

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成24年6月7日現在

機関番号：11501

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2009～2011

課題番号：21560076

研究課題名（和文） ミクロンスケール塑性論の高度化と展開

研究課題名（英文） Development of a micron-scale plasticity theory and its engineering application

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

研究成果の概要（和文）：マイクロメートル寸法領域における金属材料の機械的性質の寸法依存性について実験的に調べ、それを、物理的合理性をもって再現可能な高次勾配結晶塑性論を定式化した。実験研究においては、板厚の異なる単結晶アルミニウム箔と単結晶銅箔を用いて、ひずみ勾配とともに蓄積される内部応力の挙動を明らかにした。理論研究においては、幾何学的必要転位密度の空間勾配によって発生する内部応力を考慮した高次勾配結晶塑性理論を定式化した。

研究成果の概要（英文）：Mechanical behavior of metals at the micron scale were systematically investigated, and a physically-based gradient crystal plasticity theory has been formulated. In the experimental part of the study, microbend tests with reversal of bending direction were carried out on aluminium and copper single-crystal foils. The results strongly suggested that internal stresses, which act as back-stresses, existed in the bent foil specimens due to a non-uniform array of the geometrically necessary dislocations (GNDs). In the theoretical part, the effect of the GNDs was incorporated into a framework of gradient crystal plasticity theory.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	1,100,000	330,000	1,430,000
2010年度	1,100,000	330,000	1,430,000
2011年度	1,300,000	390,000	1,690,000
総計	3,500,000	1,050,000	4,550,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・材料力学

キーワード：連続体力学，結晶塑性，連続分布転位論，格子欠陥

1. 研究開始当初の背景

機械部品の強度設計や、複合材料などの材料設計に用いられてきた材料力学は、古典的な連続体力学の枠組みにその基礎をおいている。旧来の連続体力学は、相似な構造と荷重の条件の下では、同一の応力・ひずみの解を与える。ところが、金属材料の機械的性質は、マイクロメートル・オーダーの領域において、著しい寸法依存性を呈することが知られている。寸法が小さくなると、降伏応力や塑性硬

化率が大きくなる現象、すなわち、“Smaller is stronger” に象徴される現象が観察される。特に、塑性ひずみ分布に勾配がある場合に著しい寸法効果が発現するという報告がなされて以来、材料モデリングに対する見直しが行われて来た。

塑性材料の力学を記述するために、古くから降伏関数と流動則を基本要素とするいわゆる現象論的塑性理論が発展してきた。これに塑性ひずみ勾配の影響を導入しようという試

みが多数なされて来たが、現象論的立場を採る限り、塑性ひずみ勾配の導入の仕方には任意性が残り、これが異常な数の「ひずみ勾配塑性理論」を生み出す結果となった。これに対して結晶のすべりを塑性変形の素過程と考える結晶塑性理論は、連続体仮定に基づく塑性論の一種であるものの、結晶構造とすべりという金属塑性の巨視的な意味でのエッセンスを直接モデル化するために、一種の物理モデルとして捉えることができる。

最近では、この結晶塑性論に転位やその他の格子欠陥の影響を材料の物理を反映した形で導入して高度化しようとする機運が高まり、多数の研究者がこの分野に参入している。しかし、各々の研究者がそれぞれ断片的な実験結果を参照して、別個の理論を提案しているのが現状であり、どの考えが物理的に確からしいかという点が必ずしも明確ではなく、学界に混乱が生じていた。

この現状を打開するためには、理論を定式化する立場からの要請に合致する形での系統的な実験研究が必要であり、その実験事実と材料の物理に基づいた理論の構築が必要とされていた。

寸法効果を表現可能な物理的に確かな結晶塑性論は、微小寸法機械の設計、性能評価、材料内部の微視的構造の最適設計等に、幅広い応用が見込まれる。

2. 研究の目的

研究代表者らが 2008 年に提案した有限変形高次勾配結晶塑性論を理論の枠組みとして用いる。これを実用的な理論に高度化するためには、すべり系の相互作用を明らかにするための実験と繰り返し荷重に対する微小材料の力学応答の調査が不可欠である。本研究では、これらの実験研究を行い、その結果を理論の定式化に反映させ、理論を高度化し、さらに実用への展開を行うことを第一の目的とした。

理論を実用に近づけるためにはそれを有限要素法コードに実装し、パフォーマンスの高いシミュレーションを実施可能にしなければならない。理論のシミュレーションへの応用を第 2 の目的とした。

上記は単結晶体を対象とした基礎研究であるが、これらの微細結晶粒材料への応用を第 3 の目的とした。

3. 研究の方法

(1) 単結晶金属箔の曲げ試験と引張試験

銅の単結晶箔は、95%以上の強圧延を施した後に熱処理を行って立方体方位を広範囲に成長させて作製し、本実験を実施するにあたり十分な面積の単結晶箔を得た。アルミの単結晶箔も同様に圧延された箔に熱処理加えて作製したが、必ずしも狙った理想方位が

成長するわけではなく、また、粗大粒の粒径も最大で 10 cm 程度であり、同一方位に対しては、限られた試験片本数分しか材料を準備できなかった。

準備された単結晶箔は、電解研磨でいくつかの段階に板厚を減じた後、そこから放電加工により試験片を切り出した。

これらの試験片を用いて、引張試験とマイクロ曲げ試験を実施した。マイクロ曲げ試験においては、除荷後の弾性回復量から、弾性係数を用いて作用曲げモーメントを算出する。

(2) 高次勾配結晶塑性論の構築と有限要素法コードへの実装

研究代表者が、2008 年に提案した高次勾配結晶塑性理論を平面問題用の有限要素コードに導入し、マイクロ曲げ試験結果の再現を試みた（微小変形問題）。

大変形問題に対しては、本理論のような高次勾配理論の計算実績は世界でもほとんど例がないため、どの有限要素定式化が最も効率よく精度の高い解を出すかという基礎的な検討を先ず行った。これについては、変形が厳しく集中するせん断帯形成の問題をベンチマークとして、有限要素定式化による計算結果の差異と結果の妥当性について詳細に検討を行った。これらの知見を受けて、未だテスト段階ではあるものの 3 次元コードへの実装も行っている。

(3) 微細結晶粒材料を対象とした研究

本研究で考えている材料モデリングの微細結晶粒材料に対する適用性を検討するために、重ね接合圧延 (ARB) を利用して、微細結晶粒板材を作製した。引張荷重中に材料内に発生する内部応力 (背応力) を評価するために、反転負荷 (圧縮) 試験を行うための試験装置を開発した。

4. 研究成果

(1) 単結晶金属箔の曲げ試験と引張試験

単結晶アルミニウム箔に対して、図 1 に示す 2 つの結晶方位に対して試験を行った。図 1(a) の方位では、4 つのすべり面全てにおいてすべりが活動し、(b) の方位では 1 つのすべり系のみが活動することが期待できる。

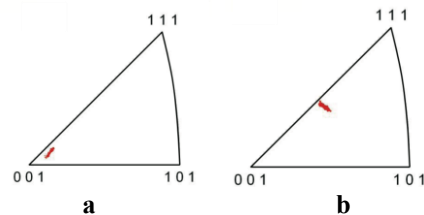


図 1 荷重軸方向と結晶軸の相対的關係を表す逆極点図 (アルミニウム単結晶箔) (a) 多重すべり試験片; (b) 単一すべり試験片。

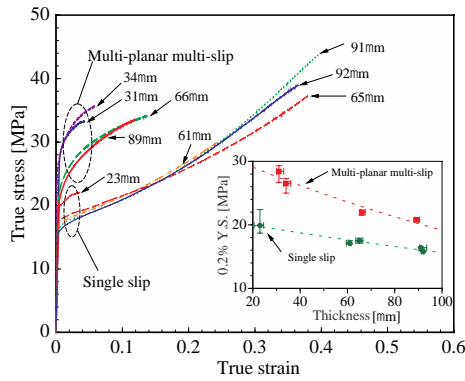
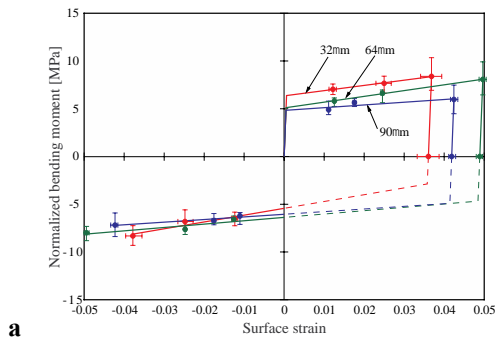
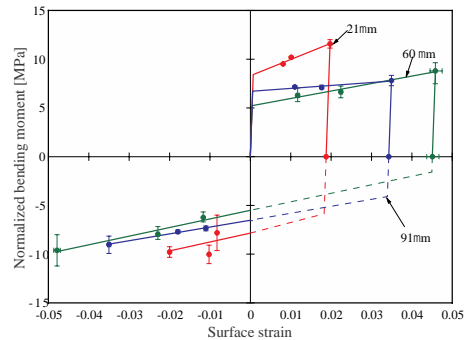


図2 異なる厚さのアルミニウム単結晶箔の引張試験の結果 (真応力-真ひずみ関係)。



a



b

図3 マイクロ曲げ試験の結果 (正規化曲げモーメントと表面ひずみの関係; アルミニウム単結晶箔) (a) 多重すべり試験片; (b) 単一すべり試験片。

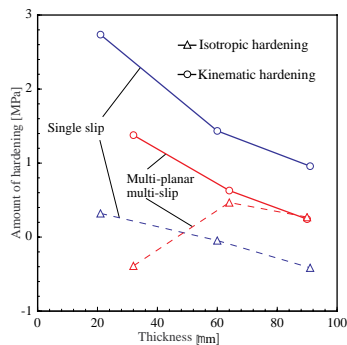


図4 塑性表面ひずみ1.8%時における等方硬化・移動硬化量と箔厚の関係 (アルミニウム単結晶箔)。

引張試験の結果を図2に示す。多重すべり試験片のほうが、加工硬化率が高くなっている。これは、交差するすべり面の林立転位の影

響と考えられる。僅かではあるが初期降伏応力の板厚依存性が見られる。

図3にマイクロ曲げ試験の結果を示す。縦軸は曲げモーメントを板厚の2乗と試験片の幅の積で正規化した値、横軸は曲率から算出した試験片表面の公称ひずみである。多重すべり試験片、単一すべり試験片ともにひずみ硬化量に明らかな板厚依存性が見られる。また、明確なバウシinger効果 (反転負荷後に降伏応力が小さくなる現象) が観察される。

図3に示した正規化した曲げモーメント-表面ひずみ関係を、一種の応力-ひずみ関係とみなして、1.8%塑性表面ひずみの時点での等方硬化量と移動硬化量を読み取った結果を図4に示す。単一すべりの場合は、等方硬化がほとんど見られない。移動硬化量に対しては、単一すべり、多重すべりの場合ともに明瞭な寸法依存性が見られ、試験片内にGN転位に起因する内部応力が存在することが強く示唆された。(以上は論文①で公表。)

上記と同様な実験を純銅単結晶箔に対しても行った (論文③で公表)。共面2重すべり方位と多重すべり方位に対して試験を実施した。銅においては、多重すべり変形の場合には、等方硬化量に明確な箔厚依存性が認められる一方、共面2重すべり方位に対しては、等方硬化量は箔厚に関わらずほぼ一定であった。材料内部に蓄積される幾何学的必要(GN)転位の密度は、塑性ひずみ勾配の大きさに比例する。箔厚が小さい試験片のほうがより塑性ひずみの勾配は大きく、GN転位の密度は高くなる。実験結果より、GN転位はそれらが存在するすべり面の加工硬化には直接寄与しないことが分かった。すなわち、銅箔においては、GN転位は林立転位効果を通して等方硬化挙動に寄与すると解釈できる。

同じ面心立方体金属であるアルミニウムと銅におけるGN転位に関わる硬化挙動の差異の原因説明は、今後の研究課題である。

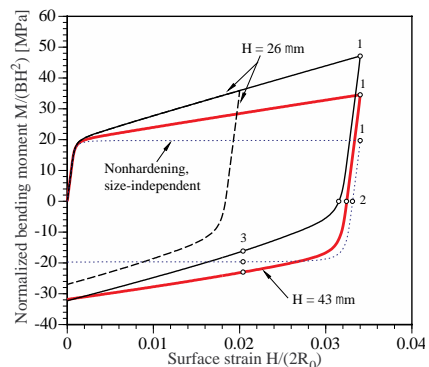


図5 シミュレーションによる正規化曲げモーメントと表面ひずみの関係 (立方体方位を有する面心立方箔材の場合)。

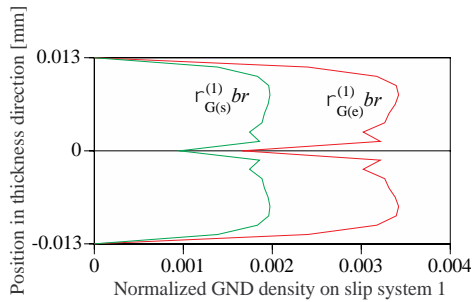


図6 シミュレーションによる箔内の刃状及びびらせん GN 転位密度分布 (立方体方位を有する 26 μm 厚の面心立方箔の場合).

(2) 高次勾配結晶塑性論に基づくシミュレーション法

銅箔のマイクロバンド試験における観察結果に基づき、GN 転位密度が他のすべり面に林立転位として影響を及ぼし、そのすべり面の転位の自由運動距離を制限するというモデルを採用した。そのモデルを、高次勾配結晶塑性理論に導入し、マイクロバンド試験のシミュレーションを行った。図5は、シミュレーションによる多重すべり箔試験片に対する正規化曲げモーメント-表面ひずみ関係である。図5に示すシミュレーション結果と、対応する銅箔を用いた実験結果との差異は、シミュレーションにおいて等方硬化量が非常に小さく見積もられる点である。シミュレーションでは、試験片表面において、GN 転位密度を境界条件として与える必要がある。本研究では、自由表面を表現するために転位は表面から自由に領域外へ抜けると考えて、表面において GN 転位密度を零と仮定した。図6に、シミュレーションで得られた GN 転位密度分布を示す。同図に見られるように、表面において GN 転位密度が零であるという仮定によって、表面付近の転位密度は極端に小さく計算される。その結果、林立転位効果が弱く見積もられ、等方硬化が過小評価されたと考えられる。図5に示すような移動硬化が支配的な挙動は、むしろアルミニウム箔の応答に近い。転位密度の値を境界条件として要求するのは、高次勾配理論の一つの特徴であるが、材料や表面の状態に応じた適切な境界条件の詳細な検討は、今後の課題として残った。(以上は論文③で公表.)

マイクロバンド試験に対応した解析は微小変形問題であるが、大変形問題に対する高次勾配理論の計算実績は世界でもほとんど例がない。ここでは、どのような有限要素定式化が最も効率よく精度の高い解を出すかという基礎的な検討を行った。高次勾配結晶塑性理論では、GN 転位場を離散化して解析する必要があり、GN 密度が有限要素法の節点自由度として追加される。本研究では、基礎的な検討を効率よく行うため平面ひずみ

問題に限定し、さまざまな形状関数の次数と積分点数を設定して、これらによる解析結果の妥当性を検討した。

図7は、変位増分と GN 転位密度の計算に適用した有限要素の一覧である。

面心立方構造における 12 すべり系を平面における 3 つのすべり系に理想化したモデルを考え、平面ひずみブロックのくびれ問題を解析した。ブロックの中央断面の幅に僅かな形状初期不整を導入し、くびれを誘発する。この問題においては、くびれ領域にせん断ひずみが集中するいわゆる「せん断帯(shear band)」が形成されることが事前の分岐理論解析で分かっている。この変形モードの急激な変化を適切に追跡できるかどうかを図7に示す有限要素に対して調査した。

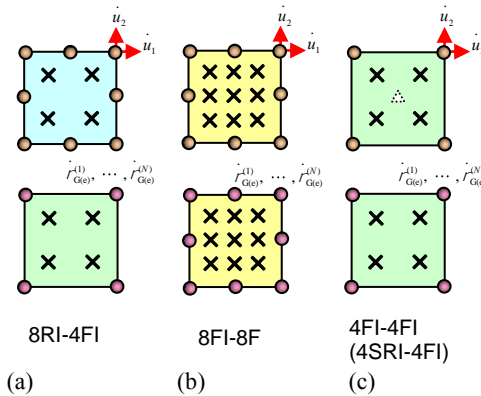


図7 本研究で検討した有限要素の種類: (a) 8RI-4FI 要素 (変位増分を 8 節点次数低減積分要素で、GN 転位密度を 4 節点完全積分要素で解析する); (b) 8FI-8FI (変位増分と GN 転位密度を共に 8 節点完全積分要素で解析する); (c) 4FI-4FI (4SRI-4FI) (変位増分を 4 節点完全積分 (又は 4 節点選択低減積分) 要素で、GN 転位密度は 4 節点完全積分要素で解析する)。図中、記号“O”は節点を、“x”はガウスの積分点を示す。

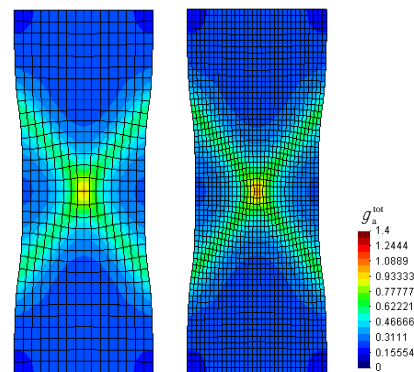


図8 高次勾配結晶塑性論による平面ひずみブロックの引張解析。有限要素メッシュの変形と累積すべり量 g_a^{tot} の等値線図 (公称引張ひずみ 18%)。固有長さ l は、 $l/W_0=0.12$ に設定 (W_0 は試験片の初期幅): (a) 8RI-4FI (16 \times 32 の有限要素メッシュ); (b) 8RI-4FI (32 \times 64 の有限要素メッシュ)。

多数の解析を系統的に行った結果、図 7(a) の 8RI-4FI 要素が最も有用であることがわかった。これは、変位増分を 8 節点低減積分要素で、GN 転位密度を 4 節点完全積分要素で解くものである。図 8 は 8RI-4FI 要素により 2 種類の要素分割を施して解析した結果である。高次勾配効果を導入しない場合には、せん断帯の「幅」は 1 要素のサイズで決まってしまう、分割を細かくすればするほどひずみが集中するという結果に陥り、分割を細かくすると解が収束する方向に向かうという有限要素法的前提が崩れる。ところが本解析のように高次勾配効果を考慮すると図 8 に見られるようにせん断帯の幅は要素分割様式に関わらず一定となり、いわゆるメッシュ依存性が除去される。

8FI-8FI 要素(変位増分と GN 転位密度の両方を 8 節点完全積分要素で解く)を用いると、変位、ひずみ、応力に関しては、8RI-4FI 要素によるものと同様の結果が得られるものの、GN 転位密度分布に不自然な凹凸が現れ、許容し難い結果となった。また、4SRI-4FI(変位増分を 4 節点選択型低減積分要素で、GN 転位密度を 4 節点完全積分要素で解く)を用いると、要素対角線方向に剛性が大きくなり過ぎ、ひずみの局所化現象が全く捉えられないことが分かった。

その他、上下端の塑性ひずみが零に拘束された薄いストリップの単純せん断問題(拘束単純せん断問題)、単一すべりブロックの圧縮問題等で、各要素のテストを行ったが、どの問題に対しても 8RI-4FI 要素は適切な解を出した。(以上、論文②で公表。)

上記の高次勾配結晶塑性論は、材料物理に立脚した高精度なシミュレーションを実施するためのツールとなることが期待できる一方、シミュレーションには多くの計算機資源と要する。そこで、高次勾配結晶塑性理論における GN 転位の効果を現象論形式に書き下し、従来の巨視的塑性理論に組み込むことによって現象論的勾配塑性論を構築した(論文④で公表)。

(3) 微細結晶粒材料について

微細結晶粒材料の力学的応答に対する GN 転位起因の内部応力(背応力)の影響を調べるためには、微細結晶粒材料の反転負荷試験が必要である。本研究では、重ね接合圧延(ARB)で作製した厚さ 1 mm の純アルミニウム微細結晶粒板材の引張～圧縮反転試験を実施するために、座屈防止機構を備えた試験ジグを新たに設計・製作した(図 9)。負荷反転試験により、力学的挙動の観察を通して結晶粒界に堆積する GN 転位の状況を把握する道が開ける。今後、データを系統的に蓄積し、顕微鏡観察を併用して、微細結晶粒材料挙動

に及ぼす GN 転位影響を調査する必要がある。

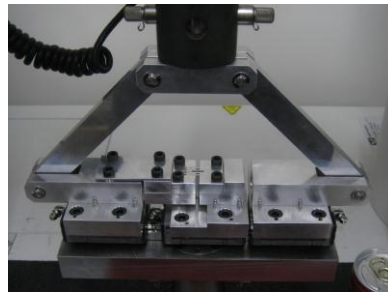


図 9 微細結晶材料による小型試験片のための圧縮試験装置の開発状況。

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 4 件)

- ①. M. Sato, Y. Matsuki, I. Hayashi, M. Kuroda: Yielding and strain hardening in aluminium single-crystal foils subjected to tension and bending. *Philosophical Magazine Letters* (Online 公開のみ; 巻号未定) 査読有. doi: /10.1080/09500839.2012.691214
- ②. M. Kuroda: On large-strain finite element solutions of higher-order gradient crystal plasticity. *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 48, pp. 3382-3394 (2011) 査読有. doi:10.1016/j.ijsolstr.2011.08.008
- ③. I. Hayashi, M. Sato, M. Kuroda: Strain hardening in bent copper foils. *Journal of the Mechanics and Physics*, Vol. 59, pp. 1731-1751 (2011) 査読有. doi:10.1016/j.jmps.2011.06.001
- ④. M. Kuroda, V. Tvergaard: An alternative treatment of phenomenological higher-order strain gradient plasticity theory. *International Journal of Plasticity*, Vol. 26, pp. 507-515 (2010) 査読有. doi:10.1016/j.ijplas.2009.09.001

[学会発表] (計 6 件)

- ①. 黒田充紀: 金属の機械的性質の寸法効果に対する実験検証とその理論的解釈, 第 61 回理論応用力学講演会, 2012 年 3 月 12 日, 東京大学(目黒区).
- ②. M. Kuroda: Deformation behavior of small-sized single crystals affected by unconventional microscopic boundary conditions: Gradient plasticity-based predictions. *The 17th International Symposium on Plasticity and Its Current Applications: Plasticity 2011*, 2011 年 1 月 6 日, Puerto Vallarta, Mexico.
- ③. 林一郎, 黒田充紀: 単結晶銅箔における機械的性質の寸法依存性に関する実験

- 的研究, 第 61 回塑性加工連合講演会, 2010 年 10 月 17 日, 山形大学(米沢市).
- ④. 黒田充紀: 高次勾配結晶塑性論によるひずみの局所化解析, 第 23 回計算力学講演会(日本機械学会), 2010 年 9 月 23 日, 北見工業大学(北見市).
 - ⑤. 黒田充紀: ひずみ勾配塑性論の定式化に関する一考察, 第 15 回計算工学講演会(計算工学会), 2010 年 5 月 27 日, 九州大学(福岡市).
 - ⑥. M. Kuroda: M. Sato: Size effects in single crystals: Theory and experiments. The 16th International Symposium on Plasticity and Its Current Applications: Plasticity 2010, 2010 年 1 月 5 日, St. Kitts & Navis.

[その他]

ホームページ

<http://kuroda.yz.yamagata-u.ac.jp/>

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