The Society of Materials Science, Japan

641

単相フェライト結晶の疲労挙動に関する GN 転位 - 結晶塑性シミュレーション

慶應大学[院]　○横山晃彦
住友金属　中川英介　斉藤岳行　早川守　岡村一男　慶應大学　志澤一之

GN Dislocation-Crystal Plasticity Simulation for Fatigue Behavior of Single Phase Ferrite Crystal

Akihiko YOKOYAMA, Eisuke NAKAGAWA, Takeyuki SAITO, Mamoru HAYAKAWA, Kazuo OKAMURA and Kazuyuki SHIZAWA

1 緒　言

構造材料として広く使用されているフェライトなどの BCC 結晶における疲労破壊挙動には不明な点が多く，その解明に期待が寄せられている．しかしながら，BCC 結晶には活動すべり系が多く，異方性も強いため，結晶塑性論的モデル化が非常に煩雑となり，その疲労挙動を計算力学的に検討した例はほとんどない．そこで本研究では，著者らが提案した GN 転位 - 結晶塑性モデルを繰返し負荷過程におけるフェライト単結晶および双結晶平板に適用して FEM 解析を実施する．得られた数値解析結果を実験結果と比較し，本解析の妥当性について検討するとともに，転位密度分布および相当塑性ひずみ分布などに基づいて，き裂発生箇所の予測を試みる．

2 転位密度の定義

Burgers 回路内の孤立転位密度を表す GN 転位密度テンソル $\boldsymbol{\alpha}^{(\alpha)}$ および転位対密度を表す GN 不適合度テンソル $\boldsymbol{\eta}^{(\alpha)}$ (幾何学量)は

$$\boldsymbol{\alpha}^{(\alpha)} = \frac{1}{\tilde{b}} \boldsymbol{P}^{(\alpha)} \times \nabla \gamma^{(\alpha)}, \quad \boldsymbol{\eta}^{(\alpha)} = \frac{l^{(\alpha)}}{\tilde{b}} \boldsymbol{P}_S^{(\alpha)} \overset{\times}{\times} (\nabla \gamma^{(\alpha)} \otimes \nabla) \quad \text{..(1)(2)}$$

のように表される [1]．ここで，$(\ )^{(\alpha)}$ はすべり系 α に関する量，$\tilde{b}$ は Burgers ベクトルの大きさ，$\boldsymbol{P}^{(\alpha)}$ は $\boldsymbol{P}^{(\alpha)} \equiv \boldsymbol{s}^{(\alpha)} \otimes \boldsymbol{m}^{(\alpha)}$ であり，$\gamma^{(\alpha)}$ はすべり，$\boldsymbol{s}^{(\alpha)}$ および $\boldsymbol{m}^{(\alpha)}$ は，それぞれすべり方向およびすべり面の法線方向の結晶基底ベクトル，$l^{(\alpha)}$ は最隣接転位間距離である．また，$\boldsymbol{P}_S^{(\alpha)}$ は $\boldsymbol{P}^{(\alpha)}$ の対称部分(Schmid テンソル)である．一方，動的回復により対消滅を起こした転位対密度 $\rho_R^{(\alpha)}$ は $\boldsymbol{\eta}^{(\alpha)}$ の大きさ $\rho_\eta^{(\alpha)}$ を用いて次式にて表せる．

$$\rho_R^{(\alpha)} = 4 f y_c^2 \rho_\eta^{(\alpha)2} \quad (\rho_R^{(\alpha)} \le \rho_\eta^{(\alpha)}) \quad \text{......(3)}$$

ここで，f は対消滅の頻度を表す数値係数および y_c は転位対の消滅距離である．以上より動的回復を考慮した全転位密度 $\rho^{(\alpha)}$ は初期転位密度 $\rho_0{}^{(\alpha)}$，GN 転位密度テンソル $\boldsymbol{\alpha}^{(\alpha)}$ の大きさ $\rho_G{}^{(\alpha)}$，前述の $\rho_\eta{}^{(\alpha)}$ および $\rho_R{}^{(\alpha)}$ を用いて次式のように書ける．

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

3 GN 転位 - 結晶塑性モデル

本研究では，多重すべり系に対応した Bailey-Hirsch の式 [2]を BCC 金属の 48 すべり系に拡張した形で用いる．

$$g^{(\alpha)} = \tau_r^{(\alpha)} + \sum_{\beta=1}^{48} \Omega^{(\alpha\beta)} a \mu \tilde{b} \sqrt{\rho^{(\beta)}} \quad \text{......(5)}$$

ここで，$g^{(\alpha)}$ は流れ応力，$\tau_r^{(\alpha)}$ は参照せん断応力，$\Omega^{(\alpha\beta)}$ は転位相互作用行列，a は 0.1 のオーダーの数値係数および μ は横弾性係数である．式(5)における $\rho^{(\beta)}$ は β すべり系に蓄積した転位密度であり，式(4)により表される．

通常の結晶塑性論における $g^{(\alpha)}$ の発展式は，結晶の硬化係数 $h^{(\alpha\beta)}$ を用いて次式のように与えられる．

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^{48} h^{(\alpha\beta)} \left| \dot{\gamma}^{(\beta)} \right| \quad \text{......(6)}$$

式(5)に時間微分を施し，Orowan の式等を用いて式(6)と比較すれば，転位密度を考慮した硬化係数 $h^{(\alpha\beta)}$ は次式のように得られる．

$$h^{(\alpha\beta)} = \frac{1}{2} \frac{ac\mu\Omega^{(\alpha\beta)}}{L^{(\beta)} \sqrt{\rho_h^{(\beta)}}} \quad \text{......(7)}$$

ここで c は 1 のオーダーの数値係数，$L^{(\beta)}$ は転位の平均飛行距離および $\rho_h^{(\beta)}$ は結晶の加工硬化に寄与する転位密度である．なお，この $\rho_h^{(\beta)}$ には式(4)より算出した全転位密度を導入する．一方，$L^{(\alpha)}$ には次式の転位密度依存形モデル [2]を用いる．

$$L^{(\alpha)} = \frac{c^*}{\sqrt{\sum_\beta \omega^{(\alpha\beta)} \rho_L^{(\beta)}}} \quad \text{......(8)}$$

ここで，c^* は可動転位が不動化するまでに切る林立転位の本数，$\omega^{(\alpha\beta)}$ は自己硬化を除く転位の相互作用重み行列および $\rho_L^{(\beta)}$ は転位運動の阻害に関する転位密度である．$\rho_L^{(\beta)}$ は式(4)とは異なり，ここでは次式のように表す．

$$\rho^{(\beta)} = \rho_0{}^{(\beta)} + \rho_\eta{}^{(\beta)} - \rho_R{}^{(\beta)} \quad \text{......(9)}$$

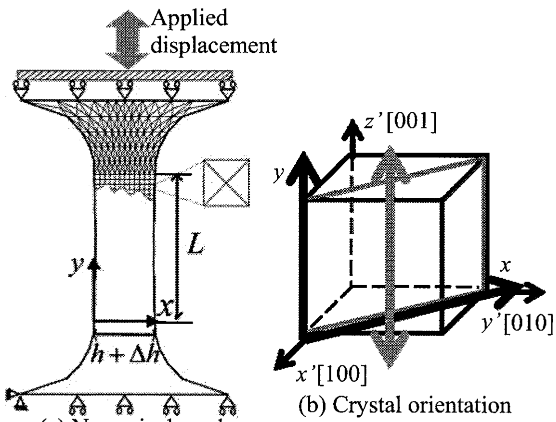
4 FEM 解析および結果

解析対象は図1(a)に示すフェライト単結晶平板の平行部であり，変位制御で y 方向に繰返し負荷を与えた場合の擬似3次元FEM解析を平面応力下で実施する．なお，本研究では簡単化のため，48すべり系のうちほとんど活動しない24個のすべり系セット{123}<111>を除いて解析を行う．平行部は長さL=0.5mm，板幅h=0.2mmであり，幅方向に次式で表わされる形状初期不整を与える．

$$\Delta h = h \left\{ -a_1 \cos\left(\frac{\pi y}{L}\right) + a_2 \cos\left(\frac{m_a \pi y}{L}\right) \right\} \quad \text{......(10)}$$

ここで，a_1 および a_2 は不整振幅率，m_a は波数であり，

NII-Electronic Library Service

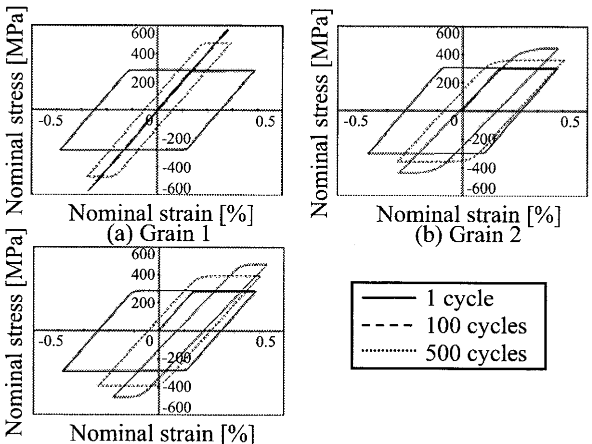


(a) Numerical mesh (b) Crystal orientation

Fig. 1 Computational model

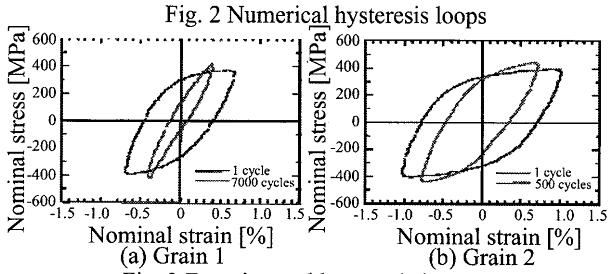
$a_1 = 0.01$，$a_2 = 0.004$ および $m_a = 4$ を与えている．初期結晶方位については図 1(b)のように与え，解析面を xy 平面とする．各結晶粒の Euler 角(Roe)は単結晶 1 においては(θ,φ,ψ)=(14.50,52.00,101.0)，単結晶 2 においては(θ,φ,ψ)=(7.998,35.99,266.0)である．また，双結晶の下部に単結晶 1，上部に単結晶 2 を配置する．

図 2 は単結晶 1，単結晶 2 および双結晶に対する繰返し負荷における公称応力−公称ひずみ線図である．図 2(a)の単結晶 1 の結果を見ると，高い加工硬化率を示しており，繰返し数の増加とともに塑性ひずみ領域が著しく減少している．一方，図 2(b)の単結晶 2 の結果では加工硬化がそれほど顕著ではなく，引張方向へのラチェット的挙動が確認できる．また，図 2(c)の双結晶の結果を見ると，単結晶 1 と単結晶 2 の中間的な硬化率を示しており，単結晶 2 と同様にラチェット的挙動が確認できる．このラチェット的挙動の詳細については調査中であるが，BCC 結晶の場合，引張りと圧縮においてらせん転位の運動が非対称性を有することに関連している可能性がある．図 3 は本解析に対応する単結晶 1 および単結晶 2 の実験結果である．図 2 と図 3 を比較すると，単結晶 1 の加工硬化が大きく，単結晶 2 では小さいという定性的な傾向の一致が見られる．ただし，実験では端面変位からひずみを測定しているため，ラチェット的挙動は捉えられない．図 4 および図 5 は，本解析から得られた繰返し数 500 における試験片内の全転位密度分布および相当塑性ひずみ分布を表している．図 4 を見ると，単結晶 1 では転位の蓄積が少ないのに対し，単結晶 2 では平行部の広い範囲に多くの転位が蓄積しており，双結晶では粒界付近および単結晶 2 側で高い転位密度が確認できる．次に，図 5 を見ると，単結晶 1 ではひずみがほとんど発生していないのに対し，単結晶 2 では試験片を横断するように大きなひずみが発生しており，双結晶では粒界付近および単結晶 2 側でひずみ値が大きくなっている．また，図 5(c)の単結晶 1 において大きなひずみが生じている部位は，図 5(a)の単結晶 1 の解析においても，周囲より比較的大きなひずみが生じていることがわかる．さらに，図 4 と図 5 を比較すると，転位の蓄積した部位の近傍で大きなひずみが生じている．ここでは図示しないが，実験における双結晶では，粒界から離れた位置で破断が起こっており，計算で得られた高転位密度蓄積箇所がき裂発生サイトになる可能性が高いと予想できる．



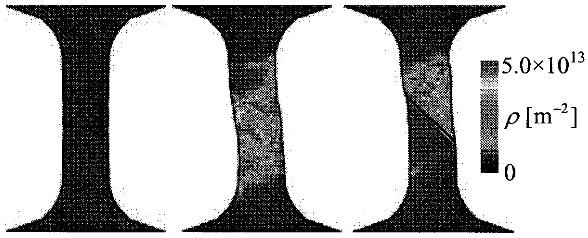
(a) Grain 1 (b) Grain 2 (c) Bicrystal

Fig. 2 Numerical hysteresis loops



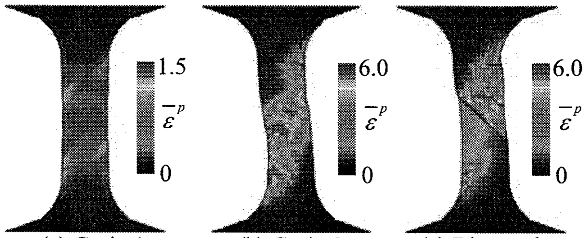
(a) Grain 1 (b) Grain 2

Fig. 3 Experimental hysteresis loops



(a) Grain 1 (b) Grain 2 (c) Bicrystal

Fig. 4 Distributions of total dislocation density



(a) Grain 1 (b) Grain 2 (c) Bicrystal

Fig. 5 Distribution of equivalent plastic strain

5 結　言

本解析結果によれば，双結晶の疲労特性は単結晶 1 および単結晶 2 の中間的特徴を有する．また，転位密度の高い領域で大きな塑性ひずみが生じており，同部位からき裂が発生すると予想される．加えて，結晶方位の違いによる加工硬化の差異は，解析結果と実験結果において定性的に一致する．

参考文献

1) Aoyagi, Y. and Shizawa, K., *Int. J. Plasticity*, **23**-6 (2007), pp. 1022-1040.

2) Ohashi, T., *Phil. Mag.*, **70**-5 (1994), pp.793-803.

NII-Electronic Library Service