

# マグネシウムを対象とした 結晶塑性解析

眞山 剛\*

## 1. はじめに

ここで紹介する結晶塑性解析で用いられている基本的な概念は、転位論や連続体力学の発展に伴い構築されており、特に集合組織の発達予測に古くから用いられてきた<sup>(1)(2)</sup>。一方で最近、様々な金属材料を対象として結晶塑性有限要素法を用いた研究報告が増加している<sup>(3)</sup>。この理由としては、まず計算機能力の著しい向上により、汎用的な解析が可能な結晶塑性有限要素法を多結晶規模の問題に適用できるようになってきたことが挙げられる。また、結晶方位分布やひずみ分布等を実験的に精度良く計測する技術が発達し、実験観察と数値解析を定量的に比較できるようになってきたことも大きな要因であると考えられる。

純マグネシウムやマグネシウム合金(以下では両者を含めてマグネシウムと呼ぶことにする)を対象とした結晶塑性解析は、2000年頃から活発化して現在に至っている<sup>(4)-(7)</sup>。本稿では結晶塑性解析の基本的な考え方とマグネシウムへの適用方法について紹介した後、具体的な解析例として押出集合組織を持つマグネシウムの単軸変形と双結晶の結晶粒界近傍における不均一変形について示す。

## 2. 結晶塑性解析手法

本章では、現在多くの研究で用いられている Peirce らの提案したひずみ速度依存型モデル<sup>(8)</sup>に基づき単結晶塑性構成式の基本的な概念を説明した後、多結晶をモデル化する幾つかの方法、およびマグネシウムに適用する際に考慮すべきことについて紹介する。大変形を含めた構成式の詳細や数値積分法等は日本語の解説<sup>(9)</sup>を参照して頂きたい。

### (1) 単結晶塑性構成式

結晶塑性構成式において、巨視的塑性変形と微視的変形機構(すべり系、双晶系等)の活動は次式で関係付けられる。

$$\mathbf{L}^p = \sum_i \dot{\gamma}^{(i)} (\mathbf{s}^{(i)} \otimes \mathbf{m}^{(i)}) \quad (1)$$

ここで、 $\mathbf{L}^p$ と $\dot{\gamma}^{(i)}$ はそれぞれ塑性速度勾配テンソル<sup>(10)</sup>と変形機構*i*が活動により生じるせん断ひずみ速度を表す。また $\mathbf{s}^{(i)}$ および $\mathbf{m}^{(i)}$ は、それぞれ変形機構*i*のせん断方向の単位ベクトルおよびせん断面法線方向の単位ベクトルを示し、 $\mathbf{s}^{(i)} \otimes \mathbf{m}^{(i)}$ は $\mathbf{s}^{(i)}$ と $\mathbf{m}^{(i)}$ のテンソル積<sup>(10)</sup>を表す。したがって式(1)は、塑性速度勾配テンソル $\mathbf{L}^p$ が、せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(i)}$ と $\mathbf{s}^{(i)} \otimes \mathbf{m}^{(i)}$ の積を活動変形機構全てについて和をとることで得られることを表している。この塑性速度勾配テンソル $\mathbf{L}^p$ の対称および反対称成分<sup>(10)</sup>は、それぞれ塑性ひずみ速度と塑性スピと呼ばれ、材料の塑性変形と結晶格子の回転を表現するために用いられる。初期結晶方位が与えられれば $\mathbf{s}^{(i)} \otimes \mathbf{m}^{(i)}$ が決まることから、各変形機構のせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(i)}$ がわかれば塑性速度勾配テンソル $\mathbf{L}^p$ が得られる。したがって問題はせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(i)}$ をいかに見積るかということである。

単結晶を用いた実験結果からも明らかなように、せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(i)}$ は応力、温度、変形履歴等に依存する。これまでに様々な関係式が提案されているが、これまでの研究で比較的良好に用いられているのは、累乗則型の次式である。

$$\dot{\gamma}^{(i)} = \dot{\gamma}_0^{(i)} \operatorname{sgn}(\tau^{(i)}) |\tau^{(i)} / g^{(i)}|^{1/m} \quad (2)$$

ここで $\tau^{(i)}$ 、 $g^{(i)}$ および $m$ は、それぞれ分解せん断応力、参照応力およびひずみ速度依存性指数を表す。 $\dot{\gamma}_0^{(i)}$ は参照せん断ひずみ速度であり、式(2)から明らかなように、分解せん断応力が参照応力と等しい場合におけるせん断ひずみ速度を表す。ひずみ速度依存性指数がゼロの場合、参照応力 $g^{(i)}$ が臨界分解せん断応力(CRSS)を意味することになるが、ひずみ速度依存性を持つ場合でも参照応力の初期値を近似的にCRSSとみなされることも多い。また、変形機構*i*の分解せん断応力 $\tau^{(i)}$ は次式に示す応力テンソル $\boldsymbol{\sigma}$ と $\mathbf{s}^{(i)} \otimes \mathbf{m}^{(i)}$ のスカラー積<sup>(10)</sup>より得られる。

$$\tau^{(i)} = \boldsymbol{\sigma} : (\mathbf{s}^{(i)} \otimes \mathbf{m}^{(i)}) \quad (3)$$

以上をまとめると、結晶塑性構成式では式(1)で巨視的な塑性変形と微視的変形機構のせん断ひずみ速度が関連付け

\* 熊本大学大学院先端科学研究部；准教授(〒860-8555 熊本市中央区黒髪 2-39-1)  
On Crystal Plasticity Analysis for Magnesium; Tsuyoshi Mayama (Materials Science and Engineering, Kumamoto University, Kumamoto)  
Keywords: *magnesium, crystal plasticity, twinning, deformation, texture, diffraction, heterogeneity*  
2017年4月20日受理[doi:10.2320/materia.56.484]

られ、式(3)で巨視的な応力と微視的変形機構の分解せん断応力とが関連付けられている。巨視的な応力と塑性変形の関係は、式(1)、(3)を介して微視的変形機構における分解せん断応力とせん断ひずみ速度の関係である式(2)により求まる、という構造である。

式(2)中の参照応力  $g^{(i)}$  の変化は材料の巨視的な加工硬化を表現するため、その発展則は重要である。1つの表現として、他の変形機構との相互作用(潜在硬化)を含めた次式がよく用いられている。

$$\dot{g}^{(i)} = \sum_j h^{(ij)} |\dot{\gamma}^{(j)}| \quad (4)$$

ここで、 $h^{(ij)}$  は変形機構  $i$  と  $j$  の相互作用を考慮した硬化係数行列である。 $h^{(ij)}$  の具体形は現象論的に関数を仮定したものから金属物理に立脚したものまで様々な提案があり、現在でも最も重要な研究トピックスの1つである。しかしながら、著者のマグネシウムを対象とした解析の経験では、たとえ硬化則に非常に簡単なモデルを仮定した場合でも、初期方位と初期参照応力に妥当な値を設定することにより、実験で得られる挙動を表現できることも多い。このことは各変形機構の幾何学情報と参照応力とで塑性異方性が表現される結晶塑性構成式の強力な点であると思う。

## (2) 多結晶のモデル化

前節の単結晶塑性構成式に基づき多結晶挙動を表現する方法は、大きく平均場型手法と Full field 型手法とに分類される。前者は塑性ひずみ一定(Taylorモデル)や応力一定(Sachsモデル)等の仮定に基づき各結晶粒の挙動を別々に評価した後にそれらの平均値を多結晶の巨視的挙動とするのに対して、後者は結晶粒の形状や配置を直接表現した解析モデルに境界条件を与えて多結晶挙動を評価する。特にマグネシウムを対象とした研究でよく用いられる多結晶解析手法は、平均場手法では Self-consistent モデル<sup>(4)(6)</sup>、Full field 手法では有限要素法<sup>(5)</sup>や FFT<sup>(7)</sup>に基づくものである。ただし、対象とする問題によっては両者を組合せた手法や、より洗練された均質化手法が用いられることもある。

## (3) マグネシウムへの適用

### (a) マグネシウムの変形機構

結晶塑性モデルをマグネシウムに適用する場合、単結晶で活動する変形機構を導入し、その初期参照応力と硬化則を与える必要がある。マグネシウムの変形機構は底面すべり系が支配的であることは良く知られているが、非底面すべり系や双晶系の活動について完全には明らかにされていない。これはマグネシウムに限られた状況ではなく、多くの材料において活動変形機構は必ずしも自明ではない。このような場合、単結晶の実験結果が貴重な情報であることは当然であるとして、変形機構を仮定した解析自体が単結晶挙動を調べる手段となり得る。すなわち、様々な負荷履歴における多結晶の応力-ひずみ挙動や集合組織発展を実験的に評価し、それらの挙動を最も良く再現する解析結果を与える変形機構を探索す

るのである。最近では多結晶を用いたその場回折試験<sup>(11)</sup>と結晶塑性解析の比較から、より直接的に活動変形機構を調べる試みも盛んである<sup>(11)-(15)</sup>。その場回折試験と結晶塑性解析の比較は、当初 FCC 金属<sup>(12)-(14)</sup>を対象として弾塑性 Self-consistent モデルが用いられていたが、その後マグネシウムを対象とした研究も行なわれ<sup>(15)</sup>、現在では結晶塑性有限要素を用いた研究<sup>(16)</sup>も増加している。

これまでに行なわれてきたマグネシウムを対象とする数値解析では、底面すべり系、柱面すべり系、二次錐面  $\langle c+a \rangle$  すべり系、 $\{10\bar{1}2\}$  双晶系を導入したものが多いが、破壊と関連する現象の解析等では  $\{10\bar{1}1\}$  双晶系を含める場合もある<sup>(17)</sup>。

### (b) 双晶変形の導入と双晶回転モデル

純マグネシウムおよび多くのマグネシウム合金では  $\{10\bar{1}2\}$  双晶が頻繁に活動し、変形挙動の異方性や集合組織変化に著しい影響を及ぼす。したがって、結晶塑性解析においても双晶変形を適切に導入する必要がある。

双晶変形はすべり変形とは異なり、せん断方向の正負が等価とならない負荷方向依存性を示すと共に、その活動に伴い局所的に大きな結晶方位変化をもたらす。多くの結晶塑性解析では双晶面と双晶によるせん断方向をすべり面とすべり方向と等価であるとし、分解せん断応力の符号により双晶変形の負荷方向依存性を表現している。このようなモデル化では結晶塑性構成式の枠組みを用いて、双晶による塑性変形への寄与をすべりと同様に取り扱うことができる。

双晶による結晶方位変化(双晶回転)については、現時点においても研究ごとに採用されているモデルが異なるが、Van Houtte<sup>(18)</sup>の提案した Predominant Twin Reorientation (PTR) 型モデルと Kalidindi<sup>(19)</sup>の提案した Multiple Twin Scheme (MTS) 型モデルに基づく双晶モデルが比較的広く用いられている。PTR 型モデルでは双晶回転が生ずるために必要な双晶系せん断ひずみの閾値を設定し、その値に達した双晶バリエーションと母相の方位関係を用いて結晶粒全体の方位を更新する。一方の MTS 型モデルでは、双晶系せん断ひずみに応じて母相と双晶の体積分率を連続的に変化させるため、各結晶粒中に複数の双晶バリエーションが存在する状況を表現できる。各手法に利点と欠点があるが、PTR 型モデルの方が計算コストは小さく、MTS 型モデルの方が実現により近い状況を表現できる、という特長を持つ。また、Proust<sup>(20)</sup>の提案した双晶モデルは MTS 型モデルの拡張と解釈できるが、双晶形成による平均結晶粒径変化が加工硬化に及ぼす影響を考慮している。さらに最近では、格子欠陥スケールの物理モデルから双晶形成・成長を表現する試み<sup>(21)</sup>も報告されている。

## 3. 数値解析例

### (1) 解析モデル

本章では結晶塑性有限要素法による解析例を示す。材料挙

表1 解析に用いた材料パラメータ.

	底面すべり系	柱面すべり系	二次錐面 <c+a> すべり系	{10 $\bar{1}$ 2} 双晶系
$g$ /MPa	50	100	150	100
$h$ /MPa	10	100	100	10

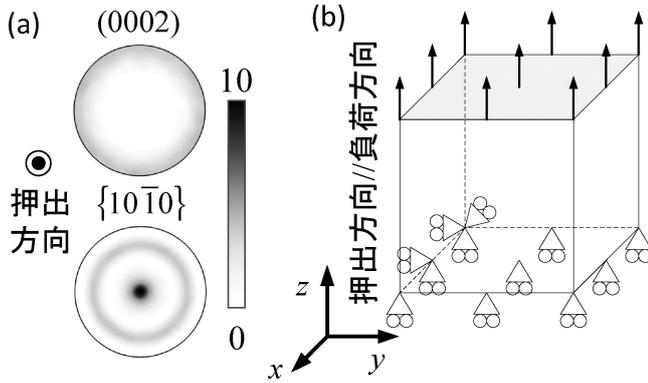


図1 解析モデル, (a)初期集合組織, (b)境界条件.

動としては線形硬化則を仮定し, MTS 型の双晶モデルを用いた. 各変形機構間の相互作用は全て等価とし, 式(4)の硬化係数行列  $h^{(ij)}$  をすべり系  $i$  のみに依存する  $h^{(i)}$  と単純化した. 変形機構および材料パラメータ(初期参照応力と硬化係数)は表1に示すとおりに仮定した. また初期集合組織として図1(a)に示すマグネシウムの典型的な押し出し集合組織を採用し,  $20 \times 20 \times 20$ 要素で均一分割された立方体の各要素を1結晶として初期方位を割り当てた. この多結晶モデルに対して図1(b)に示すように押し出し軸を負荷軸とする単軸引張および単軸圧縮荷重を変位制御で与えた.

## (2) 解析結果

図2(a)に解析により得られた単軸荷重挙動を示す. 実験的にもよく知られている<sup>(22)</sup>, 引張りと圧縮の降伏および加工硬化の顕著な非対称性が表現されている. また図2(b)は10%の引張および圧縮荷重後の集合組織を示している. 引張時と比べて圧縮時には著しい集合組織変化が生じていることがわかる. これらは荷重方向依存性を持つ双晶の活動度が, 引張時と圧縮時では大きく異なるために生じた結果であり, 実験観察から得られている知見とよく対応している. なお双晶を抑制した計算を行うと, このように顕著な非対称挙動が生じないことも結晶塑性解析では確認できる.

図3は圧縮変形に伴う格子ひずみの変化を示している. 圧縮応力の上昇に伴い, 結晶面ごとに異なる格子ひずみの発達が生じている. ここで, 格子ひずみは放射光や中性子線による測定と同様に, 軸方向と半径方向に各変形機構のせん断断面法線方向が配向した結晶の寄与が平均された量であり, 実験結果と直接的な比較が可能である. 前述したとおり本研究では, 単結晶挙動を極めて単純化しているが, 過去の研究<sup>(23)</sup>

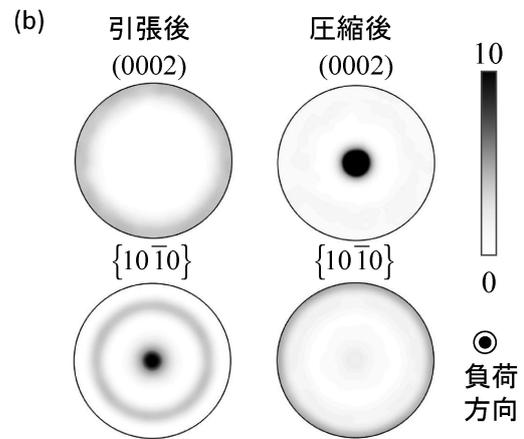
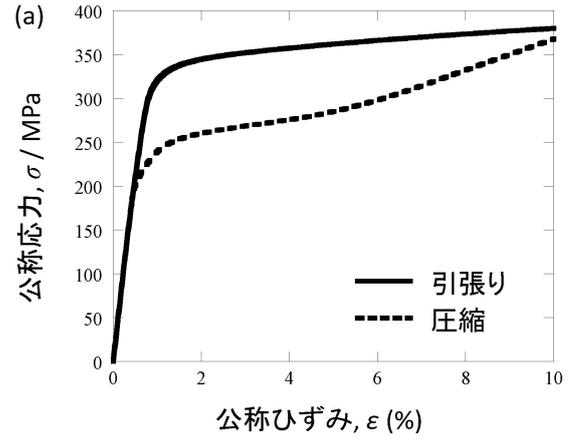


図2 押し出し材の非対称圧縮挙動, (a)応力-ひずみ挙動, (b)10%変形後の集合組織.

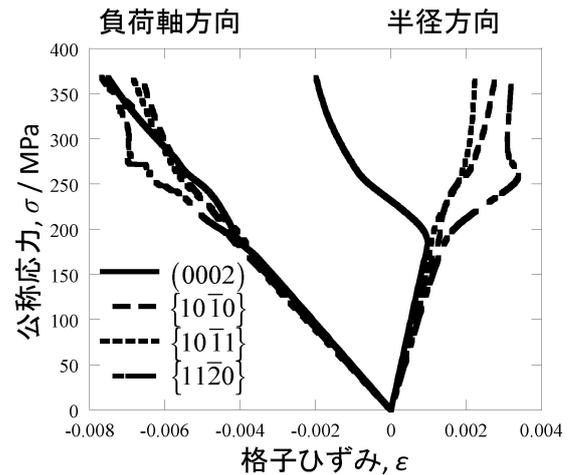


図3 圧縮荷重時の格子ひずみ発展.

で報告されている底面すべり系や双晶系の活動を示唆する格子ひずみ変化をおおむね再現している. なお前述したとおり, この格子ひずみ変化を実験と計算で同様になるようフィッティングすることにより, 各変形機構のパラメータを同定するというアプローチも可能である.

