

426 BCC 金属のマルチスケールシミュレーションのための結晶塑性構成式

○ 藤野 佑一 (神戸大・院) 長谷部 忠司 (神戸大・工) 富田 佳宏 (神戸大・工)

1 緒言

金属材料の塑性変形を適切に評価するためには巨視的変形挙動だけではなく、微視的変形挙動まで考慮しなければならない。そこで金属材料の多結晶体の集団挙動効果、粒内の不均一性、転位下部組織のセル形成など、ミクロな各階層で生じる現象やその階層間の相互作用を考慮したマルチスケール結晶塑性理論に関する研究が近年数多く行われている⁽¹⁾。しかし、BCC 金属のマルチスケールモデリングに関する研究は数少なく、かつそれらのほとんどは単に FCC 金属の 12 すべり系からすべり系を 48 に増やしただけであり、パイエルスポテンシャルを乗り越える過程を始めとする転位の熱活性化過程や、その他の BCC 金属の特徴を正しく考慮した構成式が用いられている例はほとんど見られない。

そこで本研究では BCC 金属における転位運動の熱活性化過程を考慮した構成式を定式化し、転位間相互作用の詳細、および場の理論に基づくひずみ勾配項を構成式中に導入し、有限要素法に組み込んだ。そして同モデルを用いて、BCC 金属のひずみ速度・温度依存性や、ひずみ勾配項によって表現し得る転位下部組織のオーダーの不均質場について検討を加えた。

2 構成式

BCC 金属における転位の運動に対する障害物として、内在的な抵抗であるパイエルス応力と、外的な抵抗である、すべり面上に交差する林転位による抵抗、固溶強化、転位同士の相互作用や結晶粒界から受ける長範囲の応力場による抵抗などが挙げられる。これらの抵抗は熱的障害である有効応力と、非熱的障害である内部応力に分けることができる。本研究では有効応力に、すべり面上の運動転位が林転位を切りながら進むときの熱活性化過程とパイエルスポテンシャルを乗り越えながら進むときの熱活性化過程の両者を考える。そして、林転位を切る際に必要な応力は変形に伴って変化するため、前者を構成式として定式化する際の主な過程として考える。

抗応力 $K(\alpha)$ 、背応力 $\Omega(\alpha)$ を用い、転位運動の熱活性化過程を考慮することで、各すべり系 α の微視的構成式の一般形を次式で与える⁽²⁾⁻⁽⁴⁾。

$$\dot{\gamma}(\alpha) = f \left(\frac{\tau(\alpha)}{K(\alpha)} \right)$$

$$\tau(\alpha) = \langle \tau(\alpha) - \tau^*(\alpha) \rangle - \Omega(\alpha)$$

ここで $\tau^*(\alpha)$ は、転位がパイエルスポテンシャルを乗り越える過程での有効応力を表し、次式で表す⁽⁵⁾⁽⁶⁾。

$$\tau^*(\alpha) = \tau_m^* \left[1 - \left\{ \frac{kT}{\Delta G} \ln \left(\frac{\dot{a}}{\dot{\gamma}(\alpha)} \right) \right\}^{1/q} \right]^{1/p}$$

τ_m^* は絶対零度での臨界分解せん断応力、 k はボルツマン定数、 T は温度、 ΔG は活性化エネルギー、 \dot{a} は基準となるひずみ速度を表す。

また本研究では硬化比にひずみ勾配項 $F(\alpha^{(\alpha)})$ 、 $F(\eta^{(\alpha)})$ を導入し、ひずみ勾配に基づく非局所作用を表現する。ひずみ勾配項 $F(\alpha^{(\alpha)})$ および $F(\eta^{(\alpha)})$ の具体形は \bar{k} , p_α , p_η を材料定数、 b をバーガースベクトルとし、次式で定義する⁽⁷⁾。

$$F(\alpha^{(\alpha)}) = \frac{\bar{k}}{p_\alpha} \left(\frac{|\alpha^{(\alpha)}|}{b} \right)^{1/2}$$

$$F(\eta^{(\alpha)}) = \text{sgn}(\eta^{(\alpha)}) \cdot \frac{\bar{k}}{p_\eta} \left(\frac{l_{\text{defect}}}{b} |\eta^{(\alpha)}| \right)^{1/2}$$

ここで

$$\alpha^{(\alpha)} = (P^{(\alpha)} + W^{(\alpha)}) : \alpha$$

$$\eta^{(\alpha)} = P^{(\alpha)} : \eta$$

上式中、 α はディストーションテンソル β の一次勾配で表される転位密度テンソル、 η は塑性ひずみテンソルの二次勾配で表される不適合度テンソルであり、次式で表される。

$$\alpha = -\nabla \times \beta^p$$

$$\eta = \nabla \times \nabla \times \epsilon^p$$

3 解析モデル

解析モデルを Fig.1 に示す。ランダムな結晶方位を有する、 $\{110\}$ 面と $\{112\}$ 面上の 24 すべり系 BCC 金属多結晶体の平面応力モデルを考える。材料は Fe を想定した。各粒側面は自由境界とし、上下面に変位制御で 30% まで引張変位を与えた。結晶粒数を 23 とし、粒形状は六角形とした。なお、これらのモデルは Crossed-Triangles 要素単位で分割し、1 つの結晶粒内に含まれる三角形要素数は 576 で統一した。

同モデルで、まずは負荷方向のひずみ速度を 10^{-3} [1/s] で一定にし、温度を 300~700[K] と段階的に変化させ解析を行った。ついで、温度を 300[K] で一定とし、ひずみ速度を $10^{-3} \sim 10^3$ [1/s] の異なるひずみ速度下で解析を行った。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。

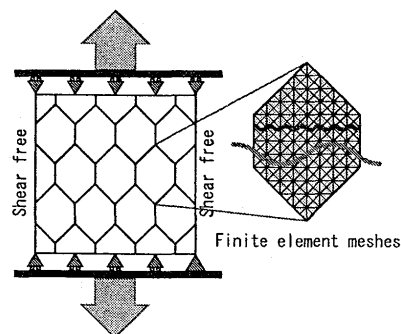


Fig. 1 Computational model

4 シミュレーション結果と考察

4.1 応力応答の温度・ひずみ速度依存性

Fig.2に温度およびひずみ速度をそれぞれ変化した時の、公称応力-公称ひずみ線図を示す。温度の低下、ひずみ速度の増加に伴い応力が大きくなっている。またこの場合、加工効率率の上昇だけでなく、降伏応力自身の上昇も見られることから、BCC金属の温度・ひずみ速度依存性の特徴が適切に表現されていることがわかる。

また、Fig.3にひずみ速度を変化させた時の、パイエルス応力と、転位過程に関係する有効応力の変化を示す。パイエルス応力はひずみ速度変化に伴い大きく変化している。そして、公称ひずみ10%以下の範囲で、衝撃負荷時よりも静的負荷を加えた場合の方が、転位過程に関係する有効応力が大きくなっていることが見てとれる。これは、BCC金属の特徴である、負のひずみ速度履歴効果に対応していると考えられる。

次に温度およびひずみ速度を変化させた時の、中央結晶粒における、平均セルサイズの変化をFig.4に示す。セルサイズに関する詳細は講演会にて報告するが、硬化比の二次不変量に基づく平均値の関数としている。セルサイズにおいても、温度変化、ひずみ速度変化に伴い変化していることがわかる。先ほどの負のひずみ速度履歴効果を反映させることで、BCC金属のセルサイズにおける温度およびひずみ速度依存性が適切に表現できる。

4.2 ひずみ勾配の物理的描像

Fig.5(a)に公称ひずみ30%での α 項の分布の様子を示す。同図より、 α 項は結晶粒界近傍で大きな値を示していることがわかる。 α 項は、本研究において、転位密度と関係を有していると仮定しており、この場合、「幾何学的に必要な転位」(geometrically necessary dislocations: GNDs)の存在に対応している。

また、Fig.5(b)に η 項の分布の様子を示す。 η 項では粒内に正の値と負の値が交互に現れる、縞状の特徴的な分布が見られる。そして、初期結晶方位の同じ粒においてこの縞模様が観察されることから、結晶学的な現象ととらえることができる。さらにこの縞は引張方向に対してほぼ45度の、この方向に主すべり系がある粒に平行に現れている。これにより、各すべり系のすべり面、すべり方向と関連していることが予想される。

ここで、圧延などの強加工で多重すべりを生じた場合や、一軸の引張りでも二重すべりを生じた場合、すべり面にほぼ平行に転位密度の高い板状の領域ができ、マイクロバンドと呼ばれている⁽⁸⁾。 η 項は塑性ひずみの2次勾配である不適合度テンソルに基づいており、これはダイポールや原子空孔や多極子などを含む欠陥に加え、結晶粒内でのセルサイズの変動の様子を意味することから、転位の配行状態を表していると考えることができる。すなわち、 η 項の縞状分布における値の大きい部分は欠陥密度の高いバンド領域と解釈することができる。従って、 η 項により、マイクロバンドオーダーの転位下部組織の存在を表現できるのではないかとということが示唆された。

5 参考文献

- 1) T.Hasebe, Trans.MRSJ, **29**-8, (2004), 3619-3624.
- 2) 長谷部忠司, 今井田豊, 芝原顕, 材料, **46**, (1997), 475.

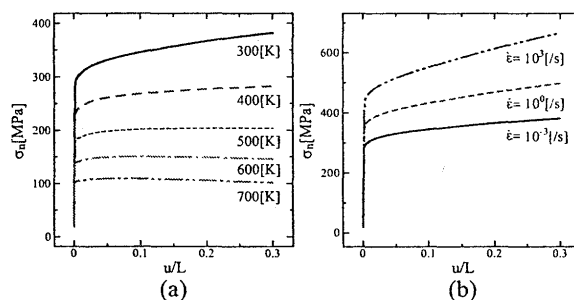


Fig. 2 Variation of stress-strain curves with (a) temperature and (b) strain rate

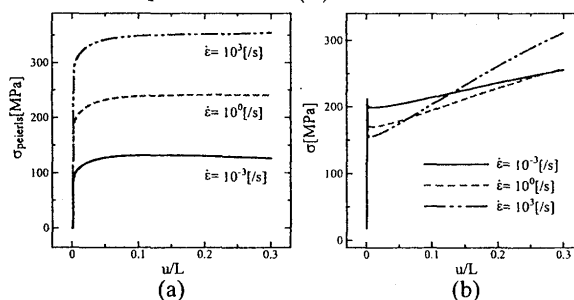


Fig. 3 Variation of effective stress with strain due to (a) Peierls potential and (b) dislocation processes

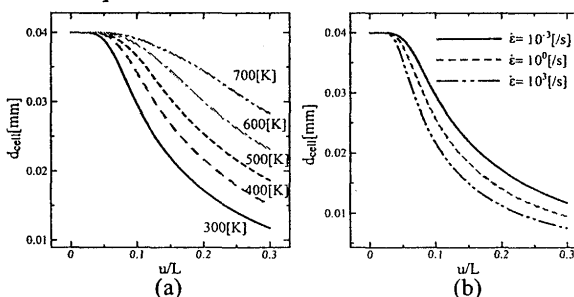


Fig. 4 Variation of cell size evolution with (a) temperature and (b) strain rate in central grain

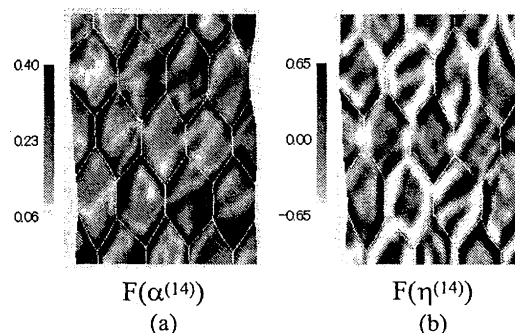


Fig. 5 Contour diagrams for (a) $F(\alpha)$ and (b) $F(\eta)$

- 3) T.Hasebe, Transaction of the 14th International Conference on Structural Mechanics Reactor Technology, (1997), 13-20.
- 4) T.Hasebe, et al., Proc.AEPA'96, Pergamon, (1996), 715.
- 5) 加藤雅治, 入門転位論, (2002), 裳華房.
- 6) 自動車用材料の高速変形に関する研究会成果報告書, (2001), 日本鉄鋼協会.
- 7) 長谷部忠司, 材料, **48**-8, (1999), 963-970.
- 8) 木村宏, 材料強度の考え方, (1999), アグネ技術センター.