

南 大地^{1,2}, 杉山 弘輝², 松井 和己², レービガー ハンネス², 多々見 純一²(¹ 神奈川県立産業技術総合研究所、 ² 横浜国立大学)

無機材料/シミュレーション

概要

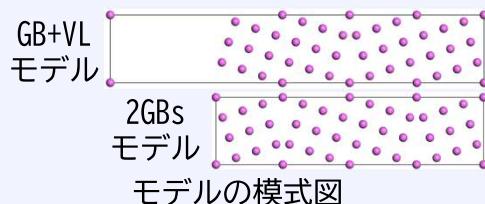
本内容は、日本機械学会M&M材料力学カンファレンス(2025年11月)にて発表したもののが筆修正版です。
本研究は、JST CREST JPMJCR2192 の支援を受けたものです。

背景

粒界特性は多結晶材料の力学的特性に大きく影響を及ぼす。実材料の力学特性は複数の因子の相互作用による結果であるが、第一原理計算では粒界による影響を評価可能である。第一原理計算では2つの粒界を含むモデル(2GBsモデル)が粒界エネルギーの評価に広く用いられている。表面系で使われる真空層を含むモデルに粒界を導入(GB+VLモデル)し表面の影響を排除することができればモデルの原子数を減らすことができ、計算を効率化可能であると考えられる。

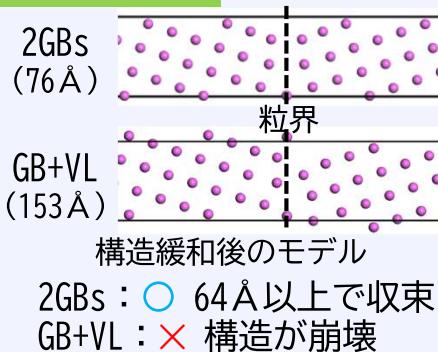
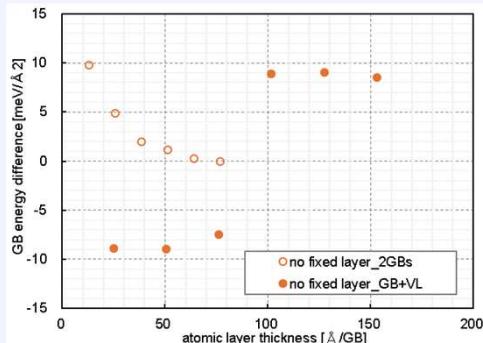
目的 第一原理計算による粒界エネルギー評価手法の効率化

結果 GB+VLモデルを用いた粒界エネルギー評価手法を確立

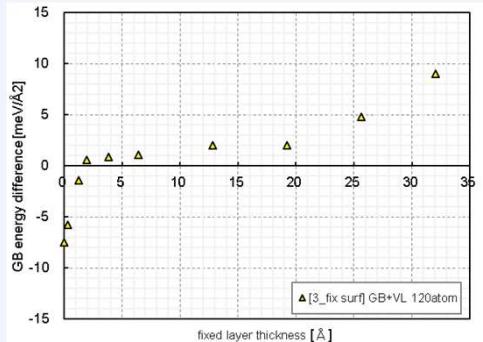
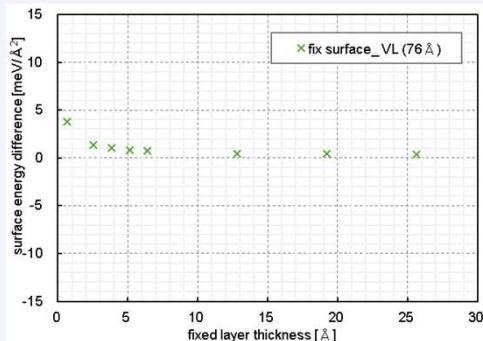


結果

原子層厚さの検討(固定層無し)



固定層厚さの検討(原子層厚さ：76 Å/GB)



⇒最適条件：原子層厚さ64 Å以上、固定層6.4 Å

特徴・優位性

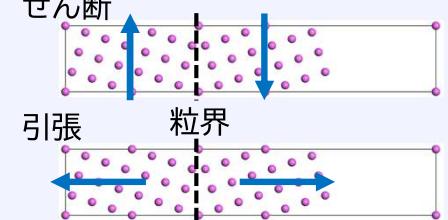
計算効率の向上

GB+VLモデルでは2GBsモデルと比較してモデル内の原子数を削減可能



今後の展望

- 第一原理引張/せん断変形シミュレーションの実施
せん断



- 同様の手法を他の系に適用

