

令和 5 年 6 月 2 日現在

機関番号：32612

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2020～2022

課題番号：20K04165

研究課題名（和文）LPSO/Mg合金の強化に関する大変形回位-結晶塑性モデルとメッシュフリー解析

研究課題名（英文）Disclination-based crystal plasticity model and mesh-free analysis at large deformation for strengthening of LPSO/Mg alloys

研究代表者

志澤 一之 (Shizawa, Kazuyuki)

慶應義塾大学・理工学部（矢上）・教授

研究者番号：80211952

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,400,000円

研究成果の概要（和文）：長周期積層構造(LPSO)相を有するMg二相合金は、微細なキンク帯形成によって飛躍的に力学特性が向上する。本研究では、キンク帯形成による材料強化機構を解明するため、Cosseratモデルを有限変形理論の体系で結晶塑性論的に定式化し、転位蓄積と回位発生を同時に考慮した材料モデルを構築した。また、得られたモデルを用いて短冊形三結晶に対してメッシュフリー解析を実施し、圧縮負荷によるキンク帯形成後に逆負荷を作用させると、Ridge形キンクが発生し易いほど局所方位差および転位が多く残存して終端強度が増大すること、ならびに  $\gamma$ -Mg相の平均粒径が小さいほど逆負荷後の終端強度がさらに上昇することを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

構造材料の軽量化と強化の立場から脱炭素社会実現に寄与する以下のような知見を得た。有限変形理論の範疇では、GN転位密度はすべりこう配のみならず回位密度にも依存する。また、試験片端部の回転を拘束できる本モデルでは、試験片寸法によらずキンク帯を再現できる。さらに、微視回転と巨視回転を独立変数としてつづべナルティ法で一致させれば、CO級要素を用いたFEM解析によってメッシュフリー法と同程度の精度で計算コストを低減させ得る。加えて、底面系を荷重軸にほぼ平行に配置するとともに初期方位の不均一性を増大させ、 $\gamma$ -Mg相を微細化すれば、圧縮後に逆負荷を加えた際、終端強度を1～3割程度増加させ得る。

研究成果の概要（英文）：The mechanical properties of Mg dual-phase alloys with long-period stacking ordered (LPSO) phase are significantly enhanced by the formation of fine kink bands. In this study, to clarify the strengthening mechanism owing to the kink bands, the Cosserat model was formulated in the framework of crystal plasticity based on finite deformation theory and a new material model was developed, in which the accumulation of dislocations and the generation of disclinations were simultaneously considered. Using the obtained model, a mesh-free analysis was performed for a strip-shaped tri-crystal. As a result, it was showed that when a kink band is formed by compressive loading and then reverse loading is applied, if ridge-shaped kinks tend to occur, local orientation differences and accumulated dislocations remain more, and the terminal strength is higher. In addition, the smaller the average grain size of the  $\gamma$ -Mg phase becomes, the higher the terminal strength after reverse loading reaches.

研究分野：計算材料科学

キーワード：LPSO型Mg二相合金 有限変形理論 結晶塑性Cosseratモデル キンク帯 回位密度 転位密度 強度発現機構 寸法効果

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

## 1. 研究開始当初の背景

近年、脱炭素社会の実現に向けて、輸送機器の軽量化が急務となっている。このような状況下において長周期積層構造(LPSO: Long-Period Stacking Ordered structure)を強化相として有するマグネシウム(Mg)二相合金は軽量、高強度、高耐熱性などの優れた特性を有することから、次世代構造材料として注目を集めている。この合金の優れた力学的特性は LPSO 相におけるキンク変形および  $\alpha$ -Mg 相の動的再結晶に起因する結晶粒微細化によってもたらされると考えられている。しかしながら、このような LPSO 型 Mg 二相合金において負荷によるキンク帯形成とその後の逆負荷時のキンク帯解消による強度変化、ならびに  $\alpha$ -Mg 相の結晶粒微細化が強度に及ぼす影響について計算力学的に予測した例は見当たらない。したがって、このような軽量・高強度材料の材料設計を支援するための材料モデルの構築および数値解析手法の開発に期待が寄せられている。

## 2. 研究の目的

本研究では、回転の自由度を有する Micropolar 理論を結晶塑性論に基づいて記述するとともに、結晶の幾何学量として回位密度テンソルを定義し、回位-結晶塑性 Cosserat モデルを構築する。最終的には、実験による応力値との対応がとれるよう、実測されない反対称応力を必要としない偶応力理論に本モデルを帰着させる。

次に、本モデルを LPSO 型 Mg 二相合金の短冊形 9 結晶平板と短冊形多結晶平板に適用し、二次元メッシュフリー解析および FEM(Finite Element Method)解析を実施し、両解析の利点と欠点を把握する。また得られた数値解析結果から、初期方位の不均一性と Ridge 形キンクの形成の関係を調査し、このような不均一性が負荷時および負荷後の逆負荷時における強度の変化に及ぼす影響を及ぼすかについて検討する。さらに、 $\alpha$ -Mg 相の結晶粒微細化が強度に与える影響についても計算力学的に予測する。このようにして、軽量構造材料の強度発現機構を明らかにし、今後の材料設計に指針を与える。

## 3. 研究の方法

### (1) 回位-結晶塑性 Cosserat モデルの構築

Micropolar 理論の運動学に則するよう速度こう配および微視角速度こう配を定義し、それを結晶塑性論的に表現する。また、Burgers ベクトルおよび Frank ベクトルの周回積分表示からそれぞれ転位密度と回位密度を定義し、これらも結晶塑性表示する。次に、力学的釣合い方程式を速度形仮想仕事の原理の形で定式化し、この段階で微視回転を巨視回転に一致させて Micropolar 理論を偶応力理論に帰着させ、応力の反対称部分が巨視的な仕事に寄与しないようにする。さらに、応力および偶応力に対する速度形弾粘塑性構成式を、弾性構成式から非弾性部分を差し引くことで導出する。また、すべり速度と微視回転角速度の硬化則を指数則で定式化するとともに、流れ応力の発展式においては硬化係数を転位密度依存形として導入する。一方、流れ偶応力の発展式には簡単のため線形硬化を仮定する。

### (2) 強度発現機構の解明に関する数値解析

まず、LPSO 単結晶平板の圧縮解析をメッシュフリー法(RKPM)および有限要素法(FEM)で実施し、各々の手法の利点および欠点を見出す。ただし、FEM 解析では巨視的回転角速度と微視的回転角速度を独立変数として解き、ペナルティ法によって両者を一致させることで、 $C^0$  級要素での解析を可能にする。次に、LPSO/Mg 二相合金の短冊形 9 結晶平板に初期方位の不均一性を与えて圧縮負荷した後に逆負荷を加えた際に、不均一性の違いが転位挙動、方位変化および強度に与える影響を検討する。さらに、 $\alpha$ -Mg 相の平均粒径を 3 段階に変化させ、結晶粒微細化が圧縮負荷後の逆負荷時における終端強度に及ぼす影響について調査する。

## 4. 研究成果

### (1) 回位-結晶塑性 Cosserat モデルの特徴

得られた回位-結晶塑性 Cosserat モデルにおいて際立った特徴は次のとおりである。有限変形理論の範疇で運動学を定式化すると、GN 転位密度は従来のすべりこう配による成分のみならず微視的回転角こう配にも依存するようになる。すなわち、転位密度はすべり由来の項と回位由来の項の差によって新たに表現される。

また、本モデルには微視回転の自由度が追加されているため、それに対する境界条件を与えることができる。したがって、試験片端面の回転を完全に拘束できるようになり、端面を固定端として扱えるようになる。他の一般化連続体モデルである高次応力モデルを用いた場合には、試験片寸法が微細になるとキンク帯の幅が試験片のほとんどを占めるようになり、端面を含む試験片全体が斜めに変形し、キンク帯が消失することが頻繁に生じる。これは高次応力モデルでは固定端を実現できないことに起因している。一方、本モデルでは固定端での回転を拘束できるため、試験片寸法によらずキンク帯を発生させ得る。

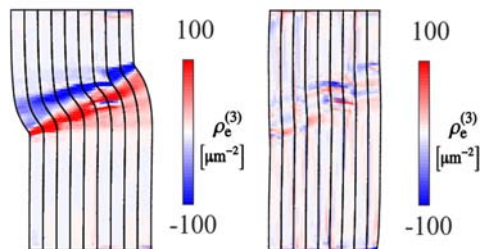
### (2) メッシュフリー解析と有限要素解析の比較

本モデルや他の高次応力モデルなどは高次ひずみを含むため、高次の導関数を精度よく計算

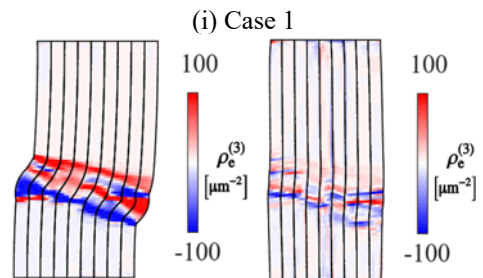
する必要がある。それには、要素境界で形状関数が不連続にならないメッシュフリー法が適していると考え、当初はこの手法を主に用いる方向で計画していた。もちろん、FEMで高次ひずみを計算する場合には、 $C^1$ 級要素を導入すればよいが、定式化が煩雑になるだけでなく、計算コスト面でメッシュフリー法に劣る。この欠点は本研究のように偶応力理論を用いて微視回転を巨視的変位こう配に拘束することに起因している。そこで、偶応力理論であっても微視回転と巨視回転を独立変数と仮定して各々の解を求め、ペナルティ法で両解を一致させれば $C^0$ 級要素が使用でき、煩雑さを抑制しつつ計算コストを低減可能である。そこで、これ以降はFEM解析を主に採用する。

### (3) 初期方位の不均一性が強度に与える影響

$\alpha$ -Mg 相と LPSO 相を交互に合計 9 個並べた短冊形結晶の初期方位に不均一性を導入する場合を考える。二相合金における各短冊の底面傾斜角は  $0 \sim 6^\circ$  の範囲であることが実験的にわかっているため、Case 1 では  $6^\circ$  に近い方位を、一方、Case 2 では  $0^\circ$  に近い方位を各短冊に無作為に与え、圧縮負荷およびその後逆負荷を作用させる。最大圧縮時および逆負荷終端時の転位密度分布および応力ひずみ線図を図 1 に示す。これを見ると、比較的軟らかい方位(Case 1)では Ortho 形キックが発生し、逆負荷時の終端においては転位の残存量が少ないことがわかる。これに対して比較的硬い方位(Case 2)では Ortho 形のみならず Ridge 形のキックが発生しており、逆負荷時に多くの転位が残存していることがわかる。これは、Ridge 形キックの内部はその中央を境に回転方向が逆であり、逆負荷時に方位が戻りにくいために発生した現象であると言える。また、両 Case の応力ひずみ線図を比較すると同図(iii)のようになり、Case 2 の方が終端強

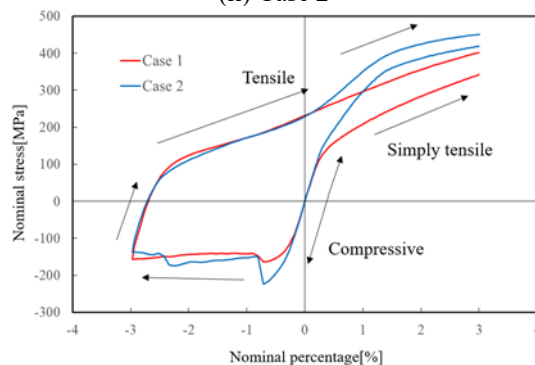


(a)  $\epsilon = -3.0\%$  (b)  $\epsilon = 3.0\%$



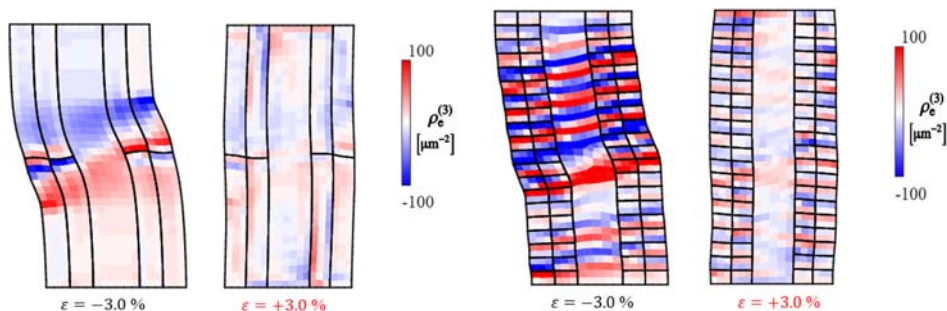
(a)  $\epsilon = -3.0\%$  (b)  $\epsilon = 3.0\%$

### (ii) Case 2



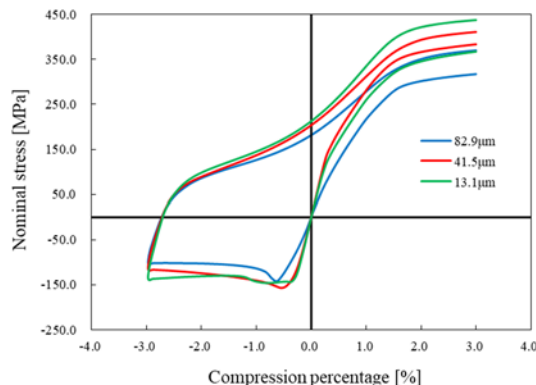
### (iii) 応力ひずみ線図

図 1 初期方位の不均一性と強度



(a) 41.5  $\mu\text{m}$

(b) 13.1  $\mu\text{m}$



### (c) Stress-strain curves

図 2  $\alpha$ -Mg 相の粒径の違いと強度

度が高くなることがわかる。

#### (4) $\alpha$ -Mg 相の粒径が強度に与える影響

短冊形結晶において、中央の短冊を LPSO 相、両側を  $\alpha$ -Mg 相の多結晶とし、 $\alpha$ -Mg 相の平均粒径を 3 段階(82.9, 41.5, 13.1  $\mu\text{m}$ )に変化させて、圧縮負荷後に逆負荷を加える。この時の転位密度分布および応力ひずみ線図を図 2 に示す。ただし、図 2(a), (b)は例として平均粒径が 41.5 $\mu\text{m}$  および 13.1  $\mu\text{m}$  の場合のみを記載している。図(a)を見ると、粒界が少ないため転位の蓄積も少なく、逆負荷時の転位の残存量も少なくなっている。一方、図(b)では圧縮時に多数の微細なキンク境界および  $\alpha$ -Mg 相の粒界に多くの転位が蓄積している。その後、逆負荷を加えても  $\alpha$ -Mg 相の転位の多くは残存する様子が見られる。このことは図(c)にも反映されており、 $\alpha$ -Mg 相の平均粒径が小さくなるほど終端強度が増加する傾向にあることがわかる。

以上の検討より、底面系を荷重軸にほぼ平行に配置するとともに初期方位の不均一性を増大させ、 $\alpha$ -Mg 相の結晶粒を微細化すれば、圧縮後に逆負荷を加えた際、終端強度を 1~3 割程度増加させ得る。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Yuichi Kimura, Ryo Ueta, Kazuyuki Shizawa	4. 巻 Vol.7
2. 論文標題 Crystal plasticity FE simulation for kink band formation in Mg-based LPSO phase using dislocation-based higher-order stress model	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Mechanical Engineering Journal	6. 最初と最後の頁 1~19
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1299/mej.19-00612	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

〔学会発表〕 計5件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 池隼佑, 志澤一之
2. 発表標題 LPSO型Mg二相合金における結晶方位の初期不均一が強度に及ぼす影響に関する回位-結晶塑性FEM解析
3. 学会等名 日本材料学会第72期学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 池隼佑, 志澤一之
2. 発表標題 LPSO型Mg二相合金における不均一性がキンク帯形成に及ぼす影響に関する回位-結晶塑性FEM解析
3. 学会等名 2022年度塑性加工春季講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 高山賢人, 木村祐一, 志澤一之
2. 発表標題 回位-結晶塑性Cosseratモデルに基づくLPSO短冊形二相多結晶のキンク形成に関するFEM解析
3. 学会等名 日本材料学会第70期学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小倉和也, 高山賢人, 志澤一之
2. 発表標題 LPSO型Mg合金におけるRidge形キンクが負荷-逆負荷時の加工硬化に及ぼす影響に関する回位-結晶塑性FEM解析
3. 学会等名 日本機械学会第34回計算力学講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 木村祐一, 只野裕一, 志澤一之
2. 発表標題 回位-結晶塑性Cosseratモデルに基づくLPSO型Mg合金に対するキンク帯形成のメッシュフリー解析
3. 学会等名 日本材料学会第6回材料WEEKワークショップ講演論文集(Web)
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関