

六方晶金属の結晶塑性・変形双晶構成モデル

A new constitutive model for crystal plasticity with deformation twinning

石田 智広¹, 渋谷 慎兵¹, 加藤 準治², 寺田 賢二郎¹, 京谷 孝史¹,
安藤 大輔³, 小池 淳一³

Tomohiro ISHIDA, Shinpei SHIBUTANI, Junji KATO, Kenjiro TERADA, Takashi KYOYA,

Daisuke ANDO and Junichi KOIKE

¹ 東北大学大学院 工学研究科 土木工学専攻 (〒 980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-1302)

² 東北大学 災害科学国際研究所 (〒 980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-1302)

³ 東北大学大学院 工学研究科 知能デバイス材料学専攻 (〒 980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-1016)

A thermodynamics-based constitutive model, which accounts for both crystallographic slip and deformation twinning, is developed for a single crystal of hcp metals within the framework of finite crystal plasticity. While the volume fractions of stress-free twin deformations are introduced as internal variables, the free-energy involves the bulk energy of separate phases and the surface energy at twin interfaces, which are introduced as functions of the internal variables, in addition to the standard hardening-related energy in crystal plasticity framework. After the formulation is described in detail, a series of numerical examples is presented to verify the performance of the proposed model in predicting the deformation twinning, the successive deformation process and the twinning-induced stress responses. The results are studied with reference to the theoretical consequences and the experimental results reported in the literature.

Key Words : Deformation Twinning, Crystal Plasticity, HCP Metals, FEM, Thermodynamics, Lattice-Reorientation

1. 緒言

マグネシウム合金に代表される六方晶金属の非弾性変形機構は、結晶格子のすべりに起因する塑性変形に加えて、変形双晶による無応力せん断変形と格子再配向により特徴づけられる⁽¹⁾。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も多いが、これら二つ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・延性などの材料特性に及ぼす影響については未だ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、これに基づくマルチスケール解析に対する期待も大きい。

マグネシウム合金を対象とした結晶粒レベルの数値解析的研究の多くは、連続体力学の枠組みで単結晶のすべり変形をモデル化した結晶塑性構成則^(2,3)を拡張したモデルを提示し、有限要素法(以下、FEM)に実装した結晶塑性FEM^(4,5)の適用が多い。この結晶塑性モデルの拡張に際して、各物質点の挙動として考慮すべきことは次の通りである。

- 変形双晶の形成条件
- 変形双晶における無応力せん断変形の導入
- 変形双晶における格子再配向

既往の研究^(6,7,8,9,10)の多くは、双晶変形を結晶すべり変形の一つとして導入してSchmidt因子を変形双晶の形成を判定するための指標としており、無応力せん断変形も上限値のある塑性ひずみの一種として評価されている。具体的には、双晶面のSchmidtテンソルから分解せん断応力を算出し、設定した双晶の臨界分解せん断応力(以下、CRSS)を超えた時点で“擬似的塑性変形”が生じるような“拡張”結晶塑性FEM解析を行っている。一方、格子再配向に際しては、実際に生じうるせん断変形量に対する“擬似的塑性変形”の比率を擬似的体積分率と定義して、その値がランダムに設定された閾値を超えた時点でその応力評価点における結晶格子を回転させている。これらは簡易的なモデルであるが、多結晶体の有限要素モデルに適用したときの数値解析により、集合組織の形成やマクロ的な応力-ひずみ曲線など、実験結果をある程度良く再現できることが報告されている。

結晶粒を連続体とみなして、結晶すべりや原子の再配列といった微視的挙動を構成則で表現するには、何らかの近似、理想化を行う必要がある。しかし、原子の再配列は双晶面上ではなく、空間的な広がりを持った領域で生じるので、前述の先行研究のようにすべり挙動と同様のCRSSを双晶形成条件に用いることは変形双晶の物理とは整合しない。また、格

* 原稿受付 2012 年 06 月 13 日, 改訂年月日 2012 年 08 月 20 日, 発行年月日 2012 年 09 月 14 日, ©2012 年 日本計算工学会。

Manuscript received, June 13, 2012; final revision, August 20, 2012; published, September 14, 2012. Copyright ©2012 by the Japan Society for Computational Engineering and Science.

子再配向を連続体力学の枠組みでモデル化するには、物質点に生成された変形双晶やその存在確率の蓄積量に閾値を設けて制御するしかないが、対応する内部変数は変形双晶の形成条件と整合していることが望ましい。

そこで本研究では、これらの不整合を払拭する、結晶塑性・変形双晶の構成モデルを構築する。具体的には、変形勾配の弾塑性乗算分解に対して変形双晶の無応力ひずみに対応する変形勾配（双晶変形勾配）を乗算形式で導入し、内部変数を用いる熱力学に基づく古典的定式化を採用する。この内部変数には、各変形双晶パターンが存在率（すなわち、体積分率）を選び、双晶変形勾配はこの連続関数として表現する。また、自由エネルギーには、通常の弾性および結晶すべりのひずみ硬化に関する項に加えて、母相および変形双晶相の化学的エネルギーと双晶界面エネルギーをこの内部変数の関数として導入する。そして、この内部変数（変形双晶相の体積分率）がある閾値を超えた際に格子再配向が行われるものと仮定する。

なお、変形双晶の発展方程式の導出に際しては、Idesmanら⁽¹¹⁾が形状記憶合金のマルテンサイト変態の数理モデル化に際して示した定式化を参考にした。特に、変形双晶の体積分率を内部変数として導入し、Helmholtz自由エネルギーに対応する項を加えることで変形双晶の形成条件を定義した点は、Idesmanらの定式化⁽¹¹⁾を直接応用したものである。しかし、このような変形双晶に対する新しいモデル化により、変形双晶を擬似的なすべり面における分解せん断応力によるのではなく、熱力学的な駆動力による形成判定が可能となる。また、双晶変形勾配の定義式において、各双晶種別の無応力ひずみパターンは材料パラメータであり、格子再配向の判定に必要な体積分率は各パターンの係数であるので、変形双晶の構成モデルで考慮すべき前述の3点が同一の内部変数で関連づけられることとなる。加えて、提案するモデルにおける変形勾配の乗算分解と自由エネルギーの定義において、結晶すべりと変形双晶が関連づけられるため、それらの相互作用を適切に捉えることができるものと期待される。

以下では、提案する結晶塑性・変形双晶の構成モデルを3節に分けて定式化した後、第5節における簡単な数値解析によりその検証を行う。

2. 双晶変形・結晶塑性構成モデル

本章では、本研究で提案する結晶すべりを伴う変形双晶構成モデルを有限変形理論および最大散逸の原理に基づいて定式化する。まず、有限変形理論の枠組みから記述する本モデルにおける運動学および変形について説明する。続いて本モデルで使用する弾性構成モデルを説明した後、双晶変形構成モデル・結晶すべり構成モデルの運動学を定義し、最大散逸の原理に基づいて発展方程式を導出する。

2.1 変形勾配の乗算分解：弾性・塑性・変形双晶 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は変形勾配 $F := \partial\varphi/\partial X$ を用いる。ここで、 $\varphi(X, t)$ は X を物質点の初期位置としたときに対

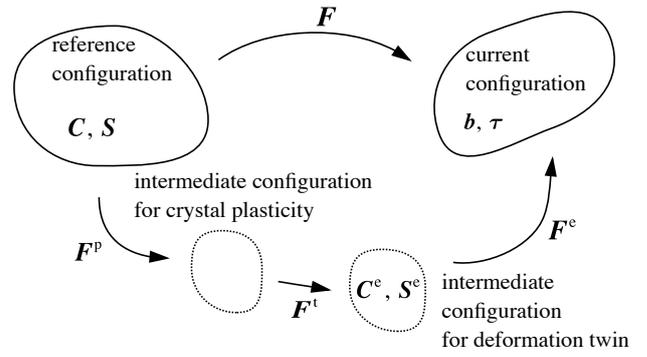


Fig. 1 Multiplicative decomposition of deformation gradient: plastic deformation, twinning and elastic deformation

応する現配置の位置ベクトル x を表す運動である。そして、全体の変形に対する弾性・変態・結晶すべりの寄与分は次に示すようにそれぞれの変形勾配の積で記述する。

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

ここで、 F^e , F^t , F^p は、それぞれ弾性変形、双晶変形、塑性変形に関する変形勾配である。なお、 F^t と F^p の順序には任意性があるとされるが、本研究では既往の多くの研究と同様に、双晶変形は無応力変形として弾性変形に付随するものとした⁽¹²⁾。

式(1)の乗算分解により、変形と応力は基準配置・中間配置・現配置を参照して定義することができる。ここで、基準配置は運動前の状態、現配置は運動後の状態を表す配置であり、中間配置は弾性変形を取り除いた状態をあらわす配置である。**Fig. 1**で各配置の関係を模式化したものである。基準配置を参照する第2 Piola-Kirchhoff 応力、中間配置を参照する第2 Piola-Kirchhoff 応力、現配置を参照した Kirchhoff 応力は、Cauchy 応力 σ を用いてそれぞれ次式で定義される。

$$S := F^{-1} J \sigma F^{-T} \quad (2)$$

$$S^e := F^{e-1} J^e \sigma F^{e-T} \quad (3)$$

$$\tau := J \sigma \quad (4)$$

ここで、 $J := \det[F]$, $J^e := \det[F^e]$ と定義した。また、中間配置を参照する右 Cauchy-Green 変形テンソルも

$$C^e := F^{eT} F^e \quad (5)$$

で定義される。なお、基準配置を参照する右 Cauchy-Green 変形テンソル $C := F^T F$ と現配置を参照する左 Cauchy-Green 変形テンソル $b := F F^T$ も同様に定義できるが、本研究で提案する構成則では陽に用いない。

式(1)を考慮すると、速度勾配は次式のように展開される。

$$l := \dot{F} F^{-1} = l^e + l^t + l^p \quad (6)$$

ここで、 \mathbf{F}^e , \mathbf{I}^e , \mathbf{P}^e は、それぞれ弾性、双晶変形、結晶すべりによる変形速度勾配であり、

$$\begin{cases} \mathbf{L}^e := \dot{\mathbf{F}}^e \mathbf{F}^{e-1} \\ \mathbf{I}^e := \mathbf{F}^e \dot{\mathbf{F}}^e \mathbf{F}^{e-1} \\ \mathbf{P}^e := \mathbf{F}^e \mathbf{F}^t \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \mathbf{F}^{t-1} \mathbf{F}^{e-1} \end{cases} \quad (7)$$

と定義した。さらに、2階のテンソル \bullet の対称・反対称成分を $\text{sym}[\bullet]$, $\text{skw}[\bullet]$ と表すことにすると、変形速度テンソル \mathbf{d} およびスピントテンソル \mathbf{w} 、およびそれらの弾性成分・双晶変形成分・塑性成分は、それぞれ以下のように定義される。

$$\begin{aligned} \mathbf{d} &:= \text{sym}[\mathbf{L}] \\ &= \mathbf{d}^e + \mathbf{d}^t + \mathbf{d}^p := \text{sym}[\mathbf{L}^e] + \text{sym}[\mathbf{I}^e] + \text{sym}[\mathbf{P}^e] \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{w} &:= \text{skw}[\mathbf{L}] \\ &= \mathbf{w}^e + \mathbf{w}^t + \mathbf{w}^p := \text{skw}[\mathbf{L}^e] + \text{skw}[\mathbf{I}^e] + \text{skw}[\mathbf{P}^e] \end{aligned} \quad (9)$$

2.2 結晶塑性における流れ則 結晶塑性モデル⁽²⁾は、単結晶について結晶学的に決まるすべり系（すべり面・すべり方向）に作用する分解せん断応力が、その系の降伏強度、すなわち CRSS に達するときその方向へのすべり変形を生ずるように規定した塑性構成則の一つである。多少の議論の余地が残されているものの、ある程度確立された構成則理論であるため、本研究では文献^(3,4,5)を参照して本項で示す定式化を採用する。

いま、対象とする材料のすべり系の数が n 個とし、あるすべり系 α の基準配置における初期の単位すべり方向ベクトルを $\mathbf{s}_0^{(\alpha)}$ 、すべり面法線ベクトルを $\mathbf{m}_0^{(\alpha)}$ 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、変形後もこれらのベクトル ($\mathbf{s}^{(\alpha)}$, $\mathbf{m}^{(\alpha)}$) が互いに直交することを考慮すると次の関係を得る。

$$\mathbf{s}^{(\alpha)} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^t \mathbf{s}_0^{(\alpha)}, \quad \mathbf{m}^{(\alpha)} = \mathbf{m}_0^{(\alpha)} \mathbf{F}^{t-1} \mathbf{F}^{e-1} \quad (10)$$

また、ある応力状態 $\boldsymbol{\sigma}$ が与えられたときのすべり系 α に作用する分解せん断応力は

$$\boldsymbol{\tau}^{(\alpha)} = (\mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)}) : \mathbf{J}\boldsymbol{\sigma} \quad (11)$$

となる。このとき、すべり系 α のすべり速度を $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ とし、塑性仕事率に関して次の関係を要請する。

$$\mathbf{J}\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{P}^e = \sum_{\alpha=1}^n \boldsymbol{\tau}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} = \sum_{\alpha=1}^n \mathbf{J}\boldsymbol{\sigma} : (\mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (12)$$

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が、結晶塑性モデルにおける流れ則

$$\mathbf{P}^e = \sum_{\alpha=1}^n (\mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (13)$$

により規定されることになる。さらに、式(9)より結晶すべりの変形速度テンソルとスピントテンソルは、それぞれ次式のように表される。

$$\mathbf{d}^p = \sum_{\alpha=1}^n \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}, \quad \mathbf{w}^p = \sum_{\alpha=1}^n \boldsymbol{\omega}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (14)$$

ここで $\boldsymbol{\mu}^{(\alpha)}$, $\boldsymbol{\omega}^{(\alpha)}$ は Schmidt テンソル ($\mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)}$) の対称・反対称成分であり、それぞれ次式で定義した。

$$\boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} := \text{sym}[\mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)}], \quad \boldsymbol{\omega}^{(\alpha)} := \text{skw}[\mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)}] \quad (15)$$

2.3 双晶変形の流れ則 既往の研究^(6,7,8,9,10)では、双晶変形をすべり変形の一形態としてモデル化して変形双晶に対応する擬似すべり系を設定している。これに対して研究では、Idesman ら⁽¹¹⁾がマルテンサイト変態のモデル化に採用した熱力学に基づく定式化に倣って、分解せん断応力とは独立な変形双晶モデルを提案する。

まず、初期の結晶構造を母相、複数種類存在する変形双晶系の各々をバリエーションと呼び、母相からバリエーションへ、または一つのバリエーションから別のバリエーションへの変化（2重双晶）を変態（transformation）と呼ぶことにする。そして、結晶粒を連続体とみなしたときの物質点において母相 \leftrightarrow バリエーション間、およびバリエーション \leftrightarrow バリエーション間の相変態が生じるものとして、その時間発展を記述するために、各相 p ($p = 0, 1, \dots, m$) の体積分率 $c^{(p)}(\mathbf{x}, t)$ を時間と空間の関数として導入し、変形双晶の変形勾配を次式で表す。

$$\mathbf{F}^t := \sum_{p=0}^m \hat{\mathbf{F}}^{t(p)} c^{(p)} \quad (16)$$

ここで、 $p = 0$ が母相に対応しており、 $1 \sim m$ は異なる変形双晶系（バリエーション）に対応している。一つの物質点に対して合計 $m + 1$ 個の相が存在することになるが、体積分率の総和は 1 であるため、独立な変数は m 個である。すなわち、双晶相の体積分率の総和を

$$c := \sum_{p=1}^m c^{(p)} \quad (17)$$

とおくと、母相の体積分率は次式から求められる。

$$c^{(0)} = 1 - c \quad (18)$$

また、 $\hat{\mathbf{F}}^{t(p)}$ は p 番目の相へ完全に変態した際に生じる変形勾配であり、本研究では「双晶形態テンソル」と呼ぶことにする。この双晶形態テンソルの成分は、本研究で対象とする六方晶金属の格子定数から決まる Bain 格子変形と格子不変変形から理論的に算出される量であり、材料パラメータとして与えられる。なお、その具体的な値は次節で与えることにする。

以上より、式(7)の第2式に式(16), (17), (18)を代入し、母相の双晶形態テンソルが $\hat{\mathbf{F}}^{t(0)} = \mathbf{1}$ （2階の単位テンソル）であることを考慮すると、変態の速度勾配は次式のように表される。

$$\mathbf{I}^e = \mathbf{F}^e \dot{\mathbf{F}}^t \mathbf{F}^{t-1} \mathbf{F}^{e-1} = \sum_{p=1}^m \boldsymbol{\chi}^{(p)} \dot{c}^{(p)} \quad (19)$$

ここで、

$$\boldsymbol{\chi}^{(p)} := \mathbf{F}^e (\hat{\mathbf{F}}^{t(p)} - \mathbf{1}) \mathbf{F}^{t-1} \mathbf{F}^{e-1} \quad (20)$$

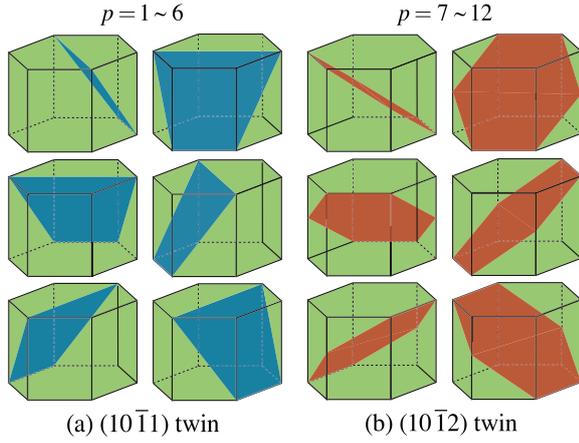


Fig. 2 Twin surfaces in hcp crystal of Mg

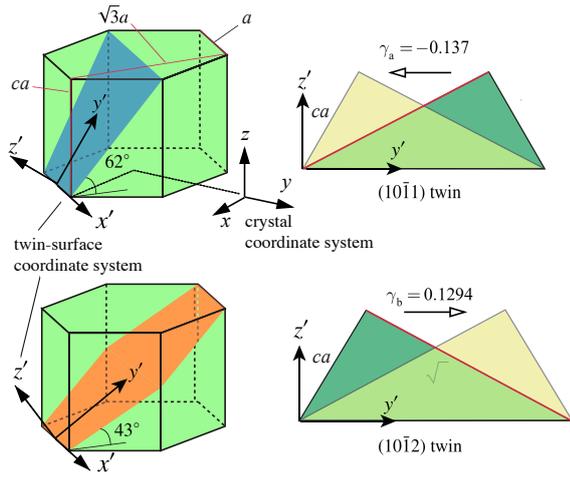


Fig. 3 Shear deformation along twin surface

とおいた。これを式 (8) と (9) に代入すると、変態 (双晶変形) の流れ則とも呼べる発展方程式として、各相の体積分率の速度 $\dot{c}^{(p)}$ から変形速度とスピテンソルを規定する関係式が次のように得られる。

$$\mathbf{d}^t = \sum_{p=1}^m \chi_{\text{sym}}^{(p)} \dot{c}^{(p)}, \quad \mathbf{w}^t = \sum_{p=1}^m \chi_{\text{skw}}^{(p)} \dot{c}^{(p)} \quad (21)$$

ここで、

$$\chi_{\text{sym}}^{(p)} := \text{sym}[\chi^{(p)}], \quad \chi_{\text{skw}}^{(p)} := \text{skw}[\chi^{(p)}] \quad (22)$$

と定義した。

このように、各相の体積分率をオーダーパラメータとして導入したことにより、双晶変形という急速度でかつ空間的に不連続な形態変化を連続変数で近似できることになり、数値解析的にも都合がよい。

3. 双晶形態テンソルと格子再配向

本節では、本研究で提案する双晶変形構成則における材料パラメータの一つである、各バリエントの双晶形態テンソル

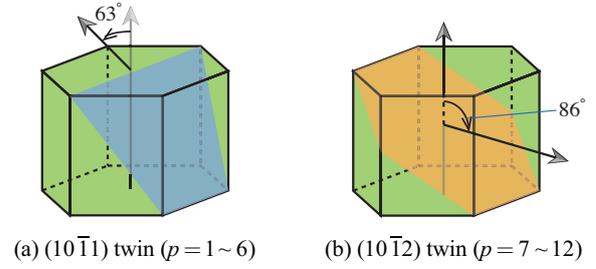


Fig. 4 Crystal reorientation due to twinning

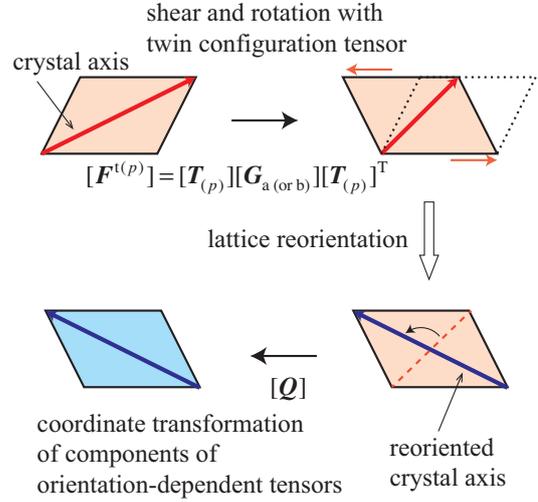


Fig. 5 Implementation of lattice reorientation with shear deformation

$\hat{F}^{(p)}$ の成分を算出するとともに、双晶変形による結晶方位の変換方法を提示する。

3.1 双晶形態テンソル $\hat{F}^{(p)}$ の成分の算出 本研究では、六方晶金属としてマグネシウムを想定し、その双晶系は多く存在すると言われているが、実験観察⁽¹³⁾において発現しやすいとされる $(10\bar{1}1)$ 双晶と $(10\bar{1}2)$ 双晶のみを考慮する。この場合、Fig. 2 に示すように、それぞれの双晶系について双晶面は 6 種類が存在する。したがって、式 (16) において $m = 12$ であり、各々について双晶形態テンソルの成分 $\hat{F}^{(p)}$ ($p = 1, \dots, 12$) が既定される。これらは、すべて事前にデータとして与えられる材料パラメータであり、せん断変形および回転成分を含む変形勾配として双晶種類および双晶面ごとに幾何学的に算定しうる。実際、マグネシウムのような六方晶金属の双晶相は双晶面に境に鏡対称の関係にあるため、双晶面に沿って Fig. 3 に示すような双晶座標系を設定すると、 $(10\bar{1}1)$ 双晶と $(10\bar{1}2)$ 双晶のせん断ひずみ量は、幾何学的な考察によりそれぞれ $\gamma_a = -0.137$ と $\gamma_b = 0.1294$ となる。したがって、それぞれに対応する変形勾配の双晶座標系にお

Table. 1 Twin configuration tensors

(10 $\bar{1}$ 1) 双晶		
$\hat{F}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.935 & 0.069 \\ 0 & -0.060 & 1.065 \end{pmatrix}$	$\hat{F}^{(2)} = \begin{pmatrix} 0.952 & 0.028 & -0.060 \\ 0.028 & 0.984 & 0.035 \\ 0.052 & -0.030 & 1.065 \end{pmatrix}$	$\hat{F}^{(3)} = \begin{pmatrix} 0.952 & -0.028 & -0.060 \\ -0.028 & 0.984 & -0.035 \\ 0.052 & 0.030 & 1.065 \end{pmatrix}$
$\hat{F}^{(4)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.935 & -0.069 \\ 0 & 0.060 & 1.065 \end{pmatrix}$	$\hat{F}^{(5)} = \begin{pmatrix} 0.952 & 0.028 & 0.060 \\ 0.028 & 0.984 & -0.035 \\ -0.052 & 0.030 & 1.065 \end{pmatrix}$	$\hat{F}^{(6)} = \begin{pmatrix} 0.952 & -0.028 & 0.060 \\ -0.028 & 0.984 & 0.035 \\ -0.052 & -0.030 & 1.065 \end{pmatrix}$
(10 $\bar{1}$ 2) 双晶		
$\hat{F}^{(7)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1.057 & -0.030 \\ 0 & 0.107 & 0.943 \end{pmatrix}$	$\hat{F}^{(8)} = \begin{pmatrix} 1.042 & -0.025 & 0.026 \\ -0.025 & 1.014 & -0.015 \\ -0.092 & 0.053 & 0.943 \end{pmatrix}$	$\hat{F}^{(9)} = \begin{pmatrix} 1.042 & 0.025 & 0.026 \\ 0.025 & 1.014 & 0.015 \\ -0.092 & -0.053 & 0.943 \end{pmatrix}$
$\hat{F}^{(10)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1.057 & 0.030 \\ 0 & -0.107 & 0.943 \end{pmatrix}$	$\hat{F}^{(11)} = \begin{pmatrix} 1.042 & -0.025 & -0.026 \\ -0.025 & 1.014 & 0.015 \\ 0.092 & -0.053 & 0.943 \end{pmatrix}$	$\hat{F}^{(12)} = \begin{pmatrix} 1.042 & 0.025 & -0.026 \\ 0.025 & 1.014 & -0.015 \\ 0.092 & 0.053 & 0.943 \end{pmatrix}$

ける成分は,

$$[\hat{G}_a] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -0.137 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad [\hat{G}_b] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0.1294 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (23)$$

となる. 双晶座標系と母相の結晶座標系との幾何学的関係は自明であり, 各双晶面に対応する座標変換行列 $[\mathbf{T}_{(p)}]$ を求めれば, 各双晶種類および双晶面 p について変換式 $[\hat{F}^{(p)}] = [\mathbf{T}_{(p)}][\hat{G}_a \text{ (or } b)][\mathbf{T}_{(p)}]^T$ を適用して双晶形態テンソルの成分をすべて算定することができる. (10 $\bar{1}$ 1) 双晶 ($p = 1 \sim 6$) と (10 $\bar{1}$ 2) 双晶 ($p = 7 \sim 12$) について, 具体的に計算して求めた双晶形態テンソルの成分を Table. 1 に与える.

3.2 双晶変形による格子再配向 双晶変形に伴う変形, および格子再配向についての模式図を Fig. 5 に示す. 図中の上段は, 各双晶面に関する $\hat{F}^{(p)}$ による変形がせん断変形として変形勾配 (双晶形態テンソル) に反映されることを示しており, 対応する成分の算出方法は前項の通りである. また, この変形と同時に, 双晶変形に伴う原子の再配置により結晶方位が変換され, 結晶格子は擬似的に回転する. このとき, 対応するすべり面・方向ベクトルや異方性の軸なども回転するので, 対応する Schmidt 因子や弾性係数などの異方性テンソルの成分を座標変換する必要がある.

しかし, 本研究では, 結晶粒内の各物質点に変形双晶系の体積分率を変数として持つようなモデル化をしているので, そこでの双晶座標系は一意に定められない場合があり得る. したがって, この格子再配向は, その物質点での双晶系の体積分率 $c^{(p)}$ の値が設定した閾値を超えたときに, 対応する双晶座標に応じて成分を変換することにする. すなわち, 複数の双晶系が存在する物質点であっても, 最大の体積分率を有する双晶系の双晶座標系を参照して, Fig. 5 の下段に示すような結晶方位の変換規則にしたがって座標変換行列 $[\mathbf{Q}]$ を設定し, 弾性係数テンソル・すべり系・双晶系ベクトルなどの

成分も変換する.

格子再配向の前後で, すべり系は物理的に全く別の系になることに注意が必要である. すなわち, 本研究で採用している結晶塑性理論の枠組みでは, 転位の蓄積に起因する各すべり系の硬化特性 (あるいは変形抵抗) を蓄積塑性ひずみの関数としてモデル化しているが, 変形双晶の有するすべり系と母相のすべり系とは幾何学的な関係しか与えられないため, 双晶前後でこれらの物理量を関連づけることができない. 実際には, 双晶前後でのすべり系の強度などの物理量を何らかの形で継承する, あるいは破棄する (初期化する) ための論理が必要であるが, 本研究ではその理論構築には至っていないため, 簡単のために格子再配向の前後ですべり系の物理量を引き継ぐものとした.

4. すべり速度および双晶変形速度

本節では, 結晶すべりおよび双晶変形の発展方程式について, 熱力学第 2 法則から導かれる散逸不等式, すなわちエネルギー散逸の最大原理を満たすようにすべり速度および双晶変形速度の関数形を規定する.

4.1 自由エネルギー n 個のすべり系と m 種類の変形双晶パターンを有する六方晶金属について, Helmholtz の自由エネルギー関数を以下のように定義する.

$$\Psi(\mathbf{C}^e, c^{(p)}, \theta, \gamma^{(\alpha)}) := \Psi^e(\mathbf{C}^e, c^{(p)}) + \Psi^h(\gamma^{(\alpha)}, c^{(p)}) + \sum_{p=0}^m \Psi^{\theta(p)}(\theta) c^{(p)} + \Psi^{\text{in}}(c^{(p)}) \quad (24)$$

ここで, Ψ^e は弾性ひずみエネルギー, Ψ^h は結晶すべりの硬化に関する自由エネルギー, $\Psi^{\theta(p)}$ は p 番目の相の化学的自由エネルギー, Ψ^{in} は相間の界面エネルギーであり, $\Psi^{\theta(p)}$ のみが温度 θ に依存するものと仮定した. また, Ψ^e と Ψ^h の $c^{(p)}$ への依存性は, 後述するように双晶に付随する結晶格子の回転による異方性弾性係数とすべり系の変化を反映している.

化学エネルギーについては、すべての双晶パターンで同一の値（関数形）を取るものと仮定する。そして、母相と変形双晶系（バリエーション）の化学的自由エネルギーに、それぞれ個別の関数 $\Psi_M^\theta(\theta)$ と $\Psi_T^\theta(\theta)$ を導入して次式のように表す。

$$\sum_{p=1}^m \Psi^{\theta(p)}(\theta)c^{(p)} := c\Psi_T^\theta(\theta) + (1-c)\Psi_M^\theta(\theta) \quad (25)$$

また、界面エネルギーは2つの相が混在するときの両相界面で生じるエネルギーであり、全自由エネルギーに対する界面エネルギーの影響度 A を材料パラメータとし、双晶相体積率 c を変数とする次の関数で定義する。

$$\Psi^{\text{in}}(c) := Ac(1-c) \quad (26)$$

ここで、異なる双晶間に生じる界面エネルギーは無視できるほど小さいものと仮定して、母相と双晶相間の界面エネルギーだけを考慮している。

ここで設定した式 (25), (26) を式 (24) に代入することで、全自由エネルギーのより具体的な関数形は次式ようになる。

$$\Psi = \Psi^e(\mathbf{C}^e, c^{(p)}) + \Psi^h(\gamma^{(\alpha)}) + c\Psi_T^\theta(\theta) + (1-c)\Psi_M^\theta(\theta) + Ac(1-c) \quad (27)$$

4.2 エネルギー散逸不等式 熱力学第2法則から導出される Clausius-Duhem 不等式は、エネルギーの散逸速度 \mathcal{D} を次のように規定するものである。

$$\mathcal{D} := \frac{1}{2}\mathbf{S} : \dot{\mathbf{C}} - \dot{\Psi} - s\dot{\theta} \geq 0 \quad (28)$$

ここで、 s はエントロピーである。式 (27) の時間微分に式 (5) を代入して整理すると散逸不等式 (28) は次のようになる。

$$\begin{aligned} \mathcal{D} = & \frac{1}{2} \left\{ \mathbf{S} - 2\mathbf{F}^{\text{p-1}} \mathbf{F}^{\text{t-1}} \frac{\partial \Psi^e}{\partial \mathbf{C}^e} \mathbf{F}^{\text{t-T}} \mathbf{F}^{\text{p-T}} \right\} : \dot{\mathbf{C}} - \sum_{\alpha=1}^n \frac{\partial \Psi^h}{\partial \gamma^{(\alpha)}} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \\ & + \left\{ -s - c \frac{\partial \Psi_T^\theta}{\partial \theta} - (1-c) \frac{\partial \Psi_M^\theta}{\partial \theta} \right\} : \dot{\theta} \\ & - \left\{ 2\mathbf{F}^{\text{tT}} \mathbf{F}^{\text{eT}} \mathbf{F}^e \frac{\partial \Psi^e}{\partial \mathbf{C}^e} \right\} : \dot{\mathbf{F}}^{\text{t-1}} \\ & - \left\{ 2\mathbf{F}^{\text{pT}} \mathbf{F}^{\text{tT}} \mathbf{F}^{\text{eT}} \mathbf{F}^e \frac{\partial \Psi^e}{\partial \mathbf{C}^e} \mathbf{F}^{\text{t-T}} \right\} : \dot{\mathbf{F}}^{\text{p-1}} \\ & - \sum_{p=1}^m \left\{ \Psi_T^\theta - \Psi_M^\theta + A(1-2c) \right\} \dot{c}^{(p)} \geq 0 \end{aligned} \quad (29)$$

となる。ここで、変態および塑性変形が生じない状態で現象は可逆的となるので、任意の温度・変形状態において等式が成り立ち、次式のような第2Piola-Kirchhoff 応力とエントロピーに関する構成方程式が得られる。

$$\begin{cases} \mathbf{S} = \mathbf{F}^{\text{p-1}} \mathbf{F}^{\text{t-1}} 2 \frac{\partial \Psi^e}{\partial \mathbf{C}^e} \mathbf{F}^{\text{t-T}} \mathbf{F}^{\text{p-T}} \\ s = -c \frac{\partial \Psi_M^\theta}{\partial \theta} - (1-c) \frac{\partial \Psi_T^\theta}{\partial \theta} \end{cases} \quad (30)$$

この第1式に式 (1), (2) を代入し、 $\frac{\partial \Psi^e}{\partial \mathbf{C}^e}$ について整理すると次式が得られる。

$$\frac{\partial \Psi^e}{\partial \mathbf{C}^e} = \frac{1}{2} \mathbf{F}^{\text{e-1}} \mathbf{J} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{F}^{\text{e-T}} \quad (31)$$

これを散逸不等式 (29) に代入して式 (7) の第2,3式を参照することで最終的には次の不等式が塑性変形と双晶変形の発展式に関する制約条件となる。

$$\begin{aligned} \mathcal{D} = & \mathbf{J} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{F}^{\text{p-1}} - \sum_{\alpha=1}^n \frac{\partial \Psi^h}{\partial \gamma^{(\alpha)}} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \\ & + \mathbf{J} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{F}^{\text{t-1}} - \sum_{p=1}^m \left\{ \Psi_T^\theta - \Psi_M^\theta + A(1-2c) \right\} \dot{c}^{(p)} \geq 0 \end{aligned} \quad (32)$$

4.3 すべり速度と双晶変形速度

ここでは、前節で導出した散逸不等式から結晶すべりと双晶変形の速度の関数形を規定する。式 (32) が成り立つための十分条件は、変態の寄与分 \mathcal{D}^t と結晶すべりの寄与分 \mathcal{D}^p がそれぞれ次の不等式を満足することである。

$$\mathcal{D}^p := \mathbf{J} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{F}^{\text{p-1}} - \sum_{\alpha=1}^n \frac{\partial \Psi^h}{\partial \gamma^{(\alpha)}} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \geq 0 \quad (33)$$

$$\mathcal{D}^t := \mathbf{J} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{F}^{\text{t-1}} - \sum_{p=1}^m \left[\Psi_M^\theta - \Psi_T^\theta + A(1-2c) \right] \dot{c}^{(p)} \geq 0 \quad (34)$$

本研究では、双晶変形と結晶すべり変形は影響を及ぼし合うものの、これらによるエネルギー散逸に関しては互いに独立な現象であると仮定して、必要条件は考えないこととする。

(1) 結晶すべり速度

式 (33) に関連した結晶すべり構成モデルの発展式は、これまでに幾つかのモデルが提案されているが、本研究では Asaro ら⁽²⁾ が用いた次式のような指数関数形の粘塑性近似式を採用することにする。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} := \dot{\alpha} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{n^\nu} \text{sign} \left(\frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right) \quad (35)$$

ここで、 $g^{(\alpha)}$ はすべり系 α のすべり抵抗力を表す変数であり、 $\dot{\alpha}$ は初期すべり速度、 n^ν は速度感度指数でいずれも材料パラメータである。また、すべり抵抗力の発展式を次式で定義する。

$$\dot{g}^{(\alpha)} := \sum_{\beta=1}^n h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \quad (36)$$

ここで、 $h_{\alpha\beta}$ は硬化係数行列の成分を表しており、これも既往の研究では複数のモデルが提案されているが、本研究では Asaro ら⁽²⁾ が用いた次式を採用する。

$$\begin{cases} h_{\alpha\alpha} := h_0 \text{sech}^2 \left| \frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right| \\ h_{\alpha\beta} := q h_{\alpha\alpha} \quad (\alpha \neq \beta) \end{cases} \quad (37)$$

ここで、 $h_{\alpha\alpha}$ は自己硬化係数、 $h_{\alpha\beta}$ は潜在硬化係数であり、 h_0 , τ_s , τ_0 , q はそれぞれ初期硬化係数、Stage-I 応力、初期 CRSS、自己硬化と潜在硬化の比を表す材料パラメータである。また、 γ は蓄積すべり量であり、次式で定義した。

$$\gamma := \sum_{\alpha=1}^n \int_0^t |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| dt \quad (38)$$

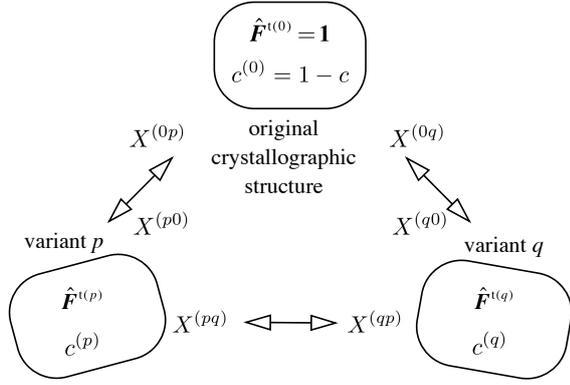


Fig. 6 Transformation between variants in deformation twinning

(2) **双晶変形速度** 式 (34) に変態速度勾配テンソル (19) を代入することで、変態に関する散逸不等式は次のように書き改められる。

$$\mathcal{D}^t = \sum_{p=1}^m X^{(p)} \dot{c}^{(p)} \geq 0 \quad (39)$$

ここで、 $X^{(p)}$ は p 相に向かう変態の駆動力であり、

$$X^{(p)} := J\sigma : \chi^{(p)} - (\Psi_T^\theta - \Psi_M^\theta) - A(1 - 2c) \quad (40)$$

と定義した。いま、 q 相から p 相へ変態する際の体積率変化速度 $\dot{c}^{(pq)}$ および対応する駆動力 $X^{(pq)}$ を新たな状態変数として、それぞれ次式のように定義する。

$$\dot{c}^{(p)} := \sum_{q=0}^m \dot{c}^{(pq)} \quad (41)$$

$$\begin{cases} X^{(p0)} := X^{(p)} = J\sigma : \chi^{(p)} - (\Psi_T^\theta - \Psi_M^\theta) - A(1 - 2c) \\ X^{(pq)} := X^{(p)} - X^{(q)} = J\sigma : (\chi^{(p)} - \chi^{(q)}) \quad (q \neq 0) \end{cases} \quad (42)$$

これにより、式 (39) を $\dot{c}^{(pq)}$ 、 $X^{(pq)}$ を用いて表すと、

$$\mathcal{D}^t = \sum_{p=1}^m X^{(p0)} \dot{c}^{(p0)} + \sum_{q=1}^{m-1} \sum_{p=q}^m X^{(pq)} \dot{c}^{(pq)} \geq 0 \quad (43)$$

となる。ここで、 $\dot{c}^{(pq)}$ と $X^{(pq)}$ は次式のように関係付けられるものとする。

$$\dot{c}^{(pq)} = \lambda^{(pq)} X^{(pq)} \quad (44)$$

ここで、係数 $\lambda^{(pq)} \geq 0$ は、エネルギーから計算される駆動力 $X^{(pq)}$ に対して、変態が進展する量を決める係数であり、材料パラメータとして与えられる。この式に式 (42) を代入すると以下の発展方程式が導出される。

$$\begin{cases} \dot{c}^{(p0)} = \lambda^{(p0)} \{ J\sigma : \chi^{(p)} - (\Psi_T^\theta - \Psi_M^\theta) - A(1 - 2c) \} \\ \dot{c}^{(pq)} = \lambda^{(pq)} \{ J\sigma : (\chi^{(p)} - \chi^{(q)}) \} \quad (q \neq 0) \end{cases} \quad (45)$$

ただし、 q 相から p 相へ向かう実際の変態は、エネルギー散逸の駆動力 $X^{(pq)}$ が正値でかつ (活性化エネルギーに相当す

る) ある閾値 k を超えたときにのみ生ずると考える。このとき、判定基準関数

$$f^{(pq)}(\sigma) = \text{sign}(X^{(pq)}) (|X^{(pq)}| - k) \quad (46)$$

を導入して、以上の発展方程式に対して以下の制約を与えることにする。

$$\begin{cases} \text{if } f^{(pq)}(\sigma) > 0 \text{ and } c^{(q)} \neq 0 \text{ then } \dot{c}^{(pq)} > 0 \\ \text{else if } f^{(pq)}(\sigma) < 0 \text{ and } c^{(p)} \neq 0 \text{ then } \dot{c}^{(qp)} < 0 \\ \text{else } \dot{c}^{(pq)} = 0 \text{ end if} \end{cases} \quad (47)$$

最後に、 $\chi^{(p)}$ の発展方程式は式 (20) を時間微分した式に式 (7) の第 2, 第 3 式および式 (9) を代入することで次式のように得られる。

$$\dot{\chi}^{(p)} = \mathbf{l}^e \chi^{(p)} + \chi^{(p)} (\mathbf{l}^{e-1} + \mathbf{l}^{e-1}) \quad (48)$$

本研究で提案する変形双晶のモデルでは、Fig. 6 に示すような母相-双晶間、双晶-双晶間の変態を、ここで示した基準にしたがって判定することになる。

(3) **すべり系の発展方程式** すべり系の発展式は、式 (10) を時間微分した式に式 (7) の第 2, 第 3 式および式 (9), (10) を代入することで次式のように得られる。

$$\dot{s}^{*(\alpha)} = (\mathbf{l}^e + \mathbf{l}^t) \cdot s^{*(\alpha)} \quad (49)$$

$$\dot{m}^{*(\alpha)} = m^{*(\alpha)} \cdot (\mathbf{l}^{e-1} + \mathbf{l}^{t-1}) \quad (50)$$

4.4 歪弾性構成則 本研究では、弾性挙動を表すための構成式として、回転に対して客観性のある応力速度を用いた次式のような歪弾性構成則を採用する⁽³⁾。

$$\overset{\nabla}{\sigma}^* + \sigma \text{tr}[\mathbf{d}^e] = \mathbb{C} : \mathbf{d}^e \quad (51)$$

ここで、 \mathbb{C} は六方晶の異方性を反映した弾性テンソル、 $\hat{\sigma}^*$ 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。

$$\overset{\nabla}{\sigma}^* := \overset{\nabla}{\sigma} + (\mathbf{w}^t + \mathbf{w}^p) \cdot \sigma - \sigma \cdot (\mathbf{w}^t + \mathbf{w}^p) \quad (52)$$

ここで、 $\overset{\nabla}{\sigma}$ は Cauchy 応力の Jaumann 応力速度

$$\overset{\nabla}{\sigma} := \dot{\sigma} - \mathbf{w} \cdot \sigma + \sigma \cdot \mathbf{w} \quad (53)$$

である。式 (52) に式 (51) と (53) を代入し、(8) および (9) を考慮して $\dot{\sigma}$ について整理すると Cauchy 応力の速度

$$\dot{\sigma} = \mathbb{C} : \mathbf{d}^e - \sigma \text{tr}[\mathbf{d}^e] + \mathbf{w}^e \cdot \sigma - \sigma \cdot \mathbf{w}^e \quad (54)$$

が得られる。ここで、 \mathbf{d}^e および \mathbf{w}^e は、式 (14), (21) などを考慮すれば、それぞれ次式で与えられる。

$$\mathbf{d}^e = \mathbf{d} - \sum_{p=1}^m \chi_{\text{sym}}^{(p)} \dot{c}^{(p)} - \sum_{\alpha=1}^n \mu^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (55)$$

$$\mathbf{w}^e = \mathbf{w} - \sum_{p=1}^m \chi_{\text{skw}}^{(p)} \dot{c}^{(p)} - \sum_{\alpha=1}^n \omega^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (56)$$

Table. 2 Material parameters for crystallographic slip

	Basal	prismatic	pyramidal
h_0	10	7500	7500
τ_s [MPa]	330	150	260
τ_0 [MPa]	1.0	20	40
$\dot{\alpha}$	0.001	0.001	0.001
n	30	30	30
q_{basal}	0.2	0.5	0.5
$q_{\text{prismatic}}$	0.2	0.2	0.2
$q_{\text{pyramidal}}$	1.0	1.0	0.2

したがって、前節で関数形を規定したすべり速度 $\dot{\gamma}^{(a)}$ と双晶変形速度 $\dot{\epsilon}^{(p)}$ が定められれば、応力速度が算定され、応力積分が可能となる。

5. 数値解析例

本節では、いくつかの簡単な数値解析を通して、本研究で提案する変形双晶モデルの性能の検証を行う。具体的には、単結晶および多結晶の簡易モデルを用いて、変形双晶を特徴づけている変形機構や応力緩和機構の再現性を確認する。

5.1 解析条件 次項以降で示す数値シミュレーションにおいて、六方晶系の弾性係数テンソル C の成分は、文献⁽¹⁶⁾を参照して以下のように設定する。

$$[C] = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{66} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \quad (57)$$

$$C_{11} = 58000, C_{12} = 25000, C_{13} = 20800, \quad (58)$$

$$C_{33} = 61200, C_{44} = 16600, C_{66} = 16500 \text{ [MPa]}$$

ここで、 $[C]$ は弾性係数テンソル C の行列表記であり、**Fig. 3** に示されている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。また、結晶すべりに関する材料パラメータは文献^(14, 15)を参照して **Table. 2** に示す値を用いる。一方、双晶変形に関するパラメータは、次項の単結晶に対する実験結果を参照して、キャリブレーションにより決定する。また、4.2 項で述べた、格子再配向時に変換すべき結晶方位に対応する双晶系の体積分率の閾値については、その設定に任意性があるが、本研究では仮に 0.4 を採用して解析を行う。

5.2 変形双晶モデルによるパラメータ同定と検証

本項では、本研究で提案する熱力学に基づく変形双晶モデルを用いて、文献⁽¹⁴⁾で報告されているマグネシウム単結晶に対する実験結果を数値シミュレーションにより再現する。この実験は、単結晶に対して **Fig. 7** に示すような負荷および拘束条件を与えるものであり、**Fig. 8** に示すような応力-ひずり

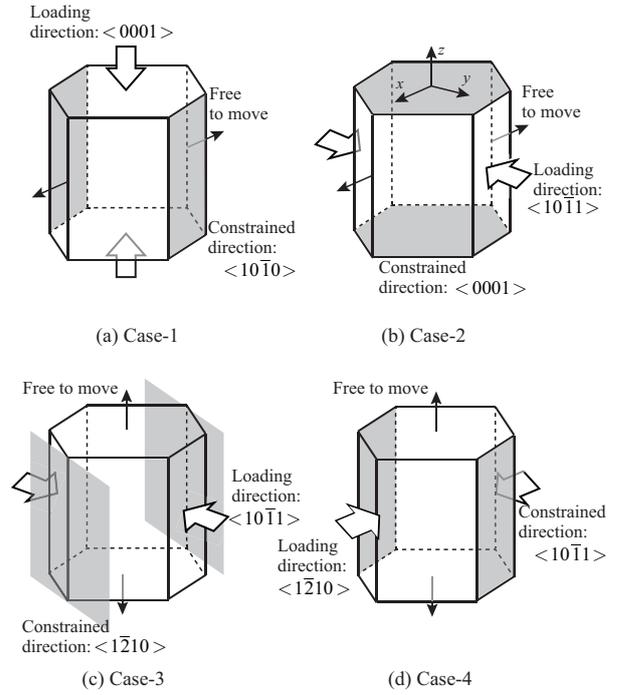


Fig. 7 Test cases for Mg single crystal

み曲線が得られている。提案する変形双晶モデルに含まれるパラメータは、この実験データを参照しながらキャリブレーションして決定した。すなわち、変態の進展量を決めるパラメータを $\lambda^{(p0)} = 1.8$, $\lambda^{(pq)} = 0.6$ ($q \neq 0$), 界面エネルギーの影響度を表すパラメータは双晶種類によらず $A = 0.1 \text{ J/m}^3$ とした。また、式 (46) において活性化エネルギーに対応するパラメータ k は、 $(10\bar{1}1)$ については 40.0 J/m^3 , $(10\bar{1}2)$ については 2.0 J/m^3 とした。一方、母相と各双晶系は原子配置が異なるだけでエネルギー的には等価と考えられるので、それぞれの化学的自由エネルギーは双晶種類によらず同一、すなわち $\psi_M^\theta = \psi_T^\theta$ ($T = (10\bar{1}1)$ or $(10\bar{1}2)$) とした。また、本研究では温度への依存性も考慮しない。

12 個の線形四面体要素からなる立方体領域の有限要素モデルにこれらのパラメータを用いて、各実験ケースに対応する数値シミュレーションを行った結果を **Fig. 9** に示す。実験とシミュレーションの結果では、応力の絶対値や応力-ひずり曲線の形状が異なるが定性的には両者はほぼ一致しているといえる。

(1) Case-1 と Case-2 本計算で設定した条件の下では、Case-1 と Case-2 の計算で変形双晶は生じないので、結晶すべりのみが変形機構となる。具体的には、Case-1 では錐面すべり系が、Case-2 では柱面と錐面すべり系がすべり得る。一方実験においては、これらのケースの負荷・拘束条件の下では、 c 軸 (**Fig. 7** 中では z -軸) が伸びるような $(10\bar{1}2)$ 双晶は生じ得ないが、Case-1 では $(10\bar{1}1)$ 双晶が発現する可能性がある。しかし、錐面すべりが卓越する状況下では双晶の駆動力となる熱力学的応力が相対的に低いために、上記のキャ

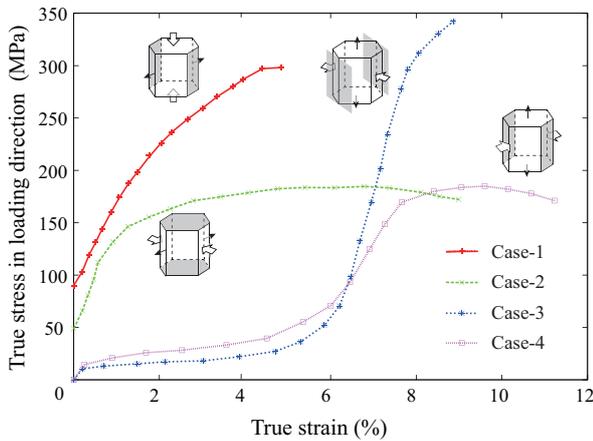


Fig. 8 Experimental results on Mg single crystal

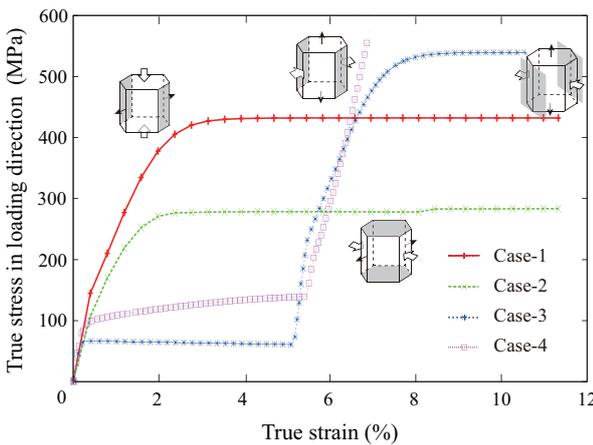


Fig. 9 Simulation results on Mg single crystal

リプレーションにより設定した活性化エネルギーを超えられない。

以上より、Case-1 と Case-2 では理論的な予測と整合した計算結果が得られているといえるが、対応する実験結果 (Fig. 8) は、計算結果に比べて応力レベルが低く、定量的には一致しない。これは、⁽¹⁴⁾に報告されているように、拘束条件が厳密に与えられていないことや、結晶方位・荷重方向のわずかな不整に起因して供試体の一部に変形双晶 (Case-1 では $(10\bar{1}2)$ 双晶、Case-2 では $((10\bar{1}2) \rightarrow (10\bar{1}1)2$ 重双晶) が現れたことにより、応力が低減されたためである。

(2) **Case-3 と Case-4** Case-3 と Case-4 では、理論的に $(10\bar{1}2)$ 双晶が発現する荷重・拘束条件が与えられている。実際、本計算の結果 (Fig. 9) でも、双方とも変形の初期段階で $(10\bar{1}2)$ 双晶が現れ、ひずみが約 5% までは双晶形態テンソルによる無応力せん断変形により 100 MPa 程度までしか応力が増加しない。また、本研究における変形双晶モデルでは各点 (各要素) における双晶の体積分率が 0.4 を超えるまでは格子再配向の影響を考慮しない設定になっているため、ひずみが 5% 程度まではせん断変形のみが生じる。今回

の数値シミュレーションでは、要素内のひずみが 5% 程度になると、 $(10\bar{1}2)$ 双晶の体積分率が 0.4 を超えるため、格子再配向に対応する結晶方位の変換が行われる。Case-3 では、変換後に c 軸が荷重方向とほぼ一致するため、より大きな拘束効果により応力が急激に増大することが再現されている。また、変換後の結晶方位では錐面すべり系が卓越して滑り得るが、このすべりに対応する結晶格子の回転が拘束されるので応力は増加し続ける。Case-4 の場合も、格子再配向後に c 軸は荷重方向に対して 31° 度傾斜するが、Case-3 と同様の効果で応力が急激に増大している。特に、格子再配向後には底面も滑る可能性があるが、課されている拘束条件がこのすべりによる変形を阻害するので見かけ上は降伏せずに応力は上昇する。

ひずみの大きい領域では、Case-3 の計算と実験の応答は概ね一致しているが、Case-4 については両者の応答は乖離している。具体的には、ひずみが 8% 以上になると、Case-4 の計算結果では応力は上昇を続けるのに対して、実験結果では応力値が頭打ちになる。前述のように、本数値シミュレーションでは荷重・拘束条件が厳密に与えられるので理論的予測と同様の応答が得られるが、文献⁽¹⁴⁾でも指摘されているように、実験においては拘束条件不完全であることや、荷重条件や材料の初期不整の影響による底面すべりなどのすべり変形が卓越することで応力は下がり得る。

また、本研究で提案する変形双晶モデルでは、物質点においてあるパターンの変形双晶の体積分率が閾値を超えた段階で格子再配向による結晶方位の変換を行なっている。すなわち、単結晶に対する一様変形のシミュレーションでは、ほとんどすべての要素で同時に無応力せん断ひずみを生じ、ある程度変形が進行して変形双晶の体積分率が閾値を超えたときにはじめて格子再配向による方位変換も同時に行われる。したがって、Fig. 9 のシミュレーションの結果では、約 5% の時点ですべての要素の結晶格子が変換されるため、応力の増加率が不連続になっている。しかし実際には、すべての物質点で同時に変形双晶となることはない。また、変形双晶の発現による無応力せん断変形と格子再配向は同時に起こる。したがって、実験結果の Fig. 8 では、双晶変形が進行する中でも応力は上昇し、応力の増加率も連続的である。本研究で提案するモデルを用いた単結晶の数値計算でこれを再現することは困難であるが、多結晶体に対する計算では、モデルが大きくなるほど、変形の不均一性が顕著になるのでこのような差異の影響は小さくなると考えられる。

5.3 c 軸方向引張り問題 前項と同じマグネシウム単結晶の有限要素モデルに対して、一様一軸応力状態となるように c 軸方向に引張りの荷重と拘束を与える数値シミュレーションを行なった。ただし、ここで設定した材料パラメータはすべて前項でキャリプレートした値を用いた。計算結果として得られた応力-ひずみ曲線を Fig. 10 に示す。同図には、双晶変形が生じないようなパラメータ設定で計算した結果を併記している。また、変形双晶による格子再配向の前後での各すべり系のすべり変形の有無も $\circ \times$ で示した。

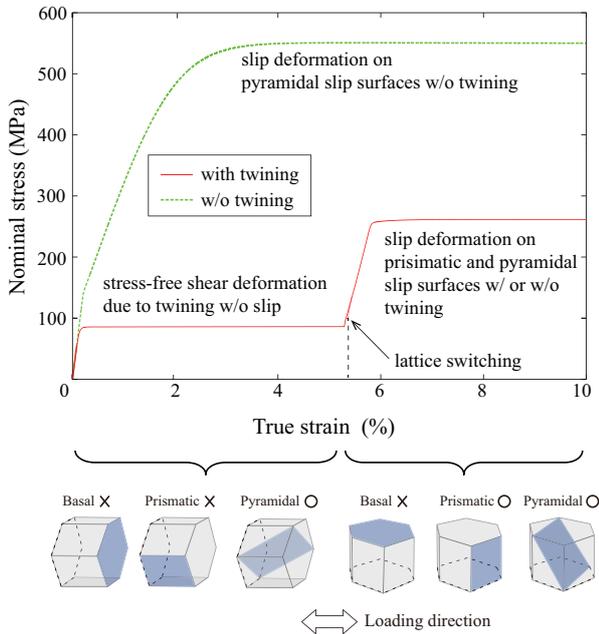


Fig. 10 Stress-strain curve for tensile loading on Mg single crystal in c-axis direction

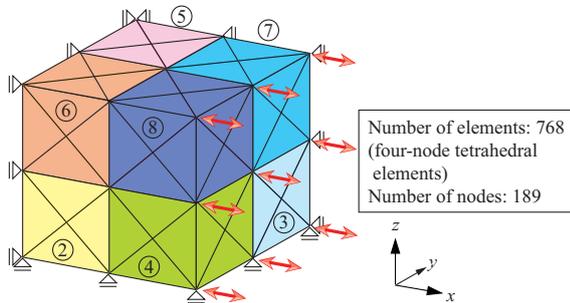


Fig. 11 Eight-grain model

変形の初期段階では、六方晶のc軸は引っ張り方向と平行な向きであり、活動しうるすべり系は錐面すべりしかない。このとき、双晶変形が生じない場合は、錐面すべり系の分解せん断応力が臨界値に達して活動する通常の塑性変形である。これに対して提案するモデルによる変形双晶が生じる場合、錐面すべり系の分解せん断応力が臨界値に達しない状態、すなわち弾性状態から(10 $\bar{1}$ 2)双晶が現れ、対応する無応力双晶せん断変形により応力が上昇しない。そして、(10 $\bar{1}$ 2)双晶の体積率 $c^{(p)}$ ($p = 7 \sim 12$)が増加していき、閾値(本研究では0.4)を越えると格子座標系の変換、すなわち格子再配向が起こる。本計算結果では、ひずみが約5.5%のときに閾値を超えたことが分かる。(10 $\bar{1}$ 2)双晶に対応する格子再配向が起こると、格子は約90°回転し、c軸方向に伸張する変形、すなわち荷重方向に収縮する変形により応力は急激に上昇するが、柱面すべり系が活動し始め、応力の上昇の度合いは低減される。さらに変形を加え続けると、(10 $\bar{1}$ 1)双晶が発現するが、本計算で荷重した程度の変形では対応する熱力学応力は活性化エネルギーを超えるほど高くない。この結果

Table. 3 Crystallographic orientation of each grain in eight-grain model

Grain No.	Roe's Euler angles (degree)		
	ϕ	θ	ψ
①	10	0	0
②	10	5	0
③	10	30	0
④	10	50	0
⑤	20	0	0
⑥	20	5	0
⑦	20	30	0
⑧	20	50	0

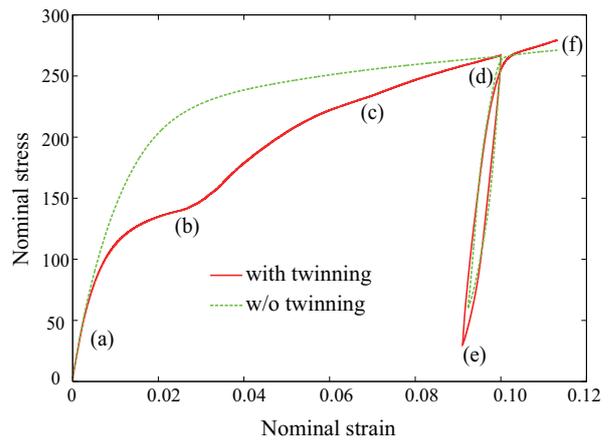


Fig. 12 Macroscopic stress-strain curve for eight-grain model subjected to cyclic loading

は、マグネシウムについて報告されている変形機構を良く表しているといえる。

5.4 多結晶簡易モデルに対する繰り返し負荷問題

Fig. 11 に示すような、8つの立方体形状の結晶粒からなる多結晶体の有限要素モデルに対して、1軸方向に強制変位による繰り返し負荷を与える解析を行った。まず、10%の引張ひずみを与えた後に0.9%圧縮することで除荷し、その後再び再負荷する。各結晶粒の結晶すべりと変形双晶の材料パラメータは、前項の解析例と同一であるが、8つの結晶粒にはそれぞれ**Table. 3**に示すような異なる結晶方位を与えた。ただし、表中のオイラー角はRoeの方法に従うものである。

解析の結果得られたマクロ公称応力-ひずみ曲線を**Fig. 12**に示す。ここで、マクロ公称応力とは、強制変形を与える面上の表面力の1軸方向成分の積分値をその初期断面積で除した値である。また同図には、比較のために双晶変形を考慮していない結晶塑性構成モデルのみを用いた数値解析結果を合わせて示した。この図から、本研究で提案した結晶塑性・変形双晶モデルは、マクロ的に単調な応答を示すが、結晶すべり

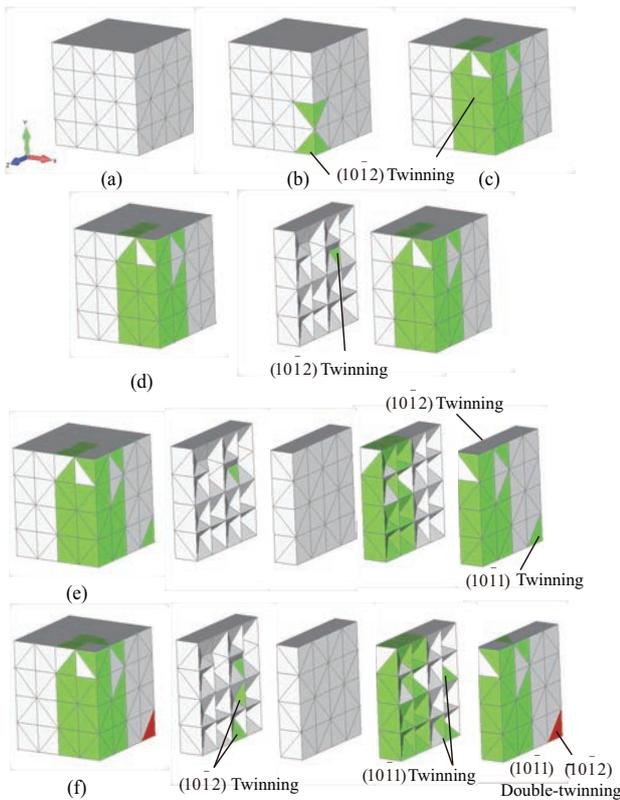


Fig. 13 Distributions of deformation twinning

りのみを考慮したモデルによる応答は、複数の種別の变形双晶が個別に形成されることから単調性が失われていることが分かる。また、双方のモデルの応答で、除荷・再負荷に際してエネルギーの散逸を表すループを描く様子が観察できる。結晶塑性構成モデルのみから得られる応答は、マクロ的な除荷時の応力再配分に起因してミクロ的な負荷領域が生じることによって現れる Bauschinger 効果⁽¹⁷⁾に他ならない。一方、結晶塑性・変形双晶モデルによって現れたループは、マクロ的な除荷に際して結晶すべりだけでなく、新たな変形双晶にも起因して現れたものである。以下では、このようなマクロ応答に対応する結晶粒レベルのメカニズムについて考察する。

マクロ応力-ひずみ曲線 Fig. 12 に付された記号 (a)~(f) の各変形段階に対応する、多結晶体内に現れた変形双晶の分布とその種別を Fig. 13 に示す。変形の初期段階 (a)~(b) では、引張方向に対して c 軸の傾斜が一番小さい (約 41°) の傾きを有する結晶粒④に、c 軸方向伸びを生じる (10 $\bar{1}$ 2) 双晶が形成される。そして、この結晶粒のほぼ全域が変形双晶になった時点で、次に傾斜角の小さい (約 44°) の結晶粒⑤に (10 $\bar{1}$ 2) 双晶が形成され、(b)~(c) で発展する。また、(c)~(d) でひずみが 10% に達するまでに、結晶粒⑤に (10 $\bar{1}$ 2) 双晶が形成されている。この結晶粒の c 軸は負荷方向に直交する方向に向いているので、単結晶であればこの変形双晶は形成されないが、多結晶体内の粒界付近では弾性およびすべり変形の相互作用により、c 軸方向の伸びを促すような主応力方向

の回転もあり得る。さらに、(d)~(e) では結晶粒⑥に (10 $\bar{1}$ 1) 双晶が発生するが、この変形双晶は再負荷時の (e)~(f) において (10 $\bar{1}$ 2) 双晶に変化する。すなわち、除荷-再負荷の過程で (10 $\bar{1}$ 1) \rightarrow (10 $\bar{1}$ 2) の 2 重双晶が現れる。これは、初期状態では結晶粒⑥の c 軸が負荷方向に対して約 60° 傾いているが、除荷に際して (10 $\bar{1}$ 1) 双晶が形成されたことより c 軸が約 56° 回転して、負荷方向に対して約 30° 傾くため、再負荷時には c 軸伸びを伴う (10 $\bar{1}$ 2) 双晶が形成されるものと考えられる。

6. 結言

本研究では、内部変数を用いる熱力学に基づく定式化⁽¹¹⁾を適用して、結晶すべりと変形双晶の相互作用を評価可能な結晶塑性・変形双晶構成モデルを構築し、簡単な数値解析例によりその性能を検証した。提案した構成モデルは、以下のような特徴を有するもので、双晶の形成条件と双晶変形時の無応力せん断変形および格子再配向を同一の内部変数を介して統一的に扱うことができる点で、双晶変形を擬似的なすべりとみなす従来の変形双晶モデルとはまったく異なっている。

- 双晶変形勾配は、材料パラメータである双晶種別の無応力ひずみパターンと対応する体積分率係数とする線形結合で定義されている
- 変形勾配の弾塑性乗算分解に対して、上記のように定義された双晶変形勾配を乗算形式で付加している
- 通常の弾性および結晶すべりのひずみ硬化に関する項に加えて、無応力ひずみパターンの体積分率係数を内部変数として変形双晶の自由エネルギーを定義している
- 変形双晶の自由エネルギーは、母相および変形双晶相の化学的エネルギーと双晶界面エネルギーから構成される
- 内部変数として導入した変形双晶相の体積分率がある閾値を超えた際に格子再配向が行われる

数値解析例では、既往の実験研究で報告されている単結晶の圧縮試験結果を参照データとして、提案した変形双晶構成モデルのパラメータをキャリブレーションにより決定するとともに、4 種類の負荷方向・拘束パターンに対する応力-ひずみ曲線を比較・考察した。そして、提案モデルによれば、負荷方向・拘束パターンの違いによる変形双晶の形成の有無と格子再配向を適切に予測できること、および後者に起因して発現する応力の低減・増加挙動を再現しうることを示した。また、この検証例題と同一の単結晶モデルに対して引張荷重を負荷する数値シミュレーションでは、理論的な予測結果と一致する結果を得た。さらに、8 結晶粒からなる簡単な多結晶モデルに対して負荷・除荷の繰り返し負荷を与える数値解析では、マクロ的な除荷に際して新たな変形双晶の形成や、2 重双晶の発現が捉えられ、弾性異方性、結晶すべり、変形双晶の相互作用を評価しうることを確認した。

本研究で提案した結晶塑性・双晶変形の構成則は、基本的な性能を備えていることが確認されたので、今後は、実際的な多結晶構造に近い数値モデルを用いて変形双晶および 2 重双

晶の形成を予測する数値シミュレーションを行い、実験結果とを比較するなどして検証を重ねることで、モデルを改良していく予定である。特に、結晶粒レベルでの結晶すべりおよび双晶変形挙動、およびそれらの相互作用がマクロな降伏強度や延性に及ぼす影響を調査するには、CRSS および活性化エネルギーの温度依存性や、格子再配向後の蓄積すべりの影響、粒界でのすべり変形の影響なども考慮する必要がある。

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。

参考文献

- (1) 吉永 日出男, 稠密六方晶金属の変形双晶—マグネシウムを中心として, 内田老鶴圃, 2007
- (2) Asaro, J.R., Crystal plasticity, *J. Appl. Mech.*, **50**, 1983, pp.921–934.
- (3) Asaro, J.R., and Lubarda, V.A., *Mechanics of Solids and Materials*, Cambridge Univ. Press, NY, 2006.
- (4) Peirce, D., Asaro, R.J., and Needleman, A., A analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals, *Acta Metall.*, **30**, 1982, pp.1087–1119.
- (5) Peirce, D., Asaro, R.J., and Needleman, A., Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids, *Acta Metall.*, **31**, pp. 1951–1976, 1983.
- (6) Staroselsky, A., and Anand, L., A constitutive model for hcp materials deforming by slip and twinning: application to magnesium alloy AZ31B, *International Journal of Plasticity*, **19**, 2003, pp.1843-1864.
- (7) Kouchmeshly, B., and Zabaras, N., Modeling the response of HCP polycrystals deforming by slip and twinning using a finite element representation of the orientation space, *Computational Material Science*, **45**, 2009, pp.1043-1051.
- (8) Mayama, T., Aizawa, K., Tadano, Y., and Kuroda, M., Influence of twinning deformation and lattice rotation on strength differential effect in polycrystalline pure magnesium with rolling texture *Computational Materials Science*, **47**, 2009, pp.448-455.
- (9) Choi, S.-H., Kim, D.H., Park, S.S., and You, B.S., Simulation of stress concentration in Mg alloys using crystal plasticity finite element method *Acta Materialia*, **58**, 2010, pp.320-329.
- (10) Choi, S.-H., Kim, D.H., Lee, H.W., and Shin, E.J., Simulation of texture evolution and macroscopic properties in Mg alloys using crystal plasticity finite element method *Materials Science and Engineering A*, **257**, 2010, pp.1151-1159.
- (11) Idesman, V.A., Levitas, I.V., Preston L.D., and Cho Y.J., Finite element simulations of martensitic phase transitions and microstructures based on a strain softening model, *Journal of the Mechanics and Physics of solids*, **53**, 2005, pp. 495–523.
- (12) Idesman, V.A., Levitas, I.V., and Stein, E., Elastoplastic materials with martensitic phase-transition and twinning at finite strains: numerical solution with the finite element method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **173**,1999, pp. 71–98.
- (13) Koike, J., Sutou, Y., and Ando, D., Origin of Anomalous { 1012} Twinning during tensile deformation of Mg alloy sheet, *Materials. Transactions*, **49**, 2792–2800, 2008.
- (14) Kelley, E.W., and Hosford, W.F., Plane-strain compression of magnesium and magnesium alloy crystals, *Trans. Metall. Soc.*, AIME **242**, 5–13, 1968
- (15) Kelley, E.W., and Hosford, W.F., The deformation characteristics of textured magnesium, *Trans. Metall. Soc.*, AIME **242**, 654–661, 1968
- (16) Simmons, G., and Wang, H., *Single crystal elastic constants and calculated aggregate properties: a handbook*, MIP Press, Cambridge, MA, 1971.
- (17) Watanabe, I., Terada, K., and Akiyama, M., Two-scale analysis for deformation-induced anisotropy of polycrystalline metals, *Computational Materials Science*, **32**, 240–250, 2005.