

結晶すべりとマルテンサイト変態を伴う 擬弾性・塑性材料挙動の数値シミュレーション

東北大学大学院
東北大学大学院
東北大学大学院
東北大学大学院

学生員 吉田善紀
正員 寺田賢二郎
正員 貝沼亮介
正員 須藤祐司

1. はじめに

Ti-Ni や Cu-Al 系合金が有する形状記憶効果や擬弾性効果はマルテンサイト変態によって得られるものである。マルテンサイト変態は熱力学的荷重によって母相（オーステナイト）からマルテンサイト相に相転移する現象で、この際に 5~10% もの大きなひずみを生じる。

本研究では、マルテンサイト変態および結晶すべりを伴う擬弾性・塑性構成則の定式化を行ない、単結晶および多結晶金属材料を模擬した三次元有限要素モデルに適用して解析を行うことで、擬弾性挙動の発現機構および結晶すべりの影響をミクロ・マクロの両視点から調査する。

2. 結晶すべりを伴うマルテンサイト変態構成モデルの定式化

本モデルにおける変形と運動は有限変形理論に基づいて記述し、マルテンサイト変態構成モデルは Idesman ら¹⁾の熱力学モデルを基にしており、その発展方程式は最大変位の原理から導く。

2.1 変形と運動学

全体の变形に対する弾性、マルテンサイト変態、結晶すべりの寄与分を次式で示すように変形勾配の乗算分解で定義する。

$$\mathbf{F} := \mathbf{F}^e \mathbf{F}^t \mathbf{F}^p \quad (1)$$

また、マルテンサイト変態による変形は材料パラメータとして与えられる各相の変形勾配 $\hat{\mathbf{F}}^{t(p)}$ と変数として与えられる体積率 $c^{(p)}$ を用いて次式で定義する。

$$\mathbf{F}^t := \sum_{p=0}^m \hat{\mathbf{F}}^{t(p)} c^{(p)} \quad (2)$$

ここで $p=0$ の相は母相をあらわしている。

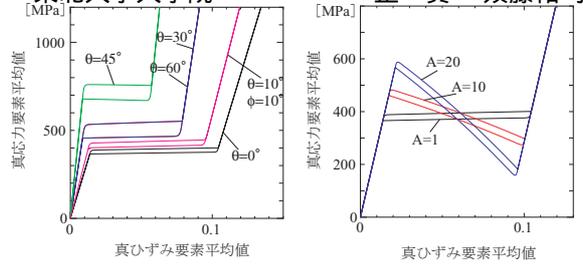
2.2 発展方程式

自由エネルギー関数は力学的ひずみエネルギー Ψ^E 、相の化学自由エネルギー Ψ_0^Θ 、 Ψ_M^Θ 、界面エネルギー、塑性硬化によるエネルギー Ψ^H を考慮し次式で定義する。

$$\Psi = \Psi^E + c\Psi_M^\Theta + (1-c)\Psi_0^\Theta + Ac(1-c) + \Psi^H \quad (3)$$

ここで c はマルテンサイト相の体積率で $c = \sum_{p=1}^m c^{(p)}$ で与えられる。 A は界面エネルギーの影響の大きさを表す材料パラメータである。さらに熱力学の第二法則から導かれる Plank 不等式を用いて、これを常に満たす次式のような発展方程式を導入する。

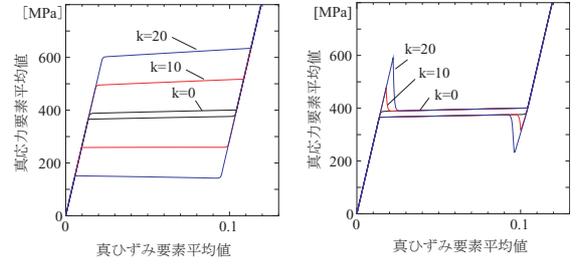
$$\dot{c}^{(pq)} = \lambda^{(pq)} X^{(pq)} \quad (4)$$



(a) 結晶方位依存性の検証

(b) A の検証

図-1 結晶方位依存性および材料パラメータ A の検証



(a) k の検証 (モデル i)

(b) k の検証 (モデル ii)

図-2 結晶方位依存性および材料パラメータ A の検証

$$\begin{cases} X^{(p0)} = \chi^{(p)} : \mathbf{J}\boldsymbol{\sigma} - (\Psi_M^\Theta - \Psi_0^\Theta) - A(1-2c) \\ X^{(pq)} = (\chi^{(p)} - \chi^{(q)}) : \mathbf{J}\boldsymbol{\sigma} \quad (q \neq 0) \end{cases} \quad (5)$$

ここで $\dot{c}^{(pq)}$ は p 相から q 相への体積率変化、 $X^{(pq)}$ は変態の駆動力をあらわし、 $\lambda^{(pq)}$ は駆動力に対する変態の進展量を与える係数である。また、

$$\chi^{(p)} = \mathbf{F}^e (\hat{\mathbf{F}}^{t(p)} - \mathbf{I}) \mathbf{F}^{t-1} \mathbf{F}^{e-1} \quad (6)$$

である。

結晶すべりの発展方程式については以下に示す Asaro ら²⁾のモデルを用いる。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} := \dot{a} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^n \text{sign} \left(\frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right) \quad (7)$$

ここで $\tau^{(\alpha)}$ は分解せん断応力、 $g^{(\alpha)}$ はすべり抵抗力をあらわす変数である。

3. パラメータスタディ

ここでは、単結晶材料を模擬した簡単な 8 要素立方体有限要素モデルを用いて、マルテンサイト変態構成モデルで使用される幾つかの材料パラメータについてそれらが結果に及ぼす影響を検証する。

図-1(a) に異なる結晶方位を割り当てて解析を行った結果得られた応力ひずみ曲線を示している。実験で確認されているヤング率、変態開始点の応力および変態ひずみの結晶方位依存性をよく再現している。

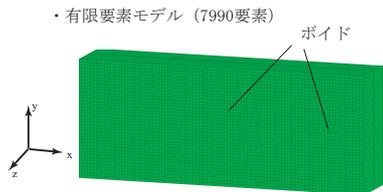


図-3 内部にボイドが分布する有限要素モデル

続いて界面エネルギーの影響の大きさをあらわす材料パラメータ A を変えて解析し、得られた応力ひずみ曲線を図-1(b) に示す。 A が大きくなると、変態開始点の応力が高くなる一方で変態の後半ではより低い応力で変態が進行している。この結果は、界面エネルギーが相の核生成を妨げる効果や、相体積率の変動により界面エネルギーが変態を妨げる力から推進する力へと変わる効果をよく再現している。

また、転位や不純物の混入といった初期不整の影響を考慮した材料パラメータ k を変えて解析した結果得られた応力ひずみ曲線を図-2(a),(b) に示す。ここで (a) は、初期不整の影響が相の核生成だけでなく変態が進展する間も及ぶことを仮定し、変態の駆動力に k を組み込んだモデルを用い、(b) はその影響が核生成時に限られると仮定したモデルを用いて得られた結果である。これらの結果は、変態開始点の応力や応力ヒステリシスに及ぼす初期不整の影響を適切に再現しているといえる。

4. 擬弾性・塑性材料挙動の数値シミュレーション

ここでは、単結晶および多結晶を模擬した有限要素モデルに対して結晶すべりを伴うマルテンサイト変態構成モデルを適用することで、擬弾性・塑性材料の単軸変形を想定した数値シミュレーションを実施し、その結果を検証する。

4.1 マルテンサイト変態の進行に伴うマイクロ組織の進展シミュレーション

ここでは、図-3 に示す内部にランダムにボイドを配置した有限要素モデルを用いてマルテンサイト変態の進行に伴うマイクロ組織の進展をシミュレーションする。図-4 に解析で得られた各荷重ステップにおけるマルテンサイト体積率の分布と相当応力の分布を示す。ボイド周辺で変態が始まり、しばらく载荷を続けると帯状のマルテンサイトが一気に析出する様子が観察できる。このように、瞬間的にマイクロ組織が大きく変化の様子は、実際の材料でマルテンサイト変態を観察する際にも見られる傾向であり、本モデルがマルテンサイト変態に伴うマイクロ組織の進展をよく再現しているといえる。また、载荷軸の 45° 方向に変態が進展しているが、図-4 を見るとボイドの周辺の応力分布は载荷軸の 45° 方向に集中しており、変態進展の方向はこれに起因するものと考えられる。

4.2 多結晶擬弾性材料における結晶すべりの影響評価

多結晶擬弾性材料における結晶すべりの影響を議論するため、多結晶材料を模擬した図-5(a) に示す有限要素モデルに対して、マルテンサイト変態における結晶すべりを考慮するモデルおよび考慮しないモデルを適用し単軸変形を想定した解析を行い、得られた結果を比較する。

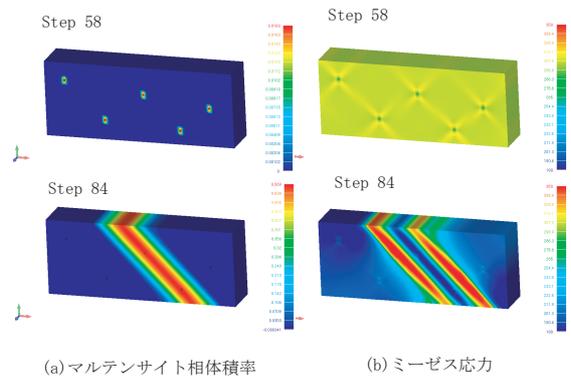


図-4 マルテンサイト体積率とミーゼス応力分布

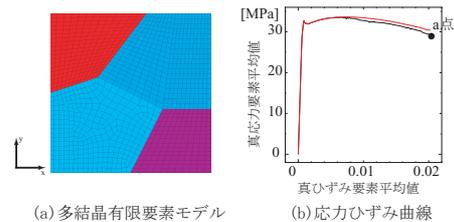


図-5 多結晶有限要素モデルと応力ひずみ曲線

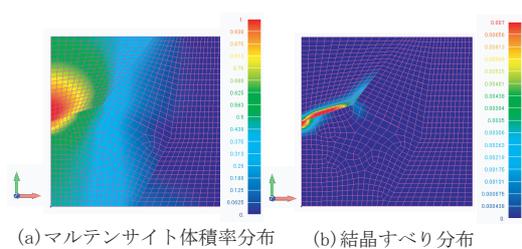


図-6 マルテンサイト体積率と結晶すべりの分布

解析の結果得られた応力ひずみ曲線を図-5(b) に、結晶すべりを考慮するモデルの a 点におけるマルテンサイト相体積率および結晶すべりの分布を図-6 に示す。図-5(b) をみると、途中までは結晶すべりを考慮するモデルとしないモデルで同じ経路をたどるが変形が大きくなると結晶すべりを考慮したモデルの応力がより低くなっていることがわかる。また図-6 より、マルテンサイト変態が終了した領域において結晶すべりが卓越している様子が観察できる。これらの結果から、擬弾性材料において確認される残留ひずみは多結晶金属の非均一な応力分布に起因した局所的な結晶すべりが生じるためであると考えられる。

5. 結論

本研究では、結晶すべりを伴うマルテンサイト変態構成モデルを用いて擬弾性・塑性材料挙動をシミュレートした。本研究で提案したモデルはマルテンサイト変態に伴う不連続なマイクロ組織をよく再現し、擬弾性・塑性材料挙動におけるマルテンサイト変態と結晶すべりの影響を明らかにした。

参考文献

- 1) A.V.Idesman, V.I.Levitas, D.L.Preston, J.Y.Cho: Finite element simulations of martensitic phase transitions and microstructures based on a strain softening model, *Journal of the Mechanics and Physics of solids*, pp.495-523, 2005.
- 2) Asaro, R.J: Micromechanics of Crystals and Polycrystals, *Adv. Appl. Mech.*, ver23, pp1- ,1983