

# 多結晶金属材料の変形挙動に及ぼす初期不均一性の影響

Effect of initial inhomogeneities on deformation behavior of polycrystalline metals

比嘉 吉一（沖縄高専） 高木 知弘（神戸大・海科）  
久國 陽介（神戸大・工） 富田 佳宏（神戸大・工）

Yoshikazu HIGA, Dept. Mech. Sys. Engng., Okinawa Nat. Coll. Tech.  
Tomohiro TAKAKI, Fac. Maritime Sci., Kobe Univ.  
Yousuke HISAKUNI, Fac. Engng., Kobe Univ.  
Yoshihiro TOMITA, Fac. Engng., Kobe Univ.  
FAX: 0980-55-4012 E-mail: y.higa@okinawa-ct.ac.jp

In this report, the effect of initial inhomogeneities related to the dislocation densities distribution and the crystallographic orientations on the macro-microscopic deformation behavior of polycrystalline metals have been discussed using the computational procedure for polycrystalline materials obeying the strain-gradient crystal plasticity theory. As a result, it is observed that the macroscopic deformation behavior like an initial yield stress depends on an initial dislocation densities.

## 1. 緒言

従来の連続体理論の枠組みへ、材料の寸法依存性変形挙動を表現するために、塑性せん断ひずみの一次勾配を導入したひずみ勾配結晶塑性理論に基づく解析が数多く報告されている。ここでは、臨界分解せん断応力 (CRSS) の発展式へ転位密度  $\rho$  の寄与を考慮した次式が用いられている。

$$\text{CRSS} = g(\tau_0, \rho^{1/2}) \quad (1)$$

ここで、 $\tau_0$  は初期臨界分解せん断応力とする。しかしながら、材料の巨視的変形挙動の一つである初期降伏応力  $\sigma_Y$  の結晶粒径依存性、すなわち、 $\sigma_Y \propto d^{-1/2}$  で知られる Hall-Petch 関係が表現できないことが指摘されてきた。そこで、CRSS の発展式に代表寸法（結晶粒径） $d$  の寄与項を導入する

$$\text{CRSS} = g(\tau_0, \rho^{1/2}, d, \dots) \quad (2)$$

が提案されている。例えば、離散転位論により導出された代表長さ  $d^{-1}$  の寄与項を修正 Bailey-Hirsch の式へ導入した CRSS の発展式<sup>1,2)</sup>や、初期臨界分解せん断応力の項に結晶粒径の  $d^{-1/2}$  を考慮した構成式<sup>3)</sup>が提案されている。一方、GN 転位の自己エネルギーを考慮したひずみ勾配塑性理論<sup>4)</sup>が提案され、 $\sigma_Y \propto d^{-1}$  を報告している。

本報は、著者ら<sup>5,6)</sup>が行ってきた式 (1) の形式によるひずみ勾配結晶塑性理論を導入した数値シミュレーションを用いて、初期結晶粒内に存在する転位密度分布の不均一性を考慮することで、巨視的な初期降伏応力の粒径依存変形挙動を検討する。

## 2. ひずみ勾配結晶塑性理論

既報<sup>5,6)</sup>と同様に、式 (1) の形式を多重すべり系に拡張した修正 Bailey-Hirsch の式<sup>7,8)</sup>を用いる。

$$g^{(\alpha)} = g_0^{(\alpha)} + a\mu\tilde{b} \sum_{\beta} \omega_{\alpha\beta} (\rho_a^{(\beta)})^{1/2} \quad (3)$$

ここで、 $g_0^{(\alpha)}$  および  $\rho_a^{(\alpha)}$  はすべり系 ( $\alpha$ ) における初期臨界分解せん断応力および蓄積転位密度、 $\omega_{\alpha\beta}$  はすべり系に関する相互作用マトリクス、 $a, \mu$  および  $\tilde{b}$  はそれぞれ定数、せん断弾性定数および転位のバーガースベクトルの大きさを表わしている。また、式 (3) 中の蓄積転位密

度  $\rho_a^{(\alpha)}$  については、統計的に蓄積する転位 (SS 転位) と幾何学的に必要な転位 (GN 転位) のスカラー和として次式のように与えている。

$$\rho_a^{(\alpha)} = \rho_S^{(\alpha)} + \|\rho_G^{(\alpha)}\| \quad (4)$$

なお、すべり系 ( $\alpha$ ) ごとに生成する転位密度は以下の発展式から算出する。

$$\dot{\rho}_S^{(\alpha)} = \frac{1}{b} \left( \frac{1}{L^{(\alpha)}} - 2y_c \rho_a^{(\alpha)} \right) |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_G^{(\alpha)} &= \dot{\rho}_{G,\text{edge}}^{(\alpha)} + \dot{\rho}_{G,\text{screw}}^{(\alpha)} \\ &= -\frac{1}{b} s_i^{(\alpha)} \dot{\gamma}_i^{(\alpha)} + \frac{1}{b} e_{ijk} s_j^{(\alpha)} m_k^{(\alpha)} \dot{\gamma}_i^{(\alpha)} \end{aligned} \quad (6)$$

ここで、式 (5) 中に現れる  $L^{(\alpha)}$  および  $y_c$  はそれぞれ可動転位の平均自由行程および dipole 転位の消滅機構に関連する特徴長さであり、式 (6) 中の  $e_{ijk}$  および  $(\cdot)_i$  はそれぞれ順列テンソルおよび  $i$  方向の空間勾配を示す。

式 (5) のすべり速度の発展式としては、各すべり系 ( $\alpha$ ) に対応した基準ひずみ速度  $\dot{\gamma}_{\text{ref}}^{(\alpha)}$ 、臨界分解せん断応力  $\tau^{(\alpha)}$  および基準分解せん断応力  $g^{(\alpha)}$  より表現された式 (7) を用いた。また、基準分解せん断応力の発展式はひずみ硬化係数  $h_{\alpha\beta}$  を用いて式 (8) で与える。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_{\text{ref}}^{(\alpha)} \text{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \left| \tau^{(\alpha)} / g^{(\alpha)} \right|^{1/\kappa} \quad (7)$$

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \quad (8)$$

本報でも、式 (5) 中の可動転位の平均自由行程  $L^{(\alpha)}$  の発展式には、既報<sup>5)</sup>と同様に次式で与えている。

$$L^{(\alpha)} / L_0^{(\alpha)} = \left( \rho_a^{(\alpha)} / \rho_0^{(\alpha)} \right)^{-n} \quad (9)$$

ここで、 $L_0^{(\alpha)}$ 、 $\rho_0^{(\alpha)}$  および  $n$  はそれぞれ転位の初期平均運動距離、初期蓄積転位密度および材料定数を表す。

なお、式 (3) の時間微分と式 (5) ならびに Orowan の式より、式 (8) は次式のように書き改められる。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} \frac{\omega_{\alpha\beta} a \mu \tilde{b}}{2 \sqrt{\rho_a^{(\beta)}}} \left( \frac{1}{L^{(\beta)}} - 2 y_c \rho_a^{(\beta)} \right) |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \quad (10)$$

以上から、式 (6) 中に現れる塑性せん断ひずみ速度の一次勾配に随伴した式 (10) を評価することにより、微視構造の特徴長さに依存した巨視的変形応答の記述を可能としている。

### 3. 多結晶金属材料の解析モデル

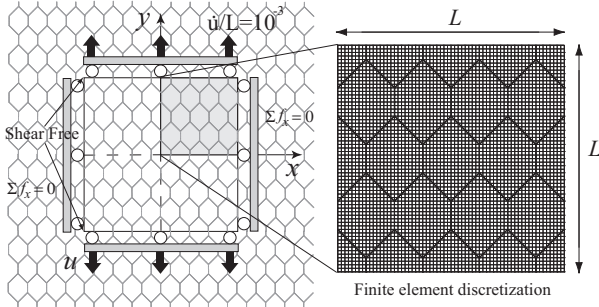


Fig. 1 Computational model for polycrystalline metals.

解析対象は図 1 に示すような定型粒が規則的に配置した多結晶金属平板とし、 $L \times L$  の正方領域に対して平面すべりモデル<sup>9)</sup>による平面ひずみ引張解析を行なう。なお、解析モデルの周期性を表現するため、図示のように左右端面の  $x$  方向変位を一定、かつ  $x$  方向節点力の総和が 0 になるようにし、上下端面に一樣な変位速度  $\dot{u}/L = 10^{-3} [s^{-1}]$  を与えた。実際の解析には問題の対称性を考慮し、図示の 1/4 領域を対象としている。一方、解析対象内に存在する 23 結晶粒は、すべり面方位角をランダムに与えることで初期結晶方位データを作成する。なお、結晶粒界では変位の連続性が保持されると仮定し、初期すべり方位の変化する境界を結晶粒界としている。

当該領域内は、格子状に  $64 \times 64$  の Crossed Triangles 要素で分割を行っており、単一結晶粒内は三角形要素単位で 1024 個に分割している。

以下では、結晶粒内の初期転位密度  $\rho_0$  の違いが巨視的 - 微視的変形挙動に及ぼす影響について検討するため、 $\rho_0 = \text{const.}$ ,  $L = 10 (\mu\text{m})$  として解析を行なっている。ここで、解析に用いる材料定数は表 1 のように与えた。

Table 1 Material parameters.

$\mu$	Elastic Shear Modulus	23.4(GPa)
$\kappa$	Strain Rate Sensitivity Exponent	0.05
$\dot{\gamma}_{\text{ref}}^{(\alpha)}$	Reference Shear Strain Rate	0.001(1/s)
$\sigma_0^{(\alpha)}$	Initial Critical Resolved Stress	60.84(MPa)
$a$	Material Parameter	0.2
$\tilde{b}$	Burgers Vector	$2.556 \times 10^{-10}(\text{m})$
$\mu$	Elastic Shear Modulus	23.4(MPa)
$\rho_0^{(\alpha)}$	Initial Dislocation Density	$1.0 \times 10^{10} (\text{m}^{-2})$
$L_0^{(\alpha)}$	Initial Glide Path Distance	$1.0 \times 10^{-3} (\text{m})$
$y_c$	Annihilation Distance	$0.4 \times 10^{-9} (\text{m})$
$n$	Material Parameter	0.72
$\omega_{\alpha\beta}$	Interaction Matrix ( $\alpha = \beta, \alpha \neq \beta$ )	1.0

### 4. 解析結果

#### (1) 初期転位密度の影響について

図 2 に初期転位密度  $\rho_0$  を  $10^{10} \sim 10^{14} [\text{m}^{-2}]$  まで変化させた場合の平均応力 - 平均ひずみ関係、図 3 に  $u/L = 0.003$  における初期転位密度  $\rho_0 = 10^{10}, 10^{14} [\text{m}^{-2}]$  の場合の相当粘塑性ひずみ  $\bar{\epsilon}^{vp}$  分布を示す。これより、 $\rho_0 = 10^{10} [\text{m}^{-2}]$  (以下、低転位密度と呼ぶ) とした場合、微視的には局所的に大きなひずみ集中域が結晶粒界近傍ならびに結晶粒内で発生しており、その結果、巨視的な変形抵抗は小さくなることが観察される。これは、低転位密度とした場合、 $\rho_0 = 10^{14} [\text{m}^{-2}]$  の場合に比して CRSS が約 20% 小さく、微視的な変形がより変形初期に進展することに起因する。

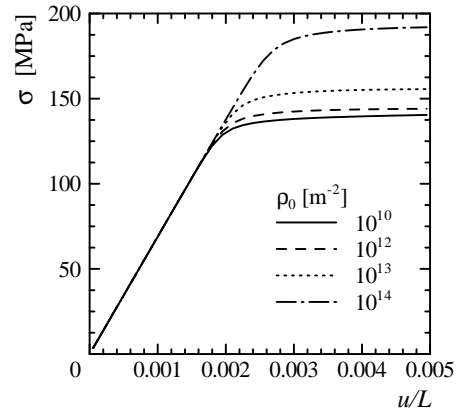


Fig. 2 Relation between nominal stress and strain.

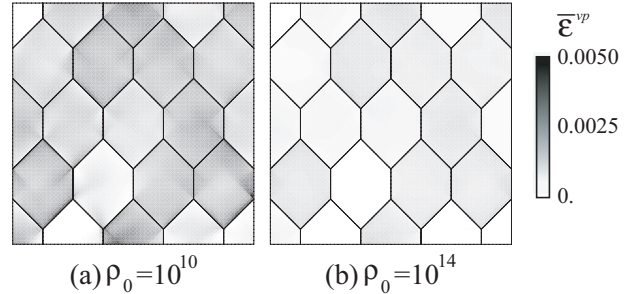


Fig. 3 Equivalent strain distribution at  $u/L = 0.003$ .

なお、結晶粒内の転位密度分布を変化させた場合の解析結果については、講演会当日に報告させていただく。

#### 参考文献

- 1) Ohashi, T. et al., *Int. J. Plasticity*, (in press).
- 2) 佐藤・海宝・青柳・只野・志澤, 機講論, 06-9, 85-86, 2006.
- 3) 中曾根・佐藤・古郡・三重野, 機講論, 06-9, 115-116, 2006.
- 4) 大野・奥村, 第 55 期日本材料学会学術講演会論文集, 391-392, 2006.
- 5) 比嘉・澤田・富田, 機論, 69A-679, 523-529, 2003.
- 6) 比嘉・中村・長谷部・富田, 機論, 71A-710, 1292-1298, 2005.
- 7) Ohashi, T., *Phil. Mag.*, A70, 793-803, 1994.
- 8) 大橋鉄也, 塑性と加工, 37-424, 451-459, 1996.
- 9) Asaro, R. J., *J. Appl. Mech.*, 50(1983), 921-933.