

HCP 結晶における双晶の形成と 収縮に伴う力学応答

志 澤 一 之*

1. はじめに

近年、カーボンニュートラル社会の実現へ向けて、航空機や自動車などの輸送機器に使用する構造材料の高強度化・軽量化は材料科学や固体力学分野における重要な課題の一つとなっている。かかる状況下において、実用構造金属材料の中で最軽量かつ高比強度(耐力/比重)で、環境親和性にも優れたマグネシウム(Mg)合金に注目が集まっている。しかしながら、MgはHCP構造であり、常温では底面系以外のすべり系の活動がほとんどないため強い変形異方性を示し、脆性的に振る舞うことが知られている。近年では、Mgに遷移元素や希土類元素を数%含有させ、 α -Mg相の中にLPSO(Long-Period Stacking Ordered Structure, 長周期積層構造)相を有するLPSO型Mg合金がKawamuraら⁽¹⁾によって提案され、室温で610 MPaという高い引張降伏強度を実現している。一方、Zhengら⁽²⁾はMg合金の結晶粒を超微細化することで伸び率25%以上という延性の向上に成功している。このように、Mgに基礎を置く材料開発が盛んに取り組まれているが、前述のようにHCP構造に起因する強い塑性異方性に加え、変形双晶の発現によって微視組織が変化するため、従来の材料モデルでは変形挙動の予測が難しい。

そこで本稿では、HCP結晶(主に純Mg)に発現する変形双晶の進展と収縮(脱双晶)といった組織変化をPhase-fieldモデルで、一方、応力ひずみ応答のような力学特性を結晶欠陥挙動に基づく転位-結晶塑性モデルによって表現し、分解せん断応力と双晶の秩序変数に関する情報を両モデルで交換することで連成解析を進めるMulti-physicsシミュレーションについて紹介する⁽³⁾。加えて、本手法のMg多結晶体への適用例、ならびに高マンガン(Mn)オーステナイト多結晶

に発現するナノ双晶と粒径依存性に関する応用についても簡単に触れる。

2. 双晶進展に対するPhase-fieldモデル

ここで考慮する $\{10\bar{1}2\}$ 引張双晶系は c 軸引張りの応力下で活動し、 $\langle\bar{1}011\rangle$ 方向へのせん断ひずみが生じると同時に双晶変形を発現した領域(双晶相)の結晶方位が変化する。また、逆負荷によって双晶相は収縮することが知られており、この現象は脱双晶化(detwinning)と呼ばれている⁽⁴⁾。これらの変形特性に加えて、双晶相の結晶方位は母相に対して双晶面を境とする鏡像対称になることが知られており、その界面エネルギーは $\{10\bar{1}2\}$ 面で極小値をとることが報告されている⁽⁵⁾。そこで本稿では、双晶変形に寄与する全自由エネルギーとして弾性ひずみエネルギーおよび異方性を持つ界面エネルギーを考慮する。また、Phase-fieldモデルにおける秩序変数として双晶相の体積分率を用いることで、双晶相の進展を記述する支配方程式を導出する。

母相における α すべり系のすべり方向を $\mathbf{s}_0^{(\alpha)}$ 、すべり面の法線方向を $\mathbf{m}_0^{(\alpha)}$ として結晶基底を表すテンソルを $\mathbf{P}_0^{(\alpha)} = \mathbf{s}_0^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_0^{(\alpha)}$ と定義すれば、 κ 双晶面を対称面とした κ 双晶相の結晶基底は $\mathbf{P}_\kappa^{(\alpha)} = \mathbf{R}^{[\kappa]} \mathbf{P}_0^{(\alpha)} \mathbf{R}^{[\kappa]T}$ と書ける。ここで、 $[\]$ のついた上添字 $[\kappa]$ は κ 双晶系の量を表し、 $\mathbf{R}^{[\kappa]} = \mathbf{I} - 2\mathbf{m}_0^{[\kappa]} \otimes \mathbf{m}_0^{[\kappa]}$ は鏡像変換テンソルである。また、下添字の0および κ はそれぞれ母相および κ 双晶相の量であることを表している。以下では両者をまとめて $(\)_{(n)}$ ($n=0, \kappa$)と表記する。

また、弾性ひずみエネルギー密度 f^e はエネルギー密度分布を表す関数 $p(\phi_\kappa) = a^* \phi_\kappa^3 (10 - 15\phi_\kappa + 6\phi_\kappa^2)$ を用いて

$$f^e = p(\phi_\kappa) E_\kappa^{[\kappa]} + (1 - p(\phi_\kappa)) E_0^{[0]} \quad (1)$$

と書ける。ここで、 ϕ_κ は κ 双晶相の体積分率、 a^* はPhase-

* 慶應義塾大学理工学部; 教授(〒223-8522 横浜市港北区日吉 3-14-1)

Mechanical Responses of HCP Crystal with Twinning and Detwinning; Kazuyuki Shizawa* (*Department of Mechanical Engineering, Keio University, Yokohama)

Keywords: hcp crystal, twinning, detwinning, dislocation, phase-field, crystal plasticity

2022年9月2日受理[doi:10.2320/materia.62.35]

field モビリティに寄与する数値係数, $E_{[n]}^{[\kappa]}$ は各相に蓄積する弾性ひずみエネルギー密度であり次式のように定義される.

$$E_{[n]}^{[\kappa]} = \frac{1}{2} \operatorname{sgn}(\tau_{[n]}^{[\kappa]}) S_{[n]}^{[\kappa]} \tau_{[n]}^{[\kappa]2} \quad (2)$$

ここで, $\tau_{[n]}^{[\kappa]}$ および $S_{[n]}^{[\kappa]}$ はそれぞれ κ 双晶系に働く分解せん断応力およびせん断弾性コンプライアンスであり, Cauchy 応力テンソル \mathbf{T} および 4 階の弾性コンプライアンステンソル \mathbf{S}^e を用いて $\tau_{[n]}^{[\kappa]} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{P}_{[n]}^{[\kappa]}$ および $S_{[n]}^{[\kappa]} = \mathbf{S}^e \cdot (\mathbf{P}_{[n]}^{[\kappa]} \otimes \mathbf{P}_{[n]}^{[\kappa]})$ と表わされる. 式(2)のように分解せん断応力の符号を考慮することで, c 軸引張りにおいて双晶相が進展し, 逆負荷によって脱双晶化する現象を表現できる. すなわち, 分解せん断応力 $\tau_0^{[\kappa]}$ を介して弾性ひずみエネルギー $E_0^{[\kappa]}$ が双晶進展の駆動力となる. また, $\mathbf{P}_\kappa^\alpha = \mathbf{R}^{[\kappa]} \mathbf{P}_0^\alpha \mathbf{R}^{[\kappa]T}$ の関係を用いれば $\tau_\kappa^{[\kappa]} = -\tau_0^{[\kappa]}$ および $S_\kappa^{[\kappa]} = S_0^{[\kappa]}$ と書けるため, $E_\kappa^{[\kappa]} = -E_0^{[\kappa]}$ となる. したがって, 式(1)は $f^e = (1-2p(\phi_\kappa))E_0^{[\kappa]}$ と書き直せる. 一方, 界面エネルギー密度 f^i は異方性を考慮して

$$f^i = \frac{1}{2} \chi^{[\kappa]} \cdot (\nabla \phi_\kappa \otimes \nabla \phi_\kappa) \quad (3)$$

のように与えられる. ここで, $\chi^{[\kappa]}$ は主方向が $\mathbf{s}_0^{[\kappa]}$, $\mathbf{m}_0^{[\kappa]}$ および $\mathbf{t}_0^{[\kappa]} = \mathbf{s}_0^{[\kappa]} \times \mathbf{m}_0^{[\kappa]}$ であり, それぞれの主方向に対応する主値が χ_s , χ_m および χ_t であるような 2 階のテンソルである. なお, 双晶界面の界面エネルギーは $\mathbf{m}_0^{[\kappa]}$ 方向で極小値を取るため⁽⁵⁾, $\chi_s, \chi_t > \chi_m$ とする. さらに, 障壁エネルギー密度は二重戸関数 $q(\phi_\kappa) = \phi_\kappa^2(1-\phi_\kappa)^2$ を用いて次式のように表される.

$$f^b = Wq(\phi_\kappa) \quad (4)$$

ここで, W は障壁エネルギーの高さである. 式(1), (3) および式(4)より, 系の全自由エネルギー F_{total} は

$$F_{\text{total}} = \int_V F dv = \int_V (f^i + f^e + f^b) dv \quad (5)$$

のように書ける. また, 系の状態は全自由エネルギーの減少率が最大となるように時間とともに変化するので, 次式のような Allen-Cahn 方程式が成立する.

$$\frac{\partial \phi_\kappa}{\partial t} = -M_\phi \frac{\delta F}{\delta \phi_\kappa} \quad (6)$$

ここで, $\delta F / \delta \phi_\kappa$ は汎関数微分であり, M_ϕ は Phase-field モビリティである. 式(5)を式(6)に代入すれば, ϕ_κ の時間発展式が次式のように書ける.

$$\frac{\partial \phi_\kappa}{\partial t} = M_\phi \left[\nabla \cdot (\chi^{[\kappa]} \nabla \phi_\kappa) + 2E_0^{[\kappa]} \frac{\partial p(\phi_\kappa)}{\partial \phi_\kappa} - W \frac{\partial q(\phi_\kappa)}{\partial \phi_\kappa} \right] \quad (7)$$

一方, 式(5)から得られる自然境界条件は

$$(\chi^{[\kappa]} \nabla \phi_\kappa) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (8)$$

となる. 式(7)の数値解は差分法で求めてもよいが, 変形場の数値解析が FEM (Finite Element Method, 有限要素法) で進められるので, 式(7)も弱形式(積分方程式)に変更しておいた方が便利である. そこで, 式(7)の両辺に任意の仮想量 $\hat{\phi}$ を乗じて体積分し, Gauss の発散定理および式(8)の境界条件を考慮して部分積分すれば, Phase-field 積分方程式が

$$\int_V \left[\frac{1}{M_\phi} \frac{\partial \phi_\kappa}{\partial t} \hat{\phi} + (\chi^{[\kappa]} \nabla \phi_\kappa) \cdot \nabla \hat{\phi} + b(\phi_\kappa) \hat{\phi} \right] dv = 0 \quad (9)$$

のように得られる. ここで, $b(\phi_\kappa) = -2E_0^{[\kappa]} \partial p(\phi_\kappa) / \partial \phi_\kappa + W \partial q(\phi_\kappa) / \partial \phi_\kappa$ であり, 式(9)における各パラメータは $W = 6\beta\sigma_m / \delta_\phi$, $\chi_m = 3\delta_\phi\sigma_m / \beta$, $\chi_s = \chi_t = 3\delta_\phi\sigma_t / \beta$ および $M_\phi = M\beta / (3d^*\delta_\phi)$ と表わせる. ここで, σ_m および σ_t は, $\mathbf{m}_0^{[\kappa]}$ 方向およびそれに垂直な方向の界面エネルギー, δ_ϕ は界面幅, M はモビリティおよび β は $\beta = 2 \operatorname{arctanh}(1-2\Delta_\phi)$ である. なお, Δ_ϕ は界面領域を規定するパラメータであり, ここでは $\Delta_\phi < \phi_\kappa < 1-\Delta_\phi$ を満たす領域を双晶界面と定義する.

3. 転位-結晶塑性モデル

(1) 釣合い方程式

FEM 解析に適合するよう弱形式の力学的釣合い方程式について考える. ここでは, 大変形問題にも対応できる Updated Lagrangian 形式の速度形仮想仕事の原理を採用する. 物体力を無視するとき, この原理は次式のように表される.

$$\int_V \{ [\hat{\mathbf{T}} + (\operatorname{tr} \mathbf{L}) \mathbf{T} - (\mathbf{D}\mathbf{T} + \mathbf{T}\mathbf{D})] \cdot \hat{\mathbf{D}} + (\mathbf{L}\mathbf{T}) \cdot \hat{\mathbf{L}} \} dv = \int_{\mathcal{S}} \hat{\mathbf{t}} \cdot \hat{\mathbf{v}} da \quad (10)$$

ここで, \mathbf{T}° は Cauchy 応力の Jaumann 速度 ($\mathbf{T}^\circ \equiv \dot{\mathbf{T}} - \mathbf{W}\mathbf{T} + \mathbf{T}\mathbf{W}$), $\hat{\mathbf{t}}$ は表面力, \mathbf{L} は速度こう配, \mathbf{D} は変形速度 ($\equiv \mathbf{L}_S = \operatorname{sym} \mathbf{L}$), $\hat{\mathbf{v}}$ は仮想速度である.

(2) 構成式および硬化則

速度こう配の塑性部分 \mathbf{L}^p を結晶塑性表示すれば

$$\mathbf{L}^p = \sum_n \phi_{(n)} \sum_\alpha \dot{\gamma}_{(n)}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(n)}^{(\alpha)} + \dot{\gamma}_0^{[\kappa]} \mathbf{P}_0^{[\kappa]} \quad (11)$$

となる. ここで, $\dot{\gamma}_{(n)}^{(\alpha)}$ はすべり, $\dot{\gamma}_0^{[\kappa]}$ は後述する双晶ひずみである. 式(11)の対象部分は塑性変形速度であり, 反対称部分は塑性スピンである. すなわち, これらの量はそれぞれ

$$\mathbf{D}^p \equiv \mathbf{L}_S^p = \operatorname{sym} \mathbf{L}^p = \sum_n \phi_{(n)} \sum_\alpha \dot{\gamma}_{(n)}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(n)S}^{(\alpha)} + \dot{\gamma}_0^{[\kappa]} \mathbf{P}_{0S}^{[\kappa]} \quad (12)$$

$$\mathbf{W}^p \equiv \mathbf{L}_A^p = \operatorname{skw} \mathbf{L}^p = \sum_n \phi_{(n)} \sum_\alpha \dot{\gamma}_{(n)}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(n)A}^{(\alpha)} + \dot{\gamma}_0^{[\kappa]} \mathbf{P}_{0A}^{[\kappa]} \quad (13)$$

のように表される.

ところで, 速度形弾性構成式は現配置で次のように書ける.

$$\hat{\mathbf{T}} = \mathbf{C}^e : \mathbf{D}^e = \mathbf{C}^e : (\mathbf{D} - \mathbf{D}^p) \quad (14)$$

ここで, \mathbf{C}^e は 4 階の弾性係数テンソル, また \mathbf{T}^ν は Cauchy 応力の Mandel-Kratovich 速度であり,

$$\hat{\mathbf{T}} \equiv \dot{\mathbf{T}} - \mathbf{W}^* \mathbf{T} + \mathbf{T} \mathbf{W}^*, \quad \mathbf{W}^* = \mathbf{W} - \mathbf{W}^p \quad (15)$$

にて与えられる. ここで, \mathbf{W} は連続体スピン ($\equiv \mathbf{L}_A$) である. 式(12), (13) および式(15)を式(14)に適用すれば, Jaumann 速度表記の構成式が次式のように得られる.

$$\hat{\mathbf{T}} = \mathbf{C}^e : \mathbf{D} - \sum_n \phi_{(n)} \sum_\alpha \dot{\gamma}_{(n)}^{(\alpha)} \mathbf{E}_{(n)}^{(\alpha)} + \dot{\gamma}_0^{[\kappa]} \mathbf{E}_0^{[\kappa]} \quad (16)$$

ここで, $\mathbf{E}_{(n)}^{(\alpha)}$ および $\mathbf{E}_0^{[\kappa]}$ は以下のとおりである.

$$\mathbf{E}_{(n)}^{(\alpha)} \equiv \mathbf{C}^e : \mathbf{P}_{(n)S}^{(\alpha)} + \mathbf{P}_{(n)A}^{(\alpha)} \mathbf{T} - \mathbf{T} \mathbf{P}_{(n)A}^{(\alpha)},$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_0^{[k]} \equiv \mathbf{C}^e : \mathbf{P}_{0S}^{[k]} + \mathbf{P}_{0A}^{[k]} \mathbf{T} - \mathbf{TP}_{0A}^{[k]} \quad (17)$$

式(16)を式(10)に適用してFEM解析すれば、物質速度の解が得られることになる。しかしながら、そのためには構成式(16)におけるすべり速度や双晶ひずみ速度を計算するための硬化則が必要である。

いま、双晶界面領域ではすべりは発生しないとし、結晶塑性モデルにおける硬化則にはPan-Rice形の指数則を採用するとすれば、すべり速度は次式のようになる。

$$\dot{\gamma}_{\{n\}}^{(\alpha)} = \begin{cases} \dot{\gamma}_r \operatorname{sgn}(\tau_{\{n\}}^{(\alpha)}) \left| \frac{\tau_{\{n\}}^{(\alpha)}}{g_{\{n\}}^{(\alpha)}} \right|^{1/m} & (\phi_{\{n\}} \geq 1 - \Delta_\phi) \\ 0 & (\phi_{\{n\}} < 1 - \Delta_\phi) \end{cases} \quad (18)$$

ここで、 $\dot{\gamma}_r$ は参照すべり速度、 $g_{\{n\}}^{(\alpha)}$ は流れ応力である。一方、ある一つの結晶粒を考えた場合、結晶粒内における ϕ_κ の体積平均 $\bar{\phi}_\kappa$ と、双晶変形によって結晶粒に生じる $\mathbf{m}_0^{[k]}$ 面、 $\mathbf{s}_0^{[k]}$ 方向の平均的なせん断ひずみ(双晶による固有ひずみ) $\gamma_0^{[k]}$ は、定数 $\tilde{\lambda} (= \tilde{b}^{[k]} / \tilde{d}^{[k]})$ を用いて幾何学的に $\gamma_0^{[k]} = \tilde{\lambda} \bar{\phi}_\kappa$ と書ける。ここで、 $\tilde{b}^{[k]}$ は双晶系のBurgersベクトルの大きさ、また $\tilde{d}^{[k]}$ は双晶面間距離である。したがって、双晶ひずみ速度は

$$\dot{\gamma}_0^{[k]} = \tilde{\lambda} \dot{\phi}_\kappa \quad (19)$$

のように書ける。なお、Mgの場合は $\tilde{\lambda} = 0.129$ である。

さらに、すべり速度を求めるためには流れ応力が必要であり、その発展式はHCP結晶に対して

$$g_{\{n\}}^{(\alpha)} = \frac{a^{(\alpha)} \mu^{(\alpha)} \tilde{b}^{(\alpha)}}{2} \sum_{\beta} \frac{\Omega^{(\alpha\beta)} c^{(\beta)}}{\tilde{b}^{(\beta)} L_{\{n\}}^{(\beta)} \sqrt{\rho_{h\{n\}}^{(\beta)}}} |\dot{\gamma}_{\{n\}}^{(\beta)}| \quad (20)$$

のように表現できる。ここで、 $a^{(\alpha)}$ および $c^{(\beta)}$ は数値係数、 $\tilde{b}^{(\alpha)}$ はBurgersベクトルの大きさ、 $\mu^{(\alpha)}$ は横弾性係数、 $\Omega^{(\alpha\beta)}$ は転位相互作用行列の成分、 $\rho_{h\{n\}}^{(\beta)} = \rho_{0\{n\}}^{(\beta)} + \|\boldsymbol{\alpha}_{\{n\}}^{(\beta)}\| + \|\boldsymbol{\eta}_{\{n\}}^{(\beta)}\|$ は加工硬化に寄与する転位密度、 $\rho_{0\{n\}}^{(\beta)}$ は初期転位密度、 $\boldsymbol{\alpha}_{\{n\}}^{(\beta)} = (1/\tilde{b}^{(\beta)}) \mathbf{P}_{\{n\}}^{(\beta)} \times \nabla \gamma_{\{n\}}^{(\beta)}$ はGN(Geometrically Necessary, 幾何学的に必要な)転位密度テンソル、 $\boldsymbol{\eta}_{\{n\}}^{(\beta)} = (\sqrt{\|\boldsymbol{\alpha}_{\{n\}}^{(\beta)}\|} / \tilde{b}^{(\beta)}) \mathbf{P}_{S\{n\}}^{(\beta)} \times (\nabla \gamma_{\{n\}}^{(\beta)} \otimes \bar{\mathbf{v}})$ はSS(Statistically Stored, 統計的に蓄積する)転位密度の役割をなす不適合度テンソルである。また、 $L_{\{n\}}^{(\beta)}$ は転位の平均飛行距離であり、次式のように表される。

$$L_{\{n\}}^{(\beta)} = \frac{c^{*(\beta)}}{\sqrt{\sum_{\gamma} \omega^{(\beta\gamma)} \rho_{L\{n\}}^{(\gamma)}}} \quad (21)$$

ここで、 $c^{*(\beta)}$ は転位の易動度(転位が停止するまでに切る林立転位の個数)を表す数値パラメータ、 $\rho_{L\{n\}}^{(\beta)} = \rho_{0\{n\}}^{(\beta)} + \|\boldsymbol{\eta}_{\{n\}}^{(\beta)}\|$ は β すべり系の障害となる林立転位密度、 $\omega^{(\beta\gamma)}$ は自己硬化を除く転位の相互作用を表す行列の成分である。ただし、ここでは簡単化のため $\omega^{(\beta\gamma)}$ の対角成分を零、それ以外の成分を1とし、すべり系ごとに $c^{*(\beta)}$ の値を変えることでHCP結晶における各すべり系の転位の易動度を表現する。なお、本稿で考慮するすべり系は底面系(3個)、柱面系(3個)および二次錐面系(6個)であり、それぞれにおける $c^{*(\beta)}$ の値を100, 20および2とする。

(3) Multi-physics 解析

以上のように本モデルでは、転位の情報を有する弾性ひず

みエネルギーがPhase-field方程式に、また、双晶の秩序変数が結晶塑性構成式に導入されることによって、双晶の秩序場と結晶の変形場が互いに連成し合うこととなり、変形双晶による組織形成と結晶の力学応答に関するMulti-physicsモデルの形式をとっていることがわかる。

4. FEM解析および検討

(1) 単結晶の繰返し負荷解析

FEM解析における解析領域は一辺10 μm の正方形領域とし、 $[1\bar{2}10]$ 方向の変位を拘束した平面ひずみ条件下で $[10\bar{1}0]$ 方向に1サイクルの繰返し負荷を与える。ひずみ振幅は2%とし、 $[10\bar{1}0]$ 引張りから開始する。各数値パラメータを $\sigma_m = 0.15 \text{ J/m}^2$, $\sigma_t = 5.00 \text{ J/m}^2$, $\delta_\phi = 0.5 \mu\text{m}$, $M = 10^{-10} \text{ m/(N}\cdot\text{s)}$, $\Delta_\phi = 0.1$, ならびに底面系および非底面系(柱面系, 二次錐面系)の初期臨界せん断応力を1 MPaおよび50 MPaとし、その他の物性値には純Mgのものを用いる。また、初期条件として ϕ_κ は全領域で零であり、 $\tau_0^{[k]} \geq 15 \text{ MPa}$ となった時点で双晶の核生成が起こるとして、解析領域中央から半径0.25 μm の領域を $\phi_\kappa = 1$ とする。さらに、双晶変形は原子の再配列によって生じるため、 $\phi_{\{n\}} < \Delta_\phi$ の領域の $\gamma_{\{n\}}^{(\alpha)}$ および $g_{\{n\}}^{(\alpha)}$ を初期化する。

図1は本解析によって得られた公称ヒステリシス曲線であり、同図中の点Tは双晶の核を配置した点である。また、図2(i)~(iv)は図1の(a)~(f)の各点における ϕ_κ 、底面系の平均すべり速度 $\dot{\gamma}_m^{\text{bas}}$ 、非底面系の平均すべり速度 $\dot{\gamma}_m^{\text{non-bas}}$ および全すべり系で和を取った転位密度 $\sum_{\alpha \in \text{slip}} \rho^{(\alpha)}$ の分布図であり、同図の上下方向が負荷方向である。なお、図2(i)~(a)の白線は母相および双晶相の結晶方位、図2(ii)および(iii)の紫色で示された領域は双晶界面を表している。図1より、はじめの $[10\bar{1}0]$ 引張りの間は著しい加工硬化が発生していることがわかる。 $[10\bar{1}0]$ 引張りでは底面系は活動できないため、この加工硬化の原因は非底面系の活動であると考

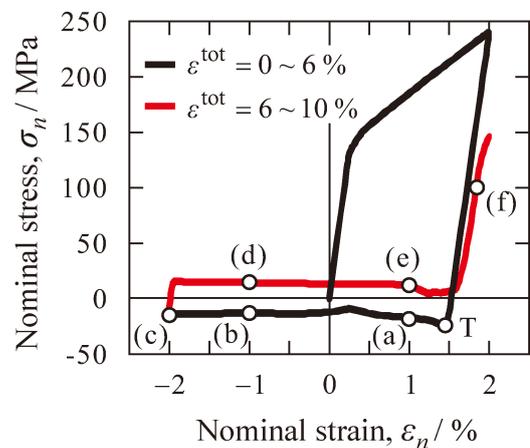


図1 Mg単結晶の繰返し負荷解析に対する公称応力公称ひずみ線図。

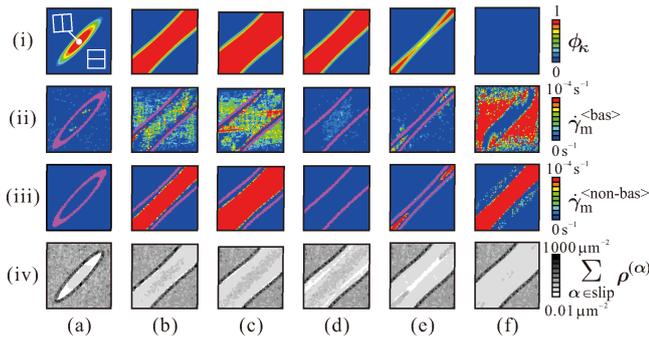


図2 諸量の分布 (i) 双晶の秩序変数, (ii) 底面系のすべり速度, (iii) 非底面系のすべり速度, (iv) 転位密度[(a)~(f)は図1に対応].

えられる。引張率2%に達して $[10\bar{1}0]$ 圧縮に転じると弾性除荷状態となり、点Tにおける双晶の核生成と同時に応力低下が生じ、その後再び引張りに転じるまではほぼ一定の応力レベルを保っている。図1と図2(i)の(a)~(c)を比較すると、一定応力の区間では双晶が帯状に成長していることがわかる。これは、負荷応力による弾性ひずみエネルギーが双晶変形の駆動力として作用すると同時に、双晶ひずみによって応力が緩和しているためである。また、図2(ii)および(iii)の(a)~(c)より、双晶内部においてすべり系の盛んな活動が確認できる。これは、引張時に母相が加工硬化しているのに対して双晶内部の流れ応力が初期値に戻されていること、および双晶界面近傍で応力集中が起きていることが原因と考えられる。さらに、図2(iv)の(a)~(c)より、双晶界面近傍で転位蓄積が確認できる。これは、双晶界面近傍に大きなすべりこう配が生じているためであり、高い結晶方位差を有する双晶界面を転位が通過できないことを表している。続いて再び $[10\bar{1}0]$ 引張りに転じると、図2(i)の(c)~(f)より、双晶の帯が次第に縮小していく様子が見られる。図1と比較すると、この区間でも一定の応力レベルが保たれており、その原因は前述の通りである。また、双晶相が完全に消失すると同時に弾性変形と見られる急激な応力の上昇が見られるが(図1)、解析領域中央の帯状の領域ではすべり変形が生じていることがわかる(図2(ii)および(iii)の(f))。これは、双晶内部で発生したすべり変形によってこの領域が加工硬化して応力が上昇したこと、および脱双晶化によって流れ応力が初期化されたことが原因と考えられる。また、図2(iv)の(f)より、母相のままであった領域と比べて、一度双晶相になった領域は脱双晶化後も低い転位密度となっていることがわかる。これは、脱双晶化が起きた領域のすべりを零としているためである。以上のヒステリシス応答ならびに双晶化および脱双晶化の挙動は、Wuら⁽⁴⁾による実験結果と定性的に一致している。

(2) 発展的な応用例

4.1節ではMg単結晶を例として、双晶進展を伴う現象の最も基本的な挙動に関する解析結果を示したが、本節ではこ

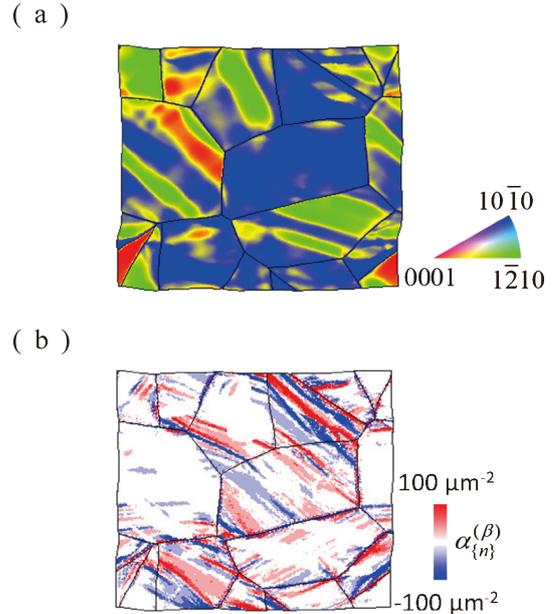


図3 Mg多結晶に形成された複数バリエーションの変形双晶, (a) 秩序変数分布, (b) GN転位密度分布.

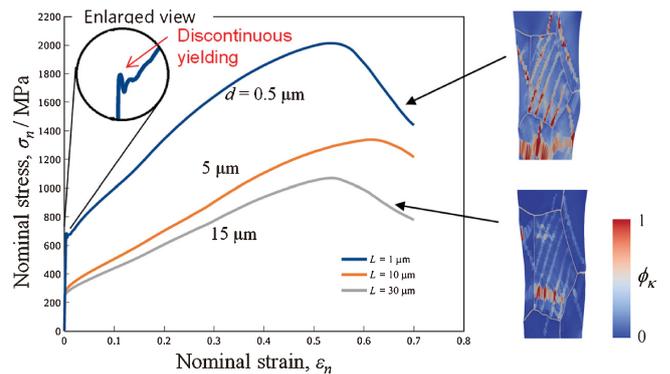


図4 TWIP鋼に発現する双晶と強度・延性の粒径依存性.

のモデルを多結晶構造やFCC結晶に発展させた場合の事例を紹介する。ただし、詳細については割愛することとする。

図3は解析対象を純Mgの多結晶構造に変更するとともに、複数の双晶バリエーションを扱えるように組織形成の計算をMulti-phase-fieldモデル⁽⁶⁾⁽⁷⁾に置き換えて解析を実施した例である。これを見ると、赤と緑で表示された変形双晶が結晶粒内に形成され(図3(a))、それに対応して正負のGN転位が双晶周囲や粒界に蓄積する様子(図3(b))が再現されていることがわかる。

一方、図4は本モデルを高Mnオーステナイト鋼に適用し、TWIP(Twinning-Induced Plasticity, 双晶誘起塑性)現象の粒径依存性を調べた解析結果である。ただし、超微細粒材では転位の枯渇による粒界転位源現象や臨界分解せん断応力の顕著な粒径依存性が発現するので、本モデルをそれに対応した形式⁽⁸⁾⁽⁹⁾に拡張している。この図を見ると、超微細粒材(粒径 $d=0.5\mu\text{m}$)では強度が全体的に増加しているだけでなく、通常粒材($d=15\mu\text{m}$)とほぼ変わらない程度の延性も

