

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 23 日現在

機関番号：10106

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2011～2015

課題番号：23109009

研究課題名（和文）マルチスケール計算力学によるLPSO構造の変形と力学特性の解明

研究課題名（英文）Study on the deformation process and macroscopic mechanical response of LPSO structures by multiscale computational mechanics

研究代表者

大橋 鉄也（Ohashi, Tetsuya）

北見工業大学・工学部・教授

研究者番号：80312445

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 78,200,000円

研究成果の概要（和文）：押出加工を施すとLPSO型Mg合金の強度と延性は大きく改善し、微視的には、LPSO相の結晶方位の配列とキンク変形が観察されていた。本研究ではキンク変形とLPSO相の力学特性を分子動力学法と結晶塑性有限要素解析によって調べた。

検討の結果、材料中の初期不均一性から底面すべりが生じ、帯状のキンク帯に発達していった。すべり変形にともなうひずみ硬化特性と幾何学的軟化現象はキンク変形の強さとパターンに関与する主要な因子であることも明らかになった。キンク帯が導入されるとLPSO相の強い変形異方性は緩和され、このことが押出変形後のMg/LPSO合金の強度と延性の向上に寄与していると結論づけた。

研究成果の概要（英文）：Strength and ductility of Mg/LPSO alloys are significantly improved after extrusion process. Crystal orientation of the LPSO phase was aligned and kink deformation was observed after the extrusion. In this study, we examined the process of kink deformation and macroscopic mechanical responses of the LPSO phase material by molecular dynamics simulation and crystal plasticity analyses.

Results show that slip deformation on basal system develops from initial inhomogeneities and grows into a band shaped deformation pattern of kink. Strain hardening and geometric softening of slip deformation were shown to control the extent and pattern of kinking. It was also shown that the deformation anisotropy of LPSO phase was suppressed by kinking and this was assumed to contribute toward the improved strength and ductility of the extruded Mg/LPSO alloys.

研究分野：材料力学

キーワード：キンク変形 すべり変形 転位 回位 初期不均一性 マルチスケール解析 結晶塑性解析 原子シミュレーション

1. 研究開始当初の背景

MgZn₁Y₂合金に代表される LPSO 型マグネシウム合金は casting 後に押し出し加工を施すことによって強度と延性がめざましく向上し、航空機用材料として広く使われている Al 合金の特性を凌駕する。押し出し加工によって LPSO 相は押し出し方向に引き伸ばされ、結晶方位に強い配向が生ずること、LPSO 相にはキック変形が生ずること、LPSO 相は微細な再結晶 α-Mg 領域と粗大な α-Mg 領域に囲まれていることがわかっているが、押し出し加工後の力学特性が著しく向上した主な理由はキック変形が関係すると単に想像されているにすぎなかった。

2. 研究の目的

本研究では結晶配向した LPSO 相に焦点を絞り、押し出し加工することによって LPSO 構造相にキック帯が形成する過程を、すべり変形の局在化とそれに伴う結晶欠陥の集積の観点から明らかにする。また、押し出し加工によってキック変形が生じた LPSO 相材料の巨視的な力学応答特性を明らかにする。

3. 研究の方法

LPSO 相に生ずるすべり変形およびそれに付随する現象の原子論的なレベルでのシミュレーションは、分子動力学法を用いる。これよりも粗視化したレベルでのすべり変形の局在化現象や、キック帯がすでに導入された LPSO 相材料の巨視的な力学応答特性の解析などは、ひずみ勾配結晶塑性有限要素解析の手法を用いて検討する。

4. 研究成果

(1) 原子モデルを用いた研究 ミクロな視点からキック変形が生じる結晶学的な要因、キック帯形成の力学過程の描像を明らかにする。特に、本課題で対象とするシンクロ型 LPSO 構造がキック変形を生じる結晶学的な要因について明らかにするためには、キック変形に及ぼす濃度変調と構造変調の影響を分離して評価することが必要である。以下に、上述の目的と問題意識の下、行った研究項目とその成果について示す。

(1)-① 分子動力学法を用いた積層変調のみを有する LPSO 構造の変形挙動解析 LPSO 構造の積層変調のみを再現する原子間ポテンシャルを作成し、分子動力学シミュレーションに組み込むことで、LPSO 構造と HCP 構造において圧縮負荷の下で生じる格子欠陥群の構造について比較検討した。HCP 構造が様々な変形条件下で双晶の急速な伝播によって変形するのに対して、LPSO 構造では双晶変形が抑制されることが確認された。LPSO 構造において、非底面転位によって形成される比較的小さい方位差を有する界面から次々と転位が射出され界面方位差が急激に増加することで、大きな方位差を持つ界面が形成され

るキック変形過程を明らかにした。(図 1)

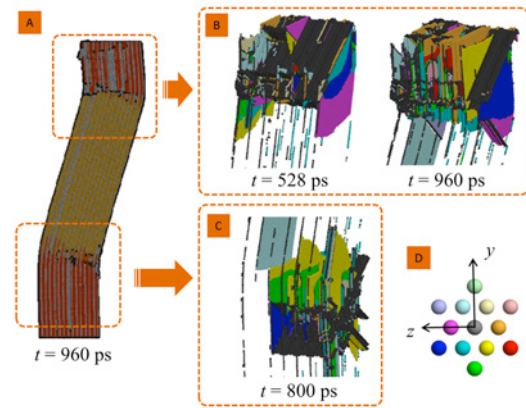


図 1. 分子動力学法で観察されたキック変形とキックバンド内すべり履歴: (A) 全体の変形状態, (B) (C) すべり系の分布, (D) すべり方向を表すカラーマップ

(1)-② 分子動力学法を用いたシンクロ型 LPSO 構造に対する変形挙動解析 Mg-Al-Gd 系, Mg-Zn-Y 系の原子間ポテンシャルを作成し、fcc 積層部に添加元素によって構成されるクラスタを導入したシンクロ型 LPSO 構造の変形挙動解析を行った。この際、クラスタ濃度をパラメータとすることで、濃度変調の影響を抽出し、fcc 積層部でのクラスタ密度が中程度の場合に、上記と類似のキック様変形が優先的に生じることを示した。

(1)-③ メタダイナミクス法を用いた Mg および LPSO 構造中の転位生成の解析 分子動力学法では、手法の特徴上、変形速度を極端に速くせざるを得ず、活性化体積の大きい現象を抽出してしまう。そこで、Mg および LPSO 構造中の変形過程の活性化自由エネルギーを評価するために、メタダイナミクス法に基づく解析コードの作成を行い、Mg 中での柱面転位や底面転位の生成と運動に要する活性化自由エネルギーの評価を行った。また、シンクロ型 LPSO 構造 (Mg-Al-Gd 系) 中の転位運動の活性化自由エネルギーについて明らかにし、現実的な変形速度での各種すべりの発現可能性を明らかにした。(図 2)

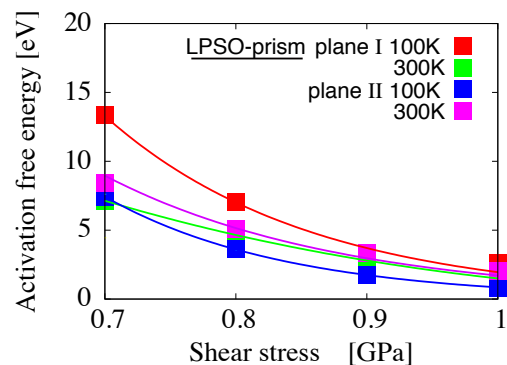


図 2. 自由表面からの柱面転位の生成の活性化自由エネルギーのせん断応力依存性

(2) 結晶塑性連続体力学によるキンク形成解析 高次応力を考慮した転位密度依存形の結晶塑性モデルを構築し、シンクロ型 Mg 基 LPSO 相におけるキンク帯形成のマルチスケール FEM 解析を実施することで、キンク帯形成過程やキンク発生に伴う材料強化特性について検討した。その際、LPSO 相の大変形状態を記述するため、結晶塑性論的に表現した GN 転位密度を増分形式で定義するとともに、SS 転位密度の発展式をすべり面の曲率依存形に拡張した。次に、仮想仕事の原理に基づいて高次理論における諸保存則を導出し、高次応力の発散が内部応力になることを示した。また、熱力学的手法に基づいて、速度形の弾粘塑性結晶塑性構成式および高次応力の構成式を導出した。後者は GN 転位密度の速度で表現され、係数には GN 転位の作る超範囲応力場が及ぼす有効範囲を表す特性長が含まれることを示した。

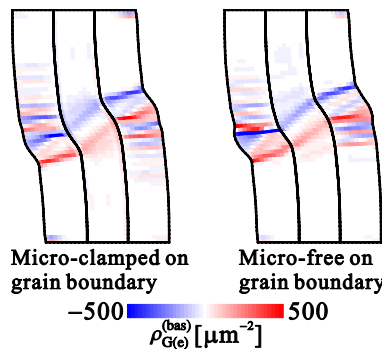


図 3 多結晶体に発現する複数のキンク帯

続いて、得られた材料モデルを用いて Mg 基 LPSO 相に対する結晶塑性 FEM 解析を実施した。まず、底面が荷重軸と平行になるような初期方位を有する短冊状の単結晶に対する解析を行い、結晶方位の微細な初期不整あるいは転位密度の局所的な不整など、何らかの材料不均一性を基点としてキンク帯が発現し、高まった応力を一気に緩和させる作用があることを示した。なお、キンク帯が発生する位置は構造全体のひずみエネルギーを最小化するように決まることを明らかにした。また、キンク帯は局所化した底面すべりの集積であり、キンク境界の傾角は高角粒界と同様に大きく、境界に沿って同符号の GN 転位が蓄積する様子を再現した。また、高次応力の効果によってキンク帯のメッシュ依存性が大幅に低減されること、ならびに特性長の変化にともなってキンク帯の幅が変化するという寸法効果を本モデルが有していることを確認した。続いて短冊形三結晶からなる多結晶体に対する解析を実施した。その際、高次応力理論の利点を活かし、境界の種類に応じて転位停止条件および転位通過条件を使い分けるようにした。その結果、多結晶の場合には粒界の存在に起因する拘束のため、最初に発現したキンク帯を基点としてその近傍

に新たなキンク帯が次々と形成されていくことを再現した(図 3)。複数のキンク帯の形成にともなって加工硬化が増加することも確認した(図 4)。加えて、リッジ型キンク境界の傾角はリッジ先端へ向かって変化するという実験事実と整合する結果を得た。さらに、すべりの不適合度におけるくさび型回位に相当する成分を用いれば、Cosserat モデルに基づく複雑な回位密度を用いることなく、キンク帯を特徴づける回位四重極構造を簡易的に表現できることを示した(図 5)。

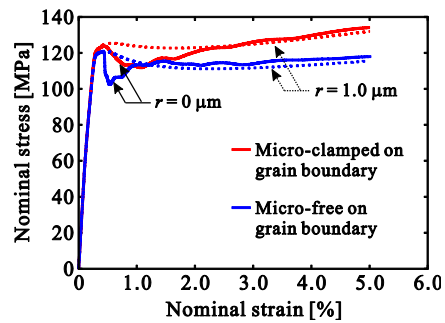


図 4 多結晶体の応力-ひずみ曲線

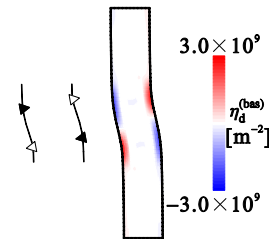


図 5 不適合度を用いた回位四重極構造

(3) 押出過程でのキンク形成解析 多結晶中の複雑な変形拘束下にある LPSO 相において、キンクモードに対応する粒内方位差が発達する過程を、押出加工を受ける LPSO 型 Mg 合金を想定した等二軸圧縮解析を結晶塑性有限要素法により調査した。

図 6(a), (b) は押出材の解析モデルを示しており、それぞれランダム方位を持つ α -Mg 相および押出集合組織を持つ LPSO 相の有限要素メッシュである。この解析モデルに対して図 6(c) に示す境界条件により等二軸圧縮負荷を与えることにより、押出過程において LPSO 相中に発達する方位変動を予測した結果の一例が図 6(d) である。図 6(d) は、モデル中心の LPSO 相を対象として、負荷開始時を基準とした押出比 1.07 における c 軸と押出方向(x 方向)間の角度変化量 $\Delta\phi$ の分布を示している。押出方向と垂直に角度変化量の大きな帯状領域が形成されており、これらはキンクモードの変形帯に対応している。

図 7 は上記解析を押し比 1.44 まで実施した結果を定量的に評価した結果を示しており、図 7(a) は c 軸と押出方向間の角度変化量 $\Delta\phi$ 、図 7(b) は押出軸周りの c 軸回転量 $\Delta\theta$ の押出方向に対するラインプロファイルを示している。いずれもモデル中心の LPSO 相を

対象として、16パスの結果を重ねて示している。図7に示した結果より、 $\Delta\phi$ では全てのラインプロファイルが比較よく重なっているのに対し、 $\Delta\theta$ ではパスごとの差が著しい。このような結晶方位変動による領域分割の特徴を図7中に模式的に示している。ここで、赤の破線は底面の折れ曲がりに対応していることからキंकモードの変形により導入された方位変動と解釈できる。以上の数値解析より、押出加工を受けるLPSO型Mg合金中のLPSO相は、キंकモードを含む結晶方位変動により細かく領域分割され得ることが示唆された。

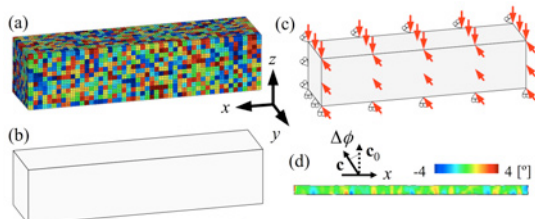


図6 解析モデル(a~c)および解析結果(d)

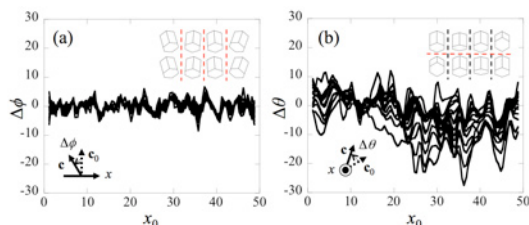


図7 等二軸圧縮荷重で発達した方位変動

(4)変形帯のあるLPSO試料の力学応答特性
 一般に底面すべりが主要な変形モードの材料が押出加工を受けると、底面法線方向が押出軸に垂直になるように結晶方位が配向する。またこのとき材料は押出軸に垂直な2つの方向の圧縮だけでなく大きなせん断も受ける。図8に押出加工の際の多軸応力場(図8(a))とその作用によって形成される変形帯(図8(c))を模式的に示した。EDは押出軸方向、 r と θ はそれぞれ押出軸に垂直で軸の半径方向と周方向である。図8(b)に示した結晶方位は一例であり、底面法線ベクトルは一般に r - θ 面内にある。図8(c)で2つの濃い灰色の帯状の領域がキंक帯であり、 r 軸に垂直な薄い灰色の領域は、結晶方位の回転を伴わないせん断帯である。キंक帯とせん断帯をまとめて変形帯と呼ぶことにする。

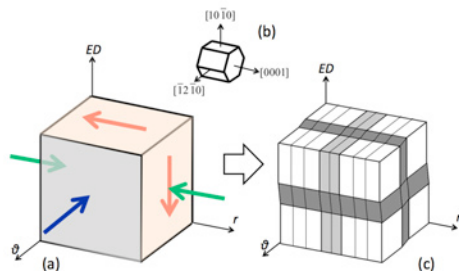


図8 キंक帯とせん断帯のあるLPSO試料のモデル。

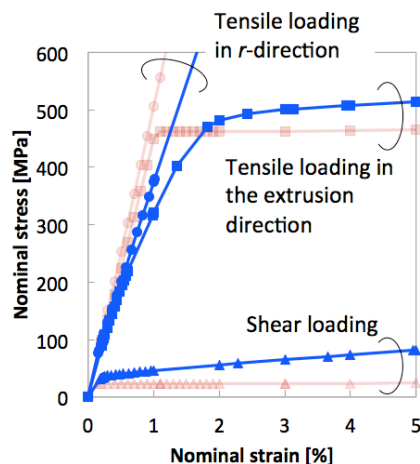


図9 変形帯導入による力学応答特性の変化

図9は変形帯を図8(c)のように含む試料のモデルにED方向または r 方向の引張荷重を加えたときの変形応答と、 r 軸に垂直な面にED方向のせん断荷重(及びこれに共役なせん断荷重)を加えたときの変形応答を結晶塑性解析有限要素法によって解析して得た結果である。薄いピンクの曲線群は比較のために変形帯がないモデルについて計算した結果である。変形帯が無いモデルでは r 方向引張では塑性変形は生じず、ED方向引張では約460MPaで降伏の後、ほとんど加工硬化せずすべり変形が進行する。この加工硬化率と塑性流動応力を比較すると $d\sigma/d\varepsilon < \sigma$ であり、不安定変形条件の範囲に入るが、変形帯が導入されると安定変形条件を満たす。せん断荷重に対しても、変形帯が導入されると加工硬化率が上昇し、塑性流動応力は低いものの、変形が安定することがわかる。すなわち、キंक帯とせん断帯が導入されるとLPSO相が本来持っていた大きな変形特性の異相性が抑制され、変形が安定する。押出加工によってLPSO型マグネシウム合金の強度だけでなく延性が大きく改善される要因は、LPSO相の力学応答特性が改善されるためであると考えられる。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計54件)

- ① M. Uranagase and R. Matsumoto, Effects of normal stresses on the homogeneous nucleation of a basal dislocation in magnesium, Computational Materials Science, 113, (2016), pp. 143-147. 査読有 (DOI: 10.1016/j.commatsci.2015.11.031)
- ② M. Uranagase and R. Matsumoto, Tension-compression asymmetry in uniaxial deformation of a magnesium bicrystal with [-1100] symmetric tilt grain boundary, Computational Materials Science, 118, (2016), pp. 124-132. 査読有

(DOI: 10.1016/j.commatsci.2016.03.012)

③ K. Hagihara, T. Mayama, M. Honnami, M. Yamasaki, H. Izuno, T. Okamoto, T. Ohashi, T. Nakano, and Y. Kawamura, Orientation dependence of the deformation kink band formation behavior in Zn single crystal, International Journal of Plasticity, 査読有, Vol. 77, 2016, 174-191

DOI: 10.1016/j.ijplas.2015.10.005

④ T. Mayama, T. Ohashi, Y. Tadano, K. Hagihara, Crystal plasticity analysis of development of intragranular misorientations due to kinking in HCP single crystals subjected to uniaxial compressive loading, Materials Transactions, 査読有, Vol. 56, 2015, 963-972

DOI: 10.2320/matertrans.MH201403

⑤ 上田亮, 志澤一之, Mg 基 LPSO 相単結晶におけるキンク帯形成の転位-結晶塑性シミュレーション, 材料, 査読有, Vol. 64, No. 4, (2015), pp. 295-302,

<http://doi.org/10.2472/jsms.64.295>

⑥ M. Tane, T. Mayama, A. Oda, H. Nakajima, Effect of crystallographic texture on mechanical properties in porous magnesium with oriented cylindrical pores, Acta Materialia, 査読有, Vol. 84, 2015, 80-94
DOI: 10.1016/j.actamat.2014.10.024

⑦ R. Matsumoto and M. Uranagase, Deformation Analyses of the Long-Period Stacking Ordered Phase Using Molecular Dynamics Simulation: Kink Deformation under Compression and Kink-boundary Migration under Tensile Strain, Materials Transactions, 56-7, (2015), pp. 957-962. 査読有

(DOI: 10.2320/matertrans.MH201408)

⑧ M. Uranagase and R. Matsumoto, Thermal Activation Analysis of Enthalpic and Entropic Contributions to the Activation Free Energy of Basal and Prismatic Slips in Mg, Physical Review B, 89, (2014), 224103. 査読有

(DOI: 10.1103/PhysRevB.89.224103)

⑨ R. Kondo, Y. Tadano and K. Shizawa, A Phase-field Model of Twinning and Detwinning Coupled with Dislocation-based Crystal Plasticity for HCP Metals, Computational Materials Science, 査読有, Vol. 95 (2014) pp. 672-683,

DOI: 10.1016/j.commatsci.2014.08.034

⑩ R. Matsumoto, M. Uranagase and N. Miyazaki, Molecular Dynamics Analyses of Deformation Behavior of Long-Period-Stacking-Ordered Structures, Materials Transactions, 54-5, (2013), pp. 686-692. 査読有

(DOI: 10.2320/matertrans.MI201211)

[学会発表] (計 177 件)

① T. Ohashi and T. Mayama, Formation of kink bands in LPSO phase regions in extruded magnesium alloys and their mechanical effects, - a crystal plasticity analysis study -, Thermec 2016, 2 June, 2016, Graz (Austria), Keynote lecture

② 志澤一之, 上田亮, 高次応力を考慮した転位-結晶塑性モデルによる LPSO 型 Mg 合金の変形帯に関するメッシュ非依存性, 日本材料学会第 65 期学術講演会, 2016 年 5 月 27 日, 富山大学五福キャンパス (富山県・富山市)

③ 眞山 剛, 二軸圧縮負荷を受ける LPSO 型 Mg 合金の結晶塑性解析, 日本機械学会 M&M2015 材料力学カンファレンス, 2015 年 11 月 23 日, 慶應義塾大学矢上キャンパス (神奈川県・横浜市)

④ T. Mayama, Crystal plasticity modelling of deformation behavior of cast Mg-Zn-Y polycrystals with LPSO phase, Mg2015, 2015 年 10 月 13 日, Jeju (Korea)

⑤ T. Ohashi, T. Mayama, Y. Yasuda, and Y. Kanazawa, Crystal plasticity finite element analyses on the development of deformation bands in LPSO phase in extruded magnesium alloys and their mechanical effects in later deformation, AMW2015, 21 June, 2015, St. Petersburg (Russia)

⑥ T. Mayama, Crystal plasticity analysis of kinking in HCP metals subjected to uniaxial compression, AMW2015, 21 June, 2015, St. Petersburg (Russia)

⑦ R. Matsumoto and M. Uranagase, Atomistic study of kink deformation mechanisms of the long-period stacking-ordered phase, AMW2015, 21 June, 2015, St. Petersburg (Russia)

⑧ 松本龍介, 原子モデルによる LPSO 構造中のキンク界面の形成機構の検討, 第 58 回日本学術会議材料工学連合講演会, 2014 年 10 月 27 日, 招待講演, 京都テルサ (京都府・京都市)

⑨ S. Tajiri, and K. Shizawa, Description of Disclination Density in Mg-based LPSO Phase Using a Crystal Plasticity Cosserat Model, LPSO2014, 2014 年 10 月 6 日, ホテル日航熊本 (熊本県・熊本市)

⑩ R. Ueta, and K. Shizawa, A Dislocation-based Crystal Plasticity Simulation on Kink Band Formation and Evolution in Polycrystalline Mg Alloy with LPSO Phase, AEPA2014, 2014 年 9 月 8 日, Kaohsiung (Taiwan)

⑪ 松本龍介, LPSO 構造におけるキンクバンドの形成に関する原子モデル解析, 日本機械学会 (2013 年度年次大会), 基調講演, 2013 年 9 月 9 日, 岡山大学津島キャンパス (岡山

県・岡山市)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

大橋鉄也 (OHASHI Tetsuya)

北見工業大学・工学部・教授

研究者番号：80312445

(2) 研究分担者

志澤一之 (SHIZAWA Kazuyuki)

慶應義塾大学・理工学部・教授

研究者番号：80211952

(2) 研究分担者

松本龍介 (MATSUMOTO RyoSuke)

京都大学・工学（系）研究科（研究院）・講師

研究者番号：80363414

(3) 連携研究者

眞山剛 (MAYAMA Tsuyoshi)

熊本大学・工学部・准教授

研究者番号：40333629