変形モードを内在し、キンクが誘起する応力・ひずみ場は長距離に渡って影響を及ぼすためメゾ~マクロスケールの記述が重要となる。従って、キンクの動的様態の本質的な理解には、スケールをまたがる階層的な描写が欠かせない。これまで我々は、電子・原子論および固体力学理論解析により、Mg 系 LPSO 構造を含む各種材料における構造・変形特性を評価し、その特性発現に關与するマイクロ・メゾ・マクロスケールの主因子を解明してきた。この知見に立脚するとともに、我々がこれまで整備してきたモデリング手法を活用することで、多様なミルフィーユ構造におけるキンク形成・強化を支配する微視的因子の詳細が明らかになれば、当該構造の設計・制御の指針を獲得できると着想するに至った。

本領域が目指す「ミルフィーユ構造の強化原理の確立」に向けて、未だ詳細が明らかにされていないキンク形成・強化のメカニズムを解明することは喫緊の課題であり、ミルフィーユ構造を有する新規材料創製への展開を図る上で不可欠である。特に、当該材料において高強度・高延性等の優れた力学特性を制御するためのキンク形成・強化メカニズムを追求するには、硬質層の影響下で発現するキンク形成の微視的様態、およびキンク強化される硬質・軟質層状構造の構造的・力学的要件を獲得することが欠かせない。そこで、本計画研究では、大規模電子状態計算から種々の原子レベルシミュレーション、幾何学的に必要な転位や回位の密度を導入した高次の結晶塑性論など、スケールをまたがる新しい計算力学手法を取り入れて、多様なミルフィーユ構造のマイクロ~メゾスケールにおけるキンク形成の微視的支配因子およびメゾ~マクロスケールにおけるキンク形成・強化の動的様態を解明する。

## 2. 研究の目的

本計画研究班の当該課題は、電子・原子論と固体力学理論に基づくモデリングにより、多様なミルフィーユ構造においてキンク形成を支配する微視的因子を明確化するとともに、キンクの介在による変形・強化のメカニズムを解明することを目的とする。具体的には、種々のミルフィーユ構造のマイクロ・メゾ・マクロスケールにおける以下の課題に取り組む。

- [マイクロ・メゾスケール] 大規模第一原理電子状態計算に加えて、キンク形成を記述するのに適した空間・時間粗視化原子レベルシミュレーション手法を活用することでミルフィーユ構造のキンク形成の微視的様態を解析する。これにより、ミルフィーユ構造においてキンク界面を構成する素子 (転位等) の生成と活動、およびキンク形成の素過程のエネルギー論を獲得し、すべり系の制限下におけるミルフィーユ構造の変形の描像を解明する。
- [メゾ・マクロスケール] 幾何学的に必要な転位等を導入した高次の結晶塑性論に基づく解析手法を構築することで、ミルフィーユ構造中のキンク領域の高精度解析を実現する。これにより、キンク形成における寸法効果や転位列のパターニングの他、これらが力学性能に与える影響を明らかにし、他の変形機構との協調・競合によって強化に至る物理的シナリオを明確化する。

最終的には、金属、セラミックス、高分子の三大材料系における結晶型および組織型のミルフィーユ構造を対象に、ミルフィーユ構造におけるキンク形成の電子・原子論的描像、ならびにキンク形成から強化に至る硬質・軟質層状構造の構造的・力学的要件を明らかにする。

### 3. 研究の方法

マイクロ～メゾスケールにおけるキンク形成の微視的支配因子の解明，ならびにメゾ～マクロスケールにおけるキンク形成・強化の動的様態の解明を進めるため，以下の5項目について研究を遂行した．

#### (1) キンク形成原子論解析

種々の材料系（金属，セラミックス，高分子）における結晶型および組織型のミルフィーユ構造をモデル化するとともに，分子動力学法等の原子シミュレーション手法を活用することでキンク形成過程を記述する．これにより，原子・分子レベルの塑性変形素過程に注目しながらキンク形成の微視的メカニズムを解明する．さらに，キンクが形成するための硬質層・軟質層の要件に関する基礎的知見を獲得する．

#### (2) キンク構造電子論解析

大規模第一原理電子状態計算を活用して，Mg系ミルフィーユ構造におけるキンク界面の局所構造を精密解析する．さらに，キンク界面と転位芯との間の相互作用ならびに溶質原子がキンク界面の安定性に与える影響をエネルギー論的に明らかにする．これにより，キンク強化のメカニズム解明に欠かせないキンク界面の移動を伴う塑性変形素過程を検証する．

#### (3) キンク形成マルチスケール解析

回転自由度を考慮した高次勾配結晶塑性モデルに対して，メッシュフリー法に基づく解析手法を新たに構築する．これにより，キンクの構成要素としての転位列を陽にモデル化した高精度な数値解析を実現する．さらに，ミルフィーユ構造のキンク形成における寸法効果ならびに転位列のパターニングを解析することを通じてキンク形成・強化機構の支配因子を同定する．加えて，マクロな力学性能に対する，キンクが介在する場合の強化の寄与を明確化する．

#### (4) キンク形成結晶塑性解析

ミルフィーユ構造の大変形有限要素解析を実現するため，ひずみ依存型の結晶塑性モデルを構築する．これにより，すべり系・双晶系の制限下におけるミルフィーユ構造のキンク形成機構ならびに変形過程におけるキンクの形態変化を解析する．さらに，多結晶中の複雑な変形拘束下におけるミルフィーユ構造の変形モードの変化を解析することで，他の変形モードとの競合によって強化に至るシナリオを検討する．

#### (5) 結晶型ミルフィーユ構造の基礎物性の解明

第一原理電子状態計算を活用して，ミルフィーユ構造中の硬質層・軟質層の起源となる結合特性ならびに硬質層中の溶質原子クラスターの形成過程を解明する．さらに，第一原理計算結果をパラメータとして伝達した遷移状態理論モデルや古典核生成理論モデルに基づいて，溶質原子の拡散およびクラスター形成のキネティクスを定量評価する．

### 4. 研究成果

先端の計算力学モデリングに基づいて，金属系，セラミックス系，高分子系のミルフィーユ構造におけるキンク形成の過程を微視的・巨視的にモデル化することで，キンク形成の様態ならびにキンク形成から強化に至る因子の解明を進めた．具体的な成果は以下に示す通りである．

#### (1) キンク形成原子論解析

金属系ミルフィーユ構造におけるキンク形成のメカニズムとその支配因子を明確化するため，Cu/Nb系およびAl/Al<sub>2</sub>Cu系のナノラメラ構造を対象に，その塑性変形の素過程を原子シミュレーションにより解析した．その結果，ラメラ界面に平行な圧縮変形過程において，界面が転位の生成源と吸収源の両方の役割を果たすことで，層間剝離を生じさせることなく大規模な塑性変形が進行することを確認した．さらに，ラメラ層厚の変化により，弾性座屈によるプロセスに加えて，転位の反応・固着を起点とする複雑な塑性変形プロセスの組み合わせによってキンクが形成・発達する描像が確認された．

セラミックス系ミルフィーユ構造におけるキンク形成のメカニズムとその支配因子を明確化するため，Ti<sub>3</sub>AC<sub>2</sub>系MAX相（A=Si, Al）単結晶を対象に，その塑性変形の素過程を原子シミュレーションにより解析した．その結果，底面に平行な圧子押し込みの変形過程において，底面転位の活動と整列，ならびに層間剝離の協調によるキンク形成の原子スケール描像を明らかにした．また，MAX相の塑性変形過程におけるripplocationの存在と活動様態について示唆を得た．

高分子系ミルフィーユ構造におけるキンク形成のメカニズムとその支配因子を明確化するため，非晶質ポリマーブレンド系を構成する共重合高分子のラメラ状マイクロ相分離構造に注

目し、粗視化粒子に基づくモデル化を実施するとともに、ミルフィーユ構造中のキンク形成過程の解析を行った。その結果、ラメラ積層の面外垂直方向の単軸引張過程において、波打ち (undulation) 不安定の発現からキンク (シェブロン構造) 形成に至る分子鎖レベルの描像を明らかにした。また、構成分子鎖のガラス転移温度との対応関係から、キンク形成が進行する温度条件に関する基礎的知見を獲得した。

## (2) キンク構造電子論解析

Mg 基 LPSO 構造の形成メカニズム、ならびにキンク界面の構造的特徴と化学的性質を明らかにするため、大規模第一原理計算を活用して Mg 中のキンクの原子構造および溶質原子との相互作用を評価した。その結果、キンク界面を形成する刃状転位列が分裂した部分転位芯の近傍において、拡張側に Y 原子、圧縮側に Zn 原子がどちらも 0.2 eV 程度の強さで偏析することを明らかにした。

キンク強化現象を考察・検証する上で重要な転位と溶質原子クラスタ間の相互作用に関する知見を得ることを目的に、大規模第一原理計算を活用して Mg 基 LPSO 構造を対象とした溶質原子クラスタの生成過程を評価した。その結果、当該過程では格子間原子と空孔が自発的に形成され、ほぼ全てのクラスタに格子間原子が含まれることが分かった。また、格子間原子を中心に含むクラスタは自身の形態により周囲の格子ひずみを緩和しており、転位との相互作用は弱いことが分かった。

原子スケールのキンク構造が材料強化に対して与える影響を明らかにすることを目的に、大規模第一原理計算を活用し、Mg-Y-Zn 系 LPSO 構造中で転位が配列したキンク界面に対する原子論的解析を実施した。その結果、空孔濃度が高い状況では転位が空孔を吸収し上昇することで硬質層へと移動する挙動が明らかになった。その状態では転位は運動することができず、軟質層へ移動してきた別の転位をトラップし、最大で数百 MPa 程度の臨界せん断応力を生じることを見出した。

キンク界面が強化に与える影響を明らかにすることを目的に、Mg-Y-Zn 系の 18R 型 LPSO 構造を対象としてキンク界面を導入した原子配置モデルを作成し、第一原理計算で安定構造を導出、さらには応力への応答を調べた。その結果、Y-Zn 析出物クラスタがない場合はキンク界面が容易に移動するのに対し、析出物クラスタがある場合はキンク界面の移動に対する臨界せん断応力が大きく、移動する前にすべりが起こることを見出した。これにより、転位の運動とは異なる変形機構が強化に寄与している可能性が示唆された。

## (3) キンク形成マルチスケール解析

メゾスケールにおけるキンク形成・強化のメカニズム解明を目的に、高次勾配結晶塑性論を導入したメッシュフリー解析手法を新たに構築し、キンクおよびその周辺の変形場および応力場を数値解析によって評価した。その結果、提案手法によりキンクおよびその周辺におけるひずみ勾配場が、連続体力学の枠組みにおいて評価可能となることを確認するとともに、キンク形成・強化のメカニズム解明に向けた強力な数値解析のツールとなり得ることを示した。

多様なキンク形態や境界条件におけるキンク強化を定量的に評価することを目的に、特に、キンク領域と領域外の底面の角度差と流れ応力の上昇の相関について詳細に数値解析を実施した。その結果、検討対象とした全ての形態のキンクに対してキンク強化が発現すること、またキンク強化の度合いはキンク形態に依存することを示し、キンク強化には最適なキンク形態が存在する可能性を明らかにした。

キンク強化に適したキンク形態の模索と種々のキンクがキンク強化に及ぼす影響の定量的検討を目的に、複数のキンク形態がキンク強化に及ぼす影響を定量的に評価するための数値解析を実施した。その結果、幾何学的硬化、格子欠陥のいずれもキンク強化発現の要因であるが、格子欠陥の存在がより重要な因子である可能性を明らかにした。

キンクの空間配置がキンク強化に及ぼす影響を明確化することを目的に、キンクの間隔や寸法がキンク強化に及ぼす影響を定量的に評価するための数値解析を実施した。その結果、キンクが十分に近接することでキンクが単体で存在するときよりも高いキンク強化が得られること、さらにキンク強化はキンク幅の  $1/2$  乗の逆数により定量的に評価できる可能性があらことを明らかにした。

## (4) キンク形成結晶塑性解析

多結晶におけるキンク帯形成機構解明を目的として、Mg 基 LPSO 構造一方向凝固材の圧縮負荷を模擬した結晶塑性有限要素解析を実施した。その結果、単純な加工硬化則を仮定した解析においても、先行研究において実験的に確認されている変形挙動を定性的に再現可能

であることがわかった。また、導入変形機構と臨界分解せん断応力を系統的に変化させた数値解析より、多結晶体におけるキンク帯形成に及ぼす塑性異方性の影響に関する知見が得られた。

組織型ミルフィーユ構造におけるキンク帯形成機構を明らかにするため、積層構造を有する共晶合金（Al/Al<sub>2</sub>Cu 合金および Mg/Mg<sub>12</sub>Al<sub>17</sub> 合金）を対象とした結晶塑性有限要素解析を実施した。孤立試料を対象とする解析に加えて、周期境界条件下における塑性変形挙動について調査した結果、軟質層と硬質層の臨界分解せん断応力比が大きいほど不均一変形挙動が顕著となる傾向が確認された。

ミルフィーユ構造におけるキンク帯形成機構を明らかにすることを目的として、結晶塑性有限要素法を用いて積層構造体の圧縮変形解析を実施し、さらに A02-1 および A02-2 との領域内連携により、計算結果と実験観察結果との対応を詳細に調査した。その結果、特に構成相の強度比が大きな場合において、軟質層のせん断変形と硬質層の剛体回転を主に担うキンク帯形成機構を明らかにした。

#### (5) ミルフィーユ構造の基礎物性の解明

金属系ミルフィーユ構造中の溶質クラスタの形成キネティクスの温度依存性を明らかにすることを目的として、置換型合金中のナノ析出物形成の時間発展を記述する速度論的解析の枠組み、ならびにナノ析出物の核生成挙動を記述するための熱力学的解析の枠組みを構築した。具体的には、溶質原子と空孔間の有効多体原子間ポテンシャル、ならびに空孔を介した原子拡散過程のエネルギー論を第一原理計算により獲得し、得られた情報を動的モンテカルロ法および古典核生成理論モデルに適用することで時空間スケールの拡張を行った。

Mg 基ミルフィーユ構造におけるキンク帯形成メカニズムを議論する上での基礎となるキンク周辺の原子構造を明らかにするため、Mg-Y-Zn 系において溶質元素が積層欠陥上でクラスタを形成し配列する過程を、第一原理計算により評価したエネルギー論に基づく動的モンテカルロ法により解析した。その結果、規則配置を形成する上で整合しない位置に形成された Y<sub>8</sub>Zn<sub>6</sub> クラスタが、一度分解して別の場所で再びクラスタを形成する過程により規則配置を形成する過程が確認され、キンク周辺においても転位の配列に呼応してクラスタが再配列する可能性が高いことが分かった。

A02 班公募研究者・多根正和准教授（大阪大学）、A04 班公募研究者池田賢一准教授（北海道大学）らとの連携のもと、第一原理計算により Ti<sub>3</sub>AC<sub>2</sub> 系 MAX 相（A = Si, Al, In）の弾性定数の全独立成分を明らかにするとともに、構成元素の違いによる硬質層と軟質層の結合特性の変化を電子状態密度や電荷移動量等の指標により同定した。

A02 班公募研究者・椎原良典准教授（豊田工業大学）との連携のもと、第一原理計算により Ti<sub>3</sub>AlC<sub>2</sub> 系 MAX 相の層間の弾性不均質性を解析するとともに、MAX 相の塑性変形を担う底面刃状転位の芯構造および易動性を離散変分 Peierls-Nabarro モデル、分子静力学計算等に基づき定量評価した。さらに、MAX 相の局所弾性に A 元素の差異が与える影響の解明を目的として、Ti<sub>3</sub>AC<sub>2</sub> 構造（A = Al, Ga, In, Si, Ge, Sn）に対して Atoms-in-molecules 解析、ならびに、Crystal-orbital 解析により局所的電子構造に関する情報を抽出して第一原理局所弾性との比較を試みた。族に関しては、A 層における局所弾性と局所電子構造の間に関係を見出した。また、同様の解析を一般化積層エネルギーについても実施して関係の抽出を試みた。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計37件（うち査読付論文 35件 / うち国際共著 4件 / うちオープンアクセス 15件）

1. 著者名 R. Hossain, H. Kimizuka, Y. Shiihara, S. Ogata	4. 巻 209
2. 論文標題 Core structure and Peierls barrier of basal edge dislocations in Ti3AlC2 MAX phase	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 111366-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2022.111366	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 H. Liao, H. Kimizuka, H. Miyoshi, S. Ogata	4. 巻 938
2. 論文標題 Origin of the nucleation preference of coherent and semicoherent nanoprecipitates in Al?Cu alloys based on atomistically informed classical nucleation theory	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Alloys and Compounds	6. 最初と最後の頁 168559-1-13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jallcom.2022.168559	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 M. Itakura, M. Yamaguchi, D. Egusa, E. Abe	4. 巻 64
2. 論文標題 DFT Calculation of High-Angle Kink Boundary in 18R-LPSO Alloy	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Materials Transactions	6. 最初と最後の頁 813-816
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.MT-MD2022010	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 T. Mayama, S.R. Agnew, K. Hagihara, K. Kamura, K. Shiraishi, M. Yamasaki, Y. Kawamura	4. 巻 154
2. 論文標題 -Mg/LPSO (Long-Period Stacking Ordered) phase interfaces as obstacles against dislocation slip in as-cast Mg-Zn-Y alloys	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 International Journal of Plasticity	6. 最初と最後の頁 103294-1-15
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ijplas.2022.103294	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 T. Tokunaga, K. Hagihara, M. Yamasaki, T. Mayama, K. Yamamoto, H. Narimoto, T. Kida, Y. Kawamura, T. Nakano	4. 巻 23
2. 論文標題 Kink-band formation in the directionally-solidified Mg/LPSO two-phase alloys	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials	6. 最初と最後の頁 752-766
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/14686996.2022.2137696	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. Gong, T. Kawasaki, R. Zheng, T. Mayama, B. Sun, K. Aizawa, S. Harjo, N. Tsuji	4. 巻 225
2. 論文標題 Compressive deformation behavior of AZ31 alloy at 21K: an in-situ neutron diffraction study	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Scripta Materialia	6. 最初と最後の頁 115161-1-5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.scriptamat.2022.115161	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 K. Hagihara, T. Tokunaga, K. Yamamoto, M. Yamasaki, T. Mayama, T. Shioyama, Y. Kawamura, T. Nakano	4. 巻 64
2. 論文標題 Unified Understanding of Strengthening Mechanisms Acting in Mg/LPSO Two-Phase Extruded Alloys with Varying LPSO Phase Volume Fraction	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Materials Transactions	6. 最初と最後の頁 720-729
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.MT-MD2022002	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 S. Harjo, W. Gong, K. Aizawa, T. Kawasaki, M. Yamasaki, T. Mayama, Y. Kawamura	4. 巻 64
2. 論文標題 Effect of Extrusion Ratio in Hot-Extrusion on Kink Deformation during Compressive Deformation in an Mg/LPSO Dual-Phase Magnesium Alloy Monitored by In Situ Neutron Diffraction	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Materials Transactions	6. 最初と最後の頁 766-773
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.MT-MD2022004	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 Y. Tadano	4. 巻 64
2. 論文標題 Numerical Investigation of Kink Strengthening Mechanism due to Kink Band in Long-Period Stacking Ordered Magnesium Alloy	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Materials Transactions	6. 最初と最後の頁 1002-1010
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.MT-MD2022006	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 H. Okuda, K. Kinatsu, S. Kurokawa, M. Tabuchi, H. Nitani, H. Kimizuka, S. Inoue, M. Yamasaki, Y. Kawamura	4. 巻 253
2. 論文標題 Nanoclusters in stacking faults in Mg-Y-Zn alloys examined by small-angle X-ray scattering and extended X-ray absorption fine structure analysis	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 118963-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2023.118963	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 R. Hossain, H. Kimizuka, S. Ogata	4. 巻 7
2. 論文標題 Asymmetry in core structure and mobility of basal dislocations in a Ti3SiC2 MAX phase: An atomistic study with machine-learned force fields	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 053608-1-12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.7.053608	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 眞山剛, 只野裕一	4. 巻 61
2. 論文標題 キンク形成とキンク強化の結晶塑性解析	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 まてりあ	6. 最初と最後の頁 558-562
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/materia.61.558	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 H. Liao, H. Kimizuka, A. Ishii, J.-P. Du, S. Ogata	4. 巻 210
2. 論文標題 Nucleation kinetics of the beta'' precipitate in dilute Mg-Y alloys: A kinetic Monte Carlo study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Scripta Materialia	6. 最初と最後の頁 114480-1-4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.scriptamat.2021.114480	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 K. Guan, M. Egami, D. Egusa, H. Kimizuka, M. Yamasaki, Y. Kawamura, E. Abe	4. 巻 207
2. 論文標題 Short-range order clusters in the long-period stacking/order phases with an intrinsic-I type stacking fault in Mg-Co-Y alloys	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Scripta Materialia	6. 最初と最後の頁 114282-1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.scriptamat.2021.114282	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 M. Yamasaki, T. Mayama, T. Matsumoto, K. Hagihara, D. Drozdenko, Y. Kawamura	4. 巻 819
2. 論文標題 Formation of <0001>-rotation-type kink boundary in Mg-Zn-Y alloy with long-period stacking ordered structure	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Materials Science and Engineering: A	6. 最初と最後の頁 141466-1-17
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.msea.2021.141466	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 R. Liu, M. Tane, H. Kimizuka, Y. Shirakami, K. Ikeda, S. Miura, K. Morita, T. S. Suzuki, Y. Sakka, L. Zhang, T. Sekino	4. 巻 41
2. 論文標題 Elastic isotropy originating from heterogeneous interlayer elastic deformation in a Ti3SiC2 MAX phase with a nanolayered crystal structure	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the European Ceramic Society	6. 最初と最後の頁 2278-2289
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jeurceramsoc.2020.11.026	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 君塚肇, 三好宙, 石井明男, 尾方成信	4. 巻 60
2. 論文標題 時効硬化型アルミニウム合金におけるGuinier-Prestonゾーンの核生成の原子論的モデリング	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 あたりあ	6. 最初と最後の頁 467-474
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/materia.60.467	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 K. Shiraishi, T. Mayama, M. Yamasaki, Y. Kawamura	4. 巻 790
2. 論文標題 Enhanced non-linearity during unloading by LPSO phase in as-cast Mg-Zn-Y alloys and slip-dominated non-linear unloading mechanism	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Materials Science and Engineering A	6. 最初と最後の頁 139679-1-14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.msea.2020.139679	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 M. Itakura, M. Yamaguchi, D. Egusa, E. Abe	4. 巻 203
2. 論文標題 Density functional theory study of solute cluster growth processes in Mg-Y-Zn LPSO Alloys	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 116491-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2020.116491	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 Y. Tadano	4. 巻 62
2. 論文標題 Plastic Flow Direction of Polycrystalline Magnesium	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Materials Transactions	6. 最初と最後の頁 88-97
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.MT-M2020262	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 H. Miyoshi, H. Kimizuka, A. Ishii, S. Ogata	4. 巻 11
2. 論文標題 Competing nucleation of single- and double-layer Guinier-Preston zones in Al-Cu alloys	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 4503-1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-021-83920-8	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 Y. Kawano, M.Sato, T. Mayama, M. Mitsuahara, S. Yamasaki	4. 巻 127
2. 論文標題 Quantitative evaluation of slip activity in polycrystalline $\alpha$ -titanium considering non-local interactions between crystal grains	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 International Journal of Plasticity	6. 最初と最後の頁 102638-1-16
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ijplas.2019.12.001	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 Y. Kawano, T. Mayama, M. Mitsuahara, S. Yamasaki, M. Sato	4. 巻 26
2. 論文標題 Generalized slip operation factor considering contribution of secondary slip systems	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Materials Today Communications	6. 最初と最後の頁 102041-1-13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.mtcomm.2021.102041	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 R. Liu, M. Tane, H. Kimizuka, Y. Shirakami, K. Ikeda, S. Miura, K. Morita, T. S. Suzuki, Y. Sakka, L. Zhang, T. Sekino	4. 巻 41
2. 論文標題 Elastic isotropy originating from heterogeneous interlayer elastic deformation in a Ti <sub>3</sub> SiC <sub>2</sub> MAX phase with a nanolayered crystal structure	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the European Ceramic Society	6. 最初と最後の頁 2278-2289
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jeurceramsoc.2020.11.026	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 眞山剛, 大橋鉄也	4. 巻 70
2. 論文標題 Mg基LPSO相におけるキンク帯形成の結晶塑性解析	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 軽金属	6. 最初と最後の頁 167-173
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2464/jilm.70.167	査読の有無 無
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 眞山剛	4. 巻 70
2. 論文標題 一方向ポーラスマグネシウムにおける高エネルギー吸収能発現構	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 軽金属	6. 最初と最後の頁 244-251
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2464/jilm.70.244	査読の有無 無
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 H. Miyoshi, H. Kimizuka, A. Ishii, S. 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 君塚肇	4. 巻 69
2. 論文標題 マグネシウム合金における溶質クラスタの規則配列化の支配因子に関する第一原理解析	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 軽金属	6. 最初と最後の頁 471-478
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2464/jilm.69.471	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 K. Takagi, T. Mayama, Y. Mine, K. Takashima	4. 巻 806
2. 論文標題 Extended ductility due to kink band formation and growth under tensile loading in single crystals of Mg-Zn-Y alloy with 18R-LPSO structure	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Alloys and Compounds	6. 最初と最後の頁 1384-1393
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jallcom.2019.07.344	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 Y. Kawano, M. Sato, T. Mayama, M. Mitsuhashi, S. Yamasaki	4. 巻 127
2. 論文標題 Quantitative evaluation of slip activity in polycrystalline $\alpha$ -titanium considering non-local interactions between crystal grains	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 International Journal of Plasticity	6. 最初と最後の頁 102638-1-16
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ijplas.2019.12.001	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 Tsuyoshi Mayama, Masakazu Tane, Yuichi Tadano	4. 巻 165
2. 論文標題 Superior energy absorption in porous magnesium: Contribution of texture development triggered by intra-granular misorientations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 62-72
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2018.11.037	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 Tsuyoshi Mayama, Masakazu Tane, Yuichi Tadano	4. 巻 1063
2. 論文標題 Crystal plasticity analysis of anisotropic deformation behavior of porous magnesium with oriented pores	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 12047-1-4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/1063/1/012047	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 Yoshiki Kawano, Tetsuya Ohashi, Tsuyoshi Mayama, Masaki Tanaka, Morihiro Sakamoto, Yelm Okuyama, Michihiro Sato	4. 巻 84
2. 論文標題 Development of a EBSD-FEM data conversion interface and the image-based crystal plasticity analysis	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Transactions of JSME	6. 最初と最後の頁 17-00559-1-18
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1299/transjsme.17-00559	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 Yoshiki Kawano, Tetsuya Ohashi, Tsuyoshi Mayama, Ryoji Kondou	4. 巻 146-147
2. 論文標題 Crystal plasticity analysis of change in incompatibility and activities of slip systems in alpha-phase of Ti alloy under cyclic loading	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Mechanical Sciences	6. 最初と最後の頁 475-485
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ijmecsci.2017.09.023	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 Daichi Kishi, Tsuyoshi Mayama, Yoji Mine, Kazuki Takashima	4. 巻 142
2. 論文標題 Crystallographic study of plasticity and grain boundary separation in FeCo alloy using small single- and bi-crystalline specimens	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Scripta Materialia	6. 最初と最後の頁 1-5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.scriptamat.2017.08.012	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 Yuichi Tadano	4. 巻 794
2. 論文標題 Numerical study on bicrystalline micropillar compression using high-order gradient crystal plasticity	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Key Engineering Materials	6. 最初と最後の頁 65-70
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.4028/www.scientific.net/KEM.794.65	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 Tota Niiro, Yuichi Tadano	4. 巻 794
2. 論文標題 Meshfree Analysis of Higher-order Gradient Crystal Plasticity Using Nodal Integration	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Key Engineering Materials	6. 最初と最後の頁 214-219
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.4028/www.scientific.net/KEM.794.214	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 -

〔学会発表〕 計98件 (うち招待講演 27件 / うち国際学会 23件)

1. 発表者名 君塚肇
2. 発表標題 種々の材料系のミルフィーユ構造におけるキンク形成の微視的モデリング
3. 学会等名 金属学会シンポジウム：ミルフィーユ構造の創製とキンク強化：新強化原理として見えてきたこと (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 君塚肇
2. 発表標題 金属系MFSおよびMAX相セラミックスにおけるキンク形成の分子動力学解析
3. 学会等名 令和4年度第二回軽金属学会「LPSO / MFS構造材料研究部会」 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 H. Kimizuka, R. Hossain
2. 発表標題 Atomistic analysis of microscopic mechanisms of kink formation in metallic and ceramic mille-feuille structures
3. 学会等名 The 5th International Symposium on Long-Period Stacking/Order Structure and Mille-Feuille Structure (LPSO/MFS 2022) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 君塚肇, R. Hossain
2. 発表標題 金属・セラミックス系ミルフィーユ構造におけるキンク形成の微視的メカニズムの原子論的解析
3. 学会等名 日本金属学会2022年秋期講演大会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 稲葉智, 君塚肇
2. 発表標題 第一原理計算によるMAX相セラミックスの結合特性とすべり変形挙動の解析
3. 学会等名 日本金属学会2022年秋期講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 M. Itakura, M. Yamaguchi, D. Egusa, E. Abe
2. 発表標題 DFT calculation of kink boundary migration in LPSO structure
3. 学会等名 The 5th International Symposium on Long-Period Stacking/Order Structure and Mille-Feuille Structure (LPSO/MFS 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Y. Tadano
2. 発表標題 Evaluation of Kink Strengthening in LPSO-type Magnesium Alloy Using Higher-order Gradient Crystal Plasticity
3. 学会等名 15th World Congress on Computational Mechanics & 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (国際学会)
4. 発表年 2022年



1. 発表者名 只野裕一, 木村海斗
2. 発表標題 複数のキンクがキンク強化に及ぼす影響の高次勾配結晶塑性モデルによる評価
3. 学会等名 日本金属学会2022年秋期講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 只野裕一, 木村海斗
2. 発表標題 LPSO型マグネシウム合金におけるキンク間隔とキンク強化の相関
3. 学会等名 日本機械学会 M&M2022材料力学カンファレンス
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Y. Tadano, K. Kimura
2. 発表標題 Effect of Kink Band Spacing on Kink Strengthening in LPSO-type Magnesium Alloy
3. 学会等名 The 5th International Symposium on Long-Period Stacking/Order Structure and Mille-Feuille Structure (LPSO/MFS 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 眞山剛, 萩原幸司, 只野裕一
2. 発表標題 ミルフィーユ構造体におけるキンク形成と後続負荷挙動に関する結晶塑性解析
3. 学会等名 軽金属学会第142回春期大会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 眞山剛
2. 発表標題 材料と構造の異方性が重畳した弾塑性挙動の連続体解析
3. 学会等名 第2回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 眞山剛
2. 発表標題 結晶塑性有限要素法による軽金属の不均一変形解析
3. 学会等名 塑性加工学会東関東支部第66回技術懇談会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 眞山剛，秋原幸司，江草大佑，阿部英司
2. 発表標題 ミルフィューク構造体のキンク帯形成における変形/回転機構の役割
3. 学会等名 日本金属学会2022年秋期講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 眞山剛
2. 発表標題 積層構造体の弾塑性変形に関する数値的研究
3. 学会等名 日本材料学会北海道支部第2回学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 眞山剛
2. 発表標題 マグネシウム合金の変形機構解明に向けた連続体解析
3. 学会等名 軽金属学会 国際連携を見据えたマグネシウム・チタン若手研究会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 T. Mayama, K. Hagihara, D. Egusa, E. Abe
2. 発表標題 Crystal plasticity analysis of kink band formation in Mille-feuille structure
3. 学会等名 The 5th International Symposium on Long-Period Stacking/Order Structure and Mille-Feuille Structure (LPSO/MFS 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 北垣展章, 椎原良典
2. 発表標題 第一原理応力計算によるMAX相Ti3AC2 (A = Al, Ga, In, Si, Ge, Sn)の局所弾性定数計算
3. 学会等名 第32回日本MRS年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 野村泰隆, 君塚肇
2. 発表標題 Al-Mg-Si合金の時効過程における溶質規則化の競合関係に関する第一原理解析
3. 学会等名 日本金属学会2022年春季講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 H. Liao, 三好宙, 君塚肇, 石井明男, 尾方成信
2. 発表標題 Nucleation preference of coherent and semi-coherent nanoprecipitates in Al-Cu alloys based on atomistically-informed classical nucleation theory
3. 学会等名 日本金属学会2022年春季講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 T. Mayama, S. R. Agnew, S. Takayama, S. Morooka, W. Gong, S. Harjo, K. Hagihara, M. Yamasaki, Y. Kawamura
2. 発表標題 Estimation of critical resolved shear stress for basal slip system of $\alpha$ -Mg and LPSO phases in as-cast Mg94Zn2Y4 alloy
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2021 (MRM2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 君塚肇
2. 発表標題 第一原理計算に基づいた合金の時効析出過程の原子論的モデリング
3. 学会等名 マテリアルセミナー (東京大学マテリアル工学専攻) (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 野村泰隆, 君塚肇
2. 発表標題 原子論的モンテカルロ法によるAl-Mg-Si合金の時効過程における短範囲規則構造の予測的評価
3. 学会等名 軽金属学会第141回秋期大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 野村泰隆, 湯川宏, 君塚肇
2. 発表標題 第一原理計算に基づいたAl-Mg-Si合金における溶質原子クラスターの形成と安定性に関する解析
3. 学会等名 第31回材料フォーラムTOKAI
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 稲葉智, 湯川宏, 君塚肇
2. 発表標題 原子シミュレーションによるMAX相セラミックスのすべり変形過程の評価
3. 学会等名 第31回材料フォーラムTOKAI
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 眞山剛, 住友祐元, 萩原幸司
2. 発表標題 層状構造体のキンク形成に及ぼす塑性異方性の影響
3. 学会等名 日本金属学会2021年秋期講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 只野裕一, 嘉村大二郎
2. 発表標題 高次勾配結晶塑性メッシュフリー法によるキンク強化機構解明へのアプローチ
3. 学会等名 日本金属学会2021年秋期講演大会(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 君塚肇
2. 発表標題 原子シミュレーションに基づく金属系ナノラメラ構造のモデル化と変形素過程の解析
3. 学会等名 日本金属学会2021年秋期講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 T. Mayama, K. Hagihara, T. Ohashi, Y. Mine, M. Yamasaki, Y. Kawamura
2. 発表標題 Numerical Evaluation of Kink Banding in Mg-based LPSO Single Phase Alloy
3. 学会等名 12th International Conference on Magnesium Alloys and their Applications (Mg2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Y. Tadano, D. Kamura
2. 発表標題 Higher-order gradient crystal plasticity analysis of LPSO-structured magnesium using meshfree approach
3. 学会等名 12th International Conference on Magnesium Alloys and their Applications (Mg2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 M. Itakura, M. Yamaguchi, D. Egusa, E. Abe
2. 発表標題 Density functional theory study of solute cluster growth processes in Mg-Y-Zn LPSO alloys
3. 学会等名 12th International Conference on Magnesium Alloys and their Applications (Mg2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Y. Tadano, D. Kamura
2. 発表標題 Higher-order gradient crystal plasticity analysis of stress field around kink band
3. 学会等名 International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials 2021 (THERMEC'2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 野村泰隆, 湯川宏, 君塚肇
2. 発表標題 Al-Mg-Si合金における溶質原子規則化のモンテカルロ解析
3. 学会等名 日本材料学会第6回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 稲葉智, 湯川宏, 君塚肇
2. 発表標題 結合次数ポテンシャルを活用したTi3AlC2単結晶の塑性変形過程に関する原子論的解析
3. 学会等名 日本材料学会第6回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 眞山剛, 住友祐元, 萩原幸司
2. 発表標題 圧縮負荷を受けるAl/Al2Cu共晶合金におけるキンク形成機構に関する結晶塑性解析
3. 学会等名 軽金属学会第140回春期大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 君塚肇
2. 発表標題 原子シミュレーションに基づく結晶材料の塑性変形素過程の解析
3. 学会等名 日本金属学会2021年春期講演大会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 君塚肇
2. 発表標題 MAX相セラミックスおよび高分子ラメラ相におけるキンク形成過程の分子動力学解析
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 君塚肇
2. 発表標題 第一原理に基づいたアルミニウム合金中のナノ析出物形成のマルチスケールモデリング
3. 学会等名 日本材料学会マルチスケール材料力学部門第69期第2回部門委員会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 君塚肇
2. 発表標題 高分子系およびセラミックス系ミルフィーユ構造のキンク形成における変形素過程の微視的解析
3. 学会等名 日本金属学会2020年秋期講演大会（招待講演）
4. 発表年 2020年



1. 発表者名 多根正和, 劉茹霞, 君塚肇, 白紙悠之, 池田賢一, 三浦誠司, 森田孝治, 鈴木達, 目義雄, 関野徹
2. 発表標題 Ti <sub>3</sub> SiC <sub>2</sub> MAX相単結晶の弾性特性
3. 学会等名 日本金属学会2020年秋期講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 只野裕一, 嘉村大二郎, 萩原世也
2. 発表標題 キンク帯内外の方位差とキンク強化の相関に関する高次勾配結晶塑性解析
3. 学会等名 第25回計算工学講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 D. Kamura, Y. Tadano, S. Hagihara
2. 発表標題 Higher-order gradient crystal plasticity analysis of plastic deformation around kink band
3. 学会等名 3rd International Conference on Computational Engineering and Science for Safety and Environmental Problems (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 眞山剛, 白石一馬, 山崎倫昭, 河村能人
2. 発表標題 粒間 / 粒内不均一変形に起因するLPSO単相合金における除荷時の非線形挙動
3. 学会等名 日本金属学会2020秋期講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 平安山 涼, 山添 恵介, 佐藤 悠治, 新里 秀平, 石井 明男, 君塚 肇, 尾方 成信
2. 発表標題 加速分子動力学法を用いたマグネシウムにおける双晶変形の温度・応力依存性解析
3. 学会等名 日本材料学会第4回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 君塚 肇
2. 発表標題 固体材料分野における古典分子動力学法の基礎と応用
3. 学会等名 2019年度計算科学ハンズオンセミナー（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Kimizuka, H. Miyoshi, A. Ishii, S. Ogata
2. 発表標題 Ab-initio based multiscale modeling of formation kinetics of nano-precipitates in Al-Cu alloys
3. 学会等名 The 6th Korea Multi-scale Mechanics Symposium (KMSM2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Kimizuka
2. 発表標題 Undulation instability and kink formation of layered block copolymers: A coarse-grained molecular dynamics study
3. 学会等名 The 10th International Conference on Auxetics and Other Materials and Models with "Negative" Characteristics and 15th International Workshop on Auxetics and Related Systems (Auxetics 2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 君塚 肇
2. 発表標題 高分子ラメラ構造における微視的座屈とシェブロン構造形成の粗視化分子動力学解析
3. 学会等名 日本金属学会研究会No.82「微小領域の力学特性評価とマルチスケールモデリング」
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 君塚 肇
2. 発表標題 高分子系ミルフィーユ構造におけるキンク形成の粗視化分子モデリング
3. 学会等名 日本金属学会2019年秋期講演大会（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 君塚 肇
2. 発表標題 ブロック共重合体ラメラ相の変形異方性とキンク形成の粗視化分子動力学計算
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会・共催シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 木下 侑也, 岩井 佑樹, 石井 明男, 君塚 肇, 尾方 成信
2. 発表標題 分子動力学法を用いたマグネシウム中の{11-21}双晶の形成過程の解析
3. 学会等名 日本機械学会関西学生会2019年度学生員卒業研究発表講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 名田 巧, 平安山 涼, 石井 明男, 君塚 肇, 尾方 成信
2. 発表標題 無拡散変態の変態経路探索の効率化のためのdimer法の改良
3. 学会等名 日本機械学会関西学生会2019年度学生員卒業研究発表講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 中村 淳平, 三好 宙, 石井 明男, 君塚 肇, 尾方 成信
2. 発表標題 高分子鎖の形態変化に対する加速分子動力学手法の検討
3. 学会等名 日本機械学会関西学生会2019年度学生員卒業研究発表講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 板倉充洋, 山口正剛
2. 発表標題 マグネシウム系LPS0 合金析出物クラスタ中の格子間原子の安定性
3. 学会等名 軽金属学会第137回秋期大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 板倉充洋, 山口正剛
2. 発表標題 Y8Zn6クラスタ中の格子間原子の安定性解析
3. 学会等名 日本金属学会2019年秋期講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 只野裕一, 嘉村大二郎, 萩原世也
2. 発表標題 キンク帯が導入されたLPSO相に対する高次勾配結晶塑性解析
3. 学会等名 第68期日本材料学会学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 只野裕一, 嘉村大二郎, 萩原世也
2. 発表標題 高次勾配結晶塑性メッシュフリー法によるキンク帯周辺の応力場解析
3. 学会等名 第24回計算工学講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 只野裕一, 嘉村大二郎
2. 発表標題 LPSO型マグネシウム合金のキンク形状が巨視的材料応答に及ぼす影響
3. 学会等名 日本金属学会2019年秋期講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 只野裕一, 嘉村大二郎
2. 発表標題 LPSO型マグネシウム合金におけるキンク形態が巨視的材料挙動に及ぼす影響
3. 学会等名 M&M2019材料力学カンファレンス
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Tadano, D. Kamura
2. 発表標題 Higher-order gradient crystal plasticity analysis of magnesium including kink band
3. 学会等名 7th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Mayama, M. Tane, Y. Tadano
2. 発表標題 Underlying deformation mechanism for high energy absorption capability in porous magnesium with oriented pores: A crystal plasticity finite element study
3. 学会等名 ICMM6 (International Conference on Material Modelling) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Mayama, M. Tane, Y. Tadano
2. 発表標題 Influence of texture on energy absorption capability in porous magnesium with oriented pores
3. 学会等名 SIPS2019 (Sustainable Industrial Processing Summit & Exhibition) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 眞山剛, 高山隼太郎, 諸岡聡, G. Wu, S. Harjo, 山崎倫昭, 河村能人
2. 発表標題 複相マグネシウム合金における格子ひずみ発達機構
3. 学会等名 日本機械学会M&M2019材料力学カンファレンス
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 眞山剛, 白石一馬, 山崎倫昭, 河村能人
2. 発表標題 強い塑性異方性を持つ金属材料におけるパウシンガー効果の発現機構
3. 学会等名 日本機械学会M&M2019材料力学カンファレンス
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 高山隼太郎, 眞山剛, 諸岡聡, G. Wu, S. Harjo, 山崎倫昭, 河村能人
2. 発表標題 -Mg/LPSO二相合金鑄造材における格子ひずみ発達機構
3. 学会等名 日本金属学会2019年秋期講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 眞山剛
2. 発表標題 結晶のすべりと回転に起因する格子ひずみ発達の数値的評価
3. 学会等名 日本金属学会2019年秋期講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 眞山剛
2. 発表標題 MgおよびMg合金の変形挙動に関する結晶塑性解析
3. 学会等名 日本金属学会2019年秋期講演大会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 眞山剛
2. 発表標題 マグネシウムにおける粒内/粒間不均一変形の数値的評価
3. 学会等名 高性能マグネシウム合金創成加工研究会第75回講演会（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Kimizuka and S. Ogata
2. 発表標題 Role of Intra- and Intercluster Interactions in Stabilization of Solute-Enriched Layers in Mg-based LPSO Phases: Towards Atomic Modeling of Mille-Feuille Structures
3. 学会等名 The 4th International Symposium on Long-Period Stacking Ordered Structure and Mille-Feuille Structure (LPSO2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Mayama
2. 発表標題 Crystal plasticity finite element analysis of kink band formation in directionally solidified crystals of Mg-based LPSO alloy
3. 学会等名 The 4th International Symposium on Long-Period Stacking Ordered Structure and Mille-Feuille Structure (LPSO2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 君塚肇
2. 発表標題 材料の強度・変形機構の解明に向けた原子・電子論的シミュレーションの活用
3. 学会等名 日本金属学会2018年秋期講演大会・公募シンポジウムS8「材料変形素過程のマルチスケール解析 計算と実験の融合を目指して」(招待講演)
4. 発表年 2018年



1. 発表者名 板倉充洋, 山口正剛
2. 発表標題 転位列への固溶元素析出の第一原理計算によるモデル化
3. 学会等名 日本金属学会2019年春期講演大会・公募シンポジウムS1「ミルフィーユ構造の材料科学II」(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 市岡航平, 三好宙, 石井明男, 君塚肇, 尾方成信
2. 発表標題 第一原理計算に基づくTi-V合金のマルテンサイト変態機構に関する原子論的解析
3. 学会等名 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
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 眞山剛, 萩原幸司, 只野裕一, 大橋鉄也
2. 発表標題 LPSO構造におけるキンク帯形成過程の結晶塑性解析
3. 学会等名 軽金属学会第134回春期大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 白石一馬, 眞山剛, 山崎倫昭, 河村能人
2. 発表標題 LPSO型Mg-Zn-Y合金における除荷時の非線形変形
3. 学会等名 軽金属学会第134回春期大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山口正剛, 板倉充洋
2. 発表標題 一軸圧縮したLPSOマグネシウム合金の一般化積層欠陥エネルギー低下
3. 学会等名 軽金属学会第134回春期大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 君塚肇, 尾方成信
2. 発表標題 第一原理計算に基づく単結晶の非線形弾性構成関係の評価
3. 学会等名 日本計算工学会第23回計算工学講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 K. Shiraishi, T. Mayama, M. Yamasaki, Y. Kawamura
2. 発表標題 Inelastic unloading behavior of dual phase Mg-Zn-Y alloys with LPSO phase
3. 学会等名 Mg2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Mayama, M. Tane, Y. Tadano
2. 発表標題 Crystal plasticity analysis of anisotropic deformation behavior of porous magnesium with oriented pores
3. 学会等名 Numisheet2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 君塚肇, 松原和輝, 尾方成信
2. 発表標題 MgにおけるI1型積層欠陥を起点とした変形機構に関する分子動力学解析
3. 学会等名 日本金属学会2018年秋期講演大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山添恵介, 佐藤悠治, 石井明男, 君塚肇, 尾方成信
2. 発表標題 原子シミュレーションによるマグネシウム{10-12}変形双晶の核生成過程の応力・温度依存性の解析
3. 学会等名 日本金属学会2018年秋期講演大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 板倉充洋, 山口正剛
2. 発表標題 LPSO型マグネシウム合金の長周期積層欠陥エネルギー
3. 学会等名 日本金属学会2018年秋期講演大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 眞山剛, 萩原幸司, 只野裕一, 大橋鉄也
2. 発表標題 LPSO構造多結晶体におけるキンク帯発達過程の結晶塑性解析
3. 学会等名 日本金属学会2018年秋期講演大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高木康介, 眞山剛, 峯洋二, 高島和希
2. 発表標題 Mg-Zn-Y合金LPSO相におけるキンク変形帯およびすべり帯形成の結晶方位依存性
3. 学会等名 日本金属学会2018年秋期講演大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 板倉充洋, 山口正剛
2. 発表標題 純マグネシウム系におけるキンクの第一原理計算
3. 学会等名 軽金属学会第135回秋期大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 眞山剛, 高木康介, 峯洋二, 高島和希
2. 発表標題 単軸引張負荷を受けるLPSO構造単結晶における変形帯形成
3. 学会等名 軽金属学会第135回秋期大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 福井浩毅, 君塚肇, 尾方成信
2. 発表標題 マグネシウム合金中の底面・柱面すべり過程に対する固溶原子と積層欠陥の影響に関する原子論的解析
3. 学会等名 日本機械学会第31回計算力学講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 只野裕一, 萩原世也
2. 発表標題 高次勾配結晶塑性メッシュフリー解析における数値積分手法に関する検討
3. 学会等名 日本機械学会第31回計算力学講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 眞山剛
2. 発表標題 結晶塑性有限要素法によるHCP双結晶の格子ひずみ解析
3. 学会等名 日本機械学会第31回計算力学講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 H. Miyoshi, A. Ishii, H. Kimizuka, S. Ogata
2. 発表標題 Atomistic kinetic Monte Carlo modeling of the formation of G.P. Zone in Al-Cu alloy
3. 学会等名 Materials Research Society (MRS) 2018 Fall Meeting & Exhibit (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Tadano
2. 発表標題 Numerical Study on Bicrystalline Micropillar Compression Using High-order Gradient Crystal Plasticity
3. 学会等名 14th Asia-Pacific Symposium on Engineering Plasticity and Its Applications (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Niino, Y. Tadano
2. 発表標題 Meshfree Analysis of Higher-order Gradient Crystal Plasticity Using Nodal Integration
3. 学会等名 14th Asia-Pacific Symposium on Engineering Plasticity and Its Applications (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 眞山剛, 高木康介, 峯洋二, 高島和希
2. 発表標題 底面すべり系が支配的に活動する単結晶における変形帯形成
3. 学会等名 日本機械学会M&M2018材料力学カンファレンス
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 大依加奈, 三好宙, 石井明男, 君塚肇, 尾方成信
2. 発表標題 高分子の緩和挙動に関する加速分子動力学解析
3. 学会等名 日本機械学会関西学生会平成30年度学生員卒業研究発表講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 黒崎亮介, 山添恵介, 石井明男, 君塚肇, 尾方成信
2. 発表標題 原子シミュレーションに用いる結晶方位解析手法の開発
3. 学会等名 日本機械学会関西学生会平成30年度学生員卒業研究発表講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 君塚肇, 福井浩毅, 尾方成信
2. 発表標題 Mg中の<a>転位の底面・柱面間の交差すべり機構に関する原子論的解析
3. 学会等名 日本金属学会2019年春季講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 市岡航平, 君塚肇, 尾方成信
2. 発表標題 Ti-V合金におけるマルテンサイト変態の原子論的機構に関する第一原理解析
3. 学会等名 日本金属学会2019年春季講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 眞山剛, 萩原幸司, 上山涼平, 只野裕一
2. 発表標題 LPSO-DS結晶におけるキンク形成におよぼす活動変形機構の影響
3. 学会等名 日本金属学会2019年春季講演大会
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 河村能人, 千野靖正監修, 只野裕一, 眞山剛他	4. 発行年 2020年
2. 出版社 シーエムシー出版	5. 総ページ数 338
3. 書名 マグネシウム合金の最先端技術と応用展開	

〔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	板倉 充洋  (Itakura Mitsuhiro)  (90370353)	国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター・研究主幹   (82110)	
研究分担者	只野 裕一  (Tadano Yuichi)  (00346818)	佐賀大学・理工学部・准教授   (17201)	

	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
研究協力者	眞山 剛  (Mayama Tsuyoshi)  (40333629)	熊本大学・先進マグネシウム国際研究センター・准教授   (17401)	
研究協力者	山口 正剛  (Yamaguchi Masatake)  (50360417)	国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター・研究主幹   (82110)	
研究協力者	椎原 良典  (Shiihara Yoshinori)  (90466855)	豊田工業大学・工学研究科・准教授   (33924)	

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