

令和 5 年 6 月 9 日現在

機関番号：13301

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2020～2022

課題番号：20H02024

研究課題名（和文）異相界面における疲労破壊のエンブリオ形成メカニズムの解明

研究課題名（英文）Mechanism of Embryo Formation of Fatigue Fracture at Heterophase Interfaces

研究代表者

下川 智嗣（Shimokawa, Tomotsugu）

金沢大学・機械工学系・教授

研究者番号：40361977

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 14,200,000円

研究成果の概要（和文）：本研究は、繰返し荷重下における「異相界面」と「固執すべり帯（PSB）を構成する転位」の相互作用を分子動力学法を用いて実施し、異相界面での転位の侵入・分解・通過の重畳現象により生じる疲労破壊のエンブリオ（核形成の起点）の形成機構の解明に挑んだ研究である。まず、界面は転位の吸収サイトとして機能するため繰返し変形に伴い転位密度を減少させ、転位組織の粒径依存性が生じることを示した。次に、PSBモデルを作成し、繰返し変形下でチャンネル内を運動するらせん転位が粒界に侵入した場合、逆方向の負荷が発生しても界面から転位は再放出されず、界面が疲労破壊のエンブリオ形成に強く影響を与えることを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、未だ解決していない人類の普遍的課題の一つである疲労破壊に対する界面の役割、特に、固執すべり帯を構成する転位壁に平行な方向に存在する界面と転位の相互作用を原子シミュレーションを用いて明らかにしたことが最大の成果である。また、この成果は、疲労現象におけるサイズ効果（粒径依存性）や界面構造の影響に対して新たな知見を与えるものであり、今後の疲労破壊の本質的な理解に貢献することが強く期待される。

研究成果の概要（英文）：This research was conducted using molecular dynamics to study the interaction between the “heterophase interface” and “persistent slip band (PSB)” under cyclic loading, and attempted to elucidate the formation mechanism of the embryo (starting point of nucleation) of fatigue failure caused by the superimposed phenomena of dislocation penetration, decomposition, and passage at the heterophase interfaces. First, it was shown that the interface functions as an absorption site for dislocations, and thus the dislocation density decreases with cyclic deformation, resulting in a grain-size dependence of the dislocation microstructure. Next, a PSB model was developed, and it was shown that when screw dislocations moving in a channel region under cyclic deformation penetrate the interface, the dislocations are not re-emitted from the interface even when loading occurs in the reverse direction, and the interface has a strong influence on the formation of fatigue fracture embrittlement.

研究分野：計算材料力学

キーワード：疲労破壊 界面 転位 分子動力学法

1. 研究開始当初の背景

機械構造物の破壊事故の約 80%は金属疲労によるものであり、その現象は古くから知られているが未だに解決していない人類の普遍的課題の代表である。今後の人類の安心安全な社会を低コストで構築するためには、疲労現象の解明は緊急を要する挑戦的な課題である。

疲労破壊とは、「小さな繰返し荷重下における格子欠陥の発達が多数の破壊のエンブリオ（核形成サイト）を形成し、その中の何れかが疲労き裂の核形成条件を満たし、その後き裂が成長し、材料が破壊する現象」と考えられる。つまり、疲労破壊の理解には先ず破壊のエンブリオの形成機構を解明する必要がある。

実際に繰返し荷重下では固執すべり帯（PSB）の形成が確認されており、PSB により材料の表面には疲労破壊のエンブリオとなる局所的な凹凸が形成されている。更に単相多結晶体の場合、PSB の形成・成長は粒界に拘束を受けるため、粒界近傍に生じる疲労破壊のエンブリオは粒界方位差に強く影響を受けることになる。一方で、多くの実用構造材料は異なる相により構成される複相組織である。例えばフェライト相とセメンタイト相からなるパーライト鋼などがある。複相組織の場合、異相界面における疲労破壊のエンブリオの形成はより複雑になる。それは、異相界面を介した塑性現象（転位の蓄積、侵入、分解、通過）を考えると、塑性不適合（各相の格子欠陥の特徴量が異なる）、弾性不適合（各相の弾性定数が異なる）、弾塑性ひずみ不適合が存在するからである。これらの 3 つの不適合現象が繰返し荷重下における異相界面近傍の格子欠陥の発展に及ぼす影響を明らかにすることは、複相材の疲労破壊現象の理解には必要不可欠である。しかし、現状では異相界面近傍の格子欠陥を直接観察することが困難であるため、その理解には至っていない。以上の背景を受け、本研究課題の核心をなす問いは、1. 繰返し変形下における異相界面内とその近傍の格子欠陥の発展はどのようなものか？、2. どのようにして異相界面の疲労破壊のエンブリオは形成するか？、3. 異相界面構造を設計することで耐疲労性を向上させることは可能か？、である。しかし、複相組織材の疲労を理解するためには、異相界面を介する格子欠陥の発展を理解する必要があるが、透過型電子顕微鏡（TEM）を用いた直接観察は難しい。その理由は、異なる結晶構造の境界に異相界面は存在するので、両相に共通する回折条件を満たすことが困難だからである。このことが未だに複相組織材の疲労現象の理解が進まない原因の一つである。

2. 研究の目的

そこで、本研究では、大規模原子シミュレーションを用いて繰返し荷重下の格子欠陥の発展現象を再現し、異相界面近傍での疲労破壊のエンブリオの形成機構の解明を目的とする。

3. 研究の方法

本研究では、上記の目的に対して 3 つの解析を行った。まず、図 1(a)に示す Al の双結晶モデルを用いて、繰返し変形下における転位組織の発展に対する界面の影響を検討する。ここで、双結晶の片方の粒は無欠陥とし、もう一方の粒は単位ユニットに周期境界条件を満足する転位組織を導入し、その単位ユニットを複数並べることで粒径を変更する。たんいユニットは 1 から 5

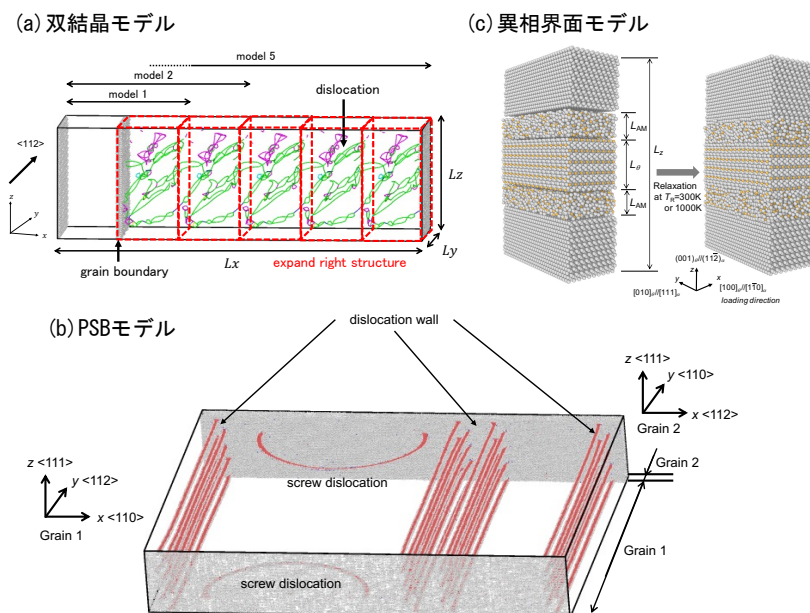


図 1 : 3 種類の解析モデル

個とし、それぞれを model 1~model 5 とする。つまり、粒径が異なるが同じ転位組織を有することになる。初期転位組織が異なる 2 つのモデルを RH model と LH model とする。次に、図 1(b) に示す AI の PSB モデルを用いてチャンネル内のらせん転位の運動に対する界面の影響を検討する。最後に、図 1(c) に示すパーライト鋼の双結晶モデルを用いて、界面を介した塑性現象に対する界面構造の影響を検討する。ここでは、フェライトとセメンタイト界面に厚さの異なる非晶質層を導入する。

4. 研究成果

■繰返し変形における転位組織の発展に対する界面の影響 図 2(a) に LH/RH model 3 の繰返し変形開始時の値で正規化を行なった繰返し変形中の転位密度の変化を示す。ひずみ振幅 $\Delta\varepsilon = \varepsilon_{\max} - \varepsilon_{\min}$ で 30 サイクルの繰返し変形を行った。このときのひずみ速度は $\dot{\varepsilon}_z = \pm 5 \times 10^8$ 1/s とし、荷重方向に垂直な方向の法線応力成分は 0 となるように制御する。 $\Delta\varepsilon$ は 0.02 ($\varepsilon_{\max} = 0.01$, $\varepsilon_{\min} = -0.01$), 0.04 ($\varepsilon_{\max} = 0.02$, $\varepsilon_{\min} = -0.02$), 0.06 ($\varepsilon_{\max} = 0.03$, $\varepsilon_{\min} = -0.03$) の 3 種類とした。 $\Delta\varepsilon$ が 0.02 では、転位密度が変化しないが、一方で 0.04, 0.06 では繰返し数に応じて転位密度の減少が確認できる。これは、ひずみ量の増加に伴い流動応力が増加し、転位組織が発展可能となることが原因であり、運動する転位は界面に侵入した後に吸収されることになる。図 2(b) に繰返し変形後に引張変形を実施したときの、降伏応力と繰返し変形終了後の粒界原子一個あたりの平均原子体積の関係を示す。降伏応力は繰返し変形前の緩和時の結果で正規化を実施し、自由体積は緩和時のからの変化を採用した。これより、自由体積が増加するほど降伏応力が低下する傾向が確認できる。これは、自由体積が増加するほど粒界から転位の放出がしやすくなるためである。この結果は、繰返し変形中に粒界の構造変化が生じていることを意味しており、粒界を介した塑性現象は疲労の進展に伴い変化していくことを示唆している。

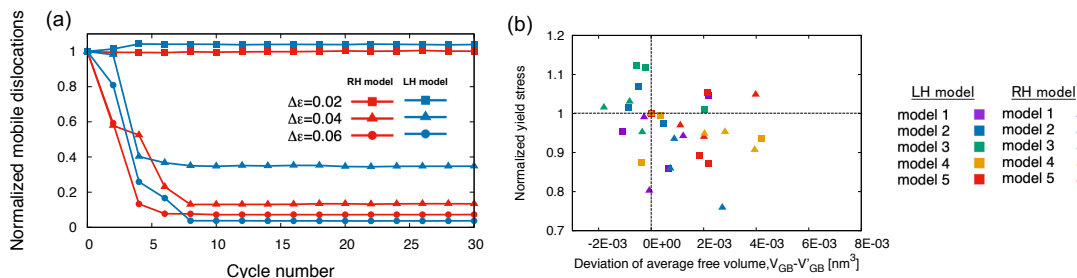


図 2 : (a) model 3 における転位密度の変化, (b) 降伏応力と粒界自由体積の関係

■PSB モデルにおける転位組織の発展に対する界面の影響 まず図 1(b) の PSB モデルに示す刃状転位で構成される転位壁の安定性に対する界面の影響を検討した。これは疲労破壊に重要な転位組織の粒径依存性を調べるためである。図 3(a) に転位間隔 $L_p \approx 2.1$ nm としたときの転位壁構造が崩壊するときの CRSS に対する粒径 L_d の影響を示す。転位壁構造の場合、CRSS は「粒界にピン留めされた転位が動くために必要な応力 τ_1 」と「転位構造を壊すために必要な応力 $\tau_2 \propto 1/L_p$ 」の競合によって決まる。 L_d が 20 nm より小さいときは CRSS は τ_1 に近く、 L_d が 20 nm より大きいときは CRSS は τ_2 で表現されることがわかった。図 3(b) に $L_d \approx 29.8$ nm としたときの転位壁構造が崩壊するときの CRSS に対する L_p の関係を示す。 L_p が大きくなるにつれ、粒界の

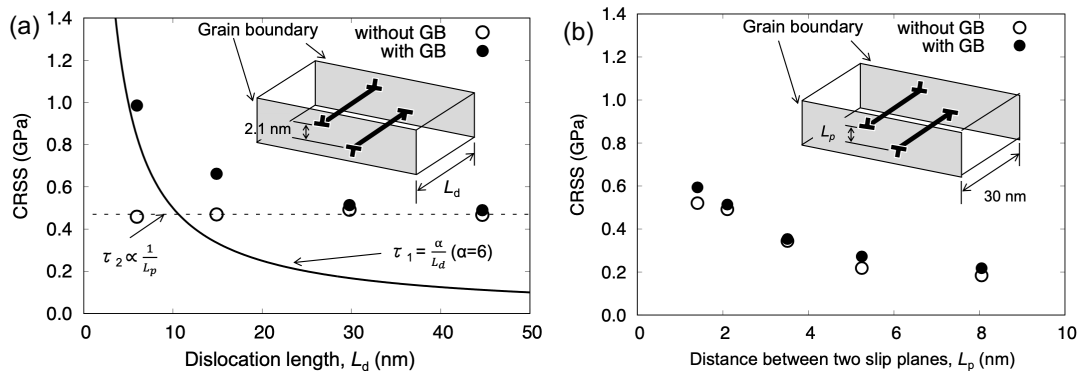


図 3 : (a) CRSS と粒径 L_d の関係, (b) CRSS と転位間隔 L_p の関係

有無にかかわらず CRSS は減少していく。これは、 L_p が低いほど転位間距離が小さくなり転位間相互作用が強くなるためである。なお、全ての L_p の領域で粒界の有無の影響は確認できていない。これは、 τ_2 の方が τ_1 よりも影響が強いためであり、 L_p と L_d の関係によって CRSS に粒径の影響が生じないときがあることが理解できた。

次に、図 1(b)の PSB モデルを用いて、転位組織と粒界の発展の挙動が可逆的なのかどうかを調査した。まず順方向 (z 面+x 方向) に負荷を与えるとそれぞれの転位ループが進行し、その後お互いを通りし粒界に侵入した。このようにチャンネル内の転位が運動したときに粒界に侵入する確率は結晶粒径が小さいほど高くなることは容易に推測出来る。次に、逆方向 (z 面-x 方向) に負荷を与えたが侵入した転位が粒界から再放出される前に転位壁組織が崩れた。このことは粒界に侵入した転位を再放出することは容易ではなく、チャンネル内の転位の枯渇化により PSB は塑性変形能を失うので内部応力が増加し、転位壁の崩壊に繋がったことになり、結晶粒径が小さいほど PSB を安定に保てないことを示唆している。これまでの PSB に対する界面の影響は、転位壁垂直方向に存在する粒界と PSB の相互作用を検討したものであるが、今回は新たに転位壁平行方向に存在する粒界の影響を明らかにした。得られた結果は、PSB 形成に対する粒径依存性の存在を示しており、粒径が小さくなるほど疲労下において PSB を形成できない環境になることが理解できる。このことは界面を起点とする疲労破壊現象の粒径依存性の存在を示唆するものである。

■異相界面の構造が界面の塑性現象に及ぼす影響 パーライト鋼のセメンタイトとフェライトの異相界面を介した塑性現象に対する界面構造の影響を検討する。図 1(c)に示す解析モデルに引張変形を加え、異相界面を介した塑性現象を調査した。図 4(a)-(d)にフェライトとセメンタイトの結晶界面、図 4(e)-(h)にフェライトとセメンタイトの間に非晶質構造を含む界面の結果を示す。赤い原子は塑性変形に参加した原子である。まず変形当初はフェライト相で結晶すべりが生じ、異相界面に到達する。その後、結晶界面モデルでは早期にセメンタイト相に変形が伝播していることがわかる。一方で非晶質界面モデルでは、フェライトの転位が非晶質層に侵入した後、非晶質層で構造緩和が生じセメンタイト相への変形の伝播が遅延していることが確認できる。つまり、フェライト相で起動したすべり系のバーガースベクトルが幾何学的なミスフィットとして結晶界面に形成され、それが起点となりセメンタイト相への非弾性変形を容易に生じさせている。これに対して非晶質構造が存在するとこの幾何学的なミスフィットは非晶質領域で緩和されてしまうためセメンタイトへの非弾性変形の起点として機能しにくくなる。このことは異相界面の転位吸収能力が界面構造に強く影響を受けていることを示唆している。セメンタイトで生じる非弾性変形は小さなボイドであり、破壊の起点となりうる。つまり、疲労破壊のエンブリオ形成は異相界面の転位吸収能力が強く関与していることが理解できる。

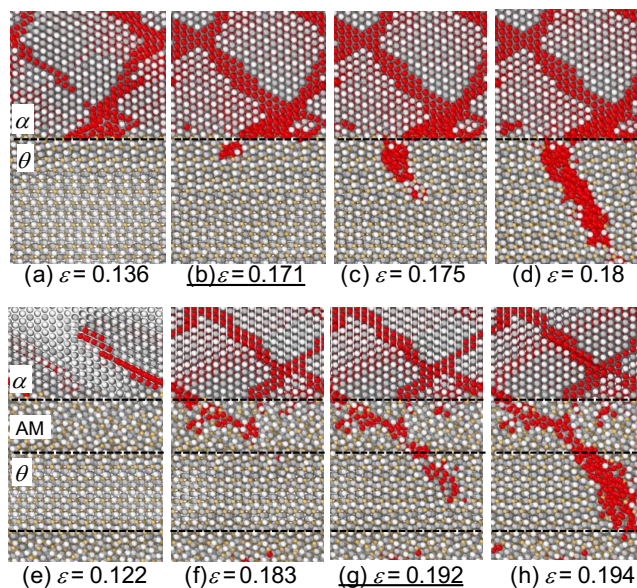


図 4：異相界面の構造が界面を介した塑性現象に及ぼす影響。(a)-(d)は結晶界面。(e)-(h)は非晶質界面。

以上の結果から、大規模原子シミュレーションを用いて繰返し荷重下の格子欠陥の発展現象を再現し、転位と界面の相互作用が粒内の転位組織の発展に強く影響を及ぼし、特に界面に侵入した転位の幾何学的なミスフィットの緩和現象が、その後の界面を介した塑性現象(疲労破壊のエンブリオ形成)に影響を与えることがわかった。また、疲労現象におけるサイズ効果(粒径依存性)に対して新たな知見を獲得しており、今後の疲労破壊の本質的な理解に貢献することが強く期待される。

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 T. Shimokawa, T. Oto, T. Niiyama | 4. 巻 62 |
| 2. 論文標題 Molecular Dynamics Simulation of the Effect of Cementite Decomposition on Yield Phenomena in Pearlite Microstructure | 5. 発行年 2022年 |
| 3. 雑誌名 ISIJ International | 6. 最初と最後の頁 343-352 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.2355/isijinternational.isijint-2021-357 | 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 下川智嗣, 原 一輝, 新山友暁 | 4. 巻 71 |
| 2. 論文標題 異なる塑性変形モードの相乗効果: 結晶・非晶質混在系の強度に対する分子動力学法による解析 | 5. 発行年 2022年 |
| 3. 雑誌名 材料 | 6. 最初と最後の頁 135-142 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.2472/jsms.71.135 | 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11件（うち招待講演 5件 / うち国際学会 0件）

| |
|---|
| 1. 発表者名 清田溪斗, 新山友暁, 下川智嗣 |
| 2. 発表標題 調和組織材料における塑性変形の伝ば挙動の転位論・原子論的研究 |
| 3. 学会等名 日本材料学会第6回マルチスケール材料力学シンポジウム |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 澤田健太郎, 新山友暁, 下川智嗣 |
| 2. 発表標題 粒界を起点とした変形双晶の発生・成長に関する原子シミュレーション |
| 3. 学会等名 日本金属学会2021年秋期第169回講演大会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 清田溪斗, 新山友暁, 下川智嗣 |
| 2. 発表標題 粒径勾配領域の塑性伝播挙動に関する転位論・原子論的研究 |
| 3. 学会等名 日本金属学会2021年秋期第169回講演大会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 行本圭吾, 新山友暁, 下川智嗣 |
| 2. 発表標題 原子シミュレーションによる繰返し変形による転位組織の発展が双結晶の降伏現象に及ぼす影響 |
| 3. 学会等名 日本機械学会M&M2021材料力学カンファレンス |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|------------------------------------|
| 1. 発表者名 下川智嗣 |
| 2. 発表標題 伸線パーライト鋼の異相界面と力学特性の関係 |
| 3. 学会等名 ISSS2021ポストシンポジウム(招待講演) |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 下川智嗣 |
| 2. 発表標題 金属結晶材料の格子欠陥と機械的性質に関する原子シミュレーション |
| 3. 学会等名 第35期CAMMフォーラム本例会(招待講演) |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|-----------------------------------|
| 1. 発表者名 澤田健太郎, 新山友暁, 下川智嗣 |
| 2. 発表標題 S3粒界から変形双晶が形成する条件 |
| 3. 学会等名 日本金属学会2022年春季第170回講演大会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 下川智嗣 |
| 2. 発表標題 Relationship between the development of lattice defects and mechanical properties in solid materials through atomic simulations |
| 3. 学会等名 IMI Workshop II: 材料科学における幾何と代数 I (招待講演) |
| 4. 発表年 2020年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 下川智嗣 |
| 2. 発表標題 分子動力学計算による固体材料における格子欠陥の発展と機械的性質の関係 |
| 3. 学会等名 第1回新FEWセミナー(東北大学)(招待講演) |
| 4. 発表年 2020年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 下川智嗣 |
| 2. 発表標題 異相界面近傍の不均一変形と機械的性質の関係: 原子シミュレーションによる考察 |
| 3. 学会等名 日本材料学会 高温強度部門委員会 講演会「計算科学による材料評価」(招待講演) |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 新山友暁, 下川智嗣 |
| 2. 発表標題 多様な構造を持つ固体塑性におけるavalanche 統計と機械特性の関係 |
| 3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会 |
| 4. 発表年 2021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 |
|-------|--|---------------------------------------|----|
| 研究分担者 | 新山 友暁 (Niiyama Tomoaki) (00583858) | 金沢大学・機械工学系・准教授 (13301) | |

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 |
|---------|---------|