

多結晶体モデルを用いた変形履歴による塑性異方性発達に関する研究

琉球大学工学部機械システム工学科

助手 末吉 敏恭

(平成 10 年度奨励研究助成 AF-98025)

キーワード:有限要素多結晶体モデル, 塑性異方性, 結晶方位分布関数

1 緒言

プレス成形における破断現象は, 製品不良につながるものであり, これらの不良現象が生じない, 成形可能な限界を明らかにする必要がある. 成形限界は, 材料の局所の変形を評価するものであり, Hill¹⁾やStören-Rice²⁾による研究が代表的である. このような局所化現象は, 結晶粒オーダーにおいては, ある特定の結晶粒への極度のひずみの集中で生じる³⁾. 一方, 多結晶金属材料中の各結晶粒は, 全体的に, 特定方向への配向を示しており, こうした結晶の方位特性を定量的に表現するために結晶方位分布関数が用いられている. 結晶方位分布関数を算出するための手法として, 球面調和関数による級数展開法が, X線回折装置による反射法のみでの測定結果である不完全極点図から結晶方位分布関数を決定することが出来る⁴⁾. このような材料の塑性変形特性を解析するために, 単結晶の変形機構理論に基づき, かつ方位分布特性を結晶方位分布関数より離散的に導入した有限要素多結晶体モデルによる解析が行なわれている. 有限要素多結晶体モデルは, 有限要素法における各 Gauss 積分点を, もしくは各要素を単結晶とし, それらの集合体として多結晶体を構成し, 単純な単結晶内のすべりのみによって解析が行われるため複雑な応力ひずみ関係を考慮する必要がないという利点をもつ. そこで, 本研究は, 有限要素多結晶体モデルによる解析を用いて, 任意の変形履歴をうける材料の結晶方位特性の変化について調べるために, 結晶方位分布関数の方位分布係数がどのような影響を受けるか検討する.

2 級数展開法による結晶方位分布関数の決定

2.1 結晶方位分布関数

結晶方位分布関数を求める手法としては, Los Alamos National Laboratory によって開発された popLA⁵⁾に代表される WIMV 法や ADC 法など, 種々あるが, その中でも, 級数展開法は, その展開係数を異方性などの性質と直接関係づけることが出来るなど, 多くの利点をもつ⁶⁾. 極点図と結晶方位分布関数の関係が Roe⁷⁾らにより明らかにされており, 級数展開法では, Euler 角 ϕ , ζ ($\zeta = \cos \theta$), ϕ 表記による結晶方位分布関数 $w(\zeta, \psi, \phi)$ を次式により表現する.

$$w(\zeta, \psi, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{n=-l}^l [W_{lmn} Z_{lmn}(\zeta) \exp(-in\psi) \exp(-in\phi)] \quad (1)$$

W_{lmn} : 結晶方位分布関数の特性を定める展開係数

$Z_{lmn}(\zeta)$: 一般化した Legendre 陪関数

ただし, 極点図は, 赤道面に投影された結晶面法線密度分

布の二次元的な表示であるため, その法線を軸とする回転の情報欠落していることから, 本研究では $\phi = 0.0$ として取り扱う.

2.2 結晶及び試料軸直交対称性による展開係数への影響

結晶自体の対称性及び試料軸直交対称性により展開係数 W_{lmn} は, l, m が偶数かつ n が 4 の倍数以外は零となることが明らかにされている^{6,7)}. 試料軸直交対称性(以下, 試料対称性)とは, 圧延方向軸, 圧延直交方向軸及び圧延面法線方向軸にそれぞれ直交する面で結晶面の方位分布が統計的に対称であることをさす. その結果, 式(1)は, 次式のように書き換えられる.

$$q(\zeta, \eta) = W_{000} + \sum_{l=4}^{\infty} S_l \sum_{m=0}^l [W_{lm0} P_l^m(\zeta) e^{-im\eta}] \quad (2)$$

S_l : 結晶格子と回折面により定まる係数

$P_l^m(\zeta)$: 正弦化 Legendre 陪関数

本研究では, $l=10$ までの有限項で近似する.

2.3 正弦関数項の導入

式(2)においては, 試料対称性を有する極点図のみが表現可能であり, 塑性異方性を評価する際に用いられる, 圧延方向から 45 度に切り出した試験片等を解析する場合には, 試料対称性が保証されない. これらを解消するために, Bunge⁸⁾や井上⁹⁾は, 偶数項のみで表現される式(2)について, 奇数項の導入を考慮しているが, 奇数項は, 極点図からは得られない情報である. そのため, 繰り返し計算等を用いて工夫することにより求める必要がある. そこで, 本研究では, 極点図から得られる情報のみを用いて係数を決定することを考え, Euler の公式により $W_{lm0} = A_{lm0} + iB_{lm0}$ として, (2)式を複素級数展開し, 実部のみ用いると, 次式ようになる.

$$q(\zeta, \eta) = W_{000} + \sum_{l=4}^{10} S_l \sum_{m=0}^l [P_l^m(\zeta) (A_{lm0} \cos m\eta + B_{lm0} \sin m\eta)] \quad (3)$$

結晶方位分布関数に正弦関数項を導入することによって, 試料対称性を有しない試料に対しても解析可能になる.

2.4 展開係数の数値解法

展開係数を決定する数値解法として次の過程を用いた. X線回折装置より得られる三種類の実測極点図から, それぞれ方位密度値 $q(\zeta, \eta)$ を読み取り, その実測値と式(3)の展開式に関して, 合計 33 個の未知係数 W_{lm0} について連立一次方程式を得ることができる. その後, 三種類の極点図の実測値と結晶方位分布関数との誤差が最小となるように最小二乗法を用いて係数を決定する. 方程式の解として得られた係数 W_{lm0} を式(3)に戻し, 規格化係数 $R = (1/4\pi)/W_{000}$ を掛けるこ

とで規格化された結晶方位分布関数を得る。図1にその計算手順を示す。

3 有限要素多結晶モデル(速度依存型モデル)

Peirceら¹⁰⁾の提案による速度依存型単結晶モデルは、すべり系(a)のすべりによるせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(a)}$ について次式で表現される。

$$\dot{\gamma}^{(a)} = \dot{a}^{(a)} \frac{\tau^{(a)}}{g^{(a)}} \left| \frac{\tau^{(a)}}{g^{(a)}} \right|^{1/m-1} \quad (4)$$

ここで、 $g^{(a)}$ は、すべり系(a)の基準せん断応力、 $\tau^{(a)}$ は、すべり系(a)の分解せん断応力、 $\dot{a}^{(a)}$ は、すべり系(a)の基準せん断ひずみ速度、 m はひずみ速度感受指数を示す。各要素は、8Gauss 積分点評価の8節点六面体アイソパラメトリック要素であり、材料は、12個のすべり系を持つFCC材アルミニウム単結晶とする。これら単結晶の集合体として、図2に示す、要素数216個の立方体ブロックを用いる。用いた材料パラメータを表1に示す。

4 結晶方位分布関数を用いた実験結果の解析

4.1 実験方法

供試材料として工業用純Al板(A1100P-H14)、板厚2mmを用い、変形異方性評価のために、JIS13号引張試験片を圧延方向、圧延直角方向および45度方向に板取る。残留応力除去のため焼鈍温度350℃、保持時間30分後、炉冷したものを初期状態とし、単軸引張後、変形異方性と集合組織を測定する。集合組織については、島津製X線回折装置(XD-D1)および極点図測定装置(PF-1616)により、(111)、(200)及び(220)面極点図をCu特性X線を用いてSchulz反射法により $0^\circ \leq \alpha \leq 65^\circ$ で測定し、無配向性標準試料により規格化する。無配向性標準試料として粉末粒子径325mesh Al粉末を使用する。

4.2 実測極点図との比較による完全極点図の妥当性

3種類の極点図を用いて結晶方位分布関数を決定し、それによって作図された完全極点図(3回折面完全極点図)と1種類の極点図のみで決定した結晶方位分布関数による完全極点図(1回折面完全極点図)について、実測極点図との比較検討を行った。初期状態における実測極点図($0^\circ \leq \alpha \leq 65^\circ$, $0^\circ \leq \beta \leq 360^\circ$)及び結晶方位分布関数から得た解析結果を図3~図5に示す。実測極点図において明らかに優先結晶方位{001}<100>が現れており、また他の2種類の結晶方位分布関数においても測定領域内で全く同様な結果が確認できる。実測値と方位分布関数の結果が一致するのは、分布関数を構成する級数展開式と実測値に関して最小2乗近似を行っているので当然の結果であるといえる。しかし図3(b), 4(b), 5(b)と図3(c), 4(c), 5(c)の完全極点図を比較すると、未測定領域($65^\circ \leq \alpha \leq 90^\circ$)のピークの位置、個数及び強度に顕著な違いがみられる。測定領域内ではほぼ合致しているため実測値を見ただけでは双方の是非を判断できないが、優先方位{001}<100>を未測定領域まで拡張

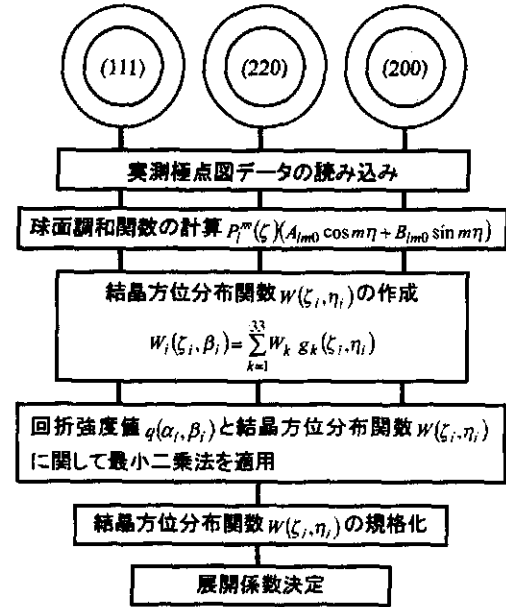


図1 解析プログラムの計算手順

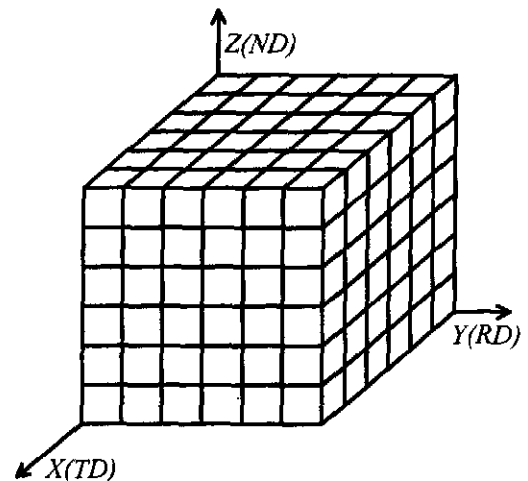


図2 解析対象モデル

表1 材料パラメータ

弾性係数	$E=70.6$ [GPa]
ポアソン比	$\nu=0.3$
初期せん断降伏応力	$Y=196$ [MPa]
加工硬化係数	$H'=784$ [MPa]
基準せん断ひずみ速度	$\dot{a}=0.0001$
ひずみ速度感受指数	$m=0.05$

するとそのピークは、3回折面完全極点図と明らかに一致していることがわかる。それに対して1回折面完全極点図の場合には、真のピークが上下左右に分散したように現れており、また偽のピークの出現が確認され、結晶学的に方位関係を説明できない。その理由は次のように解釈することができる。結晶方位分布関数を実測値に関して最小2乗近似する作業自体は単に実測値を関数表現することに過ぎず、実測値の

与えられた範囲内に限りその再現を行う。したがって範囲外では結晶方位に関する何らかの条件を与えない限り意味のある表現を行うことができない。ところが 3 種類の結晶面より得たデータを取り込むことで係数が各結晶面の制約を受け、結晶構造に関する条件を伴うことになり測定領域の外側に存在する等価な結晶面の集積もそれに基づいて顕現される。したがって 3 回折面完全極点図が未測定領域においても $\{001\}\langle 100\rangle$ に一致した集積を有すると考えられる。

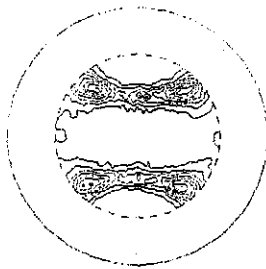
4.3 正弦関数項の導入による影響

初期状態の試験片を圧延方向に対して 45 度方向に単軸引張試験を行って得た 15% のひずみにおける実測極点図とその結晶方位分布関数による解析結果を図 6 に示す。圧延面内で試料対称性が成立しないとき、図 6(a)において、余弦関数 (cos) 項のみの結晶方位分布関数では実測極点図を表現できなかったが、図 6(b)では、正弦関数 (sin) 項を取り入れたことで表現可能になったことが確認できる。圧延方向にひずみを与えた場合、正弦関数項の導入による影響は特に見られなかったことを記しておく。圧延方向においては、試料の直交対称性が成立するため、結晶方位分布関数における正弦関数項の各係数は理論上、零となるが、各係数を計算した

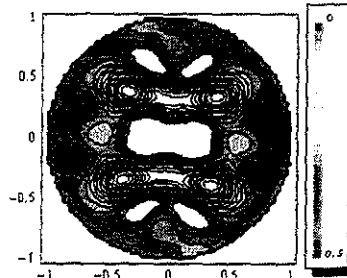
結果、その係数は、零とはならず、余弦関数項に比べ低い値を示した。実測極点図においても、正確には、圧延方向軸ならびに圧延直角方向軸に対して対称は成立していないので、より正確な極点図を得るには、正弦関数項の導入が必要と考えられる。5%、10% および 15% の各ひずみ量に対して、実測極点図をもとに完全極点図を作成した。(111) 面のみを図 7 に示す。変形に伴いピーク値の移動が確認できる。結晶方位分布関数の展開係数のひずみ量に対する変化を図 8 に示す。福岡ら¹¹⁾は、超音波を用いて、集合組織によるレーリー波速度の異方性と結晶方位分布関数の展開係数とを結びつける関係式を次式のように示している。

$$V(\theta) - V_{r0} = \left(\frac{a}{\rho V_{r0}} \right) \left[r_0 W_{400} + r_2 W_{420} \cos 2\theta + r_4 W_{440} \cos 4\theta \right] \quad (5)$$

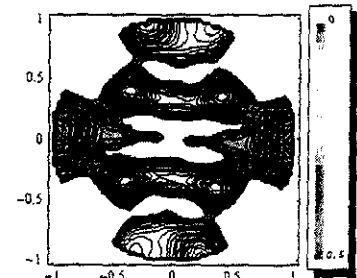
ここで、 $V(\theta)$ は、異方性の主軸方向から θ だけ回転した方向のレーリー波速度、 V_{r0} は等方材中のレーリー波速度、 a は異方性パラメータ、 ρ は、密度、 r_i はレーリー波に関するポアソン比によるパラメータである。このことより、異方性主軸の変化が展開係数の変化によって表現出来ること示唆するものと考えられる。本解析結果においても、展開係数は、引張試験によって与えたひずみ量に応じて変化しており、変化の大き



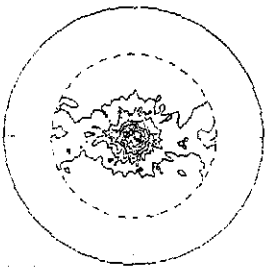
(a) (111)実測極点図



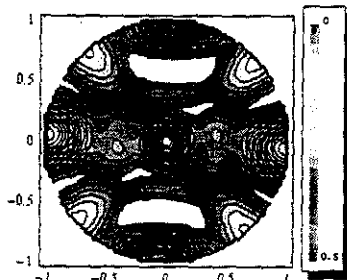
(b) 3回折面(111)完全極点図
図3 炉冷後の(111)極点図



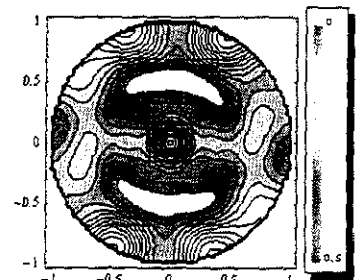
(c) 1回折面(111)完全極点図



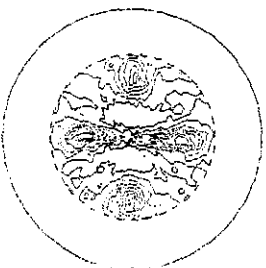
(a) (200)実測極点図



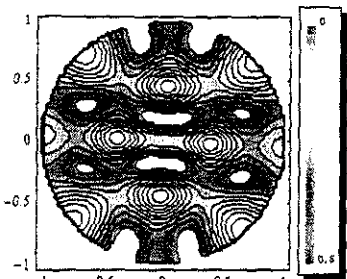
(b) 3回折面(200)完全極点図
図4 炉冷後の(200)極点図



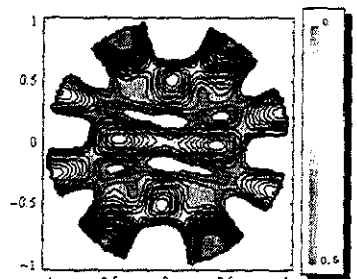
(c) 1回折面(200)完全極点図



(a) (220)実測極点図



(b) 3回折面(220)完全極点図
図5 炉冷後の(220)極点図



(c) 1回折面(220)完全極点図

い係数と、ほとんど変化しない係数に分類することが出来る。しかし、正弦関数項を導入するために、 $W_{lm0} \equiv A_{lm0} + iB_{lm0}$ なる展開を施し、その実部のみを取り扱っているため、(5)式

に示される W_{lm0} との直接的関係を考察するには、さらなる検討が必要であると考える。

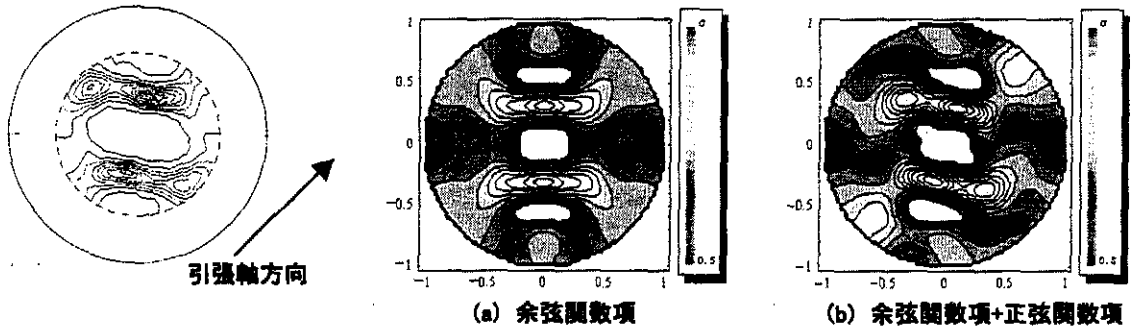


図6 45度方向引張試験結果による正弦関数項導入の影響

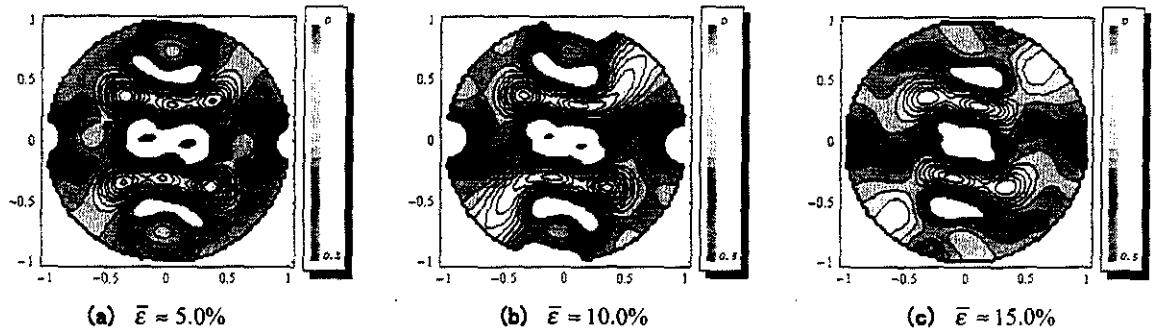


図7 各変形量に対する(111)完全極点図

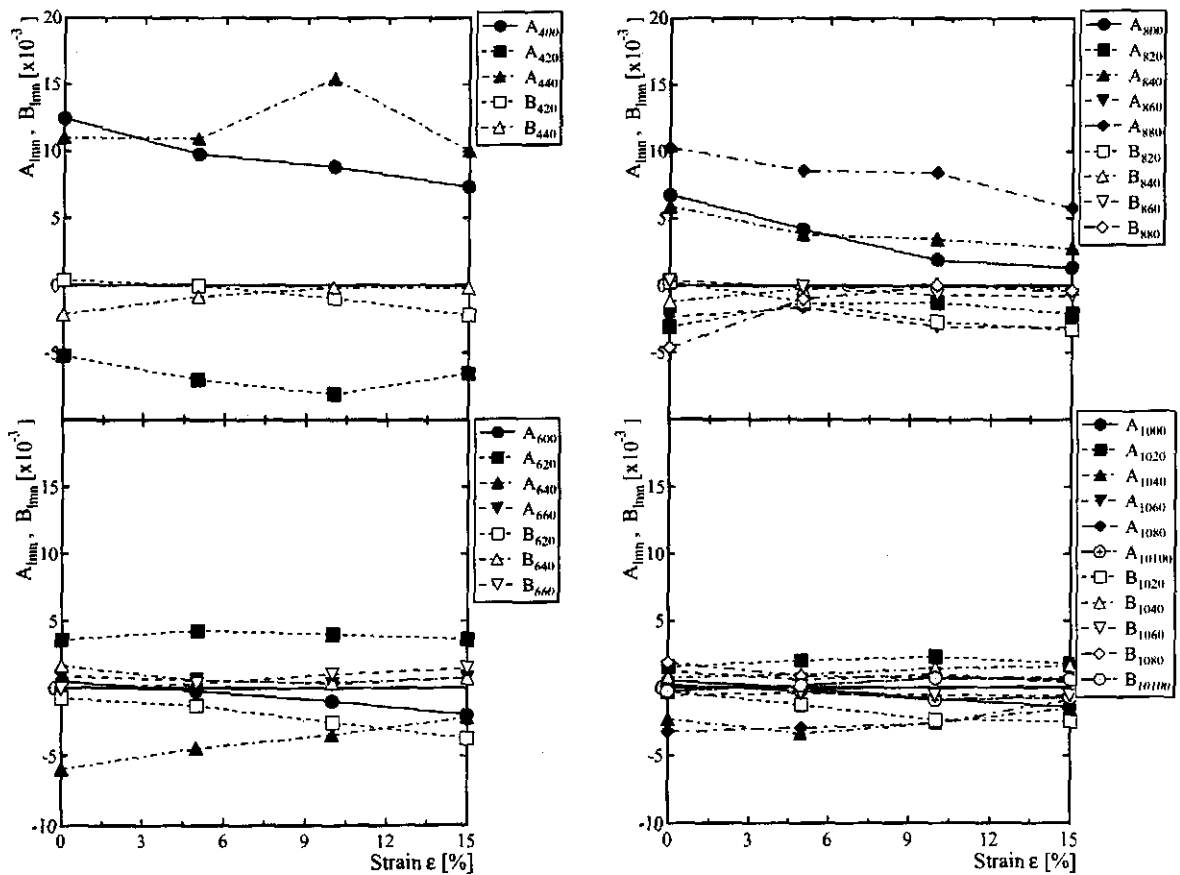


図8 変形量に伴う結晶方位分布関数展開係数の変化(45度方向)

5 有限要素多結晶モデルによる解析結果

本研究では、実材料から結晶方位分布関数を用いて有限要素多結晶へ取り込む手法が確立されていないので、ランダム関数を用いて数値的に発生させた結晶方位を等方材の結晶方位として、両端固定の平面ひずみ圧縮条件にて約60%に数値圧延を施したものを、初期異方性材の結晶方位として解析に用いることにした。圧延方向を0度として、22.5度ごとの各方向へ単純引張試験を行い、相当応力-相当塑性ひずみ関係を調べた。また、異方性の評価には、通常、Lankfordの r 値が用いられるが、 $r=0\sim 1$ と $r=1\sim\infty$ の領域で対象ではなく、また、板厚ひずみ $\varepsilon=0.0$ の場合 $r=\infty$ となるため、収縮比 q 値を次式に定義し、その変化についても調べた。本来、 q 値はBungeにより提案されたもので、 $q=0\sim 1$ の範囲を取りうるが、 $r=1$ のとき、 $q=0.5$ となるため、分子に2を掛けることで、従来の等方材に対する $r=1$ というイメージを崩すことなく用いることができる。

$$q = \frac{2r}{r+1} \quad (6)$$

ただし、 $r = \varepsilon_w / \varepsilon_t$ 、 ε_w は板幅ひずみであり、 ε_t は板厚ひ

ずみである。参考のため r 値についても付記する。相当塑性ひずみが約30%における相当応力と q 値を図9に示す。 q 値及び r 値の変化は、圧延方向で極小値を示し、45度方向

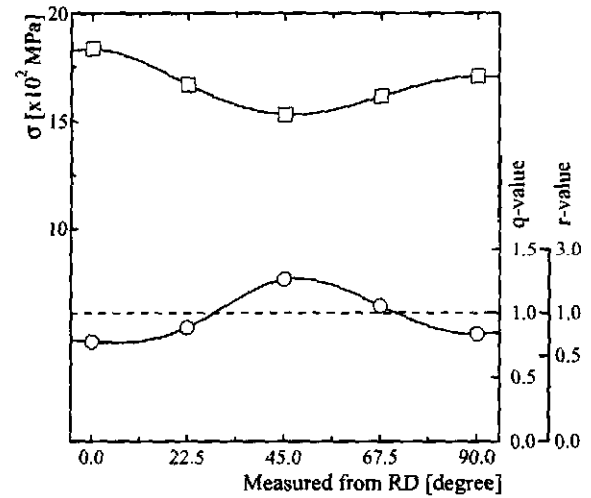
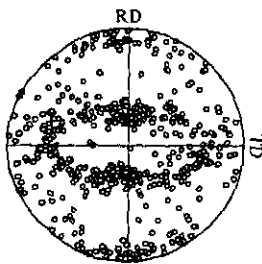
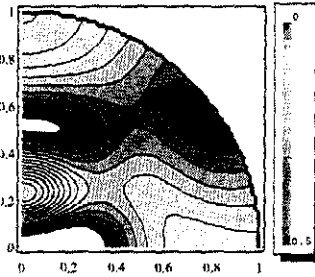


図9 圧延後の塑性異方性



(a) [111]極点図



(b) 結晶方位分布関数より得られた[111]極点図

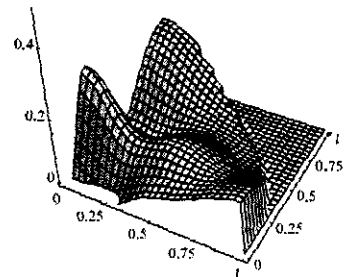
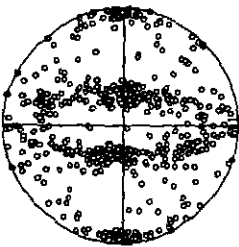
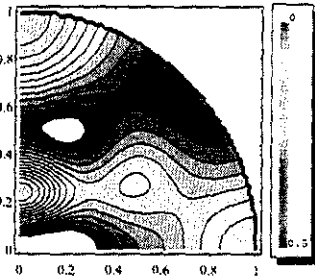


図10 約60%数値圧延された異方性材モデル



(a) [111]極点図



(b) 結晶方位分布関数より得られた[111]極点図

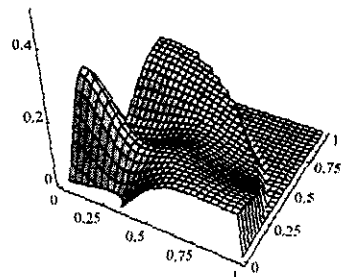
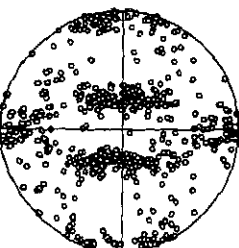
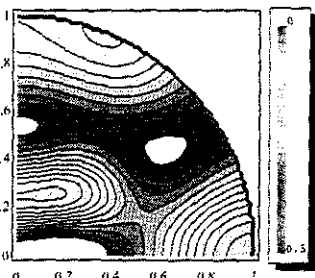


図11 圧延方向へ変形後(相当塑性ひずみ $\bar{\varepsilon}^P = 30.0\%$)



(a) [111]極点図



(b) 結晶方位分布関数より得られた[111]極点図

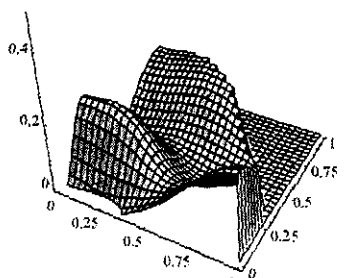


図12 圧延直角方向へ変形後(相当塑性ひずみ $\bar{\varepsilon}^P \approx 30.0\%$)

で極大値を示す。圧延直角方向については、圧延方向及び45度方向の中間程度の値となる。これは、高橋らの示した圧延方向に50%のひずみ圧延を施したAl材を供試材として用いた引張試験結果と同様な傾向を示しており、有限要素多結晶モデルを用いた計算としては良好な結果と言える。数値圧延前後の{111}極点図及び結晶方位分布関数による等高線極点図とその三次元分布を図10に示す。等高線極点図における白色部分は、従来指摘されている、関数値が負となる領域であり、結晶方位分布関数が常に零となる、もしくは、非負条件を考慮する必要があると考えられる。しかしながら、結晶方位分布関数は、極点図をよく近似しているといえる。次に、圧延方向及び圧延直角方向における変形後(相当塑性ひずみ $\bar{\epsilon}^p \approx 15.0\%$)の結晶方位分布関数による等高線極点図とその三次元分布を図11, 12にそれぞれ示す。それぞれ、単軸引張試験における解析結果と同様に、変形前に極密度のピーク値の高かった部分が、変形後には低くなり、引張軸方向側の極密度のピーク値が変形前に比べて高くなっていることが分かる。これは、変形により引張軸方向側に結晶が回転し、ピーク値の移動が生じていると考えられる。

6 結 言

- ① 試料対称性を有する試料について3回折面より作成した完全極点図とそれぞれ1回折面のみで作成した完全極点図を実測極点図と比較した結果、測定領域内($0^\circ \leq \alpha \leq 65^\circ$)ではほぼ一致した結果が得られたのに対して、未測定領域($65^\circ \leq \alpha \leq 90^\circ$)ではピークの位置、個数及び強度に顕著な違いがみられたが、3回折面より作成した完全極点図の方が実測極点図から得られる理想方位のピークと一致し、1回折面極点図に比べて信頼できるものであることが明らかとなった。
- ② 圧延方向に対し45度方向、15%ひずみを与える単軸引張試験を行い、その結果生じる結晶方位密度分布の変化を調べたところ、試料対称性の成立しない極点図が得られた。これに対し、本研究で展開した結晶方位分布関数を適用し完全極点図を作成したところ、非試料対称性の表現が可能となり、測定領域内($0^\circ \leq \alpha \leq 65^\circ$)で実測極点図との

一致が確認された。

- ③ 結晶方位分布関数の展開係数において、材料の変形とともに大きく変化する係数が存在することが分かった。これらは、変形とともに変化する塑性異方性主軸の回転に関連すると考えられ、さらなる検討が必要である。さらに、変形前後で極密度のピーク値が引張軸方向に顕著に見られる。
- ④ 典型的圧延集合組織の数値実験的単軸引張試験において、q値およびr値の変化は、圧延方向で極小値を示し、45度方向で極大値を示し、従来の計算結果と同様の結果が得られた。しかし、実材料から結晶方位分布関数を用いて有限要素多結晶体へ取り込む手法が確立されていないので、今後の課題である。

謝 辞

本研究は天田金属加工機械技術振興財団の平成10年度奨励研究助成を得て行われました。ここに、財団に対し深く感謝の意を表します。

参考文献

- 1) Hill, R.: *J. Mech. Phys. Solids*, **1**(1952) 19
- 2) Stören, S. & Rice, J.R.: *J. Mech. Phys. Solids*, **23-6**(1975) 421
- 3) Anand, L. & Kalidindi, S.R.: *Mechanics of Materials*, **17**(1994) 223
- 4) Roe, R.J.: *J. Appl. Phys.*, **36**(1965) 2024
- 5) Kallend, J.S., Kocks, U.F., Rollet, A.D. & Wenk, H.R.: *Materials Sci. and Eng.*, **A132**(1991) 1
- 6) 長島晋一: 集合組織, 丸善(1984)
- 7) Roe, R.J.: *J. Appl. Phys.*, **37**(1966) 2069
- 8) Bunge, H.J. & Haessner, F.: *J. Appl. Phys.*, **39**(1968) 5503
- 9) 井上博史, 稲数直次: 日本金属学会誌, **58-8**(1994) 892
- 10) Peirce, D., Asaro, R.J. & Needleman, A.: *Acta. Metall.*, **31**(1983) 1951
- 11) 福岡秀和, 戸田裕己, 平尾雅彦: 音弾性の基礎と応用, オーム社(1993)