

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 5 月 24 日現在

機関番号：17201

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2016

課題番号：26820012

研究課題名(和文)多結晶金属の塑性変形による結晶格子回転機構の解明とメソスケールモデリング

研究課題名(英文) Interpretation and meso-scale modeling of crystal lattice rotation due to plastic deformation of polycrystalline metals

研究代表者

只野 裕一 (Tadano, Yuichi)

佐賀大学・工学(系)研究科(研究院)・准教授

研究者番号：00346818

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：多結晶塑性論の枠組みにおいて、結晶粒形状、結晶粒の大きさ、結晶方位の3因子を考慮した複数の代表体積要素を用い、これに対して同一の巨視的境界条件下を課し、その材料応答をそれぞれ求め統計的なデータ収集を行った。この結果を踏まえ、実験的に観察される多結晶構造を有する有限要素モデルを作成し、可能な限り実験と同等の条件による解析を実施することで、既存の多結晶塑性モデルによる結晶格子回転の再現可能範囲を示した。得られた結果を踏まえ、結晶塑性論の枠組みにおけるより高精度なモデル構築の可能性を見出した。

研究成果の概要(英文)：A numerical investigation of the crystal lattice rotation in metallic metals was carried out using the polycrystalline plasticity framework. A systematical evaluation to determine the reasonable representative volume element was conducted, and the adequate grain shape and size were decided. Finite element models of polycrystalline FCC metal were generated based on the experimental study, and crystal plasticity analyses were carried out. The obtained results suggest that lattice rotation may occur along different directions with respect to each material point in a crystal grain, which is consistent with the experimental observations. These results may lead a more precise material model in the crystal plasticity framework.

研究分野：計算固体力学

キーワード：結晶塑性 格子回転 多結晶金属 材料モデリング

## 1. 研究開始当初の背景

金属材料のメゾスケールモデルとして近年注目されている結晶塑性モデルは、結晶方位を直接入力情報とすることが可能であり、さらに塑性変形に伴う結晶方位の回転を表現可能なことが重要な特徴の一つである。これにより、変形によって生じる結晶方位の偏りである集合組織の発達を数値解析で評価することが可能となる。結晶塑性モデルにおいて結晶方位の回転は、すべり変形に伴う塑性スピンという考えに基づいて決定される。これは材料固有の格子回転量を定義することを意味する。単一すべり系のみが活動する限りは、この仮定は物理的にも合理的に思われるが、現実の変形は多すべり系が同時に活動する場合も多い。多すべり系の活動下では、従来理論の妥当性には議論の余地が残されている。一例として、古典的な多結晶塑性モデルの一つである Taylor モデルを用いた多結晶解析において、解析条件によっては実験結果と明らかに整合しない集合組織が予測されることが知られている。すなわち、Taylor モデルでは格子回転量が実現象とは整合していないと考えられる。これは、Taylor モデルが各結晶粒の変形に過剰な拘束を仮定しているため、格子回転量が過大評価されるためであると説明されてきた。

これを解消するための格子回転モデルが過去に複数提案されているが、いずれもその後の発展は報告されておらず成功したアプローチとは言い難い。さらに研究代表者は最近になって、均質化理論に基づく多結晶塑性モデルを用いた検討において、従来の知見とは逆に Taylor モデルでは格子回転が過小評価されている可能性と、格子回転経路には強い非線形性があることを理論的に示唆した。

格子回転則に未だ多くの議論の余地が残されている主因として、塑性変形に伴い結晶格子が回転する過程を実験的に測定することが困難だったこと、その結果としてモデルの定量的な検証が難しかったことが挙げられる。変形前後の集合組織は測定可能であるが、変形過程の格子回転経路を定量的に追跡することはこれまで困難であった。前述の研究代表による格子回転経路の検討も、理論的見地からの推測の域を出ていない。しかし最近になって、EBSD を用いることで多結晶金属の格子回転をその場観察する手法が Chen らによって提案された (Chen et al., 2013)。Chen らによる実験結果は、非線形な結晶格子回転経路の可能性を示唆しているだけでなく、従来の結晶塑性モデルによる理論予測とは必ずしも一致しない結果を与えているほか、同一結晶粒内でも物質点によって結晶方位の回転方向が異なることが示唆している。これらの結晶格子回転機構の解明は、高精度なメゾスケールモデルの構築につながり、集合組織発達の予測など工業的にも重要な意義を持つ課題として残されている。

## 2. 研究の目的

以上の背景より、本研究課題では金属の結晶格子回転機構の詳細解明とそのモデル化を目的とする。本研究は特定の金属に特化したものではないが、具体的な例題として FCC 金属であるアルミニウムを対象とする。結晶塑性モデルを用いた数値解析により、多結晶体内部における格子回転経路の詳細を理論的に評価する。得られた数値解析結果と実験結果との比較を通じて、従来理論における格子回転則の適用可能範囲を明確化し、多結晶構造に起因する結晶格子回転機構の詳細を明らかにする。これらを通じて、高精度なメゾスケール材料モデル開発の基盤を構築する。

## 3. 研究の方法

本研究で用いる結晶塑性論では、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、 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  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。すべり速度  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  は以下の形式を仮定する。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0 \text{sign}(\tau^{(\alpha)}) \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{1/m} \quad (3)$$

$\tau^{(\alpha)}$  はすべり方向の分解せん断応力であり、Cauchy 応力を  $\sigma_{ij}$  とすれば  $\tau^{(\alpha)} = \sigma_{ij} s_i^{(\alpha)} m_j^{(\alpha)}$  で与えられる。 $m$  はひずみ速度感感性を表す指数、 $\dot{\gamma}_0$  は基準となるすべり速度、 $\text{sign}$  は括弧内の符号である。ここで硬化則  $g^{(\alpha)}$  の発展方程式が次式で与えられるものとする。

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^N h \left| \dot{\gamma}^{(\beta)} \right| \quad (4)$$

塑性変形の進行に伴う結晶格子の回転は、以下のベクトル  $s_i^{(\alpha)}$ 、 $m_j^{(\alpha)}$  の発展則として与えられる。

$$\dot{s}_i^{(\alpha)} = W_{ij}^* s_j^{(\alpha)} \quad (5)$$

$$\dot{m}_i^{(\alpha)} = W_{ij}^* m_j^{(\alpha)} \quad (6)$$

$$W_{ij}^* = \frac{1}{2}(L_{ij} - L_{ji}) - \frac{1}{2}(L_{ij}^p - L_{ji}^p) \quad (7)$$

上式を用いることで、結晶格子の回転が自然な形で導入されることが、結晶塑性モデルの特徴である。

以上のモデルに基づく結晶塑性有限要素法を解析手法として、多結晶金属の詳細な有限要素モデルの数値解析を実施することで、塑性変形に伴う結晶格子回転の詳細な理論的検討を実施する。本研究では、FCC 金属多結晶を想定した 12 のすべり系を考え、材料定数は純アルミニウムのものを用いる。

#### 4. 研究成果

##### (1) 解析条件

図1に本研究で使用した多結晶モデルの例を示す。この多結晶モデルを、約15,000の3角形要素で分割した有限要素メッシュを作成した。また、表1は図1のモデルにおける代表的な結晶粒の、結晶方位のオイラー角である。これらの結晶方位を、各有限要素の積分点における初期方位とした。ここに示す結晶粒形状および結晶方位は、Chenらの文献に基づいて作成したものである。このモデルに対し、図中水平方向への公称ひずみ11%の単軸引張解析を実施し、得られた結果をChenらの文献に示された実験結果と比較する。

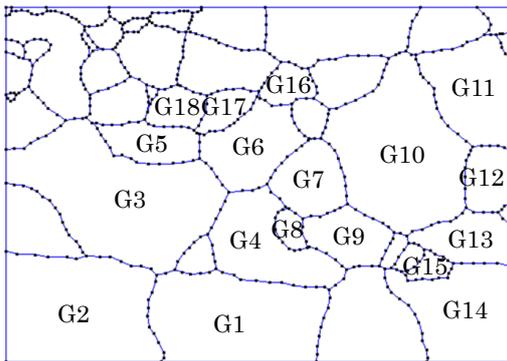


図1 解析モデル

表1 各結晶粒の結晶方位のオイラー角

Grain	Euler angles
G1	(82,132,73)
G2	(71,55,287)
G3	(88,117,82)
G4	(101,86,174)
G5	(128,86,164)
G6	(105,90,169)
G7	(105,106,103)
G8	(90,90,4)
G9	(50,90,346)
G10	(119,103,132)
G11	(102,130,104)
G12	(79,82,286)
G13	(118,119,128)
G14	(88,102,82)
G15	(94,85,185)
G16	(102,90,166)
G17	(104,107,98)
G18	(105,76,182)

##### (2) 相当塑性ひずみ分布

公称ひずみ3%および11%における相当塑性ひずみ分布を図2, 3に示す。いずれの場合においても、多結晶構造に起因して解析領域内における相当塑性ひずみ分布には強い不均一性が生じていることが確認できる。さら

に、同一結晶粒内においては初期結晶方位が同一であるにも関わらず、変形後の粒内の相当塑性ひずみは明らかに不均一である。これは、周囲の結晶粒の拘束によるものであり、多結晶ゆえに生じる変形である。結晶格子回転は塑性変形に起因して生じることから、相当塑性ひずみ分布の不均一性は結晶格子回転の不均一性を誘発するものと予想される。また図2と図3を比較すると、相当塑性ひずみの絶対値は異なるものの、相当塑性ひずみの分布の傾向はほぼ同じであり、塑性変形の初期から強い不均一性が生じていることが確認できる。このことは、結晶格子回転の不均一性もまた、塑性変形の初期段階から発生する可能性を示唆している。

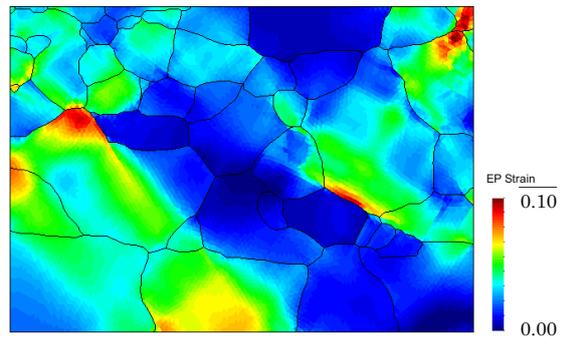


図2 相当塑性ひずみ分布 (公称ひずみ3%)

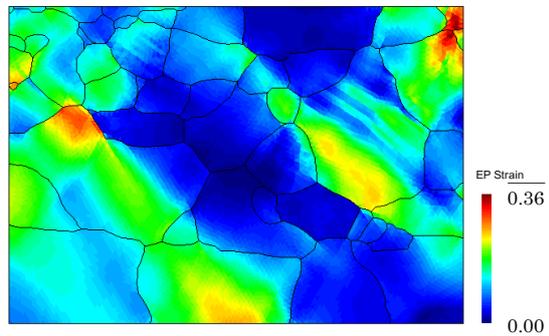


図3 相当塑性ひずみ分布 (公称ひずみ11%)

##### (3) 結晶格子回転に関する定性的検討

以上に示した解析条件において、各結晶粒内の方位回転について詳細な検討を行う。ここでは、図1の解析モデル中のG1, G7, G12の3つの結晶粒に着目する。公称ひずみ3%, 8%, 11%において、これらの結晶粒内の各積分点の結晶方位を評価した結果を図4に示す。ここでは、結晶方位を荷重方向に対する逆極点図として表示している。

黒色の点で表される初期の結晶方位は結晶粒内で同一であるが、変形の進行と共に結晶方位は同一粒内でも不均一性を示すようになる。緑色、青色、赤色の点が、それぞれ公称ひずみ3%, 8%, 11%における結晶方位である。

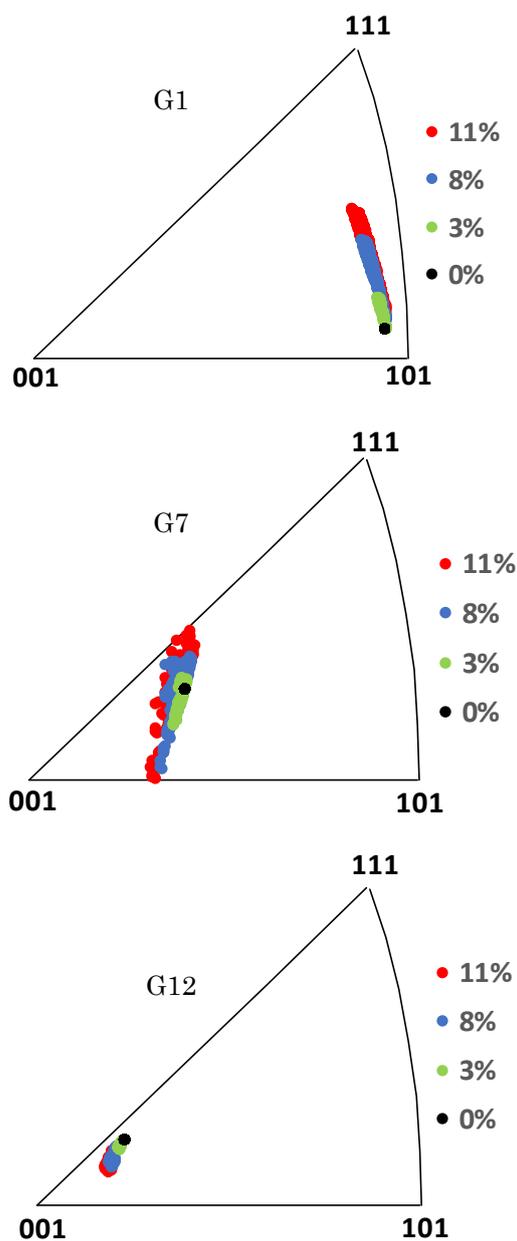


図4 塑性変形に伴う格子回転（逆極点図）

ここでG1に着目すると、初期方位は(101)方向付近にあるが、変形と共に結晶方位は(111)方向へ向かって回転している。それぞれのひずみの段階において、格子回転量は積分点毎に異なっており、図中では線上の分布となっていることが確認できる。このことは、初期方位が同一であっても格子回転量は粒内で分布を持つことを示唆している。この結晶方位の分布は、変形の進行と共により広い範囲となる。しかしながら、G1では全ての物質点が同一の方向へ回転する傾向が見られた。この回転方向は、この結晶粒の初期方位に対応するシュミットファクターが最大のすべり系に対応するものであり、結晶塑性論の枠組みからも合理的な結果である。

つぎにG7について見ると、G1とは様相が大きく異なる。初期方位は粒内で同一である

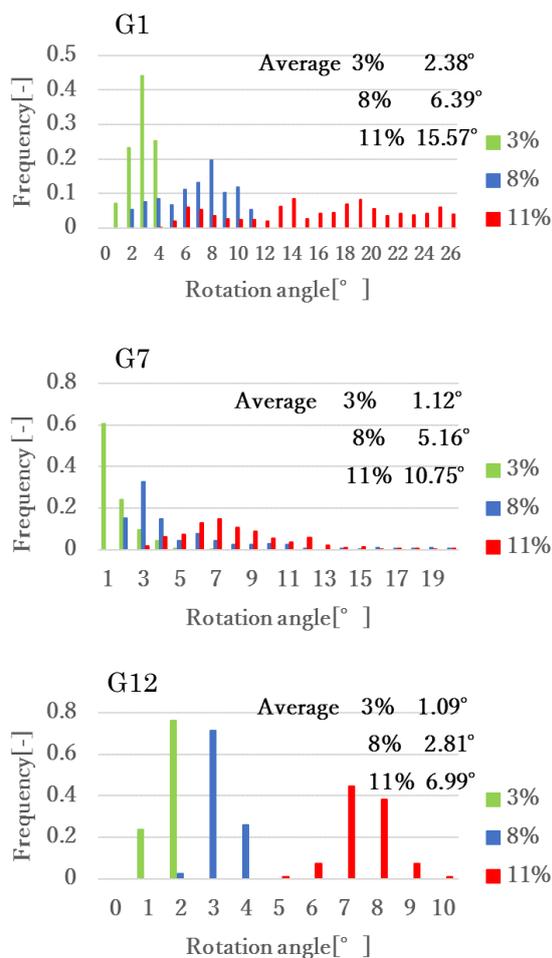


図5 格子回転量のヒストグラム

が、塑性変形が進行すると物質点毎に2つの方向のいずれかへ回転する傾向が明確に表れる。すなわち、同一初期方位にも関わらず、粒内の位置によって結晶格子が回転する方向が異なっている。この2つの回転方向について調査すると、初期方位結晶方位においてシュミットファクターが最大、および2番目に大きいすべり系に対応する方向であることがわかった。このことから、結晶粒内の変形の不均一性に起因して、同一粒内でも複数の方向へ格子回転する可能性が示唆される。

G12は、G1やG7と異なり、変形が進行しても格子回転の量は相対的に非常に小さい。図2, 3の相当塑性ひずみ分布では、G12は塑性変形が進行していることが確認できるため、塑性変形が進行しながらもほとんど結晶方位が変化しない結晶粒が存在することが示唆される。これは、同一物質点で回転方向が逆方向となるような複数のすべり系が同程度に活動することに起因している。

以上で得られた格子回転方向に関する定性的評価は、いずれも実験的に確認された傾向と整合するものであり、本研究による解析結果は妥当なものであると考えられる。

(4) 結晶格子回転に関する定量的検討  
前節で示した格子回転量について、より定

量的な評価を行うため、同じ3つの結晶粒に着目し、各物質点の格子回転量のヒストグラムを評価した。これを図5に示す。縦軸は、合計が1となるよう正規化を施している。

G1, G2ではいずれも変形の進行と共に格子回転量は増大し、かつその分布範囲も広がっていくことが確認できる。一方G12は、格子回転量が相対的に小さいため、ヒストグラム上においても格子回転量の分布範囲は狭いことがわかる。

#### (5) 研究成果のまとめと今後の展望

以上に示した結果より、本研究で用いた枠組みにより、多結晶金属内の結晶格子回転の不均一性を実現象と整合するよう評価できることが示された。このことから、各結晶粒を細かい有限要素メッシュで表現する結晶塑性有限要素法であれば、従来の格子回転則は十分合理的なモデルであることが示された。一方で、Taylorモデルをはじめとする各結晶を粗視化した結晶塑性モデルにおける格子回転則には、依然として議論の余地が残されている。今後の展望として、本研究課題で得られた知見をもとに、粗視化された結晶塑性モデルの格子回転則の精緻化が挙げられる。また、本手法はBCC金属やHCP金にも適用可能であるため、結晶構造と格子回転の関係に関する体系的な研究への発展も期待できる。さらに、ここで得られた解析手法に基づき、より複雑な変形過程を経る塑性加工問題における集合組織発展の予測への応用も、工業的に大いに意義のある取り組みであると考えられる。

#### 5. 主な発表論文等

[学会発表] (計2件)

- ① 栗栖嵩明, 只野裕一, 萩原世也, 六方晶金属における幾何学的硬化に関する結晶塑性解析, 日本機械学会九州支部第70期総会・講演会, 2017年3月14日, 佐賀大学(佐賀市).
- ② Takaaki Kurisu, Yuichi Tadano, Seiya Hagihara, Effect of lattice rotation on hardening behavior of HCP metal, 13th Asia-Pacific Conference on Engineering Plasticity and Its Applications, 2016年12月6日, 東広島芸術文化ホール くらら(東広島市).

#### 6. 研究組織

##### (1) 研究代表者

只野 裕一 (TADANO, Yuichi)  
佐賀大学・大学院工学系研究科・准教授  
研究者番号: 00346818