T. Hama

結晶塑性有限要素法によるマグネシウム合金板の変形挙動のモデリング

浜　孝之 *

1．緒言

マグネシウム（以下，Mg）合金は低密度材料であり，また比強度，比剛性が高いという特徴を有する[1, 2]．そのため，輸送機器の軽量化を促進する環境調和型材料として期待されている．一方，構造部材はプレス加工により成形される場合が多いが， Mg 合金板は常温では張出し加工性や絞り加工性が著しく低く，またスプリングバックも大きいなど，プレス成形性が低いことが知られている[3-5]．その要因の一つとして，引張—圧縮非対称性[6-9]や除荷時の顕著な非線形挙動[10-13]，顕著な異方硬化挙動[14, 15]など極めて特徴的な塑性変形挙動を示すことが挙げられる．しかしながらその詳細はいまだ十分に明らかにされておらず，Mg 合金板を幅広く利用する上で障害となっている．

Mg 合金板の特徴的な塑性変形挙動は，六方晶における強い結晶異方性に起因する．常温では，主すべり系である底面すべり系に比べて非底面すべり系の臨界分解せん断応力(Critical Resolved Shear Stress, CRSS)が著しく大きく，活動が容易ではない．そのため塑性変形には，すべりに加えて CRSS の小さい$\{10\bar{1}2\}$双晶も大きな役割を担うこととなる．しかしながら双晶には変形の極性があるため，変形モードによってその活動の大きさは異なる．さらに，通常プレス加工で用いられる圧延板では，六方晶の c 軸が板厚方向に配向した底面集合組織が形成され，変形異方性を増大させる要因となっている．

このような結晶粒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には，結晶塑性モデルの適用が有効な手段である．著者らは，Mg 合金の変形挙動の高精度な予測を目的とした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[9, 12, 13, 15, 16]．そこで本稿では，本研究で開発してきた結晶塑性解析技術の概要とそれによるいくつかの解析事例，また解析を通して変形メカニズムを考察した結果を報告する．

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[9, 12, 13, 15, 16]を参照いただきたい．

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[17, 18]．

$$\frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\dot{\gamma}_0} = \left|\frac{\tau^{(\alpha)}}{\tau_{\mathrm{Y}}^{(\alpha)}}\right|^{\frac{1}{m}} \mathrm{sign}\left(\tau^{(\alpha)}\right), \quad \tau^{(\alpha)} = \boldsymbol{s}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{m}^{(\alpha)}, \qquad \dot{\tau}_{\mathrm{Y}}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} q_{\alpha\beta}\, h \left|\dot{\gamma}^{(\beta)}\right| \tag{1}$$

ただし$\tau^{(\alpha)}$は分解せん断応力，$\tau_{\mathrm{Y}}^{(\alpha)}$はすべり抵抗，$\dot{\gamma}_0$は参照すべり速度，$m$はひずみ速度敏感性指数， $q_{\alpha\beta}$は自己および潜在硬化係数である．単位ベクトル$\boldsymbol{s}^{(\alpha)}$および$\boldsymbol{m}^{(\alpha)}$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．

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[19, 20]に基づき，本研究では最密六方晶における底面<a>すべり系（6 つ），柱面<a>すべり系（3 つ），錐面-2<c + a>すべり系（3 つ），そして$\{10\bar{1}2\}\langle 10\bar{1}\bar{1}\rangle$引張双晶系（6 つ）を考慮した．なお Mg では，変形後期に$\{10\bar{1}1\}\langle 10\bar{1}\bar{2}\rangle$圧縮双晶が形成することが報告されている[21]が，本稿では一様伸びの範囲内での変形を対象とするため，以下では$\{10\bar{1}1\}$双晶は無視する．

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[19]．

$$h = h_0 \tag{2}$$

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

τ_0は CRSS を，またh_0およびτ_∞は加工硬化を表すパラメータである．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

本研究では，van Houtte の提案した手法[22]に基づいて双晶の形成・回復を以下のようにモデル化した[13, 23]．まず，双晶面にせん断応力が作用することで双晶の形成が起こ

* 京都大学　エネルギー科学研究科エネルギー応用科学専攻　准教授

ると考える．双晶系αの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．$\{10\bar{1}2\}$双晶の変形の極性を表すため，初期状態では$\tau^{(\alpha)} > 0$，すなわち c 軸を伸張させる方向に応力が作用する場合のみ双晶が形成しうると仮定する．双晶系α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．

$$f^{(\alpha)} = \bar{\gamma}^{(\alpha)}_{\mathrm{twin}} / \gamma_{\mathrm{ref}} \tag{4}$$

ただし，$\bar{\gamma}^{(\alpha)}_{\mathrm{twin}}$ 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．解析に先だって結晶粒ごとに乱数を用いて体積率に対する閾値 $f^{(\alpha)}_{\mathrm{th}}$ を定めておき，毎ステップで $f^{(\alpha)}$ と $f^{(\alpha)}_{\mathrm{th}}$ を比較する．そして $f^{(\alpha)} = f^{(\alpha)}_{\mathrm{th}}$ が満足されたとき，この結晶粒を次式の双晶回転テンソルを用いて双晶系αにより方位回転させる．

$$\boldsymbol{R}^{tw} = 2\boldsymbol{m}^{(\alpha)} \otimes \boldsymbol{m}^{(\alpha)} - \boldsymbol{I} \tag{5}$$

ただし $\boldsymbol{I}$ は単位テンソル，$\boldsymbol{m}^{(\alpha)}$ は双晶系αの双晶面単位法線ベクトルである．塑性変形の進展に伴って双晶領域が拡大する様子を表すため，双晶の進展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．

$\tau^{(\alpha)} > 0$ 下で双晶形成した履歴のある双晶系αでは，その後圧縮の分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$が作用することで双晶回復が生じると仮定する．すなわち，式(1)，式(2)に基づいて双晶形成時と逆向きにせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}_{\mathrm{dtw}}$ が発生すると考える．$\tau^{(\alpha)} > 0$（双晶形成時）に発生した累積せん断ひずみを $\bar{\gamma}^{(\alpha)max}_{\mathrm{tw}}$とすると，双晶回復は次式が満たされるまで活動できると仮定する．

$$\bar{\gamma}^{(\alpha)}_{\mathrm{dtw}} = \int \dot{\gamma}^{(\alpha)}_{\mathrm{dtw}}\, \mathrm{d}t = \bar{\gamma}^{(\alpha)max}_{\mathrm{tw}} \tag{6}$$

$\tau^{(\alpha)} > 0$ 下で方位回転した履歴がある場合は，式(6)が満たされた時点でこの結晶粒を回転テンソル $\boldsymbol{R}^{tw\mathrm{T}}$ を用いて形成時とは逆方向へ方位回転させる．

先行研究[6, 24]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っている．

以上の結晶塑性モデルをアップデート・ラグランジェ形式の静解析有限要素法[25, 26]に導入した．陽的な時間積分を行うため，rate tangent modulus 法[27]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，$\mathrm{r_{min}}$ 法[28]を用いた．

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 10 分割したモデルを用いる．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，1000 の初期方位からなるモデルを想定する．初期方位は，変形前の Mg 合金板を EBSD により測定した結果から決定した．初期結晶方位分布の一例を図 1[16]に示す．

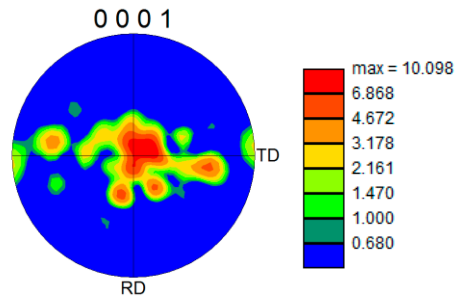

図 1　初期の極点図[16]

結晶塑性解析を行うにあたり，式(1)～(4)などで用いられる材料パラメータをすべり系/双晶系ごとに予め決定する必要がある．詳細は省略するが，本研究では Mg 合金圧延板を対象として，一軸引張及び一軸圧縮時の応力－ひずみ曲線，一軸引張時の r 値の発展，また反転負荷時の応力－ひずみ曲線を用いて変形機構ごとにパラメータを決定する手法を提案した[29]．同定されたパラメータの一例を表 1[29]に示す．

表 1　同定されたパラメータの一例[29]

	底面	柱面	錐面<c+a>	双晶
τ_0 /MPa	10	100	100	45
τ_∞ /MPa	-	726	365	-
h_0 /MPa	30	950	530	60

3．結果と考察

3.1　単軸負荷時の変形挙動[16]

本節では，Mg 合金圧延板における種々の負荷経路での変形挙動を結晶塑性解析により予測した事例を示す．以下で示す実験結果は，特に断りのない限り板厚 1mm の AZ31Mg 合金圧延板を用いて得られた結果である．

図 2 に，引張，圧縮，圧縮から引張への反転負荷時の応力－ひずみ曲線と引張時の r 値の発展を示す．いずれも圧延方向へ負荷した場合の結果である．上述のように，これらの実験結果を用いてパラメータ同定を行った．いずれの解析結果も実験結果を良く再現できており，良好にパラメータが同定されていることがわかる．

ここで注目すべき点として，顕著な引張－圧縮の非対称性が見られることと，応力反転後には S 字状の加工硬化挙動が発現していることが挙げられる．このように特徴的な加工硬化挙動を示すメカニズムは，次のように説明できる．図 3 に引張時および反転負荷時の相対活動度の推移を示す．相対活動度は各すべり系/双晶系の活動の大きさを相対的に評価する指標であり，すべり系/双晶系 i の相対活動度 r_i は次式で定義される．

$$r_i = \frac{\sum_n^{n_s} \sum_k \left|\Delta\gamma^{(n,k)}\right|}{\sum_n^{n_s} \sum_j \left|\Delta\gamma^{(n,j)}\right|} \tag{7}$$

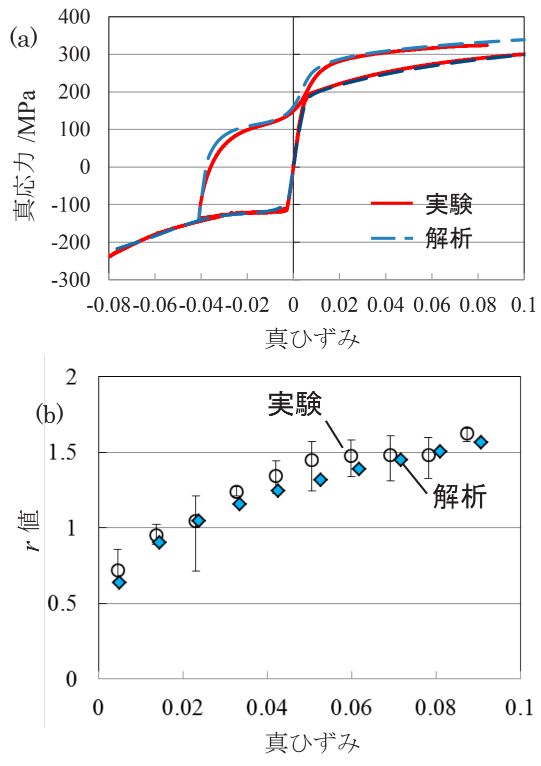

図 2　単軸負荷時の変形挙動 [16]．(a)応力―ひずみ曲線，(b)r 値の発展．

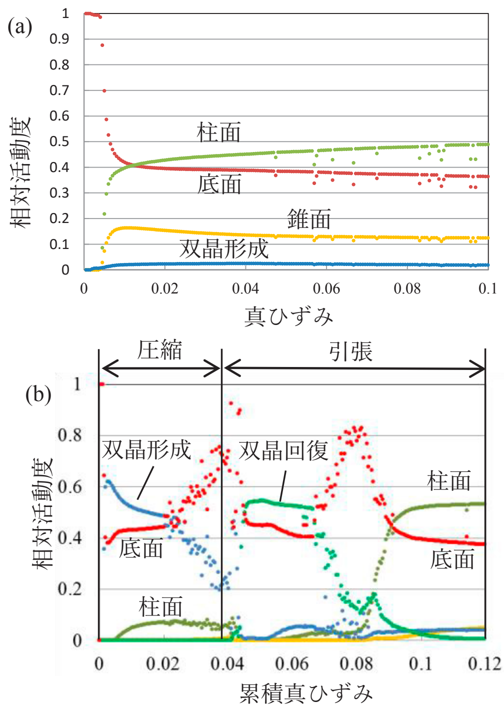

図 3　相対活動度の推移 [16]．(a)引張負荷，(b)圧縮から引張への反転負荷．

ただし k はすべり系/双晶系 i の数を，j は全てのすべり系および双晶系の数を，また n_s は結晶粒の数を表す．図 3(a)と図 3(b)の圧縮時（反転前）の結果から，引張時には底面すべりおよび柱面すべりの活動が支配的であるのに対して，圧縮時には底面すべりと引張双晶の形成が支配的であることがわかる．これは，Mg 合金圧延板では強い底面集合組織が発達しているため，圧縮時には c 軸方向に引張応力が作用する結晶粒が多数存在するためである．この結果から，柱面すべりに比べて引張双晶の CRSS が低いため（表 1），双晶の活動が活発な圧縮時の応力レベルが引張時に比べて低くなったことが示唆される．一方，図 3(b)の反転後の結果から，引張へ反転直後には双晶回復が支配的であるのに対して，累積真ひずみ 8%付近で双晶回復の活動が急速に低下し，代わりに柱面すべりの活動が活発になる．これは，圧縮時に形成された双晶が累積真ひずみ 8%付近でほぼ全て回復し，単調引張への変形モードに移行したためである．このとき，双晶回復に比べて柱面すべりの CRSS が高いため（表 1），支配的な変形機構の急激な遷移に伴って応力レベルが急激に高まり，S 字状の加工硬化挙動が発現したと考えられる．ここで強調したいのは，結晶塑性モデルを用いるとこれらの複雑な挙動を特段の仮定を設けることなく自然に予測できる点であり，これが従来の現象論モデルでは得がたい大きな強みである．

3.2　二段階負荷挙動 [16]

板材成形中，板材は複雑なひずみ経路変化を受ける場合が多い．したがって，材料モデルにはひずみ経路変化を伴う種々の変形挙動を予測できることが求められる．その一例として，図 4 に示すような二段階の負荷を受けた場合の変形挙動を調査した事例を紹介する．ここでは，一次経路として圧延方向に 6%の引張ひずみあるいは圧縮ひずみを与え，その後二次経路として種々の方向へ 10%の引張ひずみを与えた．

実験および解析から得られた二次経路における応力－ひずみ線図を図 5 に示す．引張予ひずみを与えた場合，負荷角度差θが大きくなるにつれて応力レベルが低下している．またθ＝0°　では降伏後に急激に加工硬化率の変化が生じているのに対して，それ以外の条件では降伏後緩やかに加工硬化率が変化している．このように，一定の面内異方性は見られるものの，その程度は顕著ではない．一方，圧縮予ひずみを与えた場合，極めて顕著な面内異方性が発現している．反転負荷に対応するθ=0°　では，図 2(a)と同様に明らかな S 字状の加工硬化挙動が発現している．一方，S 字の程度はθが大きくなるにつれて弱まり，θ=60°，90°では全く見られない．以上の加工硬化挙動は，結晶塑性解析により良好に予測できている．

予圧縮材で見られる加工硬化挙動の面内異方性は，次のように説明できる．図 6 に，圧縮予ひずみを与えた場合の二次経路前後での(0001)極点図を示す．初期では強い底面集合組織が形成されているのに対して（図 1），二次経路負荷前には，圧延方向に強いピークが生じている．これは，図 3 の相対活動度からも明らかなように，一次経路（圧縮）で引張双晶が形成されたためである．二次経路負荷後には，θ=0°では圧延方向のピークが消失してほぼ初期と同様の

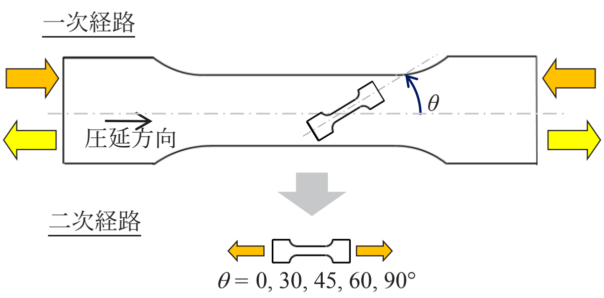

図 4　二段階負荷試験の模式図.

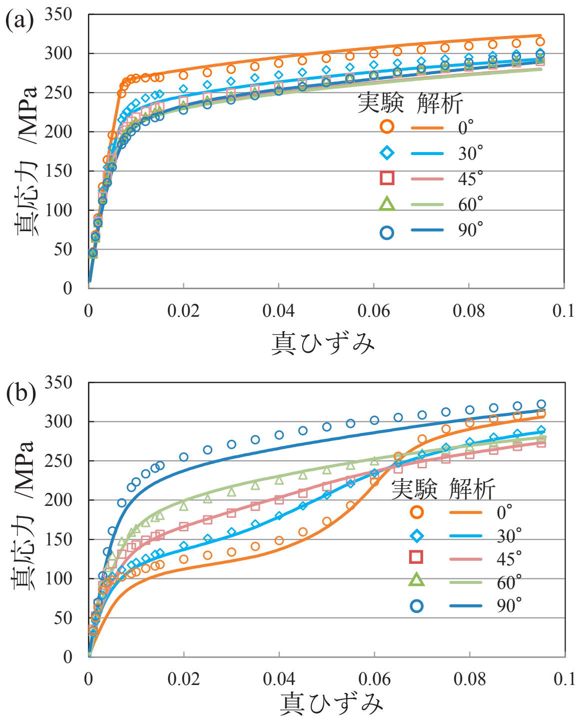

図 5　予変形を受けた Mg 合金圧延板における応力―ひずみ線図 [16]．(a)予引張材，(b)予圧縮材.

集合組織に戻っている一方で，θが大きくなるにつれて圧延方向に残存するピーク強度が高まっている．これは，θ=0°では双晶回復が活発であるのに対して，θが大きくなるにつれて双晶回復の活動度が低下することを示す. 以上の集合組織発展は，解析でも良好に予測できている．この結果から，予圧縮材で見られる顕著な面内異方性は，負荷角度差によって双晶回復の活動度が大きく異なることが原因であると示唆される.

3. 3　除荷時の非線形挙動 [12)]

Mg 合金では，図 7 に示すように除荷時に顕著な非線形挙動を示すことが知られている．除荷時の挙動は，板材成形における主要な不良現象の一つであるスプリングバックに大きな影響を及ぼすことから，近年その適切なモデル化が求められている．古典的な塑性力学では，塑性変形が生じた金属材料が除荷を受けると弾性状態に戻り，その時の応力ーひずみ関係もほぼヤング率の傾きで線形的に推

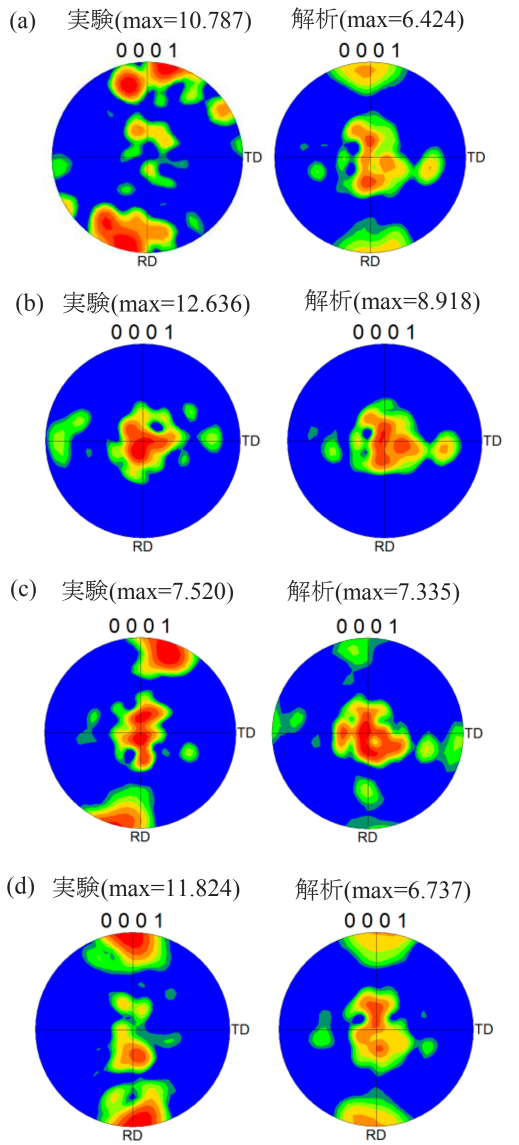

図 6　予圧縮材における二次経路前後の極点図 [16)]. (a)二次経路負荷前, (b) θ=0°　で二次経路負荷後, (c) θ=45°　で二次経路負荷後，(d)θ=90°　で二次経路負荷後.

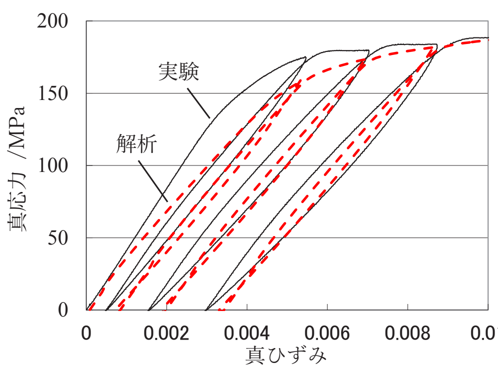

図 7　繰り返し引張－除荷を受ける Mg 合金圧延板の応力－ひずみ線図 [12)].

移すると考える．したがって古典的な塑性力学の枠組みで除荷時の非線形挙動をモデル化しようとすると，非線形挙動が生じることを予め仮定する必要がある．一方，結晶塑性モデルを用いると，特段の仮定をおくことなく除荷時の非線形挙動を良好に再現することができる（図 7）．詳細な結果は省略するが，解析より，除荷時の非線形挙動は次のようなメカニズムから説明できることが示されている．引張変形中は柱面すべりの活動が活発なため（図 3(a)），負荷時の応力レベルは柱面すべりのすべり抵抗によって支配される．その後巨視的な除荷に転じると，柱面すべりに比べてすべり抵抗が著しく低い底面すべりにとっては巨視的な除荷中であっても十分活動しうる程度の分解せん断応力が作用する．その結果，除荷時であっても底面すべりが活動し，非線形な応力挙動が発現したと考えられる．

3.4　鋳造板への適用 [30)]

前節までは，全て圧延板を対象としていた．結晶塑性解析の大きな魅力の一つは，初期結晶方位分布の違いが材料の応答に及ぼす影響を数値的に予測できる点である．そこで本節では，ランダムな結晶方位分布を持つ鋳造板の変形挙動を結晶塑性解析により予測した事例を紹介する．実験には，AZ31Mg 合金のインゴットから切り出した厚さ 1mm の板状試験片を用いた．

解析では，各要素に対してランダムに初期結晶方位を割り当てた．ところで，2.4 節で述べたパラメータ同定法は圧延板を想定しており，鋳造板には適用できない．そこで，次の 2 点を仮定してパラメータを決定した．(a)圧延板で同定されたパラメータは，鋳造板にも適用可能である，(b)圧延板と鋳造板での結晶粒径の違いを考慮するため，CRSS に対して Hall-Petch 則が成り立つと仮定し，文献 [31)] で示された Hall-Petch パラメータを用いて CRSS を調整する．

引張および圧縮時の応力－ひずみ曲線を図 8(a)に示す．なお，引張と圧縮の結果を直接比較するため，両軸ともに絶対値で示している．圧縮時に比べて引張時の方が応力レベルが高く，鋳造板においても引張-圧縮の非対称性が見られる．またこの非対称性は，解析でも良好に予測できている．図 8(b)に，引張から圧縮へ，および圧縮から引張への反転負荷時の応力－ひずみ曲線を示す．鋳造板においてもひずみ経路依存性が見られ，圧縮から引張へ反転した場合は反転後に緩やかな S 字状の加工硬化挙動が見られるのに対して，引張から圧縮へ反転した場合はそのような傾向は見られず，ほぼ線形的に推移している．以上のひずみ経路依存性は解析でも良好に予測できている．解析結果から，引張―圧縮の非対称性やひずみ経路依存性は，鋳造板においても引張負荷下と圧縮負荷下で双晶活動度が異なることが要因であると示唆されている．

4．まとめ

本稿では，筆者らの開発した Mg 合金に対する結晶塑性有限要素法解析技術とそれを用いたいくつかの解析事例を紹介した．結晶粒レベルの微視的変形を適切にモデル化すれば，多様かつ複雑な巨視的変形挙動を特段の仮定を設けることなく良好に予測できることを示した．また，微視的な変形が巨視的な変形に及ぼす影響を直接読み解くことができるのも大きな魅力であり，変形メカニズムの理解にも大いに役立つことを示した．一方，本解析技術を実用的に用いるためには，パラメータ同定の問題や定量的な予測精度の向上など，多くの問題が残されており，その解決が今後の課題である．

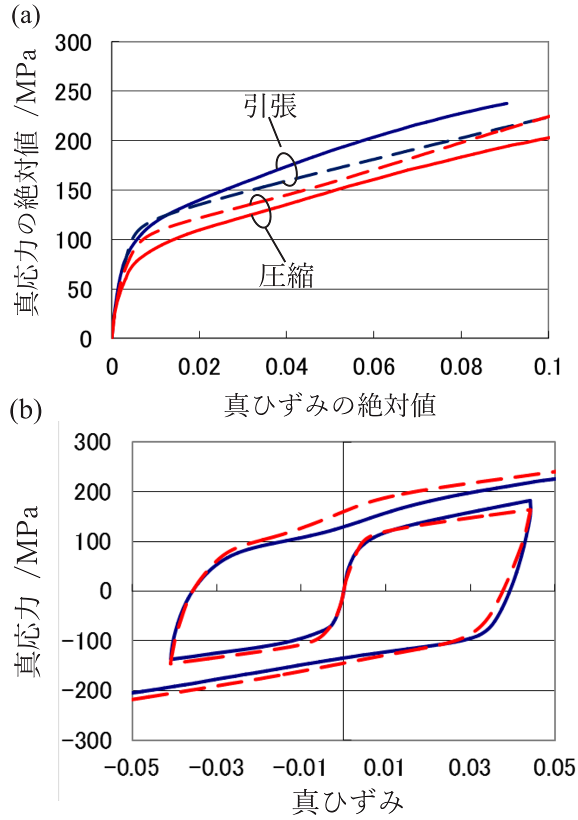

図 8　Mg 合金鋳造板の応力－ひずみ線図 [30)]．(a)圧縮および引張，(b)反転負荷．実線は実験結果，破線は解析結果を表す．

謝　辞

本研究は，公益財団法人天田財団からの一般研究助成ならびに科学研究費により実施した研究に基づいていることを付記するとともに，同財団に感謝いたします．

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) T. Hama, H. Nagao, Y. Kuchinomachi, Takuda, H., Materials Science and Engineering A, 591 (2014), 69-77.

9) T. Hama, T. Suzuki, S. Hatakeyama, H. Fujimoto, H. Takuda, Materials Science & Engineering A, 725 (2018), 8-18.

10) C.H. Cáceres, T. Sumitomo, M. Veidt, Acta Materialia, 51 (2003), 6211-6218.

11) G.E. Mann T. Sumitomo, C.H. Cáceres, J.R. Griffiths, 1aterials Science and Engineering A, 456 (2007), 138-146.

12) T. Hama, H. Takuda, International Journal of Plasticity, 27 (2011), 1072-1092.

13) T. Hama, N. Kitamura, H. Takuda, Materials Science and Engineering A, 583 (2013), 232–241.

14) M.O. Andar, T. Kuwabara, D. Steglich, Materials Science and Engineering A, 549 (2012), 82-92.

15) T. Hama, H. Takuda, Computational Materials Science, 51 (2012), 156-164.

16) T. Hama, Y. Tanaka, M. Uratani, H. Takuda, International Journal of Plasticity, 82 (2016), 283-304.

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) S. Graff, W. Brocks, D. Steglich, International Journal of Plasticity, 23 (2007), 1957-1978.

20) T. Mayama, K. Aizawa, Y. Tadano, M. Kuroda, Computational Materials Science, 47 (2009), 448-455.

21) J. Koike, Metallurgical Materials Transactions A, 36 (2005), 1689–1696.

22) P. Van Houtte, Acta Metallurgica, 26 (1978), 591-604.

23) T. Hama, H. Takuda, Steel Research International, Special Edition, (2012), 1115-1118.

24) G. Proust, C.N. Tomé, A. Jain, S.R. Agnew, International Journal of Plasticity, 25 (2009), 861-880.

25) M. Kawka, A. Makinouchi, Journal of Materials Processing Technology, 50 (1995), 105-115.

26) T. Hama, T. Nagata, C. Teodosiu, A. Makinouchi, H. Takuda, International Journal of Mechanical Sciences, 50 (2008), 175-192.

27) D. Peirce, C.F. Shih, A. Needleman, Computers & Structures, 18 (1984), 875-887.

28) Y. Yamada, N. Yoshimura, T. Sakurai, International Journal of Mechanical Sciences, 10 (1968), 343-54.

29) T. Hama, N. Hosokawa, H. Takuda, Proceedings of the 9th NUMISHEET, (2014), 692–695.

30) T. Hama, T. Mayama, H. Takuda, The Romanian Journal of Technical Sciences-Applied Mechanics, 60 (2015), 16 pages.

31) 中浦祐典，渡部晶，大堀紘一，軽金属，58-1(2008), 22-26.