多結晶材料の局所領域における応力-ひずみ挙動[†]

坂本 正雄* 二瓶 正俊*

Local Stress-Strain Behavior of Polycrystalline Materials

by

Masao SAKAMOTO* and Masatoshi NIHEI*

The relationship between the local deformation within a grain and macroscopic deformation of material was investigated by FEM simulation and tensile tests. Tensile tests for investigating the local deformation within a grain were carried out using on the thin copper specimens in a SEM chamber. From these tests, it was found that the local stress-strain behavior within a grain depends on the orientation of grains and the strain shows distribution within a grain.

It was also found that the value of local strain depends mainly on the gauge length used for the calculations of strain. A FEM simulation showed a good agreement with tensile test results by considering the crystallographic orientation of each grain and that of the constraint from circumferential grains.

Key words: Stress-strain curve, Deformation, Local strain, FEM simulation

1 緒言

一般構造用材料の変形特性の評価、特に応力-ひずみ特性は連続体力学の概念に基づき、均質、一様な材料であると仮定して行われている。この応力-ひずみ特性は純金属単結晶材料についてそのメカニズムからの検討が進められているが¹⁾、これら単結晶材料から得られた成果をそのまま構造材料に適用することはできない。これは構造材料の応力-ひずみ特性は結晶粒サイズ、結晶粒界、結晶粒相互の幾何学的関係等の多くの因子が複雑に影響しているためと考えられる。一般に実用の金属材料は多結晶体であり、種々の大きさや方位を持った多くの結晶粒からなっている。このような材料に一樣な巨視的変形を与えても、微視的な局所領域における変形は一樣にはならず、結晶粒単位で異なり、また荷重の種類や材料の組織によっても異なることが知られている。^{3), 4)} 微視的変形についての研究は、結晶モデルに基づいた計算による定量的考察^{5)~11)}はみられるものの、実験観察によるものはすべりの発生の有無や発生箇所の確認など定性的なものが多く、西谷^{12), 13)}らは実用材料の局所ひずみについて定量的な評価の重要性を指摘している。

金属材料技術研究所では1997年4月から新世紀構造材料研究プロジェクトを開始している。その中では汎用構造用鋼の超微細化技術による強度向上を大きな柱として研究開発を進めている。本研究はそのような研究開発に必須な結晶粒とバルクな材料の変形挙動との関係を局所の変形ひずみに注目して実験と計算シミュレーションとを対比させながら明らかにしていくことを目指した。

2 実験方法および計算方法

2.1 実験方法

用いた試験片はFig. 1に示すような平行部20mmの

Fig. 1. Shape and dimension of test specimen.

純銅 (99.99%) の板状試験片である。この試験片を800℃で真空焼きなまし処理を行い、さらに試験片表面を20μm程度電解研磨により除去した後、超微小硬さ計により表面にひずみ測定用の圧痕をつけた。圧痕の間隔は最短間隔を20μmとし、局所ひずみは圧痕の間隔を標点距離として求めた。圧痕による表面ひずみへの影響を最小限とするように、圧痕の大きさは深さ1μm以下、幅3μm程度の大きさの三角錐とした。この試験片を走査型電子顕微鏡 (SEM) 内にて引張試験を行い試験中の試験片表面のひずみを測定した。引張試験は変位制御で行い、試験機のDTFの変位から求めたひずみ (巨視ひずみと呼ぶ) で30%まで行った。

2.2 計算方法

局所ひずみの解析は有限要素法 (FEM) を用い、多結晶材料の個々の結晶粒を異方性均質材として取り扱った。構成要素は四辺形要素を用い、平面応力場を仮定した。結晶粒の応力-ひずみ曲線は次式のようなRamberg-Osgoodの式を用いた。

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} + \frac{3}{7} \frac{\sigma_{0.7}}{E} \left(\frac{\sigma}{\sigma_{0.7}} \right)^n \quad (1)$$

ここでεはひずみ、σは応力、Eは縦弾性係数、σ_{0.7}は

[†] 原稿受理 平成10年3月12日 Received Mar. 12, 1998

* 正会員 金属材料技術研究所 〒305-0047 つくば市千現, National Res. Inst. for Metals, Sengen, Tsukuba, 305-0047

Table I. Crystallographic orientation of each grain.

grain	angle	
	λ (rad)	ϕ (rad)
A	1.132	0.459
B	1.213	0.588
C	0.553	1.031
D	1.144	0.617
E	1.068	0.518
F	1.092	0.493
H	1.092	0.311

Fig. 2. Effect of orientation used for the FEM stress analysis.

0.7E の割線の交点における単軸応力, n は硬化指数である. Fig. 2 に結晶方位と結晶粒の応力-ひずみ関係の取り扱いを示す. 結晶方位の扱いは, 銅が fcc 金属であることから, 各結晶粒について 12 のすべり系を考えるが, このうち最大せん断応力を有する主すべり系に沿ってのみ変形すると仮定した. 結晶粒の応力-ひずみ曲線は, [111] や [101] など主たる結晶方位を引張軸とした単結晶材料の応力-ひずみ曲線群¹⁾を基準にした. 他の結晶方位における結晶粒の応力-ひずみ曲線はこれから内挿して得た. 各結晶粒には, Fig. 2 に示すようにすべり面および応力軸とすべり面上のすべり方向との角度を 0 から π まで一様乱数を用いて与えた. 結晶方位が与えられた結晶粒の応力-ひずみ曲線の数式化は, この角度に応じて式 (1) の縦弾性係数, $\sigma_{0.7}$, 硬化指数を変化させて得た.

結晶粒のモデルは 1) 結晶粒の大きさが等しいと仮定した一様寸法の結晶粒モデルと 2) 実材料の結晶粒を用いたモデルで検討した. 一様寸法の結晶粒モデルでは, 一つの結晶粒は 24 および 80 の四辺形要素に分割して計算を行った. Table I に, Fig. 3 の各結晶粒の応力軸とすべり面の法線方向, およびすべり方向の間の角度を示す. 実材料の結晶粒を用いたモデルでは Fig. 3 に示す結晶粒界に沿ってモデリングを行い, 各結晶粒には Table I に示すような実測した結晶方位を用いた.

3 結果および考察

3.1 結晶粒内の変形挙動

3.1.1 局所領域における変形挙動 Fig. 3 に試験片の中心部付近の組織写真を示す. 図中の A, B, C... は結晶粒の番号を示している. Fig. 4 は引張試験を行ったときの, これら結晶粒ごとのひずみを巨視ひずみとの関係で示したものである. 縦軸のひずみは結晶粒内のひず

Fig. 3. Optical micrograph of surface for Cu.

Fig. 4. Relationship between local strain and macroscopic strain.

Fig. 5. Distribution of local strain along Line 1 in Fig. 3 (experiments).

みの平均値として示した。この図のように結晶粒の応力-ひずみ挙動は各結晶粒ごとに異なったふるまいを示していることがわかる。

結晶粒内の变形挙動を調べるため、Fig. 3 中の Line 1 に沿ったひずみの分布を測定した。Fig. 5 は Line 1 における各位置の局所ひずみ値である。実線は巨視ひずみが 10% の場合、破線は 20% の場合を示している。各位置における局所ひずみは標点距離 $30\mu\text{m}$ と固定して求めた。この図から結晶粒内の变形は均一ではなく結晶粒界近傍と結晶粒中心部付近など位置によって变形量が大きく異なっていることがわかる。この傾向は巨視ひずみが 20% の場合も同様であった。

3・1・2 結晶粒相互の变形拘束と局所ひずみ 単結晶材料の場合、異なった結晶方位で引張試験を行うと結晶方位により異なった応力-ひずみ挙動を示すことが知られている¹⁾。多結晶材料にこの関係を適用し、結晶粒の方位と結晶粒相互の力学的な作用による局所の变形ひずみへの影響について FEM を用いて検討した。この際、結晶粒界は結晶方位の異なる粒の間の境界とし、粒界の厚さは無限に薄く機械的強度を持たないと仮定した。Fig. 6 に一つの結晶粒を 80 個の要素に分割した結晶粒モデルを示す。太線で囲まれた中は同一の結晶粒であり、同一の結晶方位が与えられている。

Fig. 7 は結晶粒 A の周りが均質材料の場合と結晶粒 A の周りに結晶方位が異なる結晶粒を配置した場合の応力-ひずみ曲線である。曲線 A は均質材料としたときの結晶粒 A の応力-ひずみ曲線であり、この結晶粒の周辺に結晶方位の異なる結晶粒が配置されると応力-ひずみ曲線は A' のようになる。曲線 A' は周辺結晶粒の配置関係によって異なった結果を示すが、曲線 A と A' とのひずみの差 PQ は周辺結晶粒による变形拘束の影響量を示していると考えられる。そこで結晶粒 A の变形に対して周辺結晶粒はどれだけ影響を及ぼすかについて調べた。Fig. 8 はその結果である。縦軸は結晶粒 A のひずみを示し、横軸は結晶粒 A の周りに何層の結晶粒を配置したかを示す。横軸が 0 のときの結晶粒 A のひずみは均質材料の場合である。横軸が 1 における結晶粒 A のひずみは 1 層目の周辺結晶粒だけ結晶方位を乱数により変化させた場合のひずみである。横軸が 0 の場合と 1 の場合におけるひずみの差は、結晶粒 A が 1 層目の周辺結晶粒により受けた变形拘束の影響量を示している。横軸 2 のひずみは 1 層目の周辺結晶粒の結晶方位の配置状態を保ったまま 2 層目の結晶粒についてのみ結晶方位を与えた場合である。横軸が 1 の場合と 2 の場合におけるひずみの差は 2 層目の周辺結晶粒によって受けた变形拘束の影響量を示している。横軸 3 におけるひずみも同様にして求めた結晶粒 A のひずみである。このように、結晶粒 A のひずみは、1 層目の周辺結晶粒の結晶方位の配置関係に大きく影響され、2 層目以上の周辺結晶粒からの影響は小さくなっているのがわかる。

3・1・3 結晶粒内ひずみの FEM シミュレーション 結晶粒内の变形挙動について、実験に用いた Fig. 3 をモ

Fig. 6. Finite element meshes used for polycrystals.

Fig. 7. Comparison of stress-strain curves between isotropic material and polycrystals.

Fig. 8. Effect of constraint from circumferential grains.

デル化し、局所領域の变形分布を計算によりシミュレートした。Line 1 に沿って得られたひずみ分布計算結果を Fig. 9 に示す。この場合、ひずみを求める際の標点距離は要素サイズ $25\mu\text{m}$ とした。

結晶粒は周辺結晶粒の变形拘束を受けるため、結晶粒内の局所領域もその影響を受けながら变形する。計算結果からは結晶粒 C のように比較的变形量の大きな結晶粒

Fig. 9. Distribution of local strain along Line 1 in Fig. 2 (simulation).

と変形量の少ない結晶粒とがあり、結晶方位および周辺結晶粒の影響が良く表されているのがわかる。Fig. 5の実験結果と比較すると、シミュレーション結果は、結晶粒CおよびAの粒界やAとFの粒界などLine 1の変形分布の特徴を良く再現しているのがわかり、結晶粒内の変形ひずみ分布は結晶粒の結晶方位と周辺結晶粒の変形拘束により説明が可能と考えられる。

3・2 応力-ひずみ挙動と標点距離の影響

結晶粒内あるいは小さな標点距離間では局所的には不均一なひずみが生じている。このため、実材料の変形特性をひずみで評価する場合、ひずみを計算する基礎となる標点距離をどのように設定するかということが重要となる。ここでは、局所ひずみと標点距離の関係について検討する。

Fig. 10は局所ひずみを測定したときの実験結果である。横軸は標点距離であり縦軸はその標点距離のときの局所ひずみを示している。標点距離は工学的に用いられている長さの20mmから結晶粒径オーダーの20 μ mまで変化させた。標点距離とひずみとの関係をみてみると、標点距離が短くなるほど、その標点距離における局所ひ

Fig. 10. Relationship between local strain and gauge length used for the calculation of strain (experiments).

Fig. 11. Stress-strain curves which used a gauge length of 2 grains for the calculation of strain (simulation).

Fig. 12. Stress-strain curves which used a gauge length of 15 grains for the calculation of strain (simulation).

Fig. 13. Relationship between local strain and gauge length used for the calculation of strain (simulation).

ずみのばらつきは大きくなる傾向にある。

この実験結果について結晶粒の方位を考慮した FEM 計算による検討を試みる。局所ひずみの解析には、一様寸法の結晶粒モデルを用い結晶粒の数を 16, 51, 266 と増加させた。各結晶粒には一様乱数により異なった結晶方位を与えているため、初期値により各結晶粒の方位の配置状態が異なっており、1つの標点距離に対して各 10 回の解析を試みた。

Fig. 11 および 12 は各結晶粒に異なった結晶方位を与えたときの応力-ひずみ曲線のシミュレーション結果である。Fig. 11 は標点距離を 2 結晶粒間とした場合、Fig. 12 は標点距離を 15 結晶粒間とした場合の応力-ひずみ曲線である。標点距離を 2 結晶粒間とした場合の応力-ひずみ曲線は計算を行ったケースによって大きくばらつくのに対し、標点距離を 15 結晶粒間として計算を行った場合では各ケースとも同じような値の応力-ひずみ曲線を示している。Fig. 13 は標点距離を 15 結晶粒間から 1/6 結晶粒まで変化させ、得られた応力-ひずみ曲線から応力 210MPa におけるひずみを標点距離との関係で示したものである。

Fig. 10 の実験結果と対比してみると、計算における標点距離と局所ひずみのばらつきの関係は標点距離が長くなるほどばらつきは小さくなっており、実験結果と一致した傾向を示している。また、標点距離が 2 結晶粒間の場合と標点距離が 15 結晶粒間の場合とではひずみのばらつきは 1/4 程度と小さくなっている。この局所ひずみにばらつきが生じるのは多結晶体を構成する結晶粒の結晶方位の配置関係に影響を受けたためと考えられ、前節までに議論したことを反映している。標点距離が 15 結晶粒間におけるひずみのばらつきが 2 結晶粒間のひずみのばらつきに比較して小さいのは、局所的に生じている変形量は変わらないが、標点距離を長くしたため単位長さあたりの変形量が平均化され、相対的にばらつきが小さく示されたものと考えられる。

以上のことから、標点距離が数結晶粒間程度の場合、応力-ひずみ挙動は多結晶体を構成する結晶粒の結晶方位の配置関係により大きく影響を受けており、標点距離が長くなるほどこの影響は小さくなることがわかる。結晶粒は周辺結晶粒の影響を受け、さらに、自身の結晶方位により変形挙動が異なってくることを考えると、工学的に材料を評価する場合の標点距離は少なくとも結晶粒の 10 倍程度以上の長さをもって評価しないと局所ひずみのばらつきによる影響が大きくバルクの材料としての材料特性を適切に評価できないと考えられる。

4 結 言

多結晶材料の応力-ひずみ挙動と局所変形について実験と FEM を用いた計算シミュレーションによる検討を行った結果、以下の知見が得られた。

(1) 多結晶材料の局所変形挙動は、結晶粒ごとに、さらには結晶粒内でも中心部と結晶粒界付近とは異なった応力-ひずみ挙動を示す。

(2) 局所変形は周辺結晶粒による変形拘束を受ける。特に、隣接する周辺結晶粒の結晶方位の配置関係に大きく左右されていると考えられる。このことは、結晶方位と周辺結晶粒による拘束の影響を考慮することによって実験における変形分布をよく表現する計算シミュレーション結果からも明らかである。

(3) 材料の変形特性を局所ひずみで評価する場合、標点距離が短くなると局所ひずみに大きなばらつきが生じる。材料の変形特性を工学的に評価する場合、少なくとも結晶粒の 10 倍程度以上の標点距離をもって評価しないと局所ひずみのばらつきによる影響が大きく適切に評価できないと考えられる。

参 考 文 献

- 1) T. Takeuchi, J. Phys. Soc. Japan, **40**, 741 (1976).
- 2) R. A. Carolan, M. Egashira, S. Kishimoto and N. Shinya, Mat. Trans. JIM, **32**, 66 (1991).
- 3) 平 修二, 阿部武治, 材料, **14**, 992 (1965).
- 4) 宮本 博, 白鳥正樹, 三好俊郎, 大藤 誠, 日本機械学会誌, **74**, 53 (1971).
- 5) R. Hill, J. Mech. Phys. & Solids, **13**, 89 (1965).
- 6) T. H. Lin and M. Ito, Int. J. Engng. Sci., **4**, 543 (1966).
- 7) 阿部武治, 日本機械学会論文集, **34**, 1387 (1968).
- 8) 阿部武治, 日本機械学会論文集, **37**, 633 (1971).
- 9) 神馬 敬, 室田忠雄, 一柳高時, 日本機械学会誌, **75**, 602 (1972).
- 10) 後藤 学, 日本機械学会論文集, **43**, 3723 (1977).
- 11) 徳田正孝, Jan Kratochvil, 大橋義夫, 日本機械学会論文集, A-48, 239 (1982).
- 12) 西谷弘信, 福田孝之, 藤村顕世, 堀尾英明, 日本機械学会論文集, A-60, 98 (1994).
- 13) 西谷弘信, 福田孝之, 藤村顕世, 日本機械学会論文集, A-61, 600 (1995).