227

繰返し変形による不均質場の発展に関する マルチスケール結晶塑性シミュレーション

神戸大学　○長谷部忠司　　慶應義塾大学　青柳吉輝

Multiscale Crystal Plasticity Simulation on Inhomogeneity Evolution under Cyclic Loading

Tadashi HASEBE and Yoshiteru AOYAGI

1　緒　　言

微分幾何学的場の理論に基づく不適合テンソルを援用することで，転位下部組織をはじめ変形中に自己発展する種々のスケールでの不均質場の発展を簡便に表現することができる．前報[1)]では，不適合度テンソルの回転成分である転傾密度テンソルおよび並進成分であるContortionテンソルに基づくひずみこう配項を結晶塑性タイプの構成モデルに導入したマルチスケール結晶塑性モデルに対して接線係数法を適用し，マルチスケール3次元結晶塑性シミュレーションを行った．

本研究では，同モデルを用いた3次元FEシミュレーションを行い，負荷過程および除荷過程において材料内に形成される不均質場(転位下部組織に相当)の発展およびその不可逆性に及ぼす影響ついて考察する．とくに，塑性変形の履歴を表すセルサイズおよび背応力分布に着目し，それらが負荷方向反転時にマクロに現れる軟化挙動(Bauschinger効果など)に及ぼす影響について考察を加える．

2　不適合度テンソルの新しい物理描象

転位密度テンソル$\boldsymbol{\alpha}$は塑性変位こう配$\boldsymbol{\beta}^p$を用いて，

$$\boldsymbol{\alpha} = -(\mathrm{curl}\boldsymbol{\beta}^{pT})^T \tag{1}$$

と書ける．式(1)において，塑性変位こう配をひずみ成分および回転成分に分解し，前報[1)]と同様にNye[2)]によるContortionテンソル$\boldsymbol{K}$および転傾(回位)密度テンソル$\boldsymbol{\Theta}$[3)4)]を導入すれば，不適合度テンソル$\boldsymbol{\eta}$は次式のように書ける．

$$\boldsymbol{\eta} = \mathrm{curl}(\mathrm{curl}\boldsymbol{\varepsilon}^p)^T = -\boldsymbol{\Theta} + \mathrm{curl}\boldsymbol{K}^T \tag{2}$$

3　構成式

本報で用いる諸構成式[5)]は，抵抗力$K^{(\alpha)}$および背応力$\Omega^{(\alpha)}$を用いて次式で与えられる．

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{A}_{SR}\mathrm{sgn}(\tau'^{(\alpha)})\exp\left\{-B_{SR}\left(1-\left|\frac{\tau'^{(\alpha)}}{K^{(\alpha)}}\right|^{p}\right)^{q}\right\} \tag{3}$$

$$\tau'^{(\alpha)} = \left\langle\left|\tau^{(\alpha)}\right| - \tau^{*(\alpha)}\right\rangle - \Omega^{(\alpha)} \tag{4}$$

$$\tau^{*(\alpha)} = \tau_m^*\left[1-\left\{\frac{kT}{\Delta G}\ln\left(\frac{\dot{a}}{\dot{\gamma}^{(\alpha)}}\right)\right\}^{1/q'}\right]^{1/p'} \tag{5}$$

ここで，τ_m^*は絶対零度における臨界分解せん断応力，kはBoltzmann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および$\dot{A}_{SR}$およびB_{SR}は材料定数である．抵抗力$K^{(\alpha)}$および背応力$\Omega^{(\alpha)}$の発展式はそれぞれ次式のように書ける．

$$\dot{K}^{(\alpha)} = Q_{\alpha\beta}\left|\dot{\gamma}^{(\beta)}\right| \tag{6}$$

$$\dot{\Omega}^{(\alpha)} = A\left(\left\langle\frac{d_{cell}}{2} + \bar{x}_N^{(\alpha)}\right\rangle + a^* d_{cell}\right)^{-2}\dot{\bar{x}}_N^{(\alpha)} \tag{7}$$

$$\Omega^{(\alpha)} = \mathrm{sgn}(\dot{\tau}^{(\alpha)})\int\dot{\Omega}^{(\alpha)E}\left\langle 1-\frac{K^{(\alpha)}}{K_{sat}}\right\rangle dt \tag{8}$$

ここで，$Q_{\alpha\beta}$は硬化比，$H(\gamma)$は硬化係数，d_{cell}は有効セルサイズ，$\bar{x}_N^{(\alpha)}$は転位の平均移動距離，Aおよびa^*は材料定数およびK_{sat}は硬化が十分に飽和した状態での抗応力である．$Q_{\alpha\beta}$には次式のようにひずみこう配項$F(\alpha^{(\alpha)})$および$F(\eta^{(\alpha)})$を導入し，ひずみこう配に基づく非局所作用を表現する．

$$Q_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} + f_{\alpha\kappa}S_{\kappa\beta} + \delta_{\alpha\beta}\left\{F(\alpha^{(\alpha)}) + F(\eta^{(\alpha)})\right\} \tag{9}$$

ただしβについては和をとらない．式(9)において，$f_{\alpha\kappa}$は転位相互作用行列および$S_{\kappa\beta}$はひずみ履歴を表す行列である．ひずみこう配項はBurgersベクトルb，材料定数$\bar{k}$，p_αおよびp_ηを用いて

$$F(\alpha^{(\alpha)}) = \frac{\bar{k}}{p_\alpha}\sqrt{\frac{\left|\alpha^{(\alpha)}\right|}{b}} \tag{10}$$

$$F(\eta^{(\alpha)}) = \mathrm{sgn}(\eta^{(\alpha)})\frac{\bar{k}}{p_\eta}\sqrt{\frac{l_{defect}}{b}\left|\eta^{(\alpha)}\right|} \tag{11}$$

と定義する．ここで，$\alpha^{(\alpha)}$および$\eta^{(\alpha)}$はそれぞれ$\boldsymbol{\alpha}$および$\boldsymbol{\eta}$のαすべり系への写像として次式のように表す．

$$\alpha^{(\alpha)} = (\boldsymbol{s}^{(\alpha)}\otimes\boldsymbol{m}^{(\alpha)})\cdot\boldsymbol{\alpha} \tag{12}$$

$$\eta^{(\alpha)} = (\boldsymbol{s}^{(\alpha)}\otimes\boldsymbol{t}^{(\alpha)})\cdot\boldsymbol{\eta} \tag{13}$$

ここで，$\boldsymbol{s}^{(\alpha)}$はすべり方向，$\boldsymbol{m}^{(\alpha)}$はすべり面の法線方向および$\boldsymbol{t}^{(\alpha)} = \boldsymbol{s}^{(\alpha)}\times\boldsymbol{m}^{(\alpha)}$である．

4　数値解析

解析モデルはFig.1のような単純せん断を受けるBCC金属単結晶平板とする．本解析では{110}面および{112}面上の24すべり系のみを考え，試験片寸法は幅10μm，高さ10μm，厚さ0.5μmとする．

Fig.2は，せん断ひずみγが5%に達した後，$\gamma = 2.5\%$に

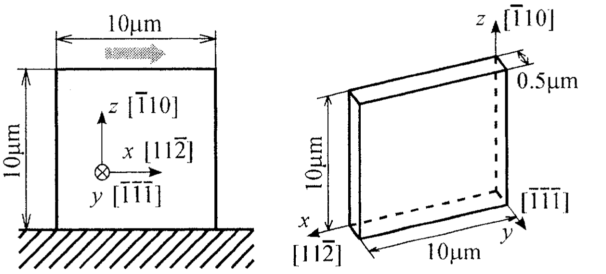


Fig.1 Computational model

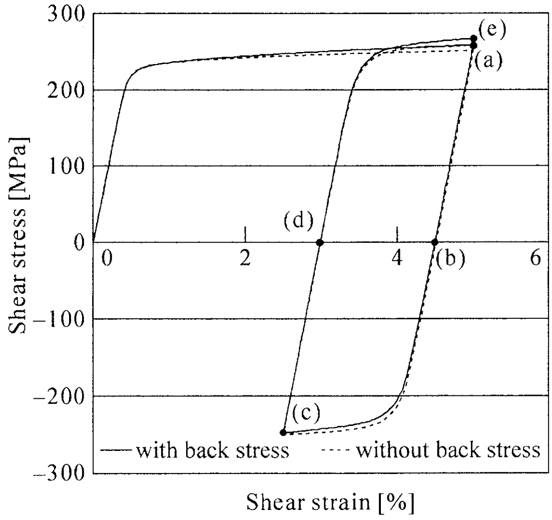
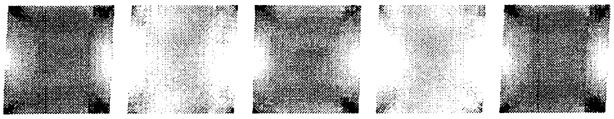
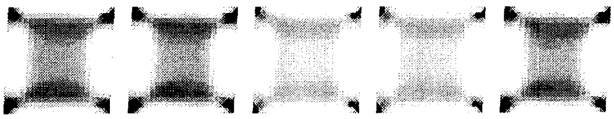


Fig.2 Shear stress versus shear strain curves



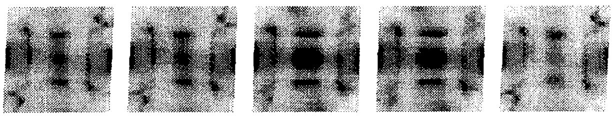
(a) 5%　(b) 4.25%　(c) 2.5%　(d) 3.25　(e) 5%

Fig.3 Distributions of equivalent stress (0MPa　1000MPa)



(a) 5%　(b) 4.25%　(c) 2.5%　(d) 3.25　(e) 5%

Fig.4 Distributions of total slip (0.0　0.1)

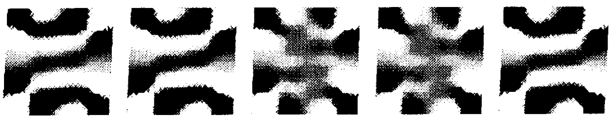


(a) 5%　(b) 4.25%　(c) 2.5%　(d) 3.25　(e) 5%

Fig.5 Distributions of cell size (0μm　10μm)

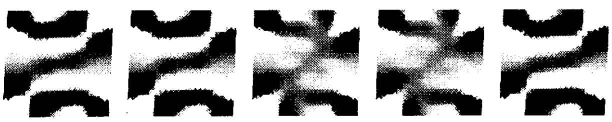
(a) 5%　(b) 4.25%　(c) 2.5%　(d) 3.25　(e) 5%

Fig.6 Distributions of back stress (0MPa　30MPa)



(a) 5%　(b) 4.25%　(c) 2.5%　(d) 3.25　(e) 5%

Fig.7 Distributions of eta term (−1　+1)



(a) 5%　(b) 4.25%　(c) 2.5%　(d) 3.25　(e) 5%

Fig.8 Distributions of eta term without back stress (−1　+1)

なるまで逆変位を与え，再び$\gamma=5\%$になるまで強制変位を与えた場合のせん断応力−せん断ひずみ曲線を表している．同図を見ると，逆変位後の降伏応力が低下し，Bauschinger効果が現れているのが確認できる．一方，式(7)におけるAを零として背応力の影響を除いた場合の曲線(破線)を見ると，逆変位後の降伏応力がほとんど低下していないのがわかる．

Fig.3〜Fig.7は，Fig.2 (a)〜(e)の各点に対応する各物理量の分布図である．相当応力分布(Fig.3)から，除荷過程における応力の減少および再負荷による応力の増加が確認できる．一方，Fig.4の全すべりの分布を見ると，逆方向変位によってすべり量が減少し，再負荷後に増加しているが，除荷過程((a)→(b))においてはすべりの値はほとんど変化していないのがわかる．有効セルサイズの分布(Fig.5)および主すべり系の背応力の分布(Fig.6)を見ると，有効セルサイズの増加に伴って背応力の値が減少しているのがわかる．これは，一度形成された転位下部構造が逆負荷によって解消され，その結果変形抵抗が減少するためと考えられる．また，式(11)によって表される主すべり系の$\eta^{(\alpha)}$項の分布から，除荷過程において一度形成されたバンド状の変調構造が，試験片の中央部でセル状の分布へと遷移しているのが確認できる．なお，今回のシミュレーションではFig.3〜Fig.7の(a)の分布と繰返し変形後の(e)の分布は酷似したものとなっているが，ひずみ量を増加させる，あるいは繰返し変形の数を増加させることによって，変形によって生じた転位下部構造の影響を受けて分布の傾向に違いが生じることが予想される．

Fig.8は式(7)において$A=0$として背応力の影響を除いて解析を行った場合の$\eta^{(\alpha)}$項の分布である．背応力の有無による影響は主として(c)(d)において現れている．背応力を考慮しない場合，Fig.8(c)(d)のように，試験片中央において一度形成されたバンド状の変調構造が除荷過程において完全には崩壊せずに残存している．これに対し，背応力を考慮した場合(Fig.7(c)(d))ではバンド構造が一旦上下に分断されている．このことは不適合度テンソルによって増幅されたゆらぎが一旦消失することを意味し，背応力の変化に伴う下部組織の不可逆的変化を表していると解釈することができる．多結晶体ではこうした効果がより顕著になると考えられる．

5　結　言

不適合度テンソルに基づくひずみこう配項を導入した結晶塑性論に基づく繰返し負荷シミュレーションにおいて，背応力モデルの有無による下部組織(不均質場)の発展に現れる不可逆性について考察を加えた．

参考文献

1) 長谷部忠司・青柳吉輝，第56回理論応用力学講演会講演論文集，477(2007).
2) J.F.Nye, Acta Metall., **1**, 153(1953).
3) H.Kleinert, Gauge Fields in Condensed Matter, Vol. II 777(1989), World Scientific.
4) S.Minagawa, and H.Ogata, Micromechanics and Inhomogeneity, 257(1990) Springer-Verlag.
5) T.Hasebe, CMES, **11**-3, 145(2006).