学位論文 博士(工学)

Mg基LPSO相におけるキンク帯形成に関する 高次応力を考慮した転位-結晶塑性FEM解析

2015年度

慶應義塾大学大学院理工学研究科

上田 亮

主 論 文 要 旨

報告番号 甲 第 号 氏 名 上田 亮

主論文題目:

Mg 基 LPSO 相におけるキンク帯形成に関する高次応力を考慮した 転位-結晶塑性 FEM 解析

(内容の要旨)

長周期積層構造(LPSO: Long-Period Stacking Ordered)相を強化相とするマグネシウム合金は軽量,高強度,高耐熱性などの優れた特性を有するため,この合金を輸送機器の構造材料に使用することは地球温暖化対策の有力な一手法になり得ると言われている。特に LPSO 相におけるキンク帯形成は材料強化の主因と考えられており、その形成機構の解明に期待が寄せられている。しかしながら、従来の転位-結晶塑性モデルに基づいたキンク帯形成に関する FEM 解析では、解析結果に顕著なメッシュ依存性が現れるため、キンク帯におけるすべりや方位などの諸量を定量的に評価するうえで望ましくない。これに対して、ひずみこう配にエネルギー共役な高次応力を考慮した理論では、構成式に物質点近傍の非局所性が導入されるため変形のメッシュ依存性が軽減される。そこで本研究では、高次応力を考慮した転位-結晶塑性モデルを構築し、LPSO 相におけるキンク帯形成のマルチスケール FEM 解析を実施することで、本モデルの妥当性および有用性を示すことを試みている。

第1章は緒言であり、本研究の社会的背景および本論文の意義について述べている.

第2章では、金属材料の大変形状態を記述するために配置の概念を導入し、各配置におけるひずみを定義している。また、結晶塑性論における諸量の配置変換則を与えている。さらに、材料内に蓄積した転位密度の結晶塑性論的表現方法を紹介し、GN(Geometrically Necessary)転位密度およびSS(Statistically Stored)転位密度の発展式をそれぞれすべり速度こう配およびすべり速度に対応する量として定義している。

第3章では、高次応力を GN 転位密度に共役な力として全自由エネルギーに導入している。また、仮想仕事の原理に基づいて高次理論に関連する各種保存則を導出し、釣合い方程式から高次応力の発散が背応力になることを示している。また、Clausius-Duhem の不等式から応力および高次応力の構成式の一般形を導くとともに、それらの構成式に対する熱力学的制限について述べている。

第4章では、速度形の弾粘塑性構成式および高次応力の構成式を熱力学的に導出している。その際、高次応力には GN 転位の分布に関連した特性長が含まれることを示している。また、SS 転位密度の表現をすべり面の曲率依存形に拡張することで従来の転位-結晶塑性論における硬化則を高次理論に適する形に修正している。さらに、本モデルに対する従来の転位-結晶塑性モデルの位置づけを説明している。

第5章では、3章で示した仮想仕事の原理を速度形に拡張している。また、高次理論において新たに導入される境界条件について言及し、高次応力に対する境界条件が GN 転位密度の境界条件に対応することを述べている。

第6章では、有限要素法による数値解析を行うために5章で導出した仮想仕事の原理を離散化している。加えて、数値計算の低コスト化・安定化を実現するための手法を導入している。

第7章では、本モデルを用いた Mg 基 LPSO 相に対する FEM 解析の結果およびそれに対する考察について述べている。まず、キンク変形が生じやすい初期方位を設定した短冊状の単結晶に対する解析を行い、キンク帯形成のメッシュ依存性を特性長と試験片寸法比(スケール比)の観点から検討している。そして、高次応力の導入によるキンク帯形成過程について議論するとともに、キンク帯の幅が特性長に応じて変化することを示している。また、本モデルにより寸法効果を表現可能なことを明らかにしている。続いて多結晶に対する解析を実施し、結晶粒界におけるすべり速度の境界条件が変形に及ぼす影響を GN 転位蓄積およびそれにともなう背応力場形成に基づいて検討している。また、粒界における非底面系の活動にも言及している。最後に、キンク帯を特徴づける回位四重極構造の表現方法について述べ、すべりの不適合度を用いて回位密度分布を簡易的に表現できることを示している。

第8章は結言であり、構築したモデルの性質および FEM 解析から得た知見を要約している.

SUMMARY OF Ph.D. DISSERTATION

School	Student Identification Number	SURNAME, Given name
Integrated Design Engineering		UETA, Ryo

Title

Dislocation-based Crystal Plasticity FE Analysis for Kink Band Formation in Mg-based LPSO Phase Considering Higher-order Stress

Abstract

Magnesium alloys including a Long-Period Stacking Ordered (LPSO) phase have some excellent properties such as light weight, high strength and high heat resistance, and are expected to be used in structural materials of transportation equipment as a prevention measure of the global warming problem. Since, kink band formation in the LPSO phase strengthens the alloys, it is extremely important to clarify the formation mechanisms of kink band. However, the results of FE analyses for the kink band formation based on the conventional dislocation-based crystal plasticity model show the mesh dependence and such numerical property is not desirable in quantitative evaluation of slip and crystal orientation in the kink band. On the other hand, in the theory considering higher-order stress conjugate to the strain gradient, the mesh dependence is reduced because nonlocal information around a material point is introduced into the constitutive law. In the present thesis, a dislocation-based crystal plasticity model considering higher-order stress is developed and the multiscale FE analysis is performed to verify the validity and the capability of the present model.

Chapter 1 is an introduction and explains the background and aims of this study.

In chapter 2, kinematics for large deformation of materials and the concept of crystal plasticity theory are described. In addition, the definitions of GN (Geometrically Necessary) dislocation density and SS (Statistically Stored) dislocation density related to the slip gradient and the slip respectively are given.

Chapter 3 provides various conservation laws in higher-order theory on the basis of the principle of virtual power. The higher-order stress is incorporated to the total free energy and its divergence is expressed as back stress. The general forms of constitutive law for stress and higher-order stress are derived in thermodynamic framework.

Chapter 4 gives rate form of the constitutive equations of elastoviscoplasticity and a higher-order stress. The higher-order stress involves an intrinsic length scale associated with the area in which the GN dislocations distribute and the conventional hardening rule is modified by extending a representation of the SS dislocation density to that depending on the curvature of slip plane. Moreover, the relationship between the conventional model and the higher-order stress one is investigated.

In chapters 5 and 6, the principle of virtual power is extended to the rate form and discretized on the basis of FEM. The boundary conditions for slip rate and higher-order stress, which are newly introduced is described in detail and the correlation between the boundary condition for higher-order stress and GN dislocation density is clarified.

Chapter 7 shows the results of FE analyses for the LPSO phase. The mesh dependence for the kink band formation in single crystal is discussed from the view point of size effect defined as a ratio of the intrinsic length scale to the specimen size. The relationship between the intrinsic length scale and the width of the kink band is also referred and it is shown that the present model can express the size dependence of materials. In analyses for polycrystals of LPSO phase, the effects of additional boundary condition for slip rate on the grain boundaries are discussed through the GN dislocation pile-up and the activity of non-basal slips. Furthermore, the method to depict a disclination quadrupole using the incompatibility of slip is mentioned.

Chapter 8 summarizes the conclusions obtained in this study.