

特集記事 • 15

鉄鋼におけるマルチスケール・マルチフィジックス計算材料科学

マルチスケールおよびマルチフィジックス
結晶塑性解析

Multiscale and Multiphysics Crystal Plasticity Analysis

志澤一之

Kazuyuki Shizawa

慶應義塾大学理工学部
教授

1 はじめに

計算機の飛躍的な進歩に伴って、材料科学で得られた材料のミクロ挙動に関する知見をマクロな固体力学に取り込むと同時に、固体力学から得られるマクロな変形場の情報を材料科学に戻すことによって材料のミクロ挙動を進展させるというマクロ-ミクロ連成解析に関する研究が、20年ほど前から盛んに行われるようになった^{1,2)}。この手法は、材料の異なる階層（スケール）で発現する現象を互いに関連づけて解析を進めるため、マルチスケール解析などと呼ばれている。また、ミクロな材料組織形成（転位組織形成、再結晶現象など）の挙動は、通常マクロな変形場の力学とは別の支配方程式によって記述されるため、変形場と組織形成場を連成して解析することが多い。これは異なる物理現象を支配する方程式系を連立して解析を進めるため、マルチフィジックス解析と呼ばれている。

そこで本稿では、転位挙動に基づく結晶塑性モデルの成り立ちについて述べるとともに、その加工硬化係数の転位密度依存性を介したマルチスケール解析およびマルチフィジックス解析について解説する。その際、簡単化のためFCC結晶を例にとり、巨大ひずみ付与によるCu多結晶の結晶粒微細化過程^{3,4)}を本モデルに基づく数値シミュレーションによって再現した結果を紹介する（超微細粒FCC金属は鉄鋼に代わる超高強度軽量構造材料）。結晶粒微細化は転位セルやサブグレインなどの転位組織形成を表現する転位の反応-拡散モデル（自己組織化モデル）と結晶の変形場を扱う結晶塑性モデルとを連成させるため、マルチスケールかつマルチフィジックスな解析の一例であると言える。

2 転位挙動に基づく結晶塑性モデル

本章では転位挙動に基づく結晶塑性モデル（以降、転位-結晶塑性モデルと略記）の概要をまとめておく⁵⁾。結晶塑性論における弾粘塑性構成式は

$$\overset{\nabla}{T} = C^e : D - C^e : \sum_{\alpha} (s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)})_s \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad \dots\dots\dots (1)$$

のように書ける。ここで、 D は変形速度テンソル、 $s^{(\alpha)}$ はすべり方向ベクトル、 $m^{(\alpha)}$ はすべり面の法線方向ベクトル、 $(\)_s$ は2階のテンソルの対称部分であり、また C^e は異方性弾性係数である。なお、 $\overset{\nabla}{T}$ はCauchy応力の共回転速度であり、下部構造スピン $W^* = W - W^p$ を用いて、

$$\overset{\nabla}{T} \equiv \dot{T} - W^* T + T W^* \quad \dots\dots\dots (2)$$

のように具体化される。ここで、 W は連続体スピンおよび W^p は塑性スピンであり、 W^p はすべり速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ および結晶基底ベクトル $s^{(\alpha)}$ および $m^{(\alpha)}$ を用いて

$$W^p \equiv \sum_{\alpha} (s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)})_A \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad \dots\dots\dots (3)$$

と表される。ここで、 $(\)_A$ は2階のテンソルの反対称部分を意味する。一方、Pan-Rice形のすべり速度硬化則⁶⁾は、参照すべり速度 $\dot{\gamma}_0^{(\alpha)}$ 、流れ応力 $g^{(\alpha)}$ および分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)} = T \cdot (s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)})$ を用いて

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0^{(\alpha)} \operatorname{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{\frac{1}{m}} \quad \dots\dots\dots (4)$$

にて与えられる。ここで、 m はひずみ速度感度指数であり、流れ応力の発展式 $g^{(\alpha)}$ は、すべり系の相互作用を考慮した硬化係数 $h^{(\alpha\beta)}$ を用いて

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h^{(\alpha\beta)} \left| \dot{\gamma}^{(\beta)} \right| \dots\dots\dots (5)$$

のように表される。硬化係数 $h^{(\alpha\beta)}$ に転位蓄積の情報を導入するために、Bailey-Hirschの式に時間微分を施し、Orowanの式などを適用した結果と式(5)を比較すれば、硬化係数と転位密度の関係が⁸

$$h^{(\alpha\beta)} = \frac{1}{2} \frac{a c \mu \Omega^{(\alpha\beta)}}{L^{(\beta)} \sqrt{\rho^{(\beta)}}} \dots\dots\dots (6)$$

のように得られる²⁾。ここで、 a は0.1のオーダの数値係数、 c は1のオーダの数値係数、 μ は横弾性係数、 $L^{(\alpha)}$ は転位の平均飛行距離である。また、 $\Omega^{(\alpha\beta)}$ の成分は文献²⁾に示されているとおりであり、すべり系間の転位相互作用を表す行列である。さらに、 $\rho^{(\beta)}$ はすべり系 β に蓄積した転位密度であり、ここでは加工硬化に影響を与える転位は不動転位のみとみなし、後述の反応-拡散方程式で求められる不動転位密度 $\rho_i^{(\beta)}$ のみを $\rho^{(\beta)}$ に適用する。ただし、転位パターンが定常化して転位密度の上昇が停止した後は、次式に示す幾何学的に必要な(GN: Geometrically Necessary)結晶欠陥密度 $\rho_{GN}^{(\beta)}$ を $\rho^{(\beta)}$ として採用する。

$$\rho_{GN}^{(\beta)} = \rho_0^{(\beta)} + \rho_{\alpha}^{(\beta)} + \rho_{\eta}^{(\beta)} - \rho_R^{(\beta)} \dots\dots\dots (7)$$

ここで、 $\rho_0^{(\beta)}$ は転位密度の初期値、 $\rho_{\alpha}^{(\beta)}$ はGN転位密度テンソル $\alpha^{(\beta)}$ のノルム、 $\rho_{\eta}^{(\beta)}$ はGN不適合度テンソル $\eta^{(\beta)}$ のノルムおよび $\rho_R^{(\beta)}$ は動的回復によって対消滅した転位対密度であり、 $\alpha^{(\beta)}$ 、 $\eta^{(\beta)}$ および $\rho_R^{(\beta)}$ は次式のように表される⁵⁾。

$$\alpha^{(\beta)} = \frac{1}{\bar{b}} (s^{(\beta)} \otimes m^{(\beta)}) \times \nabla \gamma^{(\beta)} \dots\dots\dots (8)$$

$$\eta^{(\beta)} = \frac{l^{(\beta)}}{\bar{b}} (s^{(\beta)} \otimes m^{(\beta)})_{s \times} (\nabla \gamma^{(\beta)} \otimes \nabla) \dots\dots\dots (9)$$

$$\rho_R^{(\beta)} = 4 f y_c^2 \rho_{\eta}^{(\beta)2} \quad (\rho_R^{(\beta)} \leq \rho_{\eta}^{(\beta)}) \dots\dots\dots (10)$$

ここで、 $\bar{b}$ はBurgersベクトルの大きさおよび $l^{(\beta)}$ は最隣接転位間距離であり、 $l^{(\beta)} = 1/\sqrt{\rho_{\alpha}^{(\beta)}}$ のように与えられる。演算記号 $\times$ は2階のテンソル A および B に対して $(A \times B)_{ij} = A_{ki} B_{mn} e_{ikm} e_{jln}$ という関係を表す。また、 y_c は転位対の消滅距離および f は対消滅の頻度を表す数値係数である。なお、転位の平均飛行距離に関しては様々なモデルが提案されているが、本報では多重すべりに起因する転位の平均飛行距離の減少を表す修正Seegerモデル²⁾を用いる。

$$L^{(\beta)} = \begin{cases} L_0^{(\beta)} & ; \text{Single slip} \\ \frac{\Lambda}{\gamma - (\gamma^* - \Lambda/L_0^{(\beta)})} & ; \text{Multi slip} \end{cases} \dots\dots\dots (11)$$

ここで、 $L_0^{(\beta)}$ は $L^{(\beta)}$ の初期値、 γ は全すべり、 γ^* は二次すべり系の活動が開始する際のすべり値および Λ は材料定数である。

3 転位パターンニングに対する反応-拡散モデル

3.1 反応-拡散方程式

非線形・非平衡動力学における反応-拡散方程式⁷⁾は、可動転位密度 $\rho_m^{(\alpha)}$ および不動転位密度 $\rho_i^{(\alpha)}$ に対して次式のように書ける⁸⁾。

$$\frac{\partial \rho_m^{(\alpha)}}{\partial t} = \bar{\gamma}^{(\alpha)} \{ \nabla \cdot (D_m^{(\alpha)} \nabla \rho_m^{(\alpha)}) - K_0^{(\alpha)} \rho_m^{(\alpha)} + K_1^{(\alpha)} \rho_i^{(\alpha)} - K_3^{(\alpha)} \rho_m^{(\alpha)} \rho_i^{(\alpha)2} \} \dots\dots (13)$$

$$\frac{\partial \rho_i^{(\alpha)}}{\partial t} = \bar{\gamma}^{(\alpha)} \{ \nabla \cdot (D_i^{(\alpha)} \nabla \rho_i^{(\alpha)}) + K_0^{(\alpha)} \rho_m^{(\alpha)} - K_1^{(\alpha)} \rho_i^{(\alpha)} + K_3^{(\alpha)} \rho_m^{(\alpha)} \rho_i^{(\alpha)2} + B_0^{(\alpha)} - B_2^{(\alpha)} \rho_i^{(\alpha)2} \} \dots\dots (13)$$

ここで、 $D_{[n]}^{(\alpha)}$ ($n=m,i$)は転位の易動度を表す拡散係数である。また、 $\bar{\gamma}^{(\alpha)}$ は $\bar{\gamma}^{(\alpha)} \equiv (1/v) \int_V |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| dv$ で表される粒内体積平均値ある。自己組織化現象における散逸構造の形成過程では、外部から系に付加された一様な刺激によって系に存在するわずかなゆらぎが成長し、外部刺激とは異なるスケールの波長をもった空間不均一構造が発現する。ここでは、すべり系の活動状態が一様な外部刺激に相当すると考え、式(12)および式(13)に導入するすべり速度には上述の $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ を採用している。なお、 $\bar{\gamma}^{(\alpha)}$ の値は各粒内で一様であるため、 $\nabla \bar{\gamma}^{(\alpha)} = 0$ が成立するが、粒界を跨ぐ $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ のこう配は考えないものとする。このように、 $\bar{\gamma}^{(\alpha)}$ を用いることにより、活動すべり系($\dot{\gamma}^{(\alpha)} \neq 0$)においてのみ転位密度を変化させることができる。

一方、式(12)および式(13)における $K_0^{(\alpha)}$ 、 $K_1^{(\alpha)}$ および $K_3^{(\alpha)}$ は反応速度係数であり、 $K_0^{(\alpha)}$ 項は林立転位や粒界などの障害物によって可動転位が不動化する過程ならびにダイポールの生成およびLomer-Cottrell固着によって可動転位が不動化する過程を表す。また、 $K_1^{(\alpha)}$ 項はしきい値を超える応力による不動転位の可動化、ダイポールの分解および熱活性に伴うLomer-Cottrell不動転位の崩壊による可動化を表す。さらに、 $K_3^{(\alpha)}$ 項は林立転位などの障害物に可動転位が次々に捕獲されて不動化する過程を示す。なお、 $K_3^{(\alpha)}$ の一部はトライポールの形成を表している⁹⁾。さらに、 $B_0^{(\alpha)}$ 項は転位源から発生した転位による不動転位の線形生成率を、 $B_2^{(\alpha)}$ 項は熱拡散に伴うダイポールの対消滅およびらせん転位の交差すべりに起因する対消滅を表す。

3.2 反応速度係数モデル

転位組織形成においては、反応速度係数の値は材料の力学

的狀態によって変化すると考えられる。そこで、転位のダイナミクスを考慮し、各反応速度係数を次のようにモデル化する。応力の増加に起因する転位密度の上昇によって転位の易動度が減少することを考慮し、分解せん断応力を用いて拡散係数を次式のようにモデル化する⁸⁾。

$$\left. \begin{aligned} D_{[n]}^{(\alpha)} &= D_{[n]\min}^{(\alpha)} \left(\frac{\tau_r^{III}}{\bar{\tau}^{(\alpha)}} \right)^2 & (0 \leq \bar{\tau}^{(\alpha)} \leq \tau_r^{III}) \\ D_{[n]}^{(\alpha)} &= D_{[n]\min}^{(\alpha)} & (\tau_r^{III} < \bar{\tau}^{(\alpha)}) \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (14)$$

ここで、 $D_{[n]\min}^{(\alpha)}$ は $D_{[n]}^{(\alpha)}$ の最小値を、 $\bar{\tau}^{(\alpha)}$ は分解せん断応力の粒ごとの平均値を、 τ_r^{III} は動的回復現象が頻繁に起こる単結晶の3段階硬化におけるステージ III (動的回復段階) が開始する際の分解せん断応力の値を表し、 $\bar{\tau}^{(\alpha)}$ の値が τ_r^{III} を超えると $D_{[n]}^{(\alpha)}$ の値は $D_{[n]\min}^{(\alpha)}$ になる。また、発現する転位パターンの形状は拡散係数比 $d^* = D_i^{(\alpha)} / D_m^{(\alpha)}$ に依存し、そのサイズは拡散係数の大きさに依存することが知られている。式 (14) を用いると、 $\bar{\tau}^{(\alpha)}$ が τ_r^{III} に達するまでは $D_{[n]}^{(\alpha)}$ は減少するものの、 d^* は一定値となり、応力値が増加してもパターン形状は変化せず、サイズのみが減少する。このことは単結晶の3段階硬化におけるステージ II (線形硬化段階) においてセルサイズが応力に反比例して減少することに相当する。その後、 τ_r^{III} に達すると定常パターンが形成される。

次に、二次すべり系の活動開始に伴う転位パターンニングの開始を表現するために、係数 $K_0^{(\alpha)}$ および $K_3^{(\alpha)}$ を転位密度依存形として次のようにモデル化する⁸⁾。

$$K_0^{(\alpha)} = K_0 \frac{\sum \rho_i^{(\beta)} - \rho_i^{(\alpha)}}{\rho_{is}^{(\alpha)}} \dots\dots\dots (15)$$

$$K_3^{(\alpha)} = K_3 \left(1 - \left\langle 1 - e^{-\frac{\sum \bar{\rho}_i^{(\beta)} - \bar{\rho}_i^{(\alpha)}}{\rho_{is}^{(\alpha)}}} \right\rangle \right) \dots\dots\dots (16)$$

ここで、 K_0 および K_3 は参照値であり、 e は数値係数および $\langle \rangle$ はMacaulayの括弧である。これらを用いることによって、二次すべり系の活動に伴う主すべり系における転位の蓄積を表現する $K_0^{(\alpha)}$ 値および $K_3^{(\alpha)}$ 値の上昇が表される。ただし、 $K_0^{(\alpha)}$ には二次すべり系の転位密度の局所的な値が反映されるため、主すべり系と二次すべり系の転位パターンの整合性に寄与するのに対し、 $K_3^{(\alpha)}$ には粒平均値として二次すべり系の転位密度が導入されるため、一つの粒内全域での不動転位の自己触媒反応開始に寄与する。

4 数値シミュレーション

4.1 FEM-FDM連成方法⁸⁾

ここでは、結晶の変形に対してはFEMを適用し、転位パターンニングに対してはFDMを適用してハイブリッド計算を行う。その際に、転位情報を相互にやり取りする必要があるが、FEM要素とFDM格子の対応は図1に示すとおりである。FEM解析における図1 (i) の1つの三角形要素をFDM解析における直交格子上に描けば図1 (ii) のようになる。FDM解析で計算された不動転位密度の情報は図1 (ii) に示す各格子点に与えられる。この情報をFEM解析の要素に受け渡す場合は、FEM解析の1つの要素内に含まれるFDM解析の全ての格子点における不動転位密度の平均値を算出し、その値をその要素の積分点における転位密度の値とする。一方、転位-結晶塑性FEM解析で得られる応力およびすべり速度情報を反応-拡散FDM解析へ与える場合は、対象となる粒内の平均値を求め、その値をFDMの全ての格子点に与える。ただし、計算の簡単化のためFDM格子の変形は考慮せず変形前に一つのFEM要素内に存在していた差分格子点は変形後もそのFEM要素と常に対応させる。

4.2 FEM-FDM連成解析のアルゴリズム⁸⁾

本節では、連成解析を行う際の手順を簡単に紹介する。まず、差分近似を施した反応-拡散方程式を用いたFDM解析から可動転位密度増分および不動転位密度増分を算出し、各転位密度を求める。次に、式 (11) で表される転位の平均飛行距離を算出する。これらを式 (6) に適用して硬化係数を求め、式 (4) によってすべり速度を算出する。さらに、構成式 (1) を適用した転位-結晶塑性FEM解析に基づき各量の値を

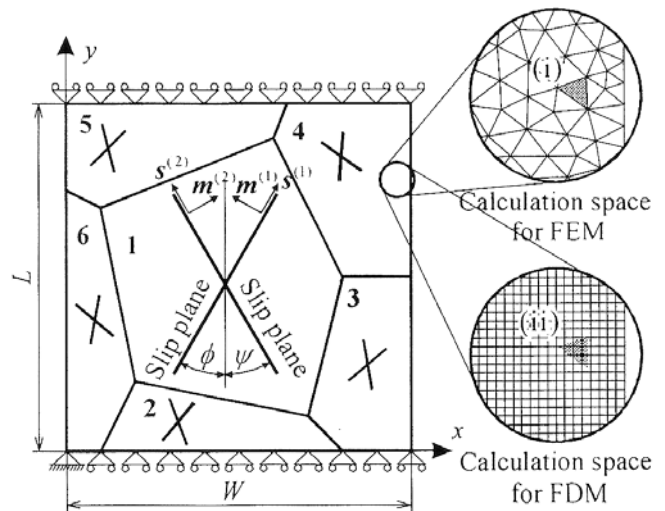


図1 解析モデル

更新する。再び反応-拡散方程式を用いたFDM解析から各転位密度を算出し、指定の変形率まで上記過程を繰り返す。ただし、転位パターンが定常化した後は式 (7) ~ (10) を用いて微分幾何学的に転位密度を求め、それを式 (6) に適用して硬化係数を得る。

4.3 解析モデル

解析対象は図1に示す1辺が $L = W = 20\mu\text{m}$ の正方形Cu多結晶平板とし、転位-結晶塑性解析に関しては端面強制圧縮変位を与えた際の平面ひずみ問題を考え、Asaroの平面二重すべりモデル¹⁰⁾を適用して静的陽解法によりFEM解析を行う。基準となる結晶基底を図1に示す $\phi = \psi = 30^\circ$ の状態と定め、そこからの反時計回りの回転角度 θ を結晶方位角とする。図1の各粒番号に対応する結晶粒の初期方位 θ_0 を表1のように設定する。また、いずれのすべり面も解析面に垂直であることから、図1におけるxy面は $(1\bar{2}1)$ に相当する。解析モデルの端面はせん断自由であり、端面変位速度は一定とする。なお、FEM解析に用いる要素は、粒形状の不均一性を表現するために、Delaunay 三角形要素を採用するものとする。さらに、解析の安定性および解析時間の短縮を図るため、反応-拡散方程式に関するFDM解析の1ステップ間の転位密度増分の最大値が $1\mu\text{m}^{-2}$ となるようにFDM解析の時間増分をステップごとにアダプティブに決定する。

4.4 境界条件および材料定数

上端に60%の強制圧縮変位（公称）をy方向に与え、変位 u および荷重 F に対する境界条件を次式のように与える。

$$\left. \begin{aligned} F_x = F_y = 0 & \quad (\text{a } tx = 0, W) \\ u_y = 0, F_x = 0 & \quad (\text{a } ty = 0) \\ u_y = -U, F_x = 0 & \quad (\text{a } ty = L) \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (17)$$

ここで、 U は端面強制変位である。また、FEMの要素数は7483であり、端面変位速度を $0.2\mu\text{m/s}$ （ひずみ速度 0.01 s^{-1} ）および全ステップ数を24000とする。

転位-結晶塑性FEM解析における材料定数および数値パラメータに関しては弾性等方性を仮定し、縦弾性係数 $E = 125\text{ GPa}$ 、ポアソン比 $\nu = 0.34$ 、臨界分解せん断応力 $\tau_0 = 1\text{ MPa}$ 、参照すべり速度 $\dot{\gamma} = 0.001\text{ s}^{-1}$ 、Burgersベクトルの大きさ $\bar{b} = 0.256\text{ nm}$ 、ひずみ速度感度指数 $m = 0.005$ 、転位の平均飛行距離の初期値 $L_0^{(a)} = 10\mu\text{m}$ 、数値パラメータ $\alpha = 0.3$ 、 $c = 1.6$

表1 各粒の初期結晶方位

Grain No.	1	2	3	4	5	6
θ_0	0°	-10°	-20°	25°	-15°	20°

および $\Lambda = 0.1\mu\text{m}$ と定める。一方、反応-拡散FDM解析における材料定数および数値パラメータに関しては次のように定める。すなわち、 $D_{m\min}^{(a)} = 8000\mu\text{m}^2$ 、 $D_{i\min}^{(a)} = 800\mu\text{m}^2$ 、 $\rho_r^I = 7600\text{ nm}^{-2}$ 、 $\rho_r^{II} = 76\text{ nm}^{-2}$ 、 $k_1 = 0.1$ 、 $e = 2$ 、 $\rho_{m0}^{(a)} = 0.001\mu\text{m}^{-2}$ 、 $\rho_{i0}^{(a)} = 0.01\mu\text{m}^{-2}$ 、 $\rho_{ms}^{(a)} = 311\mu\text{m}^{-2}$ 、 $\rho_{is}^{(a)} = 1500\mu\text{m}^{-2}$ 、 $K_0 = 1000$ 、 $K_3 = 0.06\mu\text{m}^4$ 、 $B_2^{(a)} = 2\mu\text{m}^2$ 、 $\tau_r^{III} = 50\text{ MPa}$ である。初期条件として可動・不動転位密度の初期値 $\rho_{[n]0}$ には、それぞれ約10%のゆらぎを与えるものとする。なお、 $K_1^{(a)}$ および $B_0^{(a)}$ の値に関しては、定常・均一状態の反応-拡散方程式を満足するように決定する。FDM解析の境界条件に関しては、上下端面では転位の非通過性を考慮し $\mathbf{n} \cdot \nabla \rho_{[n]} = 0$ とし、左右の自由表面では転位の抜け出しを考慮し $\mathbf{n} \cdot \nabla \rho_{[n]} = \text{const.}$ とする。また、初期粒界に関しても上下端面と同様の転位の非通過条件を適用する。

4.5 解析結果および考察

粒1におけるすべり速度の平均値の変化を図2に示す。粒1では両すべり系のSchmid因子が等しくなる初期方位を設定しているため、いずれのすべり系も変形の初期段階から活動しており、ステージIIから変形が開始しているといえる。図3は圧縮率2、3、4%における両すべり系の転位密度の分布図である。ここで、圧縮率は全て公称値を意味し、以降も同様である。図3における粒1の分布を見ると、圧縮率が2%のときにはすでに二次すべり系が活動しているものの転位パターンは形成しておらず、圧縮率が3%に達すると二次すべり系の活動の影響を受けセルパターンが徐々に形成され始めていることがわかる。圧縮率が4%のときには、転位壁における転位密度が上昇することで、明瞭なセルパターンが形成されている。以上のことから、二次すべり系の活動に伴うセル形成開始およびすべり系の活動状況に応じたセル構造の発達が表示できているといえる。

図4は各圧縮率における変形の様子を、全てのすべり系の

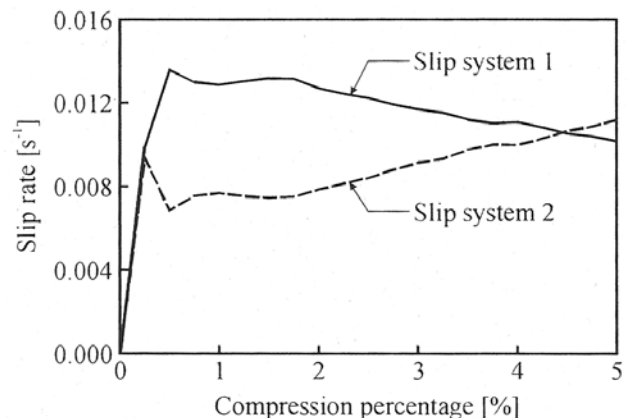


図2 粒1におけるすべり速度の変化

転位密度を重ね合わせた全転位密度とともに表している。全転位密度の分布から、変形の進行に伴って粒ごとに異なった転位組織が形成され、セルサイズが減少していく様子が確認できる。また、図4 (c)、(d) および (e) を見ると、圧縮率が大きくなると、変形の局所化領域においてGN転位密度が上昇することによって、転位壁の一部でDDW (高密度転位壁) が形成していることがわかる。圧縮率が60%まで達すると、ほぼ全ての粒においてDDWの形成が確認できる。

図5は圧縮率60%における全すべり分布図であり、局所的に真すべり値が3に達する箇所が生じ、転位パターンに沿ったマイクロバンドが領域全体を覆っているのが確認できる。

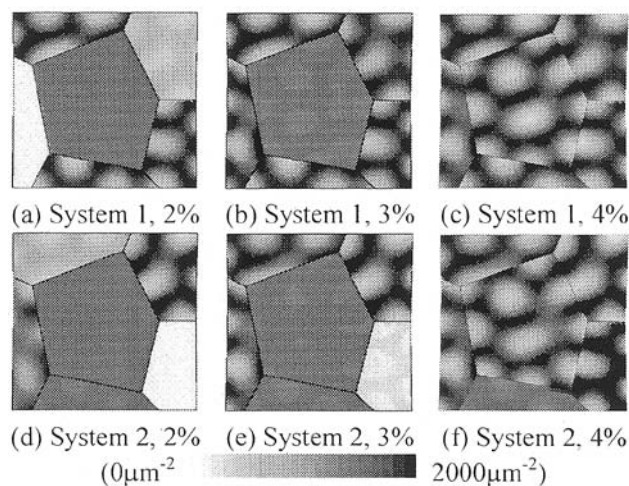


図3 活動すべり系1、2における転位パターン

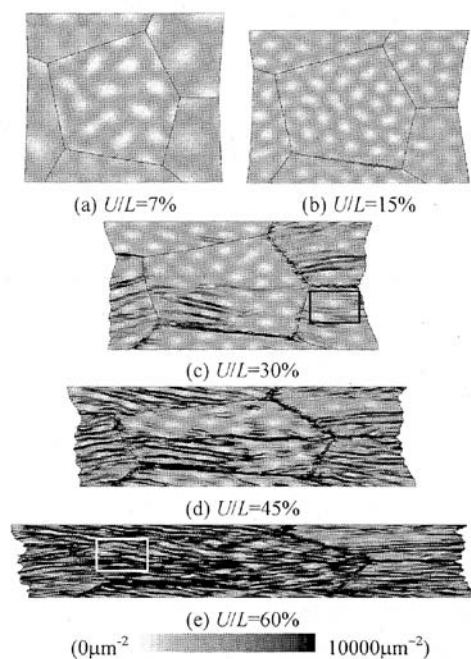


図4 全転位密度分布

図6は変形によって誘起された低角粒界あるいは高角粒界の分布図である。図6における黒色および灰色の線素はそれぞれ、(a) ~ (c) においては隣接する要素間の方位差が 5° および 2° 以上の境界を、(d) および (e) においては 15° および 10° 以上の境界を示している。圧縮率60%において変形誘起粒界が顕著に形成されている粒 (粒1、2および5) とそうでない粒 (粒3、4および6) の初期結晶方位 (表1) を比較すると、変形誘起粒界が顕著に形成されている粒の初期結晶方位は $\theta = 0^\circ$ 付近の方位となっている。このことから、強圧縮変形では、二重すべりが生じやすい初期方位を有する粒ほど超微細粒形成が促進されるということがわかる。

図7 (a) および (b) はそれぞれ図4 (c) の黒枠および (e) の白枠で囲まれた領域の拡大図であり、図 (a) および (b) のそれぞれで方位差 2° 以上の低角粒界および 10° 以上の高角粒界を白線で示している。圧縮率が7%あるいは15%のときには各粒内の結晶方位はほぼ一様であるのに対し、図7 (a) のように圧縮率が30%になると転位壁に沿った低角粒界の形成

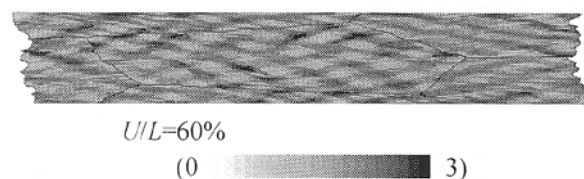


図5 全すべり分布

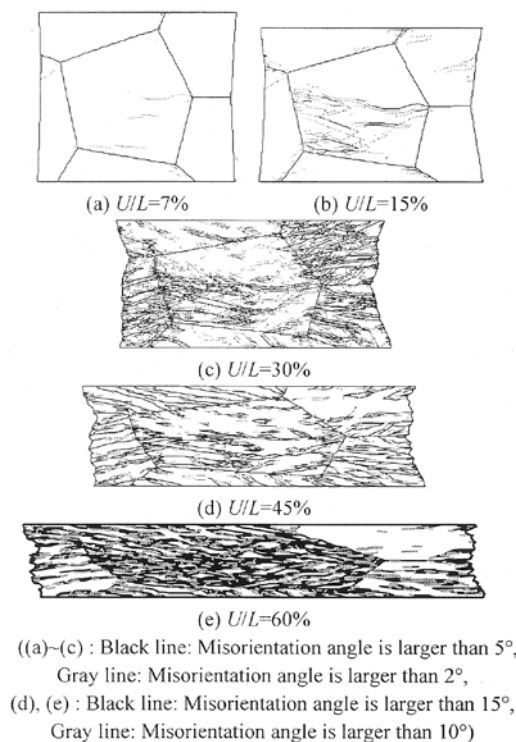


図6 変形誘起粒界

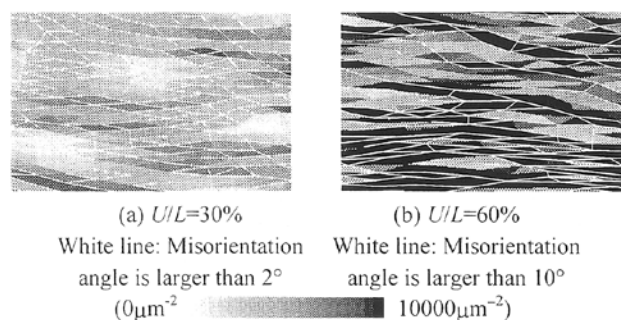


図7 全転位密度および変形誘起粒界の拡大図

が確認できる。圧縮率が30%では隣接する転位組織の方位差が生じ始め、転位パターンがセル構造からサブグレイン構造へと遷移しているといえる。一方、圧縮率が45%以上になると、図7 (b) のようにDDWが形成されている領域に沿って高角粒界が形成され、親粒が分断されてサブディビジョンが形成されている様子が確認できる。

5 おわりに

本稿では、集団転位の組織形成と結晶の変形という異なるスケールの現象を、異なる支配方程式を連成させることで互に関連づけながら解析するマルチスールかつマルチフィジックスな転位-結晶塑性モデルを紹介した。また、それを巨大ひずみ付与による結晶粒超微細化過程に適用することで、転位パターンの形成にともなう超微細粒生成の様子が再現できることを示した。

ここでは紙面の都合上省略するが、反応-拡散方程式の代わりに双晶進展を支配するPhase-field方程式に置き換え、応力場と秩序場を介して結晶塑性モデルと連成させればHCP結晶のマルチフィジックス解析が実行できる¹¹⁾。また、結晶成長のPhase-field方程式と結晶塑性モデルを連成させれば

動的再結晶のマルチフィジックス解析も行える(本特集における他の記事参照)。また、転位挙動に基づく結晶粒スケールの変形とマクロな試験片スケールの変形を均質化法で結びつけるというマルチスケール結晶塑性解析も行われているが、その詳細については文献¹²⁾を参照されたい。

参考文献

- 1) N.A.Fleck, G.M.Muller, M.F.Ashby and J.W.Hutchinson: Acta Metall.Mater., 42 (1994) 2, 475.
- 2) T.Ohashi: Philosophical Magazine, 70 (1994), 793.
- 3) N.Hansen and D.J.Jensen: Philosophical Transactions of the Royal Society of London Series A, 357 (1999), 1447.
- 4) H.Petryk and S.Stupkiewicz: Materials Science and Engineering A, 444 (2007), 214.
- 5) Y.Aoyagi and K.Shizawa: International Journal of Plasticity, 23 (2007) 6, 1022.
- 6) J.Pan and J.R.Rice: International Journal of Solids and Structures, 19 (1983) 11, 973.
- 7) N.Ghoniem and D.Walgraef: Instabilities and Self-organization in Materials, Oxford Univ.Press, 1 (2008)
- 8) Y.Aoyagi, R.Kobayashi, Y.Kaji and K.Shizawa: International Journal of Plasticity, 47 (2013), 13.
- 9) P.Hähner, B.Tippelt and C.Holste: Acta Materialia, 46 (1998) 14, 5073.
- 10) R.J.Asaro: Acta Metallurgica, 27 (1979), 445.
- 11) 近藤瑠歩, 只野裕一, 志澤一之: 日本機械学会論文集A編, 78 (2012) 792, 1157.
- 12) 黒澤瑛介, 青柳吉輝, 志澤一之: 日本機械学会論文集A編, 76 (2010) 772, 1547.

(2014年8月18日受付)