

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3月31日現在

機関番号：32612

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2009～2011

課題番号：21560100

研究課題名（和文） 超微細粒金属の力学的評価のためのトリプルスケール転位-結晶塑性モデリング

研究課題名（英文） Triple-scale Dislocation-crystal Plasticity Modeling for Evaluation on Mechanical Properties of Ultrafine-Grained Metal

研究代表者

志澤 一之 (SHIZAWA KAZUYUKI)

慶應義塾大学・理工学部・教授

研究者番号：80211952

研究成果の概要（和文）：本研究では、転位枯渇に対応する臨界分解せん断応力モデルを提案するとともに、均質化法を導入して転位-結晶粒-マクロ構造といった3階層にまたがるマルチスケール結晶塑性モデルを構築することによって、FCC超微細粒金属に発現する特異な力学的挙動（粒径減少に伴う強度上昇と延性低下、降伏点降下、Lüders帯伝ば）を計算力学的に再現することに成功した。また、超微細粒材の中に粗大粒を混在させてBimodal構造にすることで、延性が改善するメカニズムについても検討した。

研究成果の概要（英文）：In this study, it has been succeeded that peculiar mechanical behaviors occurring in f.c.c. ultrafine-grained metals, i.e., increase of strength and decrease of ductility with decrease of grain size, yield stress drop and propagation of Lüders band are computationally reproduced by using a critical resolved shear stress model proposed newly for situation of dislocation exhaustion and by developing a multiscale crystal plasticity model bridging three hierarchical scales, i.e., dislocation structure, grain aggregates and macroscopic structure through the homogenization method. Moreover, a mechanism of ductility improvement of bimodal structures with coarse grains dispersed in ultrafine-grained matrix is also discussed.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	1,300,000	390,000	1,690,000
2010年度	1,200,000	360,000	1,560,000
2011年度	1,100,000	330,000	1,430,000
年度			
年度			
総計	3,600,000	1,080,000	4,680,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学，機械材料・材料力学

キーワード：材料設計・プロセス・物性・評価，非線形計算固体力学

1. 研究開始当初の背景

強ひずみ温間・冷間圧延などによって創製される超微細粒金属(UFGM: Ultrafine-grained Metal)は、卓越した強度を有する構造材料として注目を集めている。FCC金属においては、

粒径のサブミクロン化に伴って強度が飛躍的に増加するが、その一方で延性が急激に低下する。また、FCC-UFGMに焼鈍処理を施したFCC微細粒焼鈍材においては、通常のBCC焼鈍材で観察される降伏点降下現象および

Lüders帯の伝ばに酷似した現象が起こることが実験的に報告されている。このように、UFGMは特異な力学特性を示すことが知られており、それを計算力学的に再現するとともに、その機構を解明することが材料組織制御や圧延加工の分野で期待されている。

一方、近年、FCC-UFGMの強度を損なうことなく、延性を改善する方法に関する研究が行われており、微細粒と粗大粒が混在するBimodal構造を金属材料に導入する研究が注目を集めている。ただし、Bimodal金属は混在させる結晶粒の粒径比および体積比により、力学特性が大きく異なることが知られている。

しかしながら、以上のような現象を統一的に再現できる材料モデルは提案されておらず、またそれを用いた計算力学的手法も開発されていないのが現状である。

2. 研究の目的

上述のような背景から、本研究ではFCC-UFGMにおけるミクロからマクロにわたる力学挙動を統一的に再現することを目的とし、転位の微視構造、結晶粒構造および巨視構造という3階層を橋渡しするトリプルスケール転位-結晶塑性モデルを構築する。その際、微細粒焼鈍材には転位密度が極めて低い結晶粒が存在することを考慮し、転位源としての粒界の役割を考慮した新たな臨界分解せん断応力(CRSS)モデルを提案する。以上のモデルに基づくマルチスケール転位-結晶塑性FEM解析を初期平均粒径および初期転位密度の異なるFCC多結晶体に対して実施し、強ひずみ加工のみが施されたUFGM、微細粒焼鈍材および通常粒金属のそれぞれに特有な力学挙動を数値解析的に再現する。

加えて、Bimodal構造を有するFCC微細粒焼鈍材に対しても本モデルを適用して数値解析を実施し、微細粒と混在させる粗大粒の粒径比の違いや、粗大粒に導入する結晶方位の違いが、Bimodal金属の力学特性に及ぼす影響について検討する。

3. 研究の方法

(1) 転位密度の定義

GN転位密度テンソル $\alpha^{(\alpha)}$ およびGN不適合度テンソル $\eta^{(\alpha)}$ の定義は、当研究グループが既報で提案したものをを用いる。すなわち、

$$\alpha^{(\alpha)} = \frac{1}{b} \mathbf{P}^{(\alpha)} \times \nabla \gamma^{(\alpha)} \dots\dots\dots(1)$$

$$\eta^{(\alpha)} = \frac{l^{(\alpha)}}{b} \mathbf{P}_s^{(\alpha)} \times (\nabla \gamma^{(\alpha)} \otimes \nabla) \dots\dots\dots(2)$$

である。ここで、 $(\)^{(\alpha)}$ はすべり系 α に関する量であり、 $\gamma^{(\alpha)}$ はすべり、 b はBurgersベクトルの大きさ、 $l^{(\alpha)}$ は最隣接転位間距離を表し、

$\mathbf{P}^{(\alpha)}$ はすべり方向ベクトル $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ およびすべり面の法線ベクトル $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ を用いて $\mathbf{P}^{(\alpha)} \equiv \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)}$ で定義される。なお、 $\mathbf{P}_s^{(\alpha)}$ は $\mathbf{P}^{(\alpha)}$ の対称部分(Schmidテンソル)である。一方、GN不適合度テンソルのノルム $\rho_\eta^{(\alpha)}$ で表される転位対のうち、動的回復により対消滅を起こした転位密度 $\rho_R^{(\alpha)}$ は次のように表される。

$$\rho_R^{(\alpha)} = 4f y_c^2 \rho_\eta^{(\alpha)^2} \quad (\rho_R^{(\alpha)} \leq \rho_\eta^{(\alpha)}) \dots\dots\dots(3)$$

ここで、 f は対消滅の空間頻度を表す数値係数、 y_c は転位対の消滅距離である。動的回復を考慮した全転位密度は、転位密度の初期値 $\rho_0^{(\alpha)}$ 、 $\alpha^{(\alpha)}$ のノルム $\rho_G^{(\alpha)}$ ならびに上述の $\rho_\eta^{(\alpha)}$ および $\rho_R^{(\alpha)}$ を用いて次式のように表せる。

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

(2) 転位-結晶塑性モデル

微細粒焼鈍材には、転位密度が極めて低い結晶粒が存在するが、これらの粒では塑性変形の素因となる転位の枯渇から、CRSSが変形の初期段階において一時的に増加することが予想され、粒界が転位源の役割を果たすと考えられている。そこで、転位源の位置が粒界上から粒内に遷移するときの転位密度(臨界転位密度) ρ_k を用いて、従来のCRSSモデルを以下のように拡張する。

$$g^{(\alpha)} = \left\{ \begin{array}{l} g_k = k_0 + \frac{\mu \tilde{b}}{\lambda d} \quad ; (\rho^{(\alpha)} < \rho_k) \\ \tau_r^{(\alpha)} + \sum_{\beta} \Omega^{(\alpha\beta)} a \mu \tilde{b} \sqrt{\rho^{(\beta)}} \quad ; (\rho_k \leq \rho^{(\alpha)}) \end{array} \right\} \dots\dots\dots(5)$$

$$\rho_k = \kappa / (3d^2) \dots\dots\dots(6)$$

ここで、 $g^{(\alpha)}$ は流れ応力、 g_k は粒界転位源を活動させるために必要なせん断応力、 k_0 は粒径非依存のすべり抵抗、 μ は横弾性係数、 λ は粒界転位源の長さとの比を表す数値係数、 d は粒径、 $\tau_r^{(\alpha)}$ は参照せん断応力、 $\Omega^{(\alpha\beta)}$ は転位の相互作用行列、 a は0.1のオーダーの数値係数および κ は粒内転位源の数を表す数値係数である。式(5)において $\rho^{(\alpha)} = \rho_k$ のときの流れ応力を $g_0^{(\alpha)}$ とし、 $g_k > g_0^{(\alpha)}$ となるように λ を決定することで、粒内転位源の枯渇に起因するCRSSの増加を表現できる。また、式(5)₁および式(6)から g_k および ρ_k の値は粒径に依存するため、式(5)より降伏応力の粒径依存性が表現される。

(3) 均質化理論

物質速度 \mathbf{v} を次式のように分解できるものとする。

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}^0 + \mathbf{v}^* \dots\dots\dots(7)$$

ここで $(\)^0$ および $(\)^*$ は、それぞれマクロ成分

およびそれからのじょう乱成分を表す。このじょう乱成分はマイクロ構造の不均一性に起因しており、特性速度 $\chi_i^{(kl)}$, ϕ_i およびマクロな変形速度 D_{kl}^0 を用いることで、次式のように表せる。

$$v_{i,j}^* = -\chi_{i,j}^{(kl)} D_{kl}^0 + \phi_{i,j} \dots \dots \dots (8)$$

式(8)において特性変位速度 ϕ_i が現れることに留意すれば、従来の均質化法の手順と同様にして、マクロ構造における均質化結晶塑性構成式が導出される。

4. 研究成果

(1) 微細粒焼鈍材に対する考察

マクロな解析対象はアスペクト比3の長方形Al平板(図1(a))とし、板幅に形状初期不整を導入する。また、マクロな変形の対称性を仮定してモデルの1/4のみを解析し、長手方向に強制引張変位を与える。一方、ユニットセル(図1(b))は25個の結晶粒からなる正方形多結晶平板とし、周期境界条件を適応する。ユニットセルにおいては、FCC結晶の12すべり系を全て考慮し、各粒の初期方位は図1(c)に示すようにランダムに与える。このユニットセルをマクロ構造の各積分点に割り当て、擬似3次元マイクロ-マクロ連成FEM解析を平面ひずみ条件下で実施する。数値パラメータは $f=1000$, $y_c=1\text{nm}$, $\tau_r^{(a)}=15\text{MPa}$, $a=0.1$, $\kappa=300$, $\lambda=0.18(=1/5.5)$ および $k_0=20\text{MPa}$ である。初期平均粒径および初期転位密度については、表1に示す値を用いる。 $\bar{d}=0.27\mu\text{m}$ の場合には、強ひずみ加工のみが施されたUFGMであることを想定し、初期転位密度には十分高い値を

表1 初期粒径および初期転位密度

Type of metals	Initial mean grain size [μm]	Initial dislocation density [μm^{-2}]
As-plastically deformed type	0.27	1800
Annealed fine-grained type	0.40	60
	0.66	36
	1.2	12
Usual grain size type	10	6.0

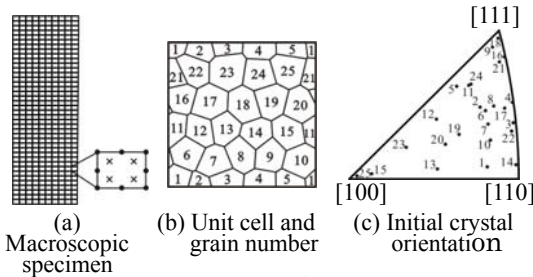


図1 解析モデル

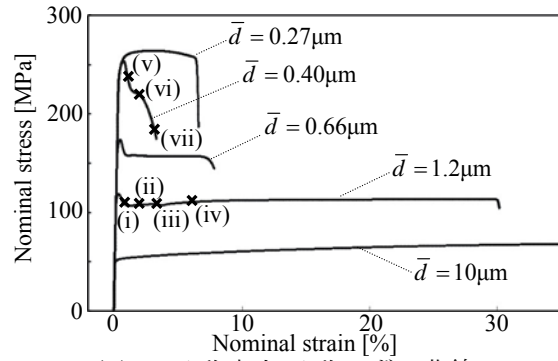


図2 公称応力-公称ひずみ曲線

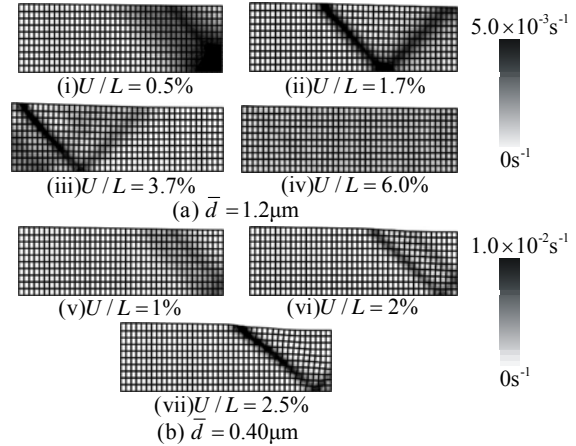


図3 相当塑性ひずみ速度分布

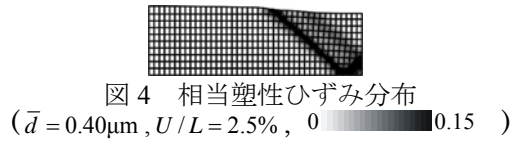


図4 相当塑性ひずみ分布

($\bar{d}=0.40\mu\text{m}$, $U/L=2.5\%$, $0 \sim 0.15 \text{ s}^{-1}$)

与える。一方、 $\bar{d} \geq 0.40\mu\text{m}$ の場合には焼鈍処理が施されているとし、初期転位密度の値は粒径の増加に伴って減少するように与えている。なお、各粒径に対応する g_k および ρ_k の値は式(5)₁と式(6)より算出する。

図2は、引張試験を想定した本解析から得られた各粒径に対応する試験片の公称応力-公称ひずみ曲線である。図2を見ると、粒径のサブミクロン化に伴う初期降伏応力の増加および延性の急激な低下といった寸法効果が再現されている。さらに微細粒焼鈍材である $\bar{d}=0.40\sim 1.2\mu\text{m}$ の曲線に注目すると、降伏点降下現象が再現されていることがわかる。これは式(5)を用いることで、変形初期では転位の枯渇から流れ応力が高くなり、その後粒内の転位密度が臨界転位密度に達することで流れ応力が減少することに起因すると考えられる。一方、強ひずみ加工のみが施されたUFGMである $\bar{d}=0.27\mu\text{m}$ および通常粒金属である $\bar{d}=10\mu\text{m}$ の曲線では降伏点降下は発現していない。これらの場合、粒内の初

期転位密度が臨界転位密度を超えており、通常のFCC金属と同様の曲線が得られると考えられる。さらに、実験結果と同様に、 $\bar{d}=0.40\mu\text{m}$ の場合に比べて $\bar{d}=0.27\mu\text{m}$ の場合の方が材料の延性が向上していることも確認できる。

図3は、図2における(i)~(vii)の伸び率に対応する試験片内の相当塑性ひずみ速度分布である。 $\bar{d}=1.2\mu\text{m}$ の場合には、降伏点降下が発現した直後に変形の局所化領域が引張方向へ伝ばしていることが確認できる(図3(a)-(i)~(iii))。この領域が材料全体を伝ばし終わると、図3(a)-(iv)のように相当塑性ひずみ速度は試験片内においてほぼ一様となり、その後均一に塑性変形が進行する。この現象は、BCC焼鈍材において観察されるLüders帯の伝ばと類似した現象である。一方、 $\bar{d}=0.40\mu\text{m}$ の場合にはLüders帯の伝ばは見られず、降伏点降下が発現した直後に材料は塑性不安定状態に陥り、塑性変形の局所化が起こっていることがわかる(図3(b))。図4は、図2における(vii)の伸び率に対応する試験片内の相当塑性ひずみ速度分布である。図4では、試験片を横断する明瞭なせん断帯が形成されていることが確認できる。このせん断帯の発現により、 $\bar{d}=0.40\mu\text{m}$ の場合には変形の早い段階で試験片は同領域において破断に至ることが予測できる。

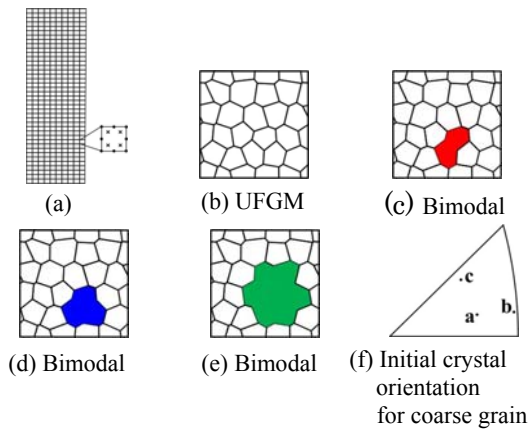


図5 解析モデル(Bimodal)

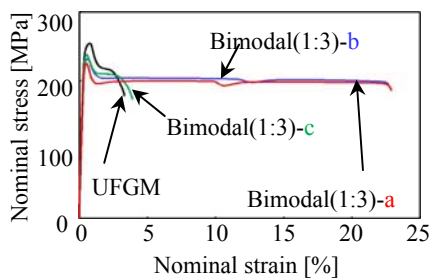


図6 公称応力-公称ひずみ曲線の方位依存性

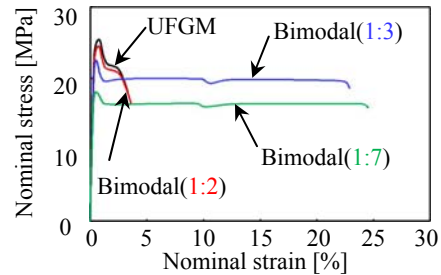


図7 公称応力-ひずみ曲線の粒径比依存性

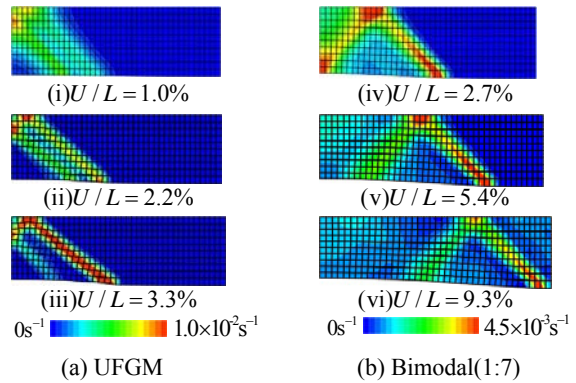


図8 相当塑性ひずみ速度分布の相違

(2) Bimodal構造に対する考察

マクロな解析対象はアスペクト比3の長方形Al平板[図5(a)]とし、マクロ変形の対称性を仮定して試験片の1/4に長手方向への強制引張変位を与えた平面ひずみ問題を考える。UFGMのユニットセル[図5(b)]は25個の結晶粒からなる正方形多結晶平板とし、周期境界条件を適応する。一方、Bimodal金属のユニットセルは、UFGMのユニットセルにおける複数の結晶粒を1つの粗大粒と想定し、微細粒と粗大粒の面積比は、図5(c)~(e)に示すように1:2, 1:3, 1:7の3通りを考える。また、初期結晶方位はUFGMおよびBimodal金属の微細粒にはFCC結晶の12すべり系を考慮した結晶方位をランダムに与え、Bimodal金属の粗大粒には図5(f)のa~cのいずれかを与える。これらのユニットセルをマクロ構造の各積分点に割り当て、マイクロ-マクロ連成FEM解析を行う。数値パラメータは $f=1000$, $y_c=1\text{nm}$, $k_0=20\text{MPa}$, $\lambda=0.18$, $\tau_r^{(a)}=12\text{MPa}$, $a=0.1$, および $\kappa=300$, である。初期平均粒径 \bar{d} および初期転位密度 ρ_0 については、延性の低い微細粒焼鈍材を想定し、 $\bar{d}=0.4\mu\text{m}$ および $\rho_0^{(a)}=5.0\mu\text{m}^{-2}$ とする。

図6は図5(b)および図5(d)のユニットセルを用いた解析に対する公称応力-公称ひずみ曲線である。ここで、Bimodal(1:3)-aの曲線は図5(d)の粗大粒に図5(f)におけるaの結晶方位を与えた解析結果を表しており、Bimodal(1:3)-bおよびBimodal(1:3)-cの曲線も同様である。図6を見ると、Bimodal(1:3)-cの曲線がUFGMよりも延性が低い一方で、

Bimodal(1:3)-a および b では延性が大きく向上している。このように、粗大粒に与える結晶方位により Bimodal 金属の延性が大きく異なることが予想される。図 7 は図 5(b)~(e) のユニットセルを用いた解析に対する公称応力-公称ひずみ線図である。なお、この解析では、いずれのユニットセルの粗大粒においても、先ほどの解析で高い延性を示した図 5(f)における a の結晶方位を与えている。図 7 を見ると、Bimodal(1:2)を除いた Bimodal 金属が高い延性を示しているが、Bimodal(1:7)の場合には降伏強度が低下する。図 8 は図 7 の各伸び率に対応した試験片内の相当塑性ひずみ速度分布であり、図 8(a)および(b)はそれぞれ UFGM および Bimodal(1:7)の分布図である。図 8 を見ると、UFGM の場合には降伏点降下が発現した直後に塑性不安定状態に陥り、塑性変形の局所化が起こっていることがわかる。一方で、Bimodal(1:7)では、変形の局所化領域が引張方向へ伝ばしていることが確認できる。この現象は、BCC 焼鈍材において観察される Lüders 帯の伝ばと類似した現象である。この Lüders 帯の伝ばは、粒径が1~4 μm 程の FCC 微細粒焼鈍材で発現することは実験的に報告されているが、サブミクロン粒 $\bar{d}=0.4\mu\text{m}$ で観察された例はほとんどない。

(3) 研究成果のまとめ

本研究において得られた主な成果は以下のとおりである。このような超微細粒金属における粒径依存の特異な力学挙動を、一つの材料モデルに基づいて系統的に再現することを可能にしたのは、本研究が初めてである。

- ・本トリプルスケールモデルを用いることで、粒径が通常粒から超微細粒サイズに至る広い範囲にある FCC 金属の力学特性を統一的に表現できる。
- ・転位源としての粒界の役割を考慮した CRSS モデルにより、FCC 微細粒焼鈍材に発現する降伏点降下現象および Lüders 帯の伝ばを再現できる。
- ・導入する粗大粒の結晶方位によって Bimodal 金属の延性は大きく異なる。
- ・微細粒と粗大粒の面積比が1:3程度であるときに、強度をほとんど損なわずに最も延性を改善できる。

(4) 今後の課題

本研究は、微細粒焼鈍材の力学挙動に対する粒径依存性の再現について定性的にも定量的にも一定の成功を収めていると言える。

一方、Bimodal 構造を有する超微細粒金属については、ユニットセル内に配置する合計の結晶粒数を現在の2倍以上に増加させ、粗大粒の体積分率の相違がマクロ挙動に与える影響についても今後詳細に調査する必要がある。ただし、単に粒数を増やすだけでは膨大な計算コストの増加を招くため、クラス

タ計算機のノード数増加等さらに並列化処理を強化していく必要がある。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計3件)

① Aoyagi, Y., Shimokawa, T., Shizawa, K. and Kaji, Y., Simulation on Nanostructured Metals Based on Multiscale Crystal Plasticity Considering Effect of Grain Boundary, Materials Science Forum, 706-709, 2012, 1751-1756.

② 黒澤瑛介, 青柳吉輝, 只野裕一, 志澤一之, FCC 超微細粒焼鈍材の降伏点降下現象に関するトリプルスケール転位-結晶塑性シミュレーション, 日本機械学会論文集 A 編, 76-772, 2010, pp.1547-1556.

③ 黒澤瑛介, 青柳吉輝, 只野裕一, 志澤一之, トリプルスケール結晶塑性モデリングおよび結晶粒微細化に伴う寸法効果に関するシミュレーション, 日本機械学会論文集 A 編, 76-764, 2010, pp. 483-492.

[学会発表] (計11件)

① 志澤一之, 小野貴裕, Bimodal 構造を有する FCC 超微細粒焼鈍材の特異な力学特性に関するマルチスケール結晶塑性シミュレーション, 日本学術会議第 61 回理論応用力学講演会(招待講演), 2012年3月8日, 東京大学(東京都).

② 石樽達也, 小野貴裕, 志澤一之, Bimodal 構造を有する超微細粒金属の力学特性に関するトリプルスケール転位-結晶塑性解析, 日本機械学会第24回計算力学講演会, 2011年10月9日, 岡山大学(岡山市).

③ 小野貴裕, 黒澤瑛介, 志澤一之, FCC 微細粒焼鈍材のリュースダース帯の伝ばに関するトリプルスケール転位-結晶塑性解析, 日本計算工学会第16回計算工学講演会, 2011年5月24日, 東京大学(柏市).

④ 志澤一之, 材料強度の粒径依存性に関するマルチスケール結晶塑性シミュレーション, 日本材料学会第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(招待講演), 2011年5月24日, 大阪大学(吹田市).

⑤ Aoyagi, Y., Shimokawa, T., Shizawa, K. and Kaji, Y., Simulation on Nanostructured Metals Based on Multiscale Crystal Plasticity Considering Effect of Grain Boundary, International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials (invited lecture), August 5, 2011, Quebec (Canada).

⑥ Kondo, R., Tadano, Y. and Shizawa, K., GN Dislocation-crystal Plasticity Simulation on Fine-graining of Magnesium Based on Deformation Twinning, The 17th International Symposium on Plasticity and Its Current Applications, January 4, 2011, Puerto Vallarta (Mexico).

⑦ 小野貴裕, 黒澤瑛介, 青柳吉輝, 志澤一之, 超微細粒金属の力学特性に関する擬似3次元トリプルスケール転位-結晶塑性解析, 日本機械学会第23回計算力学講演会, 2010年9月24日, 北見工業大学(北見市).

⑧ 黒澤瑛介, 小野貴裕, 志澤一之, FCC超微細粒金属の加工硬化特性に関するトリプルスケール転位-結晶塑性解析, 日本計算工学会第15回計算工学講演会, 2010年5月27日, 九州大学(福岡市).

⑨ Kurosawa, E., Aoyagi, Y. and Shizawa, K., A Triple-Scale GN Dislocation-Crystal Plasticity Simulation on Mechanical Properties of Ultrafine-Grained Metal, The 16th International Symposium on Plasticity and Its Current Applications, January 7, 2010, St. Kitts (Commonwealth realm).

⑩ 黒澤瑛介, 青柳吉輝, 志澤一之, 超微細粒金属の加工硬化特性に関するトリプルスケールGN転位-結晶塑性シミュレーション, 日本機械学会第22回計算力学講演会, 2009年10月11日, 金沢大学(金沢市)

⑪ 黒澤瑛介, 青柳吉輝, 志澤一之, FCC超微細粒焼鈍材の微視的降伏挙動に関するトリプルスケール結晶塑性シミュレーション, 日本学術会議第58回理論応用力学連合講演会, 2009年6月10日, 日本学術会議(東京都).

6. 研究組織

(1)研究代表者

志澤 一之 (SHIZAWA KAZUYUKI)
慶應義塾大学・理工学部・教授
研究者番号：80211952

(2)研究分担者

青柳 吉輝 (AOYAGI YOSHITERU)
独立法人日本原子力研究開発機構・原子力
基礎工学研究部門・研究員
研究者番号：70433737

(3)連携研究者

該当なし