227

# マグネシウム単結晶および双結晶の 非対称変形に関する結晶塑性解析

熊本大学 〇眞山 剛 北見工業大学 大橋 鉄也 九州大学 東田 賢二

Crystal plasticity analysis for asymmetric deformation behavior of magnesium single crystals and bi-crystals

## Tsuyoshi MAYAMA, Tetsuya OHASHI and Kenji HIGASHIDA

### 1緒 言

マグネシウムは実用構造金属材料で最も軽量である ことから、機械的特性の優れた合金を開発し、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 により大幅な軽量化とそれによる燃費向上が期待され ている.しかしながら、マグネシウムはその結晶構造が 最密六方晶(HCP)であることに起因して、従来の立方晶 型金属とは大きく異なる力学特性を示すため,構造設計 や強度評価が難しく広範囲な普及を妨げている. したが って,マグネシウムの力学特性に関する十分な理解が不 可欠である.これまでに単結晶を用いた引張試験や圧縮 試験によりマグネシウムの変形機構と臨界分解せん断 応力(CRSS)に関する多くの報告があるが、近年の多結晶 塑性解析で用いられている変形機構や臨界分解せん断 応力(CRSS)とは整合していない. この不整合の理由の1 つとして,結晶粒界の影響が考えられるが,実験により 粒界の影響を定量的に把握することは難しいため, 未だ にその詳細は解明されていない.

そこで本研究では、マグネシウム単結晶および双結晶 の結晶塑性有限要素解析を行い、結晶粒界が異方性変形 挙動と活動すべり系に及ぼす影響を検討する.



(a) Single crystal model(b) Bi-crystal modelFig.1 Schematic diagram of analysis models



(a) Millar-Bravis system (b) Orthonormal system Fig.2 Definition of crystal coordinate

#### 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>11</sup>に下記に示すマグネシウムの変形機 構を導入したものを用いた.なお、本研究では双晶変形 をすべり変形と同様に導入しているが、双晶の極性は考 慮している.

2.1 マグネシウムの変形機構 本研究ではこれまでに 行われたマグネシウム単結晶による実験観察結果<sup>2),3)</sup>に 基づき,底面すべり,柱面すべり,1 次錐面すべり,2 次錐面すべりおよび双晶変形を変形機構として考慮し た.また,CRSSの値についても実験結果<sup>2),3)</sup>に基づき, 底面すべり,非底面すべりおよび双晶の CRSS として, それぞれ 0.5,40 および 3MPa を用いた.なお,本研究 では加工硬化に関するパラメータを全ての変形機構で 同一の値とすることにより,変形機構の幾何学的な配置, CRSS および双晶の極性が異方性挙動と活動変形機構に 及ぼす影響について検討した.

2.2 解析モデルと解析条件 Fig.1 は本研究で用いた解 析モデルであり、16×16×4µmの直方体を16×16×4要素 に分割し各要素に結晶方位を与えた. HCP 結晶では Fig.2(a)に示す Millar-Bravis 系によりすべり系等が表現さ れることが多いが、本研究では解析モデルの結晶方位を Fig.2(b)の定義による直交座標系を用いてオイラー角  $(\kappa, \theta, \phi)$ で指定することにする. すなわち, Fig.2(b)に示 すように回転前には試料座標系のx, y, z方向をそれ ぞれ HCP 結晶の [10 10], [12 10], [0001] 方向と一致さ せ、まず[0001]について $\phi$ 回転させる. 次に $[10\overline{10}]$ に ついて $\theta$ 回転させ、さらに、[0001]について $\kappa$ 回転させ ることにより試料座標系と結晶座標系の関係を表す.以 上の定義によるオイラー角を Table 1 に示すように設定 することで、Fig.1(a)に示す単結晶においては、底面すべ り、柱面すべり、1次錐面すべり、2次錐面すべりおよ び双晶系のすべり(双晶によるせん断)方向およびすべり (双晶)面法線方向が x-y 平面上となり, さらに Fig.1(a)に αで示されている y 正方向とすべり面の間の角度が 44 もしくは46度となるようにした.こうして作成される 単結晶モデルをすべり系の略称(BSL, PRS, 1PY, 2PY, TWN)と角度(44,46)を用いて名付けることにする. すな わち、底面すべりのすべり方向とすべり面法線が x-y 平 面上にあり、さらにα=44度の解析モデルはBSL44と呼 ぶ. 双結晶モデルは, Fig.1(b)に示すように x 方向の中心 を境に左右で異なる結晶方位を持たせた.双結晶の結晶

方位は、Table 1より異なる2つの単結晶モデルを選択し、 右側の結晶粒(Grain B)の場合には φを 180 度増やすこと により、y 軸周りに 180 度回転した方位とした.双結晶 モデル名は"Grain A の単結晶モデル名"-"Grain B の単結 晶モデル名"として表すことにする.このようにして作 成された単結晶モデルおよび双結晶モデルに対して, Fig.1 に示すようにモデル上面に y 軸方向に強制変位を 与えることにより、引張および圧縮解析を行った.なお、 初期転位密度は 10<sup>9</sup>m<sup>-2</sup>で一様とした.

#### 3 解析結果

3.1 単結晶および双結晶の応力-ひずみ挙動 Fig.3 お よび Fig.4 は、それぞれ単結晶および双結晶モデルによ る解析結果例を示している. Fig.3(a)と(b)では, モデル毎 に引張と圧縮の応力ひずみ挙動が同じであるが, Fig.3(c)



Table 1 Euler angles for each crystal orientation

(d) TWN models





と(d)では引張と圧縮の応力--ひずみ挙動が顕著に異な る非対称変形挙動が得られた.また,Fig.4(a)に示した BSL-BSL 双結晶解析の結果にも非対称変形挙動が確認 されるが、Fig.4(b)の BSL-2PY モデルではより著しい非 対性を示している. ここで, Fig.4(a)と(b)の双結晶を構成 する各単結晶は Fig.3(a)と(b)に示したように非対称性を 示さないことから、これらの双結晶解析でみられた非対 称性の原因は、結晶粒界の導入であると考えられる.

3.2 活動変形機構 Table 2 および Table 3 は, それぞれ 単結晶および双結晶解析により得られた変形時の活動 変形機構を示している. ここで活動変形機構を, ひずみ 5%時点において統計的に蓄積される(SSD)転位密度の全 要素平均が 10<sup>11</sup>m<sup>-2</sup> 以上の変形機構と定義することによ り、変形への寄与が比較的大きな変形機構のみを考慮し た. Table 2 より BSL と 2PY モデルでは引張と圧縮で同 じ底面すべりが活動しているのに対し、PRS と TWN モ デルでは双晶の極性により引張と圧縮で変形機構が異 なる. また, Table 3 に示した双結晶の結果では, BSL-BSL モデルは引張と圧縮で同じ底面すべりが活動している のに対して、BSL-2PY モデルでは双晶の活動有無が異な る. これらのことから, Fig.3 および Fig.4 に示した単結 晶および双結晶の非対称変形挙動は双晶の活動有無が 支配的な要因と考えられる. また, Table2 より BSL と 2PY 単結晶は何れも底面の単一すべり系のみが活動し ているが、BSL-2PY 双結晶では引張負荷により4つの双 晶系が活動している.この活動変形機構の変化は粒界を 通した各結晶粒の相互拘束によるもの考えられ、さらに その結果, Fig.4(b)の非対称性が生じたものと推察される.

#### 参考文献

1) T.Ohashi, Int. J. Plast., 20 (2004) 1093-1109.

2) H.Yoshinaga and R.Horiuchi: Mater. Trans., 4 (1963) 1-8.

3) T.Obara et al.: Acta Metall., 21 (1973) 845-853.

Table 2 Activated deformation mode(s) in each single crystal

Model	Tension	Compression
BSL	$(0001)\langle 11\overline{2}0\rangle$ (Basal)	$(0001)\langle 11\overline{2}0\rangle$ (Basal)
PRS	$(1\overline{1}00)\langle 11\overline{2}0\rangle$ (Prismatic)	$(10\overline{1}2)\langle\overline{1}011\rangle$ (Twin)
		$(\overline{1}012)\langle 10\overline{1}1\rangle$ (Twin)
2PY	$(0001)\langle 11\overline{2}0\rangle$ (Basal)	$(0001)\langle 11\overline{2}0\rangle$ (Basal)
TWN	$(1\overline{1}02)\langle\overline{1}101\rangle$ (Twin)	$(0001)\langle\overline{1}2\overline{1}0\rangle$ (Basal)
		$(0001)\langle\overline{2}110\rangle$ (Basal)
		$(\overline{1}2\overline{1}2)\langle 1\overline{2}13\rangle_{(2^{nd} oder)}$
		$(\overline{2}112)\langle 2\overline{1}\overline{1}3\rangle$ pyramidal)

Model	Tension	Compression
BSL-BSL	$(0001)\langle 11\overline{2}0\rangle$ (Basal)	$(0001)\langle 11\overline{2}0\rangle$ (Basal)
BSL-2PY	$(0001)\langle 11\overline{2}0\rangle$ (Basal)	
	$(1\overline{1}02)\langle\overline{1}101\rangle$ (Twin)	-
	$(\overline{1}102)\langle 1\overline{1}01\rangle$ (Twin)	$(0001)\langle 11\overline{2}0\rangle$ (Basal)
	$(\overline{1}012)\langle 10\overline{1}1\rangle$ (Twin)	
	$(0\overline{1}12)\langle 01\overline{1}1\rangle$ (Twin)	