

力学機能のナノエンジニアリング
2021 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書

柴沼 一樹

東京大学 大学院工学系研究科
准教授

高温クリープ損傷のマルチスケールフィジックス

§ 1. 研究成果の概要

「多結晶体モデル」と「粒界相対速度モデル」を統合した多結晶体の「高温クリープ変形モデル」の開発に着手した。

高温環境下における多結晶体のクリープ変形は、粒界のポテンシャルエネルギーを最小化する「Grain boundary migration」と、粒界上の原子の吐き出し/吸い込みを伴う「Grain boundary diffusion」の2つのメカニズムに起因すると解釈できる。本研究では、まず、クリープ変形のユニットセルである「微視組織モデル」を開発し、さらに、それに対して2つの変形機構を表現するモデルを組み込むことで「高温クリープ変形モデル」の開発を行った。

3次元多結晶体の幾何情報は、結晶粒・粒界・三重線・四重点、という4階層のデータ構造で記述される。本研究では、Queyが開発するNeperに基づき、多結晶体ユニットセルとして機能する「微視組織モデル」の生成を行った。

「Grain boundary migration」による変形機構に対しては、着目する四重点の位置によって決まる粒界総エネルギーを評価し、四重点の移動に関する駆動力ベクトルから、粒界の移動速度を算出するアルゴリズムを開発した。

「Grain boundary diffusion」による変形機構に対しては、隣接粒界間の化学ポテンシャルの差から拡散流束および粒界の相対速度を評価する定式化を立案し、多結晶体ユニットセルの各構成因子の相対移動速度を段階的に算出するアルゴリズムを構築した。また、各粒界ファセットの相対速度を粒界網状で面積分することで巨視的なひずみ速度を評価するアルゴリズムを構築した。

粒界拡散クリープの変形における粒径等の諸因子の影響を記述した理論式との比較による開発モデルの妥当性検証を行った結果、開発したモデルは理論式に含まれる各因子の影響を正確に再現可能であることが示された。さらに、従来の理論式では考慮できない多結晶体の幾何学的因子の影響を評価した結果、結晶粒アスペクト比は従来の理論式には考慮されていない因子であるものの材料の変形抵抗に大きな影響があることが示唆された。