

令和 4 年 5 月 6 日現在

機関番号：14401

研究種目：若手研究

研究期間：2018～2021

課題番号：18K13658

研究課題名(和文) 摩擦の物理に基づく塑性変形・破壊現象の統一的な予測と制御

研究課題名(英文) Unified prediction and control of plastic deformation and fracture based on the physics of friction

研究代表者

石井 明男(シャードンバオ)(ISHII, AKIO)

大阪大学・基礎工学研究科・講師

研究者番号：80773340

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,800,000円

研究成果の概要(和文)：破壊現象、摩擦現象においてすべり弱化は重要な現象であり、そのメカニズムの理解は破壊・摩擦現象の理解及び制御において重要である。本研究ではすべり弱化を解析するため摩擦の物理である構造励起と緩和を考慮した材料の塑性変形、破壊を統一的に解析する粗視化モデルを構築し、これを用いて金属ガラスの塑性変形、及び破壊現象の解析を行った。構造の励起と緩和機構の競合によって低温、高ひずみ速度域にてすべり弱化が発生することを予測することができた。材料中の構造励起を抑えるか、緩和を促進させることができればすべり弱化を抑制することはできることがわかった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

建築物や輸送機械に用いられる構造材料の変形、及び破壊現象は我々の身近にある現象にもかかわらず極めて非線形性が高い現象である。このため理論的にこれを予測することは一般的には困難である。本研究では摩擦の物理として考えられている構造の励起と緩和をとり入れたモデルを考案し、材料の破壊現象に直接的につながるすべり弱化現象をこれを用いた計算機シミュレーションにより予測することに成功した。これは将来的な構造材料の変形、破壊現象の理論予測につながる研究であり、安全安心な社会の構築に貢献する研究である。

研究成果の概要(英文)：Slip (or deformation) weakening is an important phenomenon to control the fracture and friction of materials. To understand the mechanism of it is important for the prevention the fracture of material; slip weakening cause sudden fracture of materials. To understand slip weakening, we construct a novel coarse-grain model to analyze the plastic deformation and fracture of materials comprehensively, considering the rejuvenation and relaxation of structure, which is fundamental physics of friction. Computational simulation based on the model predicted the slip weakening occurs under the low temperature and high strain rate condition. Our results suggest that the prevention of the rejuvenation and the promotion of relaxation is the key to prevent the slip weakening.

研究分野：計算材料力学

キーワード：摩擦 すべり弱化 金属ガラス

1. 研究開始当初の背景

構造材料における塑性変形・破壊現象の制御・予測は材料を設計する上で極めて重要な課題であり、古くから多くの研究が行われてきた。特に近年では実験によるマクロな解析のみならず、計算機を用いたメソスケールさらには原子レベルのミクロな解析も盛んに行われており、これら双方を結び付けたマルチスケール解析により、徐々に材料における塑性変形・破壊現象の物理が明らかにされつつある。その一方で現在、実用的な精度で塑性変形・破壊現象の制御・予測が可能になったかと言われればそうではない。これはこれまで明らかにされた基礎的な物理から、如何にして実際に起きる塑性変形・破壊現象の制御・予測に結び付けるかという点に難しさがあるためである。このような難しさの背景にあるのは結晶材料、非晶質材料、ポリマー材料といった材料の種類、さらには同じ材料の種類においても塑性変形、破壊の形態によっても、塑性変形・破壊現象を支配する素過程の物理が異なり(例えば結晶材料だと転位や双晶、非晶質材料なら Shear transformation zone (STZ)によるせん断変形、ポリマー材料なら分子鎖同士のもつれや配向)、ひとくくりに統一的な解釈・理解が与えられないことである。

2. 研究の目的

上記の背景を受けて本研究では材料、塑性変形・破壊現象の種類に関わらず、統一的に塑性変形・破壊現象の予測を行う計算機シミュレーションの手法開発を目指す。具体的には摩擦の物理に基づいて結晶材料、非晶質材料、ポリマー材料の塑性変形・破壊現象の統一的理解を行い、塑性変形・破壊現象の予測する手法を考案する。

一般的な摩擦現象はスティックアンドスリップ現象と呼ばれる間欠的なすべり現象によって支配されている。このスティックアンドスリップ現象の物理については材料同士の接触面間の接触面積の増加：構造の「緩和」、接触面間の接触面積の減少：構造の「励起」、の二つの現象の重ね合わせで理解され、最終的な定常的なすべり時の平均摩擦力、さらには摩擦現象の安定性までがこの構造の「緩和」と「励起」のしやすさの度合いを評価することによって構成式から予測できる。結晶材料、非晶質材料といった材料の塑性変形メカニズム、さらには双晶変形、転位、粒界の移動、水素脆化といった素過程が異なる塑性変形・破壊現象においてもこのような摩擦現象と共通した構造の「緩和」と「励起」の物理が存在することを見出せる。そこで本研究では構造の「緩和」と「励起」に着目した計算機シミュレーション手法を考案する。

3. 研究の方法

図 1 (a)に示すように構造材料(図中は金属ガラスの例)内部を微小区域ごとに分けて粗視化することを考え、その微小区域ごとに塑性変形の素過程となる複数の変形モードが存在するような粗視化モデルを考えた。この塑性変形の素過程を熱活性化過程とし、その活性化エネルギー(Q)が変形による材料の内部構造の変化(励起)により減少する効果と、励起した構造は時間とともに元の構造に戻り減少した活性化エネルギーが回復する(緩和)効果を導入した(図 1 (b))粗視化モデルを考案した。考案した手法を用いて定ひずみ速度における非晶質材料、金属ガラス(Zr-based)、の単軸引張り試験の計算機シミュ

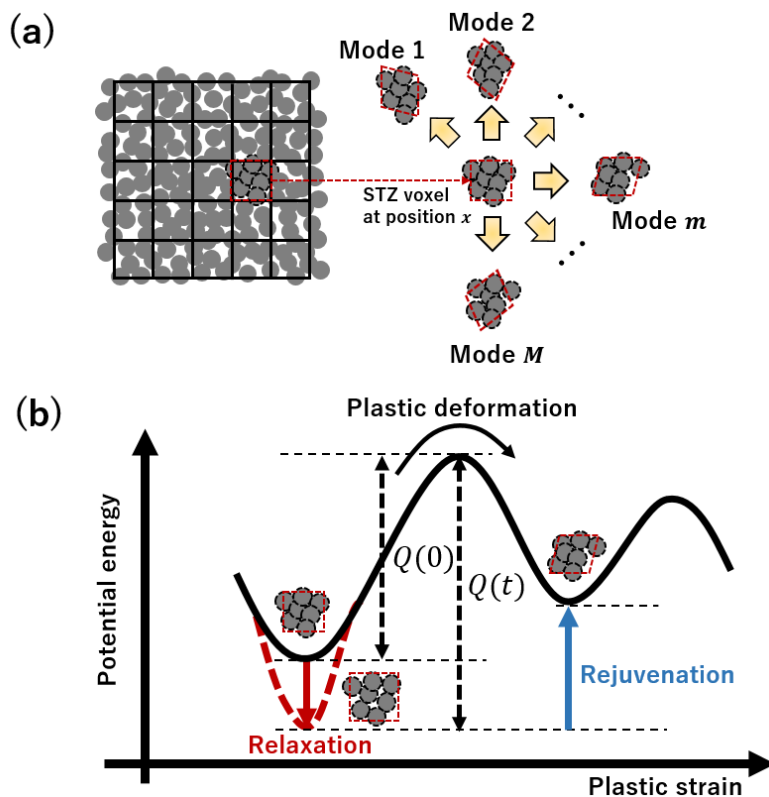


図 1. 粗視化モデルの概略図: (a) 材料内部を微小区域ごとに分けて粗視化する。(b) 各素過程の変形モードは変形を起こすと構造励起を起こし、時間経過によって励起した構造は緩和する。

レーションを実施し、金属ガラスが急激破壊（すべり弱化）を起こすような、すなわち塑性変形の流動応力のひずみ速度依存性（ひずみ速度感受性）が負となるような温度、ひずみ速度領域の予測を実施した。

4. 研究成果

図2に考案した手法を用いた計算機シミュレーションによって得られた、ひずみ速度ごとの金属ガラスの応力ひずみ線図を示す。ここでは金属ガラスの構造緩和を表現するKohlrausch-Williams-Watts緩和パラメータである、 $\beta > 1.0$ の条件においては高いひずみ速度の時に応力の大きなドロップが観測されているのがわかる。この時粗視化モデルの領域ごとの塑性変形挙動を確認すると、大域的に塑性変形が発生しており、実際の金属ガラスの変形試験でよくみられるせん断帯が発生していることがわかった。

図3に温度、ひずみ速度条件を変化させた時のひずみ速度感受性の変化を示す。低温、高ひずみ速度においてひずみ速度感受性が負の値となっていることがわかる。また緩和パラメータの値が大きいくほど、負の領域が広がっていることがわかる。得られた特定の温度やすべり速度におけるひずみ速度感受性の傾向は実際の金属ガラスの変形試験で観測されたものと定性的に一致し、金属ガラスの破壊時のすべり弱化を首尾良く予測することに成功した。また緩和パラメータとひずみ速度感受性の関係性は本研究によってはじめて明らかにされたものである。本研究は今後も継続する予定であり、考案した手法を非晶質材料だけでなく、結晶材料やポリマー材料に適用し、それらにおいても破壊現象の予測ができるかどうか検討していく予定である。

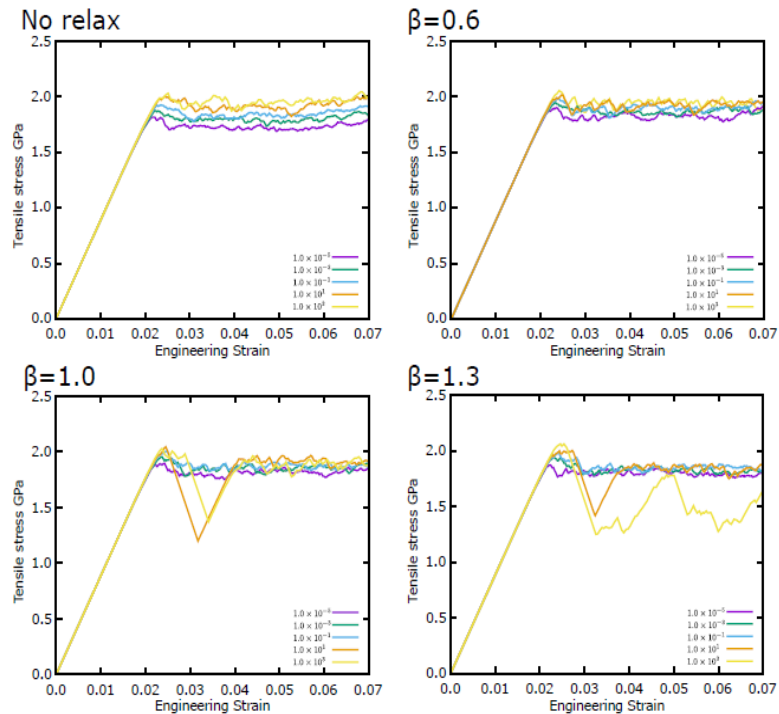


図2. 計算機シミュレーションによって得られた、単軸引張り試験時の金属ガラスの応力ひずみ曲線。線の色はひずみ速度の違いを表す。

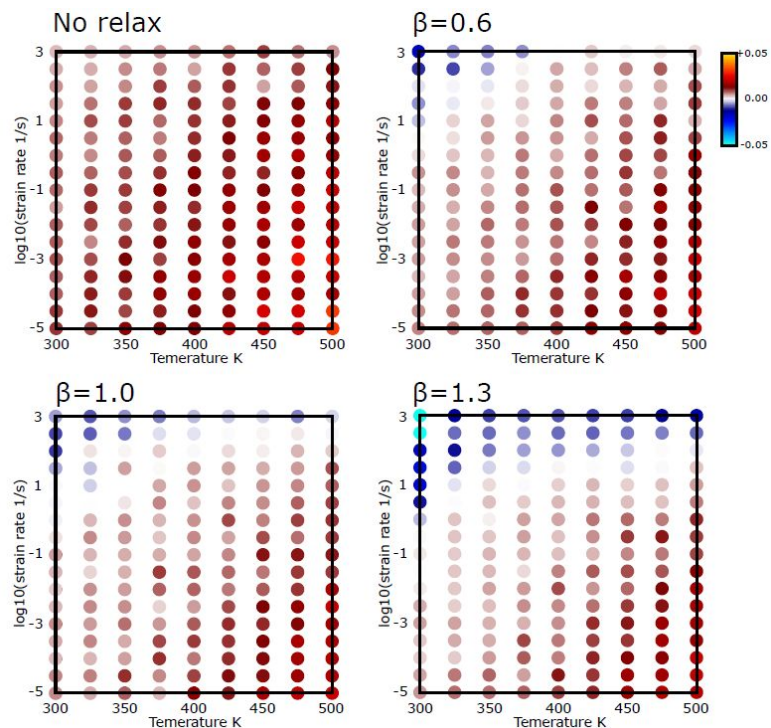


図3. 温度、ひずみ速度を変化させた時のひずみ速度感受性の変化。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Ishii Akio	4. 巻 183
2. 論文標題 Energetics of heterogeneous Mg {101-2} deformation twinning migration using an atomistically informed phase-field model	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 109907 ~ 109907
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.commatsci.2020.109907	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 Ishii Akio	4. 巻 198
2. 論文標題 Spatial and temporal heterogeneity of Kohlrausch-Williams-Watts stress relaxations in metallic glasses	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 110673 ~ 110673
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.commatsci.2021.110673	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 -

〔学会発表〕 計7件（うち招待講演 1件/うち国際学会 4件）

1. 発表者名 Akio Ishii, Takahiro Hatano and Tomoaki Niiyama
2. 発表標題 Continuum model for interacting many faults: emergence of main fault and Gutenberg-Richter 's law
3. 学会等名 JpGU-AGU Joint Meeting 2020（国際学会）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 石井明男, 新山友暁, 波多野恭弘, 下川智嗣, 尾方成信
2. 発表標題 原子構造の励起・緩和機構とアモルファス 金属 の変形のひずみ速度弱化メカニズム
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 Akio Ishii, Tomoaki Niiyama, Takahiro Hatano, Tomotsugu Shimokawa, Shigenobu Ogata
2. 発表標題 Compressed exponential relaxation originated negative strain rate dependency of metallic glass flow stress
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (MRS fall meeting 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 石井明男
2. 発表標題 材料科学の基づく地震のモデリング
3. 学会等名 日本機械学会特別講演会「材料科学と地震学の融合を目指して」(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Akio Ishii, Tomoaki Niiyama, Takahiro Hatano, Tomotsugu Shimokawa, Shigenobu Ogata
2. 発表標題 Temperature dependent shear friction in metallic glass
3. 学会等名 The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling(MMM) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Akio Ishii, Tomoaki Niiyama, Takahiro Hatano, Tomotsugu Shimokawa, Shigenobu Ogata
2. 発表標題 Origin of negative strain rate dependency of metallic glass flow stress
3. 学会等名 2018 Materials Research Society (MRS) Fall Meeting & Exhibit (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 石井明男, 新山友暁, 波多野恭弘, 下川智嗣, 尾方成信,
2. 発表標題 地震と材料破壊をつなぐすべり破壊モデルの構築～金属ガラスのすべり弱物理～
3. 学会等名 第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開ワークショップ
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔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

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