

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 4 日現在

機関番号：11301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2012～2013

課題番号：24656070

研究課題名(和文)六方晶金属における変形双晶の熱力学モデル

研究課題名(英文)Thermodynamics-based constitutive model for deformation twinning

研究代表者

寺田 賢二郎(Terada, Kenjiro)

東北大学・災害科学国際研究所・教授

研究者番号：40282678

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円、(間接経費) 930,000円

研究成果の概要(和文)：結晶塑性・変形双晶の構成モデルを構築した。具体的には、変形勾配の弾塑性乗算分解に対して変形双晶の無応力ひずみに対応する双晶変形勾配を乗算形式で導入し、内部変数を用いる熱力学に基づく古典的定式化を採用した。この内部変数には、各変形双晶パターンの存在率を選び、双晶変形勾配はこれの連続関数として表現した。また、自由エネルギーには、通常の弾性および結晶すべりのひずみ硬化に関する項に加えて、母相および変形双晶相の化学的エネルギーと双晶界面エネルギーをこの内部変数の関数として導入した。そして、この内部変数(変形双晶相の体積分率)がある閾値を超えた際に格子再配向が行われるものと仮定した。

研究成果の概要(英文)：A thermodynamics-based constitutive model, which accounts for both crystallographic slip and deformation twinning, is developed for a single crystal of hcp metals within the framework of finite crystal plasticity. While the volume fractions of stress-free twin deformations are introduced as internal variables, the free-energy involves the bulk energy of separate phases and the surface energy at twin interfaces, which are introduced as functions of the internal variables, in addition to the standard hardening-related energy in crystal plasticity framework. After the formulation is described in detail, a series of numerical examples is presented to verify the performance of the proposed model in predicting the deformation twinning, the successive deformation process and the twinning-induced stress responses. The results are studied with reference to the theoretical consequences and the experimental results reported in the literature.

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎・計算力学

キーワード：計算力学 六方晶金属 機械材料・材料力学 有限要素法

### 1. 研究開始当初の背景

マグネシウム合金に代表される六方晶金属の非弾性変形機構は、結晶格子のすべりに起因する塑性変形に加えて、変形双晶による無応力せん断変形と格子再配向により特徴づけられる。その構成則および数値解析的研究の多くは、連続体力学の枠組みで単結晶のすべり変形をモデル化した結晶塑性構成則を拡張したモデルを提示し、有限要素法(以下、FEM)に実装した結晶塑性の適用が多い。この結晶塑性モデルの拡張に際して、各物質点の挙動として考慮すべきことは次の通りである。

- 変形双晶の形成条件
- 変形双晶における無応力せん断変形の導入
- 変形双晶における格子再配向

既往の研究の多くは、双晶変形を結晶すべり変形の一つとして導入して Schmidt 因子を変形双晶の形成を判定するための指標としており、無応力せん断変形も上限値のある塑性ひずみの一種として評価されている。具体的には、双晶面の Schmidt テンソルから分解せん断応力を算出し、設定した双晶の臨界分解せん断応力(以下、CRSS)を超えた時点で“擬似的塑性変形”が生じるような“拡張”結晶塑性 FEM 解析を行っている。また、格子再配向に際しては、実際に生じうるせん断変形量に対する“擬似的塑性変形”の比率を擬似的体積分率と定義して、その値がランダムに設定された閾値を超えた時点でその応力評価点における結晶格子を回転させている。これらは簡易的なモデルであるが、多結晶体の有限要素モデルに適用したときの数値解析により、集合組織の形成やマクロ的な応力-ひずみ曲線など、実験結果をある程度良く再現できることが報告されている。

結晶粒を連続体とみなして、結晶すべりや原子の再配列といった微視的挙動を構成則で表現するには、何らかの近似、理想化を行う必要がある。しかし、原子の再配列は双晶面上ではなく、空間的な広がりを持った領域で生じるので、前述の先行研究のようにすべり挙動と同様の CRSS を双晶形成条件に用いることは変形双晶の物理とは整合しない。また、格子再配向を連続体力学の枠組みでモデル化するには、物質点に生成された変形双晶やその存在確率の蓄積量に閾値を設けて制御するしかないが、既往のモデルでは、対応する内部変数は変形双晶の形成条件と整合していない。マグネシウムごに代表される六方晶金属を構造用材料として利用していくには、これらの理論的不整合のない構成モデルの提案が望まれている。

### 2. 研究の目的

本研究の目的は、既存モデルにおける前掲の問題点と理論的不整合を払拭する、結晶塑性・変形双晶の構成モデルを構築することである。

### 3. 研究の方法

変形勾配の弾塑性乗算分解に対して変形双晶の無応力ひずみに対応する変形勾配(双晶変形勾配)を乗算形式で導入し、内部変数を用いる熱力学に基づく古典的定式化を採用する。この内部変数には、各変形双晶パターンの存在率(すなわち、体積分率)を選び、双晶変形勾配はこれの連続関数として表現する。また、自由エネルギーには、通常の弾性および結晶すべりのひずみ硬化に関する項に加えて、母相および変形双晶相の化学的エネルギーと双晶界面エネルギーをこの内部変数の関数として導入する。そして、この内部変数(変形双晶相の体積分率)がある閾値を超えた際に格子再配向が行われるものと仮定する。

なお、変形双晶の発展方程式の導出に際しては、Idesman ら<sup>1)</sup>が形状記憶合金のマルテンサイト変態の数理モデル化に際して示した定式化を参考にする。特に、変形双晶の体積分率を内部変数として導入し、Idesman らの定式化と同様に、Helmholtz 自由エネルギーに対応する項を加えることで変形双晶の形成条件を定義する。このような変形双晶に対する新しいモデル化により、変形双晶を擬似的なすべり面における分解せん断応力によるのではなく、熱力学的な駆動力による形成判定が可能となる。また、双晶変形勾配の定義式において、各双晶種別の無応力ひずみパターンは材料パラメータであり、格子再配向の判定に必要な体積分率は各パターンの係数であるので、変形双晶の構成モデルで考慮すべき、背景で述べた3点が同一の内部変数で関連づけられることとなる。加えて、提案するモデルにおける変形勾配の乗算分解と自由エネルギーの定義において、結晶すべりと変形双晶が関連づけられる。

### 4. 研究成果

#### (1) 定式化

紙面の制約上、導出過程を詳細に示すことは出来ないので、ここでは、定式化の結果得られた構成則の支配方程式を列挙しておく。

- 変形勾配の乗算分解

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^t \mathbf{F}^p$$

$\mathbf{F}^e$ : 弾性変形勾配

$\mathbf{F}^t$ : 変態変形勾配

$\mathbf{F}^p$ : 塑性変形勾配

- Kirchhoff 応力

$$\boldsymbol{\tau} := \mathbf{J}\boldsymbol{\sigma}, \quad \mathbf{J} := \det[\mathbf{F}]$$

- 分解せん断応力

$$\boldsymbol{\tau}^{(\alpha)} = (\mathbf{s}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{*(\alpha)}) : \mathbf{J}\boldsymbol{\sigma}$$

$$\mathbf{s}^{*(\alpha)} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^t \mathbf{s}_0^{(\alpha)}$$

$$\mathbf{m}^{*(\alpha)} = \mathbf{m}_0^{(\alpha)} \mathbf{F}^{t-1} \mathbf{F}^{e-1}$$

$\mathbf{s}_0^{(\alpha)}$ : すべり方向ベクトル

$\mathbf{m}_0^{(\alpha)}$ : すべり面の法線ベクトル

- 速度勾配

$$\mathbf{l} := \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} = \mathbf{l}^e + \mathbf{l}^t + \mathbf{l}^p$$

$$\begin{cases} \mathbf{l}^e := \dot{\mathbf{F}}^e \mathbf{F}^{e-1} \\ \mathbf{l}^t := \mathbf{F}^e \dot{\mathbf{F}}^t \mathbf{F}^{t-1} \mathbf{F}^{e-1} \\ \mathbf{l}^p := \mathbf{F}^e \mathbf{F}^t \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \mathbf{F}^{t-1} \mathbf{F}^{e-1} \end{cases}$$

- 結晶塑性流れ則

$$\mathbf{l}^p = \sum_{\alpha=1}^n \left( \mathbf{s}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{*(\alpha)} \right) \dot{\gamma}^{(\alpha)}$$

- 変形速度テンソル

$$\begin{aligned} \mathbf{d} &:= \text{sym}[\mathbf{l}] = \mathbf{d}^e + \mathbf{d}^t + \mathbf{d}^p \\ &:= \text{sym}[\mathbf{l}^e] + \text{sym}[\mathbf{l}^t] + \text{sym}[\mathbf{l}^p] \end{aligned}$$

- スピンテンソル

$$\begin{aligned} \mathbf{w} &:= \text{skw}[\mathbf{l}] = \mathbf{w}^e + \mathbf{w}^t + \mathbf{w}^p \\ &:= \text{skw}[\mathbf{l}^e] + \text{skw}[\mathbf{l}^t] + \text{skw}[\mathbf{l}^p] \end{aligned}$$

- 塑性変形速度テンソルと流れ則

$$\mathbf{d}^p = \sum_{\alpha=1}^n \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}$$

$$\boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} := \text{sym}[\mathbf{s}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{*(\alpha)}]$$

- 塑性スピンテンソルと流れ則

$$\mathbf{w}^p = \sum_{\alpha=1}^n \boldsymbol{\omega}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}$$

$$\boldsymbol{\omega}^{(\alpha)} := \text{skw}[\mathbf{s}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{*(\alpha)}]$$

- すべり系 $\alpha$ のすべり速度の発展則

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{a} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{n^v} \text{sign} \left( \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right)$$

- すべり系 $\alpha$ 変形抵抗の発展則

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} \left| \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right|$$

- 硬化係数

$$h_{\alpha\beta} = h_0 \text{sech}^2 \left| \frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right| q_{\alpha\beta}$$

$$\begin{cases} h_{\alpha\alpha} := h_0 \text{sech}^2 \left| \frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right| \\ h_{\alpha\beta} := q h_{\alpha\alpha} \quad (\alpha \neq \beta) \end{cases}$$

$q$ : 潜在硬化パラメータ

- 蓄積すべり量

$$\gamma = \sum_{\alpha=1}^{12} \int_0^t \dot{\gamma}^{\alpha} dt$$

- 変態変形勾配

$$\mathbf{F}^t := \sum_{p=0}^m \hat{\mathbf{F}}^{t(p)} c^{(p)}, \quad c^{(0)} = 1 - c$$

$$c := \sum_{p=1}^m c^{(p)}, \quad \dot{c}^{(p)} := \sum_{q=0}^m \dot{c}^{(pq)}$$

- 変態速度勾配テンソルと流れ則

$$\mathbf{l}^t = \mathbf{F}^e \dot{\mathbf{F}}^t \mathbf{F}^{t-1} \mathbf{F}^{e-1} = \sum_{p=1}^m \boldsymbol{\chi}^{(p)} \dot{c}^{(p)}$$

$$\boldsymbol{\chi}^{(p)} := \mathbf{F}^e \left( \hat{\mathbf{F}}^{t(p)} - \mathbf{1} \right) \mathbf{F}^{t-1} \mathbf{F}^{e-1}$$

- 変態変形速度テンソル

$$\mathbf{d}^t = \sum_{p=1}^m \boldsymbol{\chi}_{\text{sym}}^{(p)} \dot{c}^{(p)}$$

$$\boldsymbol{\chi}_{\text{sym}}^{(p)} := \text{sym}[\boldsymbol{\chi}^{(p)}]$$

- 変態スピンテンソル

$$\mathbf{w}^t = \sum_{p=1}^m \boldsymbol{\chi}_{\text{skw}}^{(p)} \dot{c}^{(p)}$$

$$\boldsymbol{\chi}_{\text{skw}}^{(p)} := \text{skw}[\boldsymbol{\chi}^{(p)}]$$

- 変態の体積分率の発展則

$$\dot{c}^{(pq)} = \lambda^{(pq)} X^{(pq)}$$

$$X^{(p)} := \mathbf{J} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\chi}^{(p)} - (\Psi_{\text{T}}^{\ominus} - \Psi_{\text{M}}^{\ominus}) - A(1 - 2c) \quad (1)$$

$$\begin{cases} X^{(p0)} := X^{(p)} \\ \quad = \mathbf{J} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\chi}^{(p)} - (\Psi_{\text{T}}^{\ominus} - \Psi_{\text{M}}^{\ominus}) - A(1 - 2c) \\ X^{(pq)} := X^{(p)} - X^{(q)} \\ \quad = \mathbf{J} \boldsymbol{\sigma} : (\boldsymbol{\chi}^{(p)} - \boldsymbol{\chi}^{(q)}) \quad (q \neq 0) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dot{c}^{(p0)} = \lambda^{(p0)} \\ \{ \boldsymbol{\chi}^{(p)} : \mathbf{J} \boldsymbol{\sigma} - (\Psi_{\text{T}}^{\ominus} - \Psi_{\text{M}}^{\ominus}) - A(1 - 2c) \} \\ \dot{c}^{(pq)} = \lambda^{(pq)} (\boldsymbol{\chi}^{(p)} - \boldsymbol{\chi}^{(q)}) : \mathbf{J} \boldsymbol{\sigma} \\ (q \neq 0) \end{cases}$$

- 変態の判定基準関数

$$f^{(pq)}(\boldsymbol{\sigma}) = \text{sign}(X^{(pq)}) \left( \left| X^{(pq)} \right| - k \right)$$

$$\begin{cases} \text{if } f^{(pq)}(\boldsymbol{\sigma}) > 0 \text{ and } c^{(q)} \neq 0 \\ \quad \text{then } \dot{c}^{(pq)} > 0 \\ \text{else if } f^{(pq)}(\boldsymbol{\sigma}) < 0 \text{ and } c^{(p)} \neq 0 \\ \quad \text{then } \dot{c}^{(pq)} < 0 \\ \text{else } c^{(pq)} = 0 \text{ end if} \end{cases}$$

- すべり系の発展方程式

$$\dot{\mathbf{s}}^{*(\alpha)} = (\mathbf{l}^e + \mathbf{l}^t) \cdot \mathbf{s}^{*(\alpha)}$$

$$\dot{\mathbf{m}}^{*(\alpha)} = \mathbf{m}^{*(\alpha)} \cdot (\mathbf{l}^{e-1} + \mathbf{l}^{t-1})$$

- 変態方向の発展方程式

$$\dot{\boldsymbol{\chi}}^{(p)} = \mathbf{l}^e \boldsymbol{\chi}^{(p)} + \boldsymbol{\chi}^{(p)} (\mathbf{l}^{t-1} + \mathbf{l}^{e-1})$$

- 歪弾性構成則

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbb{C} : \mathbf{d}^e - \boldsymbol{\sigma} \text{tr}[\mathbf{d}^e] + \mathbf{w}^e \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{w}^e$$

## (2) 数値解析例-I

本節では、いくつかの簡単な数値解析を通して、本研究で提案する変形双晶モデルの性能の検証を行う。具体的には、単結晶および多結晶の簡易モデルを用いて、変形双晶を特徴づけている変形機構や応力緩和機構の再現性を確認する。

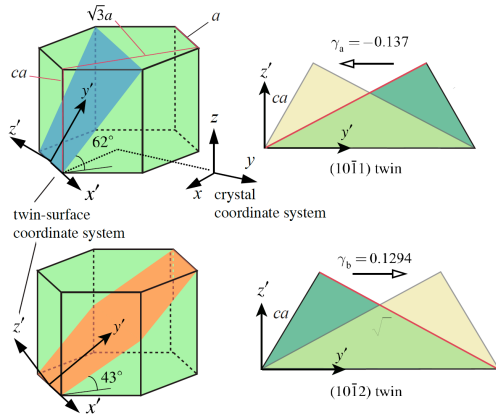


図1 双晶面に沿ったせん断変形

表1 結晶塑性に関する材料パラメータ

	Basal	prismatic	pyramidal
$h_0$	10	7500	7500
$\tau_s$ [MPa]	330	150	260
$\tau_0$ [MPa]	1.0	20	40
$\dot{\alpha}$	0.001	0.001	0.001
$n$	30	30	30
$q_{\text{basal}}$	0.2	0.5	0.5
$q_{\text{prismatic}}$	0.2	0.2	0.2
$q_{\text{pyramidal}}$	1.0	1.0	0.2

### ① 解析条件

次項以降で示す数値シミュレーションにおいて、六方晶系の弾性係数テンソルCの成分は、文献<sup>2)</sup>を参照して次のように設定する。

$$[C] = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{66} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix}$$

$$C_{11} = 58000, C_{12} = 25000, C_{13} = 20800,$$

$$C_{33} = 61200, C_{44} = 16600, C_{66} = 16500 \text{ [MPa]}$$

ここで、[C]はCの行列表記であり、図1に示されている格子座標系を参照してxx, yy, zz, xy, yz, zxに関するテンソル成分をこの順番で格納している。また、結晶すべりに関する材料パラメータは文献<sup>3,4)</sup>を参照して表1に示す値を用いる。一方、双晶変形に関するパラメータは、次項の単結晶に対する実験結果を参照して、キャリブレーションにより決定する。また、格子再配向時に変換すべき結晶方位に対応する双晶系の体積分率の閾値については、その設定に任意性があるが、本研究では仮に0.4を採用して解析を行う。

### ② パラメータ同定と検証

本項では、本研究で提案する熱力学に基づ

く変形双晶モデルを用いて、文献<sup>3)</sup>で報告されているマグネシウム単結晶に対する実験結果を数値シミュレーションにより再現する。この実験は、単結晶に対して図2に示すような負荷および拘束条件を与えるものであり、図3に示すような応力-ひずみ曲線が得られている。提案する変形双晶モデルに含まれるパラメータは、この実験データを参照しながらキャリブレーションして決定した。すなわち、変態の進展量を決めるパラメータを $\lambda^{(p0)} = 1.8$ ,  $\lambda^{(pq)} = 0.6$  ( $q \neq 0$ )、界面エネルギーの影響度を表すパラメータは双晶種類によらず $A = 0.1 \text{ J/m}^3$ とした。また、式(1)において活性化エネルギーに対応するパラメータ $k$ は、 $(10\bar{1}1)$ については $40 \text{ J/m}^3$ 、 $(10\bar{1}2)$ については $2 \text{ J/m}^3$ とした。

一方、母相と各双晶系は原子配置が異なるだけでエネルギー的には等価と考えられるので、それぞれの化学的自由エネルギーは双晶種類によらず同一、すなわち $\Psi_M^\theta = \Psi_T^\theta$  ( $T$ あるいは $(10\bar{1}1)$ )とした。また、本研究では温度への依存性も考慮しない。

12個の線形四面体要素からなる立方体領域の有限要素モデルにこれらのパラメータを用いて、各実験ケースに対応する数値シミュレーションを行った結果を図4に示す。実験とシミュレーションの結果では、応力の絶対値や応力-ひずみ曲線の形状が異なるが定性的には両者はほぼ一致しているといえる。

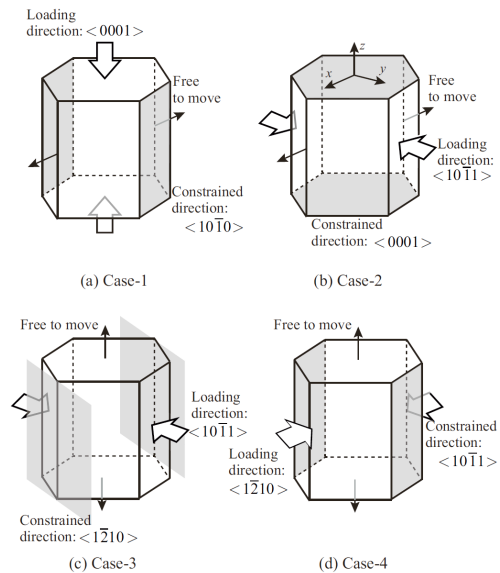


図2 マグネシウム単結晶に対する負荷ケース

### ③ Case-1 と Case-2

本計算で設定した条件の下では、Case-1 と Case-2 の計算で変形双晶は生じないので、結晶すべりのみが変形機構となる。具体的には、Case-1 では錐面すべり系が、Case-2 では柱面と錐面すべり系がすべり得る。一方実験においては、これらのケースの負荷・拘束条件の下では、c軸(図2)中ではz軸が伸びるような $(10\bar{1}2)$ 双晶は生じ得ないが、Case-1 では $(10\bar{1}1)$ 双晶が発現する可能性がある。しかし、

錐面すべりが卓越する状況下では双晶の駆動力となる熱力学的応力が相対的に低いために、上記のキャリブレーションにより設定した活性化エネルギーを超えられない。

以上より、Case-1 と Case-2 では理論的な予測と整合した計算結果が得られているといえるが、対応する実験結果 (図 3) は、計算結果に比べて応力レベルが低く、定量的には一致しない。これは、文献<sup>3)</sup>に報告されているように、拘束条件が厳密に与えられていないことや、結晶方位・荷方向のわずかな不整に起因して供試体の一部に変形双晶 (Case-1 では $(10\bar{1}2)$ 双晶, Case-2 では $(10\bar{1}1) \rightarrow (10\bar{1}2)$ 二重双晶) が現れたことにより、応力が低減されたためである。

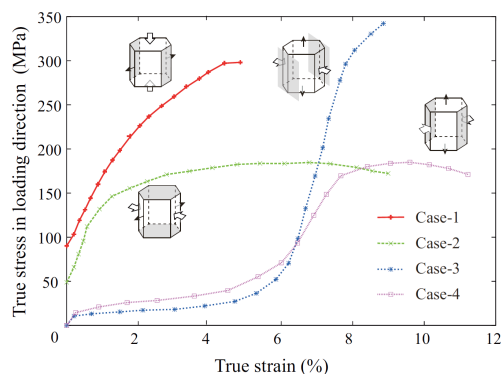


図3 マグネシウム単結晶に対する実験結果

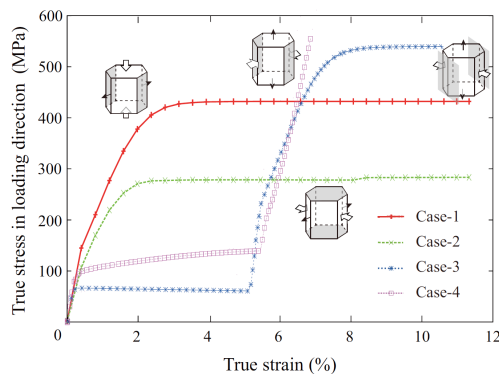


図4 マグネシウム単結晶に対する解析結果

#### ④ Case-3 と Case-4

Case-3 と Case-4 では、理論的に $(10\bar{1}2)$ 双晶が発現する荷・拘束条件が与えられている。実際、本計算の結果 (図 4) でも、双方とも変形の初期段階で $(10\bar{1}2)$ 双晶が現れ、ひずみが約 5% までは双晶形態テンソルによる無応力せん断変形により 100 MPa 程度までしか応力が増加しない。また、本研究における変形双晶モデルでは各点 (各要素) における双晶の体積分率が 0.4 を超えるまでは格子再配向の影響を考慮しない設定になっているため、ひずみが 5% 程度まではせん断変形のみが生じる。今回の数値シミュレーションでは、要素内のひずみが 5% 程度になると、 $(10\bar{1}2)$ 双晶の体積分率が 0.4 を超えるため、格子再配向に対応する結晶方位の変換が行

われる。Case-3 では、変換後に c 軸が荷方向とほぼ一致するため、より大きな拘束効果により応力が急激に増大することが再現されている。

また、変換後の結晶方位では錐面すべり系が卓越して滑り得るが、このすべりに対応する結晶格子の回転が拘束されるので応力は増加し続ける。Case-4 の場合も、格子再配向後に c 軸は荷方向に対して 31° 傾斜するが、Case-3 と同様の効果で応力が急激に増大している。特に、格子再配向後には底面も滑る可能性があるが、課されている拘束条件がこのすべりによる変形を阻害するので見かけ上は降伏せずに応力は上昇する。

ひずみの大きい領域では、Case-3 の計算と実験の応答は概ね一致しているが、Case-4 については両者の応答は乖離している。具体的には、ひずみが 8% 以上になると、Case-4 の計算結果では応力は上昇を続けるのに対して、実験結果では応力値が頭打ちになる。前述のように、本数値シミュレーションでは荷・拘束条件が厳密に与えられるので理論的予測と同様の応答が得られるが、文献<sup>3)</sup>でも指摘されているように、実験においては拘束条件不完全であることや、荷条件や材料の初期不整の影響による底面すべりなどが卓越することで応力は下がり得る。

また、本研究で提案する変形双晶モデルでは、物質点においてあるパターンの変形双晶の体積分率が閾値を超えた段階で格子再配向による結晶方位の変換を行なっている。すなわち、単結晶に対する一様変形のシミュレーションでは、ほとんどすべての要素で同時に無応力せん断ひずみを生じ、ある程度変形が進行して変形双晶の体積分率が閾値を超えたときにはじめて格子再配向による方位変換も同時に行われる。したがって、図 4 のシミュレーションの結果では、約 5% の時点ですべての要素の結晶格子が変換されるため、応力の増加率が不連続になっている。

しかし実際には、すべての物質点で同時に変形双晶となることはない。また、変形双晶の発現による無応力せん断変形と格子再配向は同時に起こる。

したがって、実験結果の図 3 では、双晶変形が進行する最中でも応力は上昇し、応力の増加率も連続的である。本研究で提案するモデルを用いた単結晶の数値計算でこれを再現することは困難であるが、多結晶体に対する計算では、モデルが大きくなるほど、変形の非均一性が顕著になるのでこのような差異の影響は小さくなると考えられる。

#### (3) まとめ

本研究では、内部変数を用いる熱力学に基づく定式化を適用して、結晶すべりと変形双晶の相互作用を評価可能な結晶塑性・変形双晶構成モデルを構築し、簡単な数値解析例によりその性能を検証した。提案した構成モデルは、以下のような特徴を有するもので、双

晶の形成条件と双晶変形時の無応力せん断変形および格子再配向を同一の内部変数を介して統一的に扱うことができる点で、双晶変形を擬似的なすべりとみなす従来の変形双晶モデルとはまったく異なっている。

- ① 双晶変形勾配は、材料パラメータである双晶種別の無応力ひずみパターンと対応する体積分率係数とする線形結合で定義されている
- ② 変形勾配の弾塑性乗算分解に対して、上記のように定義された双晶変形勾配を乗算形式で付加している
- ③ 通常の弾性および結晶すべりのひずみ硬化に関する項に加えて、無応力ひずみパターンの体積分率係数を内部変数として変形双晶の自由エネルギーを定義している
- ④ 変形双晶の自由エネルギーは、母相および変形双晶相の化学的エネルギーと双晶界面エネルギーから構成される
- ⑤ 内部変数として導入した変形双晶相の体積分率がある閾値を超えた際に格子再配向が行われる

今後は、実際が多結晶構造に近い数値モデルを用いて変形双晶および2重双晶の形成を予測する数値シミュレーションを行い、実験結果とを比較するなどして検証を重ねることで、モデルを改良していく予定である。

#### 参考文献

- 1) Idesman, V.A., Levitas, I.V., Preston L.D., and Cho Y.J., Finite element simulations of martensitic phase transitions and microstructures based on a strain softening model, *J. Mech. Phys. Solids*, 53, 2005, pp. 495-523.
- 2) Simmons, G., and Wang, H., *Single crystal elastic constants and calculated aggregate properties: a handbook*, MIP Press, Cambridge, MA, 1971.
- 3) Kelley, E.W. and Hosford, W.F., Plane-strain compression of magnesium and magnesium alloy crystals, *Trans. Metall. Soc., AIME* 242, pp.5-13, 1968
- 4) Kelley, E.W., and Hosford, W.F., The deformation characteristics of textured magnesium, *Trans. Metall. Soc., AIME* 242, 654-661, 1968.

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計2件)

- (1) 石田智広, 渋谷慎兵, 加藤準治, 寺田賢二郎, 京谷孝史, 安藤大輔, 小池淳一、結晶塑性有限要素法を用いた圧延集合組織を有するマグネシウム合金の変形・強度発現機構の解明、*機械学会論文集 (A編)* (査読有), 第79巻, 第808号, pp. 1840-1851, 2013  
([https://www.jstage.jst.go.jp/article/jscses/2012/0/2012\\_20120014/article/-char/ja/](https://www.jstage.jst.go.jp/article/jscses/2012/0/2012_20120014/article/-char/ja/))
- (2) 石田智広, 渋谷慎兵, 加藤準治, 寺田賢二郎, 京谷孝史, 安藤大輔, 小池淳一: 六方

晶金属の結晶塑性・変形双晶構成モデル, *計算工学会論文集 (査読有)*, Vol. 2012, 論文番号 P20120014, 2012

[学会発表] (計7件)

- (1) 寺田賢二郎, 石田智広, 安藤大輔, 小池淳一, 結晶塑性 FEM と Multi Phase Field 法を用いた MgY 合金の連成解析, 2014 年 春期講演大会、日本金属学会, 東京工業大学 大岡山キャンパス, 2014 年 3 月 21 日~23 日
  - (2) 石田 智広 渋谷 慎兵、加藤 準治, 寺田賢二郎、京谷 孝史、安藤大輔、小池 淳一、六方晶金属の変形双晶モデルの構築とその結晶塑性シミュレーションへの適用, 2013 年春期講演大会 (第 152 回), 2013 年 3 月 27 日 (水)~3 月 29 日 (金) 東京理科大学神楽坂キャンパス、日本金属学会
  - (3) 石田智広, 渋谷慎兵, 加藤準治, 寺田賢二郎, 京谷孝史, 安藤大輔, 小池淳一, 六方晶金属の変形双晶モデルの構築とその結晶塑性シミュレーションへの適用, 第 62 回理論応用力学講演会 (NCTAM2013), 東京工業大学, 東京, 2013 年 3 月 6 日~8 日
  - (4) 石田智広, 渋谷慎兵, 加藤準治, 寺田賢二郎, 京谷孝史, 安藤大輔, 小池淳一, 六方晶金属の変形双晶モデルの構築とその結晶塑性シミュレーションへの適用, *M&M2012 材料力学カンファレンス*、日本機械学会, 愛媛大学, 2012 年 9 月 21 ~24 日
  - (5) 安藤大輔, 須藤祐司, 小池淳一, 石田智広, 渋谷慎兵, 寺田賢二郎, 加藤準治, 京谷孝史, Mg 合金の局所変形量と変形双晶の関係, *M&M2012 材料力学カンファレンス*、日本機械学会, 愛媛大学, 2012 年 9 月 21~24 日
  - (6) K. Terada, S. Sibutani, J. Kato, T. Kyoya, J. Koike, D. Ando, Thermodynamical twin modeling in crystal plasticity framework for hcp metals, 6th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2012), University of Vienna, Austria, September 10-14, 2012
  - (7) 石田智広, 渋谷慎兵, 加藤準治, 寺田賢二郎, 京谷孝史, 安藤大輔, 小池淳一、結晶塑性 FEM によるマグネシウム合金の強度発現機構の解明、第 17 回計算工学会講演会、京都教育文化センター, 2012 年 5 月 29 日~31 日
6. 研究組織
- (1) 研究代表者  
寺田 賢二郎 (TERADA KENJIRO)  
東北大学・災害科学国際研究所・教授  
研究者番号: 40282678