134 FCC 微細粒焼鈍材の降伏点降下に関する トリプルスケール GN 転位-結晶塑性シミュレーション

A Triple-Scale GN Dislocation-Crystal Plasticity Simulation on Yield Point Drop of Annealed FCC Fine-Grained Metal

○ 森 一真・慶大[学]
Kazuma MORI,

Department of Mechanical Engineering, Keio University,
3-14-1 Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama
正 青柳 吉輝・慶大

Yoshiteru AOYAGI, Keio University
Department of Mechanical Engineering, Keio University

Key Words: Crystal Plasticity, Geometrically Necessary Dislocation, Homogenization Method, Ultrafine-Grained Metal,
Yield Point Drop, Lüders Band

学 黒澤 瑛介・慶大[院]
Eisuke KUROSAWA,
Graduate School, Keio University

正 志澤 一之・慶大
Kazuyuki SHIZAWA, Keio University
Department of Mechanical Engineering, Keio University

1. 緒 言

強ひずみ温間・冷間圧延などによって創製される超微細粒金属(UFGM: Ultrafine-Grained Metal)は、卓越した強度を有する構造材料として注目が集まっており、計算力学を援用してその力学的評価方法を開発することが材料科学の分野でも期待されている。一方、強ひずみ誘起 UFGM に焼鈍を施すと粒径は徐々に増加し、粒径が 1~10 μm である中間微細粒金属(MFGM: Middle-Fine-Grained Metal)を得ることができる。このようにして得られる一部の粒径の FCC-UFGM および MFGM においては、BCC 焼鈍材特有の降伏点降下現象およびリュウダース帯の伝ばと酷似した現象が実験的に観察されている⁽¹⁾。また、焼鈍された微細粒金属内には転位密度が極めて低い結晶粒の存在も確認されている⁽¹⁾。これは焼鈍による転位密度の低下に加えて、粒径が非常に小さいことに起因していると考えられる。そのような粒では塑性変形の素因となる転位源の枯渇により、臨界分解せん断応力が変形の初期段階において一時的に増加することが予想される。前報⁽²⁾では、この臨界分解せん断応力の増加を表現するために、多重すべり系に対応した Bailey-Hirsch の式⁽³⁾を拡張し、FCC 微細粒焼鈍材に発現する降伏点降下を現象論的に再現した。しかしながら、降伏点降下モデルの物理的意味に関する検討は不十分であり、マクロな試験片に発現するリュウダース帯の伝ばを再現するには至っていない。

そこで本研究では、転位源としての粒界の役割に注目し、前報⁽²⁾にて拡張した臨界分解せん断応力モデルの物理的解釈を試みる。また、本モデルをこれまでに提案した GN 結晶欠陥⁽⁴⁾に基づくトリプルスケール均質化結晶塑性モデル⁽⁵⁾に導入する。以上のモデルを用いたミクロ-マクロ連成 FEM 解析を FCC 多結晶体に対して実行し、焼鈍された FCC 微細粒からなるマクロな試験片に発現する降伏点降下現象およびリュウダース帯の伝ばを数値解析的に再現する。

2. GN 結晶欠陥

GN 転位密度テンソル α および GN 不適合度テンソル η の定義には前報⁽⁴⁾と同様に以下のようなものを用いる。

$$\alpha = \frac{1}{b} \sum_{\alpha} P^{(\alpha)} \times \nabla \gamma^{(\alpha)}, \quad \eta = \frac{1}{b} \sum_{\alpha} P_s^{(\alpha)} \times (\nabla \gamma^{(\alpha)} \otimes \nabla) \dots (1), (2)$$

ここで b は Burgers ベクトルの大きさ、 l は最隣接転位間距離であり、 $P^{(\alpha)}$ はすべり方向ベクトル $s^{(\alpha)}$ およびすべり面の法線ベクトル $m^{(\alpha)}$ を用いて $P^{(\alpha)} = s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)}$ で定義される。なお、 $P_s^{(\alpha)}$ は $P^{(\alpha)}$ の対称部分(Schmid テンソル)であり、 $(\cdot)^{(\alpha)}$ はすべり系 α に関する量を表す。一方、GN 不適合度テンソ

ルのノルム $\rho_{\eta}^{(\alpha)}$ で表される転位対のうち、動的回復により対消滅を起こした転位の密度 $\rho_R^{(\alpha)}$ を次のように表す⁽⁴⁾。

$$\rho_R^{(\alpha)} = 4f y_c^2 \rho_{\eta}^{(\alpha)^2} \quad (\rho_R^{(\alpha)} \leq \rho_{\eta}^{(\alpha)}) \dots (3)$$

ここで f は対消滅の空間頻度を表す数値係数、 y_c は転位対の消滅距離である。したがって、動的回復を考慮した全転位密度は、転位密度の初期値 $\rho_0^{(\alpha)}$ 、 α と η のノルム $\rho_{\alpha}^{(\alpha)}$ 、 $\rho_{\eta}^{(\alpha)}$ および $\rho_R^{(\alpha)}$ を用いて次式のように表せる。

$$\rho^{(\alpha)} = \rho_0^{(\alpha)} + \rho_{\alpha}^{(\alpha)} + \rho_{\eta}^{(\alpha)} - \rho_R^{(\alpha)} \dots (4)$$

3. 転位-結晶塑性モデル

通常粒金属の場合には、粒内に存在する Frank-Read 源が活動することで塑性変形が開始する。しかしながら、転位密度が極めて低い微細粒では、通常粒の場合と同程度の Frank-Read 源が粒内に存在しているとは考えにくい。このような微細粒の場合は、材料内において大きな割合を占める粒界が転位源の役割を果たすと考えられる。粒界転位源を活動させるためには、通常の Frank-Read 源を活動させるのに比べて高い応力が必要であることが予想されるため、臨界分解せん断応力は高い値をとることになる。その後粒界から転位が放出され、粒界転位源よりも優先的に活動できる転位源が粒内に発生することで、臨界分解せん断応力が低下すると考えられる。粒界転位源よりも優先的に活動できる Frank-Read 源の最小長さ l_k とすると、転位源が粒界から粒内に遷移する際の転位密度(臨界転位密度) $\rho_k^{(\alpha)}$ は

$$\rho_k^{(\alpha)} = A \frac{l_k}{d^3} \dots (5)$$

と表すことができる。ここで、 A は数値係数および d は粒径である。臨界転位密度を境に塑性変形の開始の仕方は変化すると考えられるため、多重すべり系に対応した Bailey-Hirsch の式⁽³⁾を前報⁽²⁾と同様に次式のように拡張する。

$$g^{(\alpha)} = \begin{cases} g_k^{(\alpha)} & ; (\rho^{(\alpha)} < \rho_k^{(\alpha)}) \\ \tau_r^{(\alpha)} + \sum_{\beta} \Omega^{(\alpha\beta)} a \mu b \sqrt{\rho^{(\beta)}} & ; (\rho_k^{(\alpha)} \leq \rho^{(\alpha)}) \end{cases} \dots (6)$$

ここで、 $g^{(\alpha)}$ は流れ応力、 $g_k^{(\alpha)}$ は転位が枯渇状態にあるときの流れ応力、 $\tau_r^{(\alpha)}$ は参照せん断応力、 $\Omega^{(\alpha\beta)}$ は転位相互作用行列、 a は 0.1 のオーダーの数値係数および μ は横弾性係数である。式(6)において $\rho^{(\alpha)} = \rho_k^{(\alpha)}$ のときの流れ応力を $g_0^{(\alpha)}$ とし、 $g_k^{(\alpha)} > g_0^{(\alpha)}$ となるように $g_k^{(\alpha)}$ を決定すれば、粒内転位源の枯渇に起因する臨界分解せん断応力の増加を表現できる。また、式(5)から $\rho_k^{(\alpha)}$ の値は粒径に依存するため、式(6)を用いて粒径に依存した初期降伏応力の違いが再現される。

4. 均質化法

変位速度 $\dot{u}_i$ を次式のように分解できると考える。

$$\dot{u}_i = \dot{u}_i^0 + \dot{u}_i^* \quad (7)$$

ここで $()^0$ および $()^*$ は、それぞれマクロ成分およびそれからの擾乱成分を表す。この擾乱成分はミクロ構造の不均一性に起因しており、特性変位速度 χ_{ij}^k 、 ϕ_i およびマクロな変形速度 D_{kl}^0 を用いることで次式のように表すことができる。

$$\dot{u}_{i,j}^* = -\chi_{i,j}^k D_{kl}^0 + \phi_{i,j} \quad (8)$$

式(8)において特性変位速度 ϕ_i が現れることに留意すれば、従来の均質化法の手順と同様にして、マクロ構造における均質化結晶塑性構成式を導出できる⁽⁶⁾。

5. FEM 解析および考察

マクロな解析対象はアスペクト 3 の長方形(図 1(a))とし、変形の対称性を仮定してモデルの 1/4 に長手方向の強制引張変位を与えた平面ひずみ問題を考える。一方、ユニットセルは 25 個の結晶粒からなる正方形 Al 多結晶平板とし、周期境界条件を与えた Asaro の平面 2 重すべりモデルを採用する(図 1(b)および(c))。さらに、このユニットセルをマクロ構造の各積分点に割り当て、ミクロ-マクロ連成解析を行う。数値パラメータは $f=1$, $\gamma_c=1\text{nm}$, $A=300$, $l_k=0.1\mu\text{m}$, $\tau_r^{(a)}=1\text{MPa}$ および $\alpha=0.2$ である。初期粒径および初期転位密度については、強ひずみ加工の後に焼鈍を施すことで得られる UFGM および MFGM のものとし、図 2 中に示す値を用いる。また、初期結晶方位はいずれの粒径においても図 1(c)に示すとおりである。なお、各粒径に対応する $\rho_k^{(a)}$ は式(5)より算出し、 $g_k^{(a)}$ についてはいずれの粒径においても $g_k^{(a)}=2.5g_0^{(a)}$ とする。

図 2 は、本解析から得られたマクロ構造における各粒径の公称応力-公称ひずみ線図である。図 2 を見ると、前報⁽⁵⁾と同様に粒径の減少に伴う初期降伏応力の増加および降伏後の加工硬化率の減少が再現されていることがわかる。さらに初期平均粒径が $\bar{d}=0.40\sim 1.2\mu\text{m}$ の曲線に注目すると、降伏点降下現象が再現されていることがわかる。これは式(6)を用いることで、変形初期では転位の枯渇から流れ応力が高くなり、その後粒内の転位密度が臨界転位密度に達することで流れ応力が減少することに起因すると考えられる。一方、 $\bar{d}=5.4\mu\text{m}$ の曲線では降伏点降下は発現しておらず、通常粒金属と同様の曲線を描いている。この場合、粒内の初期転位

密度が臨界転位密度を超えており、初期状態においても低い応力ですべり変形が進行できる。

図 3 は、図 2 における(i)~(vii)の伸び率に対応するマクロ構造内の相当塑性ひずみ速度分布である。MFGM である $\bar{d}=1.2\mu\text{m}$ の場合、降伏点降下が起きた後に変形の局所化領域が伝ばしていることが確認できる(図 3(a)(i)-(iii))。この領域が材料全体を伝ばし終わると、図 3(a)(iv)のように相当塑性ひずみ速度はほぼ一様となり、その後均一に塑性変形が進行する。この現象は、焼鈍された BCC 金属において観察されるリュースダース帯の伝ばと同様である。一方、UFGM である $\bar{d}=0.40\mu\text{m}$ の場合(図 3(b))にはリュースダース帯の伝ばは見られず、降伏点降下が発現してまもなく塑性不安定性が発現し、変形が局所化していることがわかる。さらに、図 3(b)(vii)のときのマクロ構造内の相当塑性ひずみ分布は図 4 のようになり、同図から試験片を横断する明瞭なせん断帯が形成されていることが確認できる。このせん断帯の発現により、試験片は同領域で破断に至ることが予測できる。

6. 結 言

転位源としての粒界の役割を考慮した臨界分解せん断応力モデルをトリプルスケール GN 転位-結晶塑性モデルに適用することで、焼鈍が施された FCC 微細粒金属に発現する降伏点降下現象およびリュースダース帯の伝ばを再現できる。また、粒径が減少すると降伏点降下直後に変形の局所化が起こり、塑性不安定性のために材料は脆化傾向を示す。

なお、本研究は平成 20 年度文部科学省科研費：特定領域研究「巨大ひずみ」の補助を得て実施したものであり、ここに謝意を表す。

文 献

- (1) Yu, C. Y., Kao, P. W., Chang, C. P., *Acta Mater.*, **53**-15, (2005), pp.4019-4028.
- (2) 黒澤, 青柳, 只野, 志澤, 計算工学講義, **13**-1, (2007), pp.339-342.
- (3) Ohashi, T., *Phil. Mag.*, **A70**, (1994), pp.793-803.
- (4) Aoyagi, Y. and Shizawa, K., *Int. J. Plasticity*, **23**-6, (2007), pp.1022-1040.
- (5) Kurosawa, E., Aoyagi, Y., Tadano, Y. and Shizawa, K., *Proc. APCOM'07-EPME SC XI*, (2007), CD-ROM, MS28-4-2.
- (6) Ohno, N., Okumura, D. and Noguchi, H., *J. Mech. Phys.*, **50**-5, (2002), pp.1125-1153.