

金属材料における粒界近傍での変形と力学応答のナノスケール解析

譯田 真人*, **

Nanoscale Analyses of the Deformation and Mechanical Response near Grain boundary in Metals and Alloys

by

Masato WAKEDA*, **

Key words: Grain boundary, Metals, Dislocation, Design, Atomistic simulation, Nanoscale deformation

1 緒 言

粒界や異相界面、双晶界面などの金属材料中の界面は、金属材料の微視的変形機構、破壊機構を介して巨視的な力学特性に影響を与える。粒界や析出物などの材料欠陥は、塑性変形の一つの素過程である転位運動を阻害することで材料強度の向上に寄与する。一方、粒界などの金属界面は破壊現象の起点ともなり、これは水素環境下で使用する金属材料や超高強多結晶材料などでも重要な問題となっている。さらに高温環境下では、金属粒界で原子拡散に起因する粒界すべりが生じ、これが高温での力学特性の影響因子となる。このように粒界などの金属材料中の界面は巨視的な強度や破壊に重要な影響を及ぼす。界面に関する多くの実験、計算、理論研究がこれまでに行われ、界面特性や界面が巨視的な力学特性に及ぼす影響が議論されてきた¹⁾⁴⁾。一方、界面近傍のナノスケールでの塑性変形、破壊に関しては未だに不明な点が多い。これはナノスケールで生じる変形、破壊を実験で直接的に観測することが容易ではなく、シミュレーションや理論研究においても網羅的な解析が容易でないことが一因である。金属材料の粒界を例にすると、傾角粒界、ねじり粒界、ランダム粒界、また小角粒界、大角粒界、さらには構成元素、偏析元素など、ナノスケールの力学応答に影響を与える幾何学的因子・化学的因子は多数あり、これら因子の影響を個別に解明することは容易ではない。

金属材料の巨視的な力学特性は、様々な空間階層に存在する格子欠陥と変形素過程の影響を受ける。その中でも特にナノスケールの変形現象は実験的アプローチが容易ではない。筆者らは金属材料の界面特性と界面近傍のナノスケールで生じる塑性変形、破壊現象に注目し、界面を活用した金属材料の特性改善に貢献できる知見獲得を目指している。偏析元素の影響により金属材料界面での割れに要するエネルギーは変化する。同様に変形過程での流動応力も偏析元素に依存することが報告さ

れている⁵⁾。さらには偏析元素が界面での転位伝ばを促進することで延性能が改善できるとの実験報告もある⁶⁾。これらの報告は、界面の構造を設計・制御することで巨視的な力学特性の改善につながる可能性を示している。界面は金属に限らず広範な材料の種々の特性に影響を与える重要な存在である。本稿では金属粒界近傍での変形と力学応答に関するナノスケール解析について、原子シミュレーションを主として紹介する。

2 ナノインデンテーションによる粒界近傍での塑性変形解析

金属粒界において粒界をはさむ一方の粒内から隣接粒内への変形伝ばは、重要な強化機構である粒界強化とも関係する。これまで変形伝ばの影響因子について多くの議論がなされてきた⁷⁾¹¹⁾。粒界における変形伝ばの一般的な理解は次のとおりである。パイルアップと呼ばれる複数の転位が粒界付近の粒内で蓄積する現象によって大きな応力集中が発生する。その応力が駆動力となり粒界または隣接粒内の粒界近傍に存在する転位源から隣接粒内に転位が生じる。あるいはパイルアップした転位集団の先頭転位が応力集中により隣接粒に伝ばする。これまで実験、シミュレーション、そして理論によって粒界種と変形伝ばの関係について議論が行われてきた。一方、変形伝ばの研究は FCC 金属が中心であり、実験の知見および影響因子に関する議論は BCC 金属では少ない。

筆者らはナノ力学試験、TEM 観察、原子論計算による連携的な解析より、BCC 鉄粒界における変形伝ばの支配因子について調べた¹²⁾。粒界近傍におけるナノスケールでの変形挙動を実験から理解するためにはナノ力学試験が有効である。ナノインデンテーションはナノ力学試験の一つであり、転位の発生と進展、さらにその時の荷重-変位関係を得ることができる¹³⁾。ここでは粒界近傍でのナノインデンテーションによって転位を発生させ、

+ 原稿受理 令和6年2月13日 Received Feb. 13, 2024 ©2024 The Society of Materials Science, Japan

* 正 会 員 物質・材料研究機構構造材料研究センター 〒305-0047 つくば市千現, Research Center for Structural Materials, National Institute for Materials Science, Sengen, Tsukuba, 305-0047

** JSTさきがけ 〒332-0012 埼玉県川口市本町, PRESTO, Japan Science and Technology Agency (JST), Honcho, Kawaguchi, Saitama, 332-0012

転位と粒界の相互作用の詳細を荷重—変位関係、および変形後の試料断面の TEM 観察から調査した。

ここでは $\Sigma 9\{221\}$ と $\Sigma 9\{114\}$ という2つの粒界を対象としている。これらの粒界は $\langle 110 \rangle$ 方向を回転軸とする傾角粒界であり、原子シミュレーションによる評価では2つの粒界は同程度の粒界エネルギーをもつ。押し込みの中心は粒界から約 $1 \mu\text{m}$ 離れた位置であり、押し込みの途中で粒界に及ぶ塑性変形領域が生じる。本ナノ力学試験では、押し込みを行った粒の隣接粒内で生じる塑性変形挙動が2つの粒界種で異なる結果となった。 $\Sigma 9\{114\}$ では隣接粒側の粒界近傍で塑性変形が生じたことを示す表面形状変化が生じていた。ナノインデンテーションを行った後の試験片断面の TEM 観察結果を図1に示す。TEM 観察結果でも、 $\Sigma 9\{114\}$ では隣接粒側に塑性変形が生じている一方、 $\Sigma 9\{221\}$ では顕著な塑性変形は観察されていない。

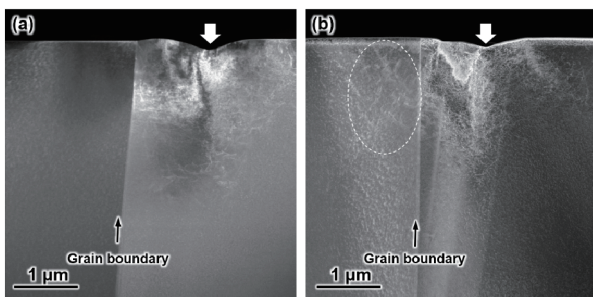


図1 粒界近傍でのナノインデンテーション後の断面の TEM 観察結果¹²⁾。(a) $\Sigma 9\{221\}$ と(b) $\Sigma 9\{114\}$ 。

荷重—変位関係においても2つの粒界で相違が存在する。 $\Sigma 9\{114\}$ では荷重—変位関係の傾きが押し込み過程で大きく変化しない一方、 $\Sigma 9\{221\}$ では傾きが押し込み過程で顕著に大きくなる。傾きが大きくなることは変形抵抗の増加を意味する。押し込み過程で塑性域が粒界まで到達したとき、粒界で変形伝ばが容易に生じる場合には、荷重—変位関係の傾きが大きく変化しないのに対して、粒界で変形の伝ばが生じない場合には、変形抵抗が増加する。この荷重—変位関係の結果は、図1の TEM 観察結果とも一致しており、ナノ力学試験の結果は $\Sigma 9\{221\}$ と $\Sigma 9\{114\}$ では粒界における変形伝ば挙動が異なることを示している。

2つの粒界近傍で押し込みをしたときに何が生じるか、原子論計算から得られる情報を述べる。経験的ポテンシャルに基づく原子論計算より $\Sigma 9\{221\}$ と $\Sigma 9\{114\}$ の2つの粒界モデルに対して、粒界近傍でのナノインデンテーション解析を行う。ここでは原子構造の緩和を共役勾配法で行っており温度零ケルビンの解析となる。原子論計算においても押し込み過程で、弾性変形の後、転位生成とその転位の進展による塑性変形が観察される。また荷重—変位関係において転位の発生と進展による荷重ドロップが観察されており、塑性変形挙動と力学応答は互い

に対応する。本原子論計算において、押し込み荷重の増大により発生した転位がすべり運動し最終的に転位は粒界に吸収されたが、吸収された転位が隣接粒側に伝ばする、あるいは粒界から隣接粒内に転位が発生する様子は見られなかった。

原子論計算においても $\Sigma 9\{221\}$ と $\Sigma 9\{114\}$ では粒界—転位反応が異なる。 $\Sigma 9\{221\}$ では主としてらせん転位が、 $\Sigma 9\{114\}$ では主として刃状転位が粒界に向かって運動し最終的に粒界と相互作用する。これは押し込み粒の結晶方位と応力状態から計算される最大せん断応力方向から説明できる。 $\Sigma 9\{221\}$ と $\Sigma 9\{114\}$ では回転軸 $\langle 110 \rangle$ に対して互いに 90° 回転させた方位関係にある。図2は押し込みによって発生した転位が粒界に吸収された後の粒界での変位を可視化したものである(押し込み側の結晶粒と粒界のみを可視化している)。 $\Sigma 9\{221\}$ では主としてらせん成分が吸収されるため直線状の変位が粒界に生じている一方、 $\Sigma 9\{114\}$ では主として刃状成分が吸収されるため折れ曲がった変位が粒界に生じている。これは BCC 金属で、線張力が刃状成分よりらせん成分のほうが顕著に大きいことに起因する。

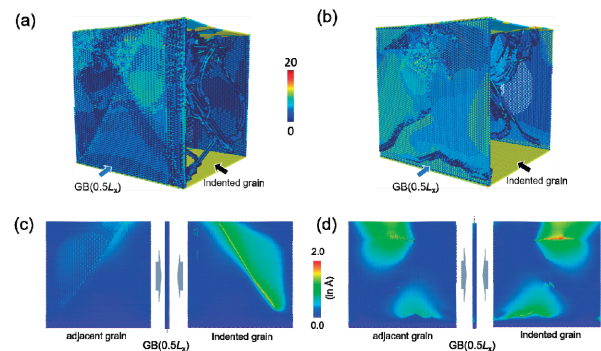


図2 転位吸収により粒界に生じる変位の原子シミュレーション解析結果¹²⁾。(a) $\Sigma 9\{221\}$ と(b) $\Sigma 9\{114\}$ 。

図2の下図は、転位吸収により生じた粒界での変位を、(右)押し込みを行った結晶粒側から見たもの、(左)隣接粒側から見たものである。隣接粒側から見た変位は $\Sigma 9\{221\}$ と $\Sigma 9\{114\}$ で大きな差異が存在する。これは刃状転位が吸収された $\Sigma 9\{114\}$ では隣接粒側に大きな変位(ひずみ)が伝ばされたことに起因する。BCC 金属では刃状転位とらせん転位で転位芯構造が異なり、らせん転位はコンパクトな転位芯構造をもつ。さらにらせん転位のコンパクトな転位芯構造は転位が粒界上を粒界にそってすべることを容易にする。変形伝ばの影響因子である粒界での転位の蓄積(変位の蓄積)に対しても、BCC 金属では転位成分が影響する可能性が指摘されている¹⁴⁾。さらに BCC 金属のコンパクトならせん転位芯構造は交差すべりを容易にするため、粒内でパイルアップが生じにくい可能性がある。これはパイルアップによる応力集中が変形伝ばの重要な因子であると考えたとき、ら

せん転位と刃状転位では変形伝ば挙動が異なる要因となりえる。

この研究¹²⁾では、ナノ力学試験、TEM 観察、原子シミュレーションの連携による変形伝ばの支配因子を議論した。一方、BCC 金属を対象とした本原子シミュレーションでは1本の転位が粒界に吸収された後、隣接粒に伝ばすることはなかった。筆者の他の試計算においてもBCC 金属では1本の転位が大角粒界に相互作用する場合に変形伝ばは観察されていない。一方、FCC 金属に関する先行研究および筆者自身の計算においても、1本の転位が大角粒界と相互作用したとき転位が隣接粒に伝ばする様子が見られた。BCC 金属と FCC 金属の大角粒界で見られた転位伝ばの違いは興味深い。BCC 金属と FCC 金属では転位芯構造の特徴が異なり、FCC 金属では転位芯構造が拡張している。このような転位特性(転位芯構造)も変形伝ばの重要な影響因子となる可能性がある。

3 粒界での転位吸収に及ぼす粒界構造の影響

前章では粒界での変形伝ば挙動が粒界種で異なることを述べた。ここでは粒界構造が粒界-転位反応(転位吸収)に及ぼすこと示す Kura らの研究を紹介する¹⁵⁾。BCC 鉄中の傾角粒界とらせん転位の相互作用に注目する。本モデルでは転位線方向と傾角粒界の回転軸方向 $\langle 111 \rangle$ はともに紙面に垂直である。モデルは転位線方向に薄く、それに対して垂直な面内には大きな寸法をとることで、転位の大きな弾性応力場に対するモデル境界の影響が小さくなるようにしている。このモデルを用いて転位が粒界に吸収される場合のエネルギー変化を評価しているが、ここで粒界構造の影響に注目する。粒界は通常、 Σ 値と粒界面を構成する結晶面で定義される。一方、粒界では結晶粒どうしが粒界に平行な面内方向の自由度をもち、これが例えば粒界エネルギーに影響を与えることが計算研究で既に議論されている¹⁶⁾。同様にこの面内方向の自由度が粒界-転位反応に影響を与える。例えば $\Sigma 7\{123\}$ 粒界とらせん転位との相互作用では、らせん転位が $\Sigma 7\{123\}$ 粒界に吸収されると、粒界上でらせん転位は分解される。転位が分解した粒界領域では粒界面内方向の変位が生じ、それによって粒界エネルギーと系全体のエネルギーが低下する。この場合、転位と粒界の相互作用は引力的である。一方、同じ $\Sigma 7\{123\}$ 粒界でもモデル構築の際に粒界を挟む結晶粒を面内方向に相対的に移動させることで、エネルギーを安定化させた粒界モデルを作成することができる。この安定な粒界構造に対してらせん転位を吸収させたとき、転位は粒界上で分解せず相互作用エネルギーもほとんど生じない。すなわち $\Sigma 7\{123\}$ 粒界でも、粒界に平行な面内方向の相対的な配置に依存して、転位の吸収挙動と相互作用エネルギーが大きく異なる。

1本の転位が粒界に吸収された後、2本目の転位を相互作用した結果を図3に示す。(a)は $\Sigma 7\{123\}$ 粒界、(b)は

$\Sigma 37\{347\}$ 粒界の結果である。1本目の粒界-転位反応は粒界種に依存しており、前述のように $\Sigma 7\{123\}$ 粒界では吸収されたらせん転位が粒界上で分解されているのに対して、 $\Sigma 37\{347\}$ では分解は生じていない。これは粒界構造がもつ転位のひずみ場に対するエネルギー的安定性に依存する。 $\Sigma 37\{347\}$ では面内変位およびらせん転位のひずみ場に対して安定であることから転位の分解が生じず、相互作用エネルギーもほとんど生じない。一方、 $\Sigma 7\{123\}$ 粒界ではらせん転位のひずみ場に対してエネルギー的に不安定であることから、1本目の転位が吸収されることで粒界での面内変位と転位の分解が同時に生じ、粒界構造が安定化する。この状態で2本目の転位が $\Sigma 7\{123\}$ 粒界に吸収されても、さらなる転位の分解と面内変位は明確には生じない。このように面内変位に対する粒界構造のエネルギー的な安定性が粒界-転位反応時の転位の分解挙動と相互作用エネルギーに影響する。

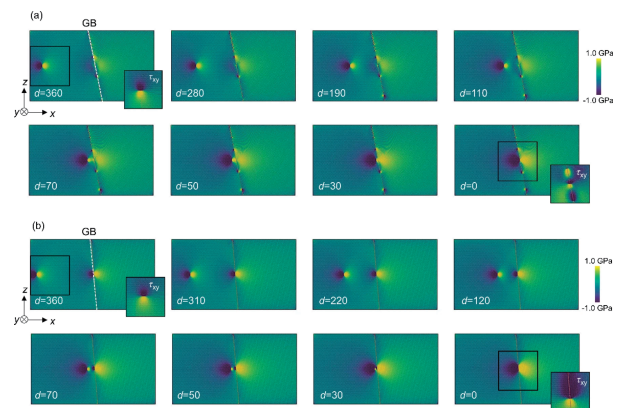


図3 傾角粒界とらせん転位の相互作用による応力分布変化の原子シミュレーション解析結果¹⁵⁾。1本目のらせん転位がすでに吸収された状態での2本目のらせん転位の相互作用。(a)は $\Sigma 7$ 粒界、(b)は $\Sigma 37$ 粒界。

本計算結果は粒界に平行な面内方向の相対配置も、粒界-転位反応(ここでは転位の吸収)に影響することを示している。この粒界構造がもつ自由度(あるいは粒界構造の複雑さ)によって、粒界構造と粒界-転位反応の関係を完全に理解することは容易ではない。さらにここでは議論されていない合金の構成元素や偏析元素などの化学的因子も粒界-転位反応に影響を及ぼす。

4 変形伝ばに及ぼす小角粒界構造と転位成分の影響

粒界構造が変形伝ばに及ぼす影響を BCC 鉄の小角粒界を例に紹介する。小角粒界は2つの隣接粒の相対方位差が小さいときに生じる粒界であり、その構造は周期的な転位列や転位網で形成されている¹⁷⁾。このことから粒界-転位反応は転位-転位反応の側面をもつ。図4に本研究で構築した小角粒界構造を示す。model 1は傾角粒界と刃状転位、model 2はねじり粒界と刃状転位、model 3は傾角粒界とらせん転位、model 4はねじり粒界とら

せん転位、の相互作用を解析することを目的としたモデルである。ここでは粒界構造と転位成分を変えた系統的な解析により、それぞれが転位伝ばに及ぼす影響を議論する。青は刃状成分、赤はらせん成分であり、傾角粒界は刃状成分による転位列、ねじり粒界ではらせん成分による転位網で形成されている。また図内の数字は傾角、ねじり角を示しており、数値が大きくなると転位列、転位網の間隔は小さくなる。25° は一般的な定義では小角粒界ではないが比較のための解析を行った。

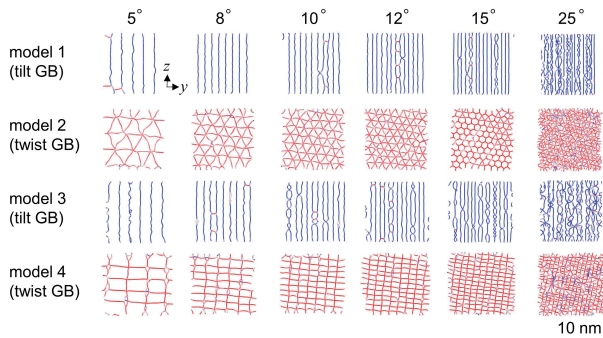


図4 原子モデルにおける小角粒界構造¹⁸⁾。

この異なる粒界構造モデルに刃状転位とらせん転位を相互作用させる。ここでは有限温度の分子動力学計算により、一つの転位ループを粒内に初期に導入してせん断応力を負荷することで転位ループを成長させ、粒界と相互作用させる。粒界に向かって運動した転位は粒界転位と相互作用し、転位の運動は粒界上で一度停止する。負荷せん断応力を徐々に大きくすることで転位に作用する力を増加させると、粒界を構成する転位列によって両端がピンニングされた入射転位のセグメントが張り出し、最終的に隣接粒に伝ばする様子が傾角粒界と刃状転位の組み合わせ (すなわち model 1) で見られた。

図5の左図は隣接粒に転位が伝ばしたときのせん断応力をまとめたもの、また右図は粒界—転位反応を評価するのに用いた原子モデルを示している。初期転位ループの形状や粒形状を変えた解析を行っており、これらの影響についても評価している。本研究で用いた(model 1)

傾角粒界と刃状転位、(model 2) ねじり粒界と刃状転位、(model 3) 傾角粒界とらせん転位、(model 4) ねじり粒界とらせん転位、の4 ケースでは傾角粒界とらせん転位の組み合わせのみ、隣接粒側への転位伝ばがせん断応力を最大で4 GPa 負荷しても見られなかった。一方、その他の3 ケースについては、傾角やねじり角が小さいときに転位伝ばが見られた。図5 で見たように傾角やねじり角が大きくなるほど粒界における転位列や転位網の間隔は小さくなる。このため入射した転位が粒界転位でピンニングされるときの間隔は、傾角やねじり角が大きくなるほど小さくなり、その結果、転位セグメントの張り出しに必要なせん断応力は大きくなる。さらに入射する転位がらせん転位の場合、刃状転位よりも伝ばに必要な応力は大きくなる。これはBCC 金属での転位の線張力が、刃状成分よりもらせん成分のほうが大きいことに起因する。この線張力の影響は顕著であり、小角粒界では粒界転位によるピンニング間隔が同程度でも、伝ばに必要なせん断応力はらせん成分のほうが刃状成分よりも著しく大きくなる。さらに入射転位と粒界転位のパーガースペクトル関係に依存して粒界転位網の再構成が生じ、この再構成が粒界転位網の間隔を変化させることで、転位伝ばに必要なせん断応力が変化する様子が見られた。

前述のように筆者らの BCC 金属に対する原子シミュレーションでは、1 本の転位と大角粒界が相互作用する場合には隣接粒への転位の伝ばは見られなかった。これは図4、5 の小角粒界の結果と異なる。小角粒界はBCC 構造と粒界転位で構成されており、変形が隣接粒に伝ばする部分が残されている。このため粒界転位のピンニングを外すことができれば隣接粒に伝ばできる。一方、大角粒界では隣接粒界に変位を伝ばすることがそもそも容易ではなく、この点において BCC 金属の小角粒界と大角粒界では転位伝ばに必要な条件は異なる笔者认为。

5 粒界での転位生成現象

大角粒界における転位伝ばでは、転位生成が一つの重要な機構となる。また微小粒からなる多結晶材料で粒内

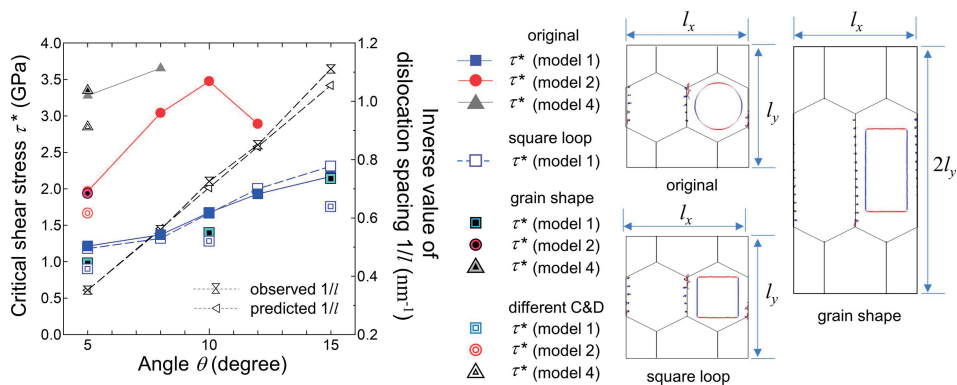


図5 小角粒界での転位伝ばの臨界せん断応力と解析に使用した原子モデル¹⁸⁾。

の初期転位密度が低い場合には、粒界から新たに生成される転位が塑性変形の重要な担い手となる。さらには粒界が自由表面を形成して破壊する場合には、粒界から転位が生成することで応力を緩和し、破壊を抑制できる可能性がある。このように粒界などの界面における転位生成現象は金属材料の変形挙動に大きな影響を与える。

温度の上昇によるぜい性から延性への遷移を議論する際には Yoffe diagram と呼ばれる両者に必要な応力の温度依存性を示すものがしばしば用いられる(図 6)¹⁹⁾。Yoffe diagram における塑性変形と破壊の競合現象の概念は、ナノスケールで生じる粒界での転位生成(塑性変形)と割れに应用できる可能性がある。BCC 金属双結晶モデルの単軸引張シミュレーションでは、低温では粒界で割れることでぜい性的な破壊が生じる一方、高温では粒界から転位が生成されることで塑性変形が進行する場合がある。粒界におけるナノスケールの延性—ぜい性遷移現象が、金属材料の巨視的な延性—ぜい性遷移現象にすぐ結びつくものではない。しかしながら、温度ではなく粒界構造を制御することで、粒界付近のナノスケールの塑性変形、破壊現象を制御する知見が得られれば、これは界面近傍でのナノスケールでの変形・破壊現象の理解を深化させるものとなる。

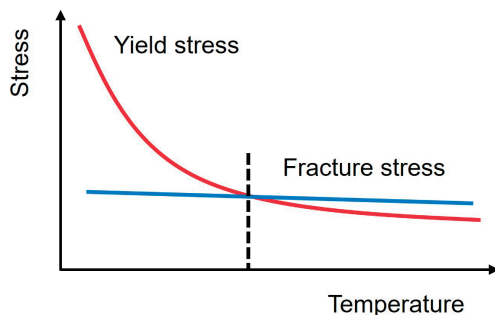


図 6 降伏応力と破壊応力の温度依存性を示す概念図。

金属材料の粒界で自由表面を形成して破壊する場合のエネルギーについては第一原理計算より様々な材料で評価が行われており、偏析元素の影響が特に議論されている。一方、粒界からの転位生成現象について、粒界での偏析元素が転位生成に及ぼす影響は原子論計算でほとんど評価されていない。粒界からの転位生成はエネルギー障壁を超える現象であり、このエネルギー障壁は応力状態や粒界構造の影響を受ける。粒界構造は幾何学的構造と化学的構造の両方を含んでおり、粒界種や偏析元素によってエネルギー障壁は変化する。このようなエネルギー障壁を超える現象に対しては最小エネルギー経路 (MEP) を探索できる Nudged Elastic Band (NEB) 法が有効である²⁰⁾。この手法では遷移現象の前後の構造を初期構造と最終構造として、その MEP と鞍点の構造・エネルギーを評価することができる。ただし転位生成解析では Free End Adaptive NEB (FEA-NEB) 法を適用する

ことで、より少ない計算コストで効率的にエネルギー障壁の評価が可能である²¹⁾。

図 7(a)に転位生成の FEA-NEB 計算の例を示す。ここでは BCC 金属における自由表面からの転位生成を対象としており、本解析によって転位のすべり面に作用する分解せん断応力とエネルギー障壁の影響を議論することが可能である。転位生成を促進する方向の分解せん断応力が大きくなるとエネルギー障壁は低下するため転位生成は容易になる。さらに分解せん断応力に対するエネルギー障壁の傾きから転位生成の活性化体積も評価することが可能である。図 7(b)に模式的に示したように分解せん断応力が増加すると活性化エネルギー・体積は一般的に減少する。

粒界からの転位生成のエネルギー障壁は、結晶構造、合金組成、偏析元素、さらには温度、応力に依存する。一方、粒界が自由表面を形成して割れる際のエネルギーも結晶構造、合金組成、偏析元素に依存する。原子論計算ではナノスケールでの粒界の割れと転位生成を制御する知見を獲得するための有効な手段である。これらを同時に考慮して制御するための知見獲得は、界面近傍での塑性変形と破壊のナノ力学の学理につながるものであり、筆者の本研究における一つの目標である。

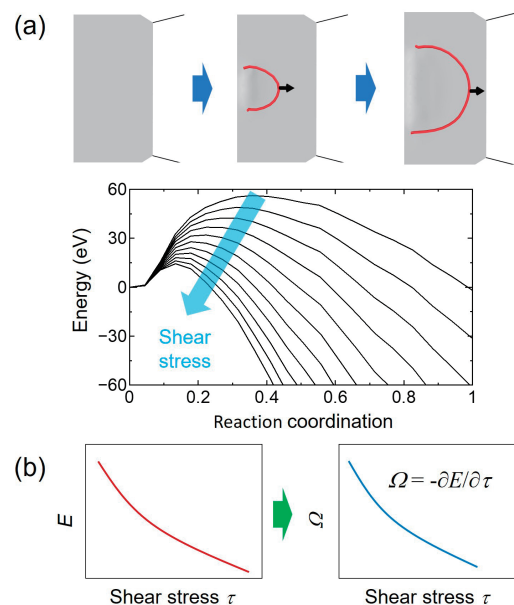


図 7 (a)界面からの転位生成に関する FEA-NEB 解析。(b)転位生成の活性化エネルギー(E)から活性化体積 (Ω) を算出する概念図。

金属材料には、粒界以外にも異相界面、双晶界面など様々な界面が存在する。筆者が本研究において注目しているのは、金属材料の界面構造とナノスケールでの変形・力学応答との関係である。ナノスケールでの界面構造を活用した力学特性の改善は挑戦的であるが潜在的な可能性をもつテーマであり、今後の知見の蓄積と学理

の構築により、金属に限らない種々の材料開発において特性向上の一手法になると考える。

6 結 言

本稿では金属材料の粒界近傍における変形と力学応答に関して、ナノインデンテーション解析、傾角粒界におけるらせん転位の吸収、小角粒界での転位伝ば、そして界面からの転位生成解析について紹介した。界面は金属材料に限らず様々な材料において、諸特性に影響する重要な存在である。今後、ナノスケール力学試験、シミュレーション、理論のさらなる発展と、データ科学手法などの新たな手法の活用により、界面そのものの理解と界面がナノスケールの変形現象および巨視的な力学特性に及ぼす影響の理解が進むと考える。

本稿の一部は JST さきがけ (JPMJPR219A) の支援のもと行ったものである。また本稿で紹介した結果は、多くの共同研究者のご協力・ご助言のもと実施した。本研究の一部は NIMS の材料数値シミュレータを利用して実施したものである。ここに記して感謝を表する。

参 考 文 献

- 1) L. Capolungo, D.E. Spearot, M. Cherkaoui, D.L. McDowell, J. Qu and K.I. Jacob, "Dislocation nucleation from bicrystal interfaces and grain boundary ledges: Relationship to nanocrystalline deformation", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 55, No. 11, pp. 2300-2327 (2007).
- 2) V. Borovikov, M.I. Mendeleev and A.H. King, "Effects of Ag and Zr solutes on dislocation emission from $\Sigma 11(332)[110]$ symmetric tilt grain boundaries in Cu: Bigger is not always better", *International Journal of Plasticity*, Vol. 109, pp. 79-87 (2018).
- 3) V. Paul, M. Wakeda, K. Ameyama, M. Ota-Kawabata and T. Ohmura, "Local deformation behavior of the copper harmonic structure near grain boundaries investigated through nanoindentation", *Materials*, Vol. 14, No. 19, p. 5663 (2021).
- 4) H. Somekawa, M. Wakeda and A. Singh, "Enhancing ambient temperature grain boundary plasticity by grain refinement in bulk magnesium", *Materials Science and Engineering: A*, Vol. 848, p. 143424 (2022).
- 5) F. Sansoz and X. Ke, "Hall-Petch strengthening limit through partially active segregation in nanocrystalline Ag-Cu alloys", *Acta Materialia*, Vol. 225, p. 117560 (2022).
- 6) T. Yang, Y.L. Zhao, W.P. Li, C.Y. Yu, J.H. Luan, D.Y. Lin, L. Fan, Z.B. Jiao, W.H. Liu, X.J. Liu, J.J. Kai, J.C. Huang and C.T. Liu, "Ultrahigh-strength and ductile superlattice alloys with nanoscale disordered interfaces", *Science*, Vol. 369, No. 6502, pp. 427-432 (2020).
- 7) M.T. Andani, A. Lakshmanan, V. Sundararaghavan, J. Allison and A. Misra, "Quantitative study of the effect of grain boundary parameters on the slip system level Hall-Petch slope for basal slip system in Mg-4Al", *Acta Materialia*, Vol. 200, pp.148-161 (2020).
- 8) E. Bayerschen, A.T. McBride, B.D. Reddy and T. Böhlke, "Review on slip transmission criteria in experiments and crystal plasticity models", *Journal of Materials Science*, Vol. 51, No. 5, pp. 2243-2258 (2016).
- 9) F. Javid, H. Pouriayevali and K. Durst, "Dislocation-grain boundary interactions: recent advances on the underlying mechanisms studied via nanoindentation testing", *Journal of Materials Research*, Vol. 36, No. 12, pp. 2545-2557 (2021).
- 10) T.R. Bieler, R. Alizadeh, M. Pena-Ortega and J. Llorca, "An analysis of (the lack of) slip transfer between near-cube oriented grains in pure Al", *International Journal of Plasticity*, Vol. 118, pp. 269-290 (2019).
- 11) T.B. Britton D. Randman and A.J. Wilkinson, "Nanoindentation study of slip transfer phenomenon at grain boundaries", *Journal of Materials Research*, Vol. 24, No. 3, pp. 607-615 (2009).
- 12) M. Wakeda, Y.L. Chang, S. Li and T. Ohmura, "Multiscale analyses of the interaction between dislocation and $\Sigma 9$ symmetric tilt grain boundaries in Fe-Si bicrystals by nanoindentation technique", *International Journal of Plasticity*, Vol. 145, p. 103047 (2021).
- 13) T. Ohmura and M. Wakeda, "Pop-in phenomenon as a fundamental plasticity probed by nanoindentation technique", *Materials*, Vol. 14, No. 8, p. 1879 (2020).
- 14) 安田 洋平, 下川 智嗣, 大橋 鉄也, 新山 友暁, "フェライト/セメンタイト積層体の延性に関する結晶塑性解析: 界面の転位吸収能力の影響", *鉄と鋼*, Vol. 105, No. 2, pp. 146-154 (2019).
- 15) C. Kura, M. Wakeda, K. Hayashi and T. Ohmura, "Energetic and atomic structural analyses of the screw dislocation absorption at tilt grain boundaries in BCC-Fe", *Scientific Reports*, Vol. 12, No. 1, p. 21301 (2022).
- 16) J. Wang, G.K.H. Madsen and R. Drautz, "Grain boundaries in bcc-Fe: A density-functional theory and tight-binding study", *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol. 26, No. 2, p. 025008 (2018).
- 17) S. Chandra, M.K. Samal, V.M. Chavan and R.J. Patel, "Atomistic simulations of interaction of edge dislocation with twist grain boundaries in Al-effect of temperature and boundary misorientation", *Materials Science and Engineering: A*, Vol. 646, pp. 25-32 (2015).
- 18) M. Wakeda and T. Ohmura, "Atomistic evaluation of the dislocation transmission across tilt and twist low-angle grain boundaries in body-centered cubic iron", *Computational Materials Science*, Vol. 228, p.112335 (2023).
- 19) J.W. Morris, Jr., "On the ductile-brittle transition in lath martensitic steel", *ISIJ International*, Vol. 51, No. 10, pp. 1569-1575 (2011).
- 20) G. Henkelman, B.P. Uberuaga and H. Jónsson, "A climbing image nudged elastic band method for finding saddle points and minimum energy paths", *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 113, pp. 9901-9904 (2000).
- 21) J. Zhang, H. Zhang, H. Ye and Y. Zheng, "Free-end adaptive nudged elastic band method for locating transition states in minimum energy path calculation", *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 145, No. 9, p. 094104 (2016).