

技術論文

フェライト系単結晶の大変形域加工硬化挙動の結晶塑性解析

Crystal Plasticity Analysis of Work Hardening Behaviour at Large Strains in Ferritic Single Crystal

上 西 朗 弘*	磯 貝 栄 志	杉 浦 夏 子	池 松 陽 一
Akihiro UENISHI	Eiji ISOGAI	Natsuko SUGIURA	Yoichi IKEMATSU
杉 山 昌 章	樋 渡 俊 二		
Masaaki SUGIYAMA	Shunji HIWATASHI		

抄 録

大ひずみ域の変形特性は使用時に大きな塑性変形が加えられる薄鋼板において最も重要な特性の一つである。結晶方位に着目して大変形域の加工硬化特性と微視的組織の発展との関係について実験及び結晶塑性を用いた数値解析により検討した。種々の結晶方位を持つフェライト系単結晶の単純せん断試験を行い加工硬化特性を測定するとともに、変形後微視組織の観察をTEMにより行った。その結果、加工硬化特性は結晶方位に依存して大きく変化することが分かった。また、変形後に形成される転位組織はいくつかの形態に分類でき、加工硬化能がその形態と相関していた。さらに結晶塑性モデルを用いて数値解析を行った結果、これらの挙動がすべり系の活動とそれらの相互作用として記述できることを明らかにした。

Abstract

The material behaviour at large strains is one of the most important properties in sheet steel, for it undergoes severe plastic deformation in its use. We focus on the relationship between the work hardening behaviour at large strains and the evolution of microstructure during deformation by experimental and numerical methods, with attention to the crystal orientation. The work hardening behaviour of ferritic single crystal with different orientations has been characterized by simple shear experiments. At the same time, TEM observations have been performed to study microstructures after shear deformation. The work hardening behaviour depends largely on the crystal orientation. The observed microstructures may be classified into three types. The work hardening behaviour could be correlated to the type of microstructure via the activity of slip systems. Crystal plasticity analysis revealed that the behaviour in macroscopic and microscopic scales could be attributed to the activity of slip systems and their interaction.

1. 緒 言

連続体力学に基づく数値解析技術は実際の開発現場での適用を急速に拡大しており、性能や成形性の予測に関して必須のツールとなってきている。そのような動きはデジタル開発と呼ばれており、開発工期の短縮や材料・構造の最適化などに大きく寄与している。薄鋼板はそのような新しい開発手法が適用される分野において最も多く使用されている材料の一つであるが、その特徴は使用の際にプレス成形等により大きな変形を受けることである。種々の高強度鋼板が開発され実用に供されているが、それらの使用性能の鍵を握るのは大ひずみ域での加工硬化特性である。

古くから金属材料の加工硬化特性は材料科学の主要な

テーマの一つであり数多くの研究がなされているが、大ひずみ域に関しては特異な加工硬化挙動と材料内部に形成された転位組織とを関連付ける報告がなされており興味を集めている¹⁻⁶⁾。また、近年発達してきたよりミクロな変形素過程を取り込んだ数値解析技術は材料内部の組織変化と外部応答としての加工硬化を結び付けた議論を可能とするレベルとなってきている。そこで本研究ではフェライト系単結晶を対象としてその大ひずみ域での加工硬化特性を調査するとともに、すべり系間の相互作用を取り込む結晶塑性モデルを用いた数値解析を行った。

2. フェライト単結晶の大変形域での加工硬化挙動

検討に用いた材料はフェライト系 Fe-Cr 合金 (mass% :

0.0017C, 16.45Cr, 0.10Ni) である。結晶粒を成長させるためにAr雰囲気中で1350℃, 72時間の焼鈍を行った。加工硬化挙動の計測には単純せん断試験を用いた^{7,8)}。材料の強度特性の評価には引張試験が用いられることが多いが、引張試験においてはくびれや破断などが生じるために大ひずみ域での加工硬化挙動の計測が難しい。単純せん断試験は平板状の試験片を面内でせん断するものであり、くびれの影響なく大ひずみ域の加工硬化挙動の計測が可能であるという特徴を持っている。

粒成長させた材料から各粒の結晶方位をX線ラウエ法で同定した後、面方位が{111}, {100}, {110}となるように単結晶の板状試験片(板厚1mm)を切り出して単純せん断試験を行った。せん断方向は各面方位で代表的な方向を選択して行ったが、以降では、面方位を{ }で、せん断方向を< >で表示し、その組合せとして試験条件を表示した。表1に本研究の試験条件における単結晶試験片の方位関係を示す(単純せん断試験の場合最大せん断応力面は常に板面の面方位とせん断方向の両方に垂直となる)。

図1に単純せん断試験により種々の面方位を持つ単結晶を変形させた際のせん断応力-せん断ひずみ関係を示す。同一の素材から切り出しているにも関わらず試験条件に依存してその加工硬化特性が大きく変化することが分かった。これは過去に行われた単結晶の単軸引張試験結果から臨界分解せん断応力を評価した場合に大きな結晶方位依存性が出る⁹⁾と類似している。しかしながら単純せん断の場合は結晶方位を適切に選択すれば活動すべり系の数が比較的少ない場合でも結晶回転の影響なく加工硬化特性の計測が可能であることに特徴がある。

個々の挙動を詳細に見ると面方位が{111}、せん断方向が<112>の試験片(以下では{111}<112>のように記述)では初期の加工硬化は小さいもの大ひずみ域まで加工硬化が持続した。一方、{100}<001>試験片では初期の加工硬化は非常に大きいがすぐに飽和してほとんど加工硬化しなくなった。また{100}<011>及び{110}<001>試験片はこの両者の中間的な挙動を示した。加工硬化が急速に飽和する{100}<001>試験片では単純せん断変形であっても不均一な変形となり、15%以上は正確な加工硬化特性の計測が出

表1 単純せん断に用いた単結晶の面方位とせん断方向
Crystal orientation in single crystal specimens used for simple shear tests

Test conditions	Normal direction	Shear direction	Maximum shear stress plane
{111}<112>	(111)	[$\bar{1}\bar{1}2$]	(1 $\bar{1}0$)
{100}<001>	(001)	[0 $\bar{1}0$]	(100)
{100}<011>	(001)	[1 $\bar{1}0$]	(110)
{110}<001>	(110)	[001]	(1 $\bar{1}0$)
{110}<112>	($\bar{1}10$)	[11 $\bar{2}$]	(111)
{110}<557>	($\bar{1}10$)	[557]	(7710)

来なくなった。

{110}<112>, {110}<557>試験片は途中で応力-ひずみ曲線の傾きが変化する二段硬化挙動を示した。図2に応力-ひずみ曲線の傾きとせん断応力との関係を示す。{111}<112>試験片での傾きが応力の増加とともに減少していくのに対して、{110}<112>及び{110}<557>試験片では変形初期の応力の小さい領域では{111}<112>試験片にほぼ重なるものの途中から傾きが増加し、{100}<011>試験片の挙動に近付いていくことが分かった。また、{100}<001>, {100}<011>及び{110}<001>試験片の応力-ひずみ曲線の傾きは他の試験条件と比べて大きな値を示すことが分かった。

以上見てきたように結晶の面方位とせん断方向に依存して加工硬化挙動は大きく変化することが分かった。これは各変形条件で異なるすべり系が活動し、それらが相互作用した結果であると考えられる。そこですべり系の影響が考慮できる結晶塑性モデルを用いて変形解析を行った。

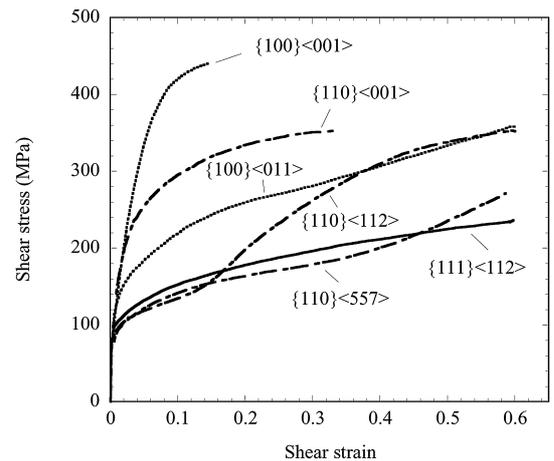


図1 フェライト系単結晶のせん断応力-せん断ひずみ曲線
Shear stress vs. shear strain curves of ferritic single crystals

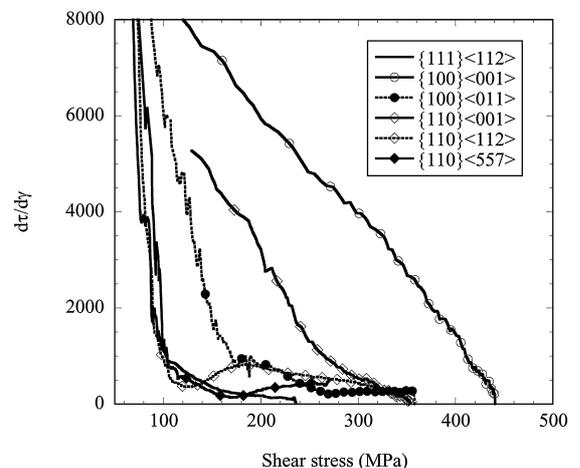


図2 応力-ひずみ曲線の傾きとせん断応力
Slope of stress-strain curves vs. shear stress curves

3. 結晶塑性を用いた大変形域特性の解析

3.1 結晶塑性理論の概要

通常マクロな変形特性の解析には降伏関数を用いる現象論的(巨視的)塑性論が用いられる。結晶塑性論は図3に示すように塑性変形がすべり面に沿う特定の方向にのみせん断(すべり)が生じるという仮定に基づいて変形解析を行うものである¹⁰⁾。結晶塑性解析の特徴は、①有限変形と各すべり系の変形とをどう対応させるか、②各すべり系の活動/非活動をどのように判定するか、③各すべり系に生じた変形と全体の応力とをどう対応付けるか、にある。

①に関しては先述のように全体の変形を個々のすべり系により生じるせん断変形の重ね合わせとして表現している。この重ね合わせにより構成される速度勾配テンソルを対称部分と反対称部分に分解することで自然な形で塑性ひずみ速度と塑性スピンの得られることも結晶塑性理論の特徴の一つである¹⁰⁾。fcc金属の場合は{111}<110>型の12のすべり系が、bcc金属の場合には{110}<111>型と{112}<111>型の24すべり系またはさらに{123}<111>型を加えた48すべり系が用いられる。

②に関しては種々の考え方があるが変形応力のひずみ速度依存性を導入し、応力の関数として各すべり系の活動度(ひずみ速度)を与えるのが一般的である。よく知られているようにすべり系に働くせん断応力がある値(臨界せん断応力)を超えたときにすべり変形が生じる。その際のすべりの頻度(～ひずみ速度)を図4に示す種々の障害の内、短範囲障害(熱活性化障害)の乗り越え頻度として定義するものである。これは潜在的にすべてのすべり系を活動系と考え、与えられた変形応力に従って乗り越え頻度すなわちひずみ速度を決めることになる。従って活動すべり系と非活動すべり系を陽に区別することなく、各すべり系の活動度を求めることができる。ここでは以下のような式を用いた¹¹⁾。

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

ここに $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ はすべり系 α のひずみ速度、 $\tau^{(\alpha)}$ はすべり系 α に作

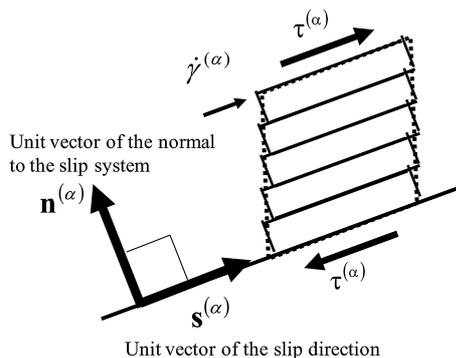


図3 すべり変形とすべり系
Shear deformation and slip system

用する変形応力であり、 m はひずみ速度感受性指数、 $\dot{\gamma}_0$ は基準ひずみ速度である。 $g^{(\alpha)}$ は各すべり系の変形応力とひずみ速度との関係を規定するものであり、 $g^{(\alpha)}$ が大のときにひずみ速度が小となることから分かるように材料の硬化と関連している。

③に関してはこの $g^{(\alpha)}$ の発展方程式を考えることで全体の硬化と関連付けることができる。その一般形は次次のように与えられる。

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \quad (2)$$

すべり系間の相互作用を図5に示す。材料の変形応力は各すべり系に存在する可動転位が受ける応力の総和であるが、それらは同じすべり系に属する転位からの自己硬化(Self-hardening)と、他のすべり系に属する転位からの潜在硬化(Latent hardening)に分けて考えることができる。 $h_{\alpha\beta}$ はこのようすべり系間の相互作用を表す硬化係数行列であり、 β 系のすべり $\dot{\gamma}^{(\beta)}$ が α 系の硬化に及ぼす寄与を示している。この行列の対角成分が自己硬化を、非対角成分が潜在硬化を表すことになる。 $h_{\alpha\beta}$ については多数のモデルが提案されているがここでは以下の式を用いた。

$$h_{\alpha\beta} = qh(\gamma_i) + (1-q)h(\gamma_j)\delta_{\alpha\beta} \quad (3)$$

$\delta_{\alpha\beta}$ はクロネッカのデルタであり、 q は潜在硬化のレベルを表す定数、 $h(\gamma_i)$ は基準となる加工硬化率である。

以上のような枠組みを用いることで各すべり系のせん断変形の重ね合わせとしてマクロな応力、ひずみを与える解析を行うことができる。

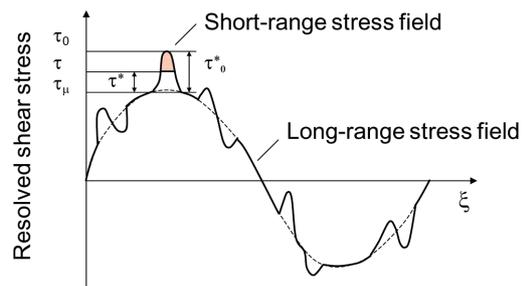


図4 活動転位に作用する種々の応力
Resolved shear stresses acting on a gliding dislocation

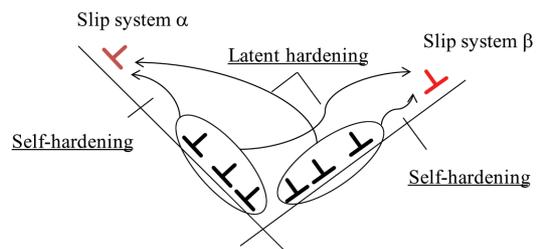


図5 すべり系間の相互作用
Hardening due to interaction between slip systems

3.2 結晶塑性を用いた単結晶変形の解析結果

図1に示した単結晶の単純せん断試験の数値解析を行うために、平面ひずみ変形を仮定し低減積分要素を用いた一要素モデルでの解析を行った。また式(3)の加工硬化率 $h(\gamma_i)$ は $\{110\}<001>$ 試験片の実験データを用いて同定を行った。これはこの加工硬化率がすべり系間の相互作用のない場合の純粋な転位の蓄積の寄与と対応することを考慮して、 $\{110\}<001>$ 試験片のせん断試験では変形に伴う結晶回転がなく、すべり面がせん断方向に平行であることから選択したものである。さらにその表式としては急激な加工硬化率の変化を表現するためにVoceらの式を拡張したものをを用いた¹²⁾。

$$h(\gamma_i) = C_1 g_1 e^{-C_1 \gamma_i} + C_2 g_2 e^{-C_2 \gamma_i} \quad (4)$$

$(g_1 = 108\text{MPa}, C_1 = 6.3, g_2 = 58\text{MPa}, C_2 = 95.0)$

また潜在硬化のレベルを表す式(3)の q はfcc金属の場合には1.0~1.4の範囲をとるとされることが多いが、ここではbcc金属でより等方的になると仮定し、1.0とした。また、すべり系は $\{110\}<111>$ 、 $\{112\}<111>$ の24すべり系とした。

図6にその解析結果を示す。 $\{110\}<001>$ 試験片の結果は材料定数を決定するのに用いたため、十分な精度を持っていることは当然であるが、同じ材料定数を用いて結晶方位のみを変化させた他の試験条件でも比較的良い精度で図1に示す実験結果を再現できることが分かった。また、 $\{110\}<112>$ 、 $\{110\}<557>$ 試験片では実験において二段硬化現象が見られたが、結晶塑性解析においても遷移を生じるひずみ量は異なるものの二段硬化現象を再現できることが分かった。

以上のようにすべり系間の相互作用を考慮する結晶塑性モデルにより、結晶方位に依存した複雑な大ひずみ域の加工硬化挙動の変化を再現できることが分かった。

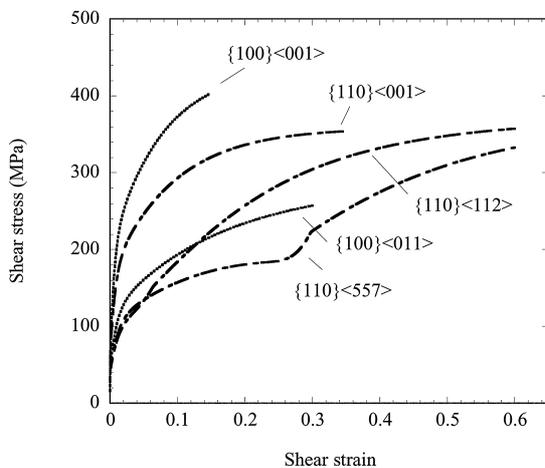


図6 せん断応力-せん断ひずみ曲線(解析)
Shear stress vs. shear strain curves of ferritic single crystals obtained by crystal plasticity analysis

4. 変形後の転位組織観察結果

これまで見てきたようにフェライト系単結晶が示す大ひずみ域の複雑な加工硬化挙動は、試験条件により異なるすべり系が活動し、それらが相互作用し合うことで生じた可能性が高い。そこでそのようなすべり系間相互作用をより直接的に把握するために単純せん断後の転位組織の観察をTEM (Transmission Electron Microscope) により行った。

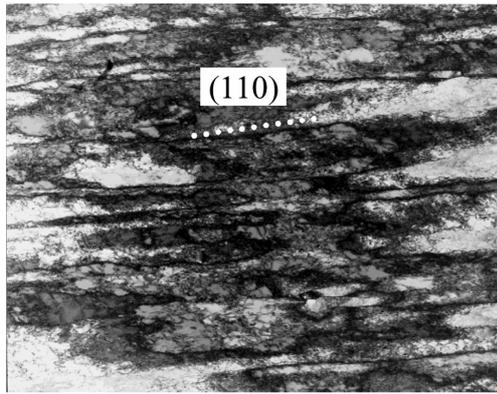
図7に $\{111\}<112>$ 、 $\{100\}<001>$ 、 $\{100\}<011>$ 試験片についての観察結果を示す。 $\{111\}<112>$ 試験片では(110)面に平行な一方向の転位壁が観察された(図7(a))。このような転位壁はIF (Interstitial Free) 鋼の γ ファイバで観察されるものに類似している^{4,5)}。それに対して $\{100\}<001>$ 試験片では方向性のない転位セル構造(図7(b))が、 $\{100\}<011>$ 試験片では二方向の転位壁を持つ組織(図7(c))が観察された。結晶方位と転位組織形態との関係についてはいくつかの報告があり、鋼についてはランダム集合組織を持つ材料に引張変形を与えた後TEM観察を行い、各結晶粒の転位組織が、一方向転位壁、二方向転位壁、等軸的セル構造、に分類され、その形態が結晶方位と相関することが示されている⁶⁾。本研究の結果もこの分類と対応している。

転位組織の形成は多数の転位の相互作用の結果であるが、ここに見られるような形態の差を生み出すのは与えられた境界条件下で活動できるすべり系が制約されていることと関係すると考えられる。そこで先に示した結晶塑性解析結果を詳細に分析し、各試験条件で活動するすべり系の同定を行った。その結果、一方向の転位組織が形成される $\{111\}<112>$ の条件(図7(a))では初期に二つのすべり系が活動するがそれらは一つのすべり面を共有していることが分かった。等軸的セル構造が形成される $\{100\}<001>$ の条件(図7(b))では四つのすべり系が活動するが、それらのすべり面はすべて異なっていた。

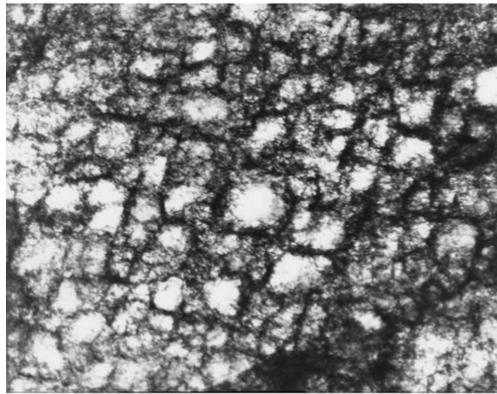
また、二方向転位壁が形成される $\{100\}<011>$ の条件(図7(c))では四つのすべり系が活動するが、それらは二つのすべり面に属していた。すなわち結晶塑性解析で得られたすべり系、特にすべり面の数の計算結果と図7に示した転位組織の形態には対応関係があった。材料の加工硬化特性は一般に活動すべり系のすべり変形量の総和と転位の平均自由工程とに支配される。すべり変形量の総和が同程度の場合には平均自由工程が加工硬化能と対応すると考えることができる。本研究の結果では平均自由工程の大きさは一つのすべり面を共有するすべり系のみが活動する一方向転位壁組織で一番大きく、多数のすべり系が相互作用するセル組織で最小となり、二方向転位壁組織はその中間的なものとなると考えられる。

実際の加工硬化挙動と転位組織形態の関係を見ると、加工硬化能は(セル構造) > (二方向転位壁) > (一方向

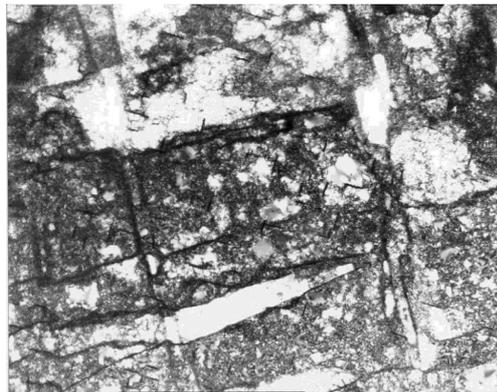
向転位壁)となっており、転位組織の観察結果から推定される転位の平均自由工程の大小とよく対応している。 $\{100\}\langle 001\rangle$ 試験片では15%以上の変形を与えることができなかったが、これは多数のすべり系が活動したため動的



(a) $\{111\}\langle 112\rangle$ 60%



(b) $\{100\}\langle 001\rangle$ 15%



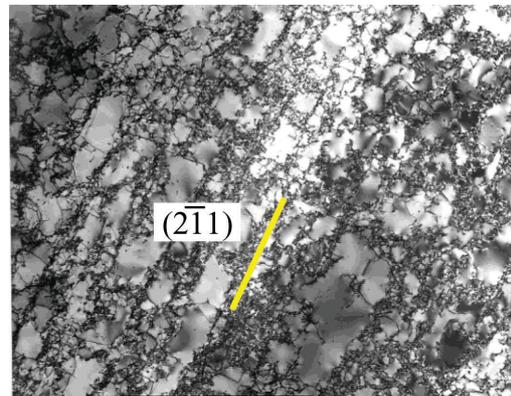
(c) $\{100\}\langle 011\rangle$ 60%

図7 単純せん断後の転位組織((a) $\{111\}\langle 112\rangle$ 試験片/せん断ひずみ60%, (b) $\{100\}\langle 001\rangle$ 試験片/せん断ひずみ15%, (c) $\{100\}\langle 011\rangle$ 試験片/せん断ひずみ60%)

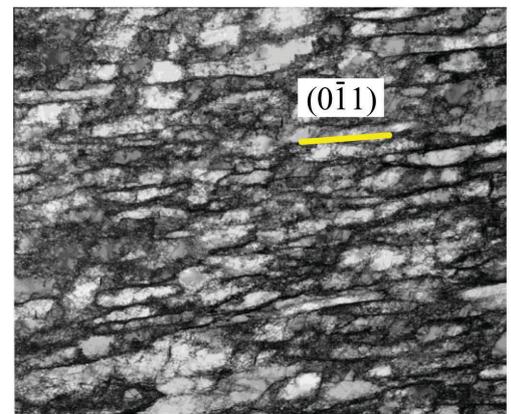
Dislocation structure in single crystals: (a) at 60% strain for $\{111\}$ normal direction and $\langle 112\rangle$ shear direction, (b) at 15% strain for $\{100\}$ normal direction and $\langle 001\rangle$ shear direction and (c) at 60% strain for $\{100\}$ normal direction and $\langle 011\rangle$ shear direction

回復が難しく、新たに可動転位を結晶中に導入することができず加工硬化能を失ったためであると考えられる。以上のように、結晶方位に依存した加工硬化挙動は、活動するすべり系とそれらの間の相互作用を媒介として、特徴的な転位組織形成と結び付けられる可能性が高いことが分かった。微視的組織変化との対応については今後詳細を検討していく。

さらに二段硬化挙動を示したものの中から $\{110\}\langle 112\rangle$ 試験片について転位組織の観察を行った。図8は $\{110\}\langle 112\rangle$ 試験片について、せん断ひずみ15%及び60%で形成された転位組織を観察した結果である。ひずみ15%では $(2\bar{1}1)$ 面に平行な一方向転位壁が形成されつつあることが分かった。この結果は図2で二段硬化前の挙動が一方向転位壁を形成する $\{111\}\langle 112\rangle$ 試験片と類似していることと対応している。一方、60%までひずみを与えた場合には $(2\bar{1}1)$ 面に平行な転位壁に加えて、 $(0\bar{1}1)$ 面に平行な



(a) $\{110\}\langle 112\rangle$ 15%



(b) $\{110\}\langle 112\rangle$ 60%

図8 $\{110\}\langle 112\rangle$ 試験片の単純せん断後の転位組織((a) せん断ひずみ15%, (b) せん断ひずみ60%)

Dislocation structure in single crystals: (a) at 15% strain for $\{110\}$ normal direction and $\langle 112\rangle$ shear direction and (b) at 60% strain for $\{110\}$ normal direction and $\langle 112\rangle$ shear direction

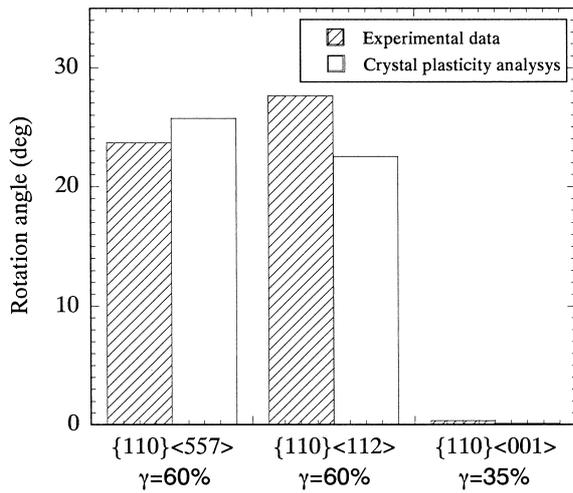


図9 単純せん断変形後の結晶回転
Crystal rotation angle after shear deformation

転位壁も観察された。これは変形後期に複数のすべり系間の相互作用が存在することを示していると考えられる。このようなすべり系間の相互作用により、図2に示す{110}<112>試験片の挙動が{111}<112>試験片のそれとは離れ、二方向転位壁を形成する{100}<011>試験片の加工硬化挙動に漸近していくと考えられる。

それではこのようなすべり系の遷移を引き起こすのは何であろうか。図9に{110}を面方位とする試験片について単純せん断前後でEBSP (Electron Back-Scattering Pattern) による結晶方位測定を行い、単純せん断変形により生じた回転角を評価した結果を示す。{110}<001>試験片ではほとんど結晶回転が生じていないのに対して、二段硬化挙動を示した{110}<557>, {110}<112>試験片では大きな結晶回転が生じていることが分かった。この結果と図8の結果を合わせて考えると、これらの試験条件では単純せん断により活動するすべり系の特徴から大きな結晶回転が起こり、その結果として活動すべり系の遷移が起こると考えられる。旧の主すべり系に導入された転位は潜在硬化成分として新しい主すべり系に導入される転位と激しく相互作用するため加工硬化率が途中で大きくなり、二段硬化挙動を示したものと考えられる。

図9には結晶塑性解析により得られたそれぞれの条件での結晶回転量についても示してある。ほぼ実験結果と対応した解析結果が得られることが分かった。図6に示したように結晶塑性解析においても二段硬化挙動が再現できたが、これは実際と同じく変形初期のすべり系と結晶回転により活動するようになった新たなすべり系が式(2)を介して相互作用した結果であると考えられる。

5. まとめ

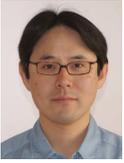
フェライト系単結晶を対象として大ひずみ域での加工硬化特性と結晶方位との関係について検討した。すべり系の活動度とそれらの間の相互作用により加工硬化特性は大きく変化することが分かった。また材料の加工後の転位組織はいくつかの特徴的な形態を示し、それらとすべり系の選択および加工硬化挙動との対応が見られることが分かった。

結晶塑性解析は各すべり系のせん断変形を素過程として、それらの相互作用を考慮しつつマクロな変形特性の解析が可能な手法である。本研究はこの手法を単結晶の大変形域特性の解析に適用し、優れた予測精度を持つことを明らかにした。従来はこのような手法の適用は降伏関数を用いる現象論的塑性論に比べて計算量が多くなることから適用規模に制限があった。しかしながら、昨今のコンピュータ技術の発達によりこの問題は急速に解決されつつある。

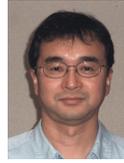
今後の材料に対する期待に応えるためには従来の検討範疇を超えて性能を引き出していく必要がある。ミクロとマクロをつなげる有力な手段の一つとして検討を進め、ますます高度化するニーズに対応できる材料とその適用技術の開発を進めていきたい。

参考文献

- 1) Hu, Z., Rauch, E.F., Teodosiu, C.: Int. J. Plasticity. 839, 8(1992)
- 2) Teodosiu, C., Hu, Z.: Proc. of Numiform '95 on Simulation of Materials Processing: Theory, Methods and Applications, Balkema, Rotterdam, 1995, p.173
- 3) Rauch, E.F.: Mat. Sci. Eng., A241, 179(1998)
- 4) Nesterova, E., Bacroix, B., Teodosiu, C.: Mat. Sci. Eng. A309-310, 495(2001)
- 5) Nesterova, E., Bacroix, B., Teodosiu, C.: Met. Mat. Trans. A. 32A, 2527(2001)
- 6) Uenishi, A., Teodosiu, C., Nesterova, E.V.: Mat. Sci. Eng. A400-401, 499(2005)
- 7) Bouvier, S., Haddadi, H., Levee, P., Teodosiu, C.: J. Mat. Proc. Tech. 96, 172(2006)
- 8) 鈴木規之ら: 塑性と加工. 46(534), 636-640(2005)
- 9) Keh, A.S.: Phil. Mag. 9, 12(1965)
- 10) 黒田充紀, 志澤一之: 塑性と加工. 43(495), 299-309(2002)
- 11) Asaro, R. J., Needleman, A.: Acta Metal. 33, 923-953(1985)
- 12) 磯貝栄志ら: 平成21年度塑性加工春季講演会講演論文集. 2009, p.207-208



上西朗弘 Akihiro UENISHI
鉄鋼研究所 加工技術研究開発センター
主任研究員 博士
千葉県富津市新富 20-1 〒293-8511



池松陽一 Yoichi IKEMATSU
広畑技術研究部長 工博



磯貝栄志 Eiji ISOGAI
広畑技術研究部 主任研究員



杉山昌章 Masaaki SUGIYAMA
先端技術研究所 解析科学研究部
主幹研究員 (技術開発企画部 部長) 工博



杉浦夏子 Natsuko SUGIURA
君津技術研究部 主任研究員 工博



樋渡俊二 Shunji HIWATASHI
名古屋技術研究部長 博士