

HCP 双結晶の塑性すべりによって生ずる回位型変形場と応力集中*

大橋 鉄也*¹, 深尾 亮太*²
伊藤 陽介*², 眞山 剛*³Crystal Plasticity Analysis of the Disclination Type Deformation Field
and Stress Concentration in a HCP BicrystalTetsuya OHASHI*⁴, Ryota FUKAO,
Yosuke ITO and Tsuyoshi MAYAMA*⁴ Department of Mechanical Engineering, Kitami Institute of Technology,
165 Koencho, Kitami-shi, Hokkaido, 090-8507 Japan

Plastic slip deformation of a HCP bicrystal is analyzed by a crystal plasticity FE code and distribution of plastic shear strain on the primary and secondary slip systems, as well as some stress components are examined. The constituent crystal are idealized ones and slip deformation on basal, prismatic and pyramidal slip systems can take place, but twin deformation cannot. After a deformation of 1% nominal tensile strain, sharp stress concentrations are developed at the junctions of the grain boundary plane and specimen surfaces even though the crystal orientations of the two grains differ only a few degree. Results are compared with the case for FCC bicrystals and effects of the activation of secondary slip systems are discussed.

Key Words: Grain Boundary Junctions, Stress Concentration, Polycrystals, Ductility, Dislocations

1. 緒 言

チタンやマグネシウム等の最密六方型(以後 HCP 型と略する)結晶構造を持つ金属材料は近年様々な分野で活用が広がっている。しかし、HCP 型金属材料は面心立方型(FCC 型)や体心立方型(BCC 型)金属材料に比べると室温で塑性変形しにくく、加工性が悪いという特徴がある。HCP 材料の塑性変形は主として塑性すべりと双晶変形であるが、塑性変形の際に活動するすべり面の数が限られることが加工性が悪い原因の一つとして考えられている。

HCP 結晶で最もすべり変形を起こしやすいすべり面は底面(0001)であるが、結晶粒界などによって底面すべりの活動が制限されるといくつかの特異な現象が起こることが知られている。結晶粒界とすべり変形に関するメカニズムを解明することは HCP 金属の加工法や高強度化の開発に重要である。そこで本研究では多結晶体の最も単純なモデルである双結晶を用いて、

底面すべりの活動が粒界に制限された場合の引張変形挙動を結晶塑性解析を用いて解析する。また、FCC 材料からなる双結晶の場合についても解析し、HCP 双結晶の場合と比較検討する。

2. 結晶塑性解析

HCP 材料の塑性変形の解析には底面すべり系 $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ 、柱面すべり系 $\{1100\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ および錐面すべり系 $\{1101\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ 上のすべり変形を組み込んだ結晶塑性解析プログラムを用いた。双晶系および2次錐面系の活動は生じない設定にし、バーガースベクトルが底面上にあるすべり変形のみで変形させる。一方 FCC 材料の塑性変形の解析には $\{111\} \langle 10\bar{1} \rangle$ すべり系を組み込んだ結晶塑性解析プログラムを用いた。

HCP, FCC 型金属材料の第 n すべり系における臨界分解せん断応力 $\theta^{(n)}$ は修正 Bailey-Hirsch の式により表わされる⁽¹⁾。

$$\theta^{(n)} = \theta_0(T) + \sum_{m=1}^N a \mu \bar{b} \Omega^{(nm)} \sqrt{\rho_s^{(m)}} \quad (1)$$

ここで $\theta_0(T)$ は格子摩擦応力、 N はすべり系の数、 a は数値定数、 μ はせん断弾性係数、 \bar{b} はバーガ

* 原稿受付 2009年8月26日。

*¹ 正員, フェロー, 北見工業大学工学部(☎090-8507 北見市公園町165)。*² 学生員, 北見工業大学工学部。*³ 正員, 熊本大学大学院先端機構(☎860-8555 熊本市黒髪2-39-1)。

E-mail: ohashi@newton.mech.kitami-it.ac.jp

一スベクトルの大きさ、 $\rho_s^{(m)}$ は第 m すべり系の SS 転位密度である。

変形履歴を受ける材料の第 n すべり系の SS 転位密度の増分 $d\rho_s^{(n)}$ は次式で表わされる。

$$d\rho_s^{(n)} = \frac{1}{bL^{(n)}} d\gamma^{(n)} \quad (2)$$

$d\gamma^{(n)}$ は第 n すべり系のひずみ増分である。 $L^{(n)}$ は運動転位の平均自由行程であり、次式の転位密度依存型モデルを用いた⁽¹⁾。

$$L^{(n)} = \frac{c^*}{\sqrt{\sum_m \omega^{(nm)} (\rho_s^{(m)} + \|\rho_G^{(m)}\|)}} \quad (3)$$

$\|\rho_G^{(m)}\|$ は第 m すべり系の GN 転位密度ノルムである。 c^* は転位集積速度パラメータであり、運動転位が堆積している転位の平均間隔の c^* 倍の距離を運動した後、停止することを意味する。 ω は重み行列で運動転位と蓄積転位の相互作用の強さを表わす。

解析では、格子摩擦応力 $\theta_0(T)$ 以外の値は HCP, FCC 共に同じ値を用いた。格子摩擦応力 $\theta_0(T)$ は HCP の底面系と FCC の全てのすべり系で 0, HCP の柱面すべりおよび錐面すべりで 40MPa とした。 $\Omega^{(nm)}$ は相互作用行列で、すべり系上に堆積した転位が他のすべり系上の運動転位に対する障害の強度を表している。HCP, FCC 材料共に等方硬化となる相互作用行列を用いた。転位集積速度パラメータは $c^* = 15$ とした。また、HCP, FCC 共に自己すべり系と共面すべり系上の蓄積転位は運動転位の捕捉に寄与しないように式(3)の ω の成分を設定した。以上の条件を用いると、HCP 材料および FCC 材料の単結晶が単一すべりによって変形するときの変形曲線は同一になる。これらの条件を用いて、HCP または FCC 材料からなる双結晶の変形特性について比較することにする。

3. 解析モデル

図 1 に傾角粒界をもつ双結晶の解析モデルを示す。幅と高さが $200 \mu\text{m}$ 、厚さが $10 \mu\text{m}$ で、粒界面はモデル表面 (x - y 面) に垂直である。解析には 6 面体 8 節点要素を用いて分割した節点数 1323, 要素数 800 のモデルを用いた。境界条件はモデル底面の y 軸方向の変位を拘束し、上面に y 軸方向の平均引張りひずみが 1% になるまで強制変位を与えた。

結晶方位は HCP の $(0001)[\bar{1}2\bar{1}0]$, FCC の

$(11\bar{1})[101]$ のすべり系が主すべり系になり、主すべり系のすべり方向の z 成分がゼロとなり、すべり方向と負荷方向がなす角度 α が粒 1 では 46° , 粒 2 では 44° となるように設定した。従って、結晶粒界は角度 2° の小傾角粒界である。初期転位密度は $\rho_0 = 1.0 \times 10^9 [\text{m}^{-2}]$ で均一とした。結晶基準方位の弾性コンプライアンスは弾性異方性の効果が生じないように決定した。

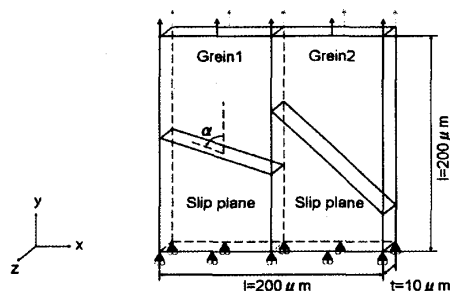


Fig.1 Geometry and boundary condition for the models employed in this study.

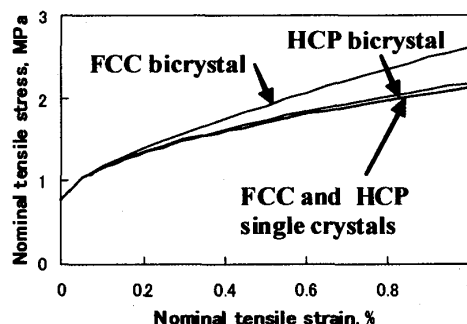


Fig. 2 Nominal stress vs. nominal strain relations obtained for single and bi-crystals of FCC and HCP type.

4. 解析結果と考察

図 2 に得られた応力ひずみ曲線を示す。引張方向の力は上面の節点力の合力から求めた。図より HCP 双結晶の方が FCC 双結晶よりも加工硬化が小さく、変形が進むと差が大きくなるのがわかる。

図 3(a)と(b)は HCP および FCC 双結晶の主すべり系に生じた塑性せん断ひずみの分布である。結晶粒界と試料上端面との交線の近傍でのひずみ分布に違いが見られる。図 3(c)と(d)は 2 次すべり系における塑性せん断ひずみの分布である。FCC 双結晶では大きく活動しているが、HCP 双結晶では

ごくわずかの活動が見られるに過ぎない。

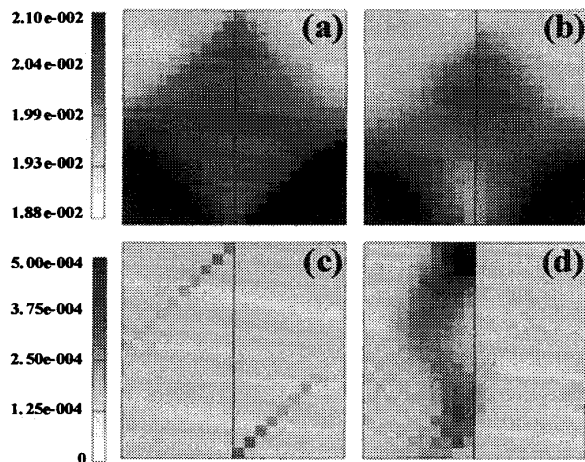


Fig. 3 (a) and (b): Distribution of plastic shear strain on the primary slip systems in bicrystals of HCP and FCC type, respectively. (c) and (d): Plastic shear strain on secondary slip systems in HCP and FCC bicrystals.

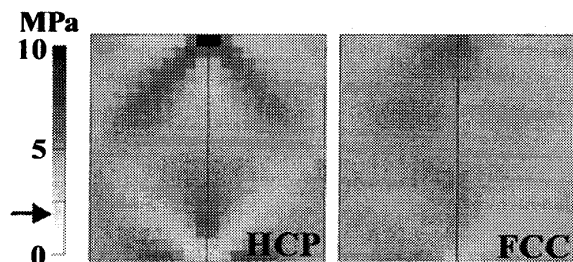


Fig. 4 Distribution of the stress component σ_{yy} in bi-crystals of FCC and HCP type. Gray level at the nominal stress is shown by an arrow at the legend.

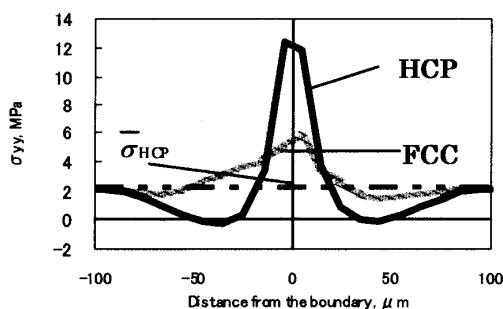


Fig.5 Distribution of σ_{yy} on the top surface of the specimen.

図4にHCPおよびFCC双結晶試料に生じた引張り負荷軸(y軸)方向の垂直応力 σ_{yy} の分布を示す。HCP双結晶では結晶粒界の近傍に大きな応力の集中がみられ、FCC双結晶と大きく異なる分布となっている。図5は双結晶試料の上端面における σ_{yy} の分布を示した

ものである。HCP双結晶の場合、試料上面と結晶粒界が交わる箇所の近傍で大きな引張り応力($\sigma_{yy} \approx 12.4\text{MPa}$)が生じている。一方FCC双結晶試

料の場合にも粒界の近傍での応力集中はあるものの、図5に示されているように、応力集中の程度はHCP双結晶試料の場合に比べて軽微である。このような違いが生じる原因は以下のように考えられる。すなわち、図1のような双結晶の場合、試料上下端面が平面を保つように拘束され、かつ結晶粒相互の変形拘束があると、粒界面と試料端面の交線の近傍にはくさび回位型の変形場が形成される⁹⁾。回位型の変形場に伴う高い応力は塑性すべりが起こると緩和される。FCC双結晶における応力集中が軽微であった理由は、粒界近傍での応力集中によって2次すべり系が活動した(図3(d))ためである。この2次すべり系の活動により転位の平均自由行程が減少し、その結果として高い加工硬化を示した。一方HCP双結晶の場合には底面すべり系以外のすべり系の活動が困難なために応力集中の緩和が不十分で、図5に見られるような応力分布になったと考えられる。この場合、非底面系の活動が生じないために、転位の平均自由行程はほぼ一定値を保ち、加工硬化率はFCC試料の場合に比べて低くなった。すなわち、HCP多結晶材料の場合、結晶粒の変形の相互作用によって生ずる応力集中は2次すべり系の活動が難しいために緩和が生じにくく、結果として粒界近傍に大きな応力集中を生じさせることになることが示された。

5. 結言

本研究では結晶方位が僅かに異なる結晶粒からなる双結晶モデルを用いてHCP型金属材料とFCC型金属材料の結晶塑性解析を行い、変形特性の違いについて検討した。HCP型金属材料ではFCC型金属材料に比べ加工硬化が小さいが、粒界近傍に高い応力集中が生ずるといった特性が得られた。

文 献

- (1) Ohashi, T., *Int. J. Plasticity*, vol. 21(2005), pp2071-2088.
- (2) Kondou, R., and Ohashi, T., *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol. 72, No.713 (2006), pp. 16-23.