139 離散的な転位挙動を考慮した均質化理論の枠組み

Framework of Homogenization Theory Taking Account of Discrete Dislocation Behavior

○正 奥村 大 (名古屋大学)

片桐慶大 (名古屋大学[院])

正 大野信忠 (名古屋大学)

Dai OKUMURA, Nagoya University

Yoshihiro KATAGIRI, Nagoya University

Nobutada OHNO, Nagoya University

Key Words: Dislocation, Homogenization, Finite element analysis, Polycrystals, Composites

1. 緒 言

近年、開発が盛んに進められている单相もしくは多相の超微細粒多結晶金属材料⁽¹⁾の応力解析のためには、離散的な転位の挙動を考慮した有限要素解析^{(2),(3)}が有用である。この解析は離散転位動力学シミュレーションに基づいており、転位の力学的特性が転位論⁽⁴⁾に基づいて陽に導入されることから拡張性が非常に高く、計算機性能の向上にともない今後適用範囲の益々の拡大が期待される。

本研究では、周期的な複合材料を考え、母材中に転位が運動する場合の均質化理論について検討し、境界値問題や巨視的關係式の導出を行うとともにその特徴について述べる。

2. 均質化理論

Fig.1(a)に示されるように、母材と介在物によって構成され、空孔を含まない周期複合材料が巨視的に一様な変形状態にあるとき、巨視的な応力ひずみ関係および微視的な応力分布を解析する問題を考える。このため、周期単位 Y を周期とする空間的变化を Y 周期的変化と呼ぶことにする。また、母材中の転位の分布もこの周期単位 Y に基づく周期性を有するとし、着目する時刻 t までの転位の運動は転位動力学計算によってすべて既知であるとする。

2-1 基礎式 応力 σ_{ij} の釣合い式は、物体力を無視するとき、

$$\sigma_{ij,j} = 0 \quad (1)$$

と書ける。上式の弱形式は、 Y 周期性を満足する任意の変分 δu_i^* を考えるとき、次のように表される⁽⁵⁾⁻⁽⁸⁾。

$$\langle \delta u_{i,j}^* \sigma_{ij} \rangle = 0 \quad (2)$$

ここで、記号 $\langle \rangle$ は体積平均を表し、状態量を $\#$ 、周期単位の体積を $|Y|$ とするとき、 $\langle \# \rangle = |Y|^{-1} \int_Y \# dY$ である。この関係を用いると、巨視的な応力 Σ_{ij} は応力 σ_{ij} によって、

$$\Sigma_{ij} = \langle \sigma_{ij} \rangle \quad (3)$$

と定義される。次に、応力 σ_{ij} と弾性ひずみ ϵ_{kl}^e の間にはフックの法則

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \epsilon_{kl}^e \quad (4)$$

が成り立つことを仮定する。ここで、 c_{ijkl} は弾性係数であり、母材中では c_{ijkl}^M 、介在物中では c_{ijkl}^I であるとする。周期単位内部には弾性変形のほかに、転位の運動にともなうすべり変形が生じる。したがって、巨視的なひずみ E_{ij} は、すべり変形による巨視的なひずみ量を E_{ij}^p と表せば、

$$E_{ij} = \langle \epsilon_{ij}^e \rangle + E_{ij}^p \quad (5)$$

と定義される。 E_{ij}^p の具体形は2-5節で述べることにする。

2-2 無限体中の転位のひずみ場 無負荷状態の無限体中に転位を導入するとき、転位論によって変位、ひずみ、および応力場が解析的に求められることはよく知られている。したがって、Fig.1(b)に示すように、母材中の転位によるひずみ場は、介在物が母材と等しい弾性係数を有すると仮定すれば、

$$\tilde{\epsilon}_{ij}^e = \sum_k \epsilon_{ij}^{(k)} \quad (6)$$

と求められる。ここで、 $\epsilon_{ij}^{(k)}$ はそれぞれの転位によって生じるひずみ場であり、着目する位置のひずみ $\tilde{\epsilon}_{ij}^e$ はその周辺の転位によるひずみ場 $\epsilon_{ij}^{(k)}$ の重ね合わせとして表される。

つづいて、それぞれの転位による応力場は転位芯からの距離に反比例して減衰し、この応力場の無限体中での体積平均は零である。したがって、これらの応力場の重ね合わせによって作られる応力 $c_{ijkl}^M \tilde{\epsilon}_{kl}^e$ の体積平均も零となる。また、 $\langle c_{ijkl}^M \tilde{\epsilon}_{kl}^e \rangle = c_{ijkl}^M \langle \tilde{\epsilon}_{kl}^e \rangle$ であることから、

$$\langle c_{ijkl}^M \tilde{\epsilon}_{kl}^e \rangle = 0, \quad \langle \tilde{\epsilon}_{kl}^e \rangle = 0 \quad (7),(8)$$

の関係が成り立つ。さらに、それぞれの転位によって生じる応力場は式(1)の釣合い条件を満足するから、応力場 $c_{ijkl}^M \tilde{\epsilon}_{kl}^e$ も応力の釣合い条件を満足する。このことは、式(2)に示される

Fig.1 (a) Macroscopic stress-strain relation and microscopic stress field for periodic composites including dislocations in the matrix and (b) decomposition of elastic strain field.

応力の釣合い式の弱形式を用いれば、次式のように表される。

$$\langle \delta u_{i,j}^* c_{ijkl}^M \tilde{\varepsilon}_{kl}^e \rangle = 0 \quad (9)$$

ただし、実際には介在物の弾性係数は $c_{ijkl}^I (\neq c_{ijkl}^M)$ である。

2-3 ひずみの分離 複合材料中の弾性ひずみ ε_{kl}^e は、式(6)によるひずみを用いて次のように表すことができる(Fig.1(b))。

$$\varepsilon_{kl}^e = \tilde{\varepsilon}_{kl}^e + \hat{\varepsilon}_{kl}^e \quad (10)$$

ここで、 $\hat{\varepsilon}_{kl}^e$ は巨視的に一様な変形状態のもとで生じるひずみ成分とひずみ $\tilde{\varepsilon}_{kl}^e$ を補正する成分を含んでいる。なお、従来の離散転位動力学計算^{(2),(3)}でも、このようなひずみの分離は用いられているが、本研究では空孔を含まない周期複合材料を解析対象としており、 $\tilde{\varepsilon}_{kl}^e$ によって生じる表面力を打ち消すような補正外力の導入は必要としない。

式(10)を式(5)に代入するとき、式(8)の関係を用い、 $\hat{E}_{ij}^e = \langle \hat{\varepsilon}_{ij}^e \rangle$ と表せば、次式が得られる。

$$E_{ij} = \hat{E}_{ij}^e + E_{ij}^p \quad (11)$$

時刻 t までの転位の運動がわかっているとき、すべり変形による巨視的成分 E_{ij}^p は既知である。つづいて、 $\hat{\varepsilon}_{ij}^e$ と $\hat{E}_{ij}^e$ の関係を考えると、このひずみ成分に寄与する変位は、

$$\hat{u}_i = \hat{E}_{ij}^e y_j + \hat{u}_i^* \quad (12)$$

と与えられる。上式の右辺第1項は巨視的ひずみ $\hat{E}_{ij}^e$ による一様変位成分であり、第2項は Y 周期性を満足する擾乱変位である。式(12)の関係を用いて、 $\hat{\varepsilon}_{ij}^e$ を表せば次式となる。

$$\hat{\varepsilon}_{ij}^e = \hat{E}_{ij}^e + \frac{1}{2} (\hat{u}_{i,j}^* + \hat{u}_{j,i}^*) \quad (13)$$

2-4 均質化方程式 前節までの内容から、離散的な転位の挙動を考慮した均質化理論では、時刻 t までの転位の運動履歴を既知として、このときの巨視的な負荷条件に対する擾乱変位場 $\hat{u}_i^*$ を解析しなければならない。このための境界値問題は、式(2)に式(4),(10),(11),(13)を代入することによって、

$$\langle \delta u_{i,j}^* c_{ijkl} \hat{u}_{k,l}^* \rangle = - \langle \delta u_{i,j}^* c_{ijkl} \rangle (E_{kl} - E_{kl}^p) - \langle \delta u_{i,j}^* c_{ijkl} \tilde{\varepsilon}_{kl}^e \rangle \quad (14)$$

と導かれる。この式は式(9)の関係を用いれば、

$$\begin{aligned} & \langle \delta u_{i,j}^* c_{ijkl} \hat{u}_{k,l}^* \rangle \\ &= - \langle \delta u_{i,j}^* c_{ijkl} \rangle (E_{kl} - E_{kl}^p) - \langle \delta u_{i,j}^* (c_{ijkl} - c_{ijkl}^M) \tilde{\varepsilon}_{kl}^e \rangle \end{aligned} \quad (15)$$

と書き換えることも可能である。式(15)は右辺第2項の積分領域を実質的に介在物領域に限定しているため便利である。したがって、これ以降では式(15)の境界値問題について考えることにする。なお、これらの式の導出には、弾性係数 c_{ijkl} の対称条件 $c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{ijlk} = c_{klij}$ を用いた。

巨視的負荷条件として、巨視的応力 Σ_{ij} と巨視的ひずみ E_{kl} の複合した形を考えると、式(15)の境界値問題は、右辺の巨視的ひずみ E_{kl} に未知成分を含んでおり、このまま解くことはできない。そこで、次に示すふたつの境界値問題をそれぞれ考えることにする。

$$\langle \delta u_{i,j}^* c_{ijkl} \chi_{k,l}^{pq} \rangle = - \langle \delta u_{i,j}^* c_{ijkl} \rangle \quad (16)$$

$$\langle \delta u_{i,j}^* c_{ijkl} \varphi_{k,l} \rangle = - \langle \delta u_{i,j}^* (c_{ijkl} - c_{ijkl}^M) \tilde{\varepsilon}_{kl}^e \rangle \quad (17)$$

これらの境界値問題は、式(15)における擾乱変位 $\hat{u}_i^*$ と右辺項との間の線形関係に基づいており、式(16)の解 $\chi_{k,l}^{pq}$ は巨視的単位ひずみに対応する擾乱変位成分である。また、式(17)の解 φ_k は、母材無限体中に転位が存在するとして定めたひずみ $\tilde{\varepsilon}_{kl}^e$ に対して、応力の釣合い条件を満足するように補正す

る擾乱変位成分と見なすことができる。式(15)~(17)の関係より、擾乱変位 $\hat{u}_i^*$ は次のように表される。

$$\hat{u}_i^* = \chi_{ik}^{kl} (E_{kl} - E_{kl}^p) + \varphi_i \quad (18)$$

なお、擾乱変位 $\hat{u}_i^*$ は Y 周期性を満足することから、 $\chi_{k,l}^{pq}$ と φ_k もこの周期性を満足する。

式(4),(10),(11),(13),(18)を用いて応力を表すと、

$$\sigma_{ij} = c_{ijpq} (\delta_{pk} \delta_{ql} + \chi_{p,q}^{kl}) (E_{kl} - E_{kl}^p) + c_{ijkl} (\tilde{\varepsilon}_{kl}^e + \varphi_{k,l}) \quad (19)$$

であり、さらに上式を式(3)に代入して巨視的応力を表すと、

$$\Sigma_{ij} = \langle c_{ijpq} (\delta_{pk} \delta_{ql} + \chi_{p,q}^{kl}) \rangle (E_{kl} - E_{kl}^p) + \langle c_{ijkl} (\tilde{\varepsilon}_{kl}^e + \varphi_{k,l}) \rangle \quad (20)$$

である。ここで、 δ_{ij} はクロネッカーのデルタである。また、

$$C_{ijkl}^H = \langle c_{ijkl} + c_{ijpq} \chi_{p,q}^{kl} \rangle \quad (21)$$

$$\tilde{\Sigma}_{ij} = \langle c_{ijkl} (\tilde{\varepsilon}_{kl}^e + \varphi_{k,l}) \rangle \quad (22)$$

と書くこととすれば、巨視的応力ひずみ関係は、

$$\Sigma_{ij} = C_{ijkl}^H (E_{kl} - E_{kl}^p) + \tilde{\Sigma}_{ij} \quad (23)$$

と表される。したがって、巨視的負荷条件を与えれば、式(23)の巨視的応力ひずみ関係から巨視的な応力とひずみの未知成分は解析され、つづいて式(19)によって周期単位内部の応力場も求められる。

式(19)と式(23)を考察することは非常に興味深い。なぜなら、母材無限体中を仮定して導入された転位のひずみ場 $\tilde{\varepsilon}_{ij}^e$ は実際の複合材料中では応力の釣合いを満足しない。しかしながら、式(17)の境界値問題から求められる擾乱変位成分 φ_k はこの不釣合いを補正するように生じる。この結果として、式(19)の右辺第2項は、転位の存在によって生じる複合材料中の応力場を表すことになる。また、右辺第1項は巨視的一様変形によって生じる応力場であり、双方の重ね合わせの形で全体の応力場は表現される。式(23)の巨視的応力ひずみ関係においても同様のことがいえ、式(22)の関係から明らかであるように、 $\tilde{\Sigma}_{ij}$ は転位の存在によって生じる巨視的応力である。重ね合わせの形で表されるという事実は、双方の応力場が弾性的であることに起因している。ただし、式(11)に示されるように、巨視的ひずみ E_{ij} には転位のすべり変形による非弾性成分 E_{ij}^p が含まれていることに注意が必要である。なお、転位の影響を無視すると、式(19)と式(23)はそれぞれ $\sigma_{ij} = c_{ijpq} (\delta_{pk} \delta_{ql} + \chi_{p,q}^{kl}) E_{kl}$ 、 $\Sigma_{ij} = C_{ijkl}^H E_{kl}$ であり、弾性周期複合材料の均質化理論⁽⁹⁾において導かれる関係式と完全に同じ形式となる。

2-5 すべり変形 転位に作用する力はピーチケーラーの式より求められる。転位の運動速度がこの力と構成関係を有し、転位 k の速度 $v^{(k)}$ が既知であるとすれば、すべり変形によって生じる巨視的ひずみ速度は、

$$\dot{E}_{ij}^p = \frac{1}{|Y|} \sum_k \frac{b^{(k)}}{2} \left(\int_{l^{(k)}} v^{(k)} dl^{(k)} \right) (s_i^{(k)} m_j^{(k)} + m_i^{(k)} s_j^{(k)}) \quad (24)$$

と求められる。ここで、 $b^{(k)}$ はバーガースベクトルの大きさ、 $l^{(k)}$ は転位線長さであり、 $s_i^{(k)}$ と $m_i^{(k)}$ はそれぞれすべり方向とすべり面法線の単位ベクトルである。したがって、式(23)を時間積分することによって、時刻 t における巨視的ひずみ E_{ij}^p は求められる。

謝 辞 本研究の一部は科研費(課題番号 20760069)の助成を受けたものである。このことに深く感謝の意を表する。
参考文献 (省略)