

純チタン板における結晶塑性解析手法の確立と変形特性の解明

京都大学 大学院エネルギー科学研究科 エネルギー応用科学専攻
准教授 浜 孝之
(平成 27 年度 一般研究開発助成 AF-2015020)

Key words: 純チタン板, 結晶塑性有限要素法, 変形異方性

1. 緒言

工業用純チタンは低温靱性や耐熱性, 耐食性等に優れており, 航空宇宙分野や医療分野, 民生部品などで広く用いられている[1]. 一方で工業用純チタン板は極めて強い塑性異方性を示し, その加工は容易ではないことが知られている. しかしながら, 詳細な変形挙動は明らかにされておらず, またそのため変形挙動を適切に記述できる材料モデルも確立されていない. その結果, 有限要素法シミュレーションにより工業用純チタン板の成形プロセスを適切に予測することができないという大きな問題がある.

工業用純チタン板における強い変形異方性は, 結晶レベルでの異方性が顕著な最密六方構造を有することと, その圧延板では六方晶の c 軸が板厚方向に配向した強い底面集合組織が形成していることに起因する[2]. さらに, 工業用純チタン板の塑性変形には活動に極性を持つ変形双晶が大きく影響することが報告されており[2,3], 変形異方性を強める要因になっている. したがって純チタンの塑性変形特性を明らかにするためには, 結晶レベルの微視的変形に基づいて巨視的な変形挙動を考察することが不可欠である.

このような結晶粒レベルの微視的変形から巨視的変形を予測する数値解析手法として, 結晶塑性解析が最近大きな注目を集めている. 結晶塑性解析技術は, かつてはアルミニウム合金や鉄鋼といった立方晶金属を対象とする場合が多かったが, マグネシウム合金に対する関心の高まりや計算機能力の向上に伴い, 近年では六方晶金属への適用が盛んである[例えば 4,5]. 筆者らもこれまでの研究で, マグネシウム合金板を対象とした結晶塑性解析技術の開発を行い, 引張-圧縮での変形非対称性[6]や反転負荷挙動[7], 等塑性仕事面の発展[8], 除荷時の非線形挙動[6, 9], 二段階負荷挙動[10]などの再現に成功している. 一方, 純チタンについては, マグネシウム合金に比べてその適用事例が著しく少なく, その解析技術は未だ発展途上の段階である. その理由の一つとして, 純チタンではマグネシウム合金に比べて活動しうるすべり系や双晶系の種類が多い一方で, それぞれの役割が十分明らかにされていないことが挙げられる[11].

以上を踏まえて本研究では, 筆者らがこれまで開発してきたマグネシウム合金用の結晶塑性解析プログラムを拡張することで, 工業用純チタンの変形挙動予測に資する結晶塑性解析技術の開発を第一の目的とする. ここでは特に, 実験結果との詳細な比較を通して, 解析で用いる材料パラ

メータを系統的に同定する方法の確立を目指す. また第二の目的として, 開発した結晶塑性解析技術により各種負荷経路における工業用純チタン板の変形特性を明らかにする. 以上の目的が達成されれば, 純チタンに関する材料モデルの構築に向けた道筋を示すことができ, 将来的な高精度塑性加工シミュレーションの礎となる知見の獲得が期待される. なお, 本報告書は既発表論文[12]を抜粋した内容から構成されている.

2. 結晶塑性有限要素法

2.1 基礎理論

本研究で用いた結晶塑性有限要素法を構成する基礎理論の概要を示す. 詳細については引用文献[6-10, 12]を参照いただきたい.

各すべり系および双晶系の活動は, シュミット則に従うと仮定する. すべり系 α におけるすべり速度 $\dot{\gamma}^\alpha$ は次のひずみ速度依存型の式で与えられると仮定する.

$$\begin{aligned}\dot{\gamma}^\alpha &= \left| \frac{\tau^\alpha}{\tau_V^\alpha} \right|^m \text{sign}(\tau^\alpha), \\ \tau^\alpha &= \sigma : (\mathbf{s}^\alpha \otimes \mathbf{m}^\alpha), \\ \dot{\gamma}^\alpha &= \sum_\beta q_{\alpha\beta} h |\dot{\gamma}^\beta|\end{aligned}\quad (1)$$

ここで, τ^α , τ_V^α , $\dot{\gamma}^\alpha$ はそれぞれ分解せん断応力, すべり抵抗, 参照すべり速度である. σ は Cauchy 応力テンソル, 単位ベクトル \mathbf{s}^α および \mathbf{m}^α はすべり方向およびすべり面法線を表す. m はひずみ速度感性指数, $q_{\alpha\beta}$ は自己/潜在硬化係数である. h は加工硬化率である.

2.2 すべり系

結晶塑性有限要素法では, 解析で考慮するすべり系および双晶系の選択が重要である. 工業用純チタンに関する先行研究[13-15]に基づき, 本研究では最密六方晶における底面{0001}すべり系 (3), 柱面{10-10}すべり系 (3), 錐面{10-11}すべり系 (6), 錐面{11-21}すべり系 (6), 錐面{10-10}すべり系 (12) を考慮した. なお, ()内の数字は各種類の数を表す. 各すべり系の加工硬化挙動を表す加工硬化率 h には, 次式を用いる.

$$h = h_0 \left(1 - \frac{\tau_0}{\tau_\infty} \right) \exp \left(- \frac{h_0 \bar{\gamma}}{\tau_\infty} \right), \bar{\gamma} = \sum_\alpha \int |\dot{\gamma}^\alpha| dt \quad (2)$$

次節では、双晶のモデル化について示す。

2.3 双晶変形のモデル化

純チタンでは数種類の双晶系が活動することがこれまで報告されているが、本研究ではその活動が大きく塑性変形挙動に及ぼす影響が無視できないと考えられる{10-12}引張双晶系(6)および{11-22}圧縮双晶系(6)を考慮した。双晶の形成および回復には、筆者らが提案したモデルを用いた。以下にその概要を示す。

双晶活動によって生じるせん断ひずみ速度は、すべり速度と同様に式(1)で与えられると仮定する。双晶活動の極性を表すため、{10-12}引張双晶および{11-22}圧縮双晶はそれぞれ $\tau^\alpha > 0$ および $\tau^\alpha < 0$ の場合のみ形成しようと仮定する。双晶形成の進展に伴う双晶領域の拡大を表現するため、次式を用いてわずかに加工硬化すると考える。

$$h = h_0 \quad (3)$$

双晶による格子回転には、van Houtte が提案した確率論に基づくモデル[16]を用いる。まず、双晶の形成に伴って生じる双晶体積率 f^α を次式で定義する。

$$f^\alpha = \bar{\gamma}_{\text{twin}}^\alpha / \gamma_{\text{ref}} \quad (4)$$

ただし、 $\bar{\gamma}_{\text{twin}}^\alpha$ は双晶形成による累積せん断ひずみ、 γ_{ref} は結晶粒全体が双晶変形したときに対応する参照せん断ひずみである。一方、乱数を用いて体積率に対する閾値 f_{th}^α を各双晶系に予め与える。そして毎ステップで f^α と f_{th}^α を比較し、 $f^\alpha \geq f_{\text{th}}^\alpha$ が満足されたとき、この結晶粒は双晶系 α により回転すると考え、双晶回転を表す次式の直交テンソル \mathbf{R}^{tw} を用いて各すべり系の方位を回転させる。

$$\mathbf{R}^{\text{tw}} = 2\mathbf{m}^\alpha \otimes \mathbf{m}^\alpha - \mathbf{I} \quad (5)$$

ここで \mathbf{I} は単位テンソル、 \mathbf{m}^α は双晶系 α の双晶面単位法線ベクトルである。

一度双晶形成によりせん断ひずみが生じた双晶系では、その後反転負荷を受けることで双晶回復の過程に入ると考える。回復過程では、双晶形成で生じた累積せん断ひずみ $\bar{\gamma}_{\text{twin}}^{\text{max}}$ に達するまで活動できると考える。当該結晶粒において応力反転前に双晶回転が生じている場合、回復過程で生じる累積せん断ひずみ $\bar{\gamma}_{\text{ut}}$ が $\bar{\gamma}_{\text{ut}} = \bar{\gamma}_{\text{twin}}^{\text{max}}$ を満足した時に各すべり系の方位を $(\mathbf{R}^{\text{tw}})^T$ を用いて回転させる。

なお、実験観察の結果、同一結晶粒内で{10-12}引張双晶および{11-22}圧縮双晶が同時に活動することはほとんどないことが明らかとなった。そこで本研究では、同一結晶粒内では一つの双晶系しか活動し得ないと仮定した。

2.4 有限要素解析

本研究では、以上の結晶塑性モデルをアップデート・ラグランジュ形式の静解析有限要素法に導入して、変形解析を行った。解析では、立方体を各方向に7分割したモデル(図1)を代表体積要素として用いた。要素には、8節点ソリッド要素(選択低減積分)を用いた。一要素内の8積分点全てで同じ初期方位を有すると定義して、343の初期方位からなる多結晶体を想定した。初期方位には、変形前

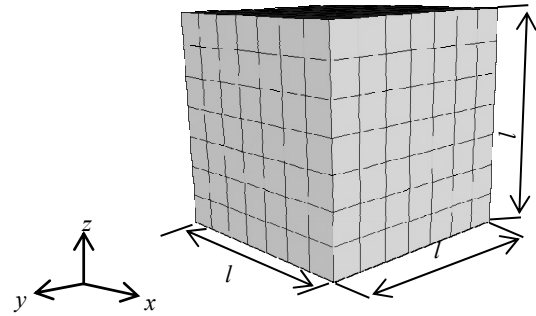


図1 解析で用いた有限要素モデル。

の材料を電子線後方散乱回折法(EBSD)により測定して得られた初期結晶方位情報を用いた。

3. 実験方法

市販のJIS1種工業用純チタン板(公称板厚1.0mm)を用いた。本供試材の初期極点図を図2に示す。ピークがTD方向に割れた、典型的な底面集合組織を示している。供試材の多様な変形挙動を調査するため、一軸引張試験、一軸圧縮試験、反転負荷試験等を行った。圧縮試験および反転負荷試験には、座屈防止用のクシ歯型用具を用いた。実験で用いた試験片形状を図3に示す。実験に先立ち、試験片形状に加工後に530℃、1時間の条件で焼鈍を施した。

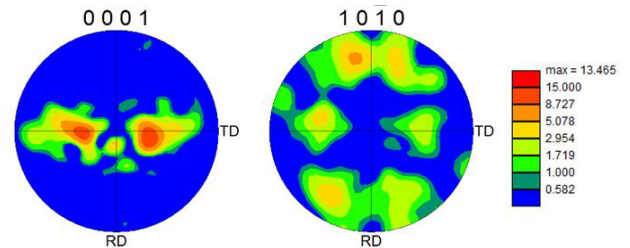


図2 EBSDで測定された初期極点図[12].

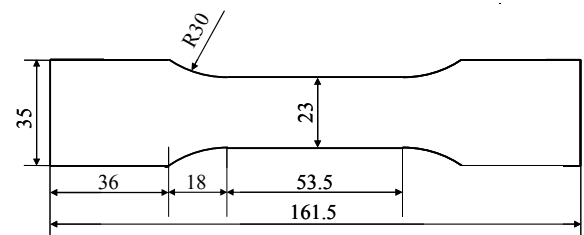


図3 試験片形状。

4. 結果と考察

4.1 材料パラメータの決定

実験結果に基づき、ヤング率、ポアソン比、ひずみ速度敏感性指数はそれぞれ $E=105\text{GPa}$ 、 $\nu=0.34$ 、 $m=0.02$ とした。また参照すべり速度は $\dot{\gamma}_0=0.001\text{s}^{-1}$ とした。自己硬化係数 q_{self} は全て1とした。一方、純チタンの潜在硬化係数については、これまでほとんど研究事例がないため、明らかではない。そこで、これまでの双晶に関する知見[例えば、17]に基づいて、双晶活動がもたらす潜在硬化はすべり系活動がもたらす影響よりも大きいと仮定した。また、後述するパラメ

ータ同定の結果として、錐面<a+c>すべり系- $\{11-22\}$ 圧縮双晶系間のパラメータが最も大きくなるように設定した。

続いて、各すべり系/双晶系の臨界分解せん断応力 (CRSS) および加工硬化パラメータの決定方法を示す。最初に、CRSS の大小関係を見積もった。過去のほとんどの研究において、柱面すべりの CRSS が最も低く、続いて錐面<a>すべり、 $\{10-12\}$ 引張双晶、 $\{11-22\}$ 圧縮双晶、そして錐面<a+c>すべりの順に大きくなる事が報告されている。一方、底面すべりの CRSS については文献によって解釈が異なり、柱面すべりに次いで小さいとする文献[13]から最も大きいとする文献[11]まで、統一的な見解が得られていないのが現状である。そこで本研究では、底面すべり以外のすべり系/双晶系における CRSS 大小関係は前述の通りで採用する一方で、底面すべりの CRSS に対しては特に制限を設けずに実験結果と合うように調整した。

続いて、具体的な決定手順を示す。過去の研究より、圧延方向 (RD) 負荷における初期降伏応力は柱面すべり系の活動でほぼ決定されること、錐面<a>すべり系も活動すること、圧延直角方向 (TD) 負荷では塑性変形初期は錐面<a>すべりが支配的であり、また柱面すべりおよび底面すべりも活動すること、RD への圧縮および引張時にはそれぞれ $\{10-12\}$ 引張双晶および $\{11-22\}$ 圧縮双晶が活動すること、などが報告されている。以上の知見に基づいて、次の流れでパラメータを逐次決定する手順を提案した。

(1) RD 引張時の応力-ひずみ曲線、 r 値発展、集合組織発展が実験と合うように、柱面すべりおよび $\{11-22\}$ 双晶形成のパラメータを見積もる。同様に、RD への引張-圧縮反転負荷時の応力-ひずみ曲線が実験と合うように $\{11-22\}$ 双晶回復のパラメータを見積もる。

(2) TD 引張時の応力-ひずみ曲線および r 値発展が実験と合うように錐面<a>すべりおよび底面すべりのパラメータを見積もる。

(3) RD 圧縮時の応力-ひずみ曲線、および集合組織発展が実験と合うように $\{10-12\}$ 双晶形成のパラメータを見積もる。また、RD への圧縮-引張反転負荷に基づいて $\{10-12\}$ 双晶回復のパラメータを見積もる。

以上の手順を繰り返すことで、全ての実験結果を再現できる一組のパラメータを同定した。紙面の都合上、詳細な数値は割愛するが、最終的な底面すべりの CRSS は、柱面すべり、錐面<a>すべりに次いで大きいと設定するのが最も適切であるとの結論に至った。またこのとき、柱面すべりと底面すべりの CRSS 比は 2.15 程度と同定された。なお、最近になって Wang ら[18]は X 線計測により CRSS 比を実験的に求めたところ、1.7-2.1 程度と報告しており、本研究で同定されたパラメータの妥当性が示されている。

4.2 各種変形挙動の予測

前節で決定されたパラメータを用いて各種負荷経路における変形挙動を解析した事例を以下に示す。図 4(a)および(b)に単軸負荷を与えた場合の応力-ひずみ曲線および引張下での r 値の発展を示す。図 4(a)では両軸ともに絶対値を示している。初期の降伏応力やその後の加工硬化は、引張と圧縮また圧延方向と圧延直角方向で大きく異なる。

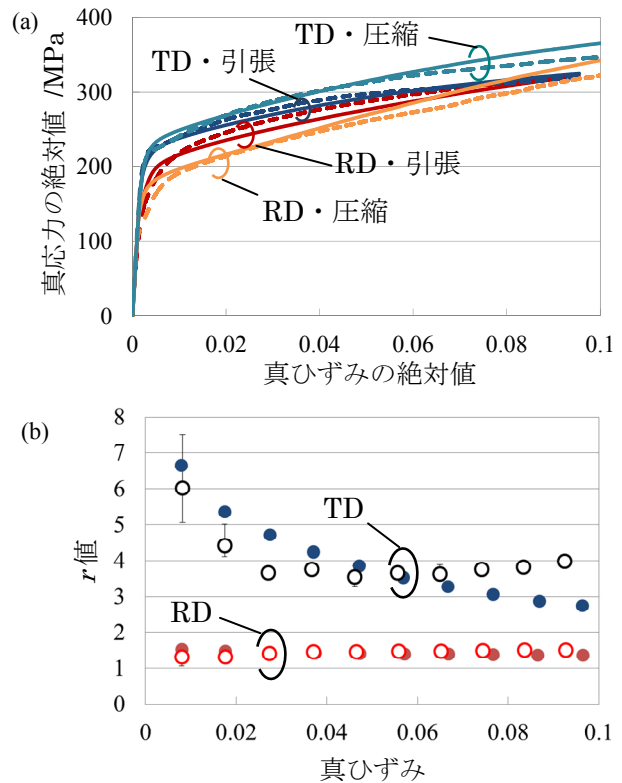


図 4 純チタン板における単軸負荷下での変形挙動[12]. (a)応力-ひずみ線図. 実線は解析, 破線は実験の結果を示す. (b)引張変形下での r 値の推移. 中塗りは実験, 中抜きは解析の結果を表す.

また r 値は、圧延方向では 1.5 程度ではほぼ変化しないのに対して、圧延直角方向では変形初期に著しく高く、その後急激に低下する傾向を示す。このように、純チタン圧延板では応力挙動およびひずみ挙動において極めて強い異方性が観察される。以上の挙動は、結晶塑性解析により良好に予測できている。図 5 に、種々の単軸負荷を受けた後の (0001)極点図を示す。圧延方向へ負荷した場合、引張と圧縮ともに圧延方向でピークが生じているが、そのピーク強度は圧縮の方が強い。一方、圧延直角方向へ負荷した場合、引張では圧延方向に弱いピークが生じるが、圧縮では初期 (図 2) からほとんど変化していない。このように、負荷方向によって集合組織発展が大きく異なる。以上の傾向は、解析により良好に予測できている。

図 6 に、圧延方向へ反転負荷を与えた場合の応力-ひずみ曲線を示す。圧縮から引張への反転負荷を与えた場合、反転後にわずかに S 字状の加工硬化挙動が生じている。一方、引張から圧縮への反転負荷を与えた場合は、S 字状の挙動は見られない。このことから、マグネシウム合金板と同様に純チタン板も顕著なひずみ経路依存性を示すことがわかる。以上の傾向は、結晶塑性解析でも精度良く予測できている。詳細は省略するが、圧縮から引張へ反転負荷した場合に見られる S 字状の挙動は、マグネシウム合金板同様に双晶回復が生じたためであり、一方で引張から圧縮へ反転した場合に S 字状の挙動が見られないのは、双晶の活動が相対的に弱いためであることが解析から示されている。

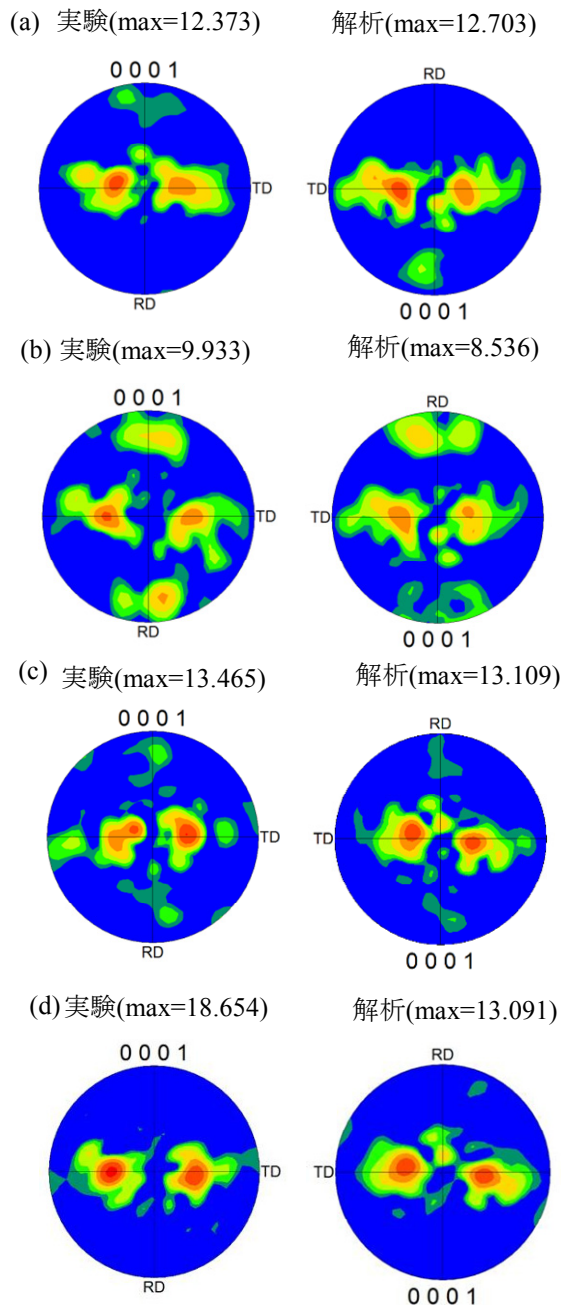


図5 純チタン板における単軸負荷後の極点図[12]. (a) 圧延方向・10%引張, (b)圧延方向・10%圧縮, (c)圧延直角方向・10%引張, (d)圧延直角方向・10%圧縮.

これまででは板材が単軸負荷を受けた場合の事例を示してきたが、実際の板材成形では多軸負荷下で変形が進行するケースが多く、多軸応力状態における変形挙動の予測も重要である。図7に純チタン板における等塑性仕事面の予測結果を示す。両軸ともに、圧延方向への一軸引張時の応力 σ_0 を用いて無次元化されている。初期等塑性仕事面では、圧延方向と圧延直角方向で著しい非対称性が生じており、総じて圧延直角方向の方が応力レベルが高い。一方、その後の塑性変形の発展に伴い、無次元化された等塑性仕事面は急速に収縮する。このとき、収縮の大きさは圧延方向に比べて圧延直角方向が顕著である。その結果、一軸引張りひずみ $\epsilon_0^p = 8.5\%$ 程度で等塑性仕事面はほぼ対称的な形状に

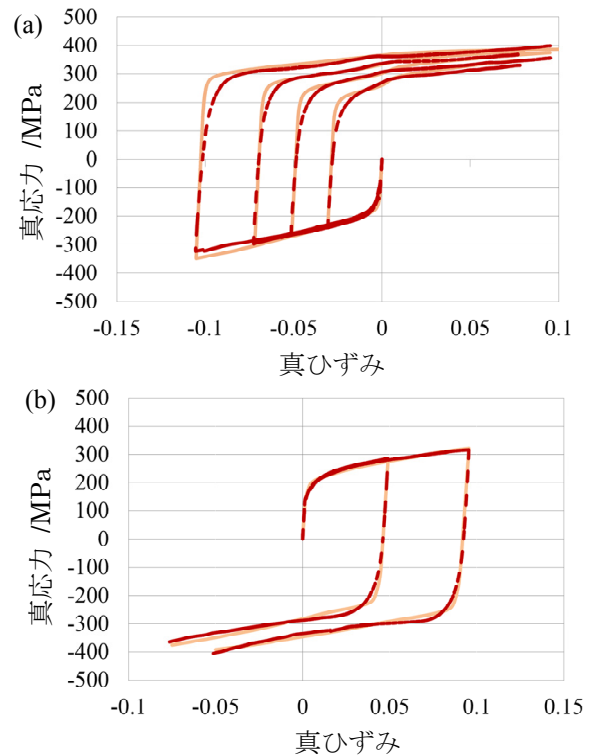


図6 純チタン板において圧延方向へ反転負荷を与えた場合の応力-ひずみ線図[12]. 実線は解析, 破線は実験の結果を表す. (a)圧縮から引張への反転負荷, (b)引張から圧縮への反転負荷.

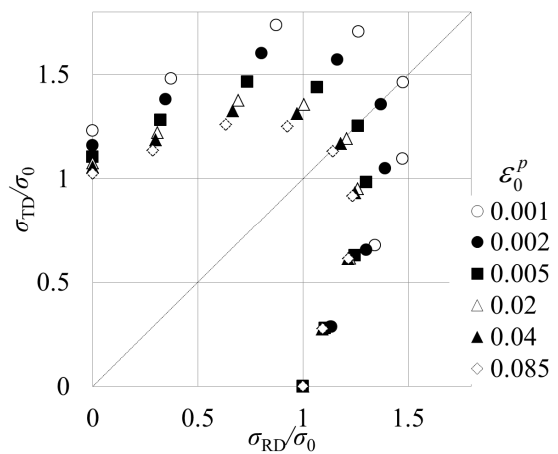


図7 純チタン板における等塑性仕事面の予測結果[12]. ϵ_0^p は一軸引張時のひずみを表す.

帰着している。以上の傾向は、伊敷らによる実験結果[19]と良く一致しており、解析では多軸応力下の変形も適切に予測できていることがわかる。また解析の結果から、初期の強い非対称性は応力比によって活動するすべり系が異なることが要因であることが示されている。

5. 結言

本研究では、種々の負荷経路における工業用純チタン板の巨視的な変形挙動を高精度に予測することを目的として、結晶塑性有限要素解析プログラムの開発および系統的なパラメータ同定手順の提案を行った。開発したプログラムおよび同定されたパラメータを用いることにより、JIS1 純種

チタン板における一軸引張，一軸圧縮，反転負荷，二軸負荷の各種負荷経路における変形挙動を良好に予測することに成功した。また，解析結果に基づいて，純チタン板における強い変形異方性の発現メカニズムを明らかにした。

謝辞

本研究を遂行するに当たり，研究助成をいただいた公益財団法人天田財団に深甚なる謝意を表す。EBSD測定には，大阪産業技術研究所の内田壮平様のご協力をいただいた。ここに記して謝意を表す。

参考文献

- [1] Zeng, Z., Zhang, Y., Jonsson, S., *Mater. Des.*, 30(2009), 3105-3111.
- [2] Mullins, S., Patchett, B.M., *Metall. Trans. A*, 12(1981), 853-863.
- [3] Ishiyama, S., *Titan. Jpn.*, 54(2006), 42-51.
- [4] Graff, S., Brocks, W., Steglich, D., *Int. J. Plast.*, 23(2007), 1957-1978.
- [5] Wang, H., Wu, P.D., Wang, J., Tome, C.N., *Int. J. Plast.*, 49(2013), 36-52.
- [6] Hama, T., Kitamura, N., Takuda, H., *Mater. Sci. Eng. A*, 583(2013), 232-241.
- [7] Hama, T., Takuda, H., *Steel Res. Int., Spec. Ed.*, 2012, 1115-1118.
- [8] Hama, T., Takuda, H., *Comput. Mater. Sci.*, 51(2012), 156-164.
- [9] Hama, T., Takuda, H., *Int. J. Plast.*, 27(2011), 1072-1092.
- [10] Hama, T., Tanaka, Y., Uratani, M., Takuda, H., *Int. J. Plast.*, 82(2016), 283-304.
- [11] Warwick, J.L.W., Jones, N.G., Rahman, K.M., Dye, D., *Acta Mater.*, 60(2012), 6720-6731.
- [12] Hama, T., Kobuki, A., and Takuda, H., *Int. J. Plast.*, 91(2017), 77-108.
- [13] Philippe, M.J., Serghat, M., Van Houtte, P., Esling, C., *Acta Metall. Mater.*, 43(1995), 1619-1630.
- [14] Wu, X., Kalidindi, S.R., Necker, C., Salem, A.A., *Acta Mater.*, 55(2007), 423-432.
- [15] Conrad, H., *Prog. Mater. Sci.*, 26(1981), 123-403.
- [16] Van Houtte, P., *Acta Metall.*, 26(1978), 591-604.
- [17] Nixon, M.E., Cazacu, O., Lebensohn, R.A., *Int. J. Plast.*, 26(2010), 516-532.
- [18] Wang, L., Zheng, Z., Phukan, H., Kenesei, P., Park, J.-S., Lind, J., Suter, R., Bieler, T. R., *Acta Mater.*, 132 (2017), 598-610.
- [19] Ishiki, M., Kuwabara, T., Yamaguchi, M., Maeda, Y., Hayashida, Y., Itsumi, Y., *Trans. Jpn. Soc. Mech. Eng.*, 75(2009), 491-500.