

# 非局所結晶塑性を考慮した均質化理論による多結晶塑性解析 (粒界でのすべりの境界条件の影響)

## POLYCRYSTAL PLASTICITY ANALYSIS USING A HOMOGENIZATION THEORY OF NONLOCAL SINGLE-CRYSTAL PLASTICITY (THE EFFECT OF SLIP BOUNDARY CONDITION ON GRAIN BOUNDARIES)

奥村 大<sup>1)</sup>, 東 洋一<sup>2)</sup>, 大野 信忠<sup>3)</sup>

Dai OKUMURA, Yoichi HIGASHI, and Nobutada OHNO

- 1) 名古屋大学大学院工学研究科 (〒464-8603 名古屋市千種区不老町, E-mail: okumura@mech.nagoya-u.ac.jp)  
 2) トヨタ自動車株式会社 (〒471-8571 愛知県豊田市トヨタ町, E-mail: higashi@mml.mech.nagoya-u.ac.jp)  
 3) 名古屋大学大学院工学研究科 (〒464-8603 名古屋市千種区不老町, E-mail: ohno@mech.nagoya-u.ac.jp)

In this study, we explore the role of grain boundaries in the size effect of polycrystal plasticity. For this purpose, F.C.C. polycrystal models are numerically analyzed using a two-scale theory of the nonlocal single-crystal plasticity with additional slip boundary conditions. For the analyses of the polycrystal models, the additional slip boundary conditions are applied on grain boundaries. Two typical slip boundary conditions called micro-free and micro-clamped conditions are considered. It is shown that the slip boundary condition on the grain boundaries has a remarkable influence on the size effect of polycrystal plasticity. The micro-clamped condition causes the size effect clearly in contrast to the micro-free condition. The difference between two boundary conditions results from the development of pile-ups of geometrically necessary dislocation near the grain boundaries.

**Key Words:** Homogenization theory, Nonlocal crystal plasticity, Grain boundary, Polycrystal plasticity

### 1. 緒言

多結晶金属は、ホールペッチの関係<sup>(1),(2)</sup>と呼ばれる降伏応力の粒径依存性を有する。この関係は、転位論において、フランクリード源から発生する転位の結晶粒界での堆積によって説明される<sup>(3)</sup>。さらに近年では、非局所結晶塑性理論<sup>(4)-(8)</sup>を用いた多結晶金属の有限要素解析<sup>(8)-(11)</sup>が行われている。非局所結晶塑性理論では、塑性ひずみの1次勾配と幾何学的に必要な転位(GN転位)の間の関係<sup>(12),(13)</sup>に着目して、材料の特性長さが導入される。したがって、非局所結晶塑性理論を用いて多結晶金属の解析を行うことは、結晶粒界におけるGN転位の力学的挙動が多結晶塑性の粒径依存性に及ぼす影響を調べる上でたいへん有用である。

このような背景から、非局所結晶塑性理論を用いた多結晶金属の有限要素解析が行われており、多結晶金属の降伏応力に支配的な材料定数や結晶粒の要素分割敏感性が検討された<sup>(9)-(11)</sup>。ただし上述の研究では、等方硬化則にGN転位密度を導入した非局所結晶塑性理論<sup>(4),(5)</sup>が用いられている。この理論は、有限要素法への組み込みの容易性を有する<sup>(14)</sup>ものの、粒界とGN転位の相互作用を陽に考慮していない。しかしながら、粒界が多結晶塑性の粒径依存性に重要な役割を果たすと考えれば、粒界とGN転位の相互作用を陽に表現できる理

論を用いて、その影響を調べなければならない。

これまでに著者らは、付加的なすべりの境界条件を有するGurtinの非局所結晶塑性理論<sup>(6),(7)</sup>を用いて、時間依存微小変形の均質化理論の構築を行った<sup>(15)</sup>。この理論展開では、単結晶金属の周期単位境界におけるすべりの境界条件が、変位の擾乱成分の周期性(以後、 $\gamma$ 周期性<sup>(16)</sup>と呼ぶ)と同様にして、系統的に与えられることを示した。しかし、多結晶金属の問題に理論を拡張する場合には、粒界でのすべりの境界条件を新たに検討する必要が生じる。

そこで本研究では、非局所結晶塑性を考慮した均質化理論を用いて、粒界でのすべりの境界条件が多結晶塑性の粒径依存性に及ぼす影響を調べる。このためまず、著者らの構築した理論<sup>(15)</sup>を多結晶金属の問題のために拡張する。ここでは、粒界でのすべりの境界条件として、異なる2つの条件を考える。つづいて、この理論に基づき面心立方多結晶モデルの有限要素解析を行い、粒界でのすべりの境界条件が、多結晶モデルの降伏応力や粒界でのGN転位の挙動に及ぼす影響を比較・検討する。

### 2. 非局所結晶塑性の基礎式

Gurtinによって構築された非局所結晶塑性理論<sup>(6),(7)</sup>の基礎

式を、時間依存微小変形の場合について示す。このため、直交座標系  $x_i$  ( $i=1, 2, 3$ ) を設け、物体力は作用しないとする。

このとき、応力  $\sigma_{ij}$  の釣合いとフックの法則は、

$$\sigma_{ij,j} = 0 \quad (1)$$

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} (\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^p) \quad (2)$$

と表される。ここで、 $(\cdot)_{,i}$  は  $x_i$  に関する偏微分を意味し、 $c_{ijkl}$  は弾性係数、 $\varepsilon_{kl}$  と  $\varepsilon_{kl}^p$  はひずみと非弾性ひずみである。ひずみ  $\varepsilon_{kl}$  は変位  $u_i$  を用いて、

$$\varepsilon_{kl} = \frac{1}{2} (u_{k,l} + u_{l,k}) \quad (3)$$

と書ける。また、非弾性ひずみ  $\varepsilon_{kl}^p$  は各すべり系 ( $\beta=1, 2, \dots, N$ ) でのせん断塑性ひずみ  $\gamma^{(\beta)}$  (以後、単にすべりと呼ぶ) によって、

$$\varepsilon_{kl}^p = \sum_{\beta} \gamma^{(\beta)} \mu_{kl}^{(\beta)} \quad (4)$$

と表される。上式において、 $\mu_{kl}^{(\beta)}$  はシュミットテンソルと呼ばれ、すべり面の単位法線  $m_i^{(\beta)}$  とすべり方向  $s_i^{(\beta)}$  を用いて次のように書ける。

$$\mu_{kl}^{(\beta)} = \frac{1}{2} (s_k^{(\beta)} m_l^{(\beta)} + m_k^{(\beta)} s_l^{(\beta)}) \quad (5)$$

各すべり系でのすべり速度  $\dot{\gamma}^{(\beta)}$  は、すべり面でのすべり方向に作用するすべりの駆動力を  $\pi^{(\beta)}$  として、時間依存のべき乗構成式

$$\dot{\gamma}^{(\beta)} = \dot{\gamma}_0 \frac{\pi^{(\beta)}}{\pi_0} \left| \frac{\pi^{(\beta)}}{\pi_0} \right|^{(1/n)-1} \quad (6)$$

に従うとする。ここで、 $\dot{\gamma}_0$ 、 $\pi_0$ 、 $n$  はそれぞれ参照ひずみ速度、参照駆動力、ひずみ速度指数と呼ばれる材料定数である。本研究では、簡単のため加工硬化を考慮せず、 $\dot{\gamma}_0$  と  $\pi_0$  を一定とする。

Gurtin の理論<sup>(6),(7)</sup>では、すべりの1次勾配  $\gamma_{,i}^{(\beta)}$  が仕事共役  $\xi_i^{(\beta)}$  によって仕事をするという仮定のもと、すべりの駆動力  $\pi^{(\beta)}$  の釣合い式が導かれる。

$$\pi^{(\beta)} - \tau^{(\beta)} - \xi_{i,i}^{(\beta)} = 0 \quad (7)$$

上式において、 $\tau^{(\beta)}$  は分解せん断応力であり、式(5)を用いて次のように表される。

$$\tau^{(\beta)} = \sigma_{ij} \mu_{ij}^{(\beta)} \quad (8)$$

また、すべりの1次勾配の仕事共役  $\xi_i^{(\beta)}$  は、材料の特性長さ  $\ell$  と GN 転位密度テンソル  $\alpha_{ij}$  を用いて、

$$\xi_i^{(\beta)} = \ell^2 \pi_0 e_{ipq} m_p^{(\beta)} \alpha_{rq} s_r^{(\beta)} \quad (9)$$

と表されるとする<sup>(6),(7),(17)</sup>。GN 転位密度テンソル  $\alpha_{ij}$  は各すべり系のすべりの1次勾配  $\gamma_{,i}^{(\beta)}$  との間に、次式の関係を有する<sup>(12),(13)</sup>。

$$\alpha_{ij} = \sum_{\kappa} e_{jkl} \gamma_{,k}^{(\kappa)} s_l^{(\kappa)} m_i^{(\kappa)} \quad (10)$$

なお、 $e_{jkl}$  は交代記号である。

Bittencourt ら<sup>(17)</sup>は、単結晶複合材料の有限要素解析を行うために、式(1)と式(7)で与えられる2つの釣合い式の弱形式

を導出した。また著者ら<sup>(15)</sup>は、式(1)～式(10)の基礎式を用いて、非局所結晶塑性を考慮した均質化理論を構築し、有限要素方程式を導いた。これらの理論展開<sup>(15),(17)</sup>では、変位成分だけでなく、すべり  $\gamma^{(\beta)}$  に対しても変分を考えるため、すべり  $\gamma^{(\beta)}$  に対する境界条件が要求される。すべりの境界条件の簡単な場合として、すべり拘束 (micro-clamped) 条件とすべり自由 (micro-free) 条件が提案されている<sup>(6),(7),(17)</sup>。さらに複雑な場合についての検討も進められており<sup>(18)</sup>、著者らの研究<sup>(15)</sup>では、単結晶金属の周期単位境界でのすべりの境界条件が、 $Y$  周期性に基づき系統的に与えられることを示した。本研究では、粒界でのすべりの境界条件として、すべり拘束条件もしくはすべり自由条件を考え、多結晶金属のための均質化理論を構築する。

### 3. 均質化理論

この章では、前章で示した非局所結晶塑性の基礎式を用いて、多結晶金属のための均質化理論を展開する。このため、巨視的に一様な変形を受ける多結晶モデル  $\Omega$  (たとえば Fig.1 を参照) を考え、 $k$  個の結晶粒  $g_i$  ( $i=1, 2, \dots, k$ ) によって構成される周期単位  $Y$  の存在を仮定する。このとき、 $Y$  の周期単位境界を  $\partial Y$ 、 $g_i$  の結晶粒界を  $\partial g_i$  ( $i=1, 2, \dots, k$ ) と定義し、それぞれの境界での外向きの単位法線ベクトルを  $n_j$ 、 $n_j^g$  と表す。

#### 3. 1. 粒界での境界条件

$\Omega$  中の結晶粒界では、変位  $u_i$  と応力  $\sigma_{ij}$  は連続条件

$$[[u_i]] = 0 \quad (11)$$

$$[[\sigma_{ij}]] n_j^g = 0 \quad (12)$$

を満たすとする。ここで記号  $[[\cdot]]$  は、粒界間での状態量  $\cdot$  の不連続量を表し、結晶粒  $g_j$  と  $g_k$  ( $j < k$ ) の粒界において、 $[[\cdot]] = \cdot^{g_j} - \cdot^{g_k}$  と定義される。また、粒界での単位法線ベクトル  $n_j^g$  は  $n_j^g = n_j^{g'} = -n_j^{g''}$  ( $j < k$ ) である。

つづいて、粒界でのすべりの境界条件には、すべり拘束条件とすべり自由条件<sup>(6),(7)</sup>をそれぞれ考える。

$$\gamma^{(\beta)} = 0 \quad (13)$$

$$n_i^{g_j} \xi_i^{(\beta)} = 0 \quad (14)$$

式(13)のすべり拘束条件では、粒界においてすべりが零に拘束される。これに対して、式(14)のすべり自由条件では、粒界においてすべりが生じうる。本研究では、簡単のため、これら2つの条件を考え、粒界でのすべりの境界条件の影響を定性的に比較する。なお、隣接する結晶粒との相互作用を考慮した境界条件<sup>(18)</sup>の導入については、今後の研究課題とする。

#### 3. 2. 変位の分離

均質化理論<sup>(16),(19)</sup>では、周期単位  $Y$  内において変位  $u_i$  を巨視的変位  $u_i^0$  とそれからのずれを表す擾乱変位  $u_i^*$  に分離する。

$$u_i = u_i^0 + u_i^* \quad (15)$$

このとき擾乱変位  $u_i^*$  は、 $Y$  内の不均一性に起因して生じ、周期性を有する。均質化理論ではこの周期性を  $Y$  周期性と呼び、周期単位境界  $\partial Y$  では対応する反対側の境界との間に周期境界条件が成り立つ。この関係は、式(11)を参考にすると、粒界での擾乱変位  $u_i^*$  の連続条件も含めて、以下のように表現で

きる。

$$[[u_i^*]] = 0 \quad (16)$$

なお、巨視的変位  $u_i^0$  は周期単位境界  $\partial Y$  において  $Y$  周期性を満足しないことに注意する必要がある。

式(15)の関係を、式(3)に代入すると、ひずみも巨視的成分と擾乱成分に分離される。

$$\varepsilon_{kl} = \varepsilon_{kl}^0 + \varepsilon_{kl}^* \quad (17)$$

$$\varepsilon_{kl}^0 = \frac{1}{2}(u_{k,l}^0 + u_{l,k}^0) \quad (18)$$

$$\varepsilon_{kl}^* = \frac{1}{2}(u_{k,l}^* + u_{l,k}^*) \quad (19)$$

上式において、巨視的ひずみ  $\varepsilon_{kl}^0$  は  $Y$  内で一様となり、擾乱ひずみ  $\varepsilon_{kl}^*$  は  $u_i^*$  と同様に  $Y$  周期性を満足する。

### 3. 3. 巨視的關係

結晶粒  $g_i$  内での体積平均を、次式のように定義する。

$$\langle \bullet \rangle_{g_i} = |g_i|^{-1} \int_{g_i} \bullet dV \quad (20)$$

このとき、周期単位  $Y$  での体積平均は、

$$\langle \bullet \rangle = |Y|^{-1} \int_Y \bullet dV = |Y|^{-1} \sum_{g_i} |g_i| \langle \bullet \rangle_{g_i} \quad (21)$$

と表される。ここで、 $|g_i|$  と  $|Y|$  は結晶粒  $g_i$  と周期単位  $Y$  の体積をそれぞれ表す。

式(17)に式(21)を適用すると、巨視的ひずみ  $\varepsilon_{kl}^0$  と微視的ひずみ  $\varepsilon_{kl}$  の関係

$$\varepsilon_{kl}^0 = \langle \varepsilon_{kl} \rangle \quad (22)$$

が導かれる。上式は、式(16)で定義される  $u_i^*$  の連続条件を用いて、 $\langle \varepsilon_{kl}^* \rangle = 0$  を示すことによって得られる。また、巨視的応力  $\Sigma_{ij}$  と微視的応力  $\sigma_{ij}$  を結び付ける関係を、

$$\Sigma_{ij} = \langle \sigma_{ij} \rangle \quad (23)$$

と定義する。

### 3. 4. 釣合い式の弱形式

応力の釣合い式(1)とすべりの駆動力の釣合い式(7)に関する弱形式を求める。このため、周期単位境界  $\partial Y$  および結晶粒界  $\partial g_i$  での連続条件式(16)を満足する任意の変分  $\delta u_i^*$  と、結晶粒界  $\partial g_i$  において、式(13)もしくは式(14)の境界条件を満足する任意の変分  $\delta \gamma^{(\beta)}$  を考える<sup>(20),(21)</sup>。このとき、結晶粒  $g_i$  ( $i=1,2,\dots,k$ ) ごとの積分形式は、

$$\langle \sigma_{ij} \delta u_{i,j}^* \rangle_{g_i} = 0 \quad (24)$$

$$\langle (\pi^{(\beta)} - \tau^{(\beta)} - \xi_{i,i}^{(\beta)}) \delta \gamma^{(\beta)} \rangle_{g_i} = 0 \quad (25)$$

と表される。さらに上の2つの式は、部分積分と発散定理を用いると、次のように展開される。

$$\langle \sigma_{ij} \delta u_{i,j}^* \rangle_{g_i} = |g_i|^{-1} \int_{\partial g_i} n_j^g \sigma_{ij} \delta u_i^* dS \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \langle (\pi^{(\beta)} - \tau^{(\beta)} - \xi_{i,i}^{(\beta)}) \delta \gamma^{(\beta)} \rangle_{g_i} &= \\ |g_i|^{-1} \int_{\partial g_i} n_i^g \xi_i^{(\beta)} \delta \gamma^{(\beta)} dS & \quad (27) \end{aligned}$$

式(26)を式(21)の関係に基づき周期単位全体での積分形式に変換すると、式(12)で定義される粒界での応力ベクトルの連続条件と、式(16)で定義される擾乱変位の連続条件より、右辺の境界積分項は消去される。また式(27)の粒界における境界積分項も、式(13)もしくは(14)の境界条件によって零となる。したがって、応力の釣合い式(1)とすべりの駆動力の釣合い式(7)の弱形式は次に帰着する。ただし、式(28)の導出には  $\sigma_{ij}$  の対称性を利用した。

$$\langle \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij}^* \rangle = 0 \quad (28)$$

$$\langle (\pi^{(\beta)} - \tau^{(\beta)}) \delta \gamma^{(\beta)} + \xi_i^{(\beta)} \delta \gamma_i^{(\beta)} \rangle = 0 \quad (29)$$

式(28)と式(29)の弱形式は、式(13)もしくは式(14)で示される粒界でのすべりの境界条件を除けば、単結晶金属のための均質化理論で導出される弱形式<sup>(15)</sup>と同じ形をしている。したがって、微視的応力と巨視的応力の関係式(23)、周期単位  $Y$  での、応力の釣合い式の弱形式(28)、各すべり系 ( $\beta=1,2,\dots,M$ ) に関する駆動力の釣合い式の弱形式(29)は、次節に示すように有限要素法に基づき離散化することができる。

### 3. 5. 有限要素方程式

時刻  $t$  における変形状態を既知として、 $t + \Delta t$  における変形状態を求める。このため、増分区間での変化量を  $\Delta(\bullet)$  として、各有限要素内での  $\Delta u_i^*$  と  $\Delta \gamma^{(\beta)}$  を次のように表す。

$$\Delta u_i^* = \sum_{k=1}^M N^{(k)} \Delta U_i^{*(k)} \quad (30)$$

$$\Delta \gamma^{(\beta)} = \sum_{k=1}^M N^{(k)} \Delta \Gamma_{(k)}^{(\beta)} \quad (31)$$

上式において、 $N^{(k)}$  ( $k=1,2,\dots,M$ ) は形状関数を表し、 $\Delta U_i^{*(k)}$  と  $\Delta \Gamma_{(k)}^{(\beta)}$  は各有限要素を構成する節点値である。

さらに、式(6)での  $\dot{\gamma}^{(\beta)}$  と  $\pi^{(\beta)}$  の間の非線形関係を線形化するため、接線係数法の考え方<sup>(22)</sup>を用いて、

$$\Delta \gamma^{(\beta)} = \left\{ \dot{\gamma}^{(\beta)}(t) + \theta \frac{\partial \dot{\gamma}^{(\beta)}}{\partial \pi^{(\beta)}} \Delta \pi^{(\beta)} \right\} \Delta t \quad (32)$$

と書く。このとき、 $\Delta \pi^{(\beta)}$  を  $\Delta \gamma^{(\beta)}$  を用いて表せば、

$$\Delta \pi^{(\beta)} = \Theta^{(\beta)} \left\{ \Delta \gamma^{(\beta)} - \dot{\gamma}^{(\beta)}(t) \Delta t \right\} \quad (33)$$

となる。ここで、 $\Theta^{(\beta)}$  は  $\Theta^{(\beta)} = \theta^{-1} \Delta t^{-1} (\partial \dot{\gamma}^{(\beta)} / \partial \pi^{(\beta)})^{-1}$  の関係を有する。なお、 $\theta$  は  $0 \leq \theta \leq 1$  の範囲で定義される係数であり、4章での有限要素解析では  $\theta=1$  を用いる。

このとき、周期単位全体における  $\Delta u_i^*$  の節点値ベクトルを  $\Delta \mathbf{U}^*$ 、すべての結晶粒  $g_i$  ( $i=1,2,\dots,k$ ) とすべり系 ( $\beta=1,2,\dots,N$ ) での  $\Delta \gamma^{(\beta)}$  をまとめた節点値ベクトルを  $\Delta \mathbf{\Gamma}$  とすると、式(23)、(28)、(29)は、転置記号 ( $\cdot$ )<sup>T</sup> を用いて、次式のように離散化される<sup>(15)</sup>。

$$\langle \mathbf{C} \rangle \Delta \varepsilon^0 + \langle \mathbf{CB} \rangle \Delta \mathbf{U}^* - \langle \mathbf{CPN} \rangle \Delta \mathbf{\Gamma} = \Delta \mathbf{\Sigma} \quad (34)$$

$$\langle \mathbf{B}^T \mathbf{C} \rangle \Delta \varepsilon^0 + \langle \mathbf{B}^T \mathbf{CB} \rangle \Delta \mathbf{U}^* - \langle \mathbf{B}^T \mathbf{CPN} \rangle \Delta \mathbf{\Gamma} = 0 \quad (35)$$

$$\begin{aligned} -\langle \mathbf{N}^T \mathbf{P}^T \mathbf{C} \rangle \Delta \varepsilon^0 - \langle \mathbf{N}^T \mathbf{P}^T \mathbf{CB} \rangle \Delta \mathbf{U}^* \\ + \left\langle \mathbf{N}^T \mathbf{\Theta N} + \mathbf{N}^T \mathbf{P}^T \mathbf{CPN} + \frac{\partial \mathbf{N}^T}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{R} \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial \mathbf{x}} \right\rangle \Delta \mathbf{\Gamma} = \langle \mathbf{N}^T \mathbf{\Theta} \dot{\gamma} \Delta t \rangle \quad (36) \end{aligned}$$

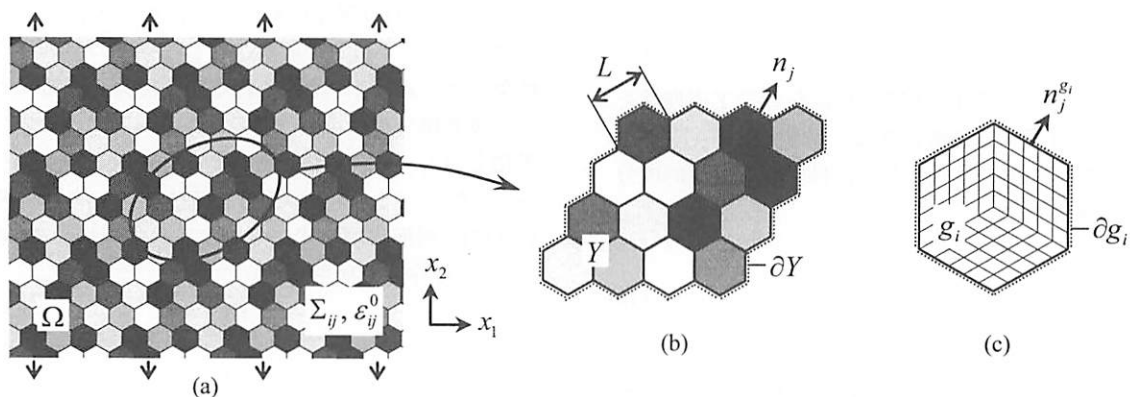


Fig. 1. Illustration of polycrystal model; (a) 2D polycrystal model subject to macroscopic uniform deformation, (b) the periodic unit  $Y$  consisting of 16 grains in  $\Omega$ , and (c) grain  $g_i$  ( $i=1,2,\dots,16$ ) and its finite element mesh.

ここで、 $\mathbf{C}$ 、 $\mathbf{P}$ 、 $\Theta$  のマトリックスは  $c_{ijkl}$ 、 $\mu_{kl}^{(\beta)}$ 、 $\Theta^{(\beta)}$  に対応し、 $\mathbf{B}$  はひずみ-変位マトリックス、 $\mathbf{N}$  はすべり成分に対応した形状関数マトリックスを示す。また  $\mathbf{R}$  は、式(9)に式(10)を代入し、展開することによって得られる次式

$$R_{ik}^{(\alpha\beta)} = \ell^2 \pi_0 s_j^{(\alpha)} s_j^{(\beta)} (m_i^{(\alpha)} m_l^{(\beta)} \delta_{ik} - m_i^{(\alpha)} m_k^{(\beta)}) \quad (37)$$

のマトリックスである。上式において、 $\delta_{ij}$  はクロネッカーのデルタを表す。

式(34)~(36)をマトリックス形式で整理すると、マトリックス連成された有限要素方程式

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{00} & \mathbf{K}_{0*} & \mathbf{K}_{0\Gamma} \\ \mathbf{K}_{*0} & \mathbf{K}_{**} & \mathbf{K}_{*\Gamma} \\ \mathbf{K}_{\Gamma 0} & \mathbf{K}_{\Gamma*} & \mathbf{K}_{\Gamma\Gamma} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^0 \\ \Delta \mathbf{U}^* \\ \Delta \boldsymbol{\Gamma} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \Delta \boldsymbol{\Sigma} \\ \mathbf{0} \\ \Delta \mathbf{F} \end{Bmatrix} \quad (38)$$

が得られる。したがって、巨視的応力増分  $\Delta \boldsymbol{\Sigma}$  が与えられれば、巨視的ひずみ増分  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^0$  と、擾乱変位増分  $\Delta \mathbf{U}^*$  とすべり増分  $\Delta \boldsymbol{\Gamma}$  を求めることができる。また、巨視的ひずみ増分  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^0$  を既知として、巨視的応力増分  $\Delta \boldsymbol{\Sigma}$  を解くことも可能であり、いずれの場合も時間ステップごとに式(38)を解き、各状態量を更新して増分解析を行う。本研究では、式(38)を効率的に解くために、サブストラクチャ法を応用<sup>(23)</sup>する。なお、この節での離散化は、文献<sup>(15)</sup>に詳しく述べられている。

#### 4. 多結晶モデルの解析結果

この章では、粒界でのすべりの境界条件の影響を調べるために、3章で展開した均質化理論を用いて、2次元多結晶モデルの有限要素解析を行う。

##### 4. 1. 多結晶モデルの解析条件

Fig.1(a) に示されるように、巨視的単軸引張り ( $\dot{\varepsilon}_{22}^0 = 10^{-3} \text{s}^{-1}$ ) を受ける2次元多結晶モデルを考える。このとき、周期単位  $Y$  はランダムな結晶方位を有する16個の結晶粒  $g_l$  ( $l=1,2,\dots,16$ ) によって構成される (Fig.1(b))。また、それぞれの結晶粒  $g_l$  は同一の形状と寸法を有するとして、図中のように結晶粒の代表長さ  $L$  を定義する。

個々の結晶粒  $g_l$  は、12のすべり系を有する面心立方の銅単結晶であるとして、材料定数を次のように定める<sup>(24),(25)</sup>。まず、弾性係数は等方的であるとして、ヤング率  $E=121\text{GPa}$ 、

ポアソン比  $\nu=1/3$  を与える。つづいて、非弾性定数は  $\dot{\gamma}_0=10^{-3} \text{s}^{-1}$ 、 $\pi_0=121\text{MPa}$ 、 $n=0.05$  とする。また、多結晶モデルの粒径依存性を定性的に調べるために、結晶粒の代表長さ  $L$  を材料の特性長さ  $\ell$  によって無次元化し、 $L^*=L/\ell=10, 0.5, 0.1$  の場合をそれぞれ解析する。

なお、各結晶粒の要素分割 (Fig.1(c)) には、2次元の8節点2次要素を用いる。また、面外方向には一様変形が生じうるとして、 $\partial u_i^*/\partial x_3=0$  という条件のもと、準3次元的な解析<sup>(26)</sup>を行う。なお、粒界でのすべりの境界条件の設定のため、粒界ではすべりの節点値を重複して定義する。

##### 4. 2. 解析結果と考察

粒界でのすべりの境界条件に、すべり拘束条件 (式(13)) を課したときの巨視的応力-ひずみ線図を Fig.2(a) に示す。また、Fig.3 は周期単位  $Y$  内での無次元化された GN 転位密度テンソル  $\ell \sqrt{\alpha_{ij} \alpha_{ij}}$  の分布である。粒径が大きな場合 ( $L^*=10$ ) には、GN 転位密度の分布は粒界の近傍に限定され、極めて少ない (Fig.3(a))。これに対して、粒径が小さくなると、GN 転位密度は増加するだけでなく、その分布は結晶粒内部にまで広がる (Fig.3(b),(c))。単調負荷において、GN 転位密度の増加は加工硬化挙動を引き起こす<sup>(17)</sup>。したがって、Fig.2(a) の巨視的な応力-ひずみ線図には、降伏後に顕著な粒径依存性が現れる。Fig.2(a) の結果は、文献<sup>(10),(11)</sup> の結果と定性的に一致する。ただし、ホールペッチの関係とは、初期降伏応力の粒径依存性のことであり、Fig.2(a) や従来の結果<sup>(10),(11)</sup> とは定性的に異なる。

一方、すべり自由条件 (式(14)) の場合には、すべり拘束条件と大きく異なる結果が得られた。すなわち、Fig.2(b) や Fig.4 に見られるように、粒界に GN 転位の堆積はほとんど生じず、巨視的な応力-ひずみ関係には粒径依存性が現れなかった。これらの結果は、粒界での GN 転位の堆積が多結晶塑性の粒径依存性に重要な役割を果たすことを再確認させる。またさらに、粒界でのすべりの境界条件が、粒界近傍での GN 転位の挙動を定める上で、非常に支配的な因子であることを示す。粒界でのすべりの境界条件が多結晶モデルの粒径依存性に及ぼす影響を示したのは本研究が初めてであり、新しい知見である。また、この知見は、適切なすべりの境界

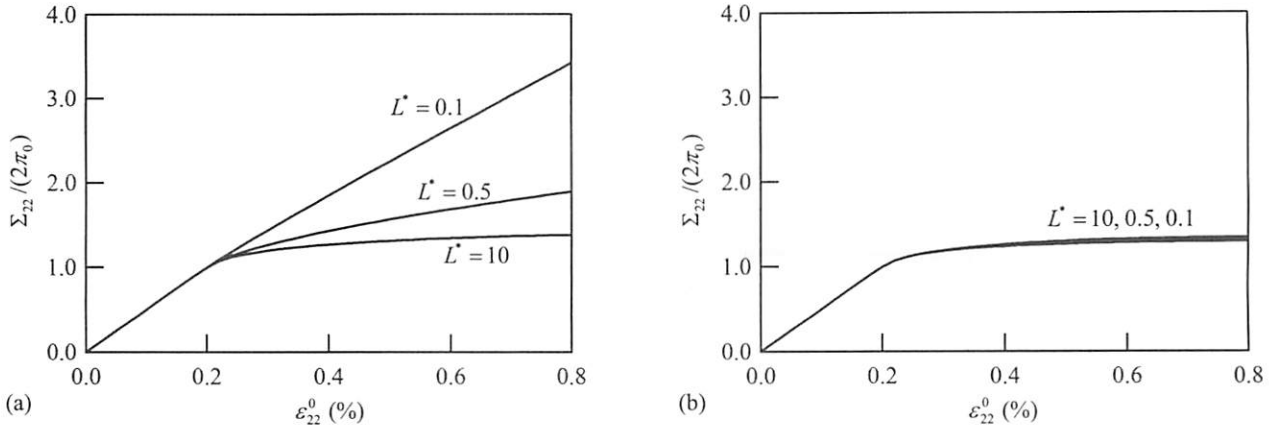


Fig. 2. Macroscopic stress-strain relations for three values of  $L^*$ ; (a) under micro-clamped condition, and (b) under micro-free condition.

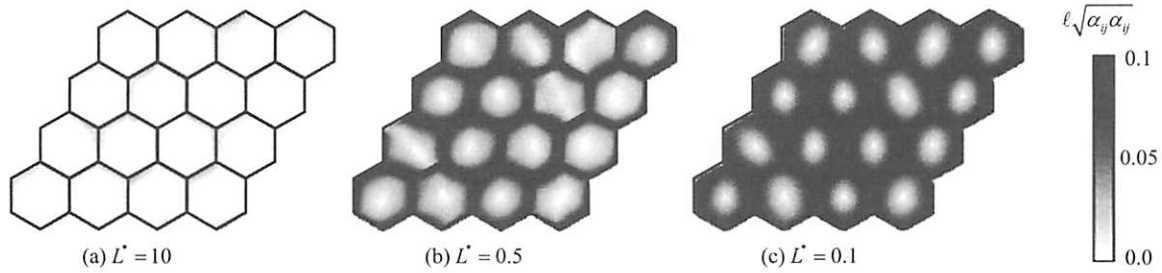


Fig. 3. Distribution of normalized GN dislocation density  $\ell\sqrt{\alpha_{ij}\alpha_{ij}}$  at  $\varepsilon_{22}^0 = 0.8\%$  under micro-clamped condition.

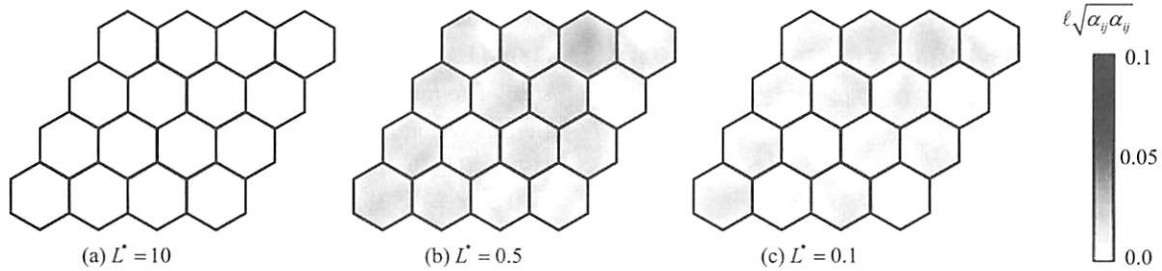


Fig. 4. Distribution of normalized GN dislocation density  $\ell\sqrt{\alpha_{ij}\alpha_{ij}}$  at  $\varepsilon_{22}^0 = 0.8\%$  under micro-free condition.

条件の設定によって、ホールペッチの関係が表現されうる可能性を示唆する。

以上の解析では、前節に従い弾性係数を等方的であるとした。ただし、一般的には銅単結晶は立方晶異方性を有する。異方性を考慮した弾性係数 ( $C_{11} = 168\text{GPa}$ ,  $C_{12} = 121\text{GPa}$ ,  $C_{44} = 75\text{GPa}$ )<sup>(25)</sup>を用いて、解析を行った結果をFig.5に示す。実線が等方の場合であるのに対して、破線が異方性を考慮した場合である。この図からわかるように、降伏直後に若干の差が生じるものの、全体としてみれば、等方の結果と大きな違いは確認されなかった。したがって、弾性係数の異方性による結晶粒界近傍での応力集中の影響は、すべりの境界条件の影響と比べて小さいといえる。

## 5. 結言と今後の課題

本研究では、Gurtinの非局所結晶塑性を考慮した均質化理

論を多結晶金属の問題のために拡張した。また、面心立方多結晶モデルの有限要素解析によって、粒界でのすべりの境界条件が、多結晶モデルの降伏応力の粒径依存性や、粒界でのGN転位の挙動に及ぼす影響を調べた。得られた知見は以下のようにまとめられる。

均質化理論の展開では、粒界でのすべりの境界条件として、すべり拘束条件とすべり自由条件をそれぞれ考えた。導出された釣合い式の弱形式は、粒界でのすべりの境界条件を除けば、単結晶金属の場合<sup>(15)</sup>と同じ形をしており、同様の離散化手法によって、有限要素方程式を導くことができる。

多結晶モデルの有限要素解析では、粒界でのすべりの境界条件によって、得られる結果が大きく異なることを示した。この結果は、多結晶金属の降伏応力の粒径依存性や、粒界近傍のGN転位の挙動を調べる上で、粒界におけるすべりの境界条件の影響が非常に大きいことを意味する。なお、弾性係

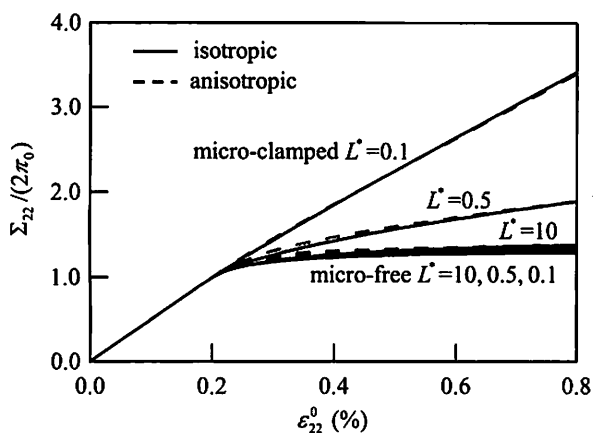


Fig. 5. Influence of anisotropic elastic stiffness under macroscopic stress-strain relation.

数の異方性を考慮した解析も行ったが、すべりの境界条件の影響に比べて十分小さかった。

すべり拘束条件によって得られた粒径依存性は、ホールペッチの関係によって示される初期降伏応力の粒径依存性とは定性的に異なる。この原因として、本研究で用いたすべりの境界条件は、隣接する結晶粒との間の相互作用を考慮していないことが挙げられる。実際には、Sun-Adamsの実験によって報告<sup>(27)</sup>されるように、粒界でのGN転位の挙動は、変形状態によって異なるなど非常に複雑である。したがって、粒界でのGN転位の挙動をより忠実に表現しようとするような、すべりの境界条件の研究が今後の課題となる。

最後に、本研究の一部は文部科学省科学研究費補助金「若手研究(B) 課題番号 16760064」の援助を受けたことを付記し、謝意を表す。

#### 参考文献

- (1) E.O. Hall: The deformation and aging of mild steel, *Phys. Soc. Lond. Proc.*, **64**(1951), pp.747-753.
- (2) N.J. Petch: The cleavage strength of polycrystals, *J. Iron Steel Inst.*, **174**(1953), pp.25-28.
- (3) 加藤雅治: 転位論, (1999), 裳華房.
- (4) A. Acharya, J.L. Bassani: Lattice incompatibility and a gradient theory of crystal plasticity, *J. Mech. Phys. Solids*, **48**(2000), pp.1565-1595.
- (5) J.L. Bassani: Incompatibility and a simple gradient theory of plasticity, *J. Mech. Phys. Solids*, **49**(2001), pp.1983-1996.
- (6) M.E. Gurtin: On the plasticity of single crystals: free energy, microforces, plastic-strain gradients. *J. Mech. Phys. Solids*, **48**(2000), pp.989-1036.
- (7) M.E. Gurtin: A gradient theory of single-crystal viscoplasticity that accounts for geometrically necessary dislocations. *J. Mech. Phys. Solids*, **50**(2002), pp.5-32.
- (8) 大橋鉄也: 結晶の塑性すべりと転位蓄積の解析へのメゾスケールアプローチ, *日本機械学会論文集*, **A-68**(2002), pp.1490-1497.
- (9) A. Acharya, A.J. Beaudoin: Grain-size effect in viscoplastic

- polycrystals at moderate strains, *J. Mech. Phys. Solids*, **48**(2000), pp.2213-2230.
- (10) 比嘉吉一, 澤田幸秀, 富田佳宏: 多結晶金属材料の特徴長さ依存性挙動の数値シミュレーション, *日本機械学会論文集*, **A-69**(2003), pp.523-529.
- (11) K.S. Cheong, E.P. Busso, A. Arsenlis: A study of microstructural length scale effects on the behaviour of FCC polycrystals using strain gradient concepts, *Int. J. Plasticity*, **21**(2005), pp.1797-1814.
- (12) J.F. Nye: Some geometrical relations in dislocated crystals, *Acta Metall.*, **1**(1953), pp.153-162.
- (13) M.F. Ashby: The deformation of plastically non-homogeneous materials, *Phil. Mag.*, **21**(1970), pp.399-424.
- (14) J.L. Bassani, A. Needleman, E. Van der Giessen: Plastic flow in a composite: a comparison of nonlocal continuum and discrete dislocation predictions, *Int. J. Solids Struct.*, **38**(2001), pp.833-853.
- (15) 奥村 大, 大野信忠, 東 洋一: 均質化理論に基づく非局所結晶塑性の有限要素解析, *計算力学講演会講演論文集*, **16**(2004), pp.709-710.
- (16) たとえば, 寺田賢二郎, 菊池 昇: 均質化法入門, (2003), 丸善.
- (17) E. Bittencourt, A. Needleman, M.E. Gurtin, E. van der Giessen: A comparison of nonlocal continuum and discrete dislocation plasticity predictions. *J. Mech. Phys. Solids*, **51**(2003), pp.281-310.
- (18) M.E. Gurtin, A. Needleman: Boundary conditions in small-deformation, single-crystal plasticity that account for the Burgers vector, *J. Mech. Phys. Solids*, **53**(2005), pp.1-31.
- (19) 大野信忠: 機械工学年鑑 5.3 グローバル/ローカルブリッジング手法, *日本機械学会誌*, **104**-993(2001), pp.19.
- (20) 久田俊明, 野口裕久: 非線形有限要素法の基礎と応用, (1995), 丸善.
- (21) 富田佳宏: ひずみ勾配依存性構成式と塑性不安定解析, *材料*, **48**(1999), pp.1207-1213.
- (22) D. Peirce, R.J. Asaro, A. Needleman: Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids, *Acta Metall.*, **31**(1983), pp.1951-1976.
- (23) 松田哲也, 奥村 大, 大野信忠, 徳田正孝: 均質化理論を用いたクロスプライ積層板の層間およびその近傍における微視的3次元解析, *計算数理工学論文集*, **4**(2004), pp.69-74.
- (24) 高橋 寛: 多結晶塑性論, (1999), コロナ社.
- (25) T.H. Courtney: *Mechanical behavior of materials*, (1990), McGraw-Hill.
- (26) 奥村 大, 大野信忠, 野口裕久: 有限変形の均質化理論に基づくセル状固体の微視的対称分岐解析(第2報, 正六角形ハニカムの面内座屈への適用), *日本機械学会論文集*, **A-67**(2001), pp.925-932.
- (27) S. Sun, B.L. Adams: Observations of lattice curvature near the interface of a deformed aluminium bicrystal, *Phil. Mag. A*, **80**(2000), pp.9-25.