

令和 2 年 4 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：2017～2019

課題番号：17K18827

研究課題名（和文）疲労のサイズ依存性の計算科学的解明

研究課題名（英文）Computational study on size dependent fatigue of materials

研究代表者

尾方 成信（Ogata, Shigenobu）

大阪大学・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）：繰り返し荷重下での欠陥の導入確率を反応速度論に基づいて予測する確率理論モデルを新たに構築し、ナノワイヤの疲労寿命を、荷重振幅、荷重負荷振動数、温度の関数とし予測することを可能とした。さらにこの理論の有効性を検証するために、分子動力学疲労解析を、銅ナノワイヤに対して荷重振幅、荷重負荷振動数、温度を変えて実施し、これら様々な条件下で得られた疲労寿命の解析結果と、理論で予測された寿命とが大変良い一致を示すことを実証した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

学問的には、18世紀の産業革命以来、長年にわたって構築されてきた材料疲労の学問体系に、新たにサイズの概念を導入することで、疲労の学問体系に不連続な発展をもたらすものである。また工学的には、近年実用化が加速しているナノ材料の疲労寿命を、様々な力学環境下、温度環境下において予測することを可能とし、ナノ材料によって構成されるナノ構造体の長期運用下での信頼性の向上に資するものである。

研究成果の概要（英文）：A theoretical model based on transition state theory for predicting fatigue life of nano-materials has been established. In the model, the fatigue life is described by a function of loading amplitude, loading frequency, and system temperature. To demonstrate validity of the theory, molecular dynamics fatigue simulations to Cu nano-wire has been performed under different loading amplitudes, loading frequencies, and system temperatures. It has been confirmed that the theory well-predicts the fatigue life of the nano-wire directly estimated by the molecular dynamics fatigue simulations under the different conditions.

研究分野：計算材料力学、計算材料科学

キーワード：疲労 ナノ材料 分子動力学 反応速度論 格子欠陥

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

ナノレベルの特徴長さを有する各種ナノ材料の創製が可能になり、ナノ材料を部材として用いた構造体の構築が現実的になりつつある。材料をナノにまで小さくするとバルク材料とは全く異なる力学挙動を示すため、これらナノ材料の力学特性の根本理解が求められている。このような背景のもと、研究代表者は研究開発当初までに計算材料力学や計算材料科学的手法を駆使しつつ実験研究と強く連携し、各種ナノ材料の力学特性について以下に示す多数の研究成果を発表してきた。これらの研究の主な成果として、ナノ材料の強度、延性、靱性、クリープ特性はどれも明確な材料のなんらかの特徴長さ依存性を有していることがわかった。具体的には、ナノ材料では材料自体の特徴長さがマクロ材料中で形成される欠陥(転位、双晶、変態組織など)が作る欠陥組織の特徴長さ(通常マイクロメートル)を下回ることが理由で、強度の向上、延性や靱性の改善、クリープ変形の温度・ひずみ速度依存性の急激な上昇などの特異的な力学的特性が発現することがわかった。つまり例えば、従来の応力ひずみ線図やクリープ変形線図に、あらたな軸として、特徴長さの情報を追加する必要があることがわかってきた。このようなマクロ材料中でのマイクロメートルオーダーの欠陥組織形成は、疲労試験でも疲労の前駆現象として通常観察されるものであり、こういった特徴長さ依存性は疲労現象にもあてはまるはずであると考えたのがこの研究を提案するに至った経緯である。それまでの疲労研究には材料サイズの影響を論じた研究がほとんどなかった。このような状況において、本研究で、疲労の学問体系にサイズ概念を新規に導入することは、長年の莫大な疲労研究の資産と学問体系を尊重し継承しつつも、その学問体系を飛躍的に発展させる挑戦であった。特にナノスケール領域への展開は、発達が著しいナノ材料創製技術と融合して、疲労強度を考慮した新たなナノ材料設計指針の構築に繋がるはずであり、その先には、飛躍的に優れた耐疲労特性を有するナノ材料創造にも繋がっていくと考えられる。

2. 研究の目的

18世紀の産業革命以来、長年にわたって構築されてきた材料疲労の学問体系に、新たにサイズ概念を導入することで、疲労の学問体系に不連続な発展をもたらす。具体的には、最先端の計算材料力学および計算材料科学的手法を用いて疲労シミュレーションを実施し、疲労現象のサイズ依存性を実験に先駆けて予測する。これにより近年盛んに研究され、その驚くべき力学特性から次世代機械材料としての工学的応用が期待されているナノメートルの特徴長さ(材料そのもののサイズや材料内部の組織の代表寸法)を有するナノ材料の疲労予測をも可能とし、これまでの疲労の学問体系をナノからマクロまでのあらゆる特徴長さを持つ材料を対象にできる学問体系へと拓く。十分大きな特徴長さを有する結晶材料における疲労の開始は、材料内部での転位組織形成による材料表面での突き出しや入り込みに起因する表面き裂生成であることがわかっている。このとき形成される転位組織のスケールはマイクロメートルである。特徴長さの大きな材料では、このように転位組織を形成するスペースが材料内部に与えられている。しかし、特徴長さが小さくなり、材料自体の大きさもしくは転位が動ける領域である結晶粒の大きさがナノメートル(マイクロメートル以下)になるとどうなるであろうか。転位組織が全く形成されないか、またはされたとしても全く異なるものであることが予想される。このような場合にはこれまで常識とされてきた疲労破壊の論理が成り立たない。ナノ材料でも疲労するのか、するとすれば一体どのようなメカニズムなのかを明らかにすることが大きな目的のひとつである。そして最終的には、ナノ材料の疲労寿命を予測するための理論の構築やその正当性の確認を行う。

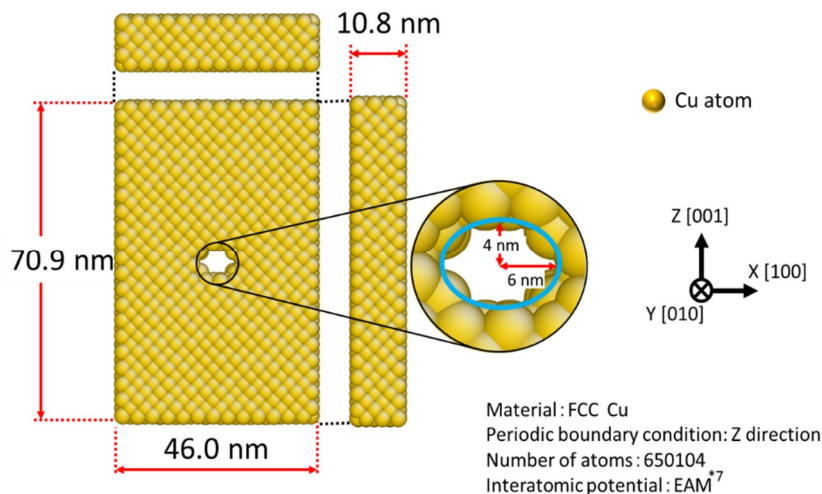


図1 ナノ材料の原子モデル

3. 研究の方法

(1) 分子動力学計算法を用いて、計算機中に構築した、図1に示すような初期欠陥を有するナノ材料の原子モデル(一例)に対して、図2にしめすような力学的繰り返し負荷(一例)を作用させ、その疲労挙動を原子レベルで確認するとともに、疲労破壊までの負荷振幅依存性、負荷振動数依存性、環境温度依存性を、それぞれの条件を変化させることで獲得した。

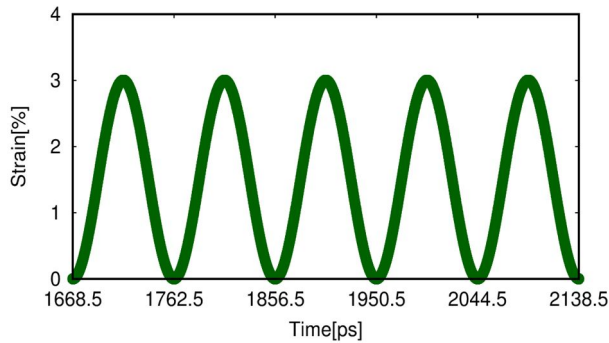


図2 繰り返し負荷荷

(2) 有限温度での繰り返し負荷中に材料中に欠陥が生成するまでの平均時間を、反応速度論に基づいて定式化した。

(3) 欠陥生成の活性化エネルギーを負荷応力の関数として分子動力学法と反応経路探索法を用いて計算した。



図3 繰り返し負荷下での欠陥生成

(4) (2) で定式化した理論式に、(3) で求めた活性化エネルギーの応力依存性を代入して、疲労寿命の負荷振幅依存性、負荷振動数依存性、環境温度依存性を獲得した。

4. 研究成果

(1) 分子動力学法を用いた疲労シミュレーション(研究の方法(1))により、ナノ材料は初期欠陥の発生(図3)が破壊を導く致命的なイベントであり、その発生の直後に破壊がもたらされることがわかった。これは、大きなサイズの材料が見せる転位網の発達に起因する疲労挙動とは全くことなるものであり、疲労に対するサイズ効果を明らかにすることができた。

(2) 研究の方法(2)(3)で構築した疲労寿命予測モデルの正当性を確かめるために、モデルによって予測された疲労寿命の負荷振幅依存性、負荷振動数依存性、環境温度依存性と分子動力学法による疲労シミュレーションにより実測された疲労寿命を比較した。その結果、両者が大変よく一致することがわかった。

以上、本研究全体を通じて、ナノ材料の疲労メカニズムの原子論的詳細と疲労寿命の予測が可能となった。

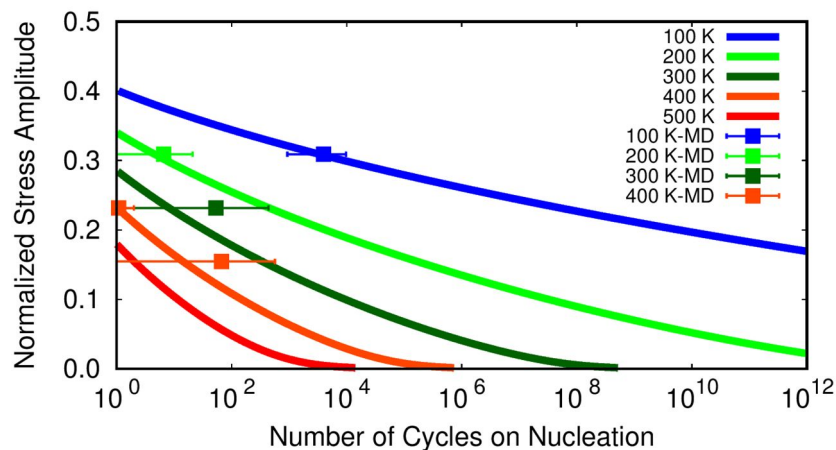


図4 疲労寿命の理論予測と分子動力学解析結果の比較

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 4件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 De-Gang Xie, Zhi-Yu Nie, Shuhei Shinzato, Yue-Qing Yang, Feng-Xian Liu, Shigenobu Ogata, Ju Li, Evan Ma, Zhi-Wei Shan	4. 巻 10
2. 論文標題 Controlled growth of single-crystalline metal nanowires via thermomigration across a nanoscale junction	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 4478-1-8
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1038/s41467-019-12416-x	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 Yuji Sato, Shuhei Shinzato, Takahito Ohmura, Shigenobu Ogata	4. 巻 121
2. 論文標題 Atomistic prediction of the temperature- and loading-rate-dependent first pop-in load in nanoindentation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 International Journal of Plasticity	6. 最初と最後の頁 280-292
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.ijplas.2019.06.012	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 -
1. 著者名 Gurcan Aral, Md Mahbubul Islam, Yun-Jiang Wang, Shigenobu Ogata, and Adri C. T. van Duin	4. 巻 125
2. 論文標題 Atomistic insights on the influence of pre-oxide shell layer and size on the compressive mechanical properties of nickel nanowires	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 165102-1-13
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1063/1.5080640	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 Ping-Jiong Yang, Qing-Jie Li, Tomohito Tsuru, Shigenobu Ogata, Jie-Wen Zhang, Hong-Wei Sheng, Zhi-Wei Shan, Gang Sha, Wei-Zhong Han, Ju Li, Evan Ma	4. 巻 168
2. 論文標題 Mechanism of Hardening and Damage Initiation in Oxygen Embrittlement of Body-Centred-Cubic Niobium	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 331-342
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.actamat.2019.02.030	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 Gurcan Aral, Md Mahbubul Islam, Yun-Jiang Wang, Shigenobu Ogata and Adri C. T. van Duin	4. 巻 20
2. 論文標題 Oxyhydroxide of metallic nanowires in a molecular H2O and H2O2 environment and their effects on mechanical properties	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Phys. Chem. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 17289
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8cp02422g	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 新里秀平, 糟谷瑛, 尾方成信	4. 巻 67
2. 論文標題 ケモメカニカルポテンシャルに基づく拡散方程式を用いたナノワイヤ中の格子間原子拡散シミュレーション	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 材料	6. 最初と最後の頁 263-268
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2472/jsms.67.263	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11件 (うち招待講演 8件 / うち国際学会 8件)

1. 発表者名 Shigenobu Ogata, Shuhei Shinzato, Yuji Sato, Takahito Ohmura
2. 発表標題 Atomistic modeling of the temperature and loading rate dependent pop-in load in nanoindentation
3. 学会等名 International Conference on Plasticity, Damage and Fracture (ICPDF) 2020 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Shigenobu Ogata
2. 発表標題 Multiscale modeling study of pop-ins in nanoindentation
3. 学会等名 Asia Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM) 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shigenobu Ogata, Yuji Sato, Takahito Ohmura and Shuhei Shinzato
2. 発表標題 Atomistic prediction of the temperature- and loading-rate-dependent pop-in load in nanoindentation
3. 学会等名 The 4th International Symposium on Atomistic and Multiscale Modeling of Mechanics and Multiphysics (ISAM4-2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shigenobu Ogata
2. 発表標題 Atomistic prediction of temperature and loading rate dependent pop in load of nanoindentation
3. 学会等名 13th International Conference on the Mechanical Behavior of Materials (ICM13) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shigenobu Ogata, Takahito Ohmura, Yuji Sato, Shuhei Shinzato
2. 発表標題 Modeling of pop-ins in nanoindentation
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 荒賀玲司, 佐藤悠治, 石井明男, 君塚肇, 尾方成信
2. 発表標題 Cuナノワイヤの繰り返し荷重下での変形挙動の分子動力学解析
3. 学会等名 日本機械学会関西学生会2018年度学生卒業研究発表講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shigenobu Ogata
2. 発表標題 Hydrogen and dislocation assisted grain boundary crack initiation ~ A molecular dynamics study ~
3. 学会等名 International Conference on Plasticity, Damage, and Fracture 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shigenobu Ogata
2. 発表標題 Modeling of Deformation and Strength of Structural Materials", International Seminar series on Time Dependent Multiscale Phenomena of Materials
3. 学会等名 International Seminar series on Time Dependent Multiscale Phenomena of Materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Shigenobu Ogata
2. 発表標題 Predictive Multiscale Modeling of Deformation and Strength of Structural Materials
3. 学会等名 IUMRS-ICA 2017 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Shigenobu Ogata
2. 発表標題 Predictive Multiscale Modeling of Deformation and Strength of Nanostructured Structural Materials
3. 学会等名 The 9th Conference of Asian Consortium of Computational Materials Science (ACCMS) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 福島秀, 石井明男, 尾方成信
2. 発表標題 離散転位動力学法を用いた繰返し荷重下での転位組織の形成に関する研究
3. 学会等名 日本機械学会 M&M2017材料力学カンファレンス
4. 発表年 2017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	石井 明男 (シャードンバオ) (Ishii Akio) (80773340)	大阪大学・基礎工学研究科・助教 (14401)	