

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 9 月 13 日現在

機関番号：11501

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2013～2015

課題番号：25289001

研究課題名(和文)金属材料の機械的性質における寸法効果発現機構の統一モデリング

研究課題名(英文)Unified modeling of size effects in mechanical properties of metals

研究代表者

黒田 充紀(KURODA, Mitsutoshi)

山形大学・理工学研究科・教授

研究者番号：70221950

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 9,100,000円

研究成果の概要(和文)：研究代表者らが開発してきた高次勾配塑性結晶性理論は、金属材料の寸法効果を広範に表現できる可能性を持っていた。しかしながら、材料の内部界面の数値モデルが確立していなかったために、様々な寸法効果を統一的に表現するには至っていなかった。本研究では、まず内部界面の数値モデルについて検討し、粒界に堆積する転位密度が一定値に近づくと、粒界が降伏して塑性流れが発生するとの仮説に基づくモデルを提案した。続いて、界面モデルの妥当性確認とそこに含まれるパラメータ同定を目的に、微細結晶粒材(AI)を用いた実験研究を行った。実験結果は微細結晶粒材内の粒界は、必ずしも塑性変形の強い障壁にはなっていないことを示唆した。

研究成果の概要(英文)：The higher-order gradient crystal plasticity (HOGCP) model that was proposed by the principal investigator has a potential capability to represent a wide range of size effects observed in mechanical properties of metals. However, methodology for modeling of interfaces (i.e. grain boundaries in polycrystals) has not yet been established. Thus, the HOGCP model could not represent the mechanical behavior of polycrystals precisely. In the present study, a new grain boundary model is proposed. In the model, it is assumed that yielding of grain boundaries occurs when the dislocation density at the grain boundary, which increases due to dislocation pileups, reaches a critical value. To confirm the validity of the model and to identify the material parameters included in the model, an experimental study using an ultra-fine grain metal (AI) was conducted. The experimental results suggested that the grain boundaries in the material did not act as strong barriers to dislocation motion.

研究分野：塑性力学，計算力学

キーワード：構成式 結晶塑性 サイズ効果

1. 研究開始当初の背景

金属材料の機械的性質は、“Smaller is stronger”に象徴される寸法依存性を示す。この現象はマイクロメータ寸法領域において顕著である。寸法効果の発現機構の物理が十分に解明され、その数学モデルが整備されれば、より高度な合目的性製品(素形材、部品、機械など広範)の開発が可能となる。具体的には、MEMS 製品の寿命・信頼性予測を含めた設計、粒径を初めとする内部構造制御により機能発現を期待する金属材料の開発・設計等が直接的な応用先として期待できる。

金属の機械的性質の寸法依存性は、塑性ひずみの空間勾配に呼応して発生するという考えに立脚する「ひずみ勾配塑性論(strain gradient plasticity theories = SGP 理論)」がこの20年間で発展してきた。SGP 理論には、巨視的な降伏関数と流動則を仮定するものと、結晶塑性モデルを基礎とするものの2系統がある。後者は材料設計等への応用が大いに期待されるが、その発展は十分とは言えなかった。その主な原因の一つは「界面」の条件の十分な理解とその数理モデル化がなされていないことである。SGP 理論では塑性ひずみ(あるいは塑性すべり)に対する境界条件の設定が要請されるが、自由表面や内部境界(粒界、異種材料境界等)で、塑性変形はどのような拘束を受けるのか十分に分っていなかった。この点についてのブレイクスルーが待たれていた。

2. 研究の目的

前述の背景の中で、本研究の目的は、ひずみ勾配と界面の影響が重畳された効果を統一的に解釈する理論の基礎を作り、その実用への道を拓くことにある。まず、高次勾配結晶塑性理論を整理し、新たな界面の数理モデルを提案する。そして、界面モデルの妥当性とそこに含まれるパラメータ同定のための実験研究を行う。さらに、将来の実用を見据えて、巨視的なひずみ勾配塑性論への展開を考える。

3. 研究の方法

(1) 高次勾配結晶塑性理論をベースとする数値シミュレーション

結晶すべり面上の塑性すべりの空間勾配は、幾何学的必要 (geometrically necessary = GN) 転位の密度(正符号の転位密度から負符号のそれを引いた量)に相当する。塑性すべりの分布が相似であっても、材料寸法が小さいほどその空間勾配は大きくなり GN 転位密度は増大する。GN 転位の一つの効果として、GN 転位配列が作り出す内部応力が外力由来の応力に加算され、すべりを駆動するための有効応力が変化することにより寸法効果が現れる。有効分解せん断応力は次の形式に書ける。

$$t_{\text{eff}}^{(a)} = t^{(a)} - t_b^{(a)} (\nabla r_{G^{(*)}}^{(1)}, \nabla r_{G^{(*)}}^{(2)}, \dots, \nabla r_{G^{(*)}}^{(N)}) \quad (1)$$

ここに、上付き括弧内のギリシャ文字はすべ

り系の番号、 N はすべり系の総数、 $t^{(a)}$ は分解せん断応力、 $t_b^{(a)}$ は背応力、 $r_{G^{(*)}}^{(b)}$ はGN転位密度(下付き括弧内の*はe(刃状成分)またはs(らせん成分)を表すものとする)、 $t_{\text{eff}}^{(a)}$ は塑性すべりを活動させる有効応力である。転位論によれば一様に配列されたGN転位が作り出す内部応力はキャンセルされ、 $r_{G^{(*)}}^{(b)}$ に空間勾配がある場合にのみ内部応力が現れる。

GN転位密度(ここでは刃状成分を考える)の速度 $\dot{r}_{G^{(*)}}^{(a)}$ は、塑性すべり速度 $g^{(a)}$ と次のような関係にある。

$$\dot{r}_{G^{(*)}}^{(a)} + \frac{1}{b} \frac{\partial g^{(a)}}{\partial x_i} s_i = 0 \quad (2)$$

ここに、 s_i はすべり方向を表す単位ベクトル、 b はバーガースベクトルの大きさである。 \hat{r} を任意の重みとして弱形式を求めると次式のようなになる。

$$\left. \begin{aligned} \int_V \dot{r}_{G^{(*)}}^{(a)} \hat{r} dV &= \frac{1}{b} \int_V g^{(a)} \frac{\partial \hat{r}}{\partial x_i} s_i^{(a)} dV \\ &- \frac{1}{b} \int_S g^{(a)} s_i^{(a)} n_i \hat{r} dS \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

ここに、 n_i は領域境界(または界面)の単位法線ベクトル、 $g^{(a)}$ は境界上での塑性すべり速度の値である(界面以外の物質点における値 $\dot{g}^{(a)}$ と区別している)。式(3)を新たに追加される支配方程式として、通常の変位仕事の原理と連立させて解くというのが、本研究における高次勾配結晶塑性理論の概要である。ここでは記述の都合上、微小変形かつ刃状転位のみを考慮して記述したが、実際の計算には3次元大変形の定式化を用いる。

式(3)の右辺第3項にある $g^{(a)} s_i^{(a)} n_i$ は界面法線方向に生じるすべり速度を表し、これが界面における境界条件を規定することになる。例えば、 $g^{(a)} s_i^{(a)} n_i = 0$ とすると、これは界面法線方向の塑性流れが無いことを意味し、全ての転位がそこで停止する硬い界面(強い粒界)を表す。一方、界面が粒内に比べて特別な性質を示さず、そこで自由に塑性流動が生じる場合には $\dot{g}^{(a)} = g^{(a)}$ と考えて良い。上記は両極端の場合であり、現実にはそれらの中間的な条件も生じうると考えられる。これらに対する統一的な定式化の一形式を示すのが本研究の具体的課題の一つである。

(2) 粒界の役割を調査するための実験研究

金属材料の力学応答に対する粒界の役割は未だ完全には解明されていない。本研究では、粒界がどの程度転位運動の障害となっているかを微細結晶材料の引張-圧縮、圧縮-引張試験を用いて調べる。粒界が転位運動の強い障害であれば、そこに堆積した転位群は背応力を発生させる。その程度は、反転負荷を

施した場合のバウシinger効果の大きさとして評価できる。このように背応力 (= 転位配列起因の内部応力) の大きさを間接的に見積もることで、粒界の性質を割り出すという戦略である。これにより粒界の数値モデルを具体化することを目指す。

実験に用いる微細結晶材料は ECAP (equal channel angular pressing) 法で作成する。工業用純アルミニウム丸棒に ECAP 加工 (1パス毎に軸廻りに 90°回転して加工する) を施した後、機械加工によりダンベル状の引張・圧縮試験用の試験片を作製して、実験を行う。

(3) 巨視的塑性論への展開

上記の(1)で述べた結晶塑性論をベースとする理論は、結晶構造に起因する異方性、ひずみの局所化を誘発する塑性流れの尖点効果、すべり面ごとの硬化挙動の差異などの微視的挙動を連続体力学の枠組みで表現できる利点を持つ。しかしながら、数値シミュレーションに応用する場合、計算時間の増大は避けられない。ここでは、結晶塑性論の特徴を維持しながら、巨視的な降伏関数と流動則に基づくより簡易な SGP 理論への展開を考える。

4. 研究成果

(1) 粒界の数値モデルと数値解析

界面の境界条件を統一的に表現するために下記の形式を提案する (学会発表)。

$$\underline{\dot{g}}^{(a)} = f^{(a)} \underline{\dot{g}}^{(a)} \quad (4)$$

スカラー係数 $f^{(a)} (\geq 0)$ が零であれば塑性流動を許さない固い界面 (ここでは hard GB と呼ぶ) が表現できる。 $f^{(a)} = 1$ を仮定すると $\underline{\dot{g}}^{(a)} = \underline{\dot{g}}^{(a)}$ となり、界面での自由な塑性流動が表現できる。一般に、 $f^{(a)}$ の範囲は $0 \leq f^{(a)} \leq 1$ であると考えられる。種々の試験的数値計算より、 $f^{(a)} = 1$ は $\dot{r}_{G^{(a)}}^{(a)} = 0$ と仮定するのと同様な挙動をもたらすことを確認している。これらは自由表面で転位が自由に物体外に出て行くことを表現するのにも適していると考えられる。

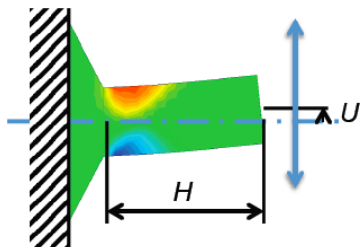


図1 マイクロビーム (単結晶) の繰返し曲げ問題

自由表面に起因する寸法効果を調べるために図1に示すマイクロビーム (直径 D の円形断面) の繰返し曲げ解析を行った (学会発

表)。背応力は、次のように与える。

$$t_b^{(a)} = t_0 \bar{b} l^2 \left(\frac{\partial r_{G^{(a)}}^{(a)}}{\partial x_i} s_i^{(a)} + \frac{\partial r_{G^{(a)}}^{(a)}}{\partial x_i} p_i^{(a)} \right) \quad (5)$$

ここに、 t_0 は臨界分解せん断応力、 l は材料の固有寸法、 $p_i^{(a)}$ はすべり面内で $s_i^{(a)}$ に直交する方向を表す単位ベクトルである。図2は正規化した曲げモーメントと先端のたわみ量の関係である。理論に導入した材料の固有長さ l と D との比が大きくなると、ひずみ硬化量が大きくなると共に反転負荷時にバウシinger効果が大きくなっている。表面において $\dot{r}_{G^{(a)}}^{(a)} = 0$ を規定したために、図3に示すように、塑性すべり量に空間勾配が生じ、結果として背応力が増加して、図2に見られるようにバウシinger効果の増大が発生している。同様の現象は既往の実験研究でも観察されている。

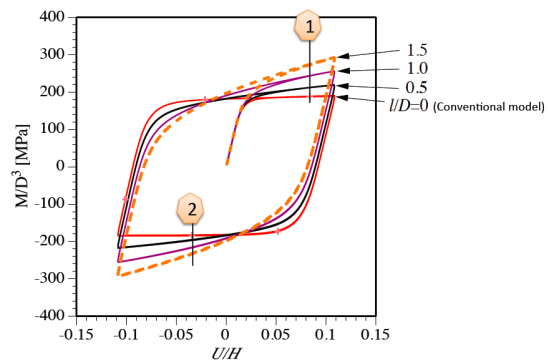


図2 正規化した曲げモーメントと先端のたわみの関係 (マイクロビーム曲げ問題の解析結果; l は材料固有の特徴長さ、 D はビーム (円形断面) の直径)

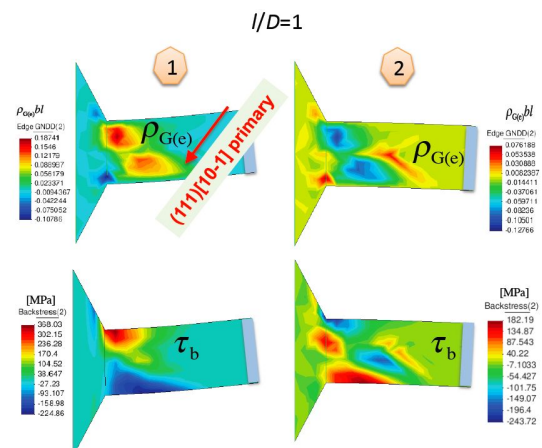


図3 図2にマークした2つの変形段階におけるGN転位密度分布と背応力の分布

次に内部界面 (ここでは粒界 = GB) 効果を考える。GB における転位堆積には限界があり、粒界における $r_{G^{(a)}}^{(a)}$ がある臨界値に近づくると塑性流動が開始するという仮説を立てると、次のような一形式が考えられる。

$$f^{(a)} = \frac{1}{1 + b \cdot \exp\left(-c\left(r_{G^{(a)}}^{(a)} - r_G^{(Critical)}\right)\right)} \quad (6)$$

ここに、 $r_G^{(Critical)}$ は粒界堆積転位密度の臨界値、 b と c はそれぞれ無次元、長さの 2 乗オーダーのパラメータである。 b と c の値の選択により、 $r_{G^{(a)}}^{(a)} \approx r_G^{(Critical)}$ の成立に伴い急激に界面で塑性流動が開始する挙動や、 $r_{G^{(a)}}^{(a)}$ が $r_G^{(Critical)}$ に近づくにつれて徐々に塑性流動がアクティブになる挙動が表現可能になる。これらは、「粒界の降伏」現象を表すモデルとも解釈できる。(学会発表)。

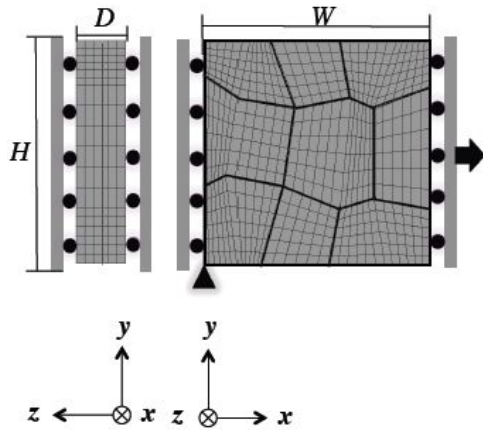


図4 多結晶モデル

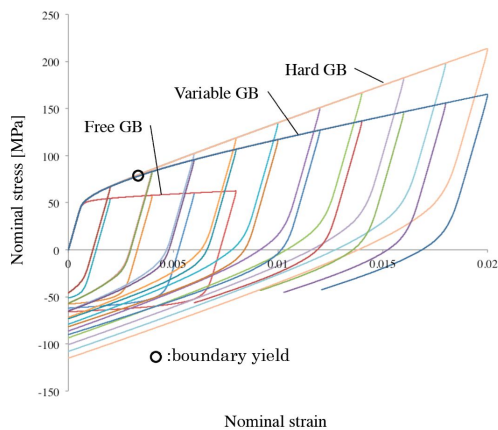


図5 粒界の境界条件とパウシンガー挙動の変化

図4は解析対象とする3次元多結晶有限要素モデルである。図5に本モデルによる典型的な結果(公称応力-公称ひずみ線図)の例を示す($W = 100 \mu\text{m}$, $H = 100 \mu\text{m}$, $D = 25 \mu\text{m}$, $l = 50 \mu\text{m}$ と設定した。)

図中、'Variable GB'はGBにおけるすべりの条件を式(7)によると仮定した場合の結果、'Free GB'は $f^{(a)} = 1$ とした場合の結果、'Hard GB'は $f^{(a)} = 0$ と置いた場合の結果である。Hard GBの場合は、GBにGN転位が蓄積して背応力が大きくなり、強いひずみ硬化と大きなパウシンガー効果を示す。これに対して、Free GBの場合には、GBにGN転位の蓄積が生じないため、弱いひずみ効果と非常に小さいパウシンガー効果を呈している。

Variable GBの場合は両者の中間的挙動が観察される。

(2) 粒界の役割を調査するための実験研究

直径 10 mm の工業用純アルミニウム (JIS A1070) 棒材を焼鈍した後(この時点で平均粒径は $40 \mu\text{m}$) ECAP加工を6パスまで施し、最終的に平均粒径が約 $4 \mu\text{m}$ の試料を得た。本実験研究は、研究期間終了後も継続して実施中であり、十分なデータがそろい次第順次学会発表並びに雑誌論文公表する予定である。ここでは、本課題研究期間内に得られた結果の概要を報告する。2パス目の ECAP加工後に平均粒径は $100 \mu\text{m}$ 程度まで粗大化した。流動応力は焼き鈍し直後の試験片の5倍程度まで増加した。その後6パスまで ECAP加工を進めたところ前述の通り平均粒径は約 $4 \mu\text{m}$ まで小さくなったが、流動応力レベルは2パス材とほぼ同一であった。パウシンガー効果の大きさは粒径が減少してもほとんど変化せず、応力-ひずみ関係は図5の解析結果の Free GB のものと類似の傾向を呈した。現時点で取得できたデータからは、ECAP加工で作られた材料においては、粒界は塑性変形の強い障壁には必ずしもなっていないことが示唆される。より確固たる考察を得るためには今後データ数の積み重ねが必要である。

(3) 巨視的塑性論への展開

ひずみの局所化を誘発する塑性流れの尖点効果を表現可能な改良型 J_2 理論にひずみ勾配効果を考慮した新理論を提案した(雑誌論文)。図6に代表的な解析例(平ひずみ引張問題)を示す。塑性ひずみ勾配による寸法効果を考慮しない場合には、1有限要素幅の鋭いせん断帯が発生するが、材料固有寸法に対して試験片が小さくなるとせん断帯は発生せず、拡散くびれモードで変形が進行することが分かる。

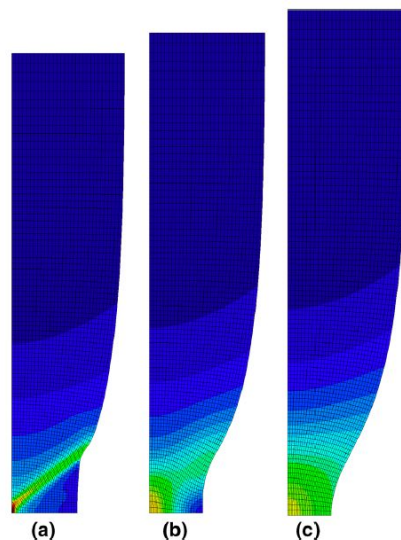


図6 巨視的ひずみ勾配塑性論による平面ひずみ引張におけるせん断帯形成の解析: (a) $l/H_0 = 0$; (b) $l/H_0 = 0.04$; (c) $l/H_0 = 0.1$ (l は材料の固有寸法 H_0 は試験片の初期幅)

5. 主な発表論文等
(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計1件)

Kuroda, M., A strain-gradient plasticity theory with a corner-like effect: a thermodynamics-based extension, Int. J. Fracture 査読有, 巻号未定, DOI: 10.1007/s10704-015-0055-9

[学会発表](計5件)

庄司真之・黒田充紀, バウシンガー効果の発現機構のモデル化, 第66回塑性加工連合講演会, 2015年10月29日~2015年10月31日, いわき市(文化会館)

黒田充紀, 内部界面効果の連続体力学的取り扱いについて, 第19回計算工学講演会(日本計算工学会), 2014年06月11日~2014年06月13日, 広島市(広島国際会議場)

長岡佑磨・黒田充紀, 高次勾配結晶塑性有限要素法を用いた多結晶材料の変形解析, 第27回計算力学講演会(日本機械学会), 2014年11月22日~2014年11月24日, 盛岡市(岩手大学)

Kuroda, M., Higher-order gradient effects on plastically deformed small-sized single crystals, Computational Plasticity – COMPLAS XII, 2013年09月03日~2013年09月05日 Barcelona, Spain.

Kuroda, M., A gradient crystal plasticity theory at finite strain and its application to three-dimensional simulation of micro-pillar compression, New Horizons in Materials Mechanics, Viggo Tvergaard Symposium(招待講演) 2013年06月05日~2013年06月07日, Kgs. Lyngby, Denmark.

[図書](計0件)

[産業財産権]

○出願状況(計0件)

○取得状況(計0件)

[その他]

ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

黒田 充紀 (KURODA, Mitsutoshi)
山形大学・大学院理工学研究科・教授
研究者番号: 70221950

(2) 研究分担者 なし

(3) 連携研究者 なし

(4) 研究協力者

小泉 隆行 (KOIZUMI, Takayuki)