

結晶塑性有限要素法によるマグネシウム合金板変形特性の解明

京都大学大学院エネルギー科学研究科 エネルギー応用科学専攻
准教授 浜 孝之
(平成 22 年度一般研究開発助成 AF-2010021)

Key words: マグネシウム合金板, 結晶塑性有限要素法, 繰り返し塑性変形

1. 緒言

マグネシウム (以下 Mg) は構造用金属としては最も軽量であり, その密度はアルミニウムの約 2/3, 鋼の約 1/4 である^{1,2)}. 地球環境問題が解決すべき喫緊の課題である昨今, Mg 合金は輸送機器の軽量化を促進する環境調和型材料として大きな期待を集めている. 最近では利用拡大を目的として Mg 合金板のプレス加工への適用が切望され, 多くの研究開発が展開されている³⁻⁵⁾. しかしながら遅々として実用化が進んでいないのが現状である.

その要因の一つとして, Mg 合金は他の構造用金属と比べて特徴的な変形挙動を示すことが挙げられる. Mg 合金板は引張変形-圧縮変形の非対称性^{6,7)}や除荷時の顕著な非線形挙動⁸⁻¹⁰⁾, 顕著な異方硬化挙動^{11,12)}など, これまでの構造用金属にはない変形特性を示す. これは Mg 合金が, 結晶レベルでの異方性が強い最密六方構造を有するためである.

微視的に見てみると, Mg 合金ではすべり系の種類によってその活動が大きく異なる. また, すべり系だけでなく双晶系の活動も塑性変形に大きな影響を及ぼす. そしてこれらのすべり系および双晶系の活動は集合組織に大きく依存して変化する. このような結晶レベルでの強い異方性の結果として生じる巨視的な変形特性を理解するためには, 結晶レベルの変形に基づくマルチスケールの視点からの検討が不可欠である. しかしながら, 初期集合組織からマクロな塑性変形特性を定量的に予測する手段がほとんど確立されていない現在では, 適切なプレス加工を行うのに十分な塑性変形特性の理解に至っていないのが現状である.

この問題に対して, 結晶レベルの変形から巨視的な変形挙動を予測できる結晶塑性有限要素法は非常に有効な手段である. 著者らは, Mg 合金の変形挙動を予測するための結晶塑性有限要素法解析プログラムの開発を進めてきた^{10,12)}. 前述のように Mg 合金の変形においては双晶の活動が重要であり, 結晶塑性有限要素法においてもその適切なモデル化が不可欠である¹³⁾. Mg 合金では, 一度活動 (形成) した双晶がその後反転負荷を受けることで消滅 (回復) することが知られているが, これまで双晶回復にも対応したモデルはほとんど提案されていなかった¹⁴⁾. そのため, プレス加工において重要な反転負荷を伴う負荷経路における変形特性を十分に予測することができないのが現状である.

そこで本研究では, 双晶回復モデルを新たに提案することで, 反転負荷を含む種々の負荷経路におけるマクロな変

形挙動を高精度に予測できる結晶塑性有限要素解析プログラムの開発を目的とする. またそれにより, Mg 合金板の繰り返し塑性変形下での変形特性をマルチスケールの視点に基づいて検討したのでその結果を報告する.

2. 結晶塑性有限要素法

2.1 基礎理論

本研究で用いた結晶塑性有限要素法を構成する基礎理論の概要を示す. その詳細については既発表文献(10), (12)を参照いただきたい.

アップデート・ラグランジェ形式の静解析有限要素法^{15,16)}にひずみ速度依存型の結晶塑性モデル^{17,18)}を導入した. 陽的な時間積分を行うため, rate tangent modulus 法¹⁷⁾を用いた. また陽的な時間積分に伴う内力と外力の不釣り合いの増加を防ぐため, r_{\min} 法¹⁹⁾を用いた.

各すべり系の活動は, シュミット則に基づくと仮定する. すべり系 α におけるすべり速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ には次式を仮定する.

$$\begin{aligned}\frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\dot{\gamma}_0} &= \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{\tau_Y^{(\alpha)}} \right|^{\frac{1}{m}} \text{sign}(\tau^{(\alpha)}), \\ \tau^{(\alpha)} &= s^{(\alpha)} \cdot \sigma \cdot m^{(\alpha)}, \\ \dot{\tau}_Y^{(\alpha)} &= \sum_{\beta} q_{\alpha\beta} h |\dot{\gamma}^{(\beta)}|\end{aligned}\quad (1)$$

ただし $\tau^{(\alpha)}$ は分解せん断応力, $\tau_Y^{(\alpha)}$ すべり抵抗, $\dot{\gamma}_0$ は参照すべり速度, m はひずみ速度感受性指数, $q_{\alpha\beta}$ は自己・潜在硬化係数である. 単位ベクトル $s^{(\alpha)}$ および $m^{(\alpha)}$ はすべり方向およびすべり面法線を表す. h は加工硬化率である.

繰り返し塑性変形では, 結晶レベルでも背応力を考慮することの重要性が指摘されている^{20,21)}. しかしながら, Mg 合金ではすべり系によって活動が大きく異なるため, すべり系ごとで個別に背応力の条件を決定することは極めて困難である¹⁰⁾. そこで本研究では, 簡単のため背応力は無視することとする.

2.2 すべり系

結晶塑性有限要素法では, 解析で考慮するすべり系・双晶系の適切な選択が重要である. マグネシウム合金に関する先行研究^{22,23)}に基づき, 本研究では最密六方晶における底面 $\langle a \rangle$ すべり系 (6 つ), 柱面 $\langle a \rangle$ すべり系 (3 つ), 錐面 $\langle 2\langle a \rangle + c \rangle$ すべり系 (3 つ), そして $\{10\bar{1}2\}$ 引張双晶系 (6 つ) を考慮した.

すべり系の種類に応じて、加工硬化率 h は以下の 2 種類の式で与える²²⁾。

$$h = h_0 \quad (2)$$

$$h = h_0 \left(1 - \frac{\tau_0}{\tau_\infty} \right) \exp \left(- \frac{h_0 \bar{\gamma}}{\tau_\infty} \right), \bar{\gamma} = \sum_\alpha \int |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| dt \quad (3)$$

底面すべり系には線形硬化則 (式(2)) を、また柱面すべり系および錐面-2 すべり系には Voce 則 (式(3)) を適用した。双晶のモデル化については次節で示す。

2.3 双晶変形のモデル化

双晶変形の形成・回復を結晶粒レベルでみると、**図 1** のようにレンズ状領域が拡大・縮小するように観察される。このとき双晶変形により格子回転したレンズ状領域と母相の境界は、端部を除いてほぼ母相の双晶面と一致すると考えられている²⁴⁾。これより、端部近傍を無視すれば、双晶境界面は双晶の形成・回復に関わらず常に母層の双晶面で構成されると仮定できる。

以上を踏まえると、双晶の形成・回復は以下のようにモデル化できる。すなわち、双晶境界面に相当する双晶面に引張せん断応力が作用することで双晶の形成が起こり、その後このせん断応力が圧縮に転じることで双晶の回復が起こると考える。このとき、当該双晶面そのものは双晶活動による結晶方位回転の影響を受けないと仮定する。この仮定は、結晶塑性有限要素法においては、 $\{10\bar{1}2\}$ 双晶系 (6 つ) は上述の双晶境界面を表すと考えて双晶回転の条件が満たされても双晶系は回転させないことに対応する。また簡単のため二次双晶は考慮せず、双晶回転後は双晶系の活動はできないとする。

以上を踏まえ、次のようなアルゴリズムを構築した。

双晶活動によって生じるせん断ひずみ速度は、すべり速度と同様に式(1)で与えられると仮定する。 $\{10\bar{1}2\}$ 双晶の極性を表すため、初期状態では $\tau^{(\alpha)} > 0$ (c 軸を伸張させる応力) の場合のみ双晶が形成しようと仮定する。双晶による格子回転の条件には、van Houtte が提案した確率論に基づくモデル¹³⁾を用いる。格子回転を表す直交テンソル $\mathbf{R}^{(\alpha)}$ は次式で与えられる。

$$\mathbf{R}^{(\alpha)} = 2\mathbf{m}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)} - \mathbf{I} \quad (4)$$

ただし \mathbf{I} は単位テンソル、 $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ は双晶系 α の双晶面単位法線ベクトルである。数値計算上の取扱いを簡便にするため、双晶の形成に伴ってわずかに加工硬化すると考える。そのときの加工硬化率 h には線形硬化則 (式(2)) を用いる。

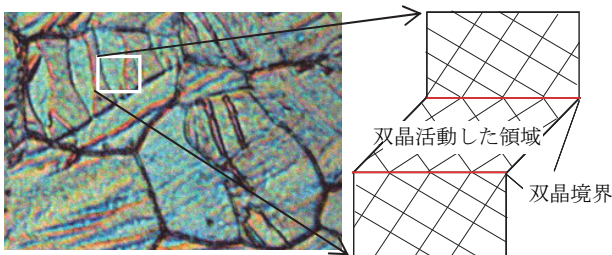


図 1 双晶活動の様子。

双晶の形成に伴って生じる双晶体積率 $f^{(\alpha)}$ を次式で定義する。

$$f^{(\alpha)} = \bar{\gamma}_{\text{twin}}^{(\alpha)} / \gamma_{\text{ref}} \quad (5)$$

ただし、 $\bar{\gamma}_{\text{twin}}^{(\alpha)}$ は双晶の形成による累積せん断ひずみを、 γ_{ref} は結晶粒全体が双晶変形したときのせん断ひずみである。双晶体積率は毎ステップ更新される。乱数を用いて 0.3 から 1.0 の間で体積率に対する閾値 $f_{\text{th}}^{(\alpha)}$ を双晶系ごとで決定し、毎ステップで $f^{(\alpha)}$ と $f_{\text{th}}^{(\alpha)}$ を比較する。そして $f^{(\alpha)} \geq f_{\text{th}}^{(\alpha)}$ が満足されたとき、この結晶粒は双晶系 α により双晶回転すると考え、双晶回転を表す直交テンソル (式(4)) を用いて各すべり系の方位を回転させる。ただし、前述のように双晶系そのものは双晶境界面を表すと考えるため、これらは回転させない。

$\tau^{(\alpha)} > 0$ でせん断ひずみが生じた双晶系については、その後 $\tau^{(\alpha)} < 0$ となることで双晶の回復過程に入ることできる。応力が反転するまでに発生した双晶形成による累積せん断ひずみを $\bar{\gamma}_{\text{twin}}^{\text{max}}$ とすると、回復過程でも $\bar{\gamma}_{\text{twin}}^{\text{max}}$ だけ変形が進行できると考える。当該結晶粒において応力反転前に双晶回転が生じている場合、回復過程で生じた累積せん断ひずみ $\bar{\gamma}_{\text{ut}}$ が $\bar{\gamma}_{\text{ut}} = \bar{\gamma}_{\text{twin}}^{\text{max}}$ を満たした時点で $(\mathbf{R}^{(\alpha)})^T$ により回復方向へ双晶回転をさせる。回復方向へ双晶回転した以降は、双晶回復によるせん断ひずみは発生できないと考える。一方当該結晶粒において応力反転前に双晶回転しなかった場合 (すなわち $f^{(\alpha)} \geq f_{\text{th}}^{(\alpha)}$ が満たされる前に応力反転した場合)、 $\bar{\gamma}_{\text{ut}} = \bar{\gamma}_{\text{twin}}^{\text{max}}$ が満足されても回復方向へ双晶回転させず、またそれ以降は双晶回復によるせん断ひずみも発生できないと考える。

先行研究^{6, 14)}より、双晶回復時の初期すべり抵抗は双晶形成時の初期すべり抵抗に比べて小さいことが指摘されている。そこで本研究では簡単のため、双晶回復時の初期すべり抵抗は実験結果に合わせて調整すべきパラメータとして取り扱うこととする。

以上の新しい双晶回復モデルを結晶塑性有限要素法プログラムに組み込んだ。

2.4 有限要素モデル

本解析では、立方体を 8 節点ソリッド要素 (選択低減積分) により各方向に 7 分割したモデル (**図 2**) を用いる。一要素内の 8 積分点全てで同じ初期方位を有すると定義して、343 の初期方位からなるモデルを想定する。Mayama らの手法²³⁾により **図 3** に示すような Mg 合金圧延板の底面集合組織を模擬した方位分布を作成し、各要素へ任意に与えた。

解析モデルでは、**図 2** の x 方向、 y 方向、 z 方向をそれぞれ圧延方向 (RD)、圧延直角方向 (TD)、板厚方向 (ND) と定義する。したがって、六方晶の c 軸は主として z 方向を向いている。本研究では、単軸負荷における変形挙動を考察する。そこで、 $x=0$, $y=0$, $z=0$ の各面に面对称の境界条件を与え、 $x=l$ の面に引張もしくは圧縮の微小な強制変位を与えた。

式(1)におけるひずみ速度敏感性指数および参照すべり

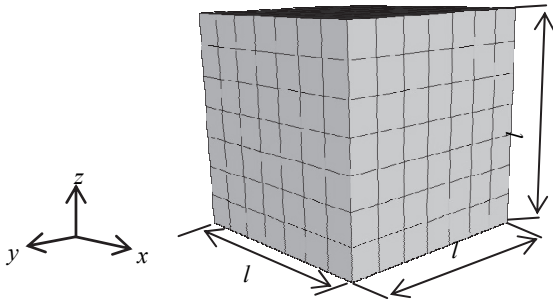


図2 解析で用いた有限要素モデル.

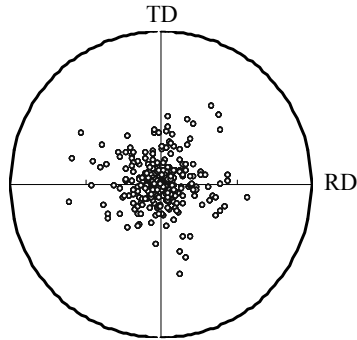


図3 解析で用いた初期結晶方位の(0001)極点図.

速度は, $m=0.02$, $\dot{\gamma}_0=0.001\text{s}^{-1}$ とした. m が解析結果へ及ぼす影響やその決定については, 文献(10)に詳述している. 自己・潜在硬化係数 q_{self} には文献値²²⁾を採用した. そのほか, 式(2)~(5)におけるパラメータの決定については次節にて示す.

3. 実験方法

式(2)~(5)におけるパラメータの決定および解析結果の妥当性検証のため, 市販の AZ31BMg 合金板 (板厚 0.8mm, 大阪富士工業) を用いて各種負荷経路での応力-ひずみ線図を実験により取得した. 実験で用いた試験片形状を図4に示す. 実験に先立ち, 供試材は試験片形状に加工後 350° , 1.5 時間の条件で焼鈍されている. 薄板材の面内反転負荷試験を行うため, クシ歯型の治具^{7, 25)}を用いて板厚方向に圧力を負荷することで座屈を防止した. 実験装置の模式図を図5に示す.

4. 結果と考察

4.1 解析結果の妥当性検証

本研究では, 一軸引張試験, 一軸圧縮試験, そして 2%

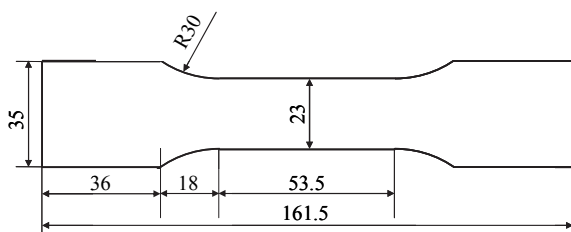


図4 実験で用いた試験片形状.

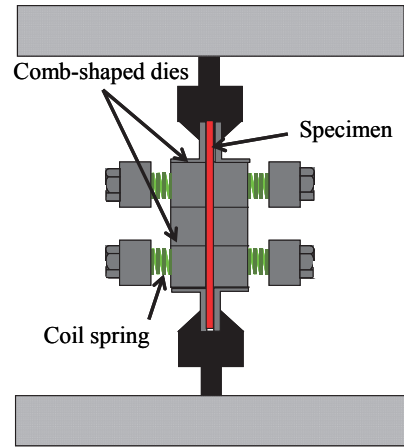


図5 実験装置の模式図.

圧縮後に反転負荷した試験 (以下, 2% Compression - Tension を略して 2%CT 試験などと表記) における応力-ひずみ線図が実験と良好に一致するように式(2)~(5)におけるパラメータを同定した. 表1に同定されたパラメータを, また図6, 図7に一軸引張試験および 2%CT 試験における実験結果および解析結果を示す. 一軸引張試験では, 解析結果はひずみ 10%という高ひずみ域まで実験結果と良好な一致を示している. また 2%CT 試験では, 反転負荷後に Mg 合金特有の 2 度の急激な加工硬化域 (S 字状の曲線) が見られ, この傾向は実験と解析で非常に良い一致が得られている. なお, 双晶回復のパラメータは, 二度目の急激な加工硬化が開始する近傍の応力レベルが実験と解析で一致するように同定した.

続いて, 表1のパラメータを用いて 2%TCT 試験および 4%CT 試験を行った結果を図8, 図9に示す. いずれの負荷経路においても, 圧縮後の引張時に S 字状の曲線が発現している様子も含めて解析結果は実験結果と良い一致を示している.

図10に図9 (4%CT 試験) の点 A および点 B における

表1 同定されたパラメータ.

| τ_0 | 底面 | 柱面 | 錐面-2 | 双晶形成 | 双晶回復 |
|---------------|----|-----|------|------|------|
| τ_∞ | 10 | 84 | 160 | 40 | 30 |
| h_0 | - | 260 | 360 | - | - |
| | 20 | 680 | 750 | 50 | 50 |
| n | - | - | - | 10 | 10 |

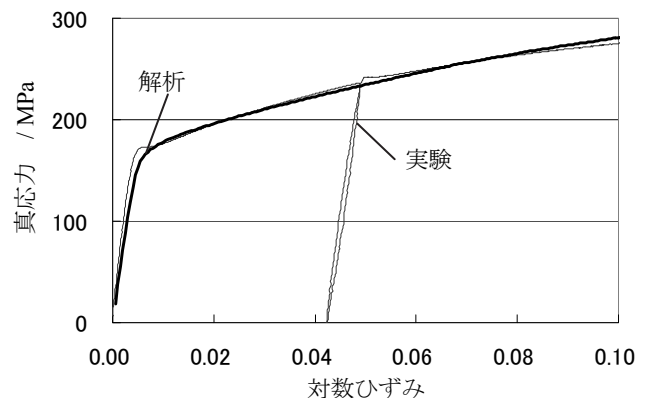


図6 一軸引張試験で得られた応力-ひずみ線図.

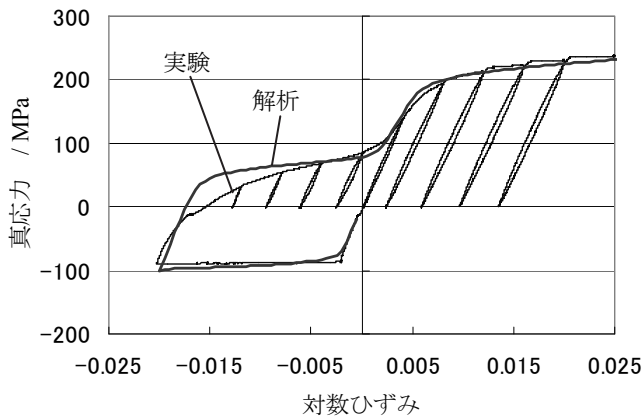


図7 2% CT 試験で得られた応力-ひずみ線図.

(0001) 極点図の解析結果を示す。圧縮変形時には双晶形成が活発であるため、点 A では双晶回転により多くの結晶粒が RD 方向に方位回転している。しかしながらその後反転負荷を受けると、双晶回復によって圧縮時に双晶回転した結晶粒が元の方位へ再回転する。その結果、点 B では初期方位 (図 3) とほぼ同じ方位分布となっている。この結果は、先行研究で示された実験結果⁶⁾と定性的に一致している。

以上の結果から、本研究で開発したプログラムにより種々の負荷経路下の応力-ひずみ線図を良好に予測し、またそのときの集合組織の発展も良好に予測できることが明らかとなった。これにより、提案した双晶モデルの妥当性が示された。

4.2 考察

前節で示したように、圧縮後の引張時には双晶回復により S 字状の応力-ひずみ曲線が発現することが解析でも予測された。しかしながら一方で、その詳細な変形メカニズムは明らかにされていない。そこでそのメカニズムを明らかにするため、4%CT 試験時の各すべり系および双晶系の活動を解析により調査した。各すべり系および双晶系の活動を表す指標として、次式で与えられる相対活動度 r_i を用いた。

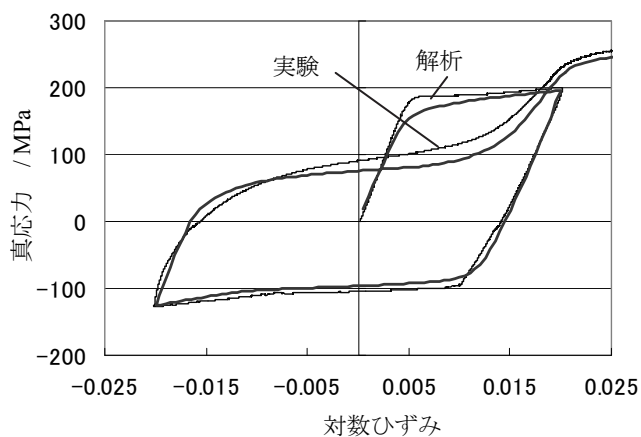


図8 2% TCT 試験で得られた応力-ひずみ線図.

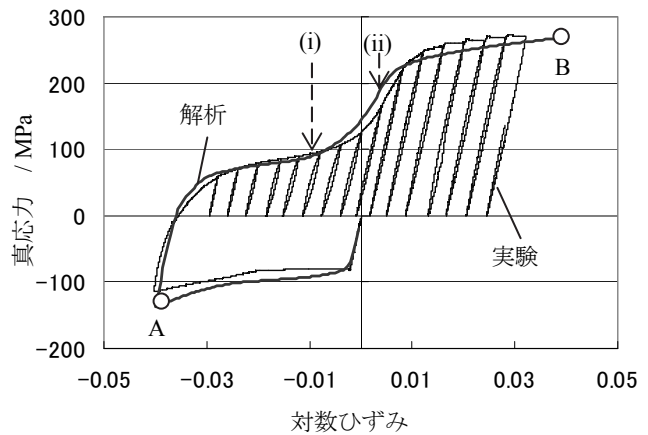


図9 4% CT 試験で得られた応力-ひずみ線図.

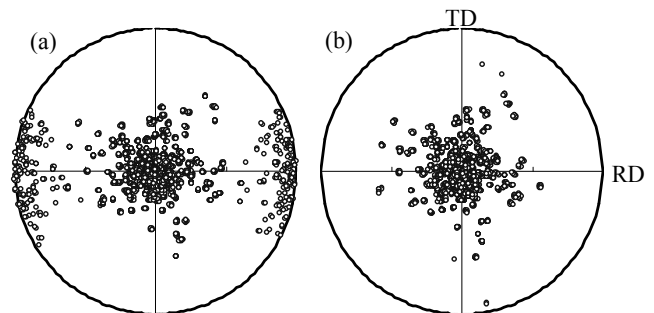


図10 4% CT 試験時の (0001) 極点図. (a) 点 A, (b) 点 B (図9 参照).

$$r_i = \frac{\sum_{n_i} \sum_k |\Delta\gamma^{(n,k)}|}{\sum_{n_i} \sum_j |\Delta\gamma^{(n,j)}|} \quad (6)$$

右辺の分子は各すべり系もしくは双晶系 i により生じた塑性ひずみ増分を全ての結晶粒について総和をとったものである。 k は各すべり系もしくは双晶系 i の数である。また分母は全てのすべり系および双晶系により生じた塑性ひずみ増分の総和であり、 j は全てのすべり系および双晶系の数である。なお、双晶の形成と回復は別々に評価した。参考のため、一軸引張変形時の相対活動度の推移を図 11 に示す。便宜上横軸には時間をとり、そのときのひずみは右側の縦軸に示している。塑性変形開始直後は底面すべり系の活動が支配的である。これは、他のすべり系および双晶系に比べて底面すべり系の臨界せん断応力が低いためである (表 1)。その後柱面すべり系の活動も活発となり、それ以降この傾向は持続される。

図 12 に 4%CT 試験における各すべり系および双晶系の相対活動度の推移を示す。圧縮変形開始直後は底面すべり系の活動が支配的であるが、その後もまもなく双晶が形成をはじめ。そしてやがて双晶の形成が支配的となり、その傾向は圧縮変形終了まで持続される。このとき、柱面すべり系もわずかに活動している。その後負荷方向が反転して引張変形に転じると、双晶形成と柱面すべり系はその活動を停止する。その一方で、双晶回復および底面すべり系の活動が活発になり、その傾向は応力-ひずみ線図において

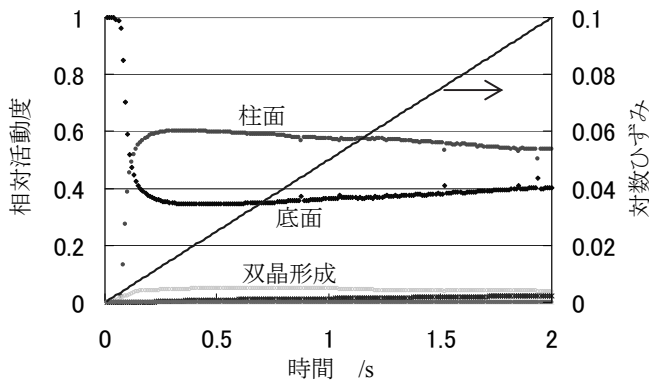


図 11 一軸引張中の相対活動度の推移。

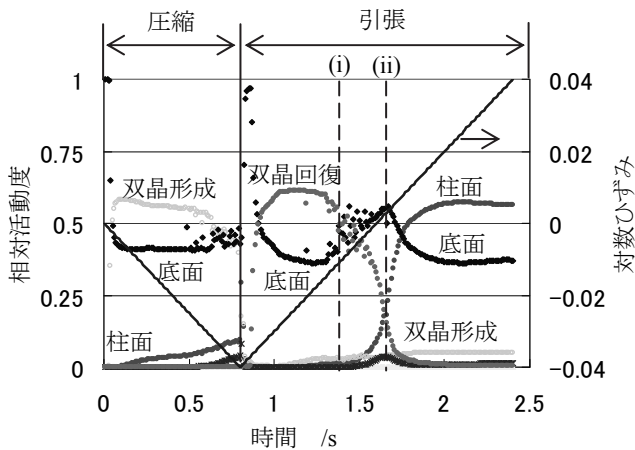


図 12 4%CT 試験中の相対活動度の推移。

二度目の急激な加工硬化が始まる (図 12 中の(i)) まで持続される。この結果より、二度目の急激な加工硬化が開始するまでの変形は、双晶回復と底面すべり系の活動に支配されていることがわかる。

その後二度目の急激な加工硬化が始まると、双晶回復の活動度が急激に低下する。そして加工硬化率が低下し始める近傍 (図 12 中の(ii)) で双晶回復の活動がほぼゼロになり、それに代わって柱面すべり系の活動が活発になる。そしてそれ以降は柱面すべり系と底面すべり系の活動が支配的である。加工硬化率が低下した以降の応力-ひずみ線図および相対活動度は、図 6 および図 11 に示す一軸引張試験時の結果と非常に良く似ていることがわかる。この結果より、二度目の急激な加工硬化が開始した以降の変形は以下のように説明できる。すなわち、二度目の急激な加工硬化は双晶回復の活動が低下する一方で柱面すべり系の活動が活発になる遷移領域であり、その後加工硬化率が低下した以降の変形は微視的・巨視的ともに通常の一軸引張変形と同様である。

5. 結言

本研究では、反転負荷を含む種々の負荷経路におけるマグネシウム合金板のマクロな変形挙動を高精度に予測できる結晶塑性有限要素解析プログラムを開発した。また、開発したプログラムを用いて反転負荷時の変形メカニズムを検討した。本研究で得られた知見を以下に示す。

(1) van Houtte が提案した双晶モデル¹³⁾に基づいて、新しい

双晶回復モデルを提案した。反転負荷を伴う種々の負荷経路における応力-ひずみ曲線や集合組織の発展において、解析結果は実験結果と良い一致を示し、提案したモデルの妥当性が示された。

(2) 各すべり系および双晶系の相対活動度を用いて、反転負荷時の変形メカニズムをマルチスケールの視点から検討した。その結果、圧縮後の引張変形時に見られる S 字状の応力-ひずみ曲線は次のようなメカニズムにより発現することが明らかとなった。すなわち、応力が反転した直後から双晶回復の活動が活発になり、加工硬化率が非常に小さくなる。その後双晶回復の活動度が急激に低下するのに伴い、柱面すべり系の活動が急激に活発になる。その結果、二度目の急激な加工硬化が生じる。そして柱面すべり系の活動度の変化が小さくなると応力の変化も小さくなり、それ以降は微視的・巨視的ともに一軸引張時と同様の変形を呈する。

謝辞

本研究を遂行するに当たり、研究助成をいただいた公益財団法人天田財団に深甚なる謝意を表する。

参考文献

- 1) B.L. Mordike, and T. Ebert, *Materials Science and Engineering A*, 302 (2001), 37-45.
- 2) M.K. Kulekci, *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 39 (2008), 851-865.
- 3) T. Hama, Y. Kariyazaki, K. Ochi, H. Fujimoto, H. Takuda, *Materials Transactions*, 51-4 (2010), 685-693.
- 4) Z. Meng, S. Huang, J. Hu, W. Huang, Z. Xia, *Journal of Materials Processing Technology*, 211 (2011), 863-867.
- 5) M. Nebebe Mekonen, D. Steglich, J. Bohlen, D. Letzig, J. Mosler, *Materials Science and Engineering A*, 540 (2012), 174-186.
- 6) X.Y. Lou, M. Li, R.K. Boger, S.R. Agnew, R.H. Wagoner, *International Journal of Plasticity*, 23 (2007), 44-86.
- 7) T. Hama, Y. Kariyazaki, N. Hosokawa, H. Fujimoto, H. Takuda, *Materials Science and Engineering A*, 551 (2012), 209-217.
- 8) C.H. Cáceres, T. Sumitomo, M. Veidt, *Acta Materialia*, 51 (2003), 6211-6218.
- 9) G.E. Mann T. Sumitomo, C.H. Cáceres, J.R. Griffiths, *Materials Science and Engineering A*, 456 (2007), 138-146.
- 10) T. Hama, H. Takuda, *International Journal of Plasticity*, 27 (2011), 1072-1092.
- 11) M.O. Andar, T. Kuwabara, D. Steglich, *Materials Science and Engineering A*, 549 (2012), 82-92.
- 12) T. Hama, H. Takuda, *Computational Materials Science*, 51 (2012), 156-164.
- 13) P. Van Houtte, *Acta Metallurgica*, 26 (1978), 591-604.
- 14) G. Proust, C.N. Tomé, A. Jain, S.R. Agnew, *International Journal of Plasticity*, 25 (2009), 861-880.
- 15) M. Kawka, A. Makinouchi, *Journal of Materials Processing Technology*, 50 (1995), 105-115.
- 16) T. Hama, T. Nagata, C. Teodosiu, A. Makinouchi, H. Takuda,

- International Journal of Mechanical Sciences, 50 (2008), 175-192.
- 17) D. Pierce, R.J. Asaro, A. Needleman, Acta Metallurgica, 31 (1983), 1951-1976.
- 18) R.J. Asaro, A. Needleman, Acta Metallurgica, 33 (1985), 923-953.
- 19) Y. Yamada, N. Yoshimura, T. Sakurai, International Journal of Mechanical Sciences, 10 (1968), 343-54.
- 20) J. Harder, International Journal of Plasticity, 15 (1999), 21) E. Nakamachi, N.N. Tam, H. Morimoto, International Journal of Plasticity, 23 (2007), 450-489.
- 22) S. Graff, W. Brocks, D. Steglich, International Journal of Plasticity, 23 (2007), 1957-1978.
- 23) T. Mayama, K. Aizawa, Y. Tadano, M. Kuroda, Computational Materials Science, 47 (2009), 448-455.
- 24) 幸田, 改訂金属物理学序論, コロナ社, 1973.
- 25) T. Kuwabara, Y. Kumano, J. Ziegelheim, I. Kurosaki, International Journal of Plasticity, 25 (2009), 1759-1776.