結晶界面すべり効果による 正・逆 Hall-Petch 現象の発現に関する検討

Study on positive and negative Hall-Petch effects
due to crystalgrain size and boundary phenomena

○ 築瀬 孝一
正 松本 龍介

Kouichi YANASE,

Michihiko NAKAGAKI,

Ryosuke MATSUMOTO,

(九工大院)
(九工大情報工)

Graduate School, Department of Mechanical Information Science and
Technology, Faculty of Computer Science and Systems Engineering,
Kyushu Institute of Technology, 680-4 Kawazu, Iizuka-City, Fukuoka
820-8502
Faculty of Computer Science and Systems Engineering, Kyushu Insti-
tute of Technology
Department of Mechanical Information Science and Technology, Fac-
ulty of Computer Science and Systems Engineering, Kyushu Institute
of Technology

正 中垣 通彦 (九工大情報工)

Key Words : Crystalline Plasticity, Finite Element Method, Hall-Petch Relation, Grain Size Dependence, Polycrystal,
Strain Gradient, Size Effect

1. 緒言

多結晶構造を持つ金属材料の巨視的な構成挙動は、粒内すべりや粒界すべりなどの微視的な挙動が大きく影響している。その中でも結晶粒のサイズが及ぼす影響は、粒子の大きさが小さくなると金属の強度が増す Hall-Petch の関係で知られている。これは転位運動が粒界付近で妨げられ蓄積するためと考えられている。有限要素法などの相対的な解析法にも、Zbib^{[1][2]}らのひずみ勾配依存性をもつ構成則をマルチレベルのミクロ構造に用いれば、粒子径依存性をもつ材料の強度解析が可能である。本研究では、予め歪み勾配依存性を仮定せず、Asaro の結晶すべりモデル^[3]を用いて多結晶体の粒子径依存性の証明を試みる。

また、実際には結晶粒がさらに小さくなると逆に材料強度が減少する、いわゆる”逆 Hall-Petch の関係”が確認されている^{[4][5]}。その原因として粒界での互いの結晶すべりが推測されている。そこで本研究では、粒子微細化における結晶転位と、粒子境界で起こる結晶粒界すべりが干渉する事から起きる本現象について解析を試みる。本論文では、結晶すべりモデルの粒界に非結晶要素領域を配して粒界すべり効果を表し、結晶粒子サイズに依存する結晶粒内すべりと結晶粒界すべりの相互関係を把握し検討する。

2. Hall-Petch・逆 Hall-Petch 則

結晶粒界をわたって結晶の方位は不連続となる。そのため、結晶粒内で生じた転位が、粒界を挟みそのまま貫通することが出来なくなり、粒界付近に転位が蓄積し応力が集中する。従って、粒界が多ければ多い程、つまり結晶粒径が小さい程、変形する抵抗が大きいために強度が上昇する。この現象が Hall-Petch 則として知られている。

ある臨界を超えて、さらに結晶粒径を小さくすると逆に強度が下降する、いわゆる逆 Hall-Petch の現象が表れる。これは、結晶粒界のすべりによる変形、つまり結晶自体がすべる粒界すべりの効果が、転位の蓄積による変形の抵抗を上回るためであると言われている。Hall-Petch 則と逆 Hall-Petch 則が表れる結晶粒サイズの境界は、図 1^[5]の場合 15[nm] 付近である。

Fig. 1 Hall - Petch relation
(copper)

3. 結晶すべりモデル

結晶内において、変形勾配テンソル F をすべり方向への単純せん断を表す塑性変形勾配テンソル F^p と結晶格子の伸縮と回転を表す弾性変形勾配テンソル F^* に分解する。

$$F = F^* \cdot F^p \quad \dots\dots\dots (1)$$

あるすべり系 α のすべり方向ベクトルを $s^{(\alpha)}$ 、すべり法線ベクトルを $m^{(\alpha)}$ 、それぞれの反転ベクトルを $(*)$ で表せば、結晶すべり面での分解せん断応力の速度形を次のように表せる。

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = m^{*(\alpha)} \cdot (\dot{\hat{\tau}}_J^* - D^* \cdot \tau + \tau \cdot D^*) \cdot s^{(\alpha)} \quad \dots\dots\dots (2)$$

同様に、せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ も表すことができ、最終的に結晶すべりモデルによる弾塑性構成則を $\dot{\hat{\tau}}_J = C : D$ とすると、 C は

$$C = L - \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n (P^{(\alpha)} : L + \beta^{(\alpha)}) N_{\alpha\beta}^{-1} (P^{(\beta)} : L + \beta^{(\beta)}) \quad (3)$$

となる。ここで、 $\dot{\hat{\tau}}_J$ はキルヒホッフ応力の Jaumman 速度、 L は等方弾性マトリクス、 D はストレッチングテンソルである。

4. 結晶の粒界設定

ボロノイ分割法により、結晶の分割を行う。分割した結晶モデルを用いて Asaro の構成則を適用させると、結晶内部に起こる塑性変形時に見られるせん断帯などの特異なすべり変形が表現される。しかし、粒界で起こる結晶自体のすべり、粒界すべりは表現できない。そこで、図 2 のようにボロノイ分割した結晶モデル (図 2 左) から、結晶粒のサイズを一回り小さくすることで、非結晶領域の幅を確保し、これを粒界として表現した。このとき、結晶粒界の幅は、結晶の各辺に対して一定になるように配した。大変形有限要素法を用いて結晶部分の要素には構成則 (3) 式を適用し、粒界の領域には通常の等方弾塑性構成則を適用した。これにより、粒界の領域に塑性ひずみによるせん断すべりを表現させた。

本研究では、客観的極座標系の上で、Jaumman 応力率とひずみ率の間に定式化した結晶すべりモデルの構成則を適用した。

5. 解析方法

本報告で行う、縦横の比が 1:1 の領域に対する解析条件を以下に示す。

解析領域の上辺と下辺に上下方向の引き張り荷重を与える。この場合、結晶のみの場合と結晶の周りに粒界を配した場合とで解析を行う (図 2 参照)。結晶の領域には Asaro の結晶すべりモデルを適用し、粒界の要素には通常の弾塑性構成則を

Fig. 2 Modeling of crystal grain boundary

適用した。

結晶粒子サイズについては、解析領域を一定とし内部に含まれる結晶粒子の数を変化させる事により、相対的にサイズを変化させる。

図 3(A),(B),(C) は、それぞれ解析幅 w と平均粒径 d との比が $d/w = 0.23, 0.19, 0.15$ の結晶の様子を示している。また、各粒子には全て異なるすべり方位を持たせ、それぞれ -90 度から 90 度の範囲でランダムに与えている。上述の粒界相のある場合とない場合の 2 種類のモデルに対して $d/w = 0.23, 0.19, 0.15$ の 3 ケースをの解析を行った。また、粒界を与えたことによる効果を、結晶粒径と強度の関係で示し検討する。解析に用いた結晶と粒界の物性値を表 1 に示す。

Table 1 Parameter of material

	Young's modulus	Poisson's ratio	Yield stress
Crystal	3.0 [GPa]	0.33	60.0 [MPa]
Grain boundary	2.4 [GPa]	0.33	30.0 [MPa]

Fig. 3 Computational grain model

6. 解析結果

図 4 に、引き張り解析を行った全ケースの応力-ひずみ線図を示す。破線が結晶のみの場合（以下 Normal）、実線が粒界を配した場合（以下 GB）の結果である。

Normal において、降伏後の硬化の過程で、平均粒径が大きい $d/w = 0.23$ の硬化に比べ、平均粒径が小さい $d/w = 0.19, 0.15$ においてより大きな硬化が生じていることがわかり、Hall-Petch 関係と同様の傾向を示している。これは、粒子サイズが小さくなる事により、異なるすべり方向を持つ粒子が増え、互いの変形を阻害しあうために硬化が起こると考えられる。

一方、GB では、平均粒径が小さい場合の方が、剛性が低下するという結果が得られた。ある応力値において、同じ結晶粒径での Normal と GB のひずみの量を比べると、粒径が最も小さい $d/w=0.15$ の場合に他の二つの場合よりもひずみが顕著に増加していることが分かる。このひずみが粒界すべりを表しており、粒界すべりが増加した事により材料が軟化したことを表している。つまり、結晶のみの場合で起こる、異なるすべり方位を持つ小さな粒子が増えることによる互いの変形阻害が起きた分、結晶粒界でのすべり効果が大きく表れたためであると考えられる。

図 5 は、図 4 において、あるひずみ状態での強度を結晶粒径別に表したものである。Normal では、粒子の微細化によって強度が上昇し続けていたのに対し、GB は逆に粒子の微細化によって強度が下降している。これは、本来 Asaro の結晶方位則を適用しただけの FEM では捉えられなかった、粒界すべりを表現することで逆 Hall-Petch 則の傾向が発現したと言える。

Fig. 4 Stress-Strain relations (Tension)

Fig. 5 Effects of grain boundary sliding

7. 結言

ポロノイ分割法により分割した結晶粒モデルを平均粒径の違う 3 つのケースに対して Asaro の構成則を適用し、さらに、結晶の粒界に幅を持たせ弾塑性構成則を適用し、引き張り解析を行った。

前者の場合は多結晶体において、代表長さに対する結晶粒径の微細化による塑性強度の上昇が明らかに認められた。著者らは結晶粒の微細化により粒内結晶すべりが阻害された分、粒界すべり塑性が生じることを連続体力学的に検証するため本解析を実施し、ある程度の傾向を把握することができた。

文 献

- [1] Zbib, H.M, ASME 1994, AMD-Vol.183/MD-Vol.50
- [2] Zhu, T.H.and Zbib, M.H., Acta Mechanical 121 (1997) 165-176
- [3] A.Needleman, R.J.Asaro and Jlemonds, computer methods applied mechanics and engineering 52 (1985) 689-708
- [4] M.Nakagaki, S.Takashima, R. Matsumoto, N.Miyazaki, 'An Aspect of Hall-Petch Effect in Metallograin Structure' to appear in Computer Modeling in Engineering and Sciences
- [5] Schjøtz, Jakob and Jacobsen, Karsten W. (2003): A Maximum in the Strength of Nanocrystalline Copper. Science Vol. 301, No. 9, pp. 1357-1359