

624 GN 転位の自己ひずみエネルギーに基づくひずみこう配理論

名古屋大学 ○大野信忠

名古屋大学 奥村 大

Strain Gradient Theory Based on Elastic Strain Energy of GN Dislocations

Nobutada OHNO and Dai OKUMURA

1. 緒言

多結晶金属の降伏応力は結晶粒径に依存し、結晶粒径がミクロンスケールの領域にあれば、Hall-Petch の関係が成り立つと言われている。しかし、ひずみが小さい段階では、ミクロンスケールの領域でも Hall-Petch プロットが二直線となり、Hall-Petch の関係が満足されないような実験結果が報告されている^{1),2)}。また、二次すべり系の活動が生じるステージ II では、塑性流動応力は転位セル径に逆比例する傾向にあり、したがって塑性流動応力と転位セル径の間には Hall-Petch の関係は成立しないことが多くの研究者によって指摘されている³⁾。

上述のような寸法依存性を表現し得る連続体理論として、ひずみこう配理論がいくつか提案されている。このような理論の中で、単結晶金属のすべりこう配に対して共役力を導入した Gurtin の理論⁴⁾は、結晶粒界や転位セル壁ですべりの境界条件を指定することができる。したがってこの理論は、結晶粒界や転位セル壁への転位の堆積を境界条件として陽に表現できるから、降伏応力の粒径依存性や塑性流動応力のセル径依存性の解析に適した理論であると考えられる。そこで著者ら⁵⁾は、Gurtin の理論を用いて多結晶金属の降伏挙動を解析したが、初期降伏応力に関してはまったく粒径依存性が得られなかった。

転位が粒内あるいはセル内で生成され、粒界やセル壁に堆積すると、いわゆる GN 転位密度⁶⁾が増し、これに伴って弾性ひずみエネルギーが増加する。転位の弾性ひずみエネルギーは、材料科学の教科書において必ず説明される基本的事項であり、これによって、ピン止めされた転位の湾曲半径と負荷せん断応力の関係や Frank-Read 源からの転位増殖に必要な応力が導かれる。したがって、GN 転位による弾性ひずみエネルギー変化をひずみこう配理論において考慮することは物理的に有意義であると思われるが、このような理論はまだ発表されていない。

そこで本研究では、最初に、GN 転位の弾性ひずみエネルギーを考慮した仮想仕事式を考えてひずみこう配共役力を導入し、その釣合い方程式を Gurtin の理論⁴⁾に基づいて導く。次に、本理論を 2 次元および 3 次元結晶粒に適用し、降伏応力の粒径依存性を解析的に評価する。つづいて、この解析結果を用いて多結晶金属の低ひずみでの降伏応力を検討し、実験結果と比較する。さらに、ステージ II における塑性流動応力のセル径依存性に関しても、実験結果が本理論によってかなり説明されることを示す。

2. 理論

すべり系 β を有する単結晶金属 (領域 V , 境界 ∂V) を考え、このすべり系でのすべりを $\gamma^{(\beta)}$ とする。直交座標 x_i

を用い、すべり系 β のすべり面とすべり方向を単位ベクトル $m_i^{(\beta)}$, $s_i^{(\beta)}$ によって表す。なお今後、 x_i による微分を $(\cdot)_i$ と示すことにする。

1 本の転位は単位長さあたり $\alpha\mu b^2$ の弾性ひずみエネルギーを有すると考えてよい。ここで、 α は 0.5 ~ 1 の定数、 μ は剛性率、 b は Burgers ベクトルの大きさを示す。したがって、すべり系 β の GN 転位による弾性ひずみエネルギー密度は、次式のように表される。

$$\psi^{(\beta)} = \alpha\mu b^2 \rho_G^{(\beta)} \quad (1)$$

ここで、 $\rho_G^{(\beta)}$ はすべり系 β の GN 転位密度であり、このすべり系の GN 転位密度テンソルを $\alpha_{ij}^{(\beta)}$ と表せば、 $\rho_G^{(\beta)}$ は

$$\rho_G^{(\beta)} = b^{-1} (\alpha_{ij}^{(\beta)} \alpha_{ij}^{(\beta)})^{1/2} \quad (2)$$

と書ける。上式は、すべりこう配 $\gamma_{,i}^{(\beta)}$ のすべり面内成分を $\tilde{\gamma}_{,i}^{(\beta)}$ とすれば、

$$\rho_G^{(\beta)} = b^{-1} (\tilde{\gamma}_{,i}^{(\beta)} \tilde{\gamma}_{,i}^{(\beta)})^{1/2} \quad (3)$$

と書き直される。ここで、 $\tilde{\gamma}_{,i}^{(\beta)} = \gamma_{,i}^{(\beta)} - (\gamma_{,j}^{(\beta)} m_j^{(\beta)}) m_i^{(\beta)}$ である。

さて、すべり系 β に作用する分解せん断応力 $\tau^{(\beta)}$ がなす塑性仕事は、このすべり系のすべり抵抗応力 $k^{(\beta)}$ がなす散逸仕事と GN 転位の生成に伴う弾性ひずみエネルギー変化に費やされると考え、次の仮想仕事式が任意のすべり変分 $\delta\gamma^{(\beta)}$ に対して成り立つと仮定する。

$$\int_V \tau^{(\beta)} \delta\gamma^{(\beta)} dV = \int_V k^{(\beta)} \delta\gamma^{(\beta)} dV + \int_V \delta\psi^{(\beta)} dV \quad (4)$$

上式の $\delta\psi^{(\beta)}$ は、式(1)~(3)により、

$$\delta\psi^{(\beta)} = \xi_i^{(\beta)} \delta\gamma_{,i}^{(\beta)} \quad (5)$$

と表される。ここで、

$$\xi_i^{(\beta)} = \alpha\mu b v_i^{(\beta)}, \quad v_i^{(\beta)} = \tilde{\gamma}_{,i}^{(\beta)} / (\tilde{\gamma}_{,j}^{(\beta)} \tilde{\gamma}_{,j}^{(\beta)})^{1/2} \quad (6)$$

である。式(5)と(6)を見ると、 $\xi_i^{(\beta)}$ はすべりこう配 $\gamma_{,i}^{(\beta)}$ の共役力として解釈でき、また $v_i^{(\beta)}$ は $\tilde{\gamma}_{,i}^{(\beta)}$ の方向を示す単位ベクトルであることがわかる。

GN 転位の弾性ひずみエネルギーに基づいて式(4)~(6)を示したことは本研究による貢献であるが、これらの式は Gurtin の理論⁴⁾の枠内にある。したがって彼の理論と同様に、式(4)に式(5)を代入し、部分積分を行った後、発散定理を用いると、次の微分方程式と境界条件式が導かれる。

$$\tau^{(\beta)} - k^{(\beta)} + \xi_{i,i}^{(\beta)} = 0 \quad \text{in } V \quad (7)$$

$$\delta\gamma^{(\beta)} = 0 \quad \text{or} \quad \xi_i^{(\beta)} n_i = 0 \quad \text{on } \partial V \quad (8)$$

ここで n_i は、 ∂V の外向き法線を示す単位ベクトルである。

3. 降伏応力の評価

まず簡単のため、Fig.1 に示すような粒径 D の 2 次元円形結晶粒を考え、この結晶粒にせん断応力 σ_x が作用するとする。すべりは一つのすべり系 β で生じ、そのすべり方向とすべり面の方向はそれぞれ x 軸方向、 z 軸方向を向いているとする。また、すべり抵抗応力 $k^{(\beta)}$ は一定値 k_0 であるとする。このようなすべりが粒内で生じると、GN 転

位が粒界に堆積するから、粒界から粒中心に向いたすべりこう配が粒界近傍に生じる。この結果、式(6)により、次式のように表される共役力 $\xi^{(\beta)}$ が粒界近傍に発生する。

$$\xi_r^{(\beta)} = -\alpha\mu b \quad (9)$$

ここで r は、粒中心からの半径方向座標を示す。このとき、式(7)と発散定理を用いると、 $\tau^{(\beta)}$ の粒内平均 $\langle\tau^{(\beta)}\rangle$ が

$$\langle\tau^{(\beta)}\rangle = k_0 + 4\alpha\mu b/D \quad (10)$$

と求められる。上式の右辺第二項が粒径依存性を表す。

次に、粒径 D の球状結晶粒を考え (Fig.2), この結晶粒にせん断応力 σ_x が作用するとする。この場合も、すべりはすべり系 β でのみ生じ、そのすべり方向とすべり面の方向はそれぞれ x 軸方向、 z 軸方向を向いているとする。このとき GN 転位は、Fig.2 に示すように、 z 軸に垂直な断面上で粒界に堆積する。したがって、 z 軸に垂直な断面上での粒界中心 O' からの半径方向座標を r とすれば、粒界近傍では、式(9)のような共役力 $\xi^{(\beta)}$ が生じる。この結果 $\tau^{(\beta)}$ の粒内平均 $\langle\tau^{(\beta)}\rangle$ は、式(7)と発散定理を用いて、

$$\langle\tau^{(\beta)}\rangle = k_0 + 3\pi\alpha\mu b/2D \quad (11)$$

と求められる。上式は、結晶粒をケルビン 14 面体とみなせば、次式となる (詳細省略)。

$$\langle\tau^{(\beta)}\rangle = k_0 + 5.0\alpha\mu b/D \quad (12)$$

式(12)はすべり抵抗の粒径依存性を表す式として解釈できる。したがってこの式を用い、さらに Taylor 因子を M とすれば、平均粒径 D の多結晶金属の引張降伏応力 σ_y は、次式のように見積もられる。

$$\sigma_y = \sigma_0 + 5.0M\alpha\mu b/D \quad (13)$$

ここで $\sigma_0 = Mk_0$ である。

4. 実験結果との比較

式(13)による降伏応力の粒径依存性をミクロンスケールの領域での実験データに基づいて検討したところ、Fig.3 に示す結果が得られた。その際、式(13)では GN 転位間相互作用を考慮していないため、できるだけ低ひずみでの降伏応力 (0.2%耐力 $\sigma_{0.2}$, 0.5%耐力 $\sigma_{0.5}$) を検討対象とした。図中の実線が式(13)による予測結果であり、この式の μ と b には文献値⁷⁾を用い、また $M = 3.0$, $\alpha = 1$ とした。Fig.3 を見ると、式(13)は 316SS や IF steel の実験データをかなりの精度で表すが、他の実験データも含めると式(13)は $\sigma_{0.2}$, $\sigma_{0.5}$ のほぼ下限を予測することがわかる。このことは、式(4)において GN 転位の自己ひずみエネルギーのみを考えたことに符号する。

緒言で述べたように、ステージ II での塑性流動応力は転位セル径に逆比例する傾向にある。このような実験データの例³⁾に式(13)を適用した。その適用に際して、転位セルは結晶粒に対応すると考えられるから平均セル径を D とし、また $\sigma_0 = 0$ とした。この結果、Fig.4 に示すようにかなりよい一致が得られた。このことは、ステージ II での塑性仕事は転位セル内での GN 転位の生成にほぼ費やされることを示唆する。

参考文献 (省略)

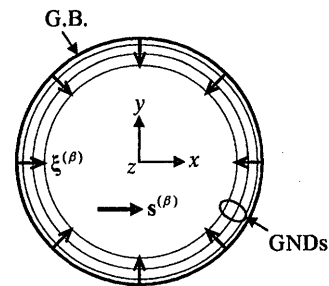


Fig. 1 Circular grain

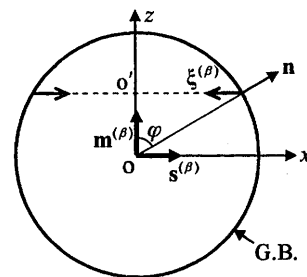


Fig. 2 Spherical grain

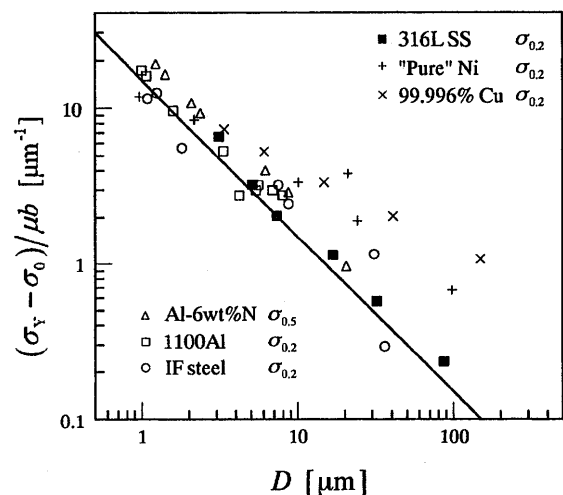


Fig. 3 Dependence of yield stress on average grain diameter

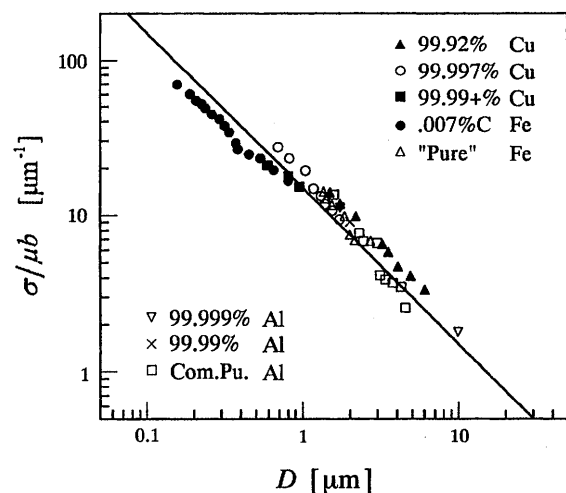


Fig. 4 Dependence of flow stress on average dislocation cell diameter