504　繊維配向した立方晶多結晶薄膜の弾性変形の有限要素法解析

名古屋大学［院］　○町屋修太郎　　名古屋大学　　秋庭　義明
名古屋大学　　田中　啓介

Finite Element Analysis of Elastic Deformation Behavior of Thin films of Cubic Polycrystals with Fiber Texture

Shutaro MACHIYA, Yoshiaki AKINIWA and Keisuke TANAKA

1. 緒　言

薄膜技術は，機械構造部材の耐摩耗性や疲労強度向上を目指し，様々な部品に用いられている．また，通常薄膜は，柱状晶多結晶体であり，かつ優先方位を持ち，均質かつ等方を仮定しているバルク材とは異なる機械的性質を持っている．それについての実験的な評価法はいくつか提案されているが，理論的な検討はあまり進んでいない．　そこで，本研究では，＜００１＞および＜１１０＞,＜１１１＞繊維配向を有する多結晶体薄膜のモデルを作成した．多結晶薄膜モデルは乱数を用いたモンテカルロ法による結晶核をもとにボロノイ分割法により生成し，一軸に一定変位を加えた場合の平面応力状態での変形挙動を有限要素法を用いて解析を行い，多結晶の変形モデルであるReussモデルおよび，Voigtモデルとの比較を行った．

2. 解 析 方 法

２・１　モデルの作成　結晶粒界の生成は，乱数によって発生させた n 個の核を対象として，ボロノイ分割により行った．平面応力状態の解析においては膜厚方向にひずみが生じることから，面外変形を生じる．よって平面応力状態の解析には三次元モデルを用いた．解析領域はFig. 1に示すように一辺 d 厚さ t の直方体領域とし，この領域内を結晶粒ごとに要素分割した．また厚さ方向には要素分割を行わず，一層の要素とした．要素分割には８節点１次のアイソパラメトリック直方体要素を用い，解析モデルは，結晶粒数 $n=10, 50, 100, 1000$ の４種類とした．

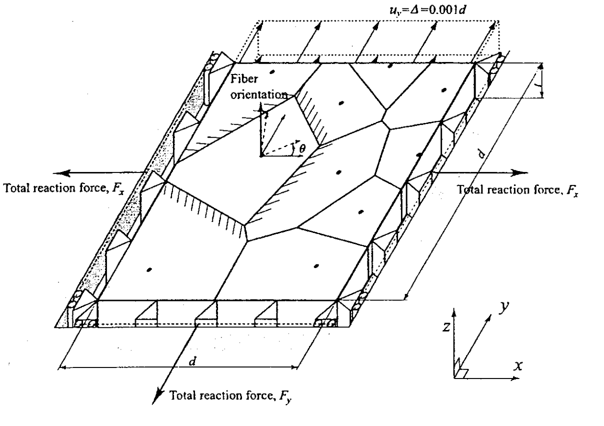

Fig. 1. Three dimensional FEM model for voronoi tesselation of microstructure.

Table I　Elastic constants of Cu

c_{11}(GPa)	c_{12}(GPa)	c_{44} (GPa)	A
168.00	121.00	75.4	3.21

２・２　解析条件　解析モデルの各粒子には〈００１〉,〈１１０〉,〈１１１〉の配向を与えた．材料としてはTable Iに示すCuを用い解析を行った．結晶粒数n=10, 50, 100, 1000の時それぞれ平均結晶粒径が 1μm とした時に結晶粒高さが 0.1μm なる割合で厚さ方向に拡張したものとした．

２・３　異方性パラメーターの決定　異方性が変化した時の材料特性の変化を解析するために，次式で表される異方性パラメータ A の値を変化させ解析を行った．ここで，c_{ij} は立方晶の単結晶の弾性スティフネスである．

$$A=\frac{2c_{44}}{c_{11}-c_{12}} \tag{1}$$

$A=1$ で等方性材料となり，異方性の強くなるに従い１から遠ざかる．また，結晶粒のポアソン比を次式のように定義する．

$$\nu=\frac{c_{11}}{c_{11}+c_{12}} \tag{2}$$

異方性パラメータの影響の検討するため，c_{11} 以外の材料定数 c_{12}, c_{44} を変化させることで，A を変化させた．つまり，式 (2) のポアソン比に任意の値を仮定し，A の値を0.1〜16の間で変化させることで c_{44} を決定できる．

２・４　Reuss による変形モデル　多結晶体の巨視的弾性定数を単結晶の弾性定数より求める変形モデルとしてReussモデルがある．Reussモデルは各結晶での応力が一定となるモデルである．〈００１〉,〈１１０〉,〈１１１〉繊維配向した多結晶体の平面応力状態でのポアソン比およびヤング率は，それぞれ次の式のように弾性コンプライアンス s_{ij} により表すことができる．

$$\nu^{\mathrm{Reuss}}_{<001>}=-\frac{2s_{11}+6s_{12}-s44}{6s_{11}+2s_{12}+s_{44}} \tag{3}$$

$$E^{\mathrm{Reuss}}_{<001>}=(1-\nu^{\mathrm{Reuss}}_{<110>})\frac{1}{s_{11}+s_{12}} \tag{4}$$

$$\nu^{\mathrm{Reuss}}_{<110>}=-\frac{6s_{11}+26s_{12}-3s44}{18s_{11}+14s_{12}+7s_{44}} \tag{5}$$

$$E^{\mathrm{Reuss}}_{<110>}=(1-\nu^{\mathrm{Reuss}}_{<110>})\frac{8}{6s_{11}+10s_{12}+s_{44}} \tag{6}$$

$$\nu^{\mathrm{Reuss}}_{<111>}=-\frac{2s_{11}+10s_{12}-s_{44}}{6s_{11}+6s_{12}+3s_{44}} \tag{7}$$

$$E^{\mathrm{Reuss}}_{<111>}=(1-\nu^{\mathrm{Reuss}}_{<111>})\frac{6}{4s_{11}+8s_{12}+s_{44}} \tag{8}$$

２・４　Voigt による変形モデル　Voigtモデルは，結晶が並列に配列し，各結晶でのひずみが一定となるモデルである．〈００１〉,〈１１０〉繊維配向した多結晶体の平面応力

状態でのポアソン比およびヤング率はそれぞれ次の式のように計算される．

$$\nu^{\rm Voigt}_{<001>} = \frac{s_{44}(s_{11}-3s_{12})-2(s_{11}^2-2s_{22}^2)}{s_{44}(3s_{11}-s_{12})+2(s_{11}^2-2s_{22}^2)} \tag{9}$$

$$E^{\rm Voigt}_{<001>} = (1-\nu^{\rm Voigt}_{<001>})\frac{1}{s_{11}+s_{12}} \tag{10}$$

$$\nu^{\rm Voigt}_{<110>} = \frac{s_{44}(s_{11}-6s_{12}+s'_{22})-4(s_{11}s'_{22}-s_{12}^2)}{s_{44}(3s_{11}-2s_{12}+3s'_{22})+4(s_{11}s'_{22}-s_{12}^2)} \tag{11}$$

$$E^{\rm Voigt}_{<110>} = (1-\nu)\frac{s_{11}+s'_{22}-2s_{12}}{2(s_{11}s'_{22}-s_{12}^2)} \tag{12}$$

ここで,〈1 1 0〉配向での s'_{22} は，$s'_{22}=s_{11}/2+s_{12}/2-s_{44}/4$ である．また〈1 1 1〉配向の場合は，ヤング率，ポアソン比のどちらも前節の Reuss モデルと値が等しくなる．

3．実験結果および考察

単結晶のポアソン比 $\nu=0.3$ での，異方性パラメータ A が 1 ～ 16 まで変化した場合におけるヤング率とポアソン比の変化を解析した．得られた結果を，ヤング率に関しては次式に示す平面応力状態の等方体に対するヤング率で無次元化した．

$$E'' = (1-\nu^2)\frac{s_{11}}{s_{11}^2-s_{12}^2} \tag{13}$$

無次元化されたヤング率は $E^* = E/E''$ のように表される．ポアソン比 ν^* はヤング率同様に各解析ごとの単結晶のポアソン比 $\nu=0.3$ で無次元化したもので，等方性材料の場合 1 となる．本解析では，弾性スティフネス c_{11} に Cu の値を用いたが，この無次元化により，他の立方晶材料にも適用できる．各繊維配向のモデルの Voigt, Reuss モデルによる予測と，ヤング率，ポアソン比を無次元化した解析結果を Fig. 2～Fig. 7 に示す．FEM による計算値は〈0 0 1〉配向の場合は Reuss モデルに近くなり,〈1 1 0〉配向の場合は Reuss と Voigt モデルのほぼ中間的な値となった．どちらも，$A=5$ 程度まではヤング率, ポアソン比共に A に対する変化が大きいが，それ以降では変化は徐々に小さくなる．A が約 5 以上ではせん断ひずみが大きくなり，垂直ひずみの影響が小さくなることから変化が小さくなると考えられる．また，結晶の回転 θ に対する依存性が無く，膜厚方向のひずみの影響が大きくなる〈1 1 1〉配向では Reuss と Voigt モデルの値は等しくなった．

結言および参考文献　省略

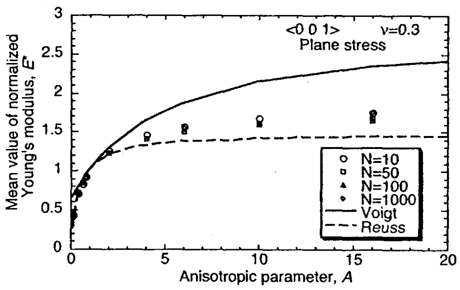

Fig. 2. Change of normalized mean value of Young's modulus for < 001 >.

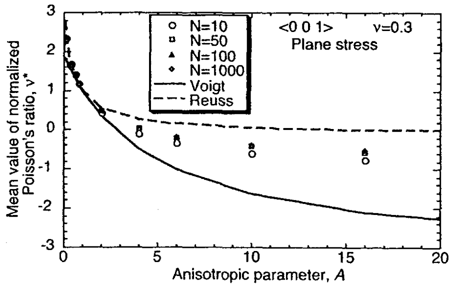

Fig. 3. Change of normalized mean value of Poisson's ratio for < 001 >.

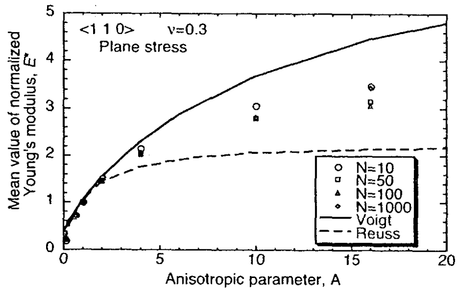

Fig. 4. Change of normalized mean value of Young's modulus for < 110 >.

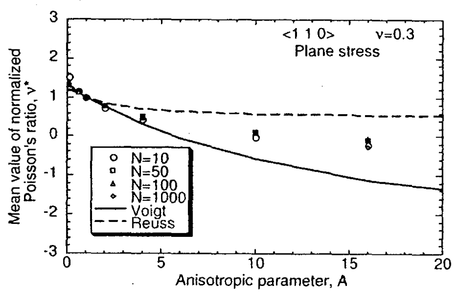

Fig. 5. Change of normalized mean value of Poisson's ratio for < 110 >.

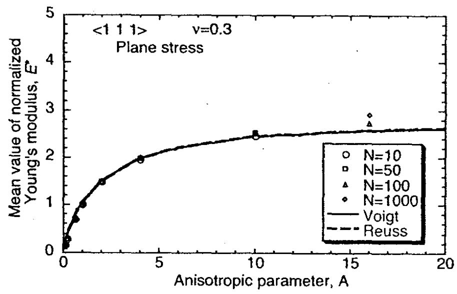

Fig. 6. Change of normalized mean value of Young's modulus for < 111 >.

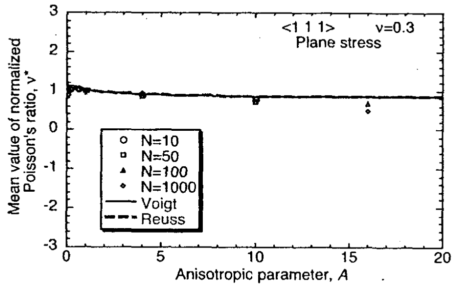

Fig. 7. Change of normalized mean value of Poisson's ratio for < 111 >.