

き裂発生・進展特性評価のための 粒界すべりおよび微視的不均質性を考慮した数値解析モデルの開発

Development of Numerical Analysis Model considering Grain Boundary Slip and Microscopic Heterogeneity for the Evaluation of Crack Initiation and Propagation

| | | | |
|--------------|-------|--------------------|--------|
| 大阪大学大学院工学研究科 | 新池 修平 | Shuhei SHINIKE | |
| 大阪大学大学院工学研究科 | 樋口 良太 | Ryota HIGUCHI | |
| 大阪大学大学院工学研究科 | 望月 正人 | Masahito MOCHIZUKI | Member |
| 大阪大学大学院工学研究科 | 豊田 政男 | Masao TOYODA | Member |

This study proposes numerical analysis model considering grain boundary slip and microscopic heterogeneity in order to estimate stress distribution which effect crack initiation and propagation. The FEM-MD combined method for considering grain boundary slip is discussed. The estimation of mechanical properties for taking account of microscopic heterogeneity is also discussed.

Keywords: Crack Initiation and Propagation, Grain Boundary Slip, Microscopy Heterogeneity, FEM, Molecular Dynamics

1. 緒言

き裂の発生や進展は材料内で発生する応力状態に影響されるが、この応力状態を決定する因子として微視的組織形態がある。微視的組織形態は、硬質相と軟質相の体積分率や変形強度比、結晶粒の大きさや形状などで特徴づけられるが[1][2]、これらの不均質性により応力集中が起こり、き裂の発生・進展の原因となる。また結晶粒界ではそのすべり挙動により応力の集中が起こりやすく、き裂の発生・進展を考える上で重要であるが、これまで十分な検討はなされていない。

そこで、結晶粒界や組織の微視的不均質性に着目し、これらが材料内の応力状態とどのように関係するかを把握することはき裂発生・進展特性を評価するために必要であり、さらにき裂発生・進展を低減するような材料の開発に繋げることも可能となる。結晶粒界や組織の微視的不均質性の影響を考慮して応力状態を推定するための手段として数値シミュレーションは有効な手段のひとつであり、本研究ではそのための解析モデルの開発を行う。まず、粒界すべりを考慮した解析手法として、FEM(Finite Element Method)と MD (Molecular Dynamics)を結合する方

法について検討した。また、微視的組織の不均質性を考慮した解析を行うためには各組織の機械的特性が必要であり、その推定方法に関して検討した。

2. 粒界すべりと微視的不均質性を考慮した数値解析モデル

2. 1 結晶粒界のモデル化

FEM はマクロな応力分布・歪分布などを推定するのに有効な手法であるが、結晶粒界を考慮した解析を行う場合では、結晶粒と結晶粒界のスケールの違いのため要素分割が困難であり、また連続体力学を用いて粒界構造を考慮したすべり挙動をモデル化することは適切ではない。一方、MD は粒界構造を考慮したすべり挙動を解析することが可能であるが、現在の計算機能力では解析できる領域が微小領域に制限される。そこで、比較的広い領域での解析が可能で、且つ粒界構造を考慮したすべり挙動を解析可能な手法として、FEM と MD を結合させる手法を開発した。Fig.1 に示すように結晶粒内を FEM で、結晶粒界を MD で解析し、両者を応力やすべり抵抗などの物理量を介して結合させた。

Fig.2 は、3 つの結晶粒の集合を模擬した領域に引張荷重を負荷した場合の解析結果として、Mises の相当応力の分布を示したものである。本解析では単相鋼を想定し、3 つの結晶粒に同じ機械物性値を与えた。また結晶粒界は

連絡先:望月正人、〒565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1、
大阪大学大学院工学研究科生産科学専攻
電話: 06-6879-7560、e-mail:mmochi@mapse.eng.osaka-u.ac.jp

すべりが生じるが剥離はしないと仮定した。解析結果から、応力が結晶粒界で不連続になっていることがわかる。3つの結晶粒が同じ機械物性値であるとするとき結晶粒すべりを考慮しない場合には結晶粒界での応力は連続的になるので、この結果は結晶粒すべりを考慮した影響が現れたものと考えられる。また、3つの結晶粒が会合する3重点で応力が集中する傾向が現れていることも見受けられる。

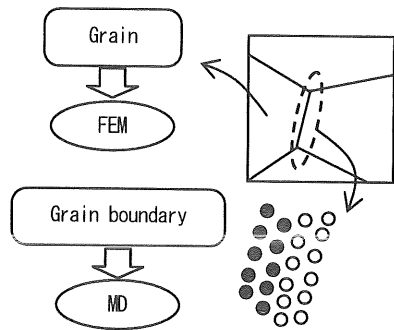


Fig.1 Schematic illustration of the FEM-MD combined method.

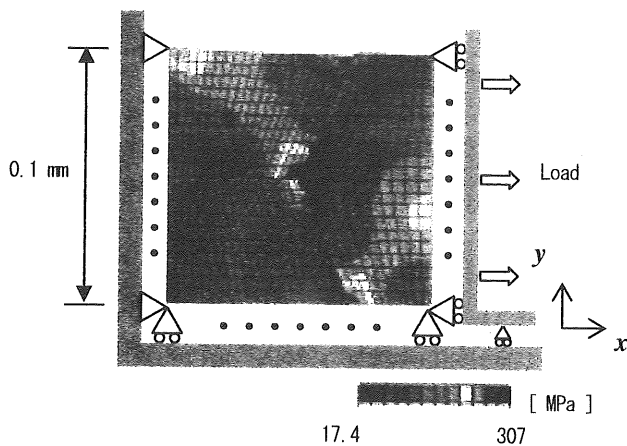


Fig.2 Contour plot of Mises's equivalent stress.

2. 2 各結晶粒の機械的性質の推定

組織の微視的不均質を考慮して材料の応力分布を推定するためには、各組織での機械的性質が必要となる。しかし、微小領域における機械的性質を評価する方法として引張試験等を用いることは測定精度の面から困難であり、そこで新たな評価方法が必要である。よって、微小領域での材料硬度を得るために利用される押し込み試験法から Fig.3 のような荷重-侵入量曲線を測定して各組織での機械的性質（真応力-真ひずみ曲線）を推定することを考える。

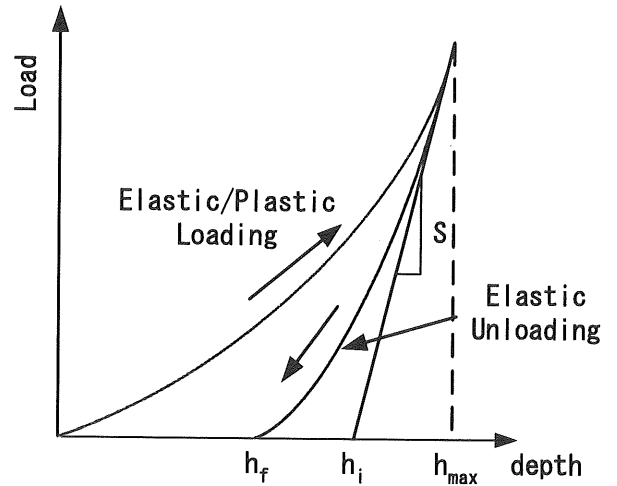


Fig.3 Load-Depth curve.

その方法の1つに球圧子による押し込み試験から真応力-真ひずみ曲線を推定した例がある[3]。この方法では、材料が降伏した後の塑性領域における真応力-真ひずみ関係の推定値を得ることができ、実験値ともよく一致している。しかし、圧子と材料の接触範囲がミリオーダーであるため、そのまま結晶粒オーダーに適用することはできない。そこで材料との接触範囲をより微小な領域とすることができる三角錐圧子を使用した押し込み試験を利用して真応力-真ひずみ曲線を推定する方法が有効であると考えられ、今後推定方法について検討していく予定である。

謝辞

本研究の一部は、文部科学省 21 世紀 COE プログラム「構造・材料先進材料デザイン拠点の形成 (研究代表者: 馬越佑吉大阪大学教授)」事業推進費補助金、ならびに科学研究費補助金・基盤研究 (B): 課題番号 17360418 の補助を受けて実施したものである。

参考文献

- [1] 友田陽、田村今男、“延性 2 相鋼の力学的性質”、鉄と鋼、Vol.67、1981、pp.439-455.
- [2] 富田恵之、“二相混合組織をもつ高強度鋼の機械的性質と第二相の存在形態”、材料、Vol.39、1990、pp.648-654.
- [3] Jeong-Hoon、“Derivation of plastic stress-strain relationship from ball indentations”、J.Mater.Res、vol.16、No.11、Nov 2001、pp.3170-3178.