106 多結晶金属材料の特徴長さ依存性挙動の数値シミュレーション

Computational Simulation of Characteristic Length Dependent Deformation Behavior of Polycrystalline Metals

○ 学 澤田 幸秀 (神戸大・院) 正 比嘉 吉一 (阪大・院)
正 富田 佳宏 (神戸大・工)

Yukihide SAWADA, Kobe Univ., Grad. Sch. Sci. & Tech., Nada, Kobe, 657-8501

Yoshikazu HIGA, Dept. Mach. Sys., Grad. Sch. Engng., Osaka Univ., Suita, Osaka, 565-0871

Yoshihiro TOMITA, Kobe Univ., Dept. Mech. Eng., Fac. Eng., Nada, Kobe, 657-8501

Key Words : Polycrystalline Metals, Strain Gradient Crystal Plasticity, Characteristic Length, Size Effect, Finite Element Method

1 緒言

一般的な多結晶金属材料は、すべり方位や結晶粒径が異なる結晶が粒界で統合して微視構造を形成している。さらに、結晶粒内では、変形とともに、塑性変形の素過程である転位の蓄積が生じ、下部組織が形成する。金属材料の微視組織中に生ずる転位には、蓄積の仕方でも分類されており、「統計的に蓄積する転位 (Statistically Stored Dislocations—SSDs) と、「幾何学的に必要な転位 (Geometrically Necessary Dislocations—GNDs) (1)」がある。近年、応力、ひずみといった局所的な量に加えて、このような材料の微視的な構造あるいは組織の形成効果を導入できる形式に一般化された構成式を用いるひずみ勾配結晶塑性理論 (Strain Gradient Crystal Plasticity) の研究が注目を集めている (2)。

本研究では、結晶粒内に生ずる蓄積転位を SSDs と GNDs の和と考え、ひずみ勾配と転位密度を関係づける構成式を用いる。さらに、転位の平均運動距離を蓄積転位と関係づけるモデル化を行う。そして、これら発展式を用いた数値シミュレーションを行い、結晶粒内下部組織である転位、転位群が多結晶体の寸法依存性挙動に及ぼす影響について検討する。

2 構成式

Asaro (3) によって提案された結晶塑性モデルに、Peirce ら (4) がひずみ速度依存性を導入した構成式に対して、解析の安定性を考慮して接線係数法により修正された構成式 (5) を用いる。

$$\dot{\gamma}_{ij} = C_{ijkl}^e d_{kl} - \sum_{(\alpha)} R_{ij}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (1)$$

$$C_{ijkl} = D_{ijkl}^e - \sum_{(\alpha)} R_{ij}^{(\alpha)} F_{ij}^{(\alpha)} \quad (2)$$

なお、式 (1) 中に現れる諸量は文献 (6) にしたがうものとしているので、ここでは詳細な説明を割愛する。さらに、各すべり系 (α) の塑性せん断ひずみ速度に対する発展式には次式を用いた。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_{ref}^{(\alpha)} \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{\frac{1}{m}-1} \quad (3)$$

ここで $\dot{\gamma}_{ref}^{(\alpha)}$ 、 $\tau^{(\alpha)}$ 及び $g^{(\alpha)}$ は基準せん断ひずみ速度、臨界せん断応力及び基準分解せん断応力であり、 m はひずみ速度感度指数である。

転位の運動に対する抵抗である基準分解せん断応力についてひずみ勾配の関数として取り扱うために次式を用いる (7)。

$$g^{(\alpha)} = \tau_0^{(\alpha)} + \sum_{\beta} \Omega_{\alpha\beta} a \mu \tilde{b} \sqrt{\rho_a^{(\beta)}} \quad (4)$$

ここで、式 (4) 中の右辺第 2 項は結晶中に蓄積した転位によるひずみ硬化からの寄与項を示している。また、 $\Omega_{\alpha\beta}$ はすべり系の相互作用マトリクス、 $\tau_0^{(\alpha)}$ 及び $\rho_a^{(\beta)}$ はそれぞれすべり系 (α) における初期臨界分解せん断応力及び蓄積転位密度である。さらに、上式中の a 、 μ 及び $\tilde{b}$ はそれぞれ定数、せん断弾性定数及び転位のバーガースベクトルの大きさを表している。また、蓄積転位密度 $\rho_a^{(\alpha)}$ については、次式のように、SSDs と GNDs の密度の和とする。

$$\rho_a^{(\alpha)} = \rho_s^{(\alpha)} + l_G \rho_G^{(\alpha)} \quad (5)$$

ここで、 l_G は材料に固有な特徴長さである。

なお、文献 (7),(8) にしたがえば、すべり系 (α) に発生する転位密度 $\rho_s^{(\alpha)}$ 及び $\rho_G^{(\alpha)}$ はそれぞれ次式により算出される。

$$\dot{\rho}_s^{(\alpha)} = c \dot{\gamma}^{(\alpha)} / (\tilde{b} L^{(\alpha)}) \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \rho_G^{(\alpha)} &= \rho_{G,edge}^{(\alpha)} + \rho_{G,screw}^{(\alpha)} \\ \rho_{G,edge}^{(\alpha)} &= -\frac{1}{\tilde{b}} \frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial x_i} s_i^{(\alpha)} \\ \rho_{G,screw}^{(\alpha)} &= \frac{1}{\tilde{b}} \frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial x_i} e_{ijk} s_j^{(\alpha)} m_k^{(\alpha)} \end{aligned} \quad (7)$$

ここで、定式中に現れる c 、 e_{ijk} 、 $s^{(\alpha)}$ 及び $m^{(\alpha)}$ はそれぞれ定数、順列テンソル、すべり系 (α) におけるすべり方向及びすべり面法線方向の単位ベクトルを示す。また、式 (7) 中の $\rho_{G,edge}^{(\alpha)}$ 及び $\rho_{G,screw}^{(\alpha)}$ はそれぞれ GNDs の刃状成分及びらせん成分の転位密度を示す。さらに、本研究では、転位の平均運動距離 $L^{(\alpha)}$ は、結晶中に蓄積された転位密度によって決定されるモデルを考えており、転位密度の増加にともない、可動転位の運動が抵抗を受けることを考慮して、次式のように表す。

$$L^{(\alpha)} = L_0^{(\alpha)} (\rho_0^{(\alpha)} / \rho_a^{(\alpha)})^n \quad (8)$$

ここで、 $L_0^{(\alpha)}$ 及び $\rho_0^{(\alpha)}$ はそれぞれ転位の初期平均運動距離及び初期転位密度を示す。

3 解析モデル

Fig.1 に平面応力下で引張変形を受ける多結晶解析モデルを示す。Table.1 に示すように、結晶粒径をそれぞれ $5.64\mu\text{m}$, $8.46\mu\text{m}$, $11.28\mu\text{m}$, $16.93\mu\text{m}$, 及び $56.42\mu\text{m}$ と変化させた 5 パターンの解析モデルを作成した。これらのモデルは Crossed-Triangles 要素単位で 32×32 で分割し、各結晶粒に FCC 結晶体の 12 すべり系をランダムな角度で与えて初期方位とし、多結晶体をモデル化した。なお、図中の太線を結晶粒界とし、変形の連続性が保持されるとの仮定から、初期の結晶方位の変わる領域を結晶粒界としている。以下に、端面に一定変位速度 $\dot{u} = 1\mu\text{m/s}$ を与えた場合の結果を示す。

Fig. 1 Computational model
Table 1 Computational model

	Model Size (μm)	Grain Size (μm)
Model(a)	10×10	5.64
Model(b)	15×15	8.46
Model(c)	20×20	11.28
Model(d)	30×30	16.93
Model(e)	100×100	56.42

4 解析結果

Fig.2 に端面平均応力 σ と、平均ひずみ u/L の関係を示す。これより、ひずみ速度依存性の影響を除外した状況下においても、結晶粒径を小寸法とするほど、巨視的な変形抵抗が増大する寸法依存性を示していることがわかる。次に、Fig.3 に平均ひずみが $u/L = 0.10$ のとき、FCC 結晶体の 12 すべり系のうち、蓄積転位密度 $\rho_a^{(\alpha)}$, SS 転位密度 $\rho_s^{(\alpha)}$, GN 転位密度の刃状成分 $\rho_{G,edge}^{(\alpha)}$ 及びらせん成分 $\rho_{G,screw}^{(\alpha)}$ が最大となるものを示す。転位の運動距離 $L^{(\alpha)}$ は、結晶粒径が小さくなるほど小さくなり、 $L^{(\alpha)}$ に依存した SS 転位密度は結晶粒径が小さくなるほど増大する。また、式 (7) に示すように、結晶粒径が小さくなるほど、塑性せん断ひずみ勾配が増大するため、GN 転位密度も増大する。これらより、結晶粒径が小さくなるほど、各転位密度が増大するため、SS 転位密度と GN 転位密度の和として表している蓄積転位密度も増大する。その結果として、式 (4) に示すように結晶粒径が小さくなるほど、各すべり系の変形抵抗が大きくなるため、巨視的な変形抵抗が増大する寸法依存性を示している。

しかしながら、現行のモデルでは、変形の大きいところでも、転位が単調に増加し、十分に転位の挙動を表現できていない。したがって、転位の発生機構及び消滅機構などを発展的に導入することにより忠実に転位の挙動を表現するモデルを構築する必要がある。これら詳細については講演にて報告する。

Fig. 2 Relation between nominal stress and strain

Fig. 3 Distribution of dislocation density at $u/L=0.10$

5 参考文献

- 1) Ashby, M. F., *Phil. Mag.*, **21**, (1970), 399
- 2) 例えば, Fleck, N. A. et. al., *Acta. Metall. Mater.*, **42-2**, (1994), 475
- 3) Asaro, R. J., *J. Appl. Mech.*, **50**, (1983), 921
- 4) Peirce, D. et. al., *Acta Metall.*, **31**, (1983), 1951
- 5) Peirce, D. et. al., *Comput. Struct.*, **18-5**, (1984), 875
- 6) 富田佳宏, 数値弾塑性力学 有限要素シミュレーション基礎と応用, (1990), 養賢堂
- 7) 例えば, Ohashi, T., *Phil. Mag.*, **A70**, (1994), 793
- 8) 例えば, Ohashi, T., *Phil. Mag. Letters*, **75-2**, (1997), 51