

# 引張り変形下における対称双結晶マグネシウムの不均質変形解析

熊本大学 ○眞山 剛 北見工業大学 大橋 鉄也 九州大学 東田 賢二

## Heterogeneous deformation analysis of symmetric bi-crystal magnesium during tensile loading

Tsuyoshi MAYAMA, Tetsuya OHASHI and Kenji HIGASHIDA

### 1 緒 言

マグネシウム合金は軽量であることから各種携帯機器の筐体に適用されている。さらに自動車をはじめとする輸送機器の構造部材として使用することによりエネルギー効率を向上させる試みも盛んである。ところで最近、長周期積層構造という新規な原子構造を含むマグネシウム合金が開発され<sup>1)</sup>、強度と延性が従来のマグネシウム合金に比べて優れた材料として注目を集めている。しかしながら、こうした力学特性を発現する微視的機構は十分に解明されていない。本研究は結晶塑性有限要素法により長周期積層構造を含むマグネシウム合金の強化メカニズムを解明するための基礎的研究として、最密六方晶の結晶塑性有限要素解析手法を構築した。さらに本手法を単結晶および対称双結晶マグネシウムの引張り変形に適用し、臨界分解せん断応力(CRSS)がすべり系毎に等価ではないことによる、すべり系の活性化および転位蓄積挙動の結晶方位依存性を検討した。

### 2 結晶塑性有限要素解析手法

本解析では、大橋により開発された結晶塑性有限要素解析システム CLP<sup>2,3)</sup>に下記に示すマグネシウムのすべり系を導入したものをを用いた。

**2.1 マグネシウムのすべり系** これまでにマグネシウムのすべり系およびそのCRSSに関する様々な研究が行われているが、本研究では Yoshinaga らの実験結果<sup>4)</sup>に基づき、室温下における変形を想定し、Table1に示すすべり系およびCRSSの値を用いた。これらの値の妥当性については今後、実験結果等との比較による検討が必要である。また、本研究では活動すべり系を議論するため、Table2に示すように各すべり系を定義した。なお、本研究では双晶変形をすべり変形と全く同様にモデル化しており、最密六方晶の双晶におけるc軸に対する負荷方向依存性は考慮していない。また、変形に伴う結晶方位変化も無視している。

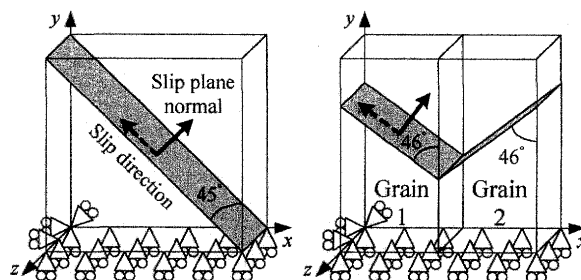
Table.1 Slip systems and initial CRSS for Magnesium

| Slip system       | Number of slip systems | Slip plane       | Slip direction               | Initial CRSS (MPa) |
|-------------------|------------------------|------------------|------------------------------|--------------------|
| Basal <a>         | 3                      | {0001}           | $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ | 0.5                |
| Prismatic <a>     | 3                      | {10 $\bar{1}0$ } | $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ | 40                 |
| Pyramidal-1 <a>   | 6                      | {10 $\bar{1}1$ } | $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ | 40                 |
| Pyramidal-2 <a+c> | 6                      | {11 $\bar{2}2$ } | $\langle 11\bar{2}3 \rangle$ | 40                 |
| Twinning          | 6                      | {10 $\bar{1}2$ } | $\langle 10\bar{1}1 \rangle$ | 100                |

**2.2 解析モデルと解析条件** Fig.1(a)および(b)は本研究で用いた解析モデルであり、それぞれ単結晶と双結晶を想定している。単結晶モデルは、あるすべり系のすべり方向およびすべり面法線方向が x-y 平面上にあり、さらに両方位とも y 軸正方向に対して 45 度傾くように結晶方位を選択した。このように方位を選択することにより、すべり系の Schmid factor が最大値の 0.5 となる。以上の結晶方位を持つモデルを Table2 に示した全 24 すべり系のそれぞれについて作成し解析を行った。一方、双結晶モデルでは、まず Grain1 のあるすべり系のすべり方向およびすべり面法線を x-y 平面上とし、y 軸正方向との傾きはそれぞれ、46 度および 44 度となるように選択する。次に Grain2 は y 軸を回転軸として Grain1 を 180 度回転させた方位関係とした。双結晶モデルはすべり系の等価

Table2 Definition of Schmid-Boas notation

|             | Slip plane normal   | Slip direction               | Slip plane normal    | Slip direction               |
|-------------|---------------------|------------------------------|----------------------|------------------------------|
| Basal       | a1 (0001)           | $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ | k4 (11 $\bar{2}2$ )  | $\langle 11\bar{2}3 \rangle$ |
|             | a2 (0001)           | $\langle 12\bar{1}0 \rangle$ | l5 (12 $\bar{1}2$ )  | $\langle 12\bar{1}3 \rangle$ |
|             | a3 (0001)           | $\langle 21\bar{1}0 \rangle$ | m6 (21 $\bar{1}2$ )  | $\langle 21\bar{1}3 \rangle$ |
| Prismatic   | b1 (1 $\bar{1}00$ ) | $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ | n7 (1 $\bar{1}22$ )  | $\langle 11\bar{2}3 \rangle$ |
|             | c2 (10 $\bar{1}0$ ) | $\langle 12\bar{1}0 \rangle$ | o8 (12 $\bar{1}2$ )  | $\langle 12\bar{1}3 \rangle$ |
|             | d3 (01 $\bar{1}0$ ) | $\langle 21\bar{1}0 \rangle$ | p9 (21 $\bar{1}2$ )  | $\langle 21\bar{1}3 \rangle$ |
| Pyramidal-1 | e1 (1 $\bar{1}01$ ) | $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ | q10 (1 $\bar{1}02$ ) | $\langle 1101 \rangle$       |
|             | f2 (10 $\bar{1}1$ ) | $\langle 12\bar{1}0 \rangle$ | r11 (10 $\bar{1}2$ ) | $\langle 1011 \rangle$       |
|             | g3 (01 $\bar{1}1$ ) | $\langle 21\bar{1}0 \rangle$ | s12 (01 $\bar{1}2$ ) | $\langle 0111 \rangle$       |
| Pyramidal-2 | h1 (1101)           | $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ | t13 (1102)           | $\langle 1101 \rangle$       |
|             | i2 (1011)           | $\langle 12\bar{1}0 \rangle$ | u14 (1012)           | $\langle 1011 \rangle$       |
|             | j3 (0111)           | $\langle 21\bar{1}0 \rangle$ | v15 (0112)           | $\langle 0111 \rangle$       |



(a) Single crystal model

(b) Bi-crystal model

Fig.1 Schematic diagram of analysis models

性を考慮し、Table2 の a1, b1, e1, k4, q10 を等価なすべり系を代表するモデルとして解析を行った。以下ではこれらの解析モデルを双結晶モデル a1, b1, e1, k4 および q10 と呼ぶことにする。有限要素モデル寸法は  $20 \times 20 \times 2 \mu\text{m}$ 、要素分割数は  $20 \times 20 \times 2$  要素とし、モデル上面に y 軸正方向の強制変位をひずみ 5% となるまで与えた。また、本研究では Table1 に示した初期 CRSS を除き構成式中のパラメータは、全すべり系で同一のものをを用いた。また、加工硬化則に含まれる転位間相互作用に関する項についても、全てのすべり系で同一の値を用いた。

### 3 解析結果

**3.1 単結晶モデルの解析結果** Table3 は 5% まで引張り負荷を受けた単結晶モデルにおいて活動したすべり系を示している。本研究では、すべり系の活動を統計的に蓄積する転位(SSD)密度の増加量で評価し、ひずみ量が 5% となった時点で、全すべり系中の最大平均 SSD 密度増加量を基準にその 10 分 1 以上の平均 SSD 密度増加がみられたすべり系を活動すべり系と判断した。すべり系 Basal および Prismatic の Schmid factor が 0.5 となる結晶方位を持つモデルの場合には、それぞれのすべり系が活動しているのに対し、すべり系 Pyramidal および Twinning 系の Schmid factor が 0.5 となるモデルでは、最大 Schmid factor を持つすべり系以外が活動している。この結果は、マグネシウムの各すべり系の CRSS が等価ではないことが主な要因であると考えられる。また、Twinning 系 r11 と u14 の Schmid factor が 0.5 の場合には、それら以外のすべり系による 2 重すべりにより変形が進行している。

**3.2 対称双結晶モデルによる検討** Table4 は双結晶モデル a1, b1, e1, k4, q10 に 5% の引張り負荷を与えた際に活動するすべり系を示している。結晶方位により活動するすべり系の数が異なる結果となった。また、双結晶モデル e1 と q10 は、それぞれ最大 Schmid factor を持つすべり系 e1 と q10 が活動していない。Fig.2(a)~(c) は最大 Schmid factor を持つすべり系が活動した双結晶モデル a1, b1, k4 の各すべり系における x-y 平面における幾何学的に必要な転位 (GND) の密度分布を示している。なお、

可視化に際してコンター幅をモデル毎に最大値から最小値までの範囲とすることで、異なる結果の定性的な比較を行っている。これらの分布より、同一ひずみ量であっても GND 密度分布は質的に異なり、特に(c)では全く異なる分布を示すことがわかる。この原因について考察するため、Fig.3 に k4 モデルの a1 および k4 すべり系の GND 密度分布発展の様子を示す。Fig.3 からわかるように、最大 Schmid factor を持つすべり系 Pyramidal-2 の k4 ではなくすべり系 Basal の a1 が先に活動を開始し、その後 k4 が活動を開始していることがわかる。このため、Schmid factor が最大のすべり系のみが活動している Fig.2(a),(b) の GND 密度分布とは大きく異なる結果になったと考えられる。

### 参考文献

- 1) Y.Kawamura, K.Hayashi, A.Inoue and T.Masumoto: Mater. Trans., **42** (2001) 1172-1176.
- 2) T.Ohashi, Int. J. Plast., **20** (2004) 1093-1109.
- 3) T.Ohashi, Int. J. Plast., **21** (2005) 2071-2088.
- 4) H.Yoshinaga and R.Horiuchi: Mater. Trans., **4** (1963) 1-8.

Table 4 Activated slip system during tensile loading up to 5% in bi-crystal models

| Slip system with the maximum Schmid factor | Activated slip system  |
|--------------------------------------------|------------------------|
| a1 (Basal)                                 | a1                     |
| b1 (Prismatic)                             | b1                     |
| e1 (Pyramidal-1)                           | a1, a2, a3             |
| k4 (Pyramidal-2)                           | a1, k4                 |
| q10 (Twinning)                             | k4, l5, m6, n7, o8, p9 |

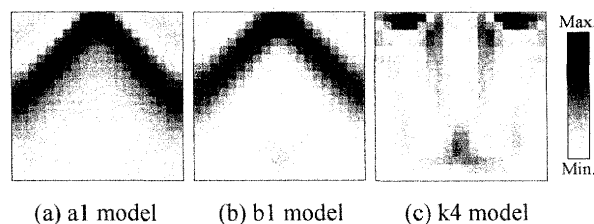


Fig.2 GND density norm distributions on slip system with the maximum Schmid factor at 5% strain

Table 3 Activated slip system during tensile loading up to 5% in single crystal models

| Slip system with the maximum Schmid factor | Activated slip system | Slip system with the maximum Schmid factor | Activated slip system |
|--------------------------------------------|-----------------------|--------------------------------------------|-----------------------|
| a1                                         | a1                    | k4                                         | a1                    |
| a2                                         | a2                    | l5                                         | a2                    |
| a3                                         | a3                    | m6                                         | a3                    |
| b1                                         | b1                    | n7                                         | a1                    |
| c2                                         | c2                    | o8                                         | a2                    |
| d3                                         | d3                    | p9                                         | a3                    |
| e1                                         | a3                    | q10                                        | l5                    |
| f2                                         | a1                    | r11                                        | m6, n7                |
| g3                                         | a2                    | s12                                        | o8                    |
| h1                                         | a2                    | t13                                        | d3                    |
| i2                                         | a3                    | u14                                        | b1, d3                |
| j3                                         | a1                    | v15                                        | b1                    |

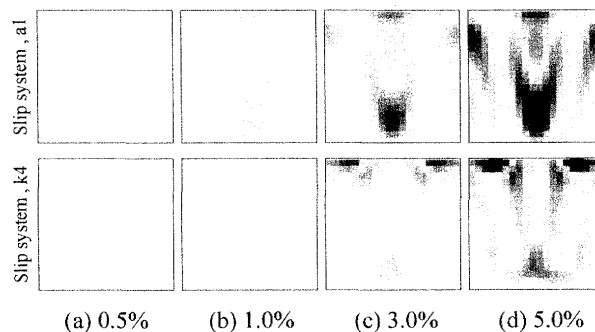


Fig.3 Evolution of GND density norm distributions of k4 model on slip system a1 and k4 during tensile loading