高次応力モデルを用いた Mg 基 LPSO 相の寸法効果に対する 転位-結晶塑性 FEM 解析†

木村 祐一* 上田 亮* 志澤 一之**

Crystal Plasticity FE Simulation for Size Effect of Mg-Based LPSO Phase Using Dislocation-Based Higher-Order Stress Model

by

Yuichi KIMURA*, Ryo UETA* and Kazuyuki SHIZAWA**

The dislocation-based crystal plasticity model has been extended to a model considering higher-order stress by explicitly considering the mechanical work induced by the strain gradient. Furthermore, a finite element (FE) analysis is performed for a single crystal with a long-period stacking ordered (LPSO) phase on the basis of the obtained model. The mesh dependence of the kink band formation is discussed from the viewpoints of the strain gradient, size effect and higher-order boundary condition. Then, it is shown that the mesh dependence of kink deformation in the FE analysis can be removed even when the size effect parameter is relatively small. The width of the kink band is determined by the intrinsic length scale. When the kink band occurs in the entire specimen, work hardening can be reproduced by appropriately defining the boundary conditions for slip. The effect of length scale ratio on the kink deformation is small. Moreover, it is shown that the disclination quadrupole structure in the kink band can be expressed qualitatively by using incompatibility of crystal slip.

Key words:

Magnesium alloy, Crystal plasticity, Dislocation, Higher-order stress, Finite deformation theory, Finite element method

1 緒 言

長周期積層構造 (LPSO: Long-Period Stacking Ordered) 相を強化相とする Mg 合金は軽量, 高強度, 高耐熱性などの優れた特性を有しており^{1),2)}, 実用化への期待が高まっている. 一方, この合金の優れた力学的特性がキンク強化という新しい材料強化機構によって得られるということも明らかになっており, 材料科学における基礎的な側面でも注目を集めている.

キンク変形は Hess-Barrett³⁾らによって局所化した底面系の転位運動としてモデル化されているが, Hess-Barrett のモデルのような転位の微視的な挙動を実験でとらえるのは困難である. そこで, 数値シミュレーションを用いたキンク帯形成の再現とその詳細なメカニズムの解明が期待されている.

著者ら^{4),5)}はこれまでに, 連続体力学に基づいた転位-結晶塑性モデルを用いた有限要素法 (FEM) によって Mg 基 LPSO 相単結晶のキンク変形を数値解析的に再現した. しかしながら, 従来の転位-結晶塑性 FEM 解析においてはキンク帯形成過程でメッシュ依存性がみられるという問題がある. これに対して高次応力を考慮した理論に基づく従来の FEM 解析では, キンク変形を扱ってはいないものの, すべり帯のメッシュ依存性を軽減できることが報告されている⁶⁾.

高次理論^{7),8)}は, 高次応力を考慮した一般化連続体力学の一つであり, ひずみこう配にエネルギー共役な高次

応力が陽に仕事をなすと考えられる理論である. 材料科学的には, 高次応力は転位に作用する Peach-Koehler 力に相当すると解釈されている. すべり速度の空間こう配が物質点に考慮されるため, 構成式に物質点近傍の非局所性が導入され, メッシュ依存性を軽減させ得る.

本研究ではこれまで行われてこなかった, 高次理論に基づいたモデル化およびキンク形成解析を行い, メッシュ依存性の解消を目指す. この時, 高次応力が常に零となる場合に本モデルは従来の転位-結晶塑性モデルに帰着するようモデル化する. また, 変形帯と母相の境界に同符号の GN 転位が蓄積しているだけではその変形帯がキンク帯であるか双晶帯のような別の変形帯であるかを区別するための指針は提案されていない. そこで, 結晶塑性モデルに導入された不適合度を用いて回位四重極を表現できるかについても検討する. ここで回位四重極構造はキンク帯のより粗視化した表現方法として Romanov⁹⁾らによって提案されたものである⁹⁾. 回位は回転性の結晶欠陥と定義され, 回位密度は非リーマン塑性論におけるひずみの曲率に相当する. 曲率は通常 4 階のテンソルで表され, それを 2 階に縮約したものが一般にひずみの不適合度と呼ばれる. 不適合度は材料の状態がひずみの適合条件からどの程度整合していないかを示す尺度である. 不適合度は著者ら¹⁰⁾によって結晶塑性モデルに導入されており, 本研究でもこれを用いる.

2 運動学

† 原稿受理 平成31年 3月18日 Received Mar.18, 2019 ©2019 The Society of Materials Science, Japan

* 慶應義塾大学大学院理工学研究科 〒223-8522 横浜市港北区日吉

Graduate School of Science and Technology, Keio University, Kohoku-ku, Yokohama 223-8522.

** 正 会 員 慶應義塾大学理工学部機械工学科 〒223-8522 横浜市港北区日吉

Department of Mechanical Engineering, Keio University, Kohoku-ku, Yokohama 223-8522.

2・1 配置の概念と塑性速度こう配の定義

大変形問題を記述するために, 本研究では著者らによる4配置構成を考える¹¹⁾. このとき, 変形こう配は次式のように分解される.

$$\mathbf{F} = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{F}^p \quad (1)$$

ここで $\mathbf{F}^p$ は塑性変形こう配, $\hat{\mathbf{U}}^e$ は弾性ストレッチ, $\mathbf{R}^*$ は弾・剛体回転である. また, 初期配置における量 $(\bullet)_{(l)}$ は第1中間配置の量 $(\bullet)_{(M)}$, 第2中間配置の量 $(\bullet)_{(m)}$, そして現配置の量 $(\bullet)$ へ射像されるが, 本研究では第2中間配置を構成式の参照配置とする.

結晶塑性論では, 第1中間配置における塑性速度こう配 $\mathbf{L}_{(M)}^p$ はすべり系ごとのすべり速度の重ね合わせで次式のように定義される.

$$\mathbf{L}_{(M)}^p \equiv \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} (\mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)}) = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(M)}^{(\alpha)} \quad (2)$$

ここで, (α) はすべり系 α に関する量を表し, $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ はすべり速度, $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ はすべり方向の単位ベクトル, $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ はすべり面法線方向の単位ベクトルである. また, $\mathbf{P}_{(M)}^{(\alpha)}$ は $\mathbf{P}_{(M)}^{(\alpha)} \equiv \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)}$ であり, その対称部分 $\mathbf{P}_{(M)S}^{(\alpha)}$ は Schmid テンソルである.

2・2 転位密度の表現

第1中間配置において, 正味の Burgers ベクトル $\tilde{\mathbf{b}}_{(M)}$ は Burgers 回路に沿った微小線素 $d\mathbf{x}_{(M)}$ の周回積分を行うことで次式のように表される.

$$\tilde{\mathbf{b}}_{(M)} = \sum_{\alpha} \tilde{\mathbf{b}}_{(M)}^{(\alpha)} = -\oint_{\mathcal{C}_{(M)}} d\mathbf{x}_{(M)} \quad (3)$$

ここで $\mathcal{C}_{(M)}$ は第1中間配置における領域 $\mathcal{S}_{(M)}$ を囲む閉曲線を表す. 式(3)右辺を初期配置に戻した後, Stokes の定理を適用し, さらに Nanson の公式を用いて第1中間配置に戻せば次式を得る.

$$\tilde{\mathbf{b}}_{(M)} = -\oint_{\mathcal{S}_{(M)}} J^{p-1} (\text{Curl} \mathbf{F}^p) \mathbf{F}^{pT} \mathbf{n}_{(M)} da_{(M)} \quad (4)$$

ここで $\text{Curl}(\bullet)$ は初期配置における回転を表し, J^p は塑性変形の Jacobian ($J^p \equiv \det \mathbf{F}^p$) である. また, 一般に正味の Burgers ベクトルは Kröner の転位密度テンソル $\boldsymbol{\alpha}_{(M)}$ によって次のように表される¹²⁾.

$$\tilde{\mathbf{b}}_{(M)} = \oint_{\mathcal{S}_{(M)}} \boldsymbol{\alpha}_{(M)} \mathbf{n}_{(M)} da_{(M)} \quad (5)$$

塑性変形による体積変化は無視できるものとし, 式(4)および式(5)を比較すれば転位密度テンソルが次式のように書ける.

$$\boldsymbol{\alpha}_{(M)} = -(\text{Curl} \mathbf{F}^p) \mathbf{F}^{pT} \quad (6)$$

次に, 式(6)で定義した転位密度テンソルをすべり系ごとの量に分解することを考える. 式(6)の物質時間微分を取って整理すると次のようになる.

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}}_{(M)} = \dot{\boldsymbol{\alpha}}_{(M)} - \mathbf{L}_{(M)}^p \boldsymbol{\alpha}_{(M)} - \boldsymbol{\alpha}_{(M)} \mathbf{L}_{(M)}^p = -\text{curl}_{(M)} \mathbf{L}_{(M)}^p \equiv \mathbf{Z}_{(M)} \quad (7)$$

ここで $\text{curl}_{(M)}(\bullet)$ は第1中間配置における回転を表す.

式(7)左辺の $\dot{\boldsymbol{\alpha}}_{(M)}$ は Oldroyd 速度であり, $\mathbf{Z}_{(M)}$ は著者ら¹¹⁾によって定義された転位ドリフト速度である. また, 塑性変形によって結晶格子は変化しないため, 初期配置および第1中間配置において結晶基底は一定と考えてよい. したがって, 式(7)は式(2)を用いて次のように書ける.

$$-\text{curl}_{(M)} \mathbf{L}_{(M)}^p = \sum_{\alpha} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes (\mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \times \nabla_{(M)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}) \quad (8)$$

ここで $\nabla_{(M)}$ は第1中間配置におけるベクトル微分演算子である. 式(8)を $\mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)}$ および単位縦法線ベクトル $\mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \equiv \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \times \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)}$ を用いて書き換えれば

$$-\text{curl}_{(M)} \mathbf{L}_{(M)}^p = \mathbf{Z}_{(M)} = \sum_{\alpha} \left[(\nabla_{(M)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)}) \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} - (\nabla_{(M)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)}) \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \right] \quad (9)$$

となり, $\mathbf{Z}_{(M)}$ に対してすべり系ごとの値で記述した結晶塑性論の表現が得られる. また, 式(9)より GN らせん転位密度速度および GN 刃状転位密度速度はすべり速度のこう配を用いて次のように定義される.

$$\dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} \equiv \frac{1}{\tilde{b}^{(\alpha)}} \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}^{(\alpha)}, \quad \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} \equiv -\frac{1}{\tilde{b}^{(\alpha)}} \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)} \quad (10), (11)$$

式(9)を時間積分した転位密度テンソル $\bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(M)}$ は, 式(10), および式(11)を用いて

$$\bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(M)} \equiv \int \mathbf{Z}_{(M)} dt = \sum_{\alpha} \left(\tilde{b}^{(\alpha)} \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} + \tilde{b}^{(\alpha)} \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \quad (12)$$

と表されるため, 正味の GN 転位密度を式(12)のノルムとして次のように定義する.

$$\rho_G^{(\alpha)} \equiv \|\bar{\boldsymbol{\alpha}}_{(M)}^{(\alpha)}\| / \tilde{b}^{(\alpha)} = \sqrt{(\rho_{G(s)}^{(\alpha)})^2 + (\rho_{G(e)}^{(\alpha)})^2} \quad (13)$$

一方, 転位対密度を表現する SS 転位密度は次のように表現される¹³⁾.

$$\dot{\rho}_S^{(\alpha)} = \frac{c^{(\alpha)}}{\tilde{b}^{(\alpha)} L^{(\alpha)}} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (14)$$

ここで, $c^{(\alpha)}$ は1のオーダーを持つ数値パラメータであり, $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ は次式で表される有効すべり速度である¹⁴⁾.

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \sqrt{(\dot{\gamma}^{(\alpha)})^2 + l^2 (\nabla^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)})^2} \quad (15)$$

ここで, l は微視的特性長と呼ばれ, 大変形状態でのすべり面のゆがみが与えるすべり速度への影響の程度を表す物性値である. また, $L^{(\alpha)}$ は転位の平均飛行距離であり, 次のように表される^{13), 15)}.

$$L^{(\alpha)} = \frac{c^{*(\alpha)}}{\sqrt{\sum_{\beta} \omega^{(\alpha\beta)} (\rho_G^{(\beta)} + \rho_S^{(\beta)})}} \quad (16)$$

ここで, $c^{*(\alpha)}$ は転位が不動化するまでに横切る林立転位の数を表す転位易動度であり, $\omega^{(\alpha\beta)}$ は自己硬化を除く転位の相互作用行列の成分である. 式(14)を時間積分すれば, 現時刻の SS 転位密度が次のように得られる.

$$\rho_S^{(\alpha)} = \rho_0^{(\alpha)} + \int \dot{\rho}_S^{(\alpha)} dt \quad (17)$$

ここで $\rho_0^{(\alpha)}$ は初期転位密度である.

2・3 回位密度の表現

材料空間の不適合度は結晶塑性論において次のように表現できる¹⁰⁾.

$$\boldsymbol{\eta} = \text{curl} \left[\text{curl} \left(\sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)} \right) \right]_S^T \quad (18)$$

式(18)を式(10)および(11)を用いて変形すれば次のようになる.

$$\begin{aligned} -\boldsymbol{\eta} = \sum_{\alpha} \left[-\tilde{b}^{(\alpha)} (\nabla \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{m}^{(\alpha)}) (\mathbf{t}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{(\alpha)})_S \right. \\ \left. + \tilde{b}^{(\alpha)} (\nabla \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}^{(\alpha)}) (\mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)})_S \right. \\ \left. - \tilde{b}^{(\alpha)} (\nabla \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{m}^{(\alpha)}) (\mathbf{t}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}^{(\alpha)})_S \right] \end{aligned}$$

$$+\tilde{b}^{(\alpha)}\left(\nabla\rho_{G(e)}^{(\alpha)}\cdot\mathbf{t}^{(\alpha)}\right)\left(\mathbf{t}^{(\alpha)}\otimes\mathbf{m}^{(\alpha)}\right)_s\Big] \quad (19)$$

式(19)の右辺第 3 項は刃状転位密度のすべり面法線方向こう配であり、この成分がくさび形回位密度に相当する。本研究では別途、回位密度テンソルを定義することなく、式(19)右辺第 3 項を簡易的にくさび形回位密度成分として採用する。

3 力学的釣合い法則の導出および高次境界条件

3・1 仮想仕事率の原理に基づく力学的釣合い法則

仮想仕事率の原理は、内力のなす仮想仕事率 $\bar{P}$ と表面力のなす仮想仕事率 $\bar{R}_s$ 、および物体力のなす仮想仕事率 $\bar{R}_b$ の釣合いによって次のように表される。ここで $(\cdot)$ は仮想量を表す。

$$\int_{\mathcal{V}} \bar{P} dv = \oint_{\mathcal{S}} \bar{R}_s da + \int_{\mathcal{V}} \bar{R}_b dv \quad (20)$$

内力を表現するため、構成式の参照配置である第 2 中間配置における全自由エネルギー Ψ の引数を、等温過程であることを仮定して次のように与える。

$$\Psi = \Psi(\mathbf{E}_{(m)}^e, \mathbf{E}_{(m)}^p, \bar{\alpha}_{(m)}) \quad (21)$$

ここで $\mathbf{E}_{(m)}^e$ は弾性ひずみ、 $\mathbf{E}_{(m)}^p$ は塑性ひずみである。全自由エネルギーの物質時間微分をとると

$$\dot{\Psi} = \hat{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e + \hat{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^p + \dot{\mathbf{N}}_{(m)} \cdot \mathbf{Z}_{(m)} \quad (22)$$

となる。ここで $(\hat{\bullet}) \equiv J(\bullet)$ であり、 $\hat{\mathbf{T}}_{(m)}$ は Kirchhoff 応力、 $\hat{\mathbf{T}}_{(m)}$ は背応力 $\mathbf{T}_b$ を用いて $\hat{\mathbf{T}} \equiv \mathbf{T} - \mathbf{T}_b$ と定義される有効応力、 $\dot{\mathbf{N}}_{(m)}$ は GN 転位の駆動力に相当する高次応力である。内力のなす仮想仕事率 $\bar{P}$ は式(22)の引数を仮想量に置き換え、現配置の量で表せば次式のようになる。

$$\bar{P} = \mathbf{T} \cdot \bar{\mathbf{D}}^e + \hat{\mathbf{T}} \cdot \bar{\mathbf{D}}^p + \mathbf{N} \cdot \bar{\mathbf{Z}} \quad (23)$$

第 2 中間配置において $\bar{P}$ は式(2)および式(9)を考慮すれば

$$\bar{P} = \mathbf{T}_{(m)} \cdot \bar{\mathbf{D}}_{(m)}^e + \hat{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \bar{\mathbf{D}}_{(m)}^p + \sum_{\alpha} \xi_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \nabla_{(m)} \check{\gamma}^{(\alpha)} \quad (24)$$

となる。ここで $\xi_{(m)}^{(\alpha)}$ は

$$\xi_{(m)}^{(\alpha)} \equiv \left[\mathbf{N}_{(m)} \cdot \left(\mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \right) \right] \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} - \left[\mathbf{N}_{(m)} \cdot \left(\mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} \right) \right] \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \quad (25)$$

のように定義される高次応力 $\mathbf{N}_{(m)}$ のすべり系 α への射影であり、すべり系ごとの GN 転位の駆動力と見なせる⁸⁾。式(24)の表現を現配置へ進め、 $\mathbf{D}^e = \mathbf{D} - \mathbf{D}^p$ を用いれば

$$\bar{P} = \mathbf{T} \cdot \bar{\mathbf{D}} - \sum_{\alpha} \tau_b^{(\alpha)} \check{\gamma}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \xi^{(\alpha)} \cdot \nabla \check{\gamma}^{(\alpha)} \quad (26)$$

となる。ここで、 $\tau_b^{(\alpha)}$ は

$$\tau_b^{(\alpha)} \equiv \tau^{(\alpha)} - \hat{\tau}^{(\alpha)} = (\mathbf{T} - \hat{\mathbf{T}}) \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \quad (27)$$

と定義される分解背応力であり、 $\hat{\tau}^{(\alpha)}$ は $\hat{\tau}^{(\alpha)} \equiv \tau^{(\alpha)} - \tau_b^{(\alpha)}$ で与えられる有効分解せん断応力である。

一方、外力のなす仮想仕事率を著者ら¹¹⁾は次式の形でそれぞれ与えている。

$$\bar{R}_s = \mathbf{t}^{(n)} \cdot \bar{\mathbf{v}} + \mathbf{N}^{(n)} \cdot \bar{\mathbf{L}}^p, \quad \bar{R}_b = \rho(\mathbf{f} - \dot{\mathbf{v}}) \cdot \bar{\mathbf{v}} \quad (28), (29)$$

ここで、 $\mathbf{t}^{(n)}$ は通常の表面力、 $\bar{\mathbf{v}}$ は運動学的に可容な仮想速度、 $\mathbf{N}^{(n)}$ は $\mathbf{N}$ と関連付けられる高次表面力、 $\mathbf{f}$ は物体力、 $\dot{\mathbf{v}}$ は加速度である。である。式(28)右辺第 2 項の高次表面力項は、式(2)を用いて次のように表現できる。

$$\mathbf{N}^{(n)} \cdot \bar{\mathbf{L}}^p = \sum_{\alpha} \mathbf{N}^{(n)} \cdot (\mathbf{P}^{(\alpha)} \check{\gamma}^{(\alpha)}) = \sum_{\alpha} \zeta^{(n)(\alpha)} \check{\gamma}^{(\alpha)} \quad (30)$$

ここで $\zeta^{(n)(\alpha)} \equiv \mathbf{N}^{(n)} \cdot \mathbf{P}^{(\alpha)}$ は高次表面力 $\mathbf{N}^{(n)}$ のすべり系 α への射影である。

式(26)、(28)、(29)および式(30)を式(20)に代入し、発散定理を適用して整理した後、仮想量の任意性を考慮すれば、局所形の力学的釣合い法則および力学的境界条件がそれぞれ次のように得られる。

$$\text{in } \mathcal{V}: \quad \left. \begin{aligned} \text{div } \mathbf{T} + \rho(\mathbf{f} - \dot{\mathbf{v}}) &= \mathbf{0} \\ \mathbf{T} &= \mathbf{T}^T \\ \tau_b^{(\alpha)} &= -\text{div } \xi^{(\alpha)} \end{aligned} \right\} \quad (31)$$

$$\text{on } \mathcal{S}: \quad \mathbf{t}^{(n)} = \mathbf{T} \mathbf{n}, \quad \zeta^{(n)(\alpha)} = \xi^{(\alpha)} \cdot \mathbf{n} \quad (32)$$

式(31)₁ および式(31)₂ はそれぞれ従来の運動方程式および応力の対称性(角運動量方程式)であり、式(32)₁ は Cauchy の基本定理である。式(31)₃ および式(32)₂ はそれぞれ高次応力の釣合い方程式および高次応力の境界条件であり、通常モデルには表れない式である。

3・2 速度形仮想仕事の原理

有限な弾塑性変形を記述するため、前節で述べた仮想仕事率の原理を速度形に拡張する。まず、式(26)、(28)および式(29)を式(20)に代入し、慣性力および物体力を無視する。次に、それを初期配置の量で記述し、仮想量の任意性を考慮して $\dot{\mathbf{v}} = \mathbf{0}$ および $\dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0$ の下で物質時間微分を施せば、速度形仮想仕事の原理が次式のように得られる。

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{V}_0} \dot{\mathbf{H}} \cdot \nabla_{(0)} \bar{\mathbf{v}} dv_{(0)} - \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}_0} \dot{\tau}_b^{(\alpha)} \check{\gamma}^{(\alpha)} dv_{(0)} \\ & + \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}_0} \dot{\xi}^{(\alpha)} \cdot \nabla_{(0)} \check{\gamma}^{(\alpha)} dv_{(0)} \\ & = \oint_{\mathcal{S}_0} \dot{\mathbf{t}}^{(0)} \cdot \bar{\mathbf{v}} da_{(0)} + \sum_{\alpha} \oint_{\mathcal{S}_0} \dot{\xi}^{(0)(\alpha)} \check{\gamma}^{(\alpha)} da_{(0)} \end{aligned} \quad (33)$$

ここで、各内力の定義は以下のとおりである。

$$\dot{\mathbf{H}} \equiv J \mathbf{T} \mathbf{F}^{-T}, \quad \dot{\tau}_b^{(\alpha)} \equiv J \tau_b^{(\alpha)}, \quad \dot{\xi}^{(\alpha)} \equiv J \xi^{(\alpha)} \mathbf{F}^{-T} \quad (34)$$

さらに、各応力速度は式(34)の物質時間微分をとることにより、それぞれ次のように書ける。

$$\left. \begin{aligned} \dot{\mathbf{H}} &\equiv J \left[\overset{\circ}{\mathbf{T}} - (\mathbf{D} \mathbf{T} + \mathbf{T} \mathbf{D}) + \mathbf{L} \mathbf{T} \right] \mathbf{F}^{-T} \\ \dot{\tau}_b^{(\alpha)} &\equiv J \dot{\tau}_b^{(\alpha)} \\ \dot{\xi}^{(\alpha)} &\equiv J \left[\overset{\nabla}{\xi}^{(\alpha)} - \mathbf{D} \xi^{(\alpha)} - \sum_{\beta} \mathbf{P}_A^{(\beta)} \xi^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\beta)} \right] \mathbf{F}^{-T} \end{aligned} \right\} \quad (35)$$

ここで、 $\overset{\circ}{\mathbf{T}} \equiv \dot{\mathbf{T}} - \mathbf{W} \mathbf{T} + \mathbf{T} \mathbf{W}$ は Cauchy 応力の Jaumann 速度、 $\overset{\nabla}{\xi}^{(\alpha)} \equiv \dot{\xi}^{(\alpha)} - \mathbf{W}^* \xi^{(\alpha)}$ は高次応力の Mandel-Kratovichil 速度および $\mathbf{W}^* \equiv \mathbf{W} - \mathbf{W}^p$ は下部構造スピンである。また、塑性変形の非圧縮性および微小弾性変形の仮定より体積一定条件： $\dot{J} = J \text{tr} \mathbf{L} = 0$ を用いている。式(35)を式(33)に代入して現配置の量で書き表し、参照配置を現配置に選べば updated Lagrange 形式の速度形仮想仕事の原理が次式のように得られる。

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{V}} \left[\overset{\circ}{\mathbf{T}} - (\mathbf{D} \mathbf{T} + \mathbf{T} \mathbf{D}) + \mathbf{L} \mathbf{T} \right] \cdot \bar{\mathbf{L}} dv - \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} \dot{\tau}_b^{(\alpha)} \check{\gamma}^{(\alpha)} dv \\ & + \sum_{\alpha} \int_{\mathcal{V}} \left[\overset{\nabla}{\xi}^{(\alpha)} - \mathbf{D} \xi^{(\alpha)} - \sum_{\beta} \mathbf{P}_A^{(\beta)} \xi^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\beta)} \right] \cdot \nabla \check{\gamma}^{(\alpha)} dv \end{aligned}$$

$$= \oint_{\mathcal{S}} \dot{\mathbf{i}}^{(n)} \cdot \bar{\mathbf{v}} d\mathbf{a} + \sum_{\alpha} \oint_{\mathcal{S}} \dot{\zeta}^{(n)} \bar{\gamma}^{(\alpha)} d\mathbf{a} \quad (36)$$

左辺第 2, 3 項および右辺第 2 項が新たに導入されている。なお, 既定量を $(\bullet)$ と表せば, 境界条件は幾何学的境界条件と対応する力学的境界条件と合わせて

$$\text{on } \mathcal{S}: \left. \begin{array}{l} \mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} \quad \text{or} \quad \dot{\mathbf{i}}^{(n)} = \dot{\mathbf{i}}^{(n)} \\ \dot{\gamma}^{(\alpha)} = \bar{\gamma}^{(\alpha)} \quad \text{or} \quad \dot{\zeta}^{(\alpha)} = \bar{\zeta}^{(\alpha)} \end{array} \right\} \quad (37)$$

と表される。このように, 高次理論ではすべり速度の境界条件を設定できるため, 実験における試験片の治具による拘束状態あるいは結晶粒界におけるすべりなし(転位の停止)といった境界条件をより正確に表現可能といえる。

3・3 高次量に対する境界条件

仮想仕事率の原理式を解くにあたり, 高次量に対する境界条件を次式のように設定することが多い^{16), 17)}。

$$\text{on } \mathcal{S}: \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0 \quad \text{or} \quad \dot{\zeta}^{(\alpha)} = 0 \quad (38)$$

式(38)₁はすべり拘束条件と呼ばれ, 物体表面が剛体に接触しているため表面においてすべり変形が妨げられることを意味している。一方, 式(38)₂のように高次表面力を零とする場合はすべり自由条件と呼ばれ, 物体表面は高次表面力が作用しない自由表面となり, すべり変形(転位の通過)が生じることを表す。

なお, 従来のモデルでは高次表面力が存在しないが, これは本モデルにおいて全表面上ですべり自由条件を課すことに相当している。

4 構成式および硬化則

4・1 応力および高次応力の速度形構成式

前述の $\mathbf{D}^p$ に関する運動学的関係式を適用して得られる弾・粘塑性構成式は次のようになる。

$$\dot{\mathbf{T}} = \mathbf{C}^e : \mathbf{D} - \mathbf{C}^e : \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} (\mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)})_{\mathcal{S}} \quad (39)$$

式(39)は従来の結晶塑性論および転位-結晶塑性論におけるものと同じである。

転位の作る線形弾性応力場との比較および簡単化のため, 高次応力の構成式は GN 転位密度 $\bar{\alpha}_{(m)}$ に対して線形な構成式を想定すれば次式のように表せる。

$$\tilde{\mathbf{N}}_{(m)} = \frac{\partial \Psi}{\partial \bar{\alpha}_{(m)}} = \lambda \bar{\alpha}_{(m)} \quad (40)$$

ここで λ はスカラーの未定係数である。式(25)を用いて $\tilde{\mathbf{N}}_{(m)}$ を各すべり系に射影し, 式(12)を代入すると次式のようになる。

$$\begin{aligned} \xi_{(m)}^{(\alpha)} = J^{-1} \lambda \sum_{\beta} \tilde{b}^{(\beta)} B_{ss}^{(\beta\alpha)} \left[\left(\rho_{G(s)}^{(\alpha)} B_{ss}^{(\beta\alpha)} + \rho_{G(e)}^{(\alpha)} B_{ts}^{(\beta\alpha)} \right) \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} \right. \\ \left. - \left(\rho_{G(s)}^{(\alpha)} B_{st}^{(\beta\alpha)} + \rho_{G(e)}^{(\alpha)} B_{tt}^{(\beta\alpha)} \right) \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \right] \end{aligned} \quad (41)$$

ここで

$$\begin{aligned} B_{ss}^{(\beta\alpha)} &\equiv \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}_{(m)}^{(\beta)}, \quad B_{ts}^{(\beta\alpha)} \equiv \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}_{(m)}^{(\beta)} \\ B_{st}^{(\beta\alpha)} &\equiv \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}_{(m)}^{(\beta)}, \quad B_{tt}^{(\beta\alpha)} \equiv \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}_{(m)}^{(\beta)} \end{aligned} \quad (42)$$

は高次応力の幾何学的なすべり系間相互作用を表す係数である。本研究では簡単化のために $\xi_{(m)}^{(\alpha)}$ のすべり系間相互作用は小さいとして無視し, 式(42)において $\alpha = \beta$ の場合のみを考慮すると構成式は次式のように書ける。

$$\xi_{(m)}^{(\alpha)} = \lambda \tilde{b}^{(\alpha)} \left(\rho_{G(s)}^{(\alpha)} \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} - \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \right) \quad (43)$$

ここで微小弾性変形の仮定 ($J^{-1} = 1$) を用いている。式

(43)の物質時間微分をとり, 現配置に進めれば高次応力の速度形構成式が次式のように得られる。

$$\dot{\xi}^{(\alpha)} = \lambda \tilde{b}^{(\alpha)} \left(\dot{\rho}_{G(s)}^{(\alpha)} \mathbf{t}^{(\alpha)} - \dot{\rho}_{G(e)}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \right) = \hat{\mathbf{S}}^{(\alpha)} \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (44)$$

ここで $\hat{\mathbf{S}}^{(\alpha)}$ は式(10)および式(11)より, $\hat{\mathbf{S}}^{(\alpha)} \equiv \lambda (\mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{(\alpha)} + \mathbf{t}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}^{(\alpha)})$ と表される。式(44)にはすべり速度の空間こう配が現れており, 解析条件(対象次元, 結晶構造など)によらず, 物質点近傍の非局所性が導入されているといえる。

式(43)を現配置の量で表せば次式のようになる。

$$\xi^{(\alpha)} = \lambda \tilde{b}^{(\alpha)} \left(\rho_{G(s)}^{(\alpha)} \mathbf{t}^{(\alpha)} - \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \right) \quad (45)$$

式(45)を式(31)₃に代入し, 結晶基底のこう配は十分小さいと仮定すれば本理論体系における背応力は次式のように表せる。

$$\begin{aligned} \tau_b^{(\alpha)} &= -\text{div} \xi^{(\alpha)} \approx -\lambda \tilde{b}^{(\alpha)} \left(\nabla \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}^{(\alpha)} - \nabla \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)} \right) \\ &= -\lambda \tilde{b}^{(\alpha)} \left(\nabla_{(1)} \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{F}^{p-1} \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} - \nabla_{(1)} \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{F}^{p-1} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \end{aligned} \quad (46)$$

ここで任意のスカラー量 $(\bullet)$ について $\nabla(\bullet) = \nabla_{(1)}(\bullet) \mathbf{F}^{p-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T}$ が成り立つこと, また, 次式で表される結晶基底の配置変換則を用いている。

$$\mathbf{s}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)}, \quad \mathbf{t}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \quad (47)$$

一方, 転位論において背応力モデルが次のように提案されている^{14), 18)}。

$$\tau_b^{(\alpha)} = -\frac{\mu r^2 \tilde{b}^{(\alpha)}}{4} \left[\nabla_{(1)} \rho_{G(s)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} - \frac{1}{2(1-\nu)} \nabla_{(1)} \rho_{G(e)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \right] \quad (48)$$

ここで, r は前述の l とは異なる特性長であり, 一つの物質点に長範囲応力場をもたらす転位群からの距離を表す。本研究では r と l は $\varepsilon_l \equiv l/r$ と定義される特性長比により関連付ける。ただし, 特性長比のオーダーは 0.01~0.1 程度である。また, μ は等方弾性体における横弾性係数, ν はポアソン比である。いま, 非圧縮性を仮定し, $\nu \approx 1/2$ として式(46)および式(48)を比較すれば λ を次のように評価できる。

$$\lambda \approx \frac{\mu r^2}{4} \quad (49)$$

よって, 高次応力の速度形構成式は次式のようになる。

$$\dot{\xi}^{(\alpha)} = \frac{\mu r^2}{4} (\mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{(\alpha)} + \mathbf{t}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}^{(\alpha)}) \nabla \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (50)$$

なお, 本モデルにおいて特性長 r を零とすれば, 背応力が零となるため有効分解せん断応力は通常の分解せん断応力となる。

4・2 硬化則

本研究ではすべり速度硬化則に Kuroda-Tvergaard⁶⁾が提案した次式を用いる。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_r^{(\alpha)} \text{sgn} \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} \right) \left| \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{1/m} \quad (51)$$

ここで $g^{(\alpha)}$ はすべり変形の抵抗を表す流れ応力であり, $\dot{\gamma}_r^{(\alpha)}$ は正值の材料定数である。従来のすべり速度硬化則では分解せん断応力が駆動力となるが, 本論文では背応力を考慮するため有効分解せん断応力を用いた形に拡張されている。

流れ応力は従来と同じく次式で表される多重すべりに拡張された Bailey-Hirsch の式¹³⁾を用いる。

$$g^{(\alpha)} = \tau_f^{(\alpha)} + a^{(\alpha)} \mu^{(\alpha)} \tilde{b}^{(\alpha)} \sum_{\beta} \Omega^{(\alpha\beta)} \sqrt{\rho_s^{(\beta)}} \quad (52)$$

Fig. 1 Computational model for LPSO single crystal.

ここで $\tau_f^{(\alpha)}$ は格子摩擦応力, $a^{(\alpha)}$ は転位の張り出しと関連した数値係数, $\Omega^{(\alpha\beta)}$ はすべり間相互作用行列の成分であり, $\rho_s^{(\alpha)}$ は SS 転位密度である.

式(52)の物質時間微分を取り, 式(14)を代入すれば流れ応力の発展式が次式のように得られる.

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} \frac{a^{(\alpha)} \mu^{(\alpha)} \tilde{b}^{(\alpha)} \Omega^{(\alpha\beta)} c^{(\beta)}}{2\tilde{b}^{(\beta)} L^{(\beta)} \sqrt{\rho_s^{(\beta)}}} \dot{\gamma}^{(\beta)} = \sum_{\beta} h^{(\alpha\beta)} \dot{\gamma}^{(\beta)} \quad (53)$$

式(53)における $h^{(\alpha\beta)}$ は従来の結晶塑性論における硬化係数に対応する. さらに, 現時点における流れ応力は式(53)を時間積分して次式のように得られる.

$$g^{(\alpha)} = g_0^{(\alpha)} + \int \dot{g}^{(\alpha)} dt \quad (54)$$

ここで, $g_0^{(\alpha)}$ は流れ応力の初期値である臨界分解せん断応力 (CRSS: critical resolved shear stress) であり, 式(52)において $\rho_s^{(\alpha)} = \rho_0^{(\alpha)}$ とすることで計算される.

5 FEM 解析結果

5.1 解析条件

すべての解析において共通の諸条件について述べる. 解析モデルは Fig. 1(a)に示す単結晶平板とし, 平面ひずみ条件の下, 試験片上端面に強制圧縮変位を加えて解析を行う. したがって公称圧縮率は試験片上端面における変位を U とすれば $\varepsilon = U/L$ と書ける. 高次理論に基づく解析では, 物質点の自由度として物質速度 $\mathbf{v}$ に加えて各すべり系のすべり速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ も付与される¹⁷⁾. 本研究では $\mathbf{v}$ および $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ のそれぞれを, 9 節点四角形要素を用いて離散化する. また, 数値解析に用いる材料定数および数値パラメータを Table 1 に示す. なお, 式(52)から計算される各すべり系の臨界分解せん断応力が実験値と整

Table 1 Material constants and numerical parameters.

Law	Values
Crystal defect	$\rho_0^{(\text{all})} = 0.1 \mu\text{m}^{-2}$, $c^{(\text{all})} = 2$, $\tilde{b}^{(\text{bas})} = 0.32 \text{ nm}$, $\tilde{b}^{(\text{pri})} = 0.32 \text{ nm}$, $\tilde{b}^{(\text{pyr})} = 0.61 \text{ nm}$, $c^{*(\text{bas})} = 100$, $c^{*(\text{pri})} = 50$, $c^{*(\text{pyr})} = 35$,
Constitutive law	$C_{11}^e = 67.7 \text{ GPa}$, $C_{33}^e = 72.9 \text{ GPa}$, $C_{44}^e = 21.5 \text{ GPa}$, $C_{12}^e = 28.3 \text{ GPa}$, $C_{13}^e = 19.5 \text{ GPa}$
$\dot{\gamma}$ power law	$\dot{\gamma}_r^{(\text{all})} = 0.001 \text{ s}^{-1}$, $m = 0.02$
Flow rule	$\tau_f^{(\text{bas})} = 3 \text{ MPa}$, $\tau_f^{(\text{pri})} = 155 \text{ MPa}$, $\tau_f^{(\text{pyr})} = 335 \text{ MPa}$, $a^{(\text{all})} = 0.3$, $\mu^{(\text{bas})} = 21.50 \text{ GPa}$, $\mu^{(\text{pri})} = 19.70 \text{ GPa}$, $\mu^{(\text{pyr})} = 24.61 \text{ GPa}$, $\Omega^{(\alpha\beta)} = 1$, $\omega^{(\alpha\beta)} = \begin{cases} 0 & (\alpha = \beta) \\ 1 & (\alpha \neq \beta) \end{cases}$
Prescribed nominal strain rate	$\dot{\varepsilon} = 0.001 \text{ s}^{-1}$

合するように数値パラメータ $\tau_f^{(\alpha)}$ および $a^{(\alpha)}$ を決定している. 硬化則で考慮する活動すべり系は (0001) $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 底面系 (3 つ), $\{10\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ 柱面系 (3 つ), そして $\{11\bar{2}2\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ 2 次錘面系 (6 つ) である. LPSO 型 Mg 合金における LPSO 相では, 双晶系の活動は極めて限定的であるため, ここでは考えない. 初期結晶方位は Fig. 1(b)のように負荷軸に対して底面が 5° 傾くように設定する. この条件では底面系の活動が支配的となるため, 以降では底面系に関する量の考察を行う. このような方位では結晶の対称性から面外のすべり変形は打消し合うため, 平面ひずみ問題として解析できる.

また, 特性長 r の変形への影響を調査するために, $\varepsilon_S \equiv r/L$ と定義される寸法効果パラメータを用いて解析結果を整理する. 代表長さとして試験片長辺 L をとる.

5.2 キンク帯形成のメッシュ依存性

まず, キンク帯形成のメッシュ依存性について検討する. そこで 5×30 , 10×60 , 15×90 の 3 通りのメッシュ分割を考え, 異なる寸法効果パラメータに対して解析を行う. 従来のモデルとの比較を行うために, 高次量の境界条件は全ての表面ですべり自由条件とする. 特性長比は微視的特性長 l の具体的な値が不明であるため, まず $\varepsilon_l = 0.1$ で固定して解析する.

はじめに寸法効果パラメータが零の場合, すなわち $r = 0.0 \mu\text{m}$ とし, 高次応力を考慮しない従来の解析結果を示す. Fig. 2(a)は公称応力ひずみ線図であり, キンク

Fig. 2 (a) Nominal stress - strain curves (b) Edge component of GN dislocation density (c) Basal SS dislocation density
Fig. 2 Nominal stress - strain curves and distributions of edge component of basal GN dislocation density and basal SS dislocation density with $\varepsilon_S = 0$ at $U/L = 1.0\%$ with (i) 5×30 , (ii) 10×60 , (iii) 15×90 elements.

Fig. 4 Nominal stress - strain curves and distributions of edge component of basal GN dislocation density with $r = 0.5 \mu\text{m}$ ($\varepsilon_s = 0.0028$) at $U/L = 1.0\%$ with (i) 5×30 , (ii) 10×60 , (iii) 15×90 elements.

Fig. 5 Nominal stress - strain curves and distributions of edge component of basal GN dislocation density with $r = 1.0 \mu\text{m}$ ($\varepsilon_s = 0.0056$) at $U/L = 1.0\%$ with (i) 5×30 , (ii) 10×60 , (iii) 15×90 elements.

Fig. 6 Nominal stress - strain curves and distributions of edge component of basal GN dislocation density at $U/L = 1.0\%$ with (i) $\varepsilon_s = 0.0056$, (ii) $\varepsilon_s = 0.011$, (iii) $\varepsilon_s = 0.022$, (iv) $\varepsilon_s = 0.056$, (v) $\varepsilon_s = 0.17$.

変形によって応力が一気に解放されていることが確認できる。形成するキンク帯の幅が細いと、応力の降下は激しくなっており、メッシュ依存性がみられる。メッシュ依存性が顕著でないのはひずみ速度感度指数 m に比較的大きな値を用いているためであると考えられる。Fig. 2(b)および(c)は1.0%圧縮後のGN転位密度の刃状成分とSS転位密度分布図である。メッシュによってキンク帯の幅が異なることがわかる。またHess-Barretのモデルに見られるような孤立転位をGN転位密度で、転位対をSS転位密度でそれぞれ表現できている。したがってこの解析によりキンク帯を表現できていると言える。

キンク帯の形成は次のような過程を経ると考えられる。Fig. 3は 10×60 分割における底面系のすべり増分

布である。Fig. 3(i)および(ii)のように、材料が降伏すると試験片全体ですべりが生じ応力は徐々に緩和されていく。すべり領域は試験片中央に徐々に局所化していき、Fig. 3(iii)のように中央の1要素の局所化が完了するとそこにキンク帯が形成される。キンク帯の幅にメッシュ依存性がみられるのは、変形の局所化が1要素まで進むためである。キンク帯が形成されると結晶格子が急激に回転するため、応力も急激に解放される。さらに圧縮を続けるとFig. 3(iv)のようにキンク帯の幅が拡大していく。

続いて特性長を与え、高次応力を考慮した結果について考察する。特性長を $r = 0.5 \mu\text{m}$ とした時の応力ひずみ線図およびGN転位密度の刃状成分をFig. 4に示す。メッシュサイズの違いによるキンク帯の幅の相違が小さ

Fig. 7 Nominal stress - strain curves and distributions of basal slip and edge component of basal GN dislocation density with micro-free condition for all surface at $U/L = 1.0\%$ with $\varepsilon_S = 0.056$.

Fig. 8 Nominal stress - strain curves and distributions of basal SS dislocation density at $U/L = 1.0\%$ with (i) $\varepsilon_l = 0.01$, (ii) $\varepsilon_l = 2.0$.

くなり、メッシュ依存性が大幅に軽減されていることがわかる。しかしながら、応力ひずみ線図を見ると変形終了時の応力の値にわずかな差が見られる。さらに特性長を大きくして $r = 1.0 \mu\text{m}$ とすれば Fig. 5 のようにメッシュ依存性はほぼ取り除かれる。また、キンク帯の幅や GN 転位密度の大きさもメッシュサイズに依らないことがわかる。したがって、寸法効果パラメータを $\varepsilon_S = 0.0056$ 程度にすればキンク変形のメッシュ依存性を除去できる。メッシュ依存性の除去という観点からは、高次応力の GN 転位に対する線形性の仮定は十分であると考えられる。特性長を与えない場合との違いは、すべり領域の局所化が 1 要素まで進まず、ある程度の幅をもって完了している点である。

5.3 キンク帯形成における寸法効果パラメータの影響

次に、寸法効果パラメータの変形に与える影響について調べる。前節の解析結果に基づいて、特性長は $r = 1.0 \mu\text{m}$ よりも大きい値とする。また、高次量の境界条件は変位制御面では治具や実験装置との接触を考慮してすべり拘束条件とし、自由表面では前節と同様にすべり自由条件とする。またメッシュは 10×60 分割の 600 要素で固定する。

特性長比を $\varepsilon_l = 0.1$ で固定して寸法効果パラメータの影響を調べた結果を Fig. 6 に示す。この結果から、寸法効果パラメータまたは特性長の増加に伴って激しい加工硬化が生じ、キンク帯の幅も拡大していることがわかる。寸法効果パラメータが大きい場合には、キンク帯の幅が広がり試験片全体ですべりが生じる。一方、この試験片の上下端面ではすべりを拘束しているため GN 転位が堆積する。このために加工硬化が生じると考えられる。

Fig. 9 Distributions of wedge disclination component of incompatibility at $U/L = 1.0\%$ with (i) $r = 1.0 \mu\text{m}$ ($\varepsilon_S = 0.0056$), (ii) $r = 2.0 \mu\text{m}$ ($\varepsilon_S = 0.011$).

これを確かめるために、寸法効果パラメータを $\varepsilon_S = 0.022$ で固定し、試験片全体ですべり自由条件とした場合および試験片上下端面ですべり拘束条件にした場合について解析を行った結果を Fig. 7 に示す。Fig. 7(a)では、すべり拘束条件を与えると加工硬化が生じているのに対し、すべり自由条件では生じていない。Fig. 7(b)の底面系のすべり分布図では試験片上下端面近傍でも底面すべりが活発に生じていることがわかる。また、Fig. 7(c)においても GN 転位密度は値をほとんど有していない。この結果から、塑性変形が試験片で全体的に生じる場合に高次境界条件が大きな影響を及ぼすことがわかる。

5.4 キンク帯形成における特性長比の影響

続いて特性長比が変形に与える影響を調べるため、特性長比を $\varepsilon_l = 0.01 \sim 2.0$ の範囲で変えながら解析する。なお寸法効果パラメータは $\varepsilon_S = 0.0056$ で固定する。その結果を Fig. 7 に示す。Fig. 8(a)の応力ひずみ線図では、特性

長比を 10, 100 のオーダーで変化させたのにもかかわらず違いがみられない. Fig. 8(b)の SS 転位密度分布図においても, 分布はほぼ同じとなっている. 特性長比の影響が最も大きいと考えられる $\epsilon_l = 0.01$ の場合および $\epsilon_l = 2.0$ の場合においても分布の差異が見られないため, 特性長比の与える影響は小さいといえる.

5・5 回位四重極の表現

最後に, 回位四重極構造の表現について考察する. 解析モデルは先ほどの単結晶解析と同じ 10×60 分割のメッシュを用い, 自由表面ですべり自由条件, 固定端ですべり拘束条件とする. 特性長は $r = 1.0$ および $2.0 \mu\text{m}$ の 2 つの場合を考え, 特性長比は $\epsilon_l = 0.1$ とする.

Fig. 9 は 1.0%変形時の GN 刃状転位密度分布図およびくさび形回位密度分布図である. キンク帯に回位が正負に分かれて集中していることがわかる. これは回位四重極構造に相当している. したがって, すべりの不適合度を用いることにより回位四重極構造を簡易的に表現できるといえる. ただし, 回位密度を定量的に考察するには Cosserat モデルに基づく定式化が今後必要となる.

6 結 言

LPSO 型 Mg 合金の強化要因とされる LPSO 相のキンク帯形成を数値解析によって表現することを目的とし, キンク帯形成のメッシュ依存性を軽減するために転位-結晶塑性モデルを高次理論に拡張した. 続いて, 得られたモデルに基づいて LPSO 相単結晶に対する FEM 解析を実施し, 本モデルによるキンク帯形成のメッシュ依存性を寸法効果パラメータの観点から検討した. また, 高次境界条件および特性長比が変形に与える影響について調べた. さらに, キンク帯を特徴づける回位四重極構造の結晶塑性論的表現方法についても言及した.

以上の検討から以下の結論を得た.

- (1) 高次応力を考慮した転位-結晶塑性モデルを用いた FEM 解析では, 寸法効果パラメータが 10^{-3} 程度と比較的小さな場合でもキンク変形のメッシュ依存性を取り除くことができる.
- (2) 形成されるキンク帯の幅は特性長により決定され, キンク帯が試験片全体で生じる際にはすべりに対する境界条件を適切に規定することで加工硬化を再現できる. なお, 特性長比がキンク変形に及ぼす影響は小さい.
- (3) すべりの不適合度を用いることでキンク帯における回位四重極構造を定性的に表現できる.

参 考 文 献

- 1) Y. Kawamura, K. Hayashi, A. Inoue and T. Masumoto, "Rapidly solidified powder metallurgy $\text{Mg}_{97}\text{Zn}_1\text{Y}_2$ alloys with excellent tensile yield strength above 600 MPa", *Materials Transactions*, Vol.42, No.7, pp.1172–1176, (2001).
- 2) K. Hagihara, A. Kinoshita, Y. Sugino, M. Yamasaki, Y. Kawamura, H.Y. Yasuda and Y. Umakoshi, "Effect of long-period stacking ordered phase on mechanical properties of $\text{Mg}_{97}\text{Zn}_1\text{Y}_2$ extruded alloy", *Acta Materialia*, Vol.58, Issue 19, pp.6282–6293, (2010).
- 3) J. B. Hess and C. S. Barrett, "Structure and nature of kink bands in zinc", *Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers*, Vol.185, pp.599–606, (1949).
- 4) R. Ueta and K. Shizawa, "A dislocation-based crystal plasticity simulation on kink band formation in single crystal of Mg-based LPSO phase", *Journal of the Society of Materials Science, Japan*, Vol.64, Issue 4, pp.295–302, (2015).
- 5) R. Ueta and K. Shizawa, "Investigation on position of kink band formation in single crystal of Mg-based LPSO phase using dislocation-based crystal plasticity simulation", *Journal of the Society of Materials Science, Japan*, Vol.65, Issue 3, pp.220–227, (2016).
- 6) M. Kuroda and V. Tvergaard, "Studies of scale dependent crystal viscoplasticity models", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol.54, Issue 9, pp.1789–1810, (2006).
- 7) M. E. Gurtin, "On the plasticity of single crystals: Free energy, microforces, plastic-strain gradients", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol.48, Issue 5, pp.989–1036, (2000).
- 8) M. E. Gurtin, "A finite-deformation, gradient theory of single-crystal plasticity with free energy dependent on the accumulation of geometrically necessary dislocations", *International Journal of Plasticity*, Vol.26, Issue 8, pp.1073–1096, (2010).
- 9) A. E. Romanov and V. I. Vladimirov, "Disclinations in solids", *Physica Status Solidi (a)*, Vol.78, Issue 1, pp.11–34, (1983).
- 10) Y. Aoyagi and K. Shizawa, "Multiscale crystal plasticity modeling based on geometrically necessary crystal defects and simulation on fine-graining for polycrystal", *International Journal of Plasticity*, Vol.23, Issue 6, pp.1022–1040, (2007).
- 11) K. Shizawa and H. M. Zbib, "A thermodynamical theory of gradient elastoplasticity with dislocation density tensor. I: Fundamentals", *International Journal of Plasticity*, Vol.15, Issue 9, pp.899–938, (1999).
- 12) P. Steinmann, "Views on multiplicative elastoplasticity and the continuum theory of dislocations", *International Journal of Engineering Science*, Vol.34, Issue 15, pp.1717–1735, (1996).
- 13) T. Ohashi, "Numerical modelling of plastic multislip in metal crystals of f.c.c. type", *Philosophical Magazine A*, Vol.70, Issue 5, pp.793–803, (1994).
- 14) C. J. Bayley, W. A. M. Brekelmans and M. G. D. Geers, "A comparison of dislocation induced back stress formulations in strain gradient crystal plasticity", *International Journal of Solids and Structures*, Vol.43, Issue 24, pp.7268–7286, (2006).
- 15) T. Ohashi, "Crystal plasticity analysis of dislocation emission from micro voids", *International Journal of Plasticity*, Vol.21, Issue 11, pp.2071–2088, (2005).
- 16) M. E. Gurtin, "A gradient theory of single-crystal viscoplasticity that accounts for geometrically necessary dislocations", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol.50, Issue 1, pp.5–32, (2002).
- 17) E. Bittencourt, A. Needleman, M. E. Gurtin and E. Van der Giessen, "A comparison of nonlocal continuum and discrete dislocation plasticity predictions", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol.51, Issue 2, pp.281–310, (2003).
- 18) L. P. Evers, W. A. M. Brekelmans and M. G. D. Geers, "Non-local crystal plasticity model with intrinsic SSD and GND effects", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol.52, Issue 10, pp.2379–2401, (2004).