

革新的力学機能材料の創出に向けたナノスケール動的挙動と力学特性機構  
の解明

2020年度採択研究代表者

2022年度  
年次報告書

澄川 貴志

京都大学 大学院エネルギー科学研究科  
教授

ナノ・マイクロ疲労学理の開拓と超高疲労強度金属の実現

主たる共同研究者:

梅野 宜崇 (東京大学 生産技術研究所 教授)

島 弘幸 (山梨大学 大学院総合研究部 教授)

## 研究成果の概要

本研究では、マクロ材とは大きく異なることが予測されるナノ～マイクロ寸法の金属材料の疲労メカニズムを解明して「ナノ・マイクロ疲労学」を構築することを目的とし、加えて超高疲労耐性材料および新奇機能材料の開発を目指す。

2022年度は、①マイクロ疲労試験の実施、②ナノ疲労試験システム開発と導入、③ナノ・メゾ・マイクロ統合、④疲労基礎メカニズム解明、⑤転位の動的・非線形挙動の基礎、及び、⑥マイクロ疲労の基礎理論の構築、を目標とした。

上記①では、疲労後のマイクロ試験片の内部観察像について分析を行い、転位構造の詳細および繰り返し数の増加に伴うその形成過程を特定した。また、粒界を有する試験片を用いて、疲労損傷に及ぼす粒界の影響を明らかにした。②では、ナノ試験片に対する疲労試験装置を開発し、数百 nm 径の試験片に対する実験を行った。③では、演繹-帰納統合型マルチスケール解析システム (DIMS) を構成する各スケール間の現象をつなぐモデルの構築・定式化を行った。④では、結晶方位および断面形状が異なる銅単結晶ナノロッドモデルに対する単軸引張変形の分子動力学シミュレーションを実施し、ナノ材では、特定の方位を有する表面ステップがすべりの起点となり、結晶方位や断面形状による表面ステップの方位の違いが、活動すべり系が変化する要因であることを明らかにした。また、マイクロ疲労の基礎メカニズムを特定した。⑤では、はしご型構造の自律形成を記述する非線形方程式系に関して、式に含まれる各種の非線形項の物理的起源を見直し、転位間の反応生成過程を反映した項を新たに加えることで、実験で観測されるパターン転位を定性的に再現することができた。⑥では、マイクロ疲労強度の考察で重要な役割を果たす表面効果に関して、表面近傍の転位に作用する表面外側方向への吸引力を、バーガースペクトルの方向および表面からの距離の関数として定式化した。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) Y. Umeno, E. Kawai, A. Kubo, H. Shima, and T. Sumigawa, “Inductive Determination of Rate-Reaction Equation Parameters for Dislocation Structure Formation Using Artificial Neural Network”, *Materials* 16(5), (2023) 2108.
- 2) E. Kawai, A. Kubo, and Y. Umeno, “Atomistic simulation for initiation of crystal slip deformation from surface of nanoscale copper single-crystal nanowires”, *Computational Materials Science* 226, (2023) 112246.
- 3) H. Shima, Y. Umeno, and T. Sumigawa, “Spot–Ladder Selection of Dislocation Patterns in Metal Fatigue”, *Symmetry* 15(5), (2023) 1028.
- 4) H. Shima, Y. Umeno, and T. Sumigawa, “Nonsingular stress distribution of edge dislocations near zero-traction boundary”, *Materials* 15(14), (2022) 4929.
- 5) H. Shima, Y. Umeno, and T. Sumigawa, “Analytic formulation of elastic field around edge dislocation adjacent to slanted free surface”, *Royal Society Open Science* 9(6), (2022) 220151.