

# 単結晶の異方弾性を考慮したマルチスケール解析

東北大学大学院 学生員 名取 美咲  
 東北大学大学院 学生員 車谷 麻緒  
 東北大学大学院 正 員 寺田 賢二郎

## 1. はじめに

多結晶金属について、近年高性能・高靱性を目指した材料開発が盛んに行われており、その代表例として形状記憶合金などが挙げられる。形状記憶合金は、金属であるにもかかわらず塑性化しないといった特性を有しているが、実際「なぜそのような特性が発現するのか?」といった疑問に対して有効であると考えられる多結晶組織の微視的力学挙動は現在研究中の分野であり、十分に解明されていないのが現状である<sup>2)~3)</sup>。

そこで本研究では、このような多結晶金属の微視的挙動に着目し、その単結晶の異方弾性を考慮した多結晶組織をモデル化し均質化法を用いて数値材料試験を行うことよって、微視的構造中での異方弾性と等方弾性の影響について比較および検討を行う。

## 2. 均質化法を用いたマルチスケール解析手法

均質化法の数学理論によれば<sup>1)</sup>、マクロ構造の支配方程式とその微視的非均質性を特徴づける周期的に分布するミクロ構造（以下、ユニットセルと呼ぶ）についての支配方程式が導出され、後者を解くことにより前者の材料特性を評価する数値材料試験が可能となる。すなわち、ユニットセルの境界値問題に対して任意のマクロ変数をデータとする数値解析を行い、ミクロ挙動の平均応答を評価することでマクロ的な材料特性を得ることが可能となる。以下では、図-1 に示した均質化法の概念図を用いて定式化を考える。

まず、図-1 に示すような周期的な微視構造を有する非均質体の弱形式のつり合い方程式は以下の式で表される。

$$\int_{\Omega^\epsilon} \nabla \delta u^\epsilon : \sigma^\epsilon d\Omega = \int_{\Omega^\epsilon} \delta u^\epsilon \cdot f^\epsilon d\Omega + \int_{\Gamma} \delta u^\epsilon \cdot \bar{t} d\Gamma \quad (1)$$

ここで、 $u^\epsilon$  は変位、 $\sigma^\epsilon$  は応力、 $f^\epsilon$  は物体力、 $\bar{t}$  は分布外力である。 $\epsilon \rightarrow 0$  をとることにより、マクロスケールとミクロスケールの境界値問題が導出され、マクロスケール境界値問題の弱形式は (2) 式ようになる。

$$\int_X \nabla_x \delta U : \Sigma dx = F_{\text{ext}} \quad (2)$$

さらに図-1 下図で示されるミクロスケール境界値問題についても同様に以下の (3)~(6) 式で書くことができる。

$$\int_Y \nabla_y \delta u : \sigma dy = 0 \quad (3)$$

$$\epsilon = \text{sym}(\nabla_x U + \nabla_y u) \quad (4)$$

$$u = E \cdot y + u^1 \quad (5)$$

$$\sigma \sim \epsilon \text{ (任意の構成則)} \quad (6)$$

このようにマクロスケールおよびミクロスケールでの2変数境界値問題とすることで、対象とする問題を解くことが

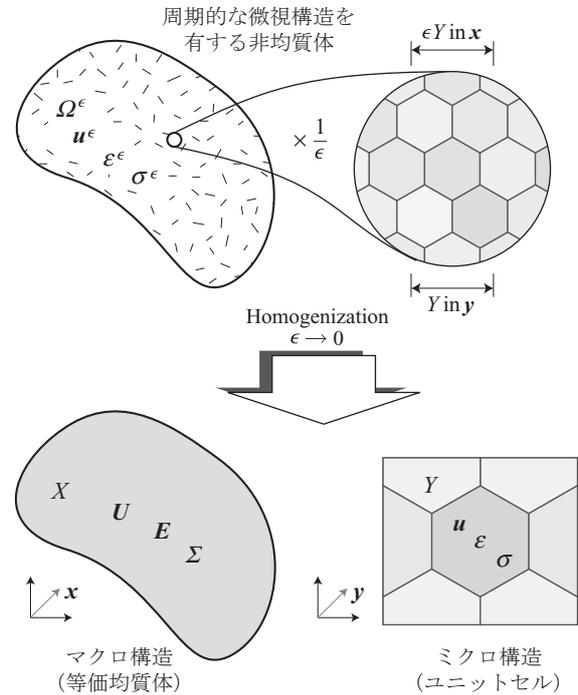


図-1 均質化法を用いた解析手法の概念図

可能となる。ここで、 $y$  はユニットセル領域  $Y$  に設定した座標系であり、 $\sigma$ 、 $E$ 、 $u$  はそれぞれミクロスケールの応力、ひずみ、変位を表している。また、 $E$  はマクロひずみを表す一定ひずみで、 $u^1$  はユニットセル境界で周期的な変位成分である。この  $u^1$  の周期性はユニットセル表面にあらわれる表面力ベクトルの反周期性と等価であり、ミクロ表面力の表面平均から算出されるマクロ応力  $\Sigma$  を制御パラメータにとり、マクロひずみ  $E$  を未知量にしてもよい。なお、マクロ応力とマクロひずみは  $\Sigma = \langle \sigma \rangle$ 、 $E = \langle \epsilon \rangle$  で定義されている、ここで、 $\langle \cdot \rangle$  はテンソル  $\cdot$  のユニットセル体積平均を表す。

なお、 $\sigma \sim \epsilon$  に任意の構成則を与えることができるので、本研究でのミクロスケールの構成則には異方的な線形弾性体モデルを採用する。

## 3. 異方弾性を有する多結晶金属のマルチスケール解析

### 3.1 解析モデルと解析条件

本研究では、異方弾性を有する単結晶からなる多結晶金属を対象として均質化法によるミクロ構造の数値材料試験を行う。解析で用いるモデルを図-2 に示す。このモデルは正六角形を一面に並べたものの最も単純な基本周期構造を取り出し、それを  $z$  方向に押し出した3次元モデルである。各結晶構造について異なる材料定数を設定し、表-1 および表-2 に示す値を用いることとする。また、解析ケースとし

表-1 等方弾性体の材料定数

| 材料 ID | ヤング率 [MPa] | ポアソン比 |
|-------|------------|-------|
| 1     | 10         | 0.2   |
| 2     | 20         | 0.2   |
| 3     | 30         | 0.2   |
| 4     | 25         | 0.3   |

表-2 材料定数 ID=4：異方性材料 ( $E, G$  : [MPa])

| ID | $E_1$ | $E_2$ | $E_3$ | $\nu_{12}$ | $\nu_{13}$ | $\nu_{23}$ | $G_{12}$ | $G_{13}$ | $G_{23}$ |
|----|-------|-------|-------|------------|------------|------------|----------|----------|----------|
| 4  | 10    | 40    | 10    | 0.1        | 0.1        | 0.4        | 50       | 50       | 50       |

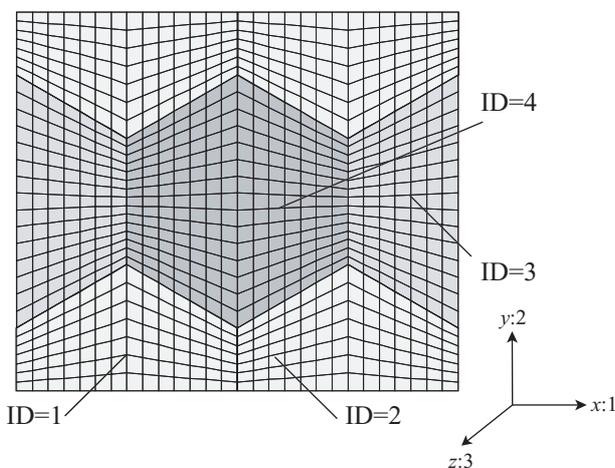


図-2 解析モデル

では、マクロひずみ  $E$  の  $(x,x)$  成分のみ単位ひずみを与えるケース (A) と、 $(x,y)$  成分にのみ単位ひずみを与えるケース (B) を考え、また、材料 ID=1~3 は固定して材料 ID=4 について次の 2 ケースを考える。

表-1 に示す等方性とした場合

表-2 に示す直交異方性とした場合

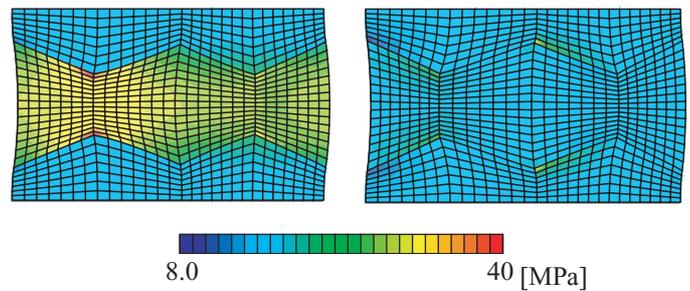
これら 4 ケースをについて解析を行い、異方性を考慮した際の影響を考察する。なお、直交異方性の各材料パラメータは安定条件を満たすよう設定し、汎用有限要素解析プログラム ABAQUS<sup>4)</sup> を用いて解析を行った。

### 3.2 解析結果と考察

ケース (A) および (B) に対する数値材料試験の結果として最大主応力分布を図-3 および図-4 に示す。

ミクロ構造の応力分布について、図-3 では異方性を考慮した場合よりも等方性材料を与えた場合の方が最大主応力分布が高くなっている。これは表-1 および表-2 で与えた  $x$  方向ヤング率について、異方性材料と比較して等方性材料の方が大きかったためである。

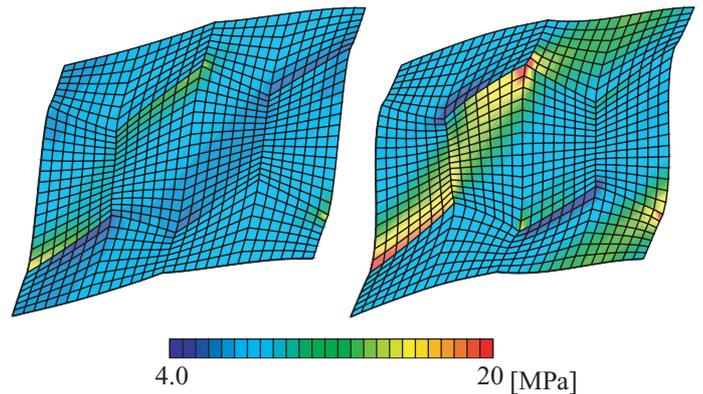
同様に図-4 についてしてみると、このケースでは逆に異方性を考慮した場合に大きな最大主応力分布を得た。こ



(A) 一様等方性材料

(B) 異方性材料

図-3  $xx$  方向最大主応力分布



(A) 一様等方性材料

(B) 異方性材料

図-4  $xy$  方向最大主応力分布

れは、ヤング率よりもせん断弾性係数の影響が大きいためである。実際、与えせん断弾性係数値は等方性材料および異方性材料のヤング率よりも大きなものであったため、等方性よりも異方性を考慮した場合に最大主応力はより高い分布を示している。

### 4. おわりに

本研究では、単結晶の異方性を考慮した多結晶金属のマルチスケール解析を行うことにより、多結晶金属を構成する単結晶の特性が等方な場合と一部異方性を有する場合について、最大主応力分布などの特性が異なることを確認した。今回は微視的構造について主に考察を行ったが、異方性を考慮した際の影響が確かめられ、今後ミクロスケールにおいて軸を回転させると、より顕著かつ詳細に異方性の影響が確かめられるのではないかと推察できる結果を得た。

### 参考文献

- 1) 寺田賢二郎, 菊池昇: 計算力学レクチャーシリーズ 均質化法入門, 丸善, 2003.
- 2) P.Sedlak, H.Seiner, M.Landa, V.Novak, P.Sittner, LI.Manosa: Elastic constants of bcc austenite and 2H orthorhombic martensite in CuAlNi shape memory alloy, Acta Materialia 53, pp.3643-3661, 2005.
- 3) V.Recarte, J.I.Perez-Landazabal, M.L.No, J.San Juan: Study by resonant ultrasound spectroscopy of the elastic constants of the phase in Cu-Al-Ni shape memory alloy, Materials Science and Engineering A 370, pp.488-491, 2004.
- 4) ABAQUS User's Manual ver.6.6-1, Hibbit Kaelsson and Sorensen Inc, 2006.