

強ひずみ付与による結晶粒微細化に関する GN転位-結晶塑性シミュレーション

慶大[院] ○青柳吉輝 慶大[院] 大石真吾 慶大 志澤一之

GN Dislocation-Crystal Plasticity Simulation on Generation of Ultrafine Subdivisions induced by Severe Strain

Yoshiteru AOYAGI, Shingo OISHI and Kazuyuki SHIZAWA

1 緒 言

強ひずみ冷間圧延加工などにより創製される超微細粒(UFG)金属は、卓越した強度を有する構造材料として注目が集まっており、誘起されるUFGの結晶粒サイズは実験室レベルで1 μm 以下まで微細化可能となっている。このようなUFG創製メカニズムおよび結晶粒微細化による材料特性の変化を数値解析的アプローチによって解明しようとする例はほとんど見られない。上記のような解析を行うためには、大変形問題に対応したマルチスケールモデリングとシミュレーション手法の構築が必要である。

そこで本報では、単結晶の3段階硬化におけるステージIIIで顕著に現れる転位の動的回復の効果を転位密度の表式に導入し、GN結晶欠陥(GN転位密度およびGN不適合度)を用いて、全ての結晶欠陥を微分幾何学的に表現する。なお、転位の平均飛行距離モデルには転位密度依存形を採用する。また、結晶粒の微細化が材料特性に与える影響を調べるために、誘起された大角粒界により分割される新たな粒の形成を定量的に判断する方法を提案する。以上のモデルを用いて、強ひずみを付与したFCC多結晶に対してGN転位-結晶塑性FEM解析を行い、結晶欠陥および結晶方位の分布を可視化する。得られた結果に基づいて、粒内に誘起されるGN粒界の形成について考察し、UFG創製シミュレーションの準備段階として結晶粒の微細化を試みる。さらに、結晶粒微細化に伴うひずみ速度感度の変化が変形に及ぼす影響についても言及する。

2 GN結晶欠陥の定義

大変形問題に適用できるように、幾何学的非線形性を導入したGN転位密度テンソル α およびGN不適合度テンソル η はそれぞれ以下のように表される。

$$\alpha \equiv -\frac{1}{b} \text{curl} \gamma + \frac{2}{b} \text{grad} \gamma \times \gamma_s \quad (1)$$

$$\eta \equiv -l(\text{curl} \alpha^T)_s + 2l(\text{grad} \alpha^T \times \gamma_s)_s \quad (2)$$

ここで γ 、 b および l はそれぞれすべりテンソル、Burgersベクトルの大きさおよびBurgers回路の代表寸法である。また、GN不適合度テンソルのノルム $\rho_\eta^{(\alpha)}$ で表される転位対のうち、動的回復により対消滅を起こした転位の密度 $\rho_R^{(\alpha)}$ を次のように表す¹⁾。

$$\rho_R^{(\alpha)} = 2f y_c \rho_\eta^{(\alpha)^2} \quad (3)$$

ここで、 y_c は転位対の消滅距離(ダイポールが形成される最小のすべり面間距離)および f は対消滅の頻度を表す数値係数である。以上より動的回復を考慮した全転位密度は、転位密度の初期値 $\rho_0^{(\alpha)}$ 、GN転位密度のノルム $\rho_\eta^{(\alpha)}$ 、 $\rho_\eta^{(\alpha)}$ および $\rho_R^{(\alpha)}$ を用いて次式のように書ける。

$$\rho^{(\alpha)} = \rho_0^{(\alpha)} + \rho_\alpha^{(\alpha)} + \rho_\eta^{(\alpha)} - \rho_R^{(\alpha)} \quad (4)$$

3 転位-結晶塑性論

結晶塑性論における流れ応力 $g^{(\alpha)}$ の発展式は硬化係数 $h^{(\alpha\beta)}$ を用いて $\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_\beta h^{(\alpha\beta)}$ と表される。この発展式から流れ応力を求め次式のPan-Rice形硬化則に導入する。

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0^{(\alpha)} \left[\frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right] \left[\left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right| \right]^{m-1} \quad (5)$$

ここで $\dot{\gamma}_0^{(\alpha)}$ は参照すべり速度、 $\tau^{(\alpha)}$ は分解せん断応力、 m はひずみ速度感度指数を表している。転位蓄積の情報を考慮する場合、硬化係数 $h^{(\alpha\beta)}$ は、多重すべり系に拡張されたBailey-Hirschの式およびOrowanの式を用いることにより $h^{(\alpha\beta)} = ac\mu\Omega^{(\alpha\beta)}/2L^{(\beta)}\sqrt{\rho^{(\beta)}}$ として得られる。ここで、 a および c はそれぞれ0.1および1のオーダーの数値係数、 μ は横弾性係数、 $\Omega^{(\alpha\beta)}$ は転位相互作用行列および $L^{(\alpha)}$ は転位の平均飛行距離である。 $L^{(\alpha)}$ には、Ohashi²⁾によって提案された次の転位密度依存形モデルを用いる。

$$L^{(\alpha)} = \frac{c^*}{\sqrt{\sum_\beta \omega^{(\alpha\beta)} \rho^{(\beta)}}}, \quad \omega^{(\alpha\beta)} = \frac{|\Omega^{(\alpha\beta)} - \Omega^{(\alpha\alpha)}|^p}{\sum_\gamma |\Omega^{(1\gamma)} - \Omega^{(11)}|^p} \quad (6),(7)$$

ここで c^* は可動転位が不動化するまでに通過する林立転位の本数および p は数値パラメータである。

4 変形誘起結晶粒界

FEM解析における各要素の結晶方位の情報は転位-結晶塑性シミュレーションにより得られるが、計算された結晶方位分布はばらつきが大きいので、変形により誘起される新たな粒界を明確に定義することは困難である。そこで本報では、次に提案するような手法を用いて変形誘起結晶粒界を決定する。まずFig.1のように隣接要素間で方位差 5° 以上の小傾角粒界を求める。この小傾角粒界によって囲まれた領域はサブグレインを形成しており、

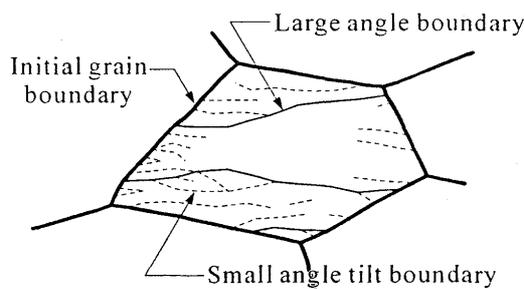


Fig. 1 Determination of separated grain

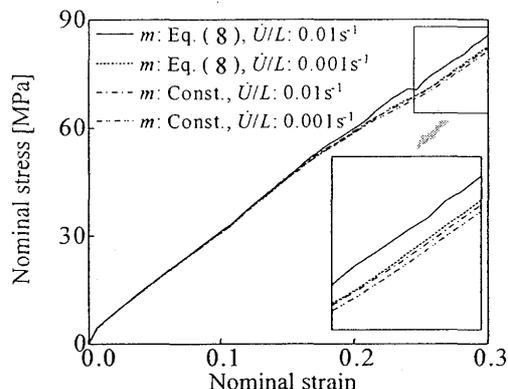


Fig. 2 Effect of strain rate sensitivity

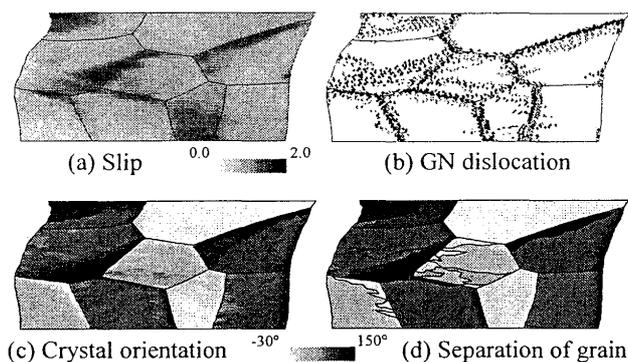
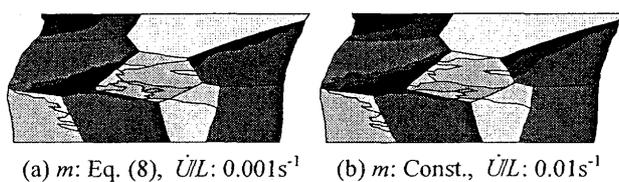
Fig. 3 Distributions of slip, rotation angle of crystal and GN dislocations ($U/L=30\%$)Fig. 4 Separation of grain ($U/L=30\%$)

Fig.1のように隣接サブグレイン間の方位差が 10° 以上の場合にこれらの粒界を大角粒界とみなす。一方、強ひずみ加工により超微細粒が形成されるとひずみ速度感度指数が上昇することが実験的に報告されている³⁾。そこで、粒径の減少の影響を m に反映させるために次のモデルを提案する。

$$m = \frac{1}{2} [m_0 + m^* + (m_0 - m^*) \tanh\{k(d - d^*)\}] \quad (8)$$

ここで、 m_0 は m の初期値、 m^* は微細粒形成後の m の値、 k および d^* は数値パラメータである。 d は粒径であり、本解析においては、大角粒界によって囲まれた領域面積の平方根で表す。

5 FEM解析結果および検討

解析対象は $50\mu\text{m} \times 50\mu\text{m}$ のアルミニウム多結晶平板とし、端面をせん断自由としたAsaroの平面2重すべりモデルを採用する。材料定数および数値パラメータは、 $a=0.2$, $c=1$, $f=4$, $c^*=30$, $p=1$, $\gamma_c=1\text{nm}$, $m_0=0.005$, $m^*=0.05$, $k=0.5\mu\text{m}^{-1}$ および $d^*=11\mu\text{m}$ とする。 $\rho_0^{(a)}$ には $1\mu\text{m}^{-2}$ を基準値とし、上限10%のゆらぎを与える。Fig.2は本解析で得られた荷重-圧縮率曲線である。式(8)を適用した解析の結果を見ると、端面変位速度が大きくなると公称応力が増加しており、微細粒の形成によるひずみ速度感度指数の上昇が再現されている。Fig.3は圧縮率30%におけるすべり、GN転位、結晶の回転角度の分布であり、Fig.3(b)において黒色および灰色の記号はそれぞれ転位密度が $300\mu\text{m}^{-2}$ 以上の正および負のGN転位の堆積を示している。結晶の回転角度は主すべり系のすべり方向と水平方向の成す角を表示している。Fig.3(a)を見るとすべりの値は局所的に2.0に達しており、Fig.3(b)からは初期結晶粒界に加えいくつかの粒内に同符号のGN転位が列を成して堆積しGN粒界を形成していることがわかる。一方、前述の手法を用いて計算された変形誘起結晶粒の分布を表すFig.3(d)を見ると、Fig.3(c)の結晶方位分布とよく一致した大角粒界の形成が確認でき、誘起された粒の形状は圧縮変形の影響により薄くなったものが多いことがわかる。また、大角粒界が形成される領域はGN粒界が形成される領域とほぼ一致しており、誘起されたGN粒界は大角粒界であることがわかる。以上のことから、GN粒界によって結晶粒が新たに2つ以上の粒に微細化されているとみなすことができる。さらに $m=0.005$ を一定とし、ひずみ速度感度指数の変化およびひずみ速度が結晶粒の微細化へ与える影響を調べたが、Fig.4のように結晶方位分布はいずれも酷似していた。この結果から、ひずみ速度感度指数の変化およびひずみ速度は、結晶粒微細化にはほとんど影響を及ぼさないといえる。

6 結 言

- (1) 結晶粒の微細化によるひずみ速度感度指数の上昇は、誘起された粒径の情報をひずみ感度指数に導入することにより表される。
- (2) 誘起されたGN粒界は大角粒界に相当し、GN粒界によって分解された粒は新たな粒を形成する。
- (3) ひずみ速度感度指数の変化およびひずみ速度は、微細粒の形成にほとんど影響を与えない。

謝 辞

本研究は、文部科学省平成16年度21世紀COEプログラム「知能化から生命科へのシステムデザイン」によるものであることを記し、謝意を表す。

参考文献

- 1) 青柳吉輝, 大石真吾, 志澤一之, 機械講論, No.04-40, 271(2004).
- 2) T. Ohashi, Philos. Mag. A, 70, 793(1994).
- 3) H.-W. Kim, S.-B. Kang, N. Tsuji and Y. Minamino, Acta Mater., 53, 1737(2005).