

228 変形双晶の体積分率を考慮した HCP 金属の結晶塑性モデリング

佐賀大学 ○只野裕一 佐賀大学 萩原世也

Crystal Plasticity Modeling of HCP metals
Considering Volume Fraction of Deformation Twinning

Yuichi TADANO and Seiya HAGIHARA

1 緒 言

結晶スケールの塑性変形は、すべり変形と変形双晶に大別される。FCC 金属では変形双晶は通常限られた条件下のみで観測されるが、HCP 金属の塑性変形においては、しばしば変形双晶が重要な役割を担うことが知られている。例えばマグネシウムの場合、 c 軸方向への引張変形において双晶は重要な変形機構である。双晶による塑性変形の特徴として、結晶格子が回転することで大きな方位回転を生じることが挙げられる。このため、結晶塑性論の枠組みにおいて変形双晶を表現する際には、格子回転を適切に導入することが必要となる。双晶の発生により結晶方位は急激に変化するものと考えられるが、現実の材料において、ある結晶粒内の全域で双晶が同時に発生するわけではなく、粒内には元の結晶方位を保つ母相と双晶相が混在している。そこで本報告では、双晶の体積分率を考慮することで、結晶塑性論の枠組みの中で、ある物質点における材料特性が連続的に変化する変形双晶のモデリングを試みる。

2 結晶塑性モデル

速度こう配テンソルが弾性部分と塑性部分に加算分解され、塑性成分が式(2)で表されるものとする。

$$L_{ij} = \dot{u}_{i,j} = L_{ij}^e + L_{ij}^p \quad (1)$$

$$L_{ij}^p = \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}^{(\alpha)} s_i^{(\alpha)} m_j^{(\alpha)} \quad (2)$$

\dot{u}_i は変位速度であり、右上付き括弧はすべり系を、 N はすべり系の総数を表し、 $\dot{\gamma}$ はすべり速度、ベクトル $s_i^{(\alpha)}$ 、 $m_j^{(\alpha)}$ はすべり方向とすべり面の法線である。本報では Graff et al. によって純マグネシウムのために提案された硬化則を用いる¹⁾。流れ応力 $g^{(\alpha)}$ の発展式は、

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} q^{(\alpha\beta)} h |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \quad (3)$$

で与えら、 $q^{(\alpha\beta)}$ はすべり系の相互作用マトリクスである。すべり系として底面すべり、柱面すべり系、2次錘面すべり系を考え、 h の具体形は底面すべりに対して式(4)、非底面すべり系に対して式(5)を用いる。

$$h = h_0 \quad (4)$$

$$h = h_0 \left(1 - \frac{\tau_0}{\tau_x} \right) \exp \left(-\frac{h_0 \gamma_{\text{all}}}{\tau_x} \right), \quad \gamma_{\text{all}} = \sum_{\alpha} \gamma^{(\alpha)} \quad (5)$$

h_0 は初期硬化率、 τ_0 は初期臨界分解せん断応力、 τ_x は飽和応力であり、具体的な材料パラメータは文献1)に倣

っている。Graff et al. は、この他に変形双晶を非対称すべり変形として導入しているが、本報では次に示す格子回転則により双晶を導入するため、非対称すべりによる変形双晶は考慮していない。

3 変形双晶のモデリング

変形双晶は、双晶面に対して母相と双晶相が鏡像関係となる変形モードである。すなわち、双晶が発生すると結晶格子が双晶面に対して鏡像変換を受けることになる。法線ベクトルが \mathbf{m}^{twin} で与えられる面で双晶が発生したとき、母相の各すべり面の法線ベクトル $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ 、すべり方向ベクトル $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ と、双晶相のそれである $\tilde{\mathbf{m}}^{(\alpha)}$ 、 $\tilde{\mathbf{s}}^{(\alpha)}$ の幾何学的関係は、鏡像変換を表す直交テンソル \mathbf{T}^{twin} を用いて次のように表せる。

$$\tilde{\mathbf{m}}^{(\alpha)} = \mathbf{T}^{\text{twin}} \cdot \mathbf{m}^{(\alpha)} \quad (6)$$

$$\tilde{\mathbf{s}}^{(\alpha)} = \mathbf{T}^{\text{twin}} \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)} \quad (7)$$

$$\mathbf{T}^{\text{twin}} \equiv \mathbf{I} - 2\mathbf{m}^{\text{twin}} \otimes \mathbf{m}^{\text{twin}} \quad (8)$$

ここで \mathbf{I} は2階の単位テンソルであり、いずれのベクトルも単位長としている。

次にある結晶粒内において母相と双晶相の2相が混在していると仮定し、双晶相の体積分率が f であるとする。ここで、多結晶モデルとして古くから利用されている Taylor モデルの考えを導入し²⁾、母相と双晶相が同じ巨視的ひずみを受けると仮定する。すなわち、

$$\mathbf{L}^{\text{parent}} = \mathbf{L}^{\text{twin}} = \mathbf{L}^0 \quad (9)$$

ここで右上添え字 parent は母相を、twin は双晶相を表し、 \mathbf{L}^0 は結晶粒の巨視的速度こう配である。母相と双晶相では結晶格子の方位が異なるため、各相において応力等の計算を行い、それぞれに対する構成則テンソルが結晶塑性論より得られる。このとき、結晶粒全体の巨視的構成則テンソル $\bar{\mathbf{C}}$ は、前述の体積分率 f を考慮すれば、各相の構成則テンソルを用いて

$$\bar{\mathbf{C}} = (1-f)\mathbf{C}^{\text{parent}} + f\mathbf{C}^{\text{twin}} \quad (10)$$

で与えられる。また結晶粒の巨視的応力 $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ も同様に次式で得られるものとする。

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = (1-f)\boldsymbol{\sigma}^{\text{parent}} + f\boldsymbol{\sigma}^{\text{twin}} \quad (11)$$

以上のモデルにより、変形初期において結晶粒の全域が母相であり、変形と共に双晶が発生して材料特性が変化することを連続的に表現することが可能となる。

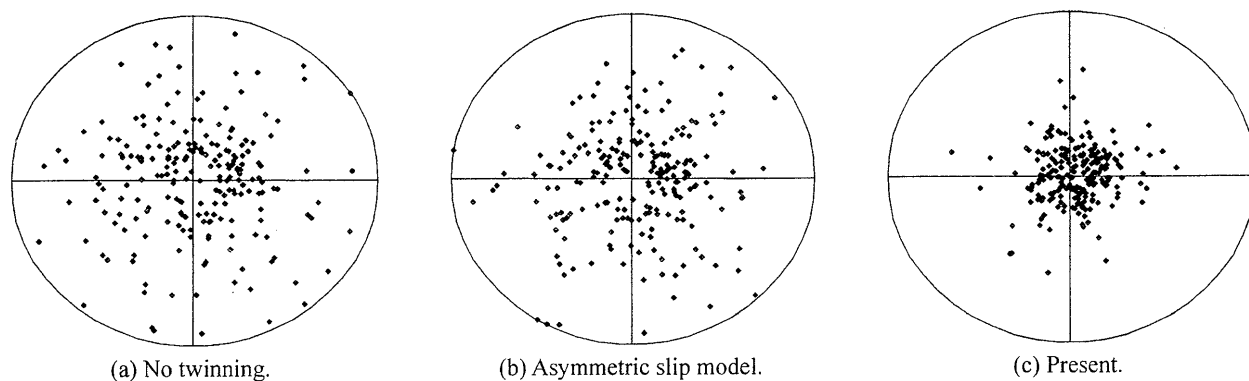


Fig. 1 (0001) pole figures after compression of rolling ratio 2.

4 数値解析例

解析対象は文献3)と同様に設定し(結晶粒数は216),初期結晶方位分布を疑似乱数によって等方的に与え,圧延比2に相当する単軸圧縮を加えた.変形双晶が発生するCRSSはGraff et al.に倣い5MPaとした.比較のために,双晶を一切考慮しない解析,およびGraff et al.による非対称すべりによる双晶モデルを導入した解析を合わせて行っている.圧縮後の(0001)極点図を図1に示す(紙面に対して垂直方向が圧縮方向).マグネシウムの圧延においては, c 軸が圧延面に直交する組織が形成されることが知られているが,この傾向は提案手法が最も明確に再現できており,非対称すべりモデルでは圧延組織の発達にはほとんど見られない.すなわち,圧延集合組織の発達には変形双晶による格子回転が重要な役割を果たしていると言える.

また,変形に伴う各すべり系の相対活動度と解析領域全体に占める双晶相の体積分率を図2に示す.なお,非対称すべりモデルに対しては,結晶粒内において1つ以上の双晶系が活動した物質点は双晶相とみなし,体積分率を決定した.いずれの場合も,底面の活動が最も大きい傾向は変わらないが,提案手法による結果では2次錘面の活動度が相対的に大きく現れている.これは,前述の圧延組織の発達により c 軸が圧縮方向と近くなり,圧縮方向の変形に2次錘面の活動が必要となるためだと考えられる.また,非対称すべりモデルではひずみ5%付近で双晶相の体積分率は50%程度となりほぼ飽和するが,提案手法ではひずみ5%以降も徐々に双晶相が増加しており,体積分率は80%近くまで達している.

5 結 言

変形双晶の体積分率を考慮することで,変形双晶による結晶格子回転を考慮しながらも材料特性が連続的に変化する結晶塑性モデリングの枠組みを導出し,圧延組織の発達解析への適用例を示した.今後は体積分率の発達式に関する詳細な検討を行うことが課題である.

参考文献

- 1) S. Graff et al., *Int. J. Plasticity*, **23**, 1957 (2007).
- 2) G.I. Taylor, *J. Inst. Metals*, **62**, 307 (1938).
- 3) Y. Tadano, *Int. J. Mech. Sci.*, **52**, 257 (2010).

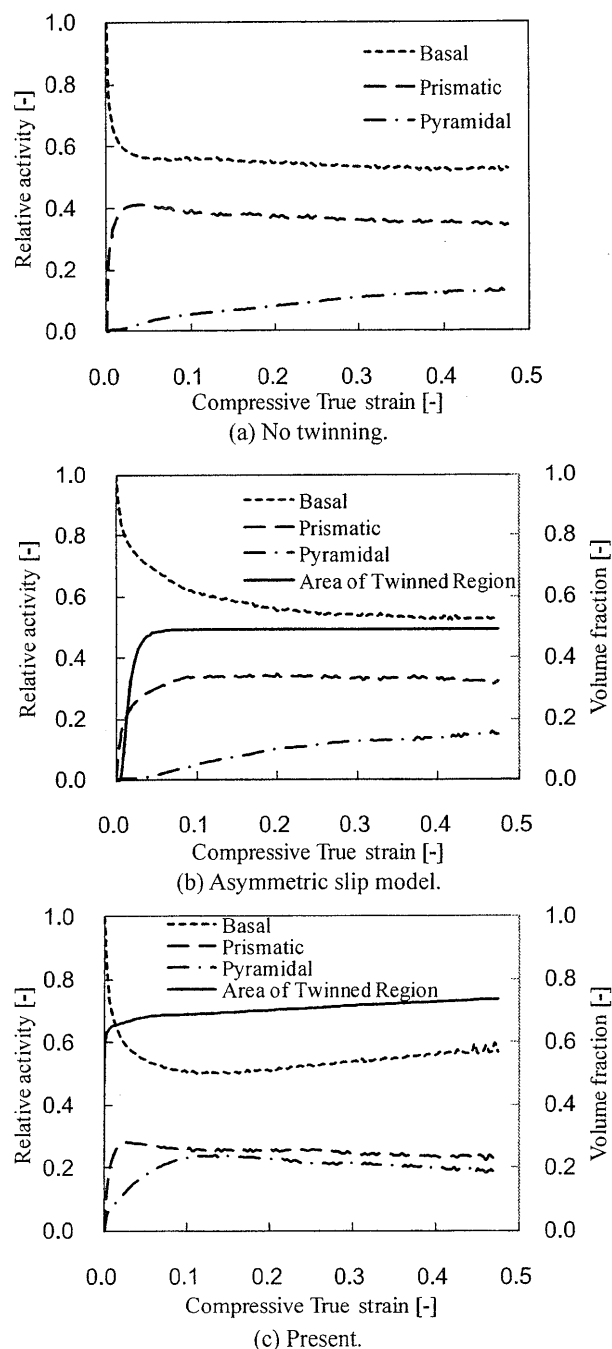


Fig. 2 Relative activities of slip systems and volume fraction of twinned region.