

双晶回復を考慮した結晶塑性有限要素法による マグネシウム合金の変形挙動予測

浜 孝之*

Journal of The Japan Institute of Light Metals, Vol. 65, No. 5 (2015), 174-183
© 2015 The Japan Institute of Light Metals

Prediction of deformation behavior in magnesium alloy using crystal plasticity finite-element method considering detwinning

Takayuki HAMA*

Keywords: *magnesium alloy sheet, crystal plasticity finite-element method, twinning, detwinning, unloading behavior, differential work-hardening behavior*

1. はじめに

マグネシウム（以下、Mg）合金は実用的に用いられる構造用金属材料の中で最も密度が低く、また高い比強度、比剛性を有する。そのため輸送機器の軽量化を促進させる材料として注目を集めている^{1),2)}。一方Mg合金板は、常温では非常に特徴的な塑性変形特性を示し、また塑性加工性が著しく悪いという特徴を有する^{3)~7)}。例えば一軸引張や曲げ変形では比較的大きな変形を与えることができるが、張出加工や絞り加工においては常温ではほとんど満足な変形を与えることができない^{2),8),9)}。そのためMg合金板のプレス加工への適用は困難なのが現状であり、幅広い利用には至っていない。

Mg合金板における特徴的な塑性変形特性は、六方最密格子の結晶構造を有することに起因する。Mg合金では、すべり系の種類によって初期の臨界分解せん断応力（Critical resolved shear stress, 以下CRSS）が大きく異なり^{2),10)}、常温では活動可能なすべり系が限られている。そのためすべり系の活動だけでは塑性変形を受け持つことができず、変形に極性がある双晶変形の活動が大きな役割を担うこととなる。さらに通常板材成形で用いられる圧延板では、六方晶の底面が板厚方向に強く配向した底面集合組織が発達している^{2),3)}。以上のような結晶レベルの強い異方性や強い集合組織によりMg合金圧延板では強い変形異方性が生じ、これが特徴的な塑性変形特性や低い塑性加工性を引き起こす要因となっている。

このような結晶構造と集合組織に由来する諸問題を解決してMg合金板の利用拡大を実現するためには、加工性に優れたMg合金板^{11)~13)}や温間成形をはじめとする新しい加工法^{8),14),15)}の研究開発を進めるとともに、その根本的な塑性変形メカニズムを十分理解することが重要である。そのためこれまで、原子論レベル^{16),17)}から転位論レベル^{18),19)}、そして

連続体（マクロ）レベル^{3)~7)}に至るまで様々なスケールからMg合金の変形メカニズムの解明を目指した研究が活発に展開されてきた。しかしながら、当然各スケール間では空間的、時間的に大きな隔りがあるため、原子論レベルや転位論レベルで得られた知見をマクロレベルに直接応用するのは容易でない。

そこで近年注目されているのが、結晶塑性解析である。結晶塑性解析手法は結晶粒レベルのすべり系/双晶系の活動に基づいてマクロレベルの塑性変形挙動を予測することが可能なマルチスケール解析手法である。結晶レベルの異方性がマクロな塑性変形に多大な影響を及ぼすMg合金においては、その変形特性を理解する上でまさに最適な「スケール」を対象とした便利な手法である。近年では世界中の研究者が結晶塑性解析を用いてMg合金の研究に取り組んでおり、その変形メカニズム理解に大きく貢献している。

本稿では、筆者らがこれまで取り組んできたMg合金のための結晶塑性有限要素法（以下、FEM）の開発と、結晶塑性FEMを用いてMg合金板の変形メカニズムを検討した事例^{20)~23)}をいくつか紹介する。紙面の都合上ここでは筆者らの研究成果の紹介に限定することとし、そのほかの研究事例については適宜引用する文献をご参照いただきたい。

2. 結晶塑性有限要素法

2.1 単結晶の構成式

結晶塑性解析の基本的な考え方や定式化は1980年代初頭にはすでに確立されており^{24)~26)}、その後も脈々と研究が続けられてきた。一方でMg合金に対する注目の高まりから、特に六方晶金属を対象として近年急速にその研究開発が活発化してきた感がある。まさに、古くて新しい技術である。まず、現在広く用いられ、また筆者らも採用している単結晶構成式の概要を示す。その速度型の定式化においては、次式の

* 京都大学大学院エネルギー科学研究科（〒606-8501 京都府京都市左京区吉田本町） Graduate school of Energy Science, Kyoto University (Yoshida-honmachi, Sakyo-ku, Kyoto 606-8501) E-mail: hama@energy.kyoto-u.ac.jp
受付日：平成26年11月28日 受理日：平成27年2月11日

ように速度勾配テンソル L が加算分解できると仮定する。

$$L = L^* + L^P \quad (1)$$

ただし、 L^* は弾性速度勾配テンソルであり弾性変形および剛体回転による寄与分を、 L^P は塑性速度勾配テンソルであり塑性変形による寄与分を表す。結晶塑性モデルでは、塑性速度勾配テンソル L^P は各すべり系および双晶系で生じたすべり速度の総和で与えられると考える。すなわち、すべり系 α におけるすべり速度を $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 、すべり面法線とすべり方向を表す単位ベクトルをそれぞれ $m^{(\alpha)}$ 、 $s^{(\alpha)}$ と表記すると、塑性速度勾配テンソル L^P は次式で与えられる。

$$L^P = \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}^{(\alpha)} (s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)}) \quad (2)$$

ただし N は単結晶内におけるすべり系および双晶系の総数である。このように L^P が定義できれば、式(2)を次式で与えられる一般的な速度型弾性構成式へ導入すればよい。

$$\dot{\sigma}^* = \dot{\sigma} - W^* \cdot \sigma + \sigma \cdot W^* = C : D^* \quad (3)$$

ただし σ は Cauchy 応力テンソルを、 \cdot および \cdot の記号はそれぞれ Jaumann 速度および物質微分を表す。 C は弾性構成テンソルであり、等方性を仮定すれば一般化された Hooke の法則を用いればよい。また、 W および D はそれぞれスピテンソルおよび変形速度テンソルを表し、その定義式と加算分解は以下の式で与えられる。

$$D = \frac{1}{2} (L + L^T), \quad W = \frac{1}{2} (L - L^T) \quad (4)$$

$$D^* = D^* + D^P, \quad W^* = W^* + W^P \quad (5)$$

ただし T は転置を表す。また式(2)、(5)から、 D^P および W^P は次式で与えられる。

$$D^P = \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}^{(\alpha)} p^{(\alpha)}, \quad p^{(\alpha)} = \frac{1}{2} (s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)} + m^{(\alpha)} \otimes s^{(\alpha)}), \quad (6)$$

$$W^P = \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}^{(\alpha)} \omega^{(\alpha)}, \quad \omega^{(\alpha)} = \frac{1}{2} (s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)} - m^{(\alpha)} \otimes s^{(\alpha)}). \quad (7)$$

式(3)に式(4)~(7)を代入して整理すると、最終的に次のような関係が得られる。

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}^* &= \dot{\sigma} - W^* \cdot \sigma + \sigma \cdot W^* \\ &= C : D - \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}^{(\alpha)} (C : p^{(\alpha)} + \omega^{(\alpha)} \cdot \sigma - \sigma \cdot \omega^{(\alpha)}) \end{aligned} \quad (8)$$

これが単結晶における弾塑性構成式の基本形である。

結晶塑性モデルでは、塑性変形を評価するためには式(2)におけるすべり速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ を適切に決定することが重要である。筆者らはその決定には、次式の粘塑性型のモデル^{27),28)}を採用している。

$$\frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\dot{\gamma}_0} = \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{\tau_Y^{(\alpha)}} \right|^{\frac{1}{m}} \text{sign}(\tau^{(\alpha)}), \quad \tau^{(\alpha)} = s^{(\alpha)} \cdot \sigma \cdot m^{(\alpha)} \quad (9)$$

ここで、 $\dot{\gamma}_0$ は基準となるすべり速度、 $\tau^{(\alpha)}$ は現在のすべり抵抗、また $\tau^{(\alpha)}$ は分解せん断応力である。また m はひずみ速度感受性指数に相当する。式(9)は、多くの金属材料がひずみ速度依存性を示すという特徴に基づいて提案されたモデルで

あり、現在広く用いられている。

変形開始時には $\tau_Y^{(\alpha)}$ は初期 CRSS τ_0 と一致しているが、加工硬化を考慮する場合は塑性変形の進行に伴って $\tau_Y^{(\alpha)}$ を発展させる必要がある。 $\tau_Y^{(\alpha)}$ の発展則として、次式が用いられる場合が多い。

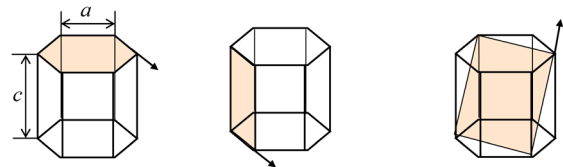
$$\dot{\tau}_Y^{(\alpha)} = \sum_{\beta} q_{\alpha\beta} h |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \quad (10)$$

ただし h は加工硬化率を表す。また $q_{\alpha\beta}$ は硬化係数行列であり、すべり系 β の活動がすべり系 α の硬化に及ぼす影響を表す。したがって、その成分数は $N \times N$ である。

2.2 すべり系および双晶系の選択

Mg 合金では、常温では底面すべり系の CRSS が非底面すべり系に比べて著しく低いことが知られている。しかしながら底面すべり系だけでは十分な塑性変形を担うことができない (Mises の条件を満足できない) ため、非底面すべり系もその塑性変形に大きく寄与していると理解されている²⁹⁾。その一方で、具体的に活動しうる非底面すべり系の種類については未だ議論の余地があるのが現状である^{3),30)}。結晶塑性解析の観点では、例えば Graff³¹⁾ は底面 $\langle a \rangle$ すべり系のほか少なくとも何らかの $\langle a+c \rangle$ すべりを考慮する必要があると結論づけている。また Agnew³⁰⁾ は、Mg 合金圧延板における r 値の変化を適切に予測するためにはやはり何らかの $\langle a+c \rangle$ すべりを考慮する必要があるとしている。筆者ら^{20)~23)} は、Graff³¹⁾ にならって $(0001)\langle 11\bar{2}0 \rangle$ すべり系 (底面 $\langle a \rangle$ すべり系, 3つ), $\{10\bar{1}0\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ すべり系 (柱面 $\langle a \rangle$ すべり系, 3つ), $\{11\bar{2}2\}\langle 11\bar{2}3 \rangle$ すべり系 (錐面 $\langle a+c \rangle$ すべり系, 6つ) が活動しうるとして、解析を行っている。考慮したすべり系を模式的に図1に示す。

Mg 合金では、すべり系の活動に加えて双晶変形も塑性変形を担う重要な変形機構の一つである³²⁾。双晶変形は双晶面を境にして結晶構造を鏡像関係の配置へと変形させる変形機構であり、変形に伴って大きなせん断ひずみと結晶格子の回転をもたらす。Mg 合金で最もよく観察される双晶系として、 $\{10\bar{1}2\}\langle 10\bar{1}\bar{1} \rangle$ 双晶系が挙げられる^{29),33)}。純 Mg では、図1に示す結晶格子の高さ c と底面での原子間距離 a の比 c/a (軸比) は 1.624 である。そのため $\{10\bar{1}2\}$ 双晶系は、図2(a)



底面 $\langle a \rangle$ すべり系 柱面 $\langle a \rangle$ すべり系 錐面 $\langle a+c \rangle$ すべり系

図1 結晶塑性解析で考慮したすべり系

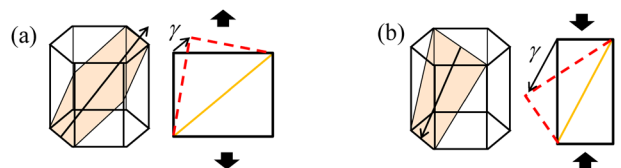


図2 Mg合金で活動しうる主な双晶系

(a) $\{10\bar{1}2\}$ 双晶系, (b) $\{10\bar{1}1\}$ 双晶系

に示すように c 軸を伸張する方向に活動する。このような特徴から、 $\{10\bar{1}2\}$ 引張双晶などと呼ばれる。一方変形後期では、 $\{10\bar{1}1\} \langle 10\bar{1}2 \rangle$ 圧縮双晶 (図2(b)) が活動し、結果として延性低下や破壊の要因となることが報告されている^{29),34)}。しかしながら、 $\{10\bar{1}1\}$ 圧縮双晶の加工硬化への影響については不明な点が多いため、結晶塑性解析において $\{10\bar{1}1\}$ 圧縮双晶を考慮した事例は多くない³⁵⁾。筆者らの研究においても、双晶系については $\{10\bar{1}2\}$ 引張双晶 (6つ) のみを考慮して計算を行っている。以上から、筆者らの解析ではすべり系および双晶系の総数は $N=18$ (式(2)) である。

前述のようにMg合金では底面 $\langle a \rangle$ すべりが最も活動しやすい一方で、非底面すべりは常温では活動しづらい。このような違いは解析においては、CRSSおよび加工硬化率 h (式(10)) によって表現される。加工硬化率 h の具体形として種々のモデルが提案されている^{24),35),36)} が、筆者らはGraffら³¹⁾の研究にならって次式を用いている。

$$h = h_0, \quad (11)$$

$$h = h_0 \left(1 - \frac{\tau_0}{\tau_\infty} \right) \exp \left(-\frac{h_0 \bar{\gamma}}{\tau_\infty} \right), \quad \bar{\gamma} = \sum_{\alpha} \int |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| dt \quad (12)$$

ただし h_0 , τ_∞ は材料パラメータである。底面 $\langle a \rangle$ すべり系には線形硬化則 (11) を、また柱面 $\langle a \rangle$ すべり系および柱面 $\langle a+c \rangle$ すべり系には飽和型硬化則 (12) を仮定する。なおこのような式の使い分けには本質的な意味はなく、例えばすべてのすべり系について式(12)を仮定することも可能である。底面 $\langle a \rangle$ すべり系に対して式(11)を用いているのは、底面 $\langle a \rangle$ すべり系のように加工硬化が小さいと仮定できる場合は式(11)を用いることで同定すべきパラメータ数を減らすことができるという程度のものである。

2.3 双晶のモデリング

前節でも概説したように、双晶変形は大きなせん断ひずみと結晶方位回転を同時に伴う現象であり、転位運動によるすべり変形とはそのメカニズムが大きく異なる。また過去の研究から、一度活動した双晶がその後反転負荷を受けることで元の方位に回復する (以下、双晶回復) 現象が報告されている^{3),4)}。その一例を図3に示す。Mg合金圧延板に圧縮-引張の反転負荷を加えた際の真応力-対数ひずみ曲線と種々の変

形状態における光学顕微鏡による組織観察結果である。なお組織観察は除荷後に行った。 $\{10\bar{1}2\}$ 引張双晶は組織観察では図中に示すように結晶粒内でレンズ状の領域として観察される。双晶変形領域は、圧縮変形下 (点A→点B) で増加している。これは、以下のようなメカニズムによると考えられている。板に対して面内圧縮変形を与えると板厚は増加しようとするため、各結晶粒の板厚方向には引張応力が働く。Mg合金圧延板は強い底面集合組織を有しているため、圧縮変形下では c 軸方向に引張応力が作用しやすくなり、活発に双晶活動する。

一方、その後圧縮から引張の反転負荷を受けると、圧縮時に多く見られた双晶変形領域が徐々に消滅している (点B→点C→点D)。これは、前述の双晶回復によるものと考えられている。また双晶回復に伴う結晶方位分布の回復についても、X線回折や電子線後方散乱回折 (EBSD) などによる結晶方位測定から確かめられている^{2),5),37)}。このように双晶変形は、その活動には極性がある一方である種の可逆的な変形も呈する非常に複雑な挙動を示す。また結晶粒レベルで考えると、双晶変形領域は非変形領域 (母材) とは結晶方位が大きく異なるため、双晶変形の進行に伴って結晶粒の微細化が進むと解釈することもできる。結晶塑性解析では、以上のような双晶変形に伴うせん断ひずみの発生と結晶方位変化を力学的かつ合理的にモデル化する必要がある。双晶活動についてはこれまで様々なモデルが提案されている³⁸⁾⁻⁴⁴⁾ が、Mgの結晶塑性解析に関する研究が活発化しているのに伴って最近では双晶回復を考慮したモデルもいくつか提案されている^{36),45)}。以下では、筆者らが提案したモデル^{22),23)}を紹介する。

双晶変形領域と母材の境界 (レンズ状領域の縁、双晶界面) は、転位が存在する端部を除いてほぼ双晶面で構成されていると近似できる⁴⁶⁾。すなわち、双晶界面に c 軸方向の引張応力が作用すれば双晶活動 (領域が拡大) し、その後反転負荷を受けて双晶界面に c 軸方向の圧縮応力が作用すれば双晶回復 (領域が縮小) すると近似できる。以上の仮定に基づき、筆者らはVan Houtteが提案した双晶モデル³⁸⁾を双晶回復まで発展させた新しいモデルを提案した。この方法では、双晶変形によるせん断ひずみの発生と結晶方位回転を次のように分離してモデル化している。まずせん断ひずみの発展に

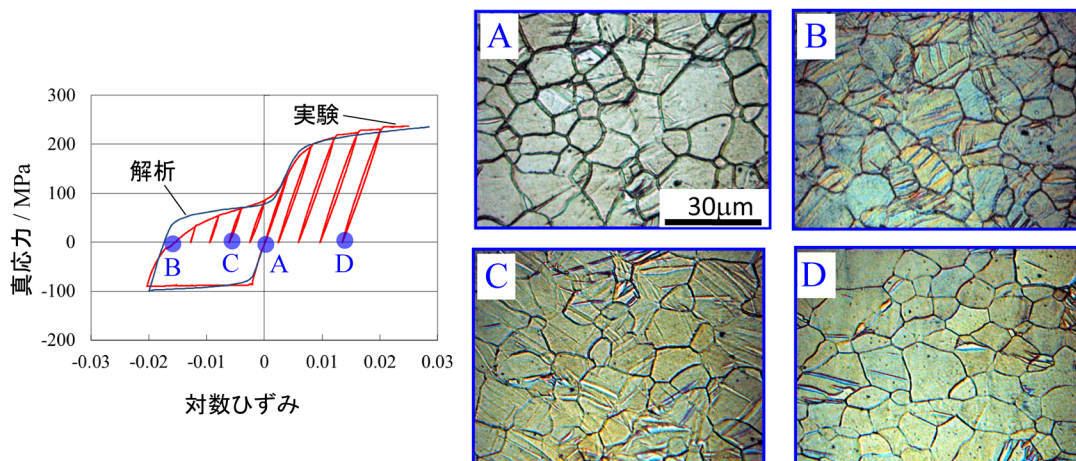


図3 圧縮-引張変形における応力-ひずみ曲線と組織観察結果

関するモデル化を示す。筆者らのモデルでは、双晶系 α に関する双晶面法線ベクトル $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ は双晶界面を表すと仮定する。そのうえで、双晶変形の極性に基づき、双晶界面に作用する分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ が正になったときのみ双晶活動が起こると考える。そしてこのときのせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}_{tw}^{(\alpha)}$ はすべり変形と同様に式(9)で与え、また加工硬化率 h には線形硬化則(11)を仮定する。なおこの加工硬化率は、結晶格子レベルの双晶変形そのものが加工硬化することを表すのではなく、応力の上昇に伴って結晶粒内での双晶変形領域が拡大することを表すと考える。

一方、双晶変形による結晶方位回転は、以下のように統計的な手法によって表現する。双晶変形によって生じた累積せん断ひずみを $\bar{\gamma}_{tw}^{(\alpha)} = \int \dot{\gamma}_{tw}^{(\alpha)} dt$ とおくと、一結晶粒内を占める双晶変形領域の体積率 $f^{(\alpha)}$ を次式で定義する。

$$f^{(\alpha)} = \frac{\bar{\gamma}_{tw}^{(\alpha)}}{\gamma_{ref}} \quad (13)$$

ただし γ_{ref} は結晶粒全域が双晶変形した場合に生じうるせん断ひずみである。式(13)は、結晶粒内で生じる変形がほぼ一様であれば十分成り立つ仮定である^{38),47)}。 γ_{ref} は図2で示した双晶変形によるせん断ひずみ γ と対応させて考えることも可能だが、前述のように結晶粒レベルの変形に置き換えてモデル化する場合は、材料パラメータの一つと考えた方が都合がよい。ここで計算に先立って、双晶体積率が取りうる最大値(閾値) $f_{th}^{(\alpha)}$ を結晶粒ごとに適当に決めておき、毎ステップで双晶体積率 $f^{(\alpha)}$ を閾値 $f_{th}^{(\alpha)}$ と比較する。例えば筆者らは、閾値 $f_{th}^{(\alpha)}$ を0.3~1.0の範囲^{48),49)}で各結晶粒へランダムに割り振っている。そして $f^{(\alpha)} = f_{th}^{(\alpha)}$ が満たされたとき、当該結晶に属する12個すべてのすべり系を次式の回転テンソル \mathbf{R}^{nw} を用いて方位回転させる。

$$\mathbf{R}^{nw} = 2\mathbf{m}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)} - \mathbf{I} \quad (14)$$

ただし \mathbf{I} は単位テンソルである。なお筆者らのモデルでは、前述のように双晶面法線ベクトル $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ は双晶界面を表すと仮定している。そのため、方位回転が起こっても双晶界面そのもの方位は変わらないと考えて、双晶面法線ベクトル $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ と双晶に関するすべり方向ベクトル $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ は方位回転させない。また本モデルでは、双晶回転した結晶粒内では双晶変形は発生しない(二重双晶は発生しない)と仮定する。

続いて、双晶回復のモデル化を示す。双晶系 α において一度 $\tau^{(\alpha)} > 0$ の下で双晶活動によるせん断ひずみが発生した履歴がある場合、その後負の分解せん断応力($\tau^{(\alpha)} < 0$)が作用することで双晶回復が起こることができると考える。このとき、双晶回復によるせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}_{dtw}^{(\alpha)}$ は双晶活動時と同様に式(9)で与えられ、また加工硬化率 h は式(11)で与えられると仮定する。 $\tau^{(\alpha)} > 0$ の下で双晶活動により生じたせん断ひずみを $\bar{\gamma}_{tw}^{(\alpha)max} (\leq \gamma_{ref} f_{th}^{(\alpha)})$ とし、また $\tau^{(\alpha)} < 0$ で双晶回復によって生じた累積せん断ひずみを $\bar{\gamma}_{dtw}^{(\alpha)} = \int \dot{\gamma}_{dtw}^{(\alpha)} dt$ と表記すると、双晶回復は次式が満たされるまで進展することができると考える。

$$\bar{\gamma}_{dtw}^{(\alpha)} = \bar{\gamma}_{tw}^{(\alpha)max} \quad (15)$$

すなわち、負荷方向が反転するまでの双晶活動により発生したせん断ひずみに達するまで双晶回復できると考える。この

仮定は、双晶変形領域が反転負荷後にほぼ消滅するという実験観察結果に基づくものである。もし当該結晶粒が双晶活動中($\tau^{(\alpha)} > 0$)に $f^{(\alpha)} = f_{th}^{(\alpha)}$ の関係を満たして式(14)により方位回転していた場合は、式(15)が満たされた時点(この場合は $\bar{\gamma}_{tw}^{(\alpha)max} = \gamma_{ref} f_{th}^{(\alpha)}$)で回転テンソル $(\mathbf{R}^{nw})^T$ を用いて逆方向へ方位回転させる。式(15)が満たされた以降は、すべての双晶変形領域が消滅したものとして双晶回復の過程が終了したと考える。

なお過去の研究から、双晶活動時に比べて双晶回復時の方が、CRSSが低いことが報告されている^{例えば3),7)}。これは双晶の核生成に比べて進展/回復の方が生じやすいためと説明されている。そこで本双晶モデルにおいても、双晶回復時の初期CRSSを別途同定すべきパラメータの一つとして取り扱っている。

以上のようにVan Houtte流のモデルでは、一つの結晶粒内では双晶変形領域と母材が共存することを許容せず、いずれかの状態しかあり得ない。したがって単結晶レベルで見ると実際には起こりえないモデルである。一方閾値 $f_{th}^{(\alpha)}$ を適切に設定することで、後述するように多結晶全体で見た場合の平均的な挙動は適切に再現することができる。ただし、閾値 $f_{th}^{(\alpha)}$ は物理的な意味が不明瞭であるという大きな欠点がある。そこで物理的に明快な閾値を導入した試みもある³⁹⁾。

一方、一結晶粒内で双晶変形領域と母材の共存を考慮したモデルも提案されている。その代表的な例として、Kalidindiのモデル⁴⁰⁾が挙げられる。しかしながらこれらのモデルでは、双晶活動の進展に伴って結晶粒数が莫大に増加してしまう欠点があり、数値計算上は実際には何らかの制限を加える必要がある。

2.4 結晶塑性有限要素法

筆者らは、上述の単結晶塑性モデルを陽解法に基づく静解析弾塑性FEMの枠組みに導入して解析を行っている^{50),51)}。なお時間積分の安定性のため、Pierceら⁵²⁾により提案されたrate tangent modulus methodを採用している。また、陽的な時間積分に伴う不釣り合い力の過度な増大を防ぐため、 r_{min} 法により各ステップの時間増分を適宜調整している。筆者らのプログラムでは一ステップで発生するすべり増分量に対しても r_{min} 法でその最大値を制限している。

筆者らが解析で用いている有限要素モデルの一例を図4に示す。立方体を六面体一次要素により各方向へ10分割したモデルである。選択低減積分法を用いており、一要素内の積分点数は8である。各積分点には解析に先立って結晶方位を割り当てることで、Mg合金の初期結晶方位分布を疑似的に再現した有限要素モデルを作成する。解析で用いる初期方位としては、EBSD等により実測された結果を直接用いる場合や、実測された初期方位分布を模擬して人工的に作成された方位を用いる場合などがある。後者の方法により底面集合組織を模して作成した結晶方位分布の例を図4に示す。筆者らは、一要素が一結晶粒に対応すると仮定して、一要素内の8積分点には同一の初期方位を割り当てている。ただし、その後の結晶方位発展は積分点ごとで異なる。なお、筆者らが行っている解析の範囲では、この程度の初期方位数でも十分であることが確かめられている²⁰⁾。初期方位数の解析結果に与える影響については、Tadano⁵³⁾が詳細に調査している。式(9)~(13)で用いられる種々の材料パラメータは、単調引

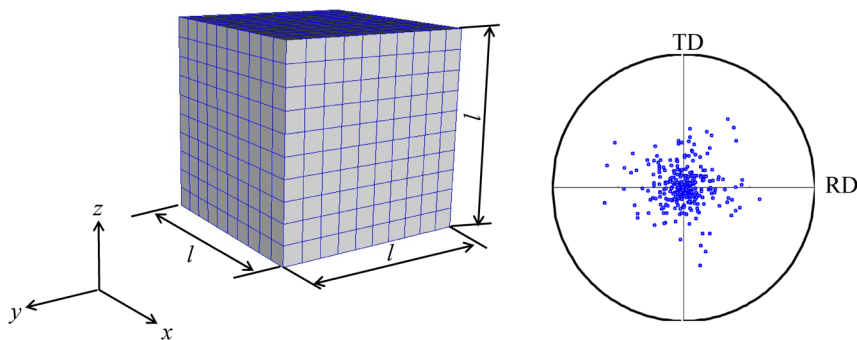


図4 結晶塑性解析で用いた有限要素モデルと底面集合組織を模擬した結晶方位分布 ((0001) 極点図) の例

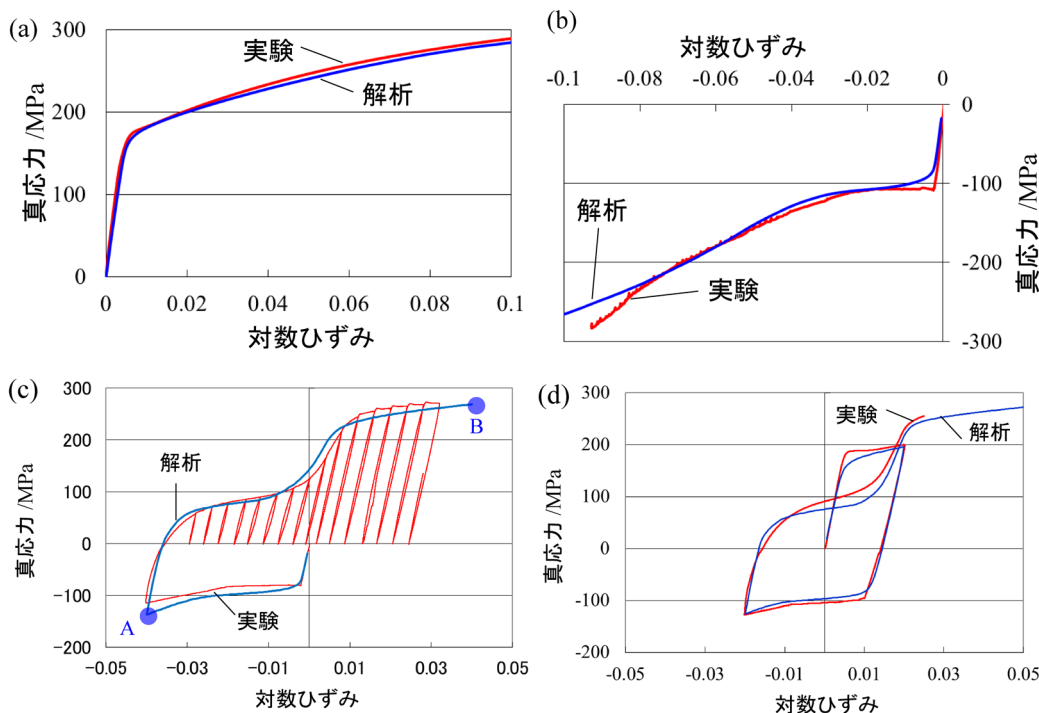


図5 各種負荷経路における応力-ひずみ曲線^{22), 23)}
 (a) 単調引張, (b) 単調圧縮, (c) 圧縮-引張, (d) 引張-圧縮-引張

張および単調圧縮下での応力-ひずみ曲線が実験と解析で一致するように決定される場合が多い。次章で紹介する解析においても、この方法で同定したパラメータを用いている。なお双晶回復に関するCRSSの同定には、圧縮-引張下での応力-ひずみ曲線を用いている。式(10)における硬化係数行列 $q_{\alpha\beta}$ には、Graffら³¹⁾の提案した値を用いている。

3. 解析事例

3.1 各種負荷経路における加工硬化挙動

本章では、筆者らの開発した結晶塑性FEMによるいくつかの解析結果を紹介する。解析結果の妥当性検証のため、AZ31B合金圧延板(板厚0.8mm)を用いた実験結果も併せて示している。解析モデルは図4に示した方法に準じた。また解析で用いた材料パラメータは、図3、図5(a)、(b)に示すように、単調引張、単調圧縮、そして圧縮-引張下の応力-ひずみ曲線が実験と解析で一致するように同定した^{22), 23)}。なお実験では、クシ歯型のジグ⁵⁴⁾を用いて薄板の面内圧縮試験を行った。

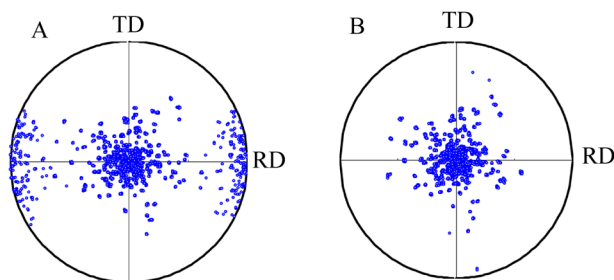


図6 圧縮-引張変形中の(0001)極点図の変化²²⁾
 図中A, Bは図5(c)中の記号と対応する

図5(c)、(d)に、同定されたパラメータを用いて種々の負荷経路で解析を行った事例を示す^{22), 23)}。定量的には改良の余地が残されているものの、引張と圧縮の非対称性や圧縮後の引張で見られるS字状の曲線が無理なく再現できている。図6に、図5(c)の各点における(0001)極点図を示す²²⁾。圧縮時には双晶活動により結晶方位の分散が進むが、その後

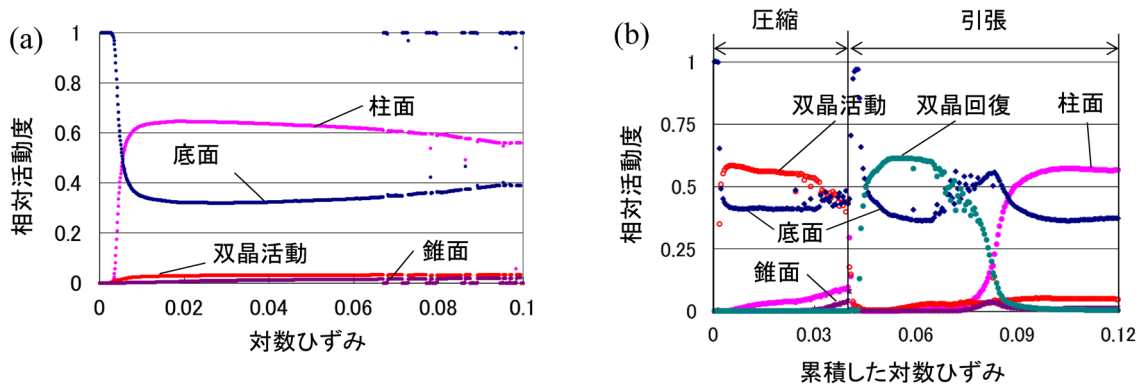


図7 各種荷経路における相対活動度の推移
(a) 単調引張²³⁾, (b) 圧縮-引張²²⁾

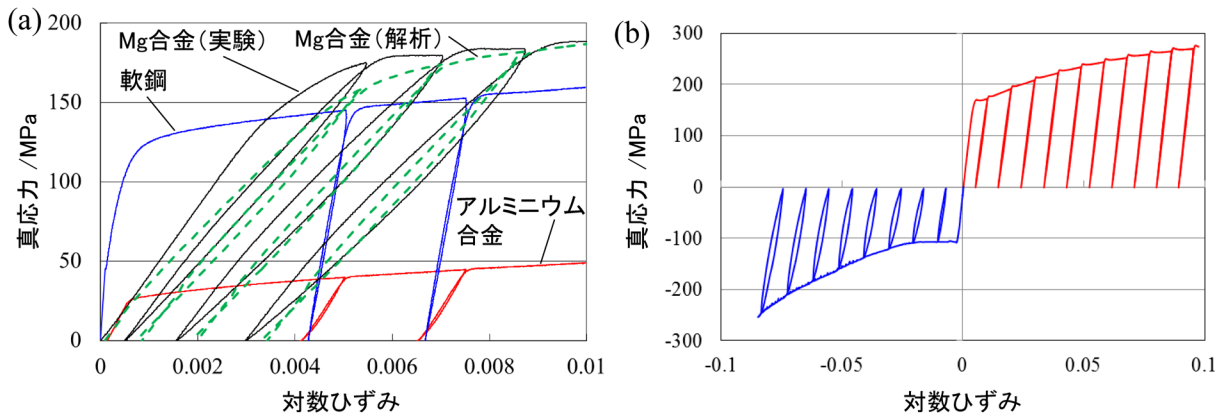


図8 繰り返し荷-除荷時の応力-ひずみ曲線 (a) 種々の金属板における引張-除荷挙動²⁰⁾, (b) Mg合金板における引張/圧縮-除荷挙動⁶⁾

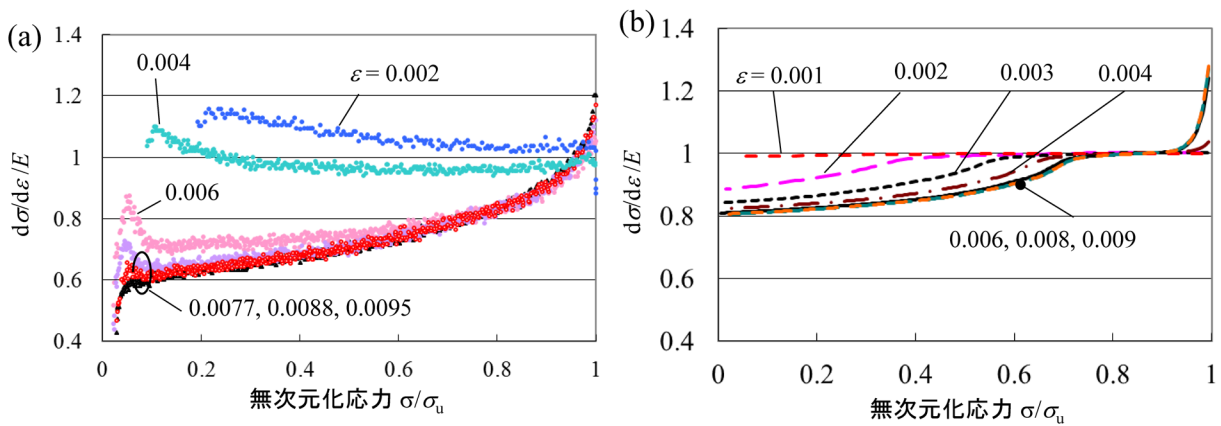


図9 引張-除荷における除荷時の瞬間勾配推移²⁰⁾ (a) 実験結果, (b) 解析結果。縦軸はヤング率 E で、また横軸は除荷開始時の応力 σ_u で無次元化している。図中の ε は除荷時のひずみを示す

荷方向が引張へ反転すると、双晶回復により元の強い底面集合組織が復元されている。この傾向は、過去の研究における実験結果^{3),5)}と定性的によく一致している。

結晶塑性解析では、塑性変形中の各すべり系および双晶系の活動の様子を直接知ることができるのが大きな特徴である。図7^{22),23)}には、単調引張(図5(a))および圧縮-引張(図6)時の相対活動度の推移を示す。相対活動度 r_i は次式で与えられる評価方法であり、塑性変形に与える各すべり系および双晶系の相対的な寄与の大きさを示している³⁹⁾。

$$r_i = \frac{\sum_{n_s}^n \sum_{k \left(\begin{smallmatrix} \text{a family of} \\ \text{slip or twinning systems, } i \end{smallmatrix} \right)} \left| \Delta\gamma^{(n,k)} \right|}{\sum_{n_s}^n \sum_{j \left(\begin{smallmatrix} \text{all families of} \\ \text{slip and twinning systems} \end{smallmatrix} \right)} \left| \Delta\gamma^{(n,j)} \right|} \quad (16)$$

分母はあるステップで生じるすべり増分の総和を、また分子はそのステップで生じるある一種類のすべり系におけるすべり増分の総和を表す。単調引張では、塑性変形開始直後を除

いて柱面すべり系の活動が最も活発であり、次いでCRSSの小さい底面すべり系の活動が活発である。一方、圧縮-引張においては、圧縮時には双晶活動が最も活発であるが、引張に転じると引張前期では双晶回復が、また引張後期では柱面すべり系の活動が活発である。この結果から、圧縮後の引張時には、双晶回復に比べてCRSSが高い柱面すべり系の活動が後期において支配的になるため、引張後期で加工硬化率の上昇が起こりS字状の曲線が発現したものと理解することができる。

3.2 除荷時非線形挙動の発現メカニズム

Mg合金ではその特徴的な変形挙動の一つとして、図8(a)²⁰⁾に示すように他の金属材料に比べて除荷時に強い非線形性を示す^{4),6)}ことが知られている。またその非線形性は、図8(b)⁶⁾に示すように引張時に比べて圧縮時の方が顕著であり、引張-圧縮の非対称性がある。過去の研究^{4),6)}から、除荷時の非線形性は双晶の活動/回復に起因すると説明されてきた。しかしながら双晶変形だけでは、双晶活動が非常に小さい引張変形(図7(a))下でも非線形性が発現する原因を説明できない。

そこで筆者らは、結晶塑性FEMを用いて除荷時非線形挙動の発現メカニズムを検討した^{20),23)}。まず図8(a)に、解析で得られた引張-除荷変形時の応力-ひずみ曲線を示す。解析では、実験に比べてその程度が小さいものの、除荷時に明瞭な非線形挙動が発現している。図9には、除荷時の応力-ひずみ曲線における瞬間的な勾配の推移を示す²⁰⁾。実験結果(図9(a))では、除荷時のひずみ $\varepsilon=0.002, 0.004$ のときの瞬間勾配は除荷中ほぼヤング率 E と一致している。この結果は、このひずみ域ではほぼ弾性変形のみが生じていることを示す。その後除荷時のひずみ ε が大きくなると、瞬間勾配は除荷開始時の急激な低下とその後のなだらかな低下を示す。全体的な低下量はひずみの増加とともに大きくなるものの、ひずみ1%付近で収束している。一方解析結果(図9(b))においても、定性的には同様の傾向が再現されている。このような除荷時の非線形性は、従来の現象論構成式では特別の仮定を与えない限り決して再現することはできないが、結晶塑性解析では特別の仮定を与えることなく自然に再現できるのが大きな魅力である。なお、除荷開始時に見られる急激な勾配変化は材料の粘性に起因すると説明されているが、筆者

らの解析でもひずみ速度依存性指数 m (式(9))に応じてこの様子が大きく変わる結果が得られている。

図10に引張-除荷時の各すべり系におけるすべり増分の総和(式(16)の分子部分)の推移を示す²⁰⁾。ここで相対活動度ではなくすべり増分の総和そのものを用いているのは、引張時と除荷時ではすべり増分量は大きく異なるにもかかわらず相対化するとその違いがわからないためである。図10より、除荷時には底面すべり系の活動が最も活発であり、また双晶活動もわずかに見られ、これらが引張-除荷時の強い非線形性をもたらしたと考えられる。詳細な結果は省略するが、除荷時の活発な底面すべり系の活動は、引張時に活動していた底面すべり系が逆向きへ活動したためであることが解析結果から示されている。以上の結果から、除荷時の非線形挙動は次のようなメカニズムで発現すると理解できる。図7(a)に示したように、一軸引張変形時には柱面すべり系の活動が支配的であり、このときの流動応力はほぼ柱面すべり系の活動によって決まると考えられる。一方除荷に転じると、多結晶体における不均質性から結晶粒によっては除荷中に圧縮応力が作用しうる。またこのときの応力は、柱面すべり系に比べてCRSSが非常に小さい底面すべり系にとっては十分活動できる大きさにもなりえ、結果として巨視的な除荷中に底面すべり系が引張時とは逆向きへ活動したものと考

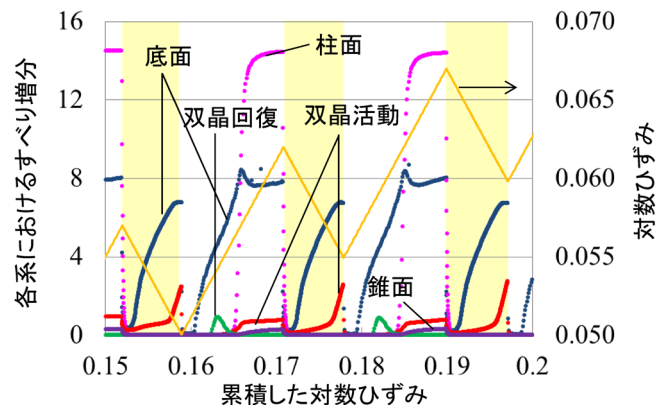


図10 引張-除荷時の各系におけるすべり増分の推移²⁰⁾。ひずみ0.055~0.067の範囲を示す。ハッチングした部分が除荷時に対応する

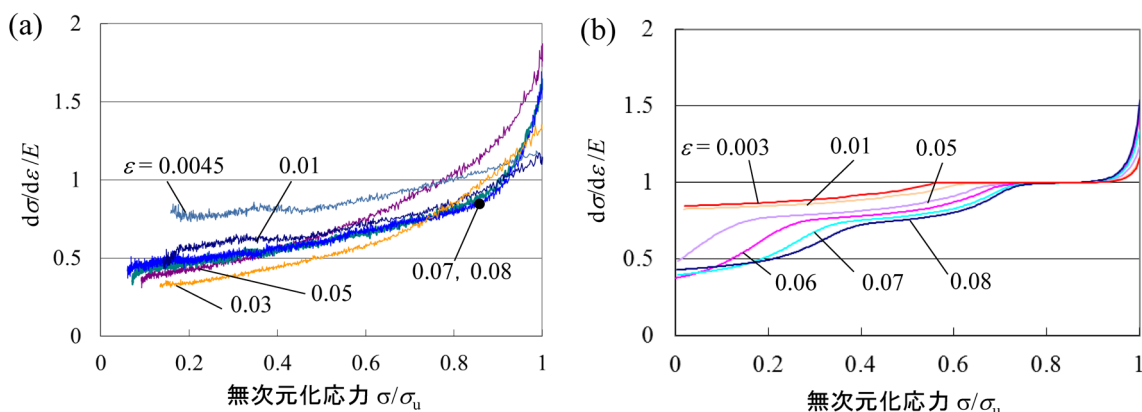


図11 圧縮-除荷における除荷時の瞬間勾配推移²³⁾ (a) 実験結果, (b) 解析結果。縦軸はヤング率 E で、また横軸は除荷開始時の応力 σ_u で無次元化している。図中の ε は除荷時のひずみを示す

られる。またわずかに見られる双晶活動も、同様のメカニズムと考えられる。以上の解析結果より、除荷時の非線形挙動には底面すべり系の活動が大きく影響していることが初めて明らかになった。

続いて、圧縮-除荷時の非線形挙動について考察した結果を紹介する。図11に圧縮-除荷時の瞬間勾配の推移を示す²³⁾。実験では、引張-除荷に比べて除荷中の勾配低下が大きい、すなわち顕著な非線形挙動が見られる。また引張-除荷に比べて、除荷時のひずみ ϵ がより大きくなるまで勾配推移に収束は見られない。一方、解析においても、以上の傾向は定性的によく再現されており、引張-除荷とは明らかに異なる結果が得られている。図12に、圧縮-除荷時のすべり増分の推移を示す²³⁾。前述のように圧縮時には双晶活動が活発であるのに対して、除荷時には底面すべり系に加えて双晶回復が活発であることがわかる。この結果より、引張-除荷に比べて圧縮-除荷の方が顕著な非線形挙動が発現する一因は、圧縮時に活動した双晶が除荷時に回復するためであることが裏付けられた。

一方で図12から明らかなように、圧縮-除荷時ではひずみの増加とともに除荷時の底面すべり系の活動が増大している。詳細な結果は省略するが、解析結果から、これは圧縮時の双晶活動により結晶方位が分散したことでより多くの底面すべり系が活動しやすくなったためであることが明らかとなった。以上のように、除荷時の非線形挙動には双晶回復だけでなく底面すべり系の活動や双晶活動に伴う結晶方位回転

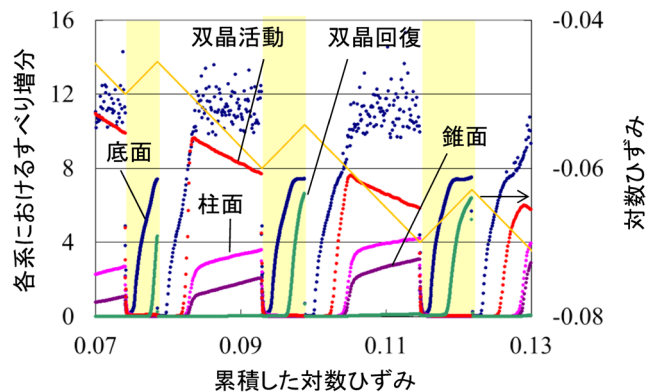


図12 圧縮-除荷時の各系におけるすべり増分の推移²³⁾ ひずみ-0.046~-0.071の範囲を示す。ハッチングした部分が除荷時に対応する

も重要な役割を担っていることが明らかになった。

3.3 等塑性仕事面と異方硬化の発現メカニズム

Mg合金は強い引張-圧縮非対称性ととも、強い異方硬化挙動を示すことが知られている。Andarら⁵⁵⁾は、AZ31合金圧延板の等塑性仕事面(第一象限)を実験的に測定した結果、塑性変形の進行に伴って等塑性仕事面の形状が著しく変化することを示した。しかしながら、そのメカニズムを実験だけから解明することは困難である。そこで筆者らは結晶塑性解析により、異方硬化の再現とそのメカニズム解明を試みた。

図13に解析で得られた等塑性仕事面を示す²¹⁾。比較のため、Misesの降伏関数による降伏曲面を併せて示している。塑性変形開始直後は、等二軸近傍の応力は小さくまた等塑性仕事面は平坦な形状をしている。しかしながら塑性変形が進行するのに伴って、等二軸近傍の加工硬化は著しくなり等塑性仕事面は大きく張り出している。以上の傾向はAndarらによる実験結果⁵⁵⁾と定性的に一致しており、解析においても異方硬化挙動が予測できていることがわかる。

図14に、応力比が $\sigma_{TD}/\sigma_{RD}=1/2$ および $\sigma_{TD}/\sigma_{RD}=1/1$ の場合の相対活動度の推移を示す²¹⁾。応力比 σ_{TD}/σ_{RD} が0/1(図7(a)),

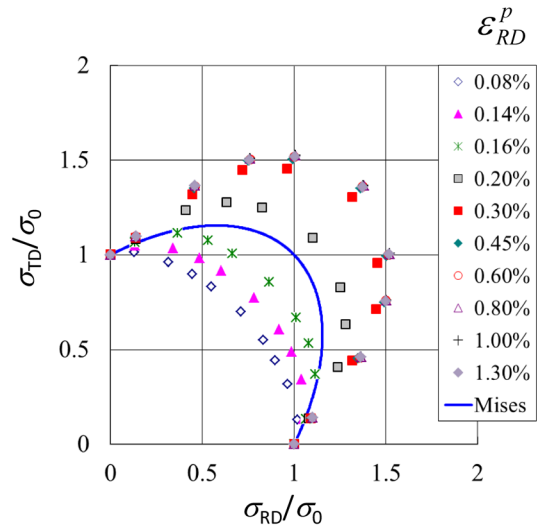


図13 解析による等塑性仕事面の予測結果²¹⁾ 横軸および縦軸がそれぞれ圧延方向(RD)および圧延直角方向(TD)に対応し、またいずれの等塑性仕事面も圧延方向への一軸引張時の応力 σ_0 で除して無次元化している。 ϵ_{RD}^P は圧延方向への一軸引張時の塑性ひずみを示す

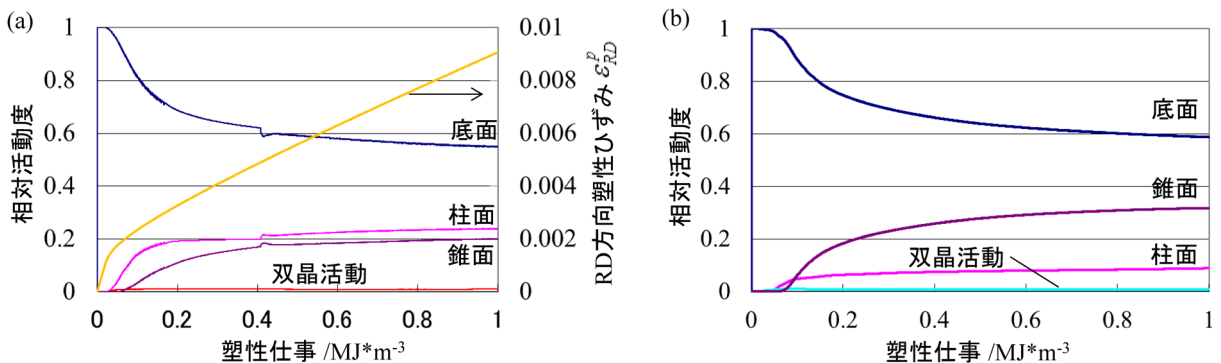


図14 二軸引張時における相対活動度の推移²¹⁾ (a) $\sigma_{TD}/\sigma_{RD}=1/2$, (b) $\sigma_{TD}/\sigma_{RD}=1/1$

1/2 (図14(a)), 1/1 (図14(b))と変化するのに伴い, 塑性変形開始直後では底面すべり系のみが活動するひずみ域が大きくなる一方で, その後の変形では錐面すべり系の活動が大きくなっている。以上の結果から, 図13で見られた異方硬化挙動は次のようなメカニズムで発現したと考えられる。塑性変形開始直後は等二軸近傍では底面すべり系のみしか活動できないひずみ域が単軸引張近傍より大きいため, 応力が小さくまた等塑性仕事面が平坦になる。一方塑性変形が進行すると等二軸近傍ではCRSSの大きい錐面すべり系の活動が大きくなるため, 等二軸近傍の応力が高まり等塑性仕事面が張り出したと考えられる。以上の結果から, 等二軸近傍でも早期から非底面すべり系の活動を開始させることができれば, 異方硬化の程度を大幅に低減できる可能性が示唆される。

4. おわりに

本稿では, これまで筆者らの開発してきた結晶塑性有限要素法の概要といくつかの解析事例を紹介した。結晶塑性解析により, すべり系や双晶系の活動が巨視的な塑性変形挙動に及ぼす影響を直接的に調査することができ, 文字通り「ミクロとマクロをつなぐ」役割を果たしていることがご理解いただければ幸いである。本稿で紹介した解析事例では, 主として巨視的な塑性変形挙動の生じるメカニズムを解明するためのツールとして結晶塑性解析を使用した, もちろん結晶塑性解析の用途はそれだけにとどまらない。例えば結晶塑性解析により加工硬化挙動を高精度に予測できれば, プレス成形シミュレーションで入力値とする材料パラメータを結晶塑性解析から数値的に同定することが可能になる。また結晶塑性解析と塑性加工シミュレーションを融合させれば, 初期の結晶方位や各すべり系の加工硬化則などの結晶レベルの情報から直接プレス成形性を予測できる可能性がある。さらに吉田⁵⁶⁾が紹介しているように, 結晶塑性解析により様々な集合組織を想定した数値実験を行うことにより, 理想的な特性を持つ材料の開発に役立てることができる。このように, 結晶塑性解析は多くの可能性を秘めており, それがMg合金に限らず幅広く援用されている理由となっている。本稿で紹介できなかった結晶塑性解析の種々の解析手法や多様な解析事例については, 黒田・志澤⁵⁷⁾や吉田⁵⁶⁾による優れた解説記事をご参照いただきたい。

一方で, いまだ発展途上段階の技術であることも間違いなく, 解決すべき課題が多く残されている。例えば, 第4章で示した諸解析事例は実験結果を定性的に再現できたものの, 定量的には不十分である。その原因として, 考慮すべきすべり系および双晶系の選択や発展途上段階にある双晶モデルに加えて, すべり系同士の相互作用の取り扱い(式(10)の $q_{\alpha\beta}$)⁵⁸⁾や結晶粒形状の影響⁵⁹⁾など様々な挙げられる。また筆者自身は, パラメータ同定が大きな課題の一つと考えている。前述のように, 通常は単調引張および単調圧縮時の応力-ひずみ曲線から材料パラメータが決定されてきたが, 実際のところこれらの条件だけではパラメータの組み合わせを絞り込むのに不十分であり, 同一の応力-ひずみ曲線を与えるパラメータ群が複数存在する場合がある。したがって, パラメータに多様性の生じない合理的かつ物理的に明快な同定法を開発することが重要である⁶⁰⁾。実用にも耐えうる結晶塑性解析技術の確立を目指して, 今後も引き続き研究を進め

ていきたい。

参考文献

- 1) B. L. Mordike and T. Ebert: *Mater. Sci. Eng. A*, 302 (2001), 37–45.
- 2) 日本塑性加工学会編: マグネシウム加工技術, コロナ社, (2004).
- 3) X. Y. Lou, M. Li, R. K. Boger, S. R. Agnew and R. H. Wagoner: *Int. J. Plastic.*, **23** (2007), 44–86.
- 4) C. H. Cáceres, T. Sumitomo and M. Veidt: *Acta Mater.*, **51** (2007), 6211–6218.
- 5) L. Wu, S. R. Agnew, T. Ren, D. W. Brown, B. Clausen, G. M. Stoica, H. R. Wenk and P. K. Liaw: *Mater. Sci. Eng. A*, 527 (2010), 7057–7067.
- 6) T. Hama, K. Ochi, N. Kitamura, H. Fujimoto and H. Takuda: *Steel Res. Int., Special Edition*, (2011), 1054–1059.
- 7) T. Hama, Y. Kariyazaki, N. Hosokawa, H. Fujimoto and H. Takuda: *Mater. Sci. Eng. A*, 551 (2012), 209–217.
- 8) F.-K. Chen, T.-B. Huang and C.-K. Chang: *Int. J. Mach. Tools Manufact.*, **43** (2003), 1553–1559.
- 9) Y. Chino and M. Mabuchi: *Scr. Mater.*, **60** (2009), 447–450.
- 10) H. Yoshinaga and R. Horiuchi: *Trans., JIM*, **5** (1963), 14–21.
- 11) B. Song, G. Huang, H. Li, L. Zhang, G. Huang and F. Pan: *J. Alloys Comp.*, 489 (2010), 475–481.
- 12) M. Kohzu, K. Kii, Y. Nagata, H. Nishio, K. Higashi and H. Inoue: *Mater. Trans.*, **51** (2010), 749–755.
- 13) X. Huang, K. Suzuki, M. Yuasa and Y. Chino: *Mater. Sci. Eng. A*, 587 (2013), 150–160.
- 14) T. Hama, Y. Kariyazaki, K. Ochi, H. Fujimoto and H. Takuda: *Mater. Trans.*, **51** (2010), 585–693.
- 15) I. Ulacia, L. Galdos, J. A. Esnaola, J. Larrañaga, G. Arruebarrena, E. S. de Argandoña and I. Hurtado: *Metall. Mater. Trans., A Phys. Metall. Mater. Sci.*, **45** (2014), 3362–3372.
- 16) M. Yuasa, M. Hayashi, M. Mabuchi and Y. Chino: *Acta Mater.*, **65** (2014), 207–214.
- 17) H. Liu, Y. Gao, J. Z. Liu, Y. M. Zhu, Y. Wang and J. F. Nie: *Acta Mater.*, **61** (2013), 453–466.
- 18) S. R. Agnew, L. Capolungo and C. A. Calhoun: *Acta Mater.*, **82** (2015), 255–265.
- 19) M. Lentz, R. S. Coelho, B. Camin, C. Fahrenson, N. Schaefer, S. Selve, T. Link, I. J. Beyerlein and W. Reimers: *Mater. Sci. Eng. A*, 610 (2014), 54–64.
- 20) T. Hama and H. Takuda: *Int. J. Plastic.*, **27** (2011), 1072–1092.
- 21) T. Hama and H. Takuda: *Comput. Mater. Sci.*, **51** (2012), 156–164.
- 22) T. Hama and H. Takuda: *Steel Res. Int., Special Edition*, (2012), 1115–1118.
- 23) T. Hama, N. Kitamura and H. Takuda: *Mater. Sci. Eng. A*, 583 (2013), 232–241.
- 24) D. Pierce, R. J. Asaro and A. Needleman: *Acta Metall.*, **31** (1983), 1951–1976.
- 25) R. J. Asaro and A. Needleman: *Acta Metall.*, **33** (1985), 923–953.
- 26) R. J. Asaro: *Adv. Appl. Mech.*, **23** (1983), 1–115.
- 27) J. W. Hutchinson: *Proc. Roy. Soc. A*, 348 (1976), 101–127.
- 28) J. Pan and J. R. Rice: *Int. J. Solids Struct.*, **19** (1983), 973–987.
- 29) J. Koike: *Metall. Mater. Trans. A*, **36** (2005), 1689–1696.
- 30) S. R. Agnew and O. Duygulu: *Int. J. Plastic.*, **21** (2005), 1161–1193.
- 31) S. Graff, W. Brocks and D. Steglich: *Int. J. Plastic.*, **23** (2007), 1957–1978.
- 32) M. H. Yoo: *Metall. Mater. Trans. A*, **12** (1981), 409–418.
- 33) M. R. Barnett: *Mater. Sci. Eng. A*, 464 (2007), 1–7.
- 34) M. R. Barnett: *Mater. Sci. Eng. A*, 464 (2007), 8–16.
- 35) A. Izadbakhsh, K. Inal and R. K. Mishra: *Comput. Mater. Sci.*, **50** (2010), 571–585.
- 36) H. Wang, P. D. Wu, J. Wang and C. N. Tome: *Int. J. Plastic.*, **49** (2013), 36–52.
- 37) T. Uota, T. Suzu, S. Fukumoto and A. Yamamoto: *Mater. Trans.*, **50** (2009), 2118–2120.
- 38) P. Van Houtte: *Acta Metall.*, **26** (1978), 591–604.
- 39) C. N. Tomé, R. A. Lebensohn and U. F. Kocks: *Acta Metall. Mater.*,

- 39 (1991), 2667–2680.
- 40) S. R. Kalidindi: *J. Mech. Phys. Solids*, **46** (1998), 267–290.
- 41) H. ElKadiri and A. L. Oppedal: *J. Mech. Phys. Solids*, **58** (2010), 613–624.
- 42) R. Glüge, A. Bertram, T. Böhlke, E. Specht and Z. Angew. J. Appl. Math. Mech., **90** (2010), 565–594.
- 43) M. Homayonifar and J. Mosler: *Int. J. Plastic.*, **27** (2011), 983–1003.
- 44) H. Abdolvand and M. R. Daymond: *Acta Mater.*, **60** (2012), 2240–2248.
- 45) G. Proust, C. N. Tomé, A. Jain and S. R. Agnew: *Int. J. Plastic.*, **25** (2009), 861–880.
- 46) 幸田成康：金属物理学序論，コロナ社，(1973)，281–282.
- 47) G. Y. Chin, W. F. Hosford and D. R. Mendorf: *Proc. Roy. Soc. A.* **309** (1969), 433–456.
- 48) A. Staroselsky and L. Anand: *Int. J. Plastic.*, **19** (2003), 1843–1864.
- 49) T. Mayama, K. Aizawa, Y. Tadano and M. Kuroda: *Comput. Mater. Sci.*, **47** (2009), 448–455.
- 50) T. Hama, T. Nagata, C. Teodosiu, A. Makinouchi and H. Takuda: *Int. J. Mech. Sci.*, **50** (2008), 175–192.
- 51) M. Kawka and A. Makinouchi: *J. Mater. Process. Technol.*, **50** (1995), 105–115.
- 52) D. Pierce, C. F. Shih and A. Needleman: *Comput. Struct.*, **18** (1984), 875–887.
- 53) Y. Tadano: *Int. J. Mech. Sci.*, **52** (2010), 257–265.
- 54) T. Kuwabara, Y. Kumano, J. Ziegelheim and I. Kurosaki: *Int. J. Plastic.*, **25** (2009), 1759–1776.
- 55) M. O. Andar, T. Kuwabara and D. Steglich: *Mater. Sci. Eng. A*, **549** (2012), 82–92.
- 56) 吉田健吾：軽金属，**64** (2014)，293–300.
- 57) 黒田充紀，志澤一之：塑性と加工，**43** (2002)，299–309.
- 58) N. Bertin C. N. Tome, I. J. Beyerlein, M. R. Barnett and L. Capolungo: *Int. J. Plastic.*, **62** (2014), 72–92.
- 59) J. Cheng and S. Ghosh: *Int. J. Plastic.*, **67** (2015), 148–170.
- 60) T. Hama, N. Hosokawa and H. Takuda: *Proc. the 9th International Conference and Workshop on Numerical Simulation of 3D Sheet Forming Processes (NUMISHEET 2014)*, Melbourne, Australia, January, 2014, 692–695, CD-ROM.