

# 微視構造を考慮した多結晶材料の变形・破壊挙動の解析

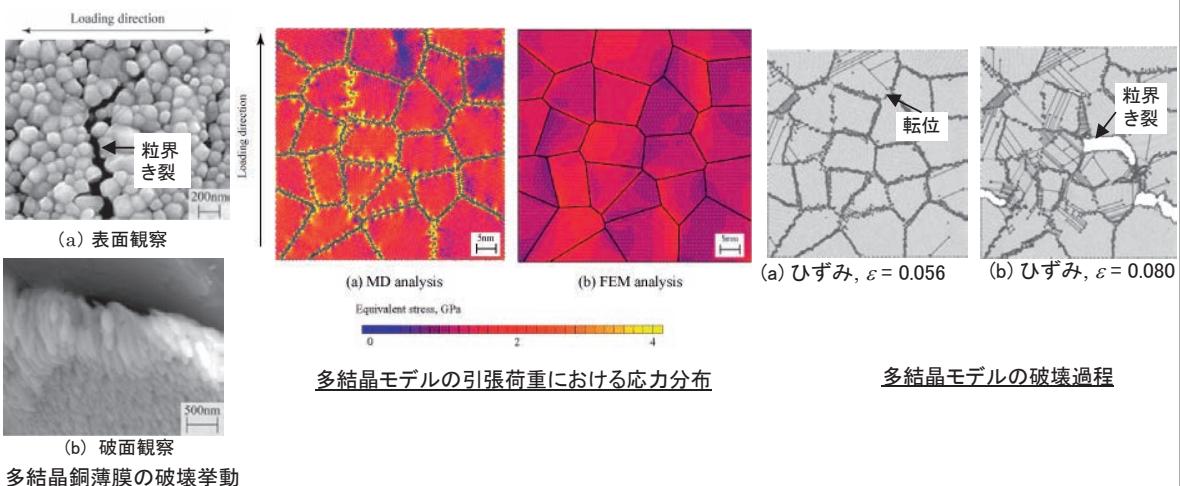
**Keyword:** 数値解析、原子シミュレーション、分子動力学、有限要素法

マイクロナノオーダーの材料組織構造をモデル化とともに、変形・破壊シミュレーション手法を開発し、微視構造が変形・破壊挙動に及ぼす影響についての評価を行うとともに、マイクロナノ破壊における微小欠陥の影響を明らかにした。

せい性材料の破壊では、材料の微視構造単位をマイクロき裂の発生と伝ばとして捉え、マイクロき裂の発生挙動をモデル化することによって、破壊のシミュレーションが可能な解析手法を独自に開発した。

せい性材料として単結晶シリコン、延性材料として単結晶銅を対象に、分子動力学法を用いて、破壊挙動に及ぼす微小欠陥の影響を明らかにするとともに、破壊基準を新たに提案した。

## 研究の概要



多結晶銅薄膜の破壊挙動

## アピールポイント

### ・特筆すべき研究ポイント:

多結晶薄膜の力学的特性は、実験的手法やX線回折法による応力評価が主であり、解析的な手法では有限要素法による弾性解析が一部行われているのみである。分子動力学法ではランダム方位の解析例はあるものの、薄膜で重要な配向材の解析例はほとんどなされていない。本研究の特色は、薄膜材料の変形・破壊挙動を原子運動の観点から明らかにしたことである。

### ・新規研究要素: (世界初あるいは日本初など)

多結晶薄膜の変形・破壊挙動の基礎的知見を得ることができ、高信頼性の薄膜構造要素の設計指針になることや、粒界の構造制御による高強度化を行うことが可能となった。

### ・従来技術との差別化要素・優位性:

多結晶薄膜は、すでに半導体デバイスを始め、マイクロマシン、MEMS等への適用が進められている。デバイス設計の際には、損傷の評価が重要であるものの、転位運動を伴う薄膜の変形には不明な点が多い。本研究は、机上計算による合理的な、微小構造体の最適設計に極めて有益な情報を与え、薄膜の変形・破壊特性の基礎的知見が得られる。



藤井 朋之

学術院工学領域  
機械工学系列  
准教授

## ■ 技術相談に応じられる関連分野

- 各種材料(金属、プラスチック、セラミック)の破壊および疲労、強度評価、破壊機構解明
- マルチスケールアナリシスの基づく材料設計
- 応力解析と材料強度学に基づく構造設計

## ■ その他の研究紹介

- 金属箔・膜材の強度評価試験法の確立と破壊機構の解明
- 塑性変形場に発生・進展する応力腐食割れ挙動の解明
- セラミックスー金属系生体適合複合材料・傾斜機能材料の開発と強度評価に関する研究
- 粒子分散複合材料の損傷・粒子寸法効果を考慮した力学モデルおよびナノ粒子分散複合材料の開発