

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 23 年 5 月 28 日現在

機関番号：14501

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2009 年～2011

課題番号：21560092

研究課題名（和文） 場の理論に基づく疲労き裂発生過程のマルチスケールモデリング

研究課題名（英文） Field Theory-based Multiscale Modeling for Fatigue Crack Initiation process

研究代表者

長谷部 忠司 (HASEBE TADASHI)

神戸大学大学院・工学研究科・准教授

研究者番号：20237994

研究成果の概要（和文）：本研究では、疲労条件下におけるすべり帯の形成からき裂の発生に至る過程をシミュレートする方法論を開発すべく、独自の理論であるマルチスケール塑性場の理論 (FTMP) を結晶塑性有限要素解析に適用し、ラダー的変調構造を伴うすべり帯部 (固執すべり帯: PSB) が自然に再現されること、同部中の転位ウォール構造が空孔拡散経路を確保する極めて重要な役割を担っていること等を明らかにするとともに、上記シミュレーション手法をほぼ確立した。

研究成果の概要（英文）：This study attempted modeling and simulation of a transient process from a slip band to a fatigue crack based on Field Theory of Multiscale Plasticity (FTMP), focusing on the dislocation substructures evolving during cyclic straining. A persistent slip band (PSB) with ladder-like structure was demonstrated to be successfully reproduced via FTMP-based incompatibility model introduced in a crystal plasticity-based FE simulation. After identifying the substantial role of the PSB ladder wall structure in the vacancy flow there, a preliminary simulation for the transition process was conducted, where the incompatibility model for the vacancy field was additionally introduced. There observed surface groove formation and its growth on the sample surface near the edge of PSB, implying its further evolution into a crack under successive straining cycles.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009 年度	1,200,000	360,000	1,560,000
2010 年度	1,200,000	360,000	1,560,000
2011 年度	1,200,000	360,000	1,560,000
総計	3,600,000	1,080,000	4,680,000

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：場の理論，マルチスケール，疲労き裂，結晶塑性，転位論

1. 研究開始当初の背景

疲労に関する研究は歴史が長く、その物理モデリングは現時点でも極めてチャレンジングな課題である。同課題に対しては、未だに決定打的な視点の提出やモデリングの例は皆無に近く、時間的にも空間的にも真にマル

チスケールの視点が不可欠となる対象である。すなわち、電子論的・原子論的視点からの材料物性から、転位運動に関する数理モデリングやシミュレーション技術、さらに“疲労”に関する現象論に至る、極めて多岐に渡る深い造詣と、大胆かつ新たな視点と方法論い

によるアプローチが要求される。

一方、国内外においてマルチスケールモデリング関連研究が活発に行われているが、多くの研究者の関心は、モデル化の質的向上よりも、近年高速化の著しいコンピュータ能力向上に伴う大規模計算へ向けられている。これはあくまで“腕力”的なアプローチと言え、多結晶金属材料という複雑なシステムの塑性変形・破壊挙動に対する原理原則、すなわちどのような仕組みで、それをどう捉えるべきかという鳥瞰的かつ“知的”観点からのそれは極めて少ない。その結果、対象とする現象の本質をあまり明確に捉えきれていない、表面的かつ安易なアプローチがほとんどであるのが現状であり、本課題のような複雑な問題はどちらかと言えば敬遠されてきた。

高サイクル疲労条件下では、一般に固執すべり帯(PSB)と呼ばれるひずみ集中部に対応する材料表面からき裂が発生する。同過程に関する研究は単結晶材を始め古くから行われており、現象論的にはよく理解されている。しかし同現象は、転位の集団的運動・相互作用から特徴的な下部組織を伴うすべり帯形成を含む“変形”から、き裂の生成という“破壊”への遷移過程を含んでおり、その完全なモデル化には必然的に“マルチスケールの観点”が必要とされ、まだ成功していない。また、転位下部組織としての“ラダー”組織が本質的にどのような役割を担っているかについても不明である(ほとんど追求されていない)。一方、転位動力学(DD)を駆使したラダー組織、とくにウォール間のチャンネル部における転位群の挙動に関する詳細シミュレーションが新たに幾つか行われており(未公表)、同部の塑性変形を担うらせん転位間の相互作用あるいはウォールとの相互作用について興味深い議論がなされていた。とくに、そうした相互作用の結果、刃状転位ダイポールが対消滅することから、チャンネル部およびウォール部のいずれにおいても原子空孔が集団的に発生することが示唆された。このような詳細メカニズムを勘案することで、疲労き裂発生過程に対する画期的なモデリングが現実的に達成可能であると判断した。

2. 研究の目的

本研究では、疲労条件下におけるすべり帯の形成からき裂の発生に至る過程をシミュレートする方法論を開発すべく、異なるスケールにおける不均質場の発展を数学的に記述できる申請者独自の理論であるマルチスケール塑性場の理論(FTMP)を適用する。具体的には、(1)FTMP不適合度モデルを用いた結晶塑性FEM解析で、ラダー構造を伴うすべり帯部を

計算機内に再現し、同組織と転位詳細プロセスとの関係を明らかにすること、(2)同部での変形挙動と試料表面での溝さらにはき裂発生との詳細な関係を明らかにすること、を重要なポイントと位置付け、(3)これらを含むシミュレーションモデル・同方法を提案することを目的とする。

3. 研究の方法

近年の実験観察結果と最新の転位シミュレーションに基づく知見から、繰り返し変形中に自発的に形成される転位下部組織、とくに刃状転位の双極子から構成されるラダー組織の役割に注目するとともに、PSBからのき裂発生過程に対する支配因子の一つとして、PSB内部での転位間相互作用に伴う空孔発生およびそれらの拡散過程に着目する。

前者に対しては、申請者が独自に提唱しているマルチスケール塑性場の理論(FTMP)における不適合度モデルを駆使することで、繰り返し変形中のPSBのモデル化を試み、連続体力学の範疇での同複雑現象(ラダー状パターンニングを含むひずみ集中部の形成)の再現を試みる(2.(1)に対応)。

後者に対しては、PSBの内部構造である転位のラダー構造を想定した4種の弾性ひずみエネルギー密度分布を仮定し、有限差分法に基づく空孔拡散の解析を行うことで、同構造の役割を特定化する(2.(2)に対応)。

最後に後者の影響を不適合度モデルを通じて前者のシミュレーションモデルに導入し、PSB部が試料表面における溝さらにはき裂形成に及ぼす影響を調べる方法について検討を加える(2.(3)に対応)。

4. 研究成果

材料表面での溝形成に対する必要条件、すなわち転位双極子ウォール構造の担う特別な役割について、以下の結論が得られた。

(1) 転位の相互作用によりPSB内部で発生した原子空孔は、PSBの外部へ流出する。この際、ウォール組織が空孔の拡散経路としての役割を果たす。想定した4種の弾性ひずみエネルギー密度分布、および得られた空孔濃度分布を図1に示す。

(2) ラダー構造を形成するwallが空孔の拡散経路となることで、空孔は一定の割合でPSB外へ拡散される。これにより疲労き裂の前駆状態である溝が、“安定”して成長することが示唆される。

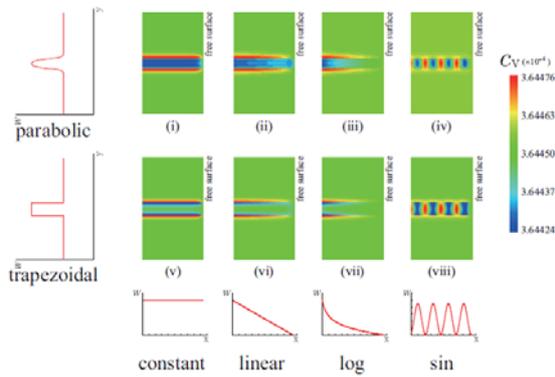


図1 ひずみエネルギー分布と拡散後の空孔濃度分布

場の理論(FTMP)に基づく不適合度場モデルを結晶塑性構成式(硬化発展則)に導入し、単結晶モデルの単一すべり方位に対し塑性ひずみ振幅制御下で繰返し負荷を与えるシミュレーションを実施した。得られた主要な結論を以下に示す。

(3)不適合度モデルの導入により、ラダー状の下部構造を伴ったすべり帯が自発的に形成され、同構造はひずみ分布にも反映されることが明らかとなった。同部では、ひずみの集中に加え、ヒステリシスループの引張り方向へのシフト、すなわちラチェット的変形を伴うことが示された。図2にこれらの結果の概略図を示す。

(4) すべり方向に対するラダーの角度は、本条件下においてより直角に近い方向に形成され、実際に観察されるPSBに近い形態を示す。

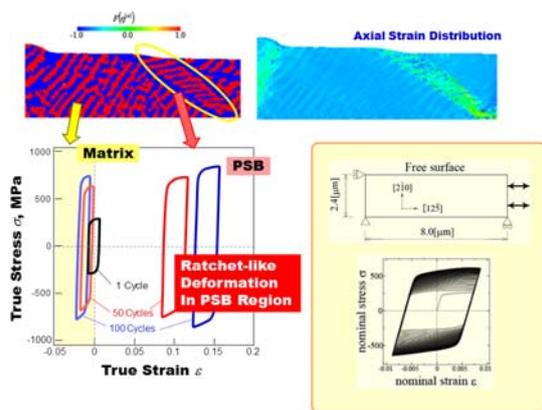


図2 FTMP ベースの不適合度モデルを用いた繰返し変形解析結果の概要

上記に加えて、さらに、上記空孔拡散解析で得られた知見を反映したシミュレーションも試み、疲労き裂形成へ繋がる遷移過程について検討を加えた結果、以下の結論が得られた。

(5) 疲労き裂の前駆状態である表面における溝の成長速度は徐々に小さくなり、一定の割合、すなわち定常的に増加する。

(6) 空孔を考慮することで、表面のすべり帯端部においてより深い溝が形成される。このような溝は疲労き裂への遷移をより強く促進する効果を有していることが示唆される。図3に、対応する試料表面のプロファイル変化を示す。

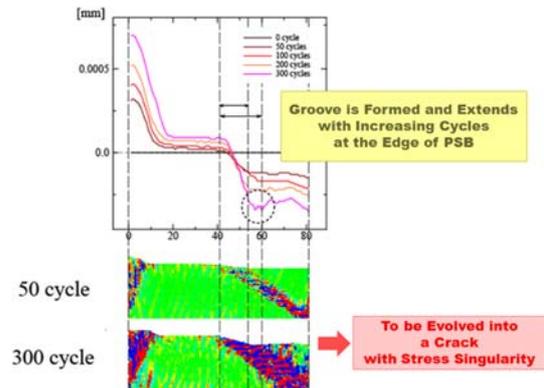


図3 FTMP ベースドシミュレーションで得られた PSB 状下部組織と試料表面での溝形成

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 0 件)

〔学会発表〕(計 5 件)

① 場の理論に基づく疲労き裂発生過程のマルチスケールモデリングとシミュレーション

中谷峻・長谷部忠司・相賀裕太郎
第24 回日本機械学会計算力学講演会
(2011. 10)

② 固執すべり帯における疲労き裂発生過程のモデル化とシミュレーション

中谷峻・相賀裕太郎・長谷部忠司
第54 回日本学術会議材料工学連合講演会
(2010. 10)

③ 場の理論に基づく疲労き裂発生過程のモデル化とシミュレーション

中谷峻・相賀裕太郎・長谷部忠司
第23 回日本機械学会計算力学講演会
(2010. 9)

④ 繰返し応力を受ける材料の固執すべり帯における空孔拡散シミュレーション

中谷峻・長谷部忠司
日本機械学会関西支部関西学生会学生員卒業研究発表講演(2010. 3)

- ⑤ Flow-Evolutionary Law and Its Applications, T. Hasebe, Workshop on Mesoscale Mechanics of Complex Materials (Vancouver, Canada, 2009, 11)

[図書] (計 1 件)

①Field Theory of Multiscale Plasticity
Cambridge University Press

6. 研究組織

(1) 研究代表者

長谷部忠司 (HASEBE TADASHI)
神戸大学・大学院工学研究科・准教授
研究者番号：20237994