

## 結晶塑性有限要素法を用いた 圧延集合組織を有するマグネシウム合金の変形・強度発現機構の解明\*

石田 智広<sup>\*1</sup>, 渋谷 慎兵<sup>\*1</sup>, 加藤 準治<sup>\*2</sup>, 寺田 賢二郎<sup>\*2</sup>  
京谷 孝史<sup>\*1</sup>, 安藤 大輔<sup>\*3</sup>, 小池 淳一<sup>\*3</sup>

### Deformation and Strength Characterization of Mg Alloys with Rolled Crystallographic Textures by Crystal Plasticity Finite Element Method

Tomohiro ISHIDA<sup>\*1</sup>, Shinpei SHIBUTANI, Junji KATO, Kenjiro TERADA, Takashi KYOYA,  
Daisuke ANDO and Junichi KOIKE

<sup>\*1</sup> Department of Civil Engineering, Tohoku University, Aramaki, Aza-Aoba 6-6-06, Aoba, Sendai 980-8579 Japan

A series of crystal plasticity finite element simulations are conducted to understand the grain-scale deformation process with crystallographic slip and to elucidate the development mechanism of the macroscopic yield strength for magnesium alloys. For the comparative study, different values of initial critical resolved shear stress are set for the basal slip system in a polycrystalline aggregate FE model. The main finding in this study is that the formation of shear bands with localized deformation, which are associated with the macroscopic strength and ductility, is strongly related to the evolution of deformation resistance of separate slip systems and depends on the latent hardening characteristics of the prismatic slip system.

**Key Words** : Finite Element Method, Numerical Simulation, Deformation Resistance, HCP, Magnesium Alloy, Slip System, Anisotropy, Strength

#### 1. 緒 言

近年, 軽量性と資源の豊富さから鉄に替わる次世代の軽量構造用材料としてマグネシウムが着目されており, その物性に関して様々な研究が行われている. 軽量性に関して各金属の単位体積当たりの重量を比較すると, 鋼: 7.9, アルミニウム: 2.7, マグネシウム: 1.8 となり, マグネシウムは現在頻繁に用いられている鋼の約 1/4, 軽金属の代表であるアルミニウムの約 2/3 の軽い金属である. また, 材料固有の強度を意味する比強度でも, マグネシウムはアルミニウムと同程度の数値を示し, マグネシウムを合金として用いることにより製品の強度を維持したまま軽量化を実現することができると期待されている.

しかし, マグネシウムは最密六方晶構造を有しており, 微視的変形機構である結晶すべりに異方性を有するなど材料挙動の予測が困難であることが原因で, 安定的に延性, 靱性を得ることができない. そのため, 現状でマグネシウムの使用は塑性加工の必要がない, 携帯電話やノートパソコンの筐体などの小型の構造物に限られており, 大型の構造物への使用には至っていない. 結晶すべりの異方性の原因となるのは, マグネシウムにおける底面, 柱面, 錘面の転位すべり (図 1) のうち, 結晶構造に起因する臨界分解せん断応力 (以下, CRSS) の低さから, 室温に近い温度では底面すべりが支配的となり, 非底面の方向への変形が起こりにくいためである<sup>(1)</sup>. 加えて, 底面が圧延方向と水平に優先方位を持つ集合組織を形成する性質が, 室温下における板厚方向への変形を難しくしている<sup>(2)</sup>. そのため, 自動車部品等の部材を安価で製造するために必要な, 塑性変形を伴う室温から再結晶温度未満での冷間加工が困難とされている. この成形性改善のため, マグネシウム合金の変形挙動について盛んに研究

\* 原稿受付 2012 年 11 月 8 日 改訂原稿受付日 2013 年 6 月 21 日

<sup>\*1</sup> 東北大学大学院工学研究科 土木工学専攻(〒980-8579 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-06)

<sup>\*2</sup> 正員, 東北大学災害科学国際研究所

<sup>\*3</sup> 東北大学大学院工学研究科 知能デバイス材料学専攻

E-mail: ishida@mm.civil.tohoku.ac.jp



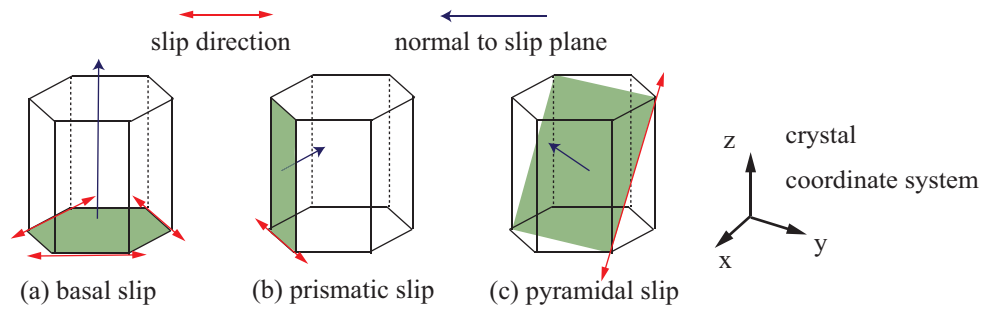


Fig. 1 Slip system of Mg

がおこなわれているが、現状では未だに明らかにされていない部分が多い。

マグネシウムの微視的変形機構は前述した結晶すべりと、結晶粒内部において原子配列が母相と鏡対象となるようせん断変形を生じる変形双晶である。近年では計測技術、とりわけ方位解析法の発達もあって実験により得られる知見が多い。しかし、多結晶体内における複雑な変形挙動、結晶粒同士の相互作用、結晶すべりと変形双晶の異なる変形機構とそれらの相互作用が集合組織の進展や降伏・引張強度・延性などの巨視的材料特性に及ぼす影響については未だに明らかにされていない。これらの巨視的強度発現メカニズムを解明するには、結晶粒レベルでの微視的変形機構を考慮した数値シミュレーションが有効であり、それを可能にするマルチスケール解析の導入に大きな期待が寄せられている。

しかし、変形双晶を考慮したマルチスケール解析には幾つかの解決すべき問題がある。例として挙げると、結晶すべりと変形双晶の相互作用や、シャフリング後の物性（ひずみ硬化など）の定量的な評価法が把握されていないことである。そのため、変形双晶後の変形挙動を適切に表現しきれていないのが現状であり、実験と数値シミュレーション双方による物性の把握が望まれている。

この変形双晶と結晶すべりの複雑な相互作用を排除する一つの方法として、多結晶体の結晶粒径を小さくすることで、変形双晶の体積比を減じることができるという報告がされている<sup>(3)</sup>。加えて、圧延材を用いると底面が板面にほぼ平行であることから引張変形において柱面すべりが活動し、20%以上の大きな板幅ひずみを得られるという報告もされている<sup>(4)</sup>。これらのことから、圧延された微細な結晶粒を用いて合金化を行うことが成形性の改善につながると期待されているが、複雑な微視的変形機構を有するマグネシウム合金に十分な延性をを持たせるためには、各すべり系の硬化特性やそれらの相互作用を十分に理解することが必要不可欠である。

既往の研究のなかには、マグネシウム合金の非底面すべりに関する温度依存性に着目し、非底面・底面すべりのCRSS比ごとの $r$ 値（ランクフォード値）を示した報告<sup>(5)</sup>や、負荷・除荷試験における各すべり系の活動が荷重方向に依存することを示した報告<sup>(6)</sup>などがあり、各すべり系の変形・強度特性が調査されている。また、粘塑性セルフコンシステントモデルを適用した解析と実験結果の定量的な比較を行った研究<sup>(7)</sup>や、MB-CPFEMを用いた多結晶粒内部の変形双晶を対象とした研究<sup>(8)</sup>などでは、微視的な変形機構による、集合組織の発展と巨視的な強度特性に関する調査が行われている。しかし、マグネシウム合金における各すべり系の変形・強度特性のうち、潜在硬化に着目したすべり系間の相互作用に関する議論や、各すべり系のCRSS比が多結晶体内における結晶すべりの分布性状および巨視的な降伏・引張強度・延性に及ぼす影響に関する議論は十分になされてきたとは言えない。

そこで本研究では、合金化に伴う結晶すべりのパラメータ変化を底面すべりの初期CRSSの増加と仮定し、圧延された微細な結晶粒径をもつマグネシウム多結晶体に対して結晶塑性FEM<sup>(9)(10)</sup>を適用した解析を行い、底面の初期CRSSを0.5MPaから10MPaまで増加させていくパラメータスタディを行うことで、合金化による微視的変形性能と巨視的変形・強度特性への影響を調査する。ただし、ここでは微細な結晶粒径をもつマグネシウム多結晶体を想定しているため、純粋な結晶すべりのみが生じ、変形双晶は発現しないものと仮定する。具体的には、実際の実験においても観測されている、変形の局所化に伴うせん断帯の形成と柱面すべりの硬化特性との関係を調べ、巨視的強度特性および延性に及ぼす影響に関して考察を行う。そして、添加元素による底面初期CRSSの増加が、マグネシウム合金の微視的および巨視的変形・材料特性に及ぼす影響について解明を試みる。

## 2. 結晶塑性構成則

本章では、本研究で使用する古典的結晶塑性モデルについて説明する。

### 2.1 変形・速度勾配の応力

本研究では、変形挙動を有限変形理論の枠組みで記述することとし、変形を表す変数として変形勾配  $F$  を用いる。全体の变形に対する弾性・結晶すべりの寄与分は次式のように弾性成分  $F^e$ 、塑性成分  $F^p$  それぞれの変形勾配の積で表す。

$$F := F^e F^p \quad (1)$$

これより、速度勾配  $l$  を以下のように定義する。

$$l := \dot{F}F^{-1} = \dot{F}^e F^{e-1} + F^e \dot{F}^p F^{p-1} F^{e-1} = l^e + l^p \quad (2)$$

ここで、 $l^e$ 、 $l^p$  はそれぞれ弾性、結晶すべりによる変形速度勾配であり、次式で定義した。

$$\begin{cases} l^e := \dot{F}^e F^{e-1} \\ l^p := F^e \dot{F}^p F^{p-1} F^{e-1} \end{cases} \quad (3)$$

さらに、変形速度テンソル  $d$  およびスピンテンソル  $w$  を、それぞれ以下のように定義する。

$$\begin{aligned} d &:= \text{sym}[l] = d^e + d^p = \text{sym}[l^e] + \text{sym}[l^p] \\ w &:= \text{skw}[l] = w^e + w^p = \text{skw}[l^e] + \text{skw}[l^p] \end{aligned} \quad (4)$$

ここで、 $\text{sym}[\bullet]$ 、 $\text{skw}[\bullet]$  はそれぞれ 2 階のテンソル  $[\bullet]$  の対称・反対称成分を表している。

### 2.2 弾性構成式

本研究では、以下に示す速度形の式を弾性構成式に採用する<sup>(10)</sup>。

$$\hat{\sigma}^* + \sigma \text{tr}[d^e] = \mathbb{C} : d^e \quad (5)$$

ここで、 $\mathbb{C}$  は弾性テンソル、 $\hat{\sigma}^*$  は次式で定義される中間配置を参照する客観応力速度である。

$$\hat{\sigma}^* := \hat{\sigma} + w^p \sigma - \sigma w^p \quad (6)$$

ここで、 $\hat{\sigma}$  は Jaumann 応力速度であり次式で定義される。

$$\hat{\sigma} := \dot{\sigma} - w \sigma + \sigma w \quad (7)$$

式 (5) に式 (6)、(4) を代入し  $\hat{\sigma}$  について整理すると次式が得られる。

$$\hat{\sigma} = \mathbb{C} : (d - d^p) - \sigma \text{tr}[d - d^p] - w^p \sigma + \sigma w^p \quad (8)$$

Cauchy 応力は、式 (7) の  $\hat{\sigma}$  を積分することで得られる。

### 2.3 結晶塑性の流れ則

結晶塑性構成モデルは単結晶のすべりを基に構築された塑性構成モデルである。この構成モデルは、単結晶の結晶構造に対して結晶学的に決まるすべり系（すべり面・すべり方向の組み合わせ）を定義し、各すべり系の臨界分解せん断応力およびすべり系にはたらく分解せん断応力から結晶すべりによる変形を決定する。ここでは、このすべり変形速度を規定する流れ則を与える。

まず、対象とする材料のすべり系の数を  $n$  個とし、あるすべり系  $\alpha$  の基準配置における単位すべり方向ベクト

ルを  $s_0^{(\alpha)}$  , 単位すべり面法線ベクトルを  $m_0^{(\alpha)}$  とする . すべり変形による結晶格子のゆがみがないものと仮定し , また変形後もこれらのベクトル ( $s^{*(\alpha)}, m^{*(\alpha)}$ ) が互いに直交することを考慮すると次の関係を得る .

$$s^{*(\alpha)} = F^e s_0^{(\alpha)}, \quad m^{*(\alpha)} = m_0^{(\alpha)} F^{e-1} \quad (9)$$

また , ある応力状態  $\sigma$  が与えられたときのすべり系  $\alpha$  にはたらく分解せん断応力は , 次式で表される Rice の定義<sup>(11)</sup>に従った .

$$\tau^{(\alpha)} = (s^{*(\alpha)} \otimes m^{*(\alpha)}) : J\sigma \quad (10)$$

このとき , すべり系  $\alpha$  のすべり速度を  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  として , これと応力 (10) による塑性仕事率に関して次式を要請する .

$$J\sigma : \dot{I}^p = \sum_{\alpha=1}^n J\sigma : (s^{*(\alpha)} \otimes m^{*(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (11)$$

これを恒等式とみなせば , 結晶すべりの変形速度テンソルに関する流れ則が次式のようになる .

$$\dot{I}^p = \sum_{\alpha=1}^n (s^{*(\alpha)} \otimes m^{*(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (12)$$

さらに , この流れ則を対称・反対称成分に分けて表すと式 (4) より結晶すべりの変形速度テンソル  $d^p$  , スピンテンソル  $w^p$  は以下で定義される .

$$d^p = \sum_{\alpha=1}^n \mu^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (13)$$

$$w^p = \sum_{\alpha=1}^n \omega^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (14)$$

となる . ここで ,  $\mu^{(\alpha)}$  ,  $\omega^{(\alpha)}$  は ( $s^{*(\alpha)} \otimes m^{*(\alpha)}$ ) の対称・反対称成分であり , 次式で定義した .

$$\begin{cases} \mu^{(\alpha)} := \text{sym}[s^{*(\alpha)} \otimes m^{*(\alpha)}] \\ \omega^{(\alpha)} := \text{skw}[s^{*(\alpha)} \otimes m^{*(\alpha)}] \end{cases} \quad (15)$$

#### 2.4 粘塑性すべり速度と硬化則

結晶すべり速度については , これまでに幾つかの関数形が提案されているが , 本研究では Asaro ら<sup>(12)</sup>が用いた以下の指数関数形の粘塑性近似式を採用する .

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} := \dot{a} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{n^v} \text{sign} \left( \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right) \quad (16)$$

ここで ,  $g^{(\alpha)}$  はすべり系  $\alpha$  の CRSS を表す変数である . また ,  $\dot{a}$  は参照ひずみ速度 ,  $n^v$  は速度感度指数でいずれも材料パラメータである . また , 単位すべり方向ベクトル  $s_0^{(\alpha)}$  と単位すべり面法線ベクトルを  $m_0^{(\alpha)}$  の速度形は Asaro and Lubarda<sup>(13)</sup>に従い , 式 (9) を時間微分した式に式 (3) の第 1 式および式 (4) , (9) を代入することで次式のように与えられる .

$$\dot{s}^{*(\alpha)} = \dot{F}^e s_0^{(\alpha)} = \dot{F}^e F^{e-1} F^e s_0^{(\alpha)} = \dot{I}^e \cdot s^{*(\alpha)} = (d + w - d^p - w^p) \cdot s^{*(\alpha)} \quad (17)$$

$$\dot{m}^{*(\alpha)} = \dot{m}_0^{(\alpha)} \dot{F}^{e-1} = \dot{m}_0^{(\alpha)} F^{e-1} \dot{F}^e F^{e-1} = \dot{m}^{*(\alpha)} \cdot \dot{I}^{e-1} = -\dot{m}^{*(\alpha)} \cdot (d + w - d^p - w^p) \quad (18)$$

本研究では , 速度形構成則を採用して応力積分を行うため , 式 (9) を用いる代わりに , これらの式を時間積分することで現配置における方向ベクトルを算定する . 分解せん断応力の発展式は式 (10) を時間微分した式に , 式 (2) ~ (4) , (5) , (7) , (8) , (17) , (18) を代入することで次式が導かれる .

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = J(d - d^p) : \{ \mathbb{C} : \mu^{(\alpha)} + \sigma \cdot \omega^{(\alpha)} - \omega^{(\alpha)} \cdot \sigma \} \quad (19)$$

Table 1 Material parameters for crystallographic slip

	Basal slip ( $\alpha = 1 - 3$ )	Prismatic slip ( $\alpha = 4 - 6$ )	Pyramidal slip ( $\alpha = 7 - 12$ )
Initial hardening modulus $h_0$	10	7500	7500
Saturation stress $\tau_s$ [MPa]	330	150	260
Initial CRSS $\tau_0$ [MPa]	0.5 - 10	20	40
Reference slip rate $\dot{\alpha}$	0.001	0.001	0.001
Latent hardening rate ( $\beta = 1 - 3$ ) $q_{\alpha\beta}$	0.2	0.5	0.5
Latent hardening rate ( $\beta = 4 - 6$ ) $q_{\alpha\beta}$	0.2	0.2	0.2
Latent hardening rate ( $\beta = 7 - 12$ ) $q_{\alpha\beta}$	1.0	0.2	1.0

さらに、CRSS の発展式を次式で定義する。

$$g^{(\alpha)} := \sum_{\beta=1}^n h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \quad (20)$$

ここで  $h_{\alpha\beta}$  は硬化係数行列の成分であり、これも既往の研究から複数の関数形が提案されているが、本研究では Asaro ら<sup>(12)</sup> および Asaro and Lubarda<sup>(13)</sup>で紹介されている以下の式を用いる。

$$\begin{cases} h_{\alpha\alpha} := h_0 \operatorname{sech}^2 \left| \frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right| \\ h_{\alpha\beta} := q_{\alpha\beta} h_{\alpha\alpha} \quad (\alpha \neq \beta) \end{cases} \quad (21)$$

$h_{\alpha\alpha}$  は自己硬化、 $h_{\alpha\beta}$  は潜在硬化 ( $\alpha \neq \beta$ ) に対応する係数であり、 $h_0$ 、 $\tau_s$ 、 $\tau_0$ 、 $q_{\alpha\beta}$  はそれぞれ初期硬化係数、飽和応力、初期臨界分解せん断応力、自己硬化と潜在硬化の比を表す材料パラメータである。ここで自己硬化とは、式 (21) で示した  $\alpha = \beta$  の際の硬化であり、各すべり系の自己すべり変形量に応じて、CRSS が高まる硬化である。一方、潜在硬化とは  $\alpha \neq \beta$  の際、他のすべり系の変形の影響で CRSS が高まる硬化挙動である。また  $\gamma$  は各すべり系の蓄積すべり量を全すべり系について和をとった値であり、次式で定義する。

$$\gamma := \sum_{\alpha=1}^n \int_0^t |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| dt \quad (22)$$

本研究では、以上のように設定した速度形の結晶塑性構成則に対して、一般的な陰的積分法<sup>(9)~(11)(13)</sup>を適用して応力を更新する。

### 3. マグネシウムの硬化特性

本研究において、多結晶体の解析に仮定した各パラメータを表 1 に示す。表中に用いた潜在硬化のパラメータは、Kelly and Hosford<sup>(14)(15)</sup>によるマグネシウムの単結晶を用いたチャンネルダイ圧縮試験とのフィッティングシミュレーションの結果<sup>(16)</sup>を参照した。文献<sup>(16)</sup>では変形双晶をすべり系の一つとして扱っているが、本研究では変形双晶は生じないものとして仮定しているため、ここで採用したパラメータはあくまで参考値であることに注意されたい。また、底面の初期 CRSS は添加元素の影響を考慮し、0.5、1.0、5.0、10 (MPa) の 4 水準を考えることにする。また、次項以降で示す数値シミュレーションにおいて、六方晶系の弾性マトリクス  $C$  の成分は、文献<sup>(17)</sup>を参照して以下のように設定する。

$$[C] = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{66} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix}, \quad \begin{cases} C_{11} = 58000 \\ C_{12} = 25000 \\ C_{13} = 20800 \\ C_{33} = 61200 \\ C_{44} = 16600 \\ C_{66} = 16500 \text{ [MPa]} \end{cases} \quad (23)$$

ここで  $[C]$  は、弾性係数テンソル  $C$  の行列表記であり、図 1 中の格子座標系を参照して  $xx$ 、 $yy$ 、 $zz$ 、 $xy$ 、 $yz$ 、 $zx$  に関するテンソル成分をこの順番で格納している。以下、本研究で採用した自己硬化および潜在硬化に関する各パラメータの役割を理解するために、式 (20)、(21) を時間微分して得られる自己硬化と潜在硬化の特徴を整理して

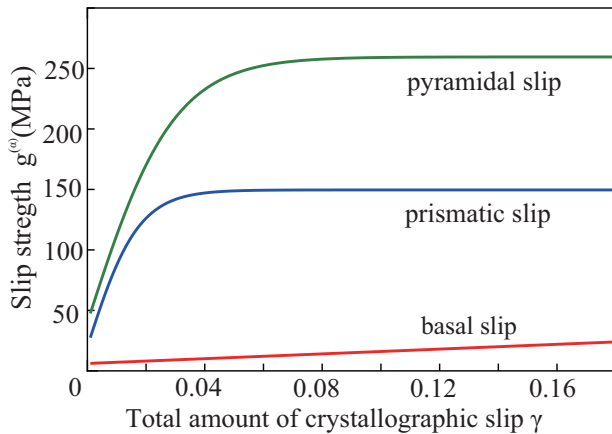


Fig. 2 Time evolution of slip strength for each slip system by self-hardening

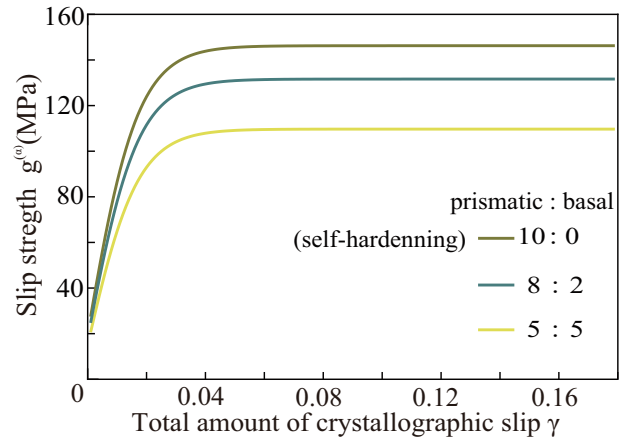


Fig. 3 Time evolution of slip strength for prismatic slip considering latent-hardening

おく．ここでの数値計算の目的は，4章のケーススタディによる議論を進めるにあたって参照できるように，想定している各すべり系の硬化曲線とそれらの相互作用を例示することである．

まず，潜在硬化がないものと仮定し，簡単のためすべり速度を  $\dot{\gamma}^{(\beta)} = 0.001$  に固定して，自己硬化による各すべり系の CRSS の時間発展の様子を図 2 に示す．なお，ここで用いた底面すべりの初期 CRSS は 0.5MPa である．これらの図より，本研究で採用したパラメータでは，底面すべり系は蓄積すべり量にかかわらず一定の傾きで CRSS が増加するが，蓄積すべり量  $\gamma = 0.05$  前後から柱面すべり系は CRSS が増加せず，0.08 前後で錘面すべり系も同様に CRSS が増加しなくなることがわかる．この CRSS が増加しない現象は，飽和応力  $\tau_s$  と硬化係数  $h_0$  によるものであるが，これはミクロスケールでのすべり変形に対する抵抗の消失を意味する．

次に，柱面すべりを例にとり，潜在硬化の影響を考慮した CRSS の時間発展を図 3 に示す．図中の 3 種の線は，すべて柱面すべり系の CRSS の発展を示しているが，底面すべりによる潜在硬化の影響を考慮しているため，降伏点（飽和応力点）に差が生じている．これは，柱面すべりの降伏点以前における全蓄積すべり量  $\gamma$  に含まれる底面すべり，柱面すべり量の割合が異なるため，潜在硬化の影響度に差が生じるためである．具体的には，マグネシウムにおける結晶すべりの各パラメータでは，底面すべり系の CRSS が非底面すべり系に比べ低い値をとるため，変形初期において底面すべりが卓越しやすい．柱面すべり，錘面すべりは図 2 に示されているように各すべり系のすべり量の総和である全蓄積すべり量  $\gamma$  が一定の値になると CRSS が増加しなくなる．この一定の値に達する前に底面すべりが卓越するほど，柱面と錘面すべり系の CRSS の増加には潜在硬化の割合が大きくなる．この潜在硬化の割合が大きくなるほど，図 3 に示されるように柱面すべりの CRSS の降伏点は自己硬化による発展に比べ相対的に低くなる．これは錘面すべり系についても同様の性質である．このような挙動が現れるのは，全蓄積すべり量  $\gamma$  が式 (22) に示されるように全すべり系のすべり量の総和であることに起因している．すなわち，硬化に関する係数の式 (21) の第 2 式から，潜在硬化係数  $h_{\alpha\beta} (\alpha \neq \beta)$  は全蓄積すべり量  $\gamma$  に対応する自己硬化関数  $h_{\alpha\alpha}$  と表 1 中の潜在硬化比  $q_{\alpha\beta}$  の積で表しているからである．表 1 に示される底面すべりの潜在硬化比  $q_{\alpha\beta}$  の各値は，底面すべりが活動したとき，同一のすべり量，すべり速度で自己硬化したときの 0.2 倍，柱面と錘面においては自己硬化の 0.5 倍を強度 (CRSS) 増分として与えるようなパラメータである．

以上より，本研究における硬化パラメータの設定では，自己硬化に対する潜在硬化の割合が大きい結晶粒ほど，柱面すべりと錘面すべりのすべり抵抗力 (CRSS 増加) が消失するときの降伏 (飽和) 応力点は低くなる．ただし，実際に解析するモデルではすべり速度  $\dot{\gamma}^{(\beta)}$  は一定ではなく，結晶粒ごとの CRSS (強度) の増加，降伏点は不均質になる．

#### 4. 結晶塑性 FEM を用いた多結晶体の解析

本章では，IPF により撮影された画像データを元にマグネシウム合金多結晶体の有限要素モデルを生成し，結晶塑性 FEM を用いて解析することで，結晶すべりの進行過程と分解せん断応力，CRSS の時間発展の関係を結晶粒

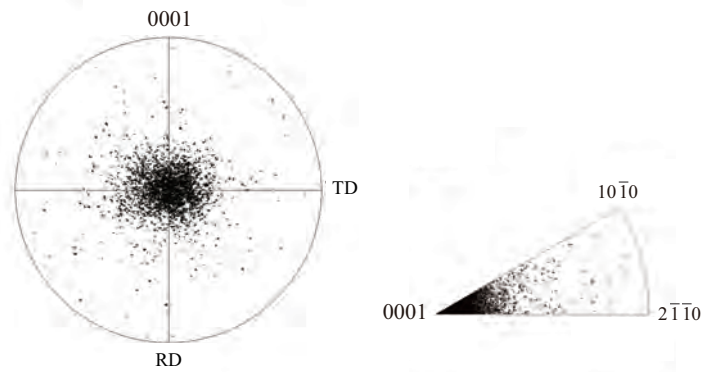


Fig. 4 {0001} Pole figure, Inverse pole figure

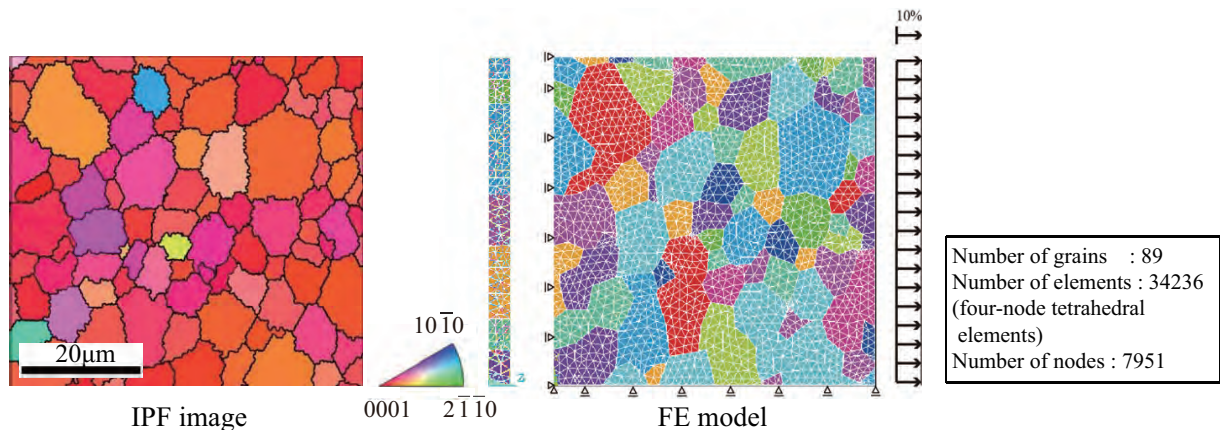


Fig. 5 Polycrystalline model

スケールで解明する．ここでは、底面すべりのCRSSを0.5, 1, 5, 10 (MPa)の4水準とするケーススタディにより、添加元素による底面初期CRSSの増加が微視的および巨視的変形・強度特性に及ぼす影響について調査する．

本研究では、圧延集合組織を有するマグネシウム合金を使用することとし、図4に底面法線方向{0001}の極点図、及び逆極点図を示す。また、図5にIPFで撮られた画像データ(左図)と、本研究で用いる有限要素モデル(右図)に示す。要素種としては、4節点四面体要素を使用し、奥行き方向に2~6要素をもつ疑似3次元モデルとした。すなわち、結晶粒形状は奥行き方向に変化しないものとしてモデル化した。解析に用いるパラメータは前述した表1に加え、結晶座標系より観測した各結晶粒の方位を表すオイラー角である。なお、本研究のパラメータスタディにおける計算結果は速度感応指数 $n^v$ の大きさに依存しないため、著者らの経験上、数値的にも安定した結果の得られる $n^v = 30$ を用いることとした。また、境界条件については図5(右図)のように設定し、一軸引張により変位を与え、マクロひずみが10%になるまで引張負荷を与える解析を行う。

#### 4.1 CRSSの増加に伴うモデル全体のすべり量の変遷

本節では、全蓄積すべり量 $\gamma$ と、せん断帯形成の相関について考察する。はじめに、底面初期CRSSが異なる4種類の全蓄積すべり量 $\gamma$ の解析結果を図6に示す。これらのコンター図はマクロひずみ10%時のものであり、底面初期CRSSが高くなるほど、結晶すべりが起こる結晶粒と起こらない結晶粒が明確に分かれ、変形が局所化する傾向が示されている。また、各CRSS値で見られる斜め約45°に変形が進行する傾向は、実際の実験で得られている微細粒の局所的な破壊原因となる、せん断帯<sup>1</sup>形成の特徴をとらえている。このせん断帯形成に対する境界の影響の程度を確認するため、3.2節で用いたモデルの結晶方位をランダムに割り当てた後、鏡面対象に複製したモデルで解析した結果を図7(a)に示す。また、解析モデルを鏡面対象に複製した後、結晶方位をランダムに割り当てたモデルを用いた解析結果を図7(b)に示す。これらはいずれもマクロひずみ10%時の全蓄積すべり量 $\gamma$ のコンター図を示しており、底面の初期CRSSは10MPaとしている。各結晶粒に割り当てた結晶方位の違いにより、数値シミュレーション結果に現れるせん断帯の位置は変わるが、約45°傾斜する傾向は変わらないことから、せ

<sup>1</sup>ここでのせん断帯とはネッキング後の挙動ではなく、せん断によるひずみ集中部を指す

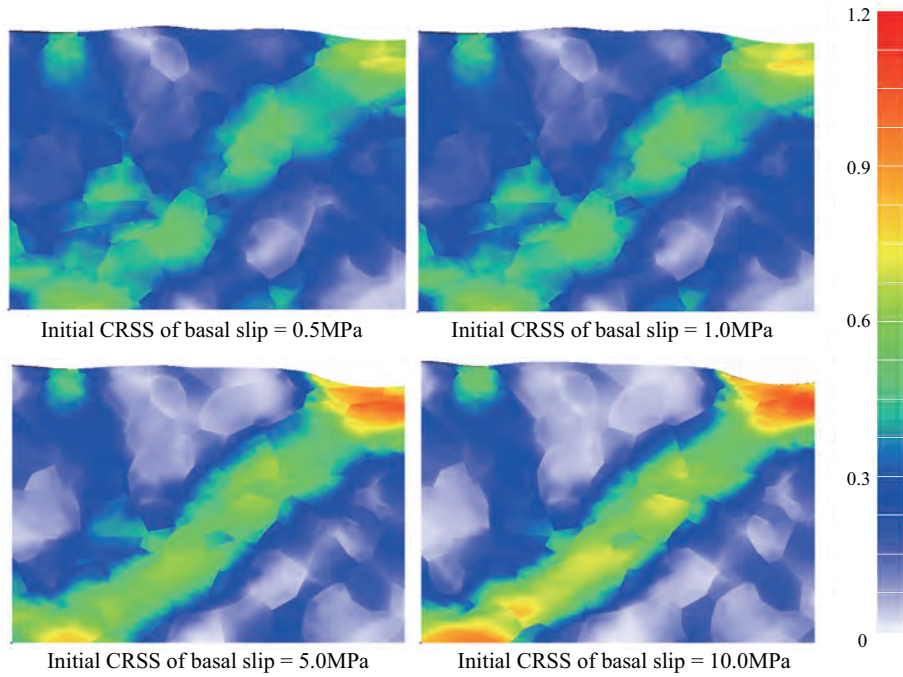


Fig. 6 Total amount of crystallographic slip  $\gamma$

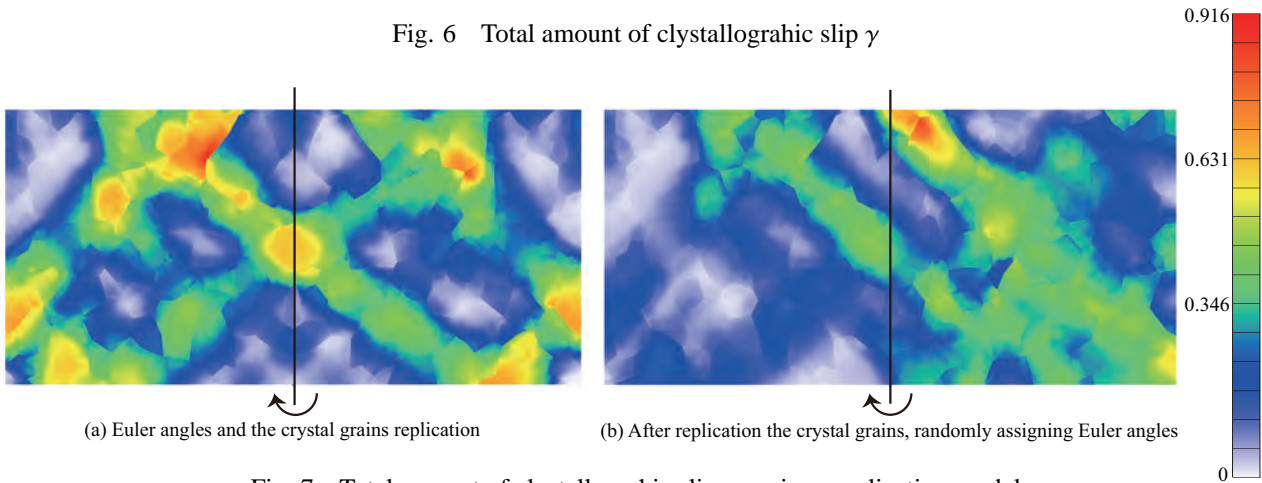


Fig. 7 Total amount of crystallographic slip  $\gamma$  : mirror replication model

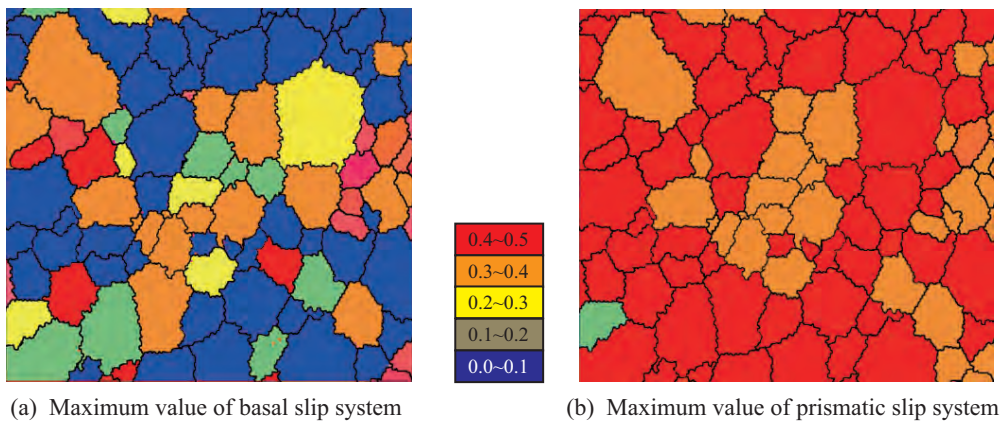


Fig. 8 Schmidt factor of basal and prismatic plane

ん断帯の形成は境界の影響を多少は含むものの，材料固有の挙動と考えられる．



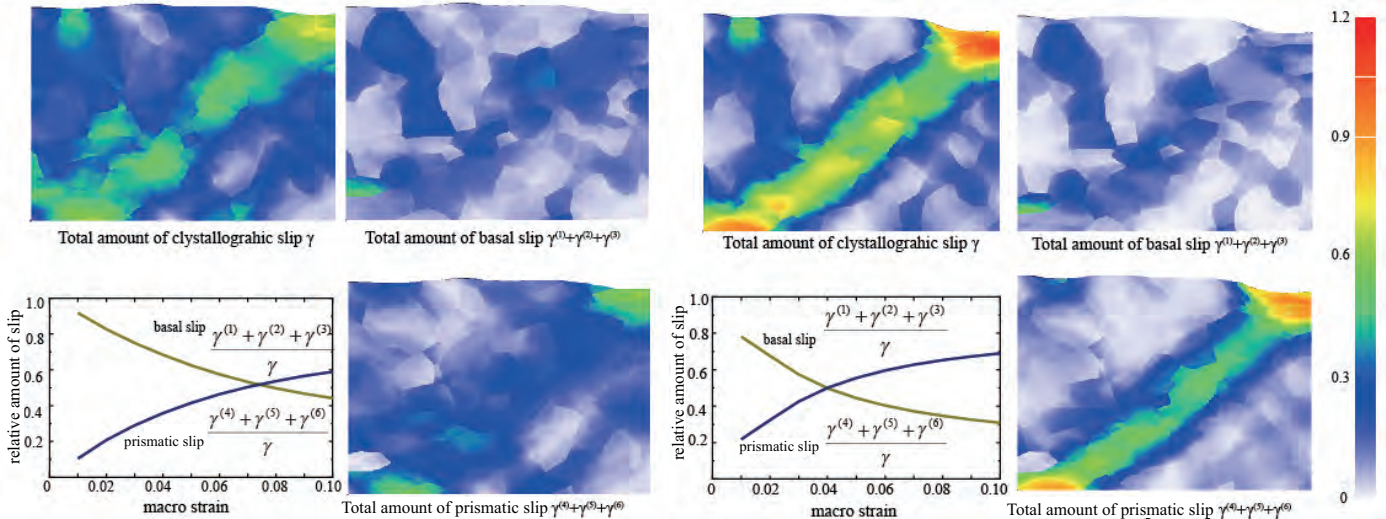


Fig. 9 Relative amount of basal and prismatic slip  
 (initial CRSS of basal slip is 0.5MPa)

Fig. 10 Relative amount of basal and prismatic slip  
 (initial CRSS of basal slip is 10.0MPa)

#### 4.2 底面初期 CRSS の増加に伴う各すべり系のすべり量の変遷

本節では、底面の初期 CRSS が異なる多結晶モデルを用いて、全蓄積すべり量  $\gamma$  と、各すべり系  $\alpha$  のすべり量  $\gamma^{(\alpha)}$  の変遷を調査し、マクロ的な強度を支配するであろうせん断帯の発現要因に関して考察する。そのための評価指標としては、底面すべり系と柱面すべり系の蓄積すべり量を選び、それぞれ  $\gamma^{(1)} + \gamma^{(2)} + \gamma^{(3)}$ 、 $\gamma^{(4)} + \gamma^{(5)} + \gamma^{(6)}$  と定義する。なお、錘面すべりに関してはすべり変形がほとんど起こらなかったため、以下の考察は底面すべりと柱面すべりに着目することとする。

まず、結晶粒の方位情報であるオイラー角より各結晶粒のシュミット因子を算出し、その分布を図 8 に示す。ここでのシュミット因子は、結晶粒ごとに底面のすべり系 3 種のうち、最大の値をとる底面のすべり系を代表的な値として採用しており、柱面についても同様である。

底面の初期 CRSS を 0.5 MPa、10 MPa と設定した多結晶モデルについてマクロひずみ 10% 時における底面と柱面の蓄積すべり量のコンター図を、それぞれ図 9 と図 10 に示す。また、図 9 と図 10 には各すべり系の蓄積すべり量を全蓄積すべり量で除した、相対すべり量の変遷を示すグラフを併記している。これらの図から底面すべりは、図 8(a) にある底面のシュミット因子が高い結晶粒とすべり変形が起きる結晶粒に相関がみられるが、初期 CRSS の低さからシュミット因子が低い（すなわち分解せん断応力値が低い）結晶粒にもすべり変形が生じている。しかし、柱面すべりは図 8(b) のシュミット因子とすべり変形との相関がみられず、底面すべりが起きた結晶粒に集中して柱面のすべり変形が起きる傾向が見られる。この原因としては、第 3 章で示したマグネシウムの硬化特性である潜在硬化の影響による、各結晶粒の柱面すべりにおける CRSS の高低が原因であると考えられる。

具体的には、以下のように説明することができる。変形の初期段階では、CRSS が他のすべり系に比べ相対的に低い底面すべりが卓越し、これによる潜在硬化の影響を強く受ける（すなわち自己硬化による強度増加が相対的に小さい）柱面すべり系を多く含む結晶粒は、柱面すべりの CRSS が低いまま降伏する。柱面すべりはすべり面を 3 種もつため、シュミット因子（図 8(b)) が結晶粒間でさほど大きな差異がなく、CRSS が低いまま降伏した結晶粒に集中してすべり変形が生じる。これにより、変形後期において柱面すべりが卓越するため、図 9 と図 10 中のグラフでは、柱面すべり量がマクロひずみの増加と共に相対的に多くなる。

さらに、図 9 と図 10 中の底面すべりのコンター図から、底面の初期 CRSS を増加させた結果として、底面のすべり変形が局所化する傾向が見られる。これは、底面のシュミット因子が低い結晶粒に底面すべりが起きなくなるためであるが、前述したとおり、柱面すべりは底面すべりが起きた結晶粒に生じやすいという硬化特性を持つため、この局所的な底面すべりに付随して、柱面すべりが局所的に生じる。そのため、局所化した底面すべりの影響で、一部の結晶粒において柱面すべりの降伏が早まり、図 10 のグラフにおいて、柱面すべりの相対的なすべり量が図 9 と比べ変形初期段階から高くなる。

これらの結果より、底面初期 CRSS を増加させるほど変形が局所化するという傾向は、底面すべり量の減少とすべり変形の局所化、柱面すべりの硬化特性によるものであると結論付けられる。加えて、図 10 中の Total amount of basal slip と Total amount of prismatic slip との比較から、底面すべりが生じた結晶粒の一部に柱面すべりが生じ

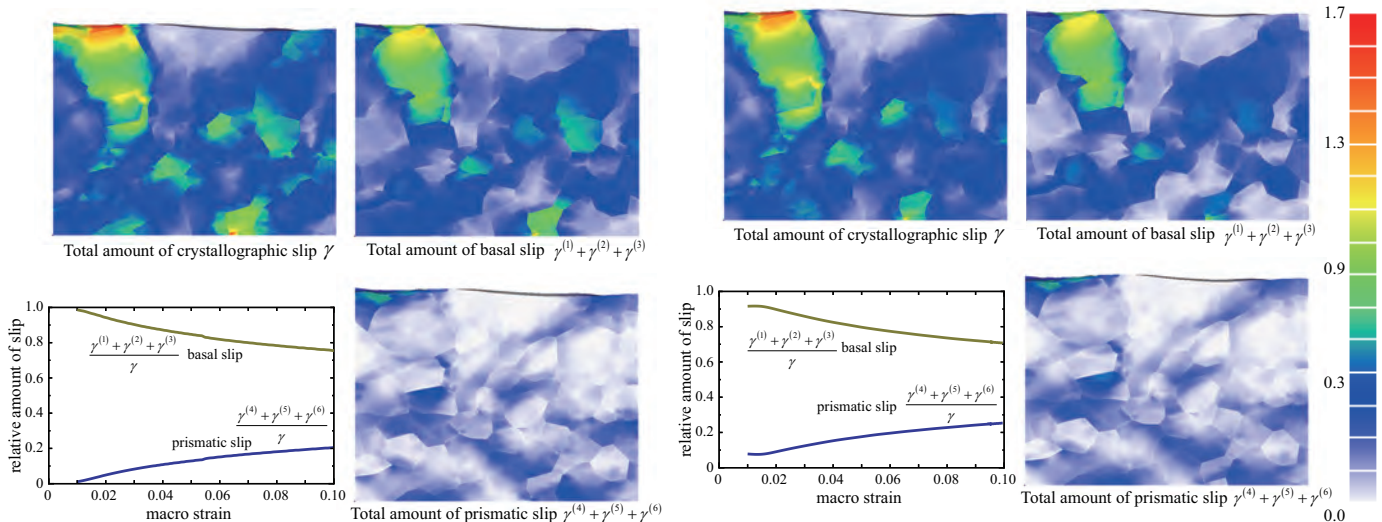


Fig. 11 Relative amount of basal and prismatic slip  
 (initial CRSS of basal slip is 0.5MPa,  $q_{\alpha\beta} = 1.0$ )

Fig. 12 Relative amount of basal and prismatic slip  
 (initial CRSS of basal slip is 10.0MPa,  $q_{\alpha\beta} = 1.0$ )

ていることから、底面すべりが生じた結晶粒を中心に効率的なマクロ変形を生じるように柱面すべりが生じ、せん断帯が形成されると推察される。このことは、3章で例示したように、同じ結晶格子の底面すべりの量が多くなるほど、その潜在硬化の影響を強く受け、同じ全蓄積すべり量に対して自己硬化の寄与分が小さくなるため、結果として柱面すべり系の CRSS が低くなり、柱面すべりによる塑性変形が集中しやすくなるという特徴が露見したものである。

ここで示した解析結果は、採用したパラメータに強く依存したものであり、異なる値を用いると、必然的に異なる結論を得る。特にこのパラメータスタディの場合、結果は潜在硬化比に大きく左右されるはずであるが、実際には六方晶金属の自己・潜在硬化特性については、未だ精緻なデータの取得は困難とされている。したがって以下では、相互作用行列の潜在硬化比を 1.0 以下で計算した上記の結果との比較の対象として、相互作用行列のすべての成分を 1.0 としたときの解析結果も参考データとして加えて考察を行う。

図 11, 図 12 は、 $q_{\alpha\beta} = 1.0$  とした際の相対すべり量の推移と蓄積すべり量の分布を示しているが、表 1 に記載する潜在硬化比を使用した図 9, 図 10 の解析結果とは大きく異なり、塑性変形のほとんどが底面すべりに担われ、柱面すべりはほとんど生じていないことがわかる。また、図 9, 図 10 における各結晶すべりの分布図と比較すると、底面すべり、柱面すべりそれぞれの分布性状も異なっていることが確認できる。加えて、底面初期 CRSS が異なる図 11, 図 12 間では解析結果に顕著な差は見られない。これらの結果が得られた理由は、潜在硬化比を  $q_{\alpha\beta} = 1.0$  としたことにより、要素内でどのすべり系が活動しても柱面すべりの CRSS が頭打ちになるときの応力値が同じになるためである。これにより、柱面すべりの硬化挙動が図 3 中の柱面すべりと底面すべりのすべり量比が 10:0 (自己硬化) のときのような変形性能を有することになり、それ故、図 9, 図 10 の解析結果のように底面すべりが生じた要素に柱面すべりが生じやすくなるような相互作用は発現しない。その結果、各すべり系はシュミット因子が高い要素でのみ活動し、他のすべり系と比べ CRSS が低い底面すべりが支配的となり、柱面すべりが生じにくくなる。この傾向は底面の初期 CRSS を増加させても同様であり、図 11, 図 12 間でひずみ量の分布性状に大きな差異が見られないのはこれによるものである。このように、潜在硬化比の大小は、すべり量分布やすべり系間の相互作用の程度に大きな影響を与えるため、本研究のようなパラメータスタディから得られる知見は、想定した範囲でのみ正当化されることに注意されたい。

### 4.3 マクロ物性の評価

本節では、異なる底面初期 CRSS を与えたモデルに対し、マクロ的な強度について考察する。各初期 CRSS 値を有するモデルから得られたみかけの (マクロ的な) 応力-ひずみ曲線を図 13 に示す。なお、ここでは CRSS が 0.5 MPa のときと 1.0 MPa のときではほぼ同じ応力-ひずみ曲線の結果となっている。縦軸の応力値は公称応力であり、CRSS を増加させると降伏強度が増加することがわかる。これは、底面初期 CRSS の増加により柱面すべりの相対的なすべり量が増加し、マクロスケールでの変形抵抗が増加したためである。また、本解析では CRSS が 10 MPa のときのみに応力のピーク値が得られた。これは柱面のすべり量が多いほど、せん断帯が変形初期に現れやすいと

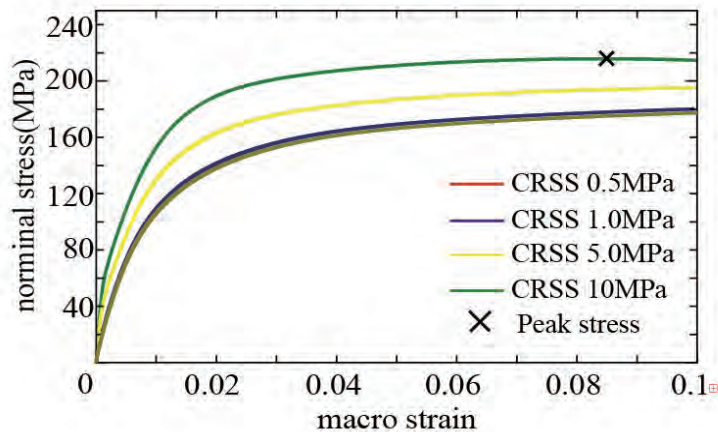


Fig. 13 Macroscopic stress-strain curve

いう前節の考察結果と整合しており、小さいマクロひずみでマクロ的なピーク強度に達することを意味している。これらの結果より、底面初期 CRSS を増加させると柱面すべりが卓越することで、マクロスケールでの降伏強度は増加するものの、個々の結晶粒の降伏や、せん断帯の形成による変形の局所化がマクロ的な変形初期に現れる傾向があり、巨視的材料特性である引張強度や延性は低くなる可能性があるといえる。

## 5. 結 論

本研究では、マグネシウム合金の多結晶体を結晶塑性 FEM を用いて解析し、添加元素の影響による底面初期 CRSS の違いが微視的、および巨視的変形・強度特性に及ぼす影響について調査した。本研究で得られた知見は以下のとおりである。

- 双晶を抑制した、圧延集合組織を有するマグネシウム合金は、変形初期においては底面すべりが卓越するが、底面初期 CRSS を増加させるほど柱面すべりの相対的なすべり量が大きくなる。
- 底面すべりの潜在硬化の影響を強く受ける柱面すべり系を多く含む結晶粒は、柱面の CRSS が低いまま降伏する。柱面すべりは、CRSS が低い結晶粒を選択して変形できるため、底面すべりが生じた結晶粒に柱面すべりが生じやすい。
- 柱面すべりの相対的なすべり量が増加すると、効率的なマクロ変形を生じるように、斜め方向にひずみが集中し、せん断帯の形成につながる。
- 底面初期 CRSS を増加させると、マクロな降伏強度は増加するが、柱面のすべり量が多いほどせん断帯の形成による変形の局所化がマクロ的な変形初期に現れる傾向があり、巨視的引張強度は低くなる可能性がある。結晶塑性 FEM を用いた本研究では、底面初期 CRSS を増加させるほど微視的な変形が局所化し、せん断帯形成が変形初期に現れるという結果が得られた。しかし、CRSS を増加させた結果として柱面すべりの活動が活発になるため、添加元素による底面初期 CRSS の増加が、底面以外のすべり系を活動させることは可能である。今後は、すべり変形と変形双晶の相互作用に着目して、実験データとの比較による検証を重ね、マグネシウムおよびマグネシウム合金の強度発現機構の解明を試みる予定である。

## 謝 辞

本研究成果の一部は、トヨタ自動車の先端技術共同研究プログラムの一環として行ったものです。ここに記して謝意を表します。

## 文 献

- (1) Yoshinaga, H., Horiuchi, R., "Deformation Mechanisms in Magnesium Single Crystals Compressed in the Direction Parallel to Hexagonal Axis", *Transactions of the Japan Institute of Metals*, Vol.4, No.1 (1963), pp.1-8.

- (2) Gehrman, R., Frommert, M.M., Gottstein, G., "Texture effects on plastic deformation of magnesium", *Materials Science and Engineering: A*, Vol.395, Issues 1-2 (2005), pp.338-349.
  - (3) Koike, J., Miyamura, T., "Microscopic mechanisms of plastic deformation in polycrystalline magnesium alloys", *Journal of Japan Institute of Light Metals*, Vol.54, No.11 (2004), pp.460-464.
  - (4) Koike, J., "Enhanced Deformation Mechanisms by Anisotropic Plasticity in Polycrystalline Alloys at Room Temperature", *Metallurgical And Materials Transactions A*, Vol.36 (2005), pp.1689-1696.
  - (5) Agnew, R.S., Duygulu, Ö., "Plastic anisotropy and the role of non-basal slip in magnesium alloy AZ31B", *International Journal of Plasticity*, Vol.21 (2005), pp.1161-1193.
  - (6) Hama, T., Takuda, H., "Crystalline-plasticity finite-element analysis of inelastic behavior during unloading in a magnesium alloy sheet", *International Journal of Plasticity*, Vol.27 (2011), pp.1072-1092.
  - (7) Steglich, D., Jeong, Y., Andar, O.M., Kuwabara, T., "Biaxial deformation behavior of AZ31 magnesium alloy: Crystal-plasticity-based prediction and experimental validation", *International Journal of Solids and Structures*, Vol.49 (2012), pp.3551-3561.
  - (8) Shin, J.E., Jung, A., Choi, H.S., Rollett, D.A., Park, S.S., "A theoretical prediction of twin variants in extruded AZ31 Mg alloys using the microstructure based crystal plasticity finite element method", *Materials Science and Engineering: A*, Vol.538 (2012), pp.190-201.
  - (9) Peirce, D., Asaro, R.J., and Needleman, A., "A analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals", *Acta Metallurgica*, Vol.30, Issue 6 (1982), pp.1087-1119.
  - (10) Peirce, D., Asaro, R.J., and Needleman, A., "Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids", *Acta Metallurgica*, Vol.31, Issue 12 (1983), pp.1951-1976.
  - (11) Rice, J.R., "Inelastic constitutive relations for solids: An internal-variable theory and its application to metal plasticity" *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 19 (1971), pp.433-455.
  - (12) Asaro, J.R., "Crystal plasticity", *Journal of Applied Mechanics*, Vol.50 (1983), pp.921-934.
  - (13) Asaro, J.R., Lubarda, V.A., *Mechanics of Solids and Materials* (2006), Cambridge University Press.
  - (14) Kelly, E., Hosford, W., "Plane-strain compression of magnesium and magnesium alloy crystals", *Transactions of the metallurgical society of AIME*, Vol.242 (1968), pp.5-13.
  - (15) Kelly, E., Hosford, W., "The deformation characteristics of textured magnesium", *Transactions of the metallurgical society of AIME*, Vol.242 (1968) pp.654-661.
  - (16) Graff, S., Brocks, W., and Steglich, D., "Yielding of magnesium: from single crystal to polycrystalline aggregates", *International Journal of Plasticity*, Vol.23, Issue 12 (2007), pp.1957-78.
  - (17) Simmons, G., Wang, H., *Single crystal elastic constants and calculated aggregate properties: a handbook* (1971), MIP Press, Cambridge, MA.
-