

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成25年 6月 5日現在

機関番号：14301  
 研究種目：基盤研究（C）  
 研究期間：2010～2012  
 課題番号：22560080  
 研究課題名（和文） 多結晶金属材料の微視的不均質性評価による乱雑さと変形・損傷の相関  
 研究課題名（英文） CORRELATION ANALYSIS OF RANDOMNESS, DEFORMATION AND DAMAGE BY WAY OF MICROSCOPIC INHOMOGENEITY FORCES IN POLYCRYSTALLINE AGGREGATE MODEL  
 研究代表者  
 今谷 勝次（IMATANI SHOJI）  
 京都大学・大学院エネルギー科学研究科・准教授  
 研究者番号：70191898

研究成果の概要（和文）：形態力概念を多結晶金属材料の微視的かつ非一様な変形領域において適用して、微視的な形態の乱雑さと変形ならびに損傷との相関について数値解析アルゴリズムを構築するとともに、界面における不均質力（エネルギー落差）と破壊力学におけるエネルギー解放率との類似性を検証した。その結果、界面における不均質力の面密度は、負荷と形態に依存して積分経路に依存しないことを解析的に確かめることができた。

研究成果の概要（英文）：Based on the configurational mechanics concept, microscopic inhomogeneity is discussed on polycrystalline material models. A numerical algorithm for evaluating the inhomogeneity force, which is none other than a generalization of the energy release rate in fracture mechanics, is constructed and applied to the interfacial problems in polycrystalline aggregates. The simulation suggests that the inhomogeneity force per unit area, which results from the loading condition and crystal morphology as well, is independent on the path of area integration so far as the path does not involve any singularity portion.

## 交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	1,500,000	450,000	1,950,000
2011年度	800,000	240,000	1,040,000
2012年度	700,000	210,000	910,000
総計	3,000,000	900,000	3,900,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学、機械材料・材料力学

キーワード：連続体力学、有限要素法、多結晶金属材料、界面、不均質力、損傷

## 1. 研究開始当初の背景

多結晶金属材料は、数ミクロンあるいは数十ミクロンの形状および方位が乱雑な集合体であり、大多数の機械／土木構造の部材として用いられているのは周知のとおりである。多結晶材料の力学的性質に関する信頼性は、巨視的な応答の再現性にあるとよい。すなわち、例えば製造時において特定の条件を合わせておけば、ロットが異なっても、弾性および塑性変形に関してほぼ同一の応答を得ることができる。一方で、最終的

な破損状況は、個々の部材によってまちまちであり、例えば疲労寿命に関しては、同一の条件での試験でも2倍以上の差が生じることは珍しくない。材料の破損の起点は微視的な損傷あるいはき裂であるから、微視的な乱雑さが材料の最終的な寿命に大きな影響を及ぼしていることは明らかである。

本研究課題は、連続体力学の正準形式に基づく形態力学（configurational mechanics）に立脚して、多結晶金属材料のもつ乱雑さを定量化し、材料の不均質性と乱雑さを理論

的・解析的に検討することを目的とした。不均質力 (inhomogeneity force) を数値的に評価する方法を確立するとともに、その力学的な意味を検証し、さらに材料の微視的損傷への適用可能性を検討することとした。

## 2. 研究の目的

不均質力の概念の多結晶金属材料への適用を目的として、以下の課題を検討することを目的とした。

(1) 不均質力評価のアルゴリズム構築：負荷が作用している多結晶体の任意の点あるいは特定の点において、不均質力

$$f^{inh} = \int b^T n ds$$

を数値的に評価するための手法を確立する。ここで  $b$  はエシェルビー応力 (エネルギー・モーメント) テンソルである。

(2) 不均質力の物理的意味の明確化：不均質力は、き裂先端を含む場合には破壊力学におけるエネルギー解放率 (J 積分) と等価であり、界面ではエネルギー落差を表すことを数値的に確かめる。

(3) 薄膜被覆材料の剥離可能性の検討：不均質力の応用として、熱負荷に伴う薄膜被覆材料の剥離を解析し、界面における不均質力と膜の変形モードの相関と剥離可能性を検討する。

(4) 多結晶体の界面および稜線での不均質力評価：微視的な問題として、多結晶体界面における不均質力を数値的に解析し、積分経路依存性や稜線長さへの依存性など、不均質力の持つ基本的な性質を検討する。

## 3. 研究の方法

有限要素法 (Finite Element Method) を用いて解析を行う。多結晶金属材料のモデルをポロノイ多面体作成の手法を用いて構成する。ポロノイ分割では予めランダムに配置した多数の点について、その近傍の点との最近接垂直二等分面をとることで、凸多面体を構成する方法であり、ここでは、(1) 被覆材料の解析にあたってはボクセル分割した要素に多面体を適用して、ボクセル中心の位置によって結晶セルに配置する場合と (2) ポロノイ多面体に分割した後に 10 節点 4 面体要素で再分割して多結晶金属を直接模擬する場合の 2 通りを用いた。さらに、結晶セルの形状と体積の乱雑さを自由に表現できるように、4 次元のポロノイ多胞体を 3 次元に投影する方法を行っている。個々の結晶には単純立方晶を模擬した材料異方性を与えた。

不均質力を算出するにあたっては、ひずみエネルギーと応力ならびに変位勾配 (変形勾配) が必要となり、それらは通常は要素内の積分点で評価される。一方、不均質力はエシ

エルビー応力を表面積分するから、これらを同時に満足するように仮想的な要素 (あるいは表面積分のための領域) を別途作成して、上式の積分を数値的に求めることとした。また、多結晶体の界面での解析では、不均質力の数値的な収束を議論する必要がある。そこで、先の要素分割で 4 つの分割パターンを作成して、単位面積当たり/単位長さ当たりの不均質力を算出して不変性を検証することとした。

## 4. 研究成果

本研究課題で得られた成果を、モデリング、アルゴリズム、妥当性を含めていくつか示す。

(1) 結晶モデル：3 次元ポロノイ多面体分割に基づく結晶セルと 4 次元ポロノイ分割によるセルを比較したものが Fig. 1 である。Fig. 1(a) は単位立方体中の個々の結晶セルの体積の分布を示しており、Fig. 1(b) は個々のセル多面体の面の数を表している。4 次元からの投影モデルの方が、体積分布のばらつきが大きいため、より自由度の高いモデリングが可能であると考えられる。4 次元目の引数を一定値 (0) にすることで、3 次元多面体に帰着することも確かめてある。今後、この成果を用いて小さい介在物をモデリングした解析を行うことが考えられる。なお、4 次元でのモデリングによって面の数が、やや小さくなる。これは、小さなセルが存在するためには、単純な (低位の) 多面体であることが必要であることを表している。

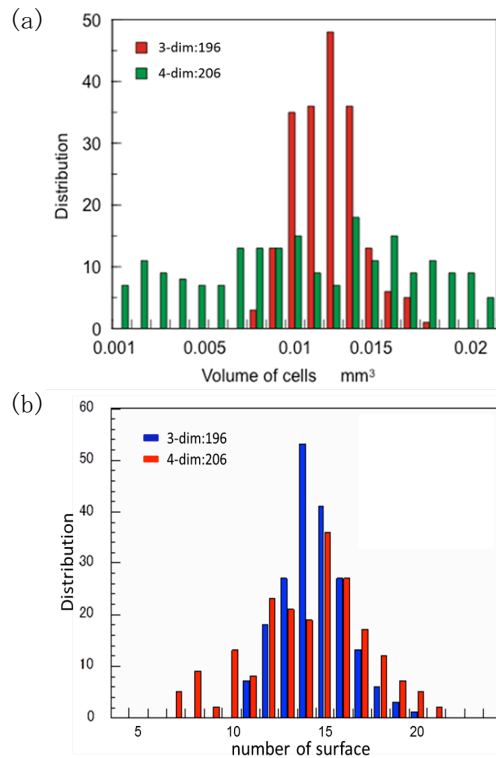


Fig. 1 結晶分割法による多面体の比較

(2) 不均質力とエネルギー解放率：き裂を挟んだ領域での不均質力と界面を挟んだ領域での不均質力を比較して、不均質力  $f^{inh}$  と J 積分 (エネルギー解放率) の性質を比較した。直方体にき裂を導入して単純な場合のエネルギー解放率を不均質力から求めるとともに、同様に異種材料からなる接合された直方体について不均質力を解析した。Fig. 2 は不均質力の要素分割依存性を表している。まず、き裂では、き裂 (線) / き裂面に垂直な不均質力 ( $G_y$  と表示) が支配的であり、き裂長さ当たりで表示することによって、要素依存性がない (不変) であることがわかる。これは 2 次元 J 積分の経路独立性に対応する。一方で、異種界面では界面に垂直な成分 ( $G_z$  と表示) が支配的であり、これは面積で正規化することによって不変性が示されることになる。また、き裂と界面とを直接比較するのは困難であるが、き裂先端での特異性が大きいことがわかる。なお、弾性変形であれば、均質な領域では不均質力は 0 に収束している。

境界条件として適切な負荷が作用していることが前提であるが、不均質力が生成されるのは、(a) き裂および自由表面、(b) 異種界面 (2 種のセルの接合面)、(c) 稜線 (3 種のセルの接合線)、(d) 角点 (4 種のセルの接点)、および (e) 塑性変形した領域 (バルクとしての不均質領域) である。多結晶体の内部の損傷として問題となるのは、(b) から (e) とと言える。

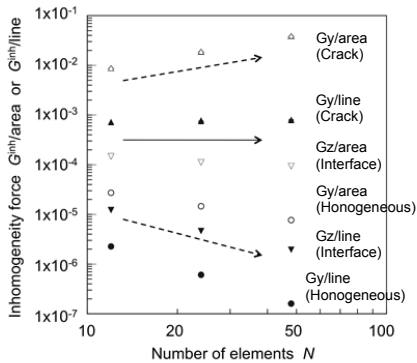


Fig. 2 き裂と界面における不均質力

(3) 薄膜被覆材の界面における不均質力：多結晶材料からなる基材に薄膜層は被覆した場合の熱負荷における不均質力の解析を試みた。解析モデルを Fig. 3 に示す。以前の実験的検討に基づいて、基材にはステンレス鋼を配置し、 $10 \mu\text{m}$  の薄膜層はニッケルとした。電析では被覆層の結晶が微細になることがわかっている。基材、表面ともに与えられた温度 (あるいは温度勾配) のもとで、基材がほぼ自由膨張するとの仮定で周囲の変位を規定している。実験的な予備検討によって、与えられた材料の組合せでは、温度上昇に伴い被覆膜には圧縮熱応力が生じることにな

る。このとき、界面で初期欠陥がある場合や表面にせん断力が作用している場合も、別途解析している。

単純に熱負荷を与えたときの界面における不均質力の発達を Fig. 4 に示す。図中の A1 は界面が厳密に平坦であったときの不均質力であり、A2 および A3 は、それぞれ  $0.2 \mu\text{m}$ 、 $0.6 \mu\text{m}$  で界面に乱雑な凹凸を導入した結果を表している。不均質力は界面に垂直な成分が常に大きいことがわかる。これは、不均質力がエネルギー落差を反映していることを意味している。一方、図から明らかなように、界面の粗さ (凹凸) が不均質力の面内成分に大きな影響を与えている。特に、表面あらかさを  $0.6 \mu\text{m}$  導入した場合には、垂直方向の不均質力に匹敵する値 (図中の ■ 印) が生じており、面内でのエネルギー落差、すなわち界面の剥離可能性を示唆するものであると考えられる。ここでは、剥離に関して何らの条件を提案するものではないが、今後、力学的な観点から薄膜層の剥離を議論する端緒になると考えられる。

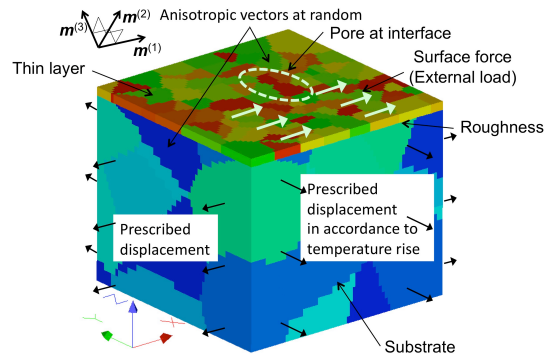


Fig. 3 薄膜被覆材の解析モデル

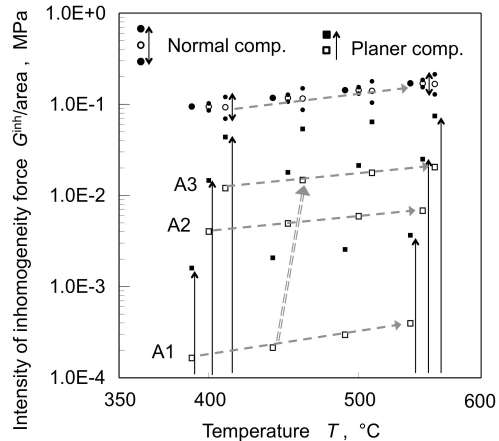


Fig. 4 熱負荷下の界面における不均質力

(4) 多結晶における不均質力評価：多結晶モデルの個々の界面および稜線において不均質力を評価して、その性質を議論した。これまでの結果から界面では面での正規化、稜線

では長さでの正規化が適切であろうと予想される。Fig. 5 は結晶モデルの界面における不均質力の大きさについて、要素分割パターンによる積分経路依存性を調べたものである。約 4,000 個のデータを処理するために、統計上典型的な値を記してある。横軸は表面積分の径を表しており、7:1 から 1:3 と変化させることで、径を大きくしている。したがって、不均質力  $f^{inh}$  も大きくなる (図中の橙色)。しかしながら、これを投影した界面の面積で除すことによって、ほぼ同じ値を示している。不均質力は、結晶中の界面であっても積分経路に依存しないことを表したものである。

Fig. 6 は結晶モデルの約 7,000 本の稜線について不均質力の傾向を示したものである。ここでは、異なった傾向が観察される。稜線での不均質力においては、表面積分中に界面での不均質力が必然的に混入する。稜線が 3 個の結晶 A, B, C の交わる線であるとする、AB, BC, CA の不均質力が表面積分の中に表われる。一方で、稜線 ABC の不均質力は径に比例して生じることになるから、径の 2 乗  $r^2$  で除すと稜線の不均質力のために減少し (図中青印の減少傾向)、径  $r$  で除すと界面の不均質力のために増大 (橙色の増大傾向) が表われることになる。この図は、まさに不均質な各形態 (界面、稜線、角点) における不均質力の傾向を表していると考えられる。

個々の不均質力のばらつきが大きいいため、ここでは統計的な議論しか行わなかったものの、今後、詳細に検討することによって、界面に平行な成分の傾向や隣り合う結晶との相関、また稜線における不均質力の方向と界面に平行な方向との相関を計算することが望まれる。本課題では、不均質力の (a) き裂、(b) 界面、および (c) 稜線を検討してきた。これらは、一つのアルゴリズムのもとで統一的に理解できることがわかった。次に必要な

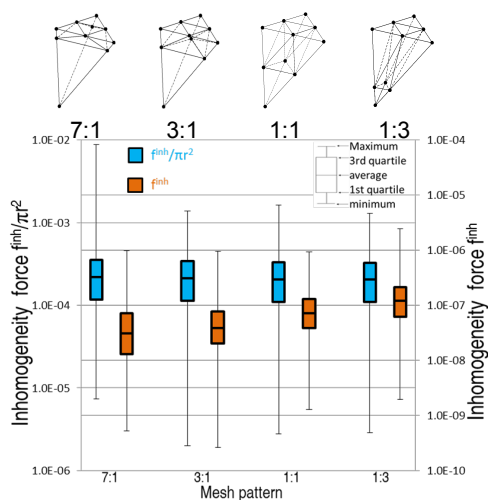


Fig. 5 界面における不均質力

ことは、(d) 角点の性質であり、さらに (e) 不均質領域としての塑性変形が挙げられる。これらを総合的に評価することによって、多結晶金属材料の微視的損傷に関する理解が進むことが期待される。

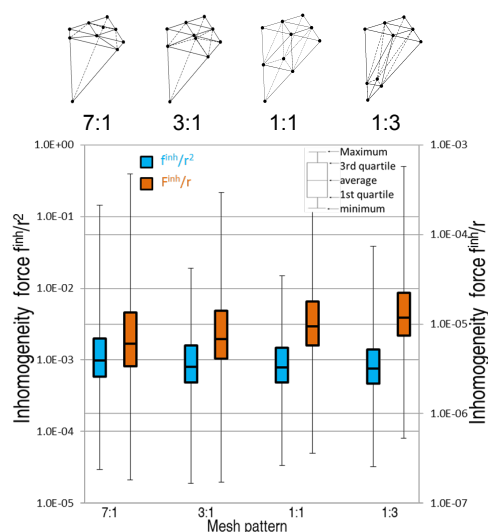


Fig. 6 稜線における不均質力

## 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 3 件)

(1) Shoji Imatani and Ek-u Thammakornbunjut, Numerical Evaluation of Inhomogeneity Forces in a Coating Layer Due to Thermal Loading, *Materials at High Temperatures*, Vol. 29, No. 4 (2012) pp.330-339.

doi:10.3184/096034012X13486528828884

(2) Shoji Imatani, Numerical Evaluation of Compressible Plasticity Behaviour of Metal Foams, *Technische Mechanik*, Vol. 32, No. 2-5 (2012) pp.265-272.

[http://www.ovgu.de/ifme/zeitschrift\\_tm/2012\\_Heft2\\_5/16\\_Imatani.pdf](http://www.ovgu.de/ifme/zeitschrift_tm/2012_Heft2_5/16_Imatani.pdf)

(3) Shoji Imatani and Ek-u Thammakornbunjut, Possible debonding mode of coated film under thermal loading, *International Journal of Engineering Science*, Vol. 49, No. 12 (2011) pp. 1443-1451.

doi:10.1016/j.ijengsci.2011.04.004

[学会発表] (計 4 件)

(1) Shoji Imatani, Morphology Effects on Plasticity Behavior of Cellular Materials, Proceedings of the 6th ECCOMAS, (2012) CD-ROM Paper-No. 4122.

(2) Shoji Imatani, Material Characterization of Polycrystals through Hyperspace, Proceedings of 23rd International Congress on Theoretical and Applied Mechanics, (2012) Paper-No.SM04-049.

(3) Ek-u Thammakornbunjut and Shoji Imatani,  
3D Finite Element Analysis of Configurational  
Forces in Surface Coating, *The Second TSME  
International Conference on Mechanical  
Engineering*, (2011) Paper-No. AMM04.

(4) Shoji Imatani and Ek-u Thammakornbunjut,  
Thermomechanical Response and Onset of  
Instability of Thin Film Layer Due to Thermal  
Loading, *AIP Conference*, Vol. 32C, No. 1  
(2010) pp.97-119.

〔図書〕（計 0 件）

〔産業財産権〕

○出願状況（計 0 件）

○取得状況（計 0 件）

〔その他〕

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

今谷 勝次 (IMATANI SHOJI)

京都大学・エネルギー科学研究科・准教授  
研究者番号：70191898