分散強化型 2 相合金の粒子体積分率と粒子直径による強度寸法依存性の結晶塑性解析 Crystal plasticity analysis of size dependence of strength by the particle diameter and particle volume fraction in two-phase alloys of dispersed particles

○正 奥山彫夢（北見工大院） 正 大橋鉄也（北見工大）
Yelm OKUYAMA and Tetsuya OHASHI, Kitami institute of Technology, Koencho 165, Kitami Hokkaido

Key Words: Crystal Plasticity Analysis, Two-phase Materials, Dispersion Hardening

1. 緒言

分散強化法は、介在物や析出物といった第 2 相を金属材料中に分散させることで転位運動を阻害し高強度を得るものである。そのため分散強化合金の強度は粒子の分散間隔に依存する。分散間隔は粒子直径、粒子の体積分率により決まる。そこで分散強化合金の粒子直径、粒子の体積分率を変化させ結晶塑性解析により強度特性を検討する。

2. 結晶塑性解析^[1]

計算に用いた有限要素法結晶塑性解析コード CLP^[1]は塑性せん断ひずみから幾何学的に必要な転位(GN 転位)と、統計的に蓄積する転位(以後 SS 転位と略す)を求めている。

CLP では、すべり系 n の活性化条件となる臨界分解せん断応力(以後 CRSS と略す) $\theta^{(n)}$ を式(1)の拡張 Bailey-Hirsch モデルを用いて決定している。

$$\theta^{(n)} = \theta_0 + \sum_{m=1}^{24} a \mu \tilde{b} \Omega^{(nm)} \sqrt{\rho_s^{(m)}} + \frac{\mu \tilde{b}}{\lambda} \quad (1)$$

第一項は格子摩擦応力 θ_0 、第二項は SS 転位による変形抵抗、第三項は微視組織の寸法効果である。本研究では第三項を分散粒子によるオロワン応力となる様にした。ここで、 $\Omega^{(nm)}$ はすべり系の相互作用行列、 a 及び μ は数値係数及びせん断弾性係数、 $\tilde{b}$ はパーガースベクトルの大きさ、 $\rho_s^{(m)}$ はすべり系 m に蓄積した SS 転位密度、 λ は粒子の平均間隔である。第 1 項と第 3 項は材料定数にのみ依存する初期条件であり、加工硬化は第 2 項の SS 転位密度に依存する。

SS 転位密度の増分は、運動転位の平均移動距離(mean free path, 以後 MFP と略す)と塑性せん断ひずみから求めている。

MFP は運動転位が障害物に捕捉されるまでの平均間隔である。そこで式(2)に示すとおり分散粒子の平均間隔 λ 又は林立転位の平均間隔の定数倍のどちらか小さい方を適用した。

$$L^{(i)} = \text{Min} \left[c^* / \sqrt{\sum_{j=1}^{24} w^{(ij)} (\rho_s^{(j)} + \|\rho_G^{(j)}\|)}, \lambda \right] \quad (2)$$

c^* は 10~100 の数値係数(本研究は 15)、 w は転位の重み行列、 $\rho_G^{(j)}$ はすべり系 j に蓄積した GN 転位の密度ノルムである。

CRSS の決定と MFP に用いる粒子の平均間隔 λ は、式(3)の粒子がランダムに分散した場合の平均間隔^{[2][3]}を用いた。

$$\lambda = 1.25 \times \bar{l} - \frac{\pi}{4} \bar{d} = 1.25 \times \sqrt{\frac{\pi}{6 \times V_f}} \bar{d} - \frac{\pi}{4} \bar{d} \quad (3)$$

$\bar{l}$ は粒子を正方配列した際の平均間隔、 $\bar{d}$ は粒子の平均直径である。 $\bar{l}$ は粒子の平均直径と体積分率 V_f により決まる。

3. 解析モデル

本研究ではフェライト母相中にバナジウム炭化物 (VC) が分散した合金に関する中田らの実験^[4]を参考に解析モデルの条件を決定した。Fig.1(a)は解析モデルの概略図で、母相となる立方体中の中心に第 2 相の球状領域を一つ配置した。これは第 2 相粒子が分散する材料の一部を切り抜いたモデル

である。立方体の一辺の寸法と粒子直径は、実験^[4]を参考に粒子の平均直径 39nm と体積分率 1.24% から決定した。Fig.1(a)は基本となるモデルの 1 例である。粒子直径、粒子体積分率とモデルの寸法は Fig.1(b)の関係となっており、粒子直径と粒子体積分率を変化させ種々のモデルを作成した。主な材料定数は Table 1 に示す。VC の格子摩擦応力は塑性変形しないよう十分に高い値を設定した。結晶構造は BCC とし、結晶方位は、主すべり系が Fig.1 に示されるすべり面及びすべり方向となる方位とした。ただし現象の単純化の為に主すべり系のみが活動する条件となっている。初期転位密度は各すべり系に $1 \times 10^9 \text{ m}^{-2}$ を与えた。計算は、モデルの上下面に引張強制変位を与え公称ひずみが 5% となるまで行った。

Fig.1 (a)Analysis model of two-phase material. (b)The relationship between particle diameter, volume fraction and lateral dimension.

Table 1 Material constants

		iron	VC
Elastic compliance	s_{11}	0.7720	0.2325
	s_{12}	-0.2850	-0.0512
	s_{44}	0.9020	0.6369
Magnitude of Burgers vector [nm]		0.248	0.294
Lattice friction [MPa]		50	4000
Initial disloc. density $\rho_0^{(m)}$ [m^{-2}]		1.0×10^9	

4. 解析結果

4.1 体積分率依存性 Fig.2 は、第 2 相粒子の直径が 39nm で粒子の体積分率が 1.24%、3%、10%モデルの応力ひずみ曲線である。各モデルについてそれぞれ 3 つの曲線を描いており、モデル全体の公称応力公称ひずみ曲線 (○)、母相に生ずる平均の引張方向垂直応力垂直ひずみ曲線 (×)、第 2 相粒子に生ずる平均の引張方向垂直応力垂直ひずみ曲線 (△) である。各モデルの公称応力公称ひずみ曲線を見ると粒子の体積分率の増加に伴い降伏応力、加工硬化率ともに増加している。第 2 相粒子では塑性変形していないため、直線的な応力ひずみ曲線を描いており、モデル全体が公称ひずみ 5% の時、粒子には約 2GPa 前後の応力が生じている。母相の応力ひずみ曲線を見ると粒子の体積分率の増加に伴い降伏応力、加工硬化率共に増加している。母相は、粒子の体積分率が増

加することで粒子の平均間隔 λ が小さくなり CRSS の値が高くなるため降伏応力が増加する。また粒子の平均間隔 λ が小さくなると MFP が狭くなり SS 転位密度の増加量が増える。Fig.3 は母相に蓄積した平均 SS 転位密度の公称ひずみに対する推移を示した図である。粒子体積分率が増加すると蓄積する転位密度の増加率が大きく、高い密度となっている。このため母相では粒子体積分率の増加により高い加工硬化を示す。以上から、各モデルの公称応力公称ひずみは、まず母相において粒子の体積分率により粒子の平均間隔 λ が異なるため CRSS と MFP により降伏応力、加工硬化率に違いが生じる。また塑性変形しない粒子が高い応力を持つため、粒子体積分率が高いほど応力分配（母相と全体の応力ひずみ曲線の差分）が加工硬化に寄与する。

分散強化合金は粒子の体積分率が増加すると、粒子の平均間隔が狭くなりオロワン応力により母相の CRSS が増加する。また MFP が狭くなることで、転位蓄積量の増加により加工硬化率が增大する。また塑性変形しない粒子は高い応力を担うため、粒子体積分率が増加すると応力分配により加工硬化率が増加する。そのため分散強化合金の強度特性は、粒子の体積分率に大きく依存する。

4.2 寸法依存性 Fig.4 は、体積分率を一定とし粒子の直径を 39nm, 390nm, 3.9 μ m と変化した場合の応力ひずみ曲線である。粒子直径が大きくなると、降伏応力、加工硬化率が低下している。粒子直径が 10 倍、100 倍になると、粒子の平均間隔 λ は 10 倍、100 倍となるため、降伏応力と加工硬化率の低下が大きい。そのため粒子直径が 3.9 μ m のモデルの結果では、ほとんど鉄の単結晶と変わらない結果となっている。

分散強化合金は粒子の直径により粒子の分散間隔が大きく変わるため、粒子直径による寸法依存性は大きい。ただし本研究で行った粒子直径 3.9 μ m のモデルでは、粒子の平均間隔は 28 μ m と結晶粒と殆ど変わらないサイズとなる。そのため本解析では単結晶中に粒子を配置したモデルであるため粒界の効果は入っておらず、粒子直径が大きくなるほど結晶粒径などの別の寸法因子が影響を及ぼすと考えられる。

5. 結言

分散強化合金の粒子直径、粒子の体積分率を変化させ結晶塑性解析により強度特性を検討し以下の事が分かった。

- 1) 粒子体積分率が増加すると、粒子の平均間隔が狭くなり母相の CRSS と、転位の蓄積により加工硬化率が増加する。また塑性変形しない粒子は高い応力を担うため、粒子体積分率が増加すると応力分配により加工硬化率が増加する。
- 2) 粒子直径が 10 倍大きくなると粒子の分散間隔は 10 倍広くなるため粒子直径による寸法依存性は大きい。ナノサイズの粒子の場合には、粒子の分散間隔が支配的となるが、粒子直径が粗大になるにつれ、結晶粒径などの別の寸法因子が影響を及ぼすと考えられる

参考文献

- [1] Ohashi, T., Kawamukai, M., Zibib, H., Int. J. Plast., 23(2007), 897
- [2] A. J. E. Foreman and M. J. Makin: Phil. Mag. 14(1966), 911.
- [3] N. Nakashima and H. Yoshinaga: *Tetsu-to-Hagane*, 77(1991), 1399.
- [4] 中田伸生, 村上真宏, 土山聡宏, 高木節雄, 硬質・軟質粒子を分散させたフェライト鋼の加工硬化挙動の相違, 日本鉄鋼協会「加工硬化特性と組織」第 12 回研究会, H23.3.7-8

謝辞

本研究は、(独) 科学技術振興機構(JST)による産学共創基礎基盤研究「ヘテロ構造制御」の支援を受けて行われたものである。

Fig.2 Nominal stress-strain curves and stress partitioning of each phase.

Fig.3 Evolution of the average density of SSD in matrix.

Fig.4 Nominal stress-strain curves.