

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 5 月 21 日現在

機関番号：11301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2015～2016

課題番号：15K13416

研究課題名(和文) 供用環境因子を考慮した時空間マルチスケール破壊力学モデルの構築

研究課題名(英文) Development of space-time multiscale fracture model in consideration of environmental factors

研究代表者

寺田 賢二郎(Terada, Kenjiro)

東北大学・災害科学国際研究所・教授

研究者番号：40282678

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、化学種(水素)の拡散に伴う結晶粒内部および粒界における局所的な強度低下を予測可能な非線形破壊力学モデルを提案し、それを適用した結晶レベルの微視的な数値解析から巨視的な材料強度低下の時空間マルチスケール力学に基づく評価手法を構築した。具体的には、材料内部に発生する微小き裂やポイドを表現する損傷変数を熱力学的定式化により既存のモデルに導入するとともに、水素濃度と表面エネルギーの関係からエネルギー解放率の変化を考慮した非線形破壊力学モデルを提案し、数値解析によりその有用性を例示した。

研究成果の概要(英文)：Based on space-time multiscale modeling, we have developed a prototype of cohesive zone model to assess the residual strength of the structure subject to local chemical action of hydrogen. A damage variable representing material degradations is introduced to a cohesive zone model by use of the thermodynamics approach. Our model, in which the decrease of the energy release rate caused by hydrogen is considered, enables us to evaluate the hydrogen embrittlement. Some representative numerical examples are presented to demonstrate the performance of the proposed model in simulating fracture processes accelerated by the hydrogen concentration.

研究分野：計算力学

キーワード：時空間マルチスケール解析 モデル化 土木材料 機械材料・材料力学 計算物理

1. 研究開始当初の背景

構造物の実際の供用環境は、常に非一様・非定常であり、時間経過とともに構造物の強度が変化すると考えるのが普通であるが、構造強度に関する従来の研究では、環境因子による材料強度の時間変化の影響は考慮されてこなかった。実際、従来のき裂進展解析、およびそれに伴う強度評価手法が理論的な拠り所としてきた「破壊力学」は、静的問題を想定した材料力学を基礎として構築された学問体系であり、き裂の問題はあくまでも準静的にしか取り扱われていない。すなわち、き裂の進展に大きく影響する環境因子が時間依存であるにも関わらず、従来の破壊力学の理論体系では時間項は考慮されていない。また、疲労破壊や応力腐食割れの解析で一般に用いられるき裂進展則は、実験事実に基づく経験則であるため、構造物の供用時間を導入できる類のものではない。実際、応力腐食割れのように化学的作用を伴う場合には、その程度によってき裂の進展速度は大きく異なることが報告¹⁾されているが、個別の構造物に対してすべての環境条件を想定した実験を行い、予めき裂進展則を定めておくことは不可能である。

特に、環境因子が材料の強度低下を引き起こす問題として、金属表面における腐食反応によって水素が侵入することで発生する水素脆化が知られている²⁾。水素脆化に関する実験的な研究は古くから盛んに行われているが、数値解析に関する研究はほとんど行われておらず、解析手法も未だに確立していない。一方、この破壊のメカニズムを説明する仮説は多くの研究者によって提唱されており、水素ガス圧説、水素吸着説、格子脆化説などが挙げられる。水素ガス圧説は、金属内部に存在する水素によって圧力が高まった結果、水素脆化が生じると説明している。しかし、水素以外の原子でも同様に靱性の低下が生じる点や圧縮時について、実現象と矛盾することが指摘されている。これに対して、水素吸着説では水素によって表面エネルギーが低下することで、破壊靱性値が低下すると考えられている。また、水素原子は結晶粒界において結晶粒内部よりも速く拡散するので、水素吸着説に従えば結晶粒界が優先して脆化することになる。このことは水素によって粒界の結合が低下するとした格子脆化説とも整合しており、既存の水素脆化のメカニズムを説明した仮説のなかでは最も有力とされている。以上の点から、水素吸着説に基づく非線形破壊力学モデルの構築が望まれる。

また、前述のように水素原子が金属内部を拡散する速度は非均一であるため、水素脆化による強度低下は非一様かつ非定常性である。すなわち、水素脆化の強度評価を行うためには、水素の局所的な濃度分布を結晶粒レベルの微視的な非定常拡散解析から求めたうえで、局所的な強度低下を水素吸着説に

基づく非線形破壊力学モデルで評価したき裂進展解析を行い、その結果から巨視的な材料強度を評価する必要がある。

2. 研究の目的

本研究の目的は、水素の拡散に伴う結晶粒内部および粒界における局所的な強度低下を予測可能な時空間マルチスケール非線形破壊力学モデルの構築と、それを適用した結晶レベルの微視的な数値解析から巨視的な材料強度の低下を予測することである。

3. 研究の方法

本研究では、前述のように既存の仮説のなかでも最も有力とされている水素吸着説に着目して水素脆化のメカニズムをモデル化し、水素の化学的作用を考慮した非線形破壊力学モデルの構築を行った。具体的には、原子間距離とそのときに働く結合力の関係をもとにRiceら³⁾が提案した既存の非線形破壊力学モデルを基本モデルと採用し、実際の材料の破壊プロセスにより即して説明するために、転位や微小ポイドによる材料強度の低下を表現するための損傷変数を熱力学的方法により導入することで非線形破壊力学モデルの緻密化を行った。さらに、水素濃度と表面エネルギーの関係からエネルギー解放率の変化を考慮することで、水素吸着説に基づく非線形破壊力学モデルを構築した。

また、水素原子の多結晶金属内部における非定常拡散解析を行い、暴露時間の経過に伴う非一様な水素の濃度分布を求めた。そして、その濃度分布を構築した非線形破壊力学モデルに反映させたうえで、結晶塑性モデルを用いてき裂進展解析を実施した。

4. 研究成果

(1) 化学作用を考慮した非線形破壊力学モデルの構築

本節では、損傷変数を熱力学的方法によって導入することで既存のRiceら³⁾のモデルを緻密化したうえで、水素濃度に伴う臨界エネルギー解放率の変化を反映することで化学作用を考慮した非線形破壊力学モデルの構築を行う。

まず、Riceらが原子間結合の関係⁴⁾に基づいて提案した非線形破壊力学に損傷変数を導入すると、結合ポテンシャル Ψ は次式のようになる。

$$\Psi = (1-D)G_c \left[1 - \left(1 + \frac{\delta}{\delta_c} \right) \exp \left(-\frac{\delta}{\delta_c} \right) \right]$$

ここで、 D は損傷変数、 G_c は臨界エネルギー解放率、 δ は有効き裂開口量、 δ_c はき裂面の分離が開始される δ の臨界値を表す。また、有効き裂開口量は破壊モードの比を表す係数 β によって次式で定義される。

$$\delta = \sqrt{\delta_n^2 + \beta \delta_i^2}$$

ただし、 δ_n および δ_i はそれぞれき裂面に垂直な方向と平行な方向のき裂開口量であり、以

降それぞれの添え字は同様の方向を表す．各方向の結合力は，結合ポテンシャルをそれぞれの方向のき裂開口量で微分することで得られ，次式ようになる．

$$\sigma_n = \frac{\partial \Psi}{\partial \delta_n} = (1-D) \frac{G_c}{\delta_c} \left(\frac{\delta_n}{\delta_c} \right) \exp \left(-\frac{\delta}{\delta_c} \right)$$

$$\sigma_t = \frac{\partial \Psi}{\partial \delta_t} = (1-D) \beta \frac{G_c}{\delta_c} \left(\frac{\delta_t}{\delta_c} \right) \exp \left(-\frac{\delta}{\delta_c} \right)$$

ただし， δ_c は結合力 σ が最大となる時のき裂開口量である．また， D と同様な熱力学的力 Y は結合ポテンシャルを微分した次式から得られる．

$$Y = -\frac{\partial \Psi}{\partial D} = G_c \left[1 - \left(1 + \frac{\delta}{\delta_c} \right) \exp \left(-\frac{\delta}{\delta_c} \right) \right]$$

ここで， Y は転位や微小ポイドなどによって材料の損傷が進行することで散逸したエネルギーを意味する．この損傷の発展方程式には Bouvard ら⁵⁾によって提案された次式で定義すると，

$$\dot{D} = B(1-D)^m \left(\sqrt{Y} - \sqrt{Y_{th}} \right)^n \left| \frac{\dot{\delta}}{\delta_c} \right| \quad (\text{if } \dot{Y} \geq 0)$$

$$\dot{D} = 0 \quad (\text{otherwise})$$

となる．ここで， B ， m および n は材料定数である．また， Y_{th} は閾値であり， Y が Y_{th} を超えると，き裂の開口に伴って損傷が徐々に蓄積される ($\dot{Y} \geq 0$)．すなわち，損傷変数 D は転位や微小ポイドなどの材料の損傷による微視的な強度低下を表しており， Y_{th} は微視的な臨界エネルギー解放率に対応するパラメータである．以上のように，Rice らのモデルが原子同士の分離による理想的な破壊プロセスを表現しているのに対して，本研究で提案した非線形破壊力学モデルは実際の材料に含まれる転位や微小ポイドを表現している点で，より現実に即したモデル化といえる．

次に，Griffith の理論に着目すると，臨界エネルギー解放率 G_c は，き裂進展に伴い新たに形成される表面における表面エネルギー ω_s と，表面を形成するのに必要な塑性仕事 ω_p に別けられる ($G_c = 2(\omega_s + \omega_p)$)． ω_s は前述のように水素濃度に依存して低下することが知られており，Rimoli ら⁶⁾は Jiang らの結果⁷⁾から水素濃度の変化に伴う ω_s の変化を次式で近似した．

$$\omega_c(\theta) = (1 - 1.0467\theta + 0.1687\theta^2) \omega_{c0}$$

ここで， $\theta = C/C_s$ であり， C は表面における水素濃度， C_s はその収束濃度であり， ω_{c0} はその時の表面エネルギーである．一方， ω_p については ω_s との相互関係があり ω_s のわずかな低下が ω_p の急激な低下をもたらすと指摘されている⁸⁾．しかし， ω_p と水素濃度の直接的な関係については不明な点も多いため，本研究では ω_p も ω_s と同様に表されるとする．これにより，臨界エネルギーと水素濃度の関係は次式ようになる．

$$G_c(\theta) = (1 - 1.0467\theta + 0.1687\theta^2) G_{c0}$$

ここで， G_{c0} は水素が存在しない時の臨界エネルギー解放率である．

以上により，本研究では既存の非線形破壊力学モデルの緻密化を行ったうえで，水素濃度による臨界エネルギー解放率の低下を考慮した定式化を示した．

(2) 多結晶体金属における水素の拡散解析

本節では，水素の非定常拡散問題に対する定式化を簡単に示した後に，多結晶体金属における水素原子の拡散解析を実施する．

非定常拡散問題における支配拡散水素原子の多結晶体金属における非定常拡散問題は次式により表される．

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla C)$$

ここで， k は拡散係数であり，前述のように結晶粒界と結晶粒内部で異なる．本研究では粒界の拡散係数は参考文献[7]より $2.53 \times 10^{-9} \text{m}^2/\text{s}$ とし，粒内は十分に大きい値として $2.53 \times 10^{-13} \text{m}^2/\text{s}$ を用いた．また，初期条件として，初期き裂面上における水素濃度は既に収束しており， $C=C_s$ に達しているものとした．

解析の結果得られた暴露時間毎の水素濃度分布は図1のようになった．この図1(a)から，初期段階では水素原子は結晶粒界に沿って拡散していることがわかる．その後の時間経過に伴って水素原子は徐々に結晶粒内部へ侵入しており，図1(d)のように十分時間が経過すると初期き裂面近傍の結晶粒の内部はほぼ一様の濃度分布となっている．

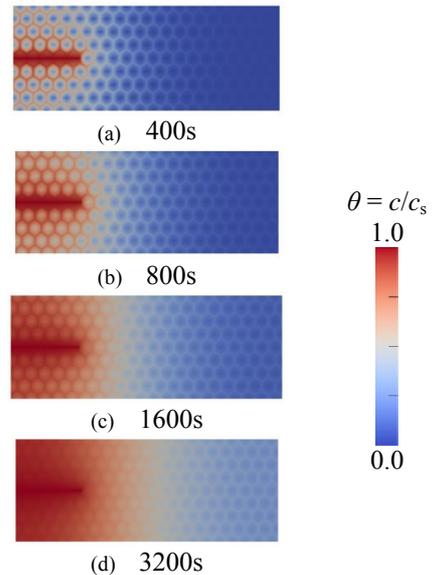


図1 暴露時間毎の水素濃度分布

(3) 水素脆化による巨視的な材料強度の低下

ここでは，前節で求めた暴露時間毎の水素濃度分布を構築した非線形破壊力学に反映させたいうで，多結晶体金属のき裂進展解析を行うことで水素脆化による巨視的な材料強度の低下を表現可能なことを例示する．

具体的には，400，800，1600，3200s にお

る水素濃度分布における SEN 試験片に対して、上下端面に引張方向の強制変位を加えた解析を実施した。また、材料モデルには結晶塑性モデル⁹⁾を用いることとし、各結晶方位は乱数で与えた。非線形破壊力学の各パラメータは $G_{c0} = 502\text{kJ/m}$, $\delta_c = 2\mu\text{m}$, $\beta = 0.7$, $B = 180$, $m = 1.5$, $n = 0.01$ および $Y_{th} = 0.0$ とした。

解析の結果得られた見かけ上の応力-ひずみの関係は図2のようになった。ここで、見かけ上の応力には上端面の全節点反力の合計を断面で割った値を採用し、見かけ上のひずみには変位に対する試験片長さの比とした。この図から、水素環境への暴露時間が増加するにつれて引張強さが低下し、破断伸びも小さくなっていることがわかる。また、それぞれのき裂の進展挙動は図3に示すようになった。図3(a)より、暴露時間0s、すなわち通常的环境下では結晶粒内部を貫通して、き裂が進展していることがわかる。これに対して、暴露時間400sでは水素原子が図1(a)のように結晶粒界に拡散し、結晶粒界の脆化が結晶粒内部よりも優先的に進行するために結晶粒界に沿ってき裂が進展している。さらに、暴露時間が増加すると初期き裂近傍の試験片前半部では水素原子が結晶粒内に侵入することで、図3(b)~(e)のようにき裂進展開始直後にき裂は結晶粒内を進展する。その後、試験片の後半部に差し掛かると図3(d)および(e)のようにき裂は粒界に沿って進展する。これは図1(c)および(d)のように試験片の後半部では水素拡散が十分に起きていないためである。なお、暴露時間800sで結晶粒内をき裂が進展したのは、試験片後半部の結晶粒界に水素がまだ十分に拡散しておらず、結晶粒界と粒内の強度の差異が大きくないためと考えられる。

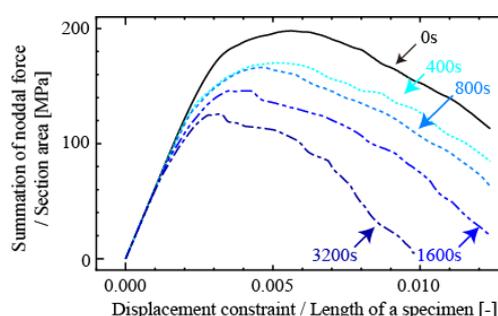


図2 暴露時間毎の応力-ひずみ関係

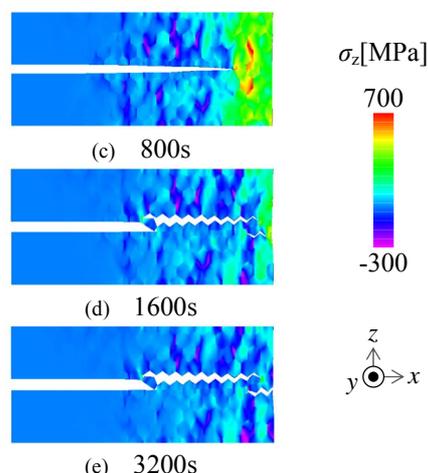
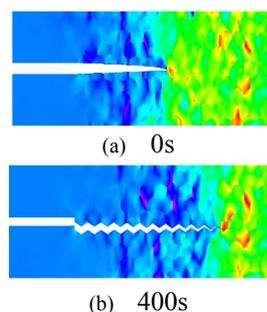


図3 暴露時間毎のき裂の進展挙動

(4) まとめ

本研究では、水素の拡散に伴う結晶粒内部および粒界における局所的な強度低下を予測可能な非線形破壊力学モデルの構築を行った。さらに、非定常拡散解析から多結晶体金属内部の水素濃度分布を求め、それを構築した非線形破壊力学モデルに反映させることでき裂進展解析を実施した。これにより、結晶レベルの微視的な数値解析から巨視的な材料強度の低下を評価することで、水素環境への暴露時間の増加に伴う材料強度の低下を予測可能とした。

参考文献

- 1) T. Anderson: Fracture mechanics: Fundamentals and Applications, Boca CRC Press, Boca Raton.
- 2) J. C. Fisher: Calculation of diffusion penetration curves for surface and grain boundary diffusion, J. Appl. Phys. 22(1951), 74-77
- 3) J. Rice and J. Wang: Embrittlement of interfaces by solute segregation, Mater. Sci. Eng. A102(1989), 23-40.
- 4) J. H. Rose and J. R. Smith: Universal binding energy curves for metals and bimetallic interfaces, Phys. Rev. Lett., 47(1981), 675-678.
- 5) J. L. Bourvard, J. L. Chaboche, F. Feyel and F. Gallenreau: A cohesive zone model for fatigue and creep-fatigue crack growth in single crystal superalloys, Int. J. Fatigue, 31(2009), 868-879
- 6) J. J. Rimoli and M. Ortiz: A three dimensional multiscale model of intergranular hydrogen-assisted cracking, Philos. Mag., 90 (2010), 2939-2963.
- 7) D. E. Jiang and E. A. Carter: First principles assessment of ideal fracture energies deformation in crystalline solids, Acta. Metall., 28 (1980), 1479-1488
- 8) M. L. Jokl, V. Viek, and C. J. NeMachon Jr: Material rate dependence and localized

deformation in crystalline solids, Acta Metall., 28(1980), 1479-1488.

- 9) J. R. Asaro: Crstal plasticity. J. Appl. Mech., 50(1983), 921-934.

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計 2 件)

- (1) 新宅勇一, 寺田賢二郎: 結合力を埋め込んだ弾性損傷モデルの構築とそのき裂進展解析への適用, 日本計算工学会論文集(査読有), Vol. 2016, 論文番号 20160011, 2016
- (2) Y. Shintaku, M. Muramatsu, S. Takase, S. Tsutsumi and K. Terada: Cohesive Crack Model to Reflect Local Chemical Action at Grain and Its Boundaries in Polycrystalline Metals, Quarterly Journal of the Japan Welding Society(査読有), Vol. 33(2), pp. 152s-155s, 2015.

〔学会発表〕(計 10 件)

- (1) 渡部慎也, 番場良平, 新宅勇一, 堤成一郎, 森口周二, 寺田賢二郎: 弾塑性損傷モデルによる極低サイクル疲労に関する強度評価のための基礎的研究, 平成 28 年度土木学会東北支部技術研究発表会, 東北工業大学 八木山キャンパス(岩手), 2017 年 3 月 5 日
- (2) Y. Shintaku, S. Tsutsumi and K. Terada: Anisotropic damage constitutive law derived from atomic separation process on cleavage plane, The International Symposium on Visualization in Joining & Welding Science through Advanced Measurements and Simulation, Osaka University, Suita Campus (Osaka), Japan, October 17-18, 2016
- (3) 新宅勇一, 寺田賢二郎, 堤成一郎: へき開面における原子間分離に基づく異方性損傷構成則, 第 29 回計算力学講演会, 名古屋大学 東山キャンパス(名古屋), 2016 年 9 月 22~24 日
- (4) Y. Shintaku, K. Terada and S. Tsutsumi: Ductile Crack Propagation Analysis by a New Cohesive Zone Model embedded in Damage Constitutive Laws, The 12th. World Congress on Computational Mechanics, COEX (Seoul), Korea, July 24-29, 2016
- (5) 新宅勇一, 寺田賢二郎, 堤成一郎: 延性破壊を考慮した結合力モデルとその結合力を埋め込んだ損傷構成則, 第 21 回計算工学講演会, 朱鷺メッセ: 新潟コンベンションセンター(新潟), 2016 年 5 月 31 日~6 月 2 日
- (6) Y. Shintaku, M. Muramatsu, S. Takase, S. Tsutsumi and K. Terada: Characterization of

Macroscopic Strength Degradation in Polycrystalline Metals due to Fatigue Aging, 13th US National Congress on Computational Mechanics, Manchester Grand Hyatt (San Diego), U.S.A, July 26-30, 2015.

- (7) 新宅勇一, 村松真由, 高瀬慎介, 森口周二, 寺田賢二郎, 堤成一郎: 埋込型結合力モデルを導入した損傷構成則, 第 20 回計算工学講演会, つくば国際会議場(つくば), 2015 年 6 月 8~10 日
- (8) 新宅勇一, 村松真由, 高瀬慎介, 森口周二, 寺田賢二郎, 堤成一郎, 車谷麻緒: 有限被覆法による自動き裂進展解析, 第 20 回計算工学講演会, つくば国際会議場(つくば), 2015 年 6 月 8~10 日
- (9) 番場良平, 新宅勇一, 村松真由, 森口周二, 高瀬慎介, 寺田賢二郎, 堤成一郎: 地震荷重を受ける鋼製橋脚のき裂進展評価, 第 20 回計算工学講演会, つくば国際会議場(つくば), 2015 年 6 月 8~10 日
- (10) Y. Shintaku, K. Terada, J. Kato, T. Kyoya, S. Takase and S. Tsutsumi: Arbitrary Crack Propagation Analysis in Polycrystalline Materials Affected by Chemical Environment, 1st Pan-American Congress on Computational Mechanics, Buenos Aires, Argentina, April 27-29, 2015

6. 研究組織

- (1) 研究代表者
寺田 賢二郎 (TERADA KENJIRO)
東北大学・災害科学国際研究所・教授
研究者番号: 40282678
- (2) 研究分担者
堤 成一郎 (TSUTSUMI SEIICHIRO)
大阪大学・接合科学研究所・准教授
研究者番号: 70344702
- 村松 真由 (MURAMATSU MAYU)
東北大学・環境科学研究科・助教
研究者番号: 20609036