

日本－シンガポール・インドネシア 国際共同研究「材料分野（マテリアルズ・インフォマティクス）」 2023 年度 年次報告書	
研究課題名（和文）	データ駆動による金属積層構造の力学特性設計
研究課題名（英文）	Data-Driven Design of Mechanical properties in metallic Layered structures
日本側研究代表者氏名	榎 学
所属・役職	東京大学大学院工学研究科・教授
研究期間	2022 年 4 月 1 日 ～ 2025 年 3 月 31 日

1. 日本側の研究実施体制

氏名	所属機関・部局・役職	役割
榎 学	東京大学・大学院工学系研究科・教授	研究総括
白岩 隆行	東京大学・大学院工学系研究科・講師	データ駆動手法の開発
Fabien Briffod	東京大学・大学院工学系研究科・特任助教	シミュレーション手法の開発

2. 日本側研究チームの研究目標及び計画概要

これまでに進めてきた統合型材料研究アプローチを拡張して、Cu / Nb 材料を含む多層ナノラミネート材料の疲労性能の高精度予測への適用を試みる。局所的な結晶方位に対するナノインデンテーション試験と EBSD 解析を複数の領域で行うことにより、測定された結晶配向を考慮した CPFEM ナノインデンテーションシミュレーションを可能とする。また CP パラメータを実験的な負荷曲線に一致するように較正し、力学特性予測のワークフローの開発を進める。

3. 日本側研究チームの実施概要

繰り返し重ね合わせ接合(ARB)により作製された Cu/Nb 積層材料の引張および疲労挙動に及ぼす荷重方向の影響を、結晶塑性有限要素(CPFEM)シミュレーションによって実験的および数値的に調査した。現象論的速度依存の結晶塑性モデルを適用し、一軸引張試験の結果に対して CP パラメータの較正を行った。続いて微細組織の再構築を行い、繰り返し疲労が与えられた場合の層厚と組織の影響が解析された(Fig. 1)。Tanaka-Mura モデルと Fatemi-Socie 基準に基づく疲労指標パラメータの解析により疲労寿命の計算を行った。

また Cu/Nb 二相積層体に対して簡便な有限要素解析(FEA)を実行し、さらにデータ科学的アプローチを適用して微細構造記述子と電気的/力学的特性の関係を解析した。Cu/Nb 積層体の 2 相構造は、界面形状を乱数を含む正弦波として表すことによって近似的に再構築した。層厚に関する Hall-Petch タイプの経験式を FEA に適用することにより、降伏応力を正確に再現することを目標とした。さらに、フォノン散乱と界面散乱の実験式を使用して導電率を再現することを検討した。

層の厚さと 2 つの相の形態を変化させ、多数の計算を実行することにより、微細構造記述子と機械的および電気的特性を結び付けるデータベースを構築した。ランダムフォレスト回帰を使用した重要度解析により、Cu の体積分率、層の厚さ、および 0 次ベッチ数が降伏応力にとって特に重要であることが示された。曲率、周長、円形度、空間相関関数などの局所的な幾何学的記述子も比較的重要であることがわかった。導電率については、Cu の体

積分率が最も強い影響を及ぼし、次に層の厚さと層の連続性が次に重要であった。長距離接続を記述する特徴量は、局所的幾何学的記述子よりも重要であった。

FEA から得られた降伏応力と導電率に基づいて、ARB Cu/Nb 積層板の強度と導電率の間のトレードオフのパレートフロントを得た(Fig. 2)。より高性能の Cu/Nb 積層材を開発するには、Cu 体積分率を 0.5 以上に維持し、層の厚さを薄く保ち、層の連続性を改善することが必要であることが示された。

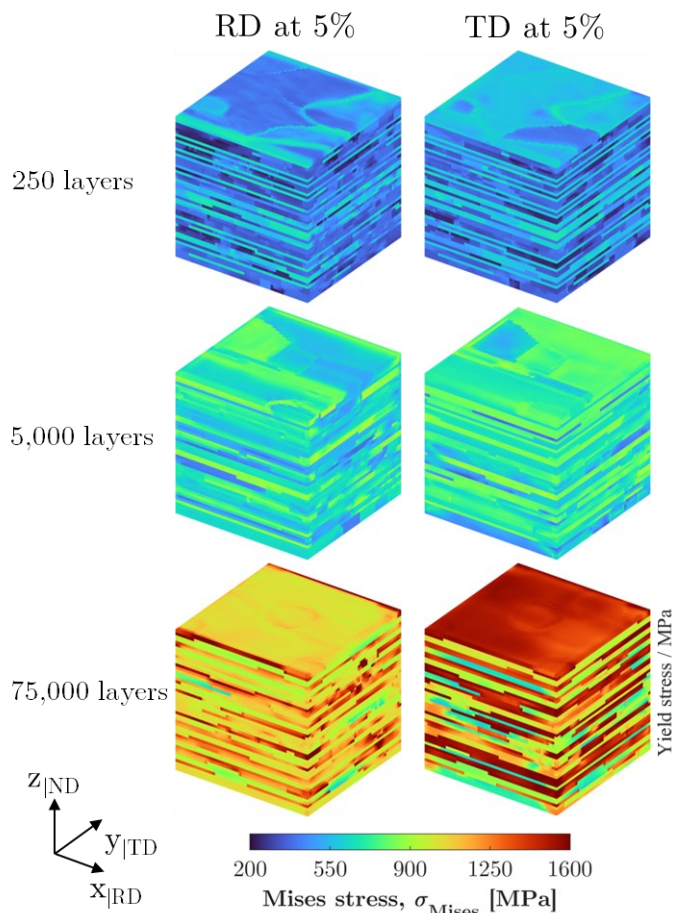


Fig. 1 ミーゼス応力の計算結果

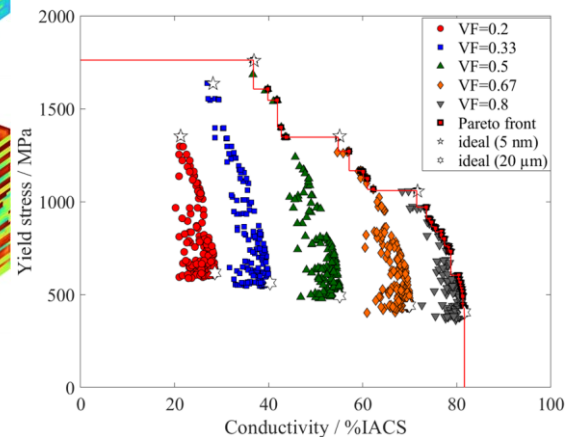


Fig. 2 降伏応力と導電率のパレートフロント