

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 15 日現在

機関番号：14401

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2021～2023

課題番号：21K18675

研究課題名（和文）ナノ材料の疲労寿命予測

研究課題名（英文）Theoretical prediction of the endurance limit of nano-materials

研究代表者

尾方 成信（Ogata, Shigenobu）

大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授

研究者番号：20273584

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,900,000円

研究成果の概要（和文）：属結合と共有結合という全く異なる結合状態を有し異なる変形能力を有する金属ナノピラーとグラフェンシートを対象とし、これらに初期欠陥を導入したモデルに対して、分子動力学法を適用し、繰り返し負荷下における欠陥の時間発展解析を実施した。き裂発生までの時間はともに温度、応力振幅の上昇に伴って急速に短くなることが示され、結合様式に依らず疲労の素過程を熱活性化過程として扱うことが妥当であることがわかった。繰り返し負荷下で破断（もしくは大きな塑性変形が生じる）までのプロセスが多段階の熱活性化プロセスとなっているため、多段階熱活性化プロセスを考慮した理論予測式を構築し、分子動力学解析結果と比較し、その妥当性を示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ナノデバイスは至る所で使用されている。それらは、使用温度の変化や外部からの力学的な振動などで繰り返し負荷を受けている。このような環境下にあるナノ材料が、いつ破壊するのかを実験以前に予測することは産業界においても重要なテーマである。しかしながら、これまでナノ材料の疲労研究はほとんど行われていない。本研究では、ナノ材料の疲労寿命を予測評価できる物理理論を構築し、その妥当性を確認することができた。この成果はナノ材料疲労の研究分野を大きく切り開くものであると考える。

研究成果の概要（英文）：This study targeted metal nanopillars and graphene sheets, which possess completely different bonding states; metallic bonds and covalent bonds, respectively; and exhibit different deformation capacities. By introducing initial defects into models of these materials, molecular dynamics methods were applied to analyze the time evolution of defects under cyclic loading. It was shown that the time until crack initiation decreases rapidly with increases in temperature and stress amplitude for both materials, indicating that treating the fundamental processes of fatigue as thermally activated processes is appropriate regardless of the bonding style. The process leading to fracture (or significant plastic deformation) under repeated loading involves multiple stages of thermal activation. Therefore, a theoretical prediction formula considering multi-stage thermal activation processes was constructed, compared with molecular dynamics analysis results, and its validity was demonstrated.

研究分野：機械材料、計算材料科学、計算材料力学

キーワード：疲労寿命 ナノ材料 変形素過程 理論予測 原子論 破壊 塑性変形

1. 研究開始当初の背景

18世紀の産業革命以来、材料の疲労について深く広く研究が展開され、多大な成果が得られたことは論を俟たない。しかし、これまでのほとんどの疲労研究の対象は、代表長さがマイクロメートル以上のいわゆるマクロ材料であった。一方、近年では、材料加工法や Additive Manufacturing などのナノ造形手法の発達により、ナノレベルの代表長さを有する各種ナノ材料の創製が可能になり、ナノ材料を使った構造体の構築が進められている。一般に、ナノ材料はマクロ材料とは全く異なる特異な力学挙動を示すため、疲労を含めたその特異な力学挙動の根源的理解が求められている。疲労とは、降伏応力以下の繰り返し応力下で材料が破壊に至る現象である。マクロ材料を対象とした従来疲労理論では、繰り返し応力下で材料内部に形成されるマイクロメートルスケールの転位（格子欠陥）組織【= persistent slip band (PSB)】が、材料表面での突き出しや入りこみを発生させ、それが生む表面応力集中が初期疲労き裂発生の原因とされている。とすれば、代表寸法が PSB よりも小さいナノ材料には PSB 形成の空間的余地がなく、疲労が起きないことになる。ところが我々の最新の原子論的シミュレーション研究で、ナノ材料（ナノシート）が PSB を形成せずとも定荷重の繰り返し応力下で、疲労破壊することが分かった。加えて、最近のナノ薄膜に対する実験でも、ナノ薄膜が疲労破壊するという報告がある (T.Kondo ら, Int. J. Fatigue (2017), 444)。しかしながら現状では、その根本メカニズムが明らかになっておらず、それを首尾良く記述する理論や学理が確立できていないのが現状である。

2. 研究の目的

上記のとおり、ナノ材料がどのような条件で疲労破壊するのか（= 疲労限はあるのか）、いつ疲労破壊に至るのか（= 疲労寿命はいかほどか）という最も基本的かつ重要な問いに、いまだ答えが用意できていない。この問いに答えるべく、ナノ材料の疲労寿命予測というナノ材料実用時の重要検討課題を根本的に解決することが本研究の全体目的である。特に、本課題では、金属結合の延性的なナノ材料と、共有結合の脆性的なナノ材料脆性を用いて、その疲労寿命を首尾良く記述できる理論を構築し、その有効性を原子シミュレーションを用いて示すことを主な目的とする。

3. 研究の方法

これまでに我々はナノ材料では欠陥生成の熱活性化過程が繰り返し応力下での破壊の発端となるとの仮説のもと、簡便な疲労破壊開始までの時間を予測する式を導出しているが、その仮説が様々なナノ材料において正しく有効であるのかを確認するために、金属結合と共有結合という全く異なる結合状態を有し異なる変形能を有する金属ナノピラーとグラフェンシートを対象とし、これらに初期き裂を導入したモデルに対して、分子動力学法を適用し、繰り返し応力下における欠陥の時間発展解析を実施した。このとき、繰り返し応力振動数、温度、応力振幅を変化させた。この繰り返し応力をナノピラー、グラフェンシートが完全に破断するまで継続して与え、疲労破壊（または大きく塑性変形する）までのプロセスと時間を求めた。

4. 研究成果

分子動力学解析の結果、金属ナノピラーでは初期き裂からの転位生成、グラフェンシートでは初期き裂の進展が見られ、き裂発生までの時間はともに温度、応力振幅の上昇に伴って急速に短くなることが示され、結合様式に依らず疲労の素過程を熱活性化過程として扱うことが妥当であることが示された。これにより予測式の理論的背景の正しさが確認できた。破断（もしくは大きな塑性変形が生じる）までのプロセスが多段の熱活性化プロセスとなっているため、単一プロセスを仮定していた従来理論式では、破断までの時間（寿命）を正確に予測できないことが判明した。この問題を解決するために、多段熱活性化プロセスを考慮した理論予測式を新たに構築した。構築した理論予測式を用いて予測したグラフェンシートの破断までの時間を、分子動力学法の解析結果と比較したところ良い一致を示した。この定式化の過程と比較結果については現在論文を執筆中である。

さらに、ここで得られた繰り返し応力時の塑性変形イベントの活性化の知見を発展させて、繰り返し振動によるナノインプリントの効率化についての分子動力学解析を実施し、振動をさせながらインプリントすることにより、これまで以上に微細なナノ造形が可能になることや、温度、振動数、振幅によって加工効率がどのように変化するかを明らかにすることができた。なお協力研究者と実施したナノ疲労実験については、繰り返し応力時の試験の安定性の確保が難しく、定常的な繰り返し応力を与えることができなかったため、成功していない。これは今後の課題である。しかしながらその試行錯誤過程で、ナノ金属材料の材料寸法が小さくなることによる表面拡散の活性化によって、バルクナノ結晶材料と同様に、材料寸法と強度の係数にピークが現れること (Nature Communications (2021) 5237.) を発見したり、ナノ変形試験で塑性変形のイベントを個別に特定すること (J. Mech. Phys. Solids (2021) 10468) や、ナノインデント

ーションによってアルミニウム金属中に非常に深い準 1 次元の塑性変形域を形成することに成功した (Acta Mater. (2022) 117944)。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 3件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Nie Zhi-Yu, Sato Yuji, Ogata Shigenobu, Duarte Maria Jazmin, Dehm Gerhard, Li Ju, Ma Evan, Xie De-Gang, Shan Zhi-Wei	4. 巻 232
2. 論文標題 Ultralong one-dimensional plastic zone created in aluminum underneath a nanoscale indent	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 117944 ~ 117944
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2022.117944	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Sixue Zheng, Shuhei Shinzato, Shigenobu Ogata, Scott Mao	4. 巻 158
2. 論文標題 Experimental molecular dynamics for individual atomic-scale plastic events in nanoscale crystals	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the Mechanics and Physics of Solids	6. 最初と最後の頁 104687-1-16
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jmps.2021.104687	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Xiang Wang, Sixue Zheng, Shuhei Shinzato, Zhengwu Fang, Yang He, Li Zhong, Chongmin Wang, Shigenobu Ogata, Scott X. Mao	4. 巻 12
2. 論文標題 Atomistic processes of surface-diffusion-induced abnormal softening in nanoscale metallic crystals	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 5237-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-021-25542-2	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 該当する
1. 著者名 Li Le, Du Jun-Ping, Ogata Shigenobu, Inui Haruyuki	4. 巻 269
2. 論文標題 Variation of first pop-in loads in nanoindentation to detect chemical short-range ordering in the equiatomic Cr-Co-Ni medium-entropy alloy	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 119775 ~ 119775
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2024.119775	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計1件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 竹龍之介, 新里秀平, 石井明男, 尾方成信
2. 発表標題 振動を利用したナノインプリントの原子シミュレーション
3. 学会等名 日本機械学会 関西学生会2021年度学生員卒業研究発表講演会
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	新里 秀平 (Shinzato Shuhei) (10853202)	大阪大学・大学院基礎工学研究科・助教 (14401)	

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
---------	---------