

平成21年5月25日現在

研究種目：基盤研究（B）

研究期間：2006～2008

課題番号：18360059

研究課題名（和文） エシェルビーの概念に基づく正準化連続体力学の体系構築と不均質材料のモデル化

研究課題名（英文） CANONICAL FORMULATION OF CONTINUUM MECHANICS BASED ON THE ESHELBY CONCEPT AND MODELIZATION OF INHOMOGENEOUS MATERIALS

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：エシェルビーによる形態力の概念は、空間表記における力学系を物質表記に置き換えたものと解釈され、その適用と応用には重要なテーマが含まれている。本研究課題では、多結晶金属材料における幾何学的・力学的不均質性に着目して、不均質性の源となる形態力の数値的評価法に関するアルゴリズム構築と検証を試み、多結晶材料モデルを用いた具体的な不均質性の発現の一形態である表面粗面化への適用ならびに薄膜／箔材料の力学特性の推定と検討を行った。

交付額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	5,500,000	1,650,000	7,150,000
2007年度	2,300,000	690,000	2,990,000
2008年度	1,800,000	540,000	2,340,000
年度			
年度			
総計	9,600,000	2,880,000	12,480,000

研究分野：連続体力学

科研費の分科・細目：機械材料・材料力学

キーワード：正準化，不均質性，有限要素法，多結晶体，表面粗面化，箔

1. 研究開始当初の背景

エシェルビーによる形態力の概念は、物質表記（基準配置）における力学的つり合いであって、エシェルビー応力は電磁気学におけるマクスウェル応力や破壊力学におけるJ積分など、その適用と応用にはきわめて重要な概念が含まれている。実在の材料には何らかの不整あるいは不均質性（乱雑さも含む）が含まれており、その不均質性が巨視的な挙動に大きな影響を及ぼす。材料の破壊や損傷の評価にあたっては、この不整の影響を避けることはできず、破損や座屈などのパラダイムシフトの原因となっている。

このように形態力の概念は比較的古くからあるものの、固体力学およびその境界値問題の解析において、破壊力学でのJ積分を除いては、形態力の具体的な数値やその物理的意味、特に多結晶体における不均質性の実体を見いだしていなかったため、材料の変形に伴う乱雑さの発達を定性的に議論するにとどまっていた。

2. 研究の目的

本課題においては、エシェルビーの概念に基づいて、実際の複雑固体における形態力あるいは不均質力を数値的に定量化するため

のアルゴリズム構築と多結晶材料をはじめとする不均質材料のモデル化に適用することを目的とした。具体的には以下のテーマについて検討した。

(1)多結晶における不均質力の評価:多結晶体において、不均質性は隣接する結晶との不整合が大きな影響を及ぼす。そこで個々の結晶に生じる不均質力を数値的に評価するアルゴリズムを構築し、不均質力と結晶の持つ乱雑さの相関を数値解析的に検討した。

(2)表面粗面化現象の解析:平坦な表面を持つ多結晶体を引っ張ると、表面に凹凸が生じることが知られている。これを多結晶体のもつ幾何学的な乱雑さに関連して検討し、その定量化を目指す。

(3)箔材料の力学特性評価:寸法が小さくなると材料の不均質性が相対的に顕著に現れる。そこで、電解箔の硬さ特性の変化に注目して力学特性評価と残留応力場を含む箔の特性変化を解明する。

3. 研究の方法

(1)多結晶体のモデル:3次元立方体(および直方体)にポロノイ多面体を多数配置し、乱雑な異方性軸を与えることによって、個々の多面体セルを結晶と見なして解析する。例として図1に示すように、結晶が大きい粗粒部と小さな細粒部からなる多結晶体を構成することが可能であり、溶接熱影響部などのモデル化にも用いることができる。

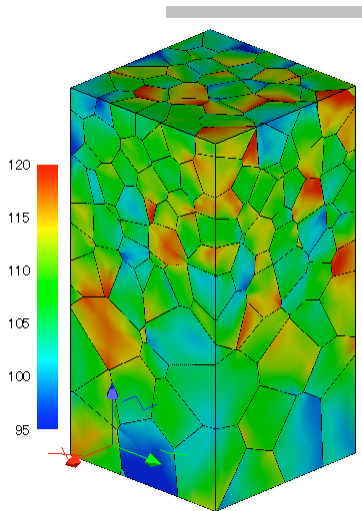


図1 多結晶体のモデル例

さらに、長手方向に結晶の数を多数配置することで、表面粗面化解析に適用した。解析にあたっては有限要素法を用いている。

(2)不均質力の数値的評価:エシェルビーによる形態力は、線形運動量の保存則について仮想仕事の原理を適用して基準配置に書き直

すことで定式化できる。このとき、エシェルビー応力を

$$b^L_k = W\delta^L_k - T^L_i F^i_k \quad (1)$$

とすると、つり合い方程式と形態力(不均質力) f^{inh} は

$$\frac{\partial b^L_k}{\partial X^L} + f^{inh}_k = 0 \quad (2)$$

$$f^{inh}_k = -\left. \frac{\partial W}{\partial X^k} \right|_{\text{expl}} \quad (3)$$

で与えられる。式(3)の右辺を直接評価する代わりに、式(1)および式(2)を通常の有限要素法から導出して(掃き出して)、間接的に形態力を算出することとした。

(3)電解ニッケル箔の力学特性推定:箔材料を単体で機械的試験に供することは困難であるため、引張り試験に代わり硬さ試験(マイクロビッカース硬さ)の荷重-深さ曲線(押し込み曲線または硬さ曲線)を用いることとした。このとき、有限要素法でビッカース圧子を押し込んでいくプロセスを解析し、実験での押し込み曲線をよく表す材料パラメータを定めた。巨視的なバルク材に対しては、10%程度の精度でパラメータフィットが可能であることがわかっている。まず、基材の影響を受けない試験荷重を定め、電解箔が通常バルク材の参照データに比べて、流動応力が大きく、延性が小さいことを確認した。薄板化によるこのような傾向は、すべての材料に広く認められる事実である。基材にオーステナイト系ステンレス鋼とマルテンサイト系ステンレス鋼の2種類を用いることで、箔に引張りおよび圧縮の熱応力ならびに付随する反転残留応力を付与して、材料特性が繰返し熱負荷によってどのように変化するかを実験的に検討した。

4. 研究成果

(1)多結晶体の不均質力の発展

①繰返し変形での不均質力:図2に示すように、巨視的にはほぼ弾性変形の小さはひずみ範囲の繰返し変形でも微視的には交番塑性となることが示唆される。

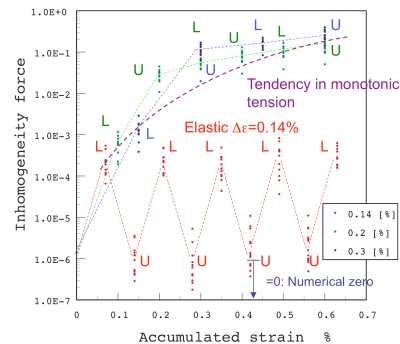


図2 繰返し変形における不均質力

②結晶間での相関：図3に示すように、不均質力と隣接する結晶との不整合（ミスフィット）には、正の相関関係があると考えてよい。ただし、さらに詳しく検討するためには、粒界（2結晶）、稜線（3結晶）、角点（4結晶）での不均質力を評価する必要がある。

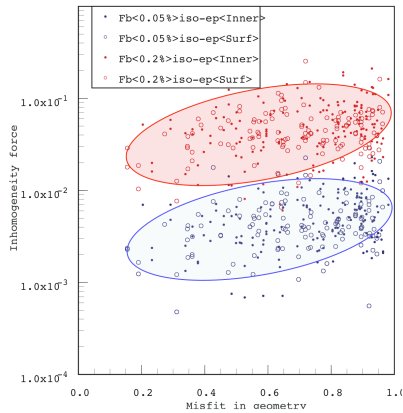


図3 不均質力とミスフィットの相関

(2) 多結晶体の表面粗面化

①スペクトル強度：表面粗さはひずみの増大とともに、ほぼ比例して大きくなる。図4に示すように、平均結晶粒径の約10~25倍の大きさのうねりをもつ。これは理論的にも実験的にもほぼ定量的に一致する。また、変形のごく初期である弾性変形領域でのプロファイルがほぼ大きくなると考えてよい。すなわち表面粗面化現象は、多結晶体の持つ不均質性が発現したものであり、具体的な塑性変形に関わる力学的特性にはほとんど無関係である。数値解析では長手方向に実験と同じ程度の結晶粒を配置する必要がある。

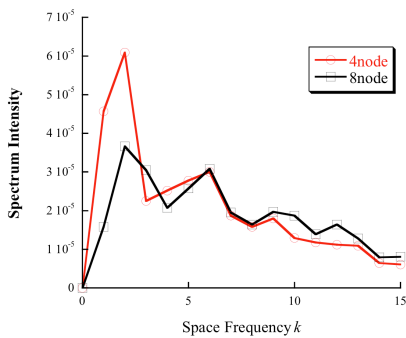


図4 表面粗面化のスペクトル強度

②表面粗さの定量化：算術平均粗さ Ra を評価するには、裏面の拘束など解析上の条件の影響が大きい。試料の厚さ方向に数結晶粒は位置するだけでは、実験値の1/10程度の粗さしか得られない。図5はいくつかの解析パターンについて、Ra を求めたものである。試料の厚さ方向に十分な数の結晶粒を配置し（モデル E）、かつ結晶の異方性パラメータを精度よく入力する（モデル D）するこ

とによって、Ra は実験結果に近づき、定量的にもほぼ解析可能である。

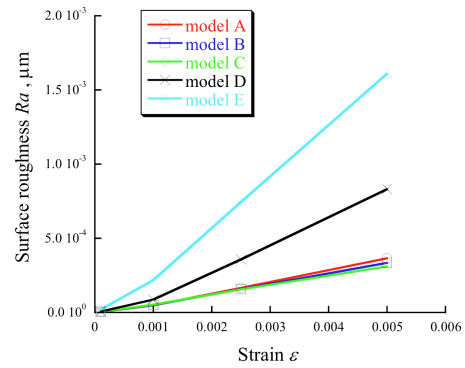


図5 表面粗さに及ぼす解析上の因子

(3) 箔の力学特性の解析

①繰返し熱負荷の影響：500℃まで昇温すると1回目の加熱・冷却プロセスを経て、硬さが著しく減少する。一方で最高温度200℃の条件で行った比較実験では、硬さ、弾性率ともにほとんど変化が見られない。このことから、500℃の加熱・冷却プロセスを経ることで電解ニッケル箔の結晶構造や配向性に何らかの影響を及ぼしていることが考えられる。図6は繰返し熱負荷を与えた SUS304 基材のニッケル箔の荷重-深さ曲線（図6a）、および SUS410 基材のニッケル箔の荷重-深さ曲線の変化（図6b）を示している。基材/箔の線膨張係数の違いによって、SUS304 基材の箔には圧縮の残留応力が生じており、一方、SUS410 基材の箔には引張りの残留応力が生じている。このとき、SUS410 のニッケル箔の硬さは、繰返し数とともに著しく小さ

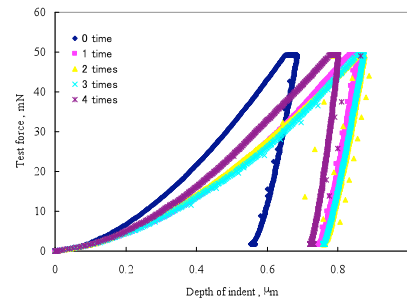


図6(a) SUS304 基材の Ni 箔の硬さ

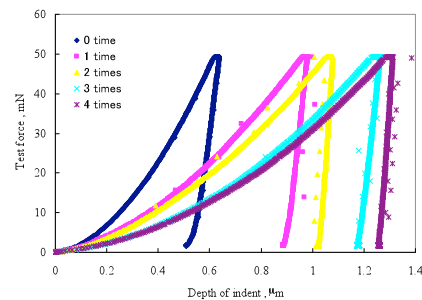
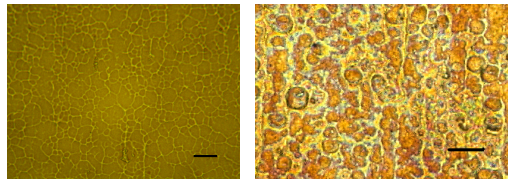


図6(b) SUS410 基材の Ni 箔の硬さ

くなり、バルク材の硬さ（約 300Hv）よりも小さいことがわかる。

②熱負荷に伴う箔の形態変化：温度変化に伴って箔に組織的变化と機械的变化が観察される。まず組織変化については、500℃程度の熱負荷を与えるると組織が変化すると考えられる（200℃では観察されなかった）。図7に温度変化前後の表面状態を示す。結晶粒径が増大しており、また表面の粗さもわずかに変化している。機械的／形態的な変化に関しては、箔と基材の界面剥離がある。剥離によって、荷重-負荷曲線が変化するため、硬さ試験によって界面剥離が推定できる。



(a) 加熱前 (b) 加熱後
図7 箔表面の性状（一寸法 10μm）

③箔の材料特性：実験により明らかになった材料異方性を考慮し、有限要素法を用いた押し込み変形解析を行った。硬さ曲線に敏感なものは F と n であり、これらを様々な値に変化させて、実験で得られた試験力-深さ曲線を最もよく再現する条件を求めることができる。図8は、荷重-深さ曲線を再現する材料定数の一例である。 $F=2700\text{MPa}$ であり、通常のバルク材の変形抵抗に比べて2倍以上大きな値となっている。一方、加工硬化指数は $n=0.11$ はバルク材に比べて小さく、延性が低下していることがわかる。このような結果は、電解箔に限らず材料の厚さが小さくなると観察される典型的な特徴である。

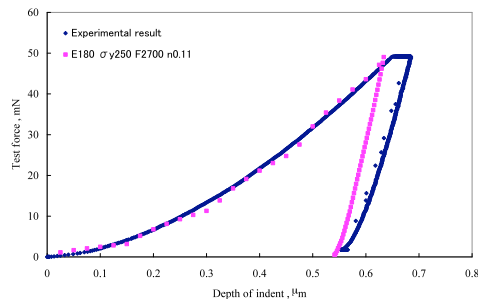


図8 箔の材料定数

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. Salvatore FEDERICO, Alfio GRILLO, Shoji IMATANI, Gaetano GIAQUINTA and Walter HERZOG, An Energetic Approach to the Analysis of Anisotropic Hyperelastic Materials, *International Journal of*

Engineering Science, Vol. 46, No. 2 (2008) pp.164-181.

2. Shoji IMATANI, Evolution of Inhomogeneity Forces in Polycrystalline Material Model, *APCOM'07-EPMESC XI: Third Asian-Pacific Congress on Computational Mechanics*(CD-ROM), (2007) Paper No. MS28-3-3.

3. Shoji IMATANI and Daisuke FUJIWARA, Macroscopic Properties of Inhomogeneous Materials with Randomly Distributed Pores, *Key Engineering Materials*, Vol. 340-341 (2007) pp.1031-1036.

〔学会発表〕（計 8件）

1. 今谷勝次, 材料不均質を表わすエシェルビー応力とエネルギー解放率, 第52回日本学術会議材料工学連合講演会, No.158(2008年10月24日), 京都市・京大会館.

2. 藤原直樹, 今谷勝次, 箔材料の微視組織を考慮した変形特性の解析, 第52回日本学術会議材料工学連合講演会, No.211(2008年10月22日), 京都市・京大会館.

3. 今谷勝次, 多結晶体の塑性変形とクリープ変形における材料不均質性, 日本機械学会 M&M2008 材料力学カンファレンス, GS305 (2008年9月17日), 草津市・立命館大学.

4. 今谷勝次, 清水健太, 硬さ試験に基づく電解銅箔の応力-ひずみ特性の検討, 日本材料学会第57期学術講演会, No.130(2008年5月25日), 鹿児島市・鹿児島大学.

5. 今谷勝次, 鎌原本也, 多結晶体の表面粗面化に関する直接シミュレーション, 日本材料学会第57期学術講演会, No.129(2008年5月25日), 鹿児島市・鹿児島大学.

6. 鎌原本也, 今谷勝次, 有限要素法を用いた多結晶体の表面粗面化解析, 日本学術会議第51回材料工学連合講演会, No.441(2007年11月29日), 京都市・京大会館.

7. 今谷勝次, 多結晶体の変形における不均質力の発展, 日本機械学会2007年度年次大会, No.2424 (2007年9月10日), 吹田市・関西大学.

8. 今谷勝次, 多結晶体のモデリングと材料不均質性の解析的検討, 日本材料学会第56期学術講演会, No.529(2007年5月20日), 名古屋市・名古屋大学.

6. 研究組織

(1) 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

(2)研究分担者

星出 敏彦 (HOSHIDE TOSHIHIKO)

京都大学・大学院エネルギー科学研究科・教授

研究者番号：80135623