

キンク形成とキンク強化の結晶塑性解析

眞 山 剛* 只 野 裕 一**

1. はじめに

キンク変形帯は、そのせん断方向がキンク界面と垂直に近く大きな回転を伴う変形の局所化領域として特徴付けられる。キンク帯の形成を固体力学の手法を用いて解析・理解する試みは古くから行われており、特に結晶スケールの変形機構を考慮した結晶塑性解析手法を用いた解析は、キンク帯形成を合理的に説明できるものとして有用である⁽¹⁾⁻⁽⁴⁾。しかしながら、実験的に顕著なキンク帯形成が認められている塑性異方性の強い材料における現象の理解は不十分であり、さらに長周期積層(LPSO)型マグネシウム(Mg)合金で実験的に確認されているキンク強化⁽³⁾を対象とした研究は限定的である。したがって、結晶塑性解析により結晶スケールにおけるキンク形成機構と強化機構を解明し、キンク強化と他の強化機構の相違点と類似点を明らかにすることで、キンク強化を最大限に活用した材料創成に貢献することが期待される。

本稿では、まず第2章で塑性異方性の強い材料系におけるキンク形成の解析結果について示す。続く第3章では、キンク強化機構の解明を目指した結晶塑性解析について概説する。格子欠陥の影響を導入した高次勾配結晶塑性モデルによる解析を通じて、キンク強化に寄与する要因の検討と、キンクの形態がキンク強化に及ぼす影響について検討する。

2. キンク形成の結晶塑性解析

本章では結晶塑性有限要素法によるキンク形成に関する解析例として、マグネシウムのように塑性異方性の強い最密六方晶(HCP)金属に加えて、塑性異方性は小さいものの強度

が著しく異なる2相が層状に積層した層状構造体(ミルフィーユ構造体)におけるキンク帯形成解析結果を示し、その類似性と相違点等について概説する。本節で示す解析は、古典的な速度依存型結晶塑性構成則を静的陽解法有限要素法に導入した解析手法を用いて実施したものであるが、その詳細については文献⁽⁴⁾⁻⁽⁷⁾を参照頂きたい。

(1) HCP 金属の底面すべりにより形成されるキンク帯⁽⁷⁾

図1は底面すべり系が支配的に活動するHCP金属におけるキンク帯形成に及ぼす負荷方位依存性を示している。本解析では図1(a)に示すように、負荷方向を $[11\bar{2}0]$ から角度 θ_{ini} だけ底面が傾いた結晶方位に対して z 軸圧縮を与えている。図1(b)は圧縮負荷時の応力-ひずみ曲線、図1(c)は圧縮ひずみ1%時の形状変化と累積すべり分布を示している。まず $\theta_{\text{ini}}=3^\circ$ の結果に着目すると、応力-ひずみ挙動としては塑性変形の開始直後に急激な軟化を示した後、ほぼ一定の応力で変形が進行しており、図1(c)に示す1%変形後のコンター図からは試料中央付近に著しくすべりが蓄積した変形帯が形成され、明確な屈曲を伴う形状変化が生じていることがわかる。変形帯の境界面が底面すべり系のせん断方向(z 軸方向)と垂直に近いこと、さらにここには示していないがすべりが蓄積した領域において大きな結晶回転が生じていることから、ここで形成された変形帯がキンク帯に対応するものと解釈することができる。すなわち、キンク帯内の大きな結晶格子回転は底面すべり系のシュミット因子を増加させ、その結果図1(b)にみられた顕著な応力の低下(幾何学的軟化)を引き起こしたものと考えられる。これは、数値解析において仮想的に結晶格子回転を考慮しない計算を実施すると、キンクの形成が著しく抑制されることから確認されている⁽⁷⁾。

* 熊本大学先進マグネシウム国際研究センター；准教授

** 佐賀大学理工学部機械工学部門；教授

Crystal Plasticity Analysis for Kink Band Formation and Kink Strengthening; Tsuyoshi Mayama* and Yuichi Tadano** (*Magnesium Research Center, Kumamoto University, Kumamoto. **Department of Mechanical Engineering, Saga University, Saga)

Keywords: kink, crystal plasticity, deformation, anisotropy, finite element analysis

2022年4月20日受理[doi:10.2320/materia.61.558]

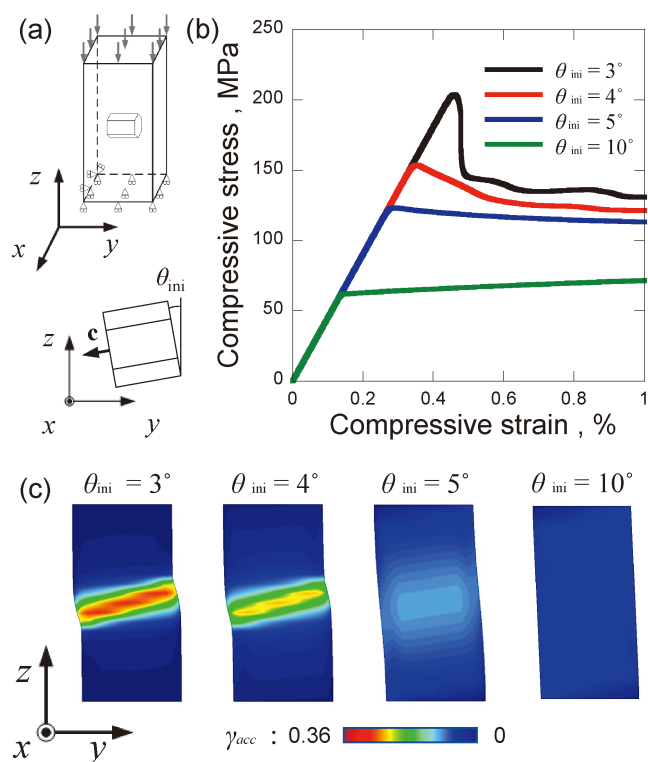


図1 底面すべりによるキンク帯形成⁽⁷⁾, (a) 解析モデル, (b) 応力-ひずみ挙動, (c) 累積すべり分布. (オンラインカラー)

次に θ_{ini} が解析結果に及ぼす影響に注目すると, θ_{ini} が大きくなるにつれて図1(b)に示す応力-ひずみ挙動における応力の低下量が小さくなり, さらに図1(c)に示す底面すべりの局所化が弱まることがわかる. これは, 底面すべり系のシュミット因子が大きくなると, 変形初期から試料全体が比較的一様に変形することにより, 幾何学的軟化による変形局所化が抑制されることに起因している. すなわち, 塑性異方性が強く, シュミット因子が小さなすべり系が活動することが顕著なキンク帯形成を引き起こす要因であると考えられる.

(2) HCP 金属の柱面すべりにより形成されるキンク帯⁽⁸⁾

図2は底面と平行に圧縮した際に柱面すべり系が活動した場合のキンク帯形成に関する解析結果を示している. この解析では図2(a)に示すように $[10\bar{1}0]$ 圧縮から c 軸周りに $\theta_{ini} = 5^\circ, 15^\circ, 25^\circ$ 回転させた初期方位に対する z 軸圧縮解析を実施し, 圧縮ひずみ9%における粒内方位差分布(図2(b))と柱面すべり系の累積すべり分布(図2(c))を比較し, 柱面すべりにより形成されるキンク帯の負荷方位依存性を検討している.

まず $\theta_{ini} = 5^\circ$ の結果に注目すると, 図2(b)より大きな粒内方位差を持つ領域が帯状に形成されていることがわかる. また図2(c)に示す柱面すべり系の累積すべり分布からは, 破線で囲んだ領域において顕著なすべりの局所化が生じていることもわかる. これらの結果と結晶方位より, すべりが局所化した帯状の領域は柱面すべり系 PRI1 のせん断方向と垂直

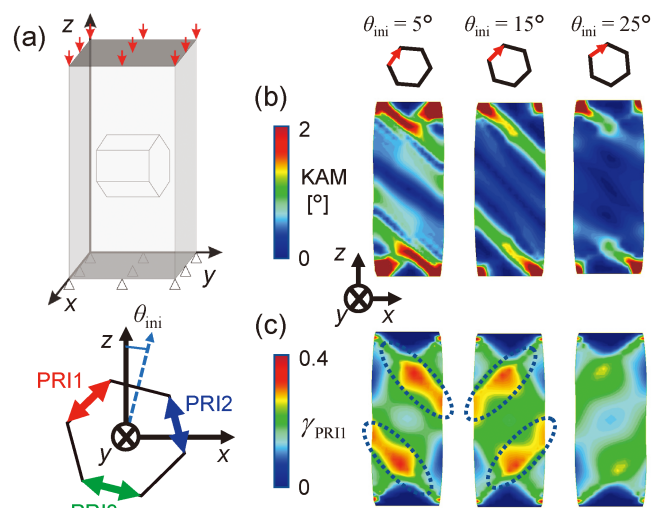


図2 柱面すべりによるキンク帯形成⁽⁸⁾, (a) 解析モデル, (b) 粒内方位差分布, (c) 累積すべり分布. (オンラインカラー)

に近い境界面を持つことがわかる. さらに柱面すべり系の局所化領域を挟むように大きな粒内方位差領域が帯状に発達していることから, $\theta_{ini} = 5^\circ$ に見られる変形の局所化領域はキンク帯に対応するものと考えられる. 一方, 図2(c)の $\theta_{ini} = 15^\circ$ では, PRI1 のせん断方向と平行に近い方向に柱面すべりの活動が大きな領域が広がっているが, 図2(b)においてはそれに対応する粒内方位差分布が確認されない. このようなすべりの局所化領域はすべり帯に対応するものと考えられる. さらに, $\theta_{ini} = 25^\circ$ の場合には, 粒内方位差分布および柱面すべり分布のいずれにおいても比較的局所化の程度が小さい. これは2つの柱面すべり系 PRI1 と PRI3 のシュミット因子が比較的近いことにより, 2重すべりにより変形が進行し, その2つのすべり系の活動による格子回転が互いに打ち消し合うことによるものと考えられる.

以上に示したように, 底面と平行に圧縮負荷を受ける際は, 前節の底面すべり系が活動する場合とは異なり, 等価な複数の柱面が存在することにより, その負荷方位依存性は複数のすべり系の競合を考える必要がある. このような競合は非等価なすべり系間でも生じ得るものであり, 純Znにおける底面すべり系と2次錘面すべり系の競合により形成されるキンク帯についても報告されている⁽⁹⁾.

(3) 硬質/軟質層からなる積層構造体におけるキンク形成

図3は同じFCCの結晶構造を持ち初期降伏応力が10倍異なる硬質層と軟質層からなる積層構造体を想定したモデル材料の圧縮解析結果を示している. ここでは, 両層ともに1つのすべり系のシュミット因子が0.5となる同一初期方位を設定している. 図3の応力-ひずみ曲線より, 塑性変形の初期には応力が徐々に増加し, 圧縮ひずみ15%程度から顕著な軟化が生じていることがわかる. また, 図中に示したコンター図は25%変形時の形状と相当ひずみ分布であり, 軟質層により大きなひずみが導入されると共に顕著な屈曲が生じ

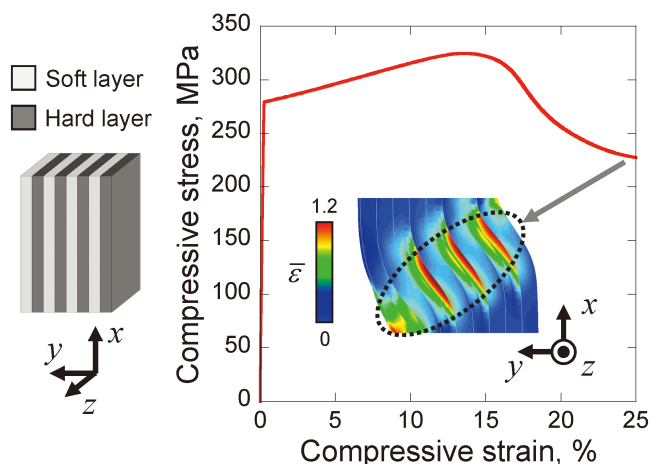


図3 積層構造体におけるキンク帯形成。(オンラインカラー)

ている。

本積層構造体は前節までに示した例とは異なり、構成相のFCC結晶は塑性異方性が小さい。しかしながら、硬質層と軟質層の強度が大きく異なるため、軟質層側の大きな塑性変形が生じる一方で、硬質層側は小さな塑性変形で大きな圧縮変形を引き起こすことのできる弾性的な曲げが主に生じている。これは、軟質層を主な塑性変形媒体として硬質層間が相対的にずれたと見做し、硬質/軟質層界面と平行なすべり面を持つ構造体として粗視化することで、前2節と同様に塑性異方性の強い材料におけるキンク帯形成と同様に解釈することが可能である。

本節では同じ結晶方位を持つFCC結晶を構成相とする積層構造体を想定したが、例えば金属における代表的な積層構造体である共晶合金では、異なる結晶構造が特定の方位関係を持つことも多い。さらに各相の特性比や配置等の組み合わせによってもキンク帯の形成頻度が著しく異なることが予想される。このように多数のパラメータを含む積層構造体におけるキンク挙動を実験的に調査することは容易では無いため、結晶塑性有限要素法による数値的探査による支援が特に有用であると考えられる。

3. キンク強化の結晶塑性解析

(1) 解析方法

前章ではキンク形成について、メゾスケール材料モデルである結晶塑性モデルにより解析例を示したが、本章ではキンクが導入された材料における材料強化発現について、結晶塑性モデルによって表現した解析例を示す。キンク強化の発現には、転位運動を阻害する結晶格子欠陥の存在が重要な役割を果たすと考えられるため、幾何学的に必要な転位(Geometrically Necessary Dislocation; GND)をすべりの勾配として結晶塑性モデルに導入した、高次勾配結晶塑性モデルを用いる。高次勾配結晶塑性モデルの一形式として本章では、GN転位密度を新たな独立変数とすることで、変位とGN転位

密度のそれぞれについて支配方程式を導出した材料モデルを導入した⁽¹⁰⁾⁽¹¹⁾。本モデルは、メゾスケールにおけるLPSO型マグネシウム合金のキンク強化を表現するのに有効であると考えられるが、連続体解析で広く用いられている有限要素法を用いた数値解析を本モデルに適用した場合、両支配方程式に対して同じ有限要素を用いる、すなわち同じ内挿関数と積分方法を用いると、適切な解が得られない場合があることが報告されている⁽¹²⁾。そこで、メッシュフリー法と呼ばれる数値計算手法のひとつであるReproducing Kernel Particle Method (RKPM)⁽¹³⁾⁽¹⁴⁾を導入した。これにより、高次勾配結晶塑性解析の解析精度向上と安定化を図ることができる⁽¹⁵⁾。

(2) 解析条件

実験的に観察されるキンクにはさまざまな形態のものが存在し、キンクの形態や変形モードによってキンク強化の様相は異なると考えられる。本章では一例として、正方形形状の試験片にキンク帯を導入したLPSO型マグネシウム合金に対する単純せん断解析を実施し、キンクの形態とキンク強化の相関について評価した結果を紹介する。解析モデルの模式図を図4に示す。LPSO型マグネシウム合金を想定していることから、すべり系は底面に限定し、母相の底面が圧縮方向に対して垂直であるとしている。試験片中央部にキンク帯を導入し、キンク帯と母相のなす角 θ をキンク角と定義した。キンクは双晶とは異なり、キンク角の大きさに幾何学的な制約はないため、様々なキンク角を持つキンクが存在し得る。そこで、キンク角を変化させた複数のモデルを解析することで、キンク形態の違いがキンク強化にどのような影響を及ぼすかを数値的に調査した。境界条件として母相の底面と同方向にせん断力を加え、得られる流れ応力を評価する。

前述の通り、キンク強化には格子欠陥が重要な役割を果たすと考えられる。ここで使用する高次勾配結晶塑性モデルでは、すべりの勾配から格子欠陥であるGN転位密度が算出され、これが背応力を介して材料挙動に影響を及ぼすモデルである。この格子欠陥がキンク強化に及ぼす影響を評価するために、高次勾配の影響を考慮しない従来の結晶塑性モデルによる数値解析もあわせて実施することで、格子欠陥がキンク強化に及ぼす影響について定量的に調査する。

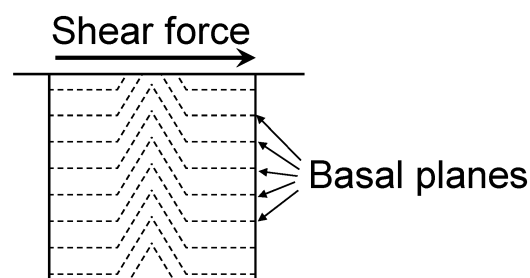


図4 キンク帯を導入した解析モデル。

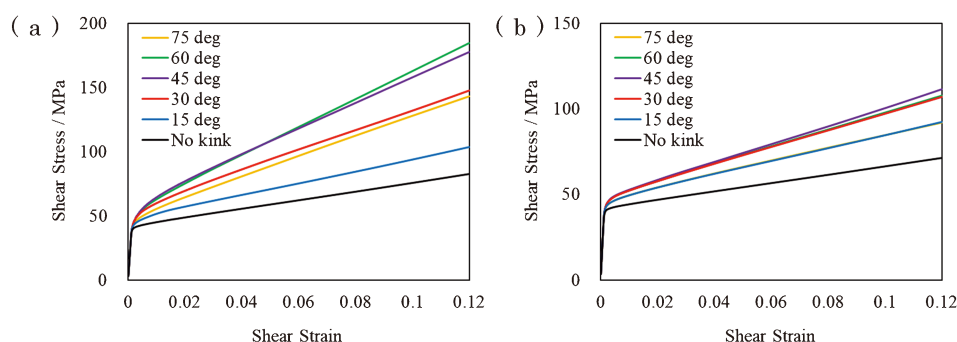


図5 キンク帯を導入した試験片の応力-ひずみ挙動, (a) 高次勾配結晶塑性モデル, (b) 従来型結晶塑性モデル. (オンラインカラー)

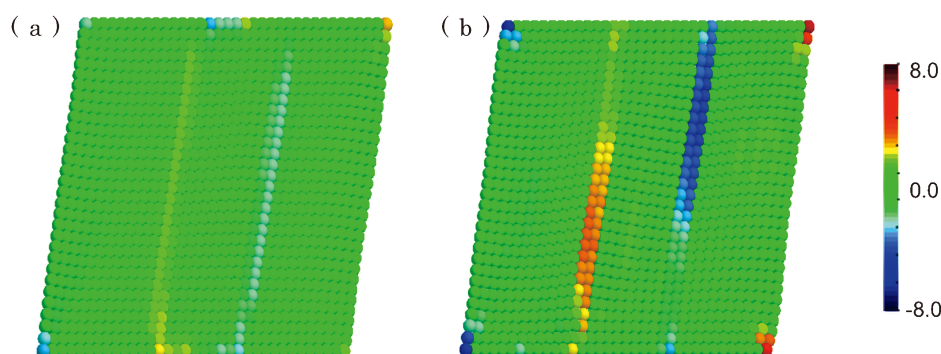


図6 変形状とGN転位密度分布, (a) キンク角 $\theta=15^\circ$, (b) キンク角 $\theta=75^\circ$. (オンラインカラー)

(3) 解析結果

キンク角を $\theta=15^\circ$ から $\theta=150^\circ$ まで変化させて得られた応力-ひずみ挙動を, 図5(a)に示す. 比較のために, キンクが存在しない条件(解析領域全体が全てせん断方向と平行な底面を有する条件)による解析も併せて実施した(図5(b)). いずれのキンク角の場合も, キンクを導入しない場合と比較すると高い流れ応力を示すことが確認でき, これがキンク強化に対応していると考えられる. また, キンク角とキンク強化には明瞭な相関があることが確認できる. 図5(b)より, 格子欠陥を考慮しない従来型の結晶塑性モデルを用いた解析でも, キンク強化は発現することが確認される. これは, キンク領域の結晶方位が母相と異なることからシュミット因子が変化し, これによる流れ応力の変化が生じたためである. これは, 従来から知られている幾何学的硬化と対応付けることができる. 一方で, いずれのキンク角においても, 高次勾配結晶塑性モデルは従来型結晶塑性モデルよりもさらに高い流れ応力を示している. 幾何学的硬化による強化は, 両モデルに等しく発現するため, 両モデルによる流れ応力の差異は高次勾配結晶塑性モデルにのみ導入されている格子欠陥に起因する背応力によるものである. すなわち, キンク強化は幾何学的硬化と格子欠陥の存在の2つの要因によって引き起こされると推察される.

キンク角 $\theta=15^\circ$ および $\theta=75^\circ$ に対して, 高次勾配結晶塑性モデルによって得られたGN転位密度分布を図6に示す. 図5に示したように, $\theta=15^\circ$ と比較して $\theta=75^\circ$ はより

高いキンク強化が得られる条件である. いずれの条件においても, 解析領域中央に導入したキンクと母相の境界付近にGN転位密度の蓄積がみられるが, これはキンク界面においてすべり方向が大きく変化するためすべりの勾配が生じ, GN転位が蓄積することによる. このGN転位密度による背応力の増大が, 流れ応力の上昇を引き起こしている. また, 図6(a)と(b)を比較するとGN転位密度の大きさが異なっており, キンク強化がより大きく得られる $\theta=75^\circ$ ではGN転位密度も高く発生している. すなわち, キンク境界周辺により多くの格子欠陥が導入される条件において, キンク強化はより顕著に発現すると考えられる.

キンク形態とキンク強化の相関をより詳しく検討するため, キンク角とせん断ひずみ24%における流れ応力の相関を図7に示す. 前述の通り, キンク角とキンク強化には明瞭な相関が見られ, 本条件ではキンク角 $\theta=75^\circ$ 付近でキンク強化は最大となる. このことは, キンク強化に最適なキンク形態が存在する可能性を示唆している. また, 高次勾配結晶塑性モデルと従来型結晶塑性モデルによる結果を比較すると, キンク角とキンク強化の相関の傾向はほぼ一致しているが, 強化量は高次勾配結晶塑性モデルによるものが全ての条件において高い結果を示す. 前述の通り, 両モデルの差は格子欠陥によるキンク強化の度合いであると考えられるが, 本条件においては, いずれのキンク角に対しても幾何学的硬化と比較して格子欠陥のキンク強化への寄与が大きくなっていることが確認された. 以上より, 幾何学的硬化, 格子欠陥のいずれもキンク強化の発現メカニズムであると考えられる

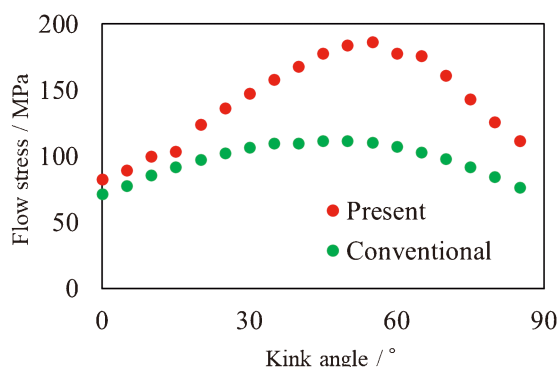


図7 キンク角および格子欠陥とキンク強化の相関。(オンラインカラー)

が、格子欠陥の存在がより重要な因子である可能性が示唆された。

なお、本モデルにおいてはすべりの空間勾配をGN転位密度と定義しているが、すべりの空間勾配はその点近傍に格子欠陥が存在することを表現するものであり、その格子欠陥は必ずしも転位には限定されない(例えば回位などの存在であっても構わない)と解釈できる。すなわち、キンク界面に蓄積される格子欠陥は必ずしもGN転位とは限らないことに注意されたい。キンク界面における力学挙動には未解明な点も多く、一般的な粒界や双晶界面との相違点、類似点を今後明らかにしていく必要がある。種々の実験観察との連携を深め、より詳細なキンク界面における物理描像を提案モデルへ組み込むことで、キンク強化のメカニズムの本質をより深く理解することが今後の課題となる。

4. ま と め

本稿では結晶塑性有限要素法によるキンク形成およびキンク強化の解析例を示した。今後はさらに材料特性や微視組織等の各種パラメータを系統的に変化させた解析を実施し、実験観察結果との整合性も検証することにより、キンク形成/強化機構のさらなる理解の獲得を目指した研究を進める予定である。また、本稿では単結晶や小さな規模の解析モデルを用いて形成と強化を別々に解析したが、キンクの形成過程はそれに続くキンク強化へも影響を及ぼすことが予想される。このため、多結晶解析や形成～強化の一貫解析等も現象の本質的な理解には不可欠であり、そのためにも大規模計算や解析手法のさらなる拡張が必要である。

本研究は、科学研究費補助金・新学術領域研究「ミルフィュー構造の材料科学」(18H05480, 19H05133 および21H00104)の補助を受けて実施しました。

文 献

- (1) R. J. Asaro and J. R. Roce: J. Mech. Phys. Solids, **25**(1977), 309–338.
- (2) S. Forest: Acta Mater., **46**(1998), 3265–3281.
- (3) A. Marano, L. Gélébart and S. Forest: Acta Mater., **175**(2019), 262–275.
- (4) D. Peirce, R. J. Asaro and A. Needleman: Acta Metall., **31**(1983), 1951–1976.
- (5) 黒田充紀, 志澤一之: 塑性と加工, **43**(2002), 299–309.
- (6) 眞山 剛: まてりあ, **56**(2017), 484–487.
- (7) T. Mayama, T. Ohashi, Y. Tadano and K. Hagihara: Mater. Trans., **56**(2015), 963–972.
- (8) M. Yamasaki, T. Mayama, T. Matsumoto, K. Hagihara, D. Drozdenko and Y. Kawamura: Mater. Sci. Eng. A, **819**(2021), 141466.
- (9) K. Hagihara, T. Mayama, M. Honnami, M. Yamasaki, H. Izuno, T. Okamoto, T. Ohashi, T. Nakano and Y. Kawamura: Int. J. Plasticity, **77**(2016), 174–191.
- (10) M. Kuroda and V. Tvergaard: J. Mech. Phys. Solids, **56**(2008), 1591–1608.
- (11) M. Kuroda and V. Tvergaard: J. Mech. Phys. Solids, **56**(2008), 2573–2584.
- (12) M. Kuroda: Int. J. Solids Struct., **48**(2011), 3382–3394.
- (13) J. S. Chen, C. Pan, C. T. Wu and W. K. Liu: Comput. Methods Appl. Mech. Eng., **139**(1996), 195–227.
- (14) J. S. Chen, C. T. Wu, S. Yoon and Y. You: Int. J. Numer. Mech. Eng., **50**(2001), 435–466.
- (15) T. Niirō and Y. Tadano: Key Eng. Mater., **794**(2019), 214–219.

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★
眞山 剛

2001年 北海道大学大学院工学研究科修士課程修了

2001年 北海道大学大学院工学研究科 助手

2008年 熊本大学大学院先端機構 特任助教

2017年4月～現職

専門分野: 材料力学

◎構造と材料の異方性に起因する力学現象を表現可能な解析手法の構築, およびその力学機能化への応用に従事。

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★
只野裕一

2002年 慶應義塾大学大学院理工学研究科修士課程修了

2002年 九州大学工学研究院 助手

2005年 慶應義塾大学大学院理工学研究科後期博士課程修了

2005年 慶應義塾大学理工学部 助手

2008年 佐賀大学理工学部 准教授

2022年4月～現職

専門分野: 計算固体力学

◎金属材料のマクロ～結晶スケールを結びつけるマルチスケール材料モデルを構築するとともに、それらのモデルに対する高精度な数値解析手法の開発に従事。

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★



眞山 剛



只野裕一