Dislocation Behaviors around Mechanically Homogenized Inclusions by Level Set Dislocation Dynamics

学 池田 健二郎 (阪大院) 正 渋谷 陽二 (阪大)
 Kenjiro IKEDA, Osaka University, 2-1, Yamadaoka, Suita-shi, Osaka
 Yoji SHIBUTANI, Osaka University

1 緒 言

原子炉や核融合炉の炉構造本体に用いられている材料に中性子が照射されると、格子欠陥の集合体等の照射損傷が生じる。これにより転位の運動が阻害され、結果的には延性が欠如し脆性的になる。このような転位-介在物相互作用場は、従来数多く研究されており⁽¹⁾、介在物の配置によるオロワンループ生成の臨界応力が評価されているが、介在物近傍のマトリクス(母材)に生じる負荷応力分布や転位の持つ内部応力場を詳細に考慮した例は少ない。

そこで、本研究では前者の応力場として均質化法⁽²⁾⁽³⁾を用い、後者にはレベルセット法を用いた転位動力学法⁽⁴⁾を用いた解析手法を提案し、臨界応力としての降伏応力を推定することを目的とする。

2 均質化法と有限要素解析

非均質な構造体全体における巨視的座標を $\mathbf{x}$ 、それを構成する微細な構造における微視的座標を $\mathbf{y} = \mathbf{x}/\varepsilon$ とする。 ε は正の微小パラメータである。 ε を用いて変位ベクトル $\mathbf{u}_i$ を漸近展開し、応力テンソル σ_{ij} に対する平衡方程式と構成式、ひずみ-変位関係を用いると、次式の弱形式が得られる。

$$\int_V \frac{\partial \delta \chi_i^k}{\partial y_j} C_{ijmn} \frac{\partial \chi_m^k}{\partial y_n} dY = \int_V \frac{\partial \delta \chi_i^k}{\partial y_j} C_{ijk} dY \quad (1)$$

ここで、 χ_i^k は特性変位であり、モデル全体に巨視的単位ひずみを与えたときの応答変位である。 C_{ijkl} は弾性定数テンソルである。本報告では、3次元の8節点定ひずみ立方体要素を用いて線形弾性変形を仮定した有限要素解析を行う。要素節点変位ベクトル $\mathbf{d}^{e(i)}$ 等を用いて式(1)を変形すると、次式の要素剛性方程式が得られる。

$$\mathbf{K}^e \mathbf{d}^{e(i)} = \mathbf{p}^{e(i)} \quad (i=1,2,\dots,6) \quad (2)$$

ここで、 $\mathbf{K}^e$ は要素剛性行列、 $\mathbf{p}^{e(i)}$ は要素節点荷重ベクトルである。式(2)から全体剛性方程式を求め、次式の特性変位関数行列を得る。

$$\mathbf{X} = [\chi^{(1)} \quad \chi^{(2)} \quad \chi^{(3)} \quad \chi^{(4)} \quad \chi^{(5)} \quad \chi^{(6)}] \quad (3)$$

以上から、任意の巨視的ひずみ $\mathbf{E}$ に対するユニットセル内の均質化された応力 σ^{hom} が次式のように求められる。

$$\sigma^{\text{hom}} = \mathbf{C}^e (\mathbf{I} - \mathbf{B}^e \mathbf{X}^e) \mathbf{E} \quad (4)$$

したがって、 σ^{hom} を転位に作用する応力場 $\sigma^{\text{tot}} = \sigma^{\text{app}} + \sigma^{\text{int}}$ の外負荷部応力場 σ^{app} として用いることができる。 σ^{int} は転位がつくる内部応力場である。

3 レベルセット法

2つの3次元レベルセット関数 φ, ψ を考える。これらの関数のゼロ等位面 $\varphi(x,y,z)=0, \psi(x,y,z)=0$ の交線を転位線と定義する。速度場 $\mathbf{v}$ を用いて次式の発展方程式を解き、 φ を発展させる。 ψ についても同様である。

$$\varphi_t + \mathbf{v} \cdot \nabla \varphi = 0 \quad (5)$$

φ のすべての等位面は $\mathbf{v}$ によって動く。速度場は $\mathbf{v} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{f}$ と表す。 $\mathbf{M}$ はモビリティテンソル、 $\mathbf{f}$ はピーチケラー力であり、 $\mathbf{f} = (\sigma^{\text{tot}} \cdot \mathbf{b}) \times \boldsymbol{\xi}$ と表される⁽⁴⁾。ここで、 $\boldsymbol{\xi}$ は転位線の接線ベクトル、 $\mathbf{b}$ はバーガースベクトルである。以上の関係から式(5)を解き φ を更新する。これを繰り返すことで、

応力場に応じた自然なトポロジー変化を伴う転位の挙動を表現できる。

4 解析モデルと解析結果

モデルの大きさを $l=2=500b$ 、母材をタングステン(弾性定数 $C_{11}=521, C_{12}=201, C_{44}=160$ [GPa])とする。まず、有限要素解析では介在物の弾性定数を母材の10倍とし、モデルを3375要素に分割し、中央の7要素を介在物とした(図1参照)。巨視的ひずみ $\mathbf{E} = [0 \ 0 \ 0 \ 0.01 \ 0 \ 0]^T$ を与えたときの均質化された応力 σ^{hom} を式(4)から求め、レベルセット法により転位と介在物の相互作用を解析した結果が図2である。FEMの解析領域に対応したレベルセット法のための差分近似した格子点における応力値から、偏差応力テンソル s_{ij} を求め、Hookeの法則からひずみテンソル ε_{ij} を各ステップで算出した。そして、次式のように八面体せん断応力 τ_{OCT} および八面体せん断ひずみ γ_{OCT} をとって応力-ひずみ曲線として表したのが図2である。

$$\tau_{\text{OCT}} = \left\langle \sqrt{\frac{2}{3} (s_{23}^2 + s_{31}^2 + s_{12}^2 - s_{22}s_{33} - s_{33}s_{11} - s_{11}s_{22})} \right\rangle \quad (6)$$

$$\gamma_{\text{OCT}} = \left\langle \frac{\sqrt{2}}{3} \sqrt{3 (\varepsilon_{23}^2 + \varepsilon_{31}^2 + \varepsilon_{12}^2 - \varepsilon_{22}\varepsilon_{33} - \varepsilon_{33}\varepsilon_{11} - \varepsilon_{11}\varepsilon_{22}) + \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}} \right\rangle \quad (7)$$

図中の応力は $C_{44}b/2l$ で正規化してある。介在物に沿って転位線が変化し、最大応力値である臨界せん断応力が推定できた。

Fig. 1 FEM model of an inclusion in W-matrix.

Fig. 2 Octahedral shear stress-octahedral shear strain relation.

5 参考文献

- (1) X. Wang, *Acta Mechanica.*, **222**, 3-4(2011), 287-294.
- (2) Qi-Zhi.Xiao, *et al.*, *computational and Experimental Methods in Structures.*, **3** (2010), 43-100.
- (3) 寺田賢二郎ほか, 均質化法入門, (2003), 丸善.
- (4) J. Pan, *et al.*, *J. Sol. Mech. Mat. Eng.*, **6-1**(2012), 61-70.