

## 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 5日現在

機関番号：13901

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2010～2011

課題番号：22760074

研究課題名（和文）

転位の長距離力を直接導入したマイクロ・ナノ塑性理論の構築と検証

研究課題名（英文）

Theoretical development for micro- and nano-scale plasticity that takes account of long range force of dislocations and its verification

研究代表者

奥村 大 (OKUMURA DAI)

名古屋大学・工学研究科・講師

研究者番号：70362283

研究成果の概要（和文）：本研究では、離散転位塑性法を用いてラメラ複合材料の塑性寸法効果を解析した。解析手法の妥当性は界面転位を有するラメラ複合材料の解析によって確かめた。解析では、弾性層の厚さと剛性だけでなく弾塑性層間のすべり面のずれをパラメータとして考えた。結果として、弾性層が数十ミクロンの場合には、弾塑性層のひずみ硬化はすべり面ずれに強く影響を受け、この影響は隣接弾塑性層内の堆積転位によって生じる長距離力によるものであることがわかった。

研究成果の概要（英文）：In this study, plastic size effects of lamellar composites were analyzed using a discrete dislocation plasticity approach. The present approach was verified by analyzing a model lamellar composite including edge dislocations fixed at interfaces. In analyses, the thickness and the stiffness of elastic layers as well as the slip plane gap between elastic-plastic layers were considered as parameters. It was thus found, in the case where elastic layer's thickness is several dozen nm, that strain hardening in elastic-plastic layers depends considerably on the slip plane gap between elastic-plastic layers, and that this effect is attributed to the long range stress due to dislocation pile-ups in adjacent elastic-plastic layers.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	2,300,000	690,000	2,990,000
2011年度	900,000	270,000	1,170,000
総計	3,200,000	960,000	4,160,000

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：塑性、転位、材料強度、離散転位塑性法、ひずみこう配理論

## 1. 研究開始当初の背景

マイクロ～ナノ領域の塑性変形を解析するためには、現状において主にふたつの方法、すなわち、離散転位動力学法と非局所塑性理論に基づく方法がある。これらの方法を用いて解析を行えば、マイクロ・ナノマシンに用いられる超微小機械要素や超微細粒多結晶金属の高精度な変形・強度の評価が可能になるだけでなく、これらの材料の有するスケ-

ル依存性の発現機構に関する統一的な解明も期待される。したがって、世界中の関心を集めてこれらの研究は進められており、著者らの仕事も含めて、今も数多くの論文が発表されてきている。しかしながら、次に述べるように、どちらについても本質的に解決しがたい問題を抱えている。

まず離散転位動力学法では、物体中のすべての転位の運動（移動や生成、消滅など）が

あらかじめ想定される規則に基づいて解析され、転位の移動にもなつてすべり変形が、その存在によって弾性場がそれぞれ生じる。一本一本の転位の運動を直接解析するわけであるから、この方法はマイクロ・ナノ領域の塑性変形を高精度に解析しうるポテンシャルを有している。しかしながら、転位同士の相互作用力の計算は極めて膨大となり、得られる結果は転位の運動規則やその定数の設定に強く依存する。さらに、転位の生成や消滅を解析するため、増分計算の時間幅をピコ秒オーダーの非常に小さな値にしなければならない。

つづいて非局所塑性理論では、寸法依存性を引き起こす主要な要因のひとつと考えられる幾何学的に必要な転位 (GN 転位) の影響にのみ着目し、GN 転位の弾性場が作る自由エネルギーを考慮することによって、従来の塑性理論が熱力学的に整合するような形で拡張される。したがって、依然として連続体塑性理論の枠組みに属しており、離散転位動力学法のようにすべての転位の運動に対して解析を必要としない点において優れている。しかしながら、自由エネルギーを表す関数の決定には、理想的な場合を除いて、現象論的なモデル化に頼るほかない。また、GN 転位の弾性場の影響は、拡張された降伏条件に含まれることによってのみ影響を及ぼし、元々の弾性場が満足すべき応力のつり合いとは独立している。すなわち、非局所塑性理論において、GN 転位の弾性場が作る長距離力は必ずしも正しく考慮されていない。

## 2. 研究の目的

そこで本研究では、前章にて述べた従来研究の問題点をふまえ、非局所塑性理論の枠組みの上に、離散転位動力学法の考え方に基づいて GN 転位による弾性場を直接的に導入することを考え、マイクロ～ナノ領域における塑性理論を構築することを目的とした。この理論構築では、従来の非局所塑性理論において GN 転位の影響のモデル化が現象論的であったり、長距離力が正しく導入されていないという問題や、離散転位動力学法における計算コストや時間スケールの問題はいずれも回避されることが期待される。この目的を達成するために、離散転位塑性法を用いてラメラ複合材料の解析を実施し、界面に堆積する GN 転位の果たす役割を調べた。第3章では解析モデルと解析方法について、第4章では解析結果と今後の展望について述べる。

## 3. 研究の方法

ラメラ複合材料の解析には、著者らによって構築された周期均質化と重ね合わせ法を組み合わせた離散転位塑性法を用いた。この方法は、周期単位や代表体積要素の解析によ

って、効率的にマイクロとマクロの連成解析を実施できる利点を有している。はじめに、解析方法の妥当性を調べるために、界面転位を有するラメラ複合材料の解析を行う。つづいて、界面に堆積する転位が塑性寸法効果に及ぼす影響を調べるために、ラメラ複合材料は弾性層と弾塑性層で構成されるとして、弾性層の厚さと剛性、弾塑性層間のすべり面のずれをそれぞれパラメータとして解析を行う。結果の分析では、転位の作る微視的応力場と弾塑性層の巨視的なひずみ硬化特性の対応関係に着目する。

## 4. 研究成果

### ① 解析方法の検証

図1はラメラ複合材料の周期単位中で界面に転位が固定されている場合に転位を作る自己応力場の解析結果を表している。周期単位の長さは縦横どちらも800nmであり、ふたつの材料の間のヤング率比は3としている。図1aはネットバーガースペクトルが零の場合の結果であり、図1bは零ではない場合の結果である。この図はネットバーガースペクトルが零でない場合には、周期単位の角部に不自然な応力が発生してしまうことを示している。したがって、離散転位塑性法を用いた解析では、ネットバーガースペクトルが零に保存されるように解析条件に対して注意しなければならない。

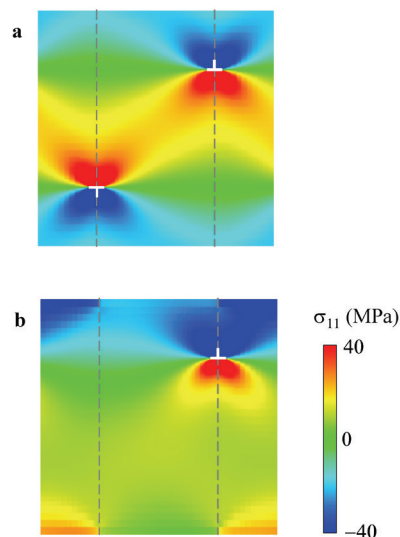


図1 界面転位による微視的応力分布

図2は解析解との比較であり、図2aと図2bの横軸の方向は図1の周期単位の右上にある界面転位からそれぞれ水平左方向、鉛直下方向にそれぞれ対応している。解析解ではふたつの材料が結合された無限体が考えられており、この点に関して解析モデルと条件が異なり、結果として、横軸が200nmより大



って、転位源には負のせん断応力、すなわち背応力が強く作用することを示している。弾性層の厚さが 400nm の場合には、背応力はすべり面のずれに依存せず、したがって、弾塑性層のひずみ硬化もすべり面のずれには依存しないといえる。これに対して、弾性層の厚さが 40nm の場合には、すべり面のずれが大きくなるとともに、背応力が大きくなるのがわかる。

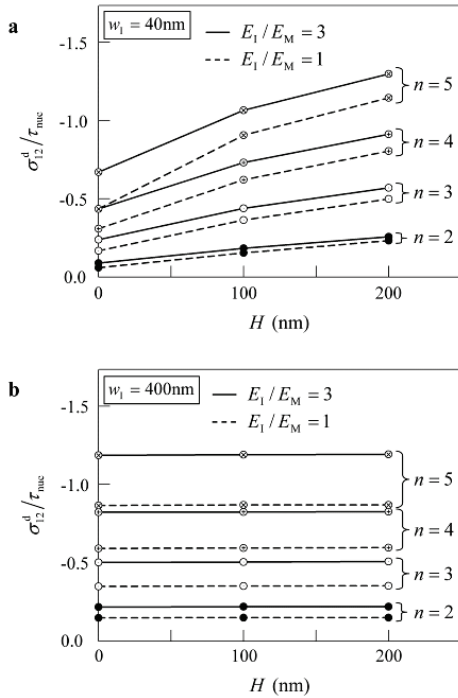


図5 転位源に作用する転位の長距離力

さらに詳細に考察するために、図6には、転位源から4つめの転位が放出される直前の周期単位内における  $\sigma_{12}^d$  の分布をそれぞれ示す。この図からわかるように、界面に堆積する転位は、その後方には負のせん断応力（背応力）を発生させ、その前方には正のせん断応力を発生させる。また、その影響は堆積する方向に対して強い指向性を持っている。図6cと図6dは弾性層の厚さが 400nm の場合の結果であり、正のせん断応力は弾性層内に作用し、隣の弾塑性層にほとんど影響を与えていないことがわかる。したがって、弾塑性層のマイクロ・マクロ応答はすべり面のずれに依存しない。これに対して、図6aと図6bは弾性層の厚さが 40nm の場合の結果であり、弾性層が薄いため、正のせん断応力は隣の弾塑性層に影響を及ぼしていることがわかる。この正のせん断応力は、すべり面のずれが大ききとき ( $H=200\text{nm}$ ) には、転位源にはほとんど影響を与えず、弾塑性層内のせん断応力の上昇に寄与させている。一方、ずれが小さいとき ( $H=0\text{nm}$ ) には、この正のせん断応力は背応力を、積極的に打ち消し、

弱めるように作用している。この結果として、弾塑性層が薄い場合には、隣接する弾塑性層間のすべり面のずれに顕著に依存したマイクロ・マクロ応答が現れる。

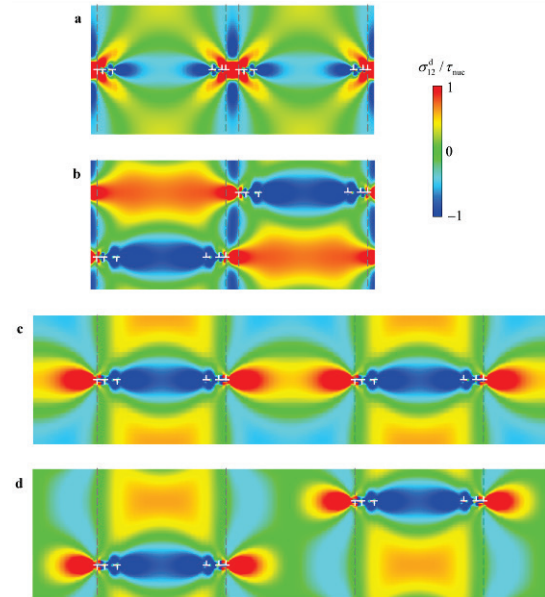


図6 長距離力  $\sigma_{12}^d$  の分布 ( $E_1/E_M=3$ )

### ③ 今後の課題と展望

本研究で得られた結果は、非常に単純化されたモデルの解析によるものであるが、サブミクロン寸法の塑性変形を考えるときに起こりうることである。今後の課題としては、弾塑性層間の結晶方位差の導入や、解析領域を大きくするための計算効率の改善などがあげられる。計算機の性能向上を期待するとともに、これらの課題を解決し、当初の目的の達成に向けて引き続き研究を進めたい。

### 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6件)

- ① R. Kametani, K. Kodera, D. Okumura, N. Ohno, Implicit iterative finite element scheme for a strain gradient crystal plasticity model based on self-energy of geometrically necessary dislocations. Computational Materials Science, 査読有, Vol. 53 (2012), pp. 53-59, DOI: 10.1016/j.commatsci.2011.08.029.
- ② D. Okumura, N. Ohno, and K. Yamaguchi, Plastic size effect analysis of lamellar composites using a discrete dislocation plasticity approach. International Journal of Plasticity, 査読有, Vol. 27 (2011), pp. 2040-2055、

DOI: 10.1016/j.ijplas.2011.04.003.

- ③ 奥村 大, 大野信忠, 離散転位塑性法を用いたラメラ複合材料の均質化解析. 計算数理工学レビュー, 査読無, No. 2011-1 (2011), pp.13-19.

[学会発表] (計10件)

- ① 半谷敏規, 奥村大, 大野信忠, 離散転位塑性法を用いたすべり系間相互作用のミクロ・マクロ解析. 日本機械学会東海支部講演会, 3月15日~16日(2012), 名古屋工業大学, 名古屋.
- ② 奥村大, 大野信忠, 山口浩史, 半谷敏規, 離散転位法を用いた塑性寸法効果のミクロ・マクロ解析. 第24回計算力学講演会 (CMD2011), 10月8日~10日(2011), 岡山大学, 岡山.
- ③ D. Okumura, N. Ohno, K. Yamaguchi, Plastic size effect analysis of lamellar composites using discrete dislocation plasticity and periodic homogenization. 12th International Symposium on Physics of Materials (ISPM12), Sep. 4 - 8 (2011), Prague, Czech.
- ④ D. Okumura, N. Ohno, K. Yamaguchi, Micro/macro analysis of lamellar composites using discrete dislocation plasticity and periodic homogenization. 2nd International Conference on Material Modelling (ICMM2), Aug. 31 - Sep. 2 (2011), Paris, France.
- ⑤ 奥村大, 大野信忠, 離散転位塑性法を用いた塑性寸法効果の解析. 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, 5月23日~24日(2011), 大阪大学, 大坂.
- ⑥ 山口浩史, 奥村大, 大野信忠, 微細層状組織内における塑性挙動の離散転位動力学解析. 第23回計算力学講演会 (CMD2010), 9月23日~25日(2010), 北見工業大学, 北海道.
- ⑦ 奥村大, 山口浩史, 大野信忠, 均質化理論を用いた転位動力学解析におけるネットバーガスベクトルの影響. 第23回計算力学講演会 (CMD2010), 9月23日~25日(2010), 北見工業大学, 北海道.

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

奥村 大 (OKUMURA DAI)  
名古屋大学・工学研究科・講師  
研究者番号: 70362283

### (2) 研究分担者なし

### (3) 連携研究者なし