LPSO 型 Mg 多結晶合金のキンク変形に関する 転位-結晶塑性 FEM 解析

上田亮^{*1}, 田尻聡太郎^{*1}, 只野裕一^{*2}, 志澤一之^{*3}

A Dislocation-based Crystal Plasticity Simulation on Deformation Kink in Polycrystalline Mg Alloy with LPSO Phase

Ryo UETA^{*4}, Sotaro TAJIRI, Yuichi TADANO and Kazuyuki SHIZAWA

^{*4} Keio Univ. Graduate School of Science and Technology,
3-14-1 Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama, Kanagawa, 223-8522 Japan

Mg alloys with long-period stacking ordered structure (LPSO) phase show excellent mechanical properties such as high specific strength. Although it is known that kink band formation in LPSO phase during plastic working strengthens the alloy, there is not much information about how the kink bands progress in the alloy. Also, the effect of misorientation between crystals has not been investigated sufficiently. We developed a dislocation-based crystal plasticity model suitable for crystals of LPSO phase and demonstrated two-dimensional FE analysis for single crystal of Mg-based LPSO phase. In this study, we carry out FE compression analysis for polycrystalline Mg alloy with LPSO phase in which single crystal of LPSO phase is sandwiched between two crystals of α -Mg phase. We use same computational model mentioned above for both LPSO phase and α -Mg phase of the alloy, however we distinguish each phase by assigning different CRSS to respective slip systems in each phase. Through this numerical simulation, we discuss the effect of α -Mg phase on kinking of LPSO phase.

Key Words : Plasticity, Magnesium Alloy, Dislocation, Finite Element Method, Crystal Plasticity, LPSO Phase, Kink Band

1. 緒 言

近年, 長周期積層構造(以下 LPSO と略記)相を有する LPSO 型 Mg 合金が開発され, 従来の Mg 合金に類を見ない高比強度を有することから次世代軽量構造材料としての応用が期待されている. α -Mg 相および LPSO 相の複相組織を有する本合金は, 塑性加工中に生じる LPSO 相のキンク変形により強化されることが知られているが⁽¹⁾, 合金中のキンクバンドの進展に関する報告は少なく, また α -Mg 相がキンク変形に及ぼす影響も十分に検討されていない. そこで本報では, 前報⁽²⁾までに構築した Mg および LPSO 相に対する転位-結晶塑性モデルを用いて短冊状の LPSO 相単結晶を α -Mg 相で両側から挟んだ簡易的な多結晶解析を実施し, 材料の不均一性がキンクバンド形成に及ぼす影響を検討する.

2. 各相に対する転位-結晶塑性モデル

2・1 加工硬化モデル 硬化則に導入する転位密度に GN 転位密度 $\rho_G^{(\alpha)} = \|(\mathbf{P}^{(\alpha)} \times \nabla \gamma^{(\alpha)}) / \tilde{b}^{(\alpha)}\|$ および GN 不適合度 $\rho_n^{(\alpha)} = \|[P_s^{(\alpha)} \cdot (\nabla \gamma^{(\alpha)} \otimes \tilde{\mathbf{V}})] / L^{(\alpha)}\|$ を用いる⁽²⁾⁽³⁾. ここで, $(\cdot)^{(\alpha)}$ は α すべり系に関する量であることを表す. また, 臨界分解せん断応力(CRSS)および流れ応力の発展式はそれぞれ次式で表わされる⁽³⁾.

$$g_{\text{CRSS}}^{(\alpha)} = \tau_f^{(\alpha)} + a^{(\alpha)} \mu^{(\alpha)} \tilde{b}^{(\alpha)} \sum_{\beta} \Omega^{(\alpha\beta)} \sqrt{\rho_0^{(\beta)}} \quad (1)$$

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h^{(\alpha\beta)} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \\ = \sum_{\beta} \frac{a^{(\alpha)} \mu^{(\alpha)} \tilde{b}^{(\alpha)} \Omega^{(\alpha\beta)} c^{(\beta)}}{2 \tilde{b}^{(\beta)} L^{(\beta)} \sqrt{\rho_h^{(\beta)}}} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \quad (2)$$

ここで, $\tau_f^{(\alpha)}$ は格子摩擦応力, $a^{(\alpha)}$ は 0.1 のオーダーの数値係数, $\mu^{(\alpha)}$ は横弾性係数, $\tilde{b}^{(\alpha)}$ は Burgers ベクトルの大きさ, $\Omega^{(\alpha\beta)}$ はすべり系間相互作用行列, $\rho_0^{(\beta)}$ は初期転位密度であり, $h^{(\alpha\beta)}$ は硬化係数, $\dot{\gamma}^{(\beta)}$ はすべり速度, $c^{(\beta)}$ は 1 のオーダーの数値係数, $L^{(\beta)}$ は転位

^{*1}一般学生, 慶應義塾大学大学院(〒223-8522 神奈川県横浜市港北区日吉 3-14-1).

^{*2}正員, 佐賀大学(〒840-8502 佐賀県佐賀市本庄町 1).

^{*3}正員, フェロー, 慶應義塾大学.

E-mail: shizawa@mech.keio.ac.jp

の平均飛行距離, $\rho_b^{(\beta)}$ は全転位密度 $\rho_0^{(\alpha)} + \rho_G^{(\alpha)} + \rho_{\eta}^{(\alpha)}$ と表される.

2.2 活動系の選択 LPSO 型 Mg 合金では双晶変形は生じないことが知られている. そこで本報では, 各相における活動系として HCP 結晶の底面系, 柱面系および二次錐面系の 3 種類のすべり系を考慮し硬化則の計算を行う. ここで, α -Mg 相と LPSO 相では各すべり系の CRSS が大きく異なるため, 式(1)における格子摩擦応力 $\tau_i^{(\alpha)}$ に次章で示す値を用いることで各相をモデル化する.

3. FEM 解析結果および考察

FEM 解析対象は図 1 の α -Mg 相および LPSO 相の三結晶粒からなる LPSO 型 Mg 多結晶合金とする. 試験片寸法は, $H=30 \mu\text{m}$ および $W=15 \mu\text{m}$ とする. なお, ΔW は材料の幾何学的形状初期不整であり, 本報では次式を採用する⁽⁴⁾.

$$\Delta W = \left(x - \frac{W}{2} \right) \left\{ W_1 \left[\cos \left(\frac{2\pi y}{H} \right) - 1 \right] + W_2 \left[\cos \left(\frac{2\pi m_w y}{H} \right) - 1 \right] \right\} \quad (3)$$

ここで, 不整振幅を $W_1=1.0 \times 10^{-2}$ および $W_2=5.0 \times 10^{-3}$ とし, 波数を $m_w=5$ とする. 各結晶粒の初期結晶方位は, 同図に示す底面と負荷軸がなす角度 θ が粒 1 および粒 3 (α -Mg 相) で 0° , 粒 2 (LPSO 相) で 10° となるように設定する. なお, この結晶方位では図 1 に示した底面系の活動が最も支配的となる. また, 初期転位密度 $\rho_0^{(\alpha)}$ は各活動系で平均値 $1.0 \mu\text{m}^{-2}$, 標準偏差 $0.3 \mu\text{m}^{-2}$ の正規分布乱数を用いて試料中の各有限要素にランダムに配置する. 前述の格子摩擦応力 $\tau_i^{(\alpha)}$ に関しては, 表 1 の値を用いて各相を特徴づける. なお, 式(1), (2)の数値係数およびすべり速度, 転位平均飛行距離および材料定数などの値は近藤ら⁽⁹⁾のものを用いる. 以上の条件で, 試験片上端面に $\dot{\varepsilon}=1 \text{ms}^{-1}$ の強制圧縮変位速度を与え, 平面ひずみ条件下で FEM 解析を行う.

図 2 は, 本解析によって得られた底面系の GN 転位密度の刃状成分分布である. 図 2(a)より, $\varepsilon=0.4\%$ において正負の GN 転位列が底面に垂直方向に伸び, 試験片を横断していることがわかる. また, そのような帯状領域内では結晶格子が $10\sim 20^\circ$ 程度回転しており, キンクバンドを形成しているといえる. キンクバンド形成過程を詳細に観察すると, 塑性変形初期において LPSO 相のみならず双晶変形を考慮していないために α -Mg 相にも多数の GN 転位列が生成する. なお, その生成箇所には初期転位密度分布および形状初期不整が関係していると考えられる. そして, 各相で生じた GN 転位列は粒界に向かって進展し, 相界面で出会ったものは試料を横断する一つのマクロなキンクバンドとなる.

Table 1 Value of $\tau_i^{(\alpha)}$ for each phase with averaged CRSS in parentheses

MPa	Basal	Prismatic	Pyramidal
α -Mg phase	0.01 (1.584)	50 (51.62)	50 (53.46)
LPSO phase	10 (11.57)	160 (161.6)	350 (353.5)

Fig. 1 Computational model

Fig. 2 Distributions of edge component of GN dislocation density

る. 本解析ではまず粒 2 および粒 3 で生じた GN 転位列が相界面で合流し, その後, 粒 1 に伝播することで図 2(a)のキンクバンドが形成される. また, 図 2(b)では更なる負荷によって最初に形成したキンクバンド近傍に多数の新たなキンクが形成し, GN 転位が極めて高密度に蓄積している様子が示されている. このような二次的なキンクバンドは, 最初のキンク形成による応力の不均一分布が関与するために初期に形成したキンク周辺に形成されると考えられる.

4. 結 言

本モデルにより LPSO 型 Mg 多結晶合金におけるキンクバンド形成を再現できる. また, 材料不均一性から各相で個別に形成した GN 転位列が連結することで試料を横断するマクロなキンクバンドが形成される.

本研究は科学研究費(新科学領域)「シンクロ型 LPSO 構造の材料科学」の助成を受けて実施したものであり, 当該支援に対して深謝する.

文 献

- (1) Yoshimoto, S., Yamasaki, M. and Kawamura, Y., *Materials Transactions*, Vol. 47, (2006), pp. 959-965.
- (2) 田尻聡太郎, 上田亮, 只野裕一, 志澤一之, 第 25 回計算力学講演会論文集, Vol. 25, (2012), pp. 335-357.
- (3) 近藤瑠歩, 只野裕一, 志澤一之, 日本機械学会論文集 A 編, Vol. 78, (2012), pp. 1157-1172.
- (4) Tvergaard, V., Needleman, A. and Lo, K. K., *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 29, (1981), pp. 115-142.