

# 計算力学による 3DP 特異界面に関連する 力学現象の数値解析

眞山 剛\* 君塚 肇\*\*

## 1. はじめに

粉末床溶融結合法 (Powder-bed fusion, PBF) 型の積層造形 (Additive manufacturing, AM/3D printing, 3DP) により造形される金属材料は、プロセスパラメータを制御することにより材料組織を制御することが可能である。Ishimoto ら<sup>(1)</sup> は、PBF プロセスの一種である選択的レーザー溶融法 (Selective laser melting, SLM) により生体適合金属材料である  $\beta$  型 Ti 合金 (Ti-15Mo-5Zr-3Al) の集合組織制御を試み、積層方向に  $\langle 001 \rangle$  方向および  $\langle 011 \rangle$  を強く配向させた単結晶様組織の制御技術を確立している。この配向制御技術を用いると、領域ごとに異なる結晶配向を与え、材料中に人工的な界面 (人工界面) を導入することが可能である。また、Gokcekaya ら<sup>(2)</sup> は、Ni 基超合金 Inconel718 を対象として PBF プロセスパラメータと造形材組織の関係を探索し、プロセスパラメータに依存して結晶配向性の強い単結晶様組織や結晶配向性の弱い多結晶組織が得られることに加えて、異なる結晶配向領域が約 100  $\mu\text{m}$  周期のラメラ状に自己組織化される自己組織化ラメラ組織を得ることができることを見出している。さらに、ラメラ組織中には 100 nm オーダーのセル組織が自己組織化されていることも確認されている。すなわち、100  $\mu\text{m}$  オーダー周期の結晶方位変化による界面 (自己組織化ラメラ界面) と 100 nm オーダー周期の溶質濃度変動による界面 (自己組織化セル界面) を含む組織を 1 つの単位ブロックとして、上記の配向制御により人工界面をも導入することにより、空間スケールが大きく異なる複数の 3DP 特異界面を含む階層構造を 3 次元的に造形することが可能である。一方で、従来の比較的均質な材料に対して用いられ

てきた解析手法を用いて、このように複雑な階層構造を持つ材料の力学特性発現機構を理解し、その変形挙動を予測することは困難であるため、電子・原子スケールから連続体スケールまでの計算力学的手法を駆使したアプローチが不可欠である。その際、各空間スケールにおける現象の理解・予測そのものが重要であることに加えて、巨視的な数値解析を実施する上で用いるパラメータをより小さな空間スケールの解析から取得することにより、明確な物理的描像に基づく巨視的解析が可能となる。

本稿では、まず人工界面を導入した構造体の巨視的な変形挙動に関する連続体解析について紹介した後に、プロセスパラメータにより制御される数百  $\mu\text{m}$  オーダーの集合組織を考慮した結晶塑性解析結果の一例を示す。さらに、金属 AM プロセスにおける超急冷により溶質元素が高濃度に強制固溶された固溶体合金における塑性変形の素過程 (主に、溶質元素の影響下での転位運動) に関する原子論的解析について紹介する。

## 2. AM 材の連続体解析

本章では AM 材の巨視的力学特性探索の一例として、仮想的な材料特性を仮定した連続体解析について示す。本研究で適用した解析手法は、速度依存型結晶塑性モデル<sup>(3)</sup> を構成式として導入した静的大変形陽解法有限要素法である<sup>(4)(5)</sup>。解析対象としては、場所ごとに異なる結晶配向を持たせることにより人工界面を導入した構造体 (AM 構造体) および自己組織化ラメラ界面を含む微視構造とし、(1)AM 構造体の弾性変形挙動、(2)AM 構造体の塑性変形挙動、および(3)自己組織化ラメラ構造の弾塑性遷移、それぞれについて予備的

\* 熊本大学先進マグネシウム国際研究センター; 准教授

\*\* 名古屋大学大学院工学研究科; 教授

Numerical Analysis of Mechanical Behavior Related to Various 3DP Interfaces; Tsuyoshi Mayama\* and Hajime Kimizuka\*\* (\*Magnesium Research Center, Kumamoto University, Kumamoto. \*\*Graduate School of Engineering, Nagoya University, Nagoya)

Keywords: additive manufacturing, finite element method, crystal plasticity, molecular dynamics, density function theory

2023年10月12日受理 [doi:10.2320/materia.63.49]

な解析を実施した結果を示す。

### (1) AM 構造体の弾性変形挙動

図1(a)は、本解析で用いたAM構造体モデルを示している。基本構成要素(Building block)は、積層方向に[011]、レーザー走査方向に[100]が配向する Scan-strategy で造形される立方体形状とし、(i)x方向または(ii)y方向を走査方向とする2種類の配向いずれかを $2 \times 2 \times 2$ 領域に適用して得られる構造体を弾性変形解析の対象とした。ここで、結晶と配置の対称性により、明らかに多くの組合せは等価となるが、本解析では重複等は考慮せずに全組合せ( $2^8 = 256$ 通り)を網羅的に調査した結果を示す。材料としては立方晶金属を想定し、異方性因子Aが1.5となる弾性係数( $c_{11} = 100$  GPa,  $c_{12} = 50$  GPa,  $c_{44} = 37.5$  GPa)を使用した。図1(b)は、ヤング率の荷方位依存性を示しており、このような弾性異方性がAM構造体に導入された人工界面における変形の不適合を引き起こす。

図1(c)および(d)は、解析モデルにx, y, およびz方向の単軸負荷を与えて得られたAM構造体としての巨視的ヤング率の頻度分布を示している。x方向とy方向は全く同じ分布となるため図1(c)にまとめて示している。図1(c)より、x方向およびy方向のヤング率分布は、図1(b)に示した[100]方位と[110]方位のヤング率の範囲に概ね収まっており、AM構造体を構成するBuilding blockの走査方向が適用された数に依存している。一方、図1(d)に示したz方向ヤング率分布は、図1(b)に示した[110]方向のヤング率以上の値で分布しており、人工界面を導入したことにより構造体としてBuilding block以上のヤング率を持ちうることを示している。今回は2種類のBuilding blockからなる $2 \times 2 \times 2$

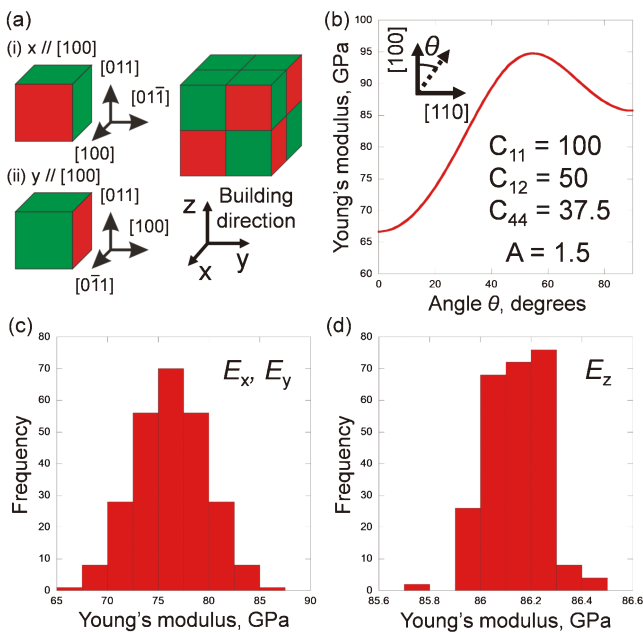


図1 AM構造体の弾性変形解析。(a)解析モデル、(b)仮想材の弾性異方性、(c)x方向およびy方向ヤング率の頻度分布、(d)z方向ヤング率の頻度分布。

の構造体を対象としたが、より多数のBuilding blockや細かく領域分割された構造体では、特性の持ちうるバリエーションは膨大となる。そのような構造体の特性を制御・最適化するためには、メタヒューリスティックなアプローチや機械学習の適用が効率的である。

### (2) AM 構造体の弾塑性変形挙動

図2(a)は、前節と同様の解析モデルを用いて塑性変形領域までz方向圧縮負荷解析を実施して得られた0.2%耐力の頻度分布を示している。本解析では、弾性特性としては前節と同じ値を用い、塑性変形機構としてはFCC金属の{111}〈110〉すべり系を考慮した。また、塑性変形領域の加工硬化挙動は次式のVoce型の硬化則を用いて表現した。

$$\hat{\tau}^{(\alpha)} = \tau_0^{(\alpha)} + (\theta_0^{(\alpha)} - \theta_1^{(\alpha)} \Gamma) \left\{ 1 - \exp \left( -\frac{\tau_1^{(\alpha)}}{\theta_0^{(\alpha)}} \Gamma \right) \right\} \quad (1)$$

ここで、 $\tau_0^{(\alpha)}$ ,  $\tau_1^{(\alpha)}$ ,  $\theta_0^{(\alpha)}$ , および  $\theta_1^{(\alpha)}$  は、材料パラメータであり、本研究では非線形硬化を示す材料を仮定して、それぞれ100 MPa, 100 MPa, 1000 MPa および 100 MPa を用いた。

図2(a)の結果は、0.2%耐力がBuilding blockの組合せにより異なり得ることを示しているが、いずれのBuilding blockも初期結晶方位に対するシュミットファクターが同一であることを考えると、材料の不均一変形に起因して0.2%耐力に差が生じていると考えられる。図2(b)は最大0.2%耐力を示した組合せの模式図および圧縮ひずみ1%時の相当ひずみ分布を示しており、顕著な不均一変形が生じていることがわかる。図2(c)はx方向およびy方向応力の標準偏差と0.2%耐力の関係を示している。原点のプロットは、単一

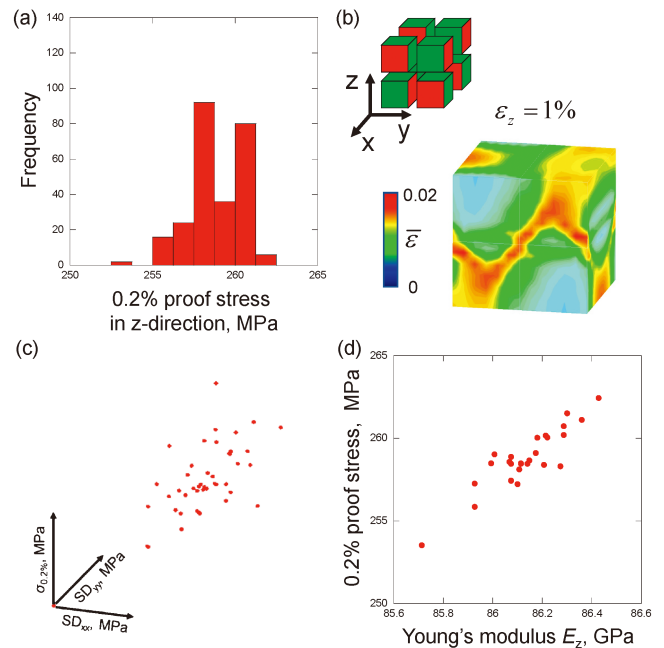


図2 AM構造体の塑性変形解析。(a)0.2%耐力の頻度分布、(b)最大0.2%耐力を示す構造の1%圧縮時相当ひずみ分布、(c)応力不均一性と0.2%耐力の関係、(d)z方向圧縮時のヤング率と0.2%耐力の関係。

Building block で構成された構造体が一樣変形する場合の結果であり、応力の標準偏差がゼロを示している。これに対して、原点から離れて分布する2種類の Building block となる構造体の結果は、応力の不均一性が大きいほど高い0.2%耐力を示す傾向がみられる。さらに図2(d)は、z方向負荷時のヤング率と0.2%耐力の関係を示しており、両者は正の相関を持つことがわかる。これは今回想定した材料では弾性異方性と塑性異方性が顕著となる負荷方位が類似していることに関連するものと考えられる。

### (3) 自己組織化ラメラ構造の弾塑性遷移

図3は、異なる組織形態を持つ Inconel718 を想定して実施した引張負荷解析結果を示している。AMにより造形さ

れる Inconel718 は、レーザーパラメータに依存して多様な組織形態を示すことが知られており<sup>(2)</sup>、本解析モデルはその SEM / EBSD 観察像に基づき、自己組織化ラメラ構造 (CLM) および多結晶構造 (PCM) に対応するものとして作成した。本解析では、不均一変形に対する塑性変形の寄与を抽出するために、弾性特性としては異方性因子 A が 1 となる等方弾性挙動を示す弾性係数 ( $c_{11} = 100$  GPa,  $c_{12} = 50$  GPa,  $c_{44} = 25$  GPa) を用い、塑性パラメータについては前節と同じ値を用いた。

図3(a)はz軸引張1%における相当ひずみ分布を示している。CLMと比べてPCMではより不均一な変形が生じていることがわかる。図3(b)は巨視的なひずみの増加に対する変形の不均一性発達として、各モデルにおけるz軸方向ひずみの標準偏差の変化を示したものである。等方弾性体を仮定したことにより、変形初期においては両モデルとも標準偏差は0、すなわち一樣な変形が生じている。さらに巨視的降伏が生じて塑性ひずみの蓄積が開始する公称ひずみ0.3%から標準偏差が増加し、CLMに比べてPCMでは2倍程度大きなひずみのばらつきが生じていることがわかる。一方、CLMの変形に注目すると、今回の計算結果にはCLMの特微的なラメラ構造とひずみ分布に顕著な対応が見られない。これは、本解析の計算手法には界面を構成する2結晶間のすべり伝達抵抗<sup>(6)</sup>を陽には考慮していないことも一因と考えられる。今後は実験事実との対応を確認しつつ、界面におけるすべり伝達抵抗を考慮した解析も実施する必要がある。

## 3. AM材を想定した高濃度固溶体合金の原子論的解析

合金に対してAM法による急冷凝固プロセスを適用した場合、非平衡相や溶質原子を強制固溶した過飽和固溶体が生ずる。これらは casting や powder metallurgy 等の従来工法により成形した場合とは異なる組織を示し、その中には従来合金には見られない特異で優れた力学特性、機能特性を示すものが発見されている。本研究では、高濃度固溶体合金を金属AM材に対する理想モデル系として位置づけ、その力学特性の支配因子を解明するための原子論的解析を進めている。具体的にはTi基体心立方(BCC)合金やNi基面心立方(FCC)合金を対象に、溶質濃度と合金の熱力学的安定性との関係、ならびに構成元素の原子サイズの違いにより不均一に歪んだ結晶格子が塑性変形挙動の素過程に与える影響を分子動力学法や電子状態計算等を用いて評価する。本章では、原子論的立場からみたTi-Nb合金およびNi-Fe-Cr合金における転位の運動過程の解析の一例を紹介する。

### (1) 局所的な組成/構造のゆらぎの影響

高濃度固溶体合金における原子レベルの転位運動の描像については、これまで主に高・中エントロピー合金に対するモデリング研究を通じて調査が進められてきた(例えば文献<sup>(7)(8)</sup>)。ランダム固溶体合金においてnmスケールの微視

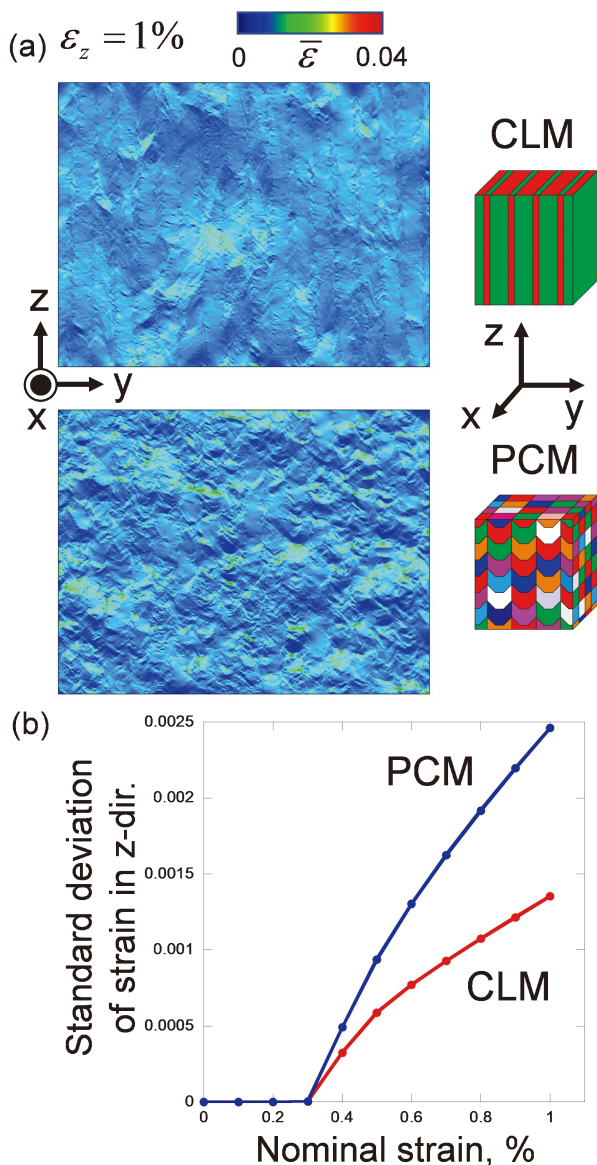


図3 自己組織化ラメラ構造 (CLM) および多結晶様構造 (PCM) の不均一変形挙動。(a) 1%変形時点における相当塑性ひずみ分布、(b) 変形に伴うひずみ分布の不均一性発達。

的領域に注目すると、その統計性から組成の局所的なゆらぎが不可避免的に生じる。格子定数、弾性定数、安定/不安定積層欠陥エネルギーなどはランダム合金の平均場表現に当たり、材料の局所的な組成・構造のゆらぎには依存しにくい一方、転位の移動性ならびに相互作用は局所的な組成・構造ゆらぎによって顕著な影響を受ける。例えば Ni 基合金の AM 材においては、セル界面近傍における溶質原子の濃化に伴い転位が集積する現象が観察されていることなどから、高濃度固溶体合金において転位の運動がどのようなメカニズムにより律速されるのかを明らかにすることが欠かせない。

## (2) 平均場表現に基づいた固溶合金のすべり特性

BCC 構造を有する Ti-Nb 合金を対象に、系の形成エネルギーおよび弾性定数の Nb 濃度依存性 (18.75~31.25 at%) を評価した。系のサイズは 128 原子とし、Special Quasirandom Structure 近似<sup>(9)</sup>に基づく配置を使用した。考慮した全ての濃度領域において系は弾性安定性を維持するものの、正方せん断弾性率  $((C_{11} - C_{12})/2)$  成分に相当) は明瞭に低い値を示すことが分かった。さらに、Nb 濃度が低くなるにつれて系の BCC 構造安定性は低下し、局所的な原子位置の緩和が進行することが確認された。これは、局所的に Nb 濃度が低い領域においては格子緩和が進行し、構造ゆらぎを伴う微小ドメイン ( $\omega$  構造等) が生じる可能性を示唆している。

BCC 構造を有する高濃度固溶体合金のすべり特性を評価するため、Ti-Nb 合金を対象に電子状態計算により一般化積層欠陥エネルギー ( $\gamma$  表面) を評価した (図 4)。図 4(a, b) を

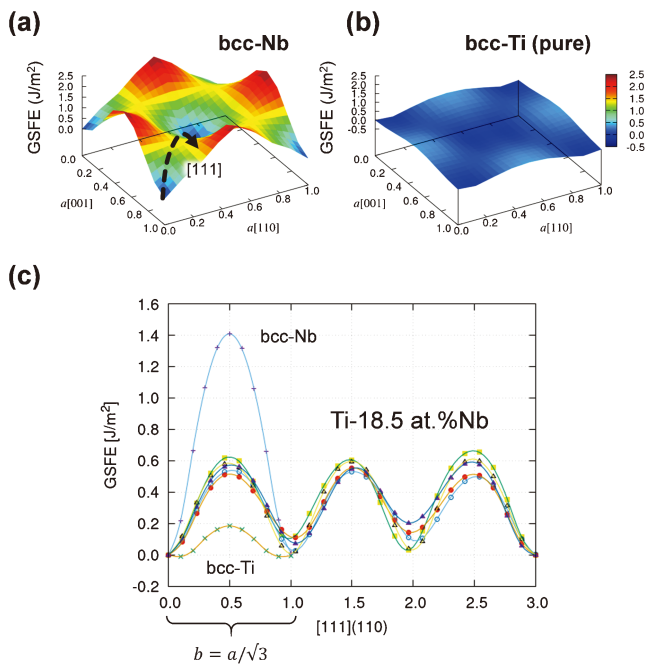


図 4 (a) 純 Nb, (b) 純 Ti および (c) Ti-Nb 合金の一般化積層欠陥エネルギー (BCC 構造, (110) 面). Ti-Nb 合金に関するプロット (計 5 ケース) は、それぞれ同じ組成を持つスーパーセルにおける異なる (110) 面に対する結果を表す。

参照すると、純 Nb では (110) 面において [111] 方向の障壁が最小であり、この方向のすべりが最も容易に生じることがわかる。一方、仮想的に評価した純 Ti (BCC 構造) の  $\gamma$  表面ではあらゆる方向の障壁が顕著に低く、さらに [111] 方向へのすべり経路の途中にはエネルギーの極小値が見られる。これは、BCC 構造を有する純 Ti は力学的に不安定であり、この方向のすべりに対して反力が働かずに変態する傾向にあることを示している。Ti-18.5 at%Nb 合金における一般化積層欠陥エネルギー (図 4(c)) を参照すると、その最大値は純 Nb のものと純 Ti のものの中間を示している。さらに、得られた  $\gamma$  表面に基づいて準離散 Peierls-Nabarro モデル<sup>(10)(11)</sup>により Peierls 応力を評価すると、上述の一般化積層欠陥エネルギーの大小関係を反映して、最も転位が移動しづらいのは純 Nb であり、Ti-Nb 合金では Nb 濃度の低下とともに転位が動きやすくなるという結果が得られた。しかし、このモデルの基礎となる一般化積層欠陥エネルギーは平均場的な表現に基づいているため、合金の局所的な組成/構造のゆらぎの影響を陽には採り入れていない。そのため、真のランダム合金における転位の描像を捉えるには、転位と溶質原子との相互作用を原子論的なモデルにより直接的に解析する必要がある。

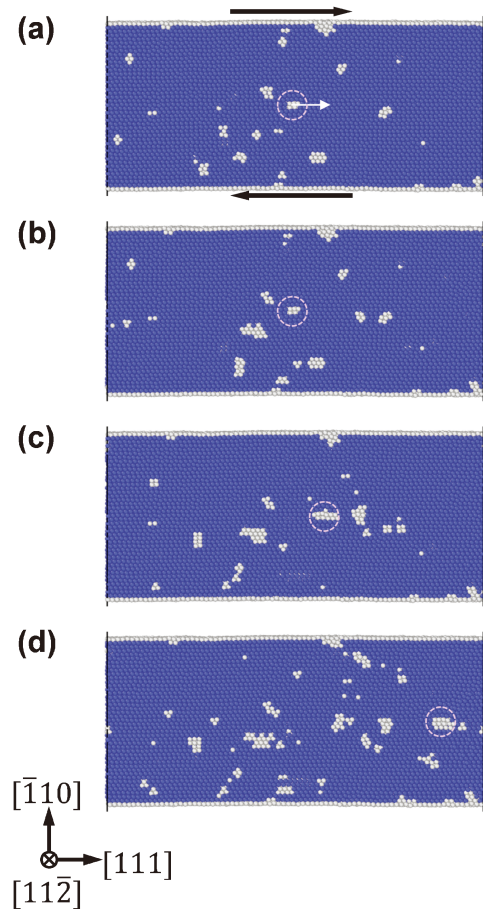


図 5 せん断ひずみ ( $\epsilon$ ) 下における Ti-25 at%Nb ランダム合金における刃状転位の移動過程. (a)  $\epsilon = 0.0\%$ , (b)  $\epsilon = 3.0\%$ , (c)  $\epsilon = 5.9\%$ , (d)  $\epsilon = 8.9\%$ .

### (3) 固溶合金における転位運動の原子論的解析

Ti-Nb 合金を対象に、せん断わずみ下における<111>(110)刃状転位の運動形態を分子静力学法により評価した(図 5)。原子間ポテンシャルには修正原子挿入法に基づくモデル<sup>(12)</sup>を適用した。通常の BCC 金属(純 Nb 等)では転位は Peierls 機構に基づきながら比較的滑らかにすべり面上を運動するのに対して、Nb を溶質原子として高濃度に含む Ti 合金では刃状転位は Nb の局所的な濃度ゆらぎに強く影響を受ける。これにより、上述のような一般化積層欠陥エネルギーが示す傾向とは異なり、転位が Ti-Nb 合金中を移動する際は純 Nb 中よりもはるかに高い応力を必要とすることが確認された。特に、Nb が局所的に枯渇した領域において、格子位置が規則的な BCC 構造から逸脱するほど転位は滑らかに運動することが難しくなり、進行と停止を繰り返すような jerky な運動を呈することが確認された。このような転位の運動形態の変化が、当該合金における塑性変形に対して影響を与えることが示唆される。

### (4) 転位のセル界面通過過程のモデル化

造形時の凝固・偏析過程を考えると、AM 材におけるセル界面は 2 次アームを持たないデンドライトとして捉えることができる。これを便宜的に、同じ方位を持つ結晶中に局所的に溶質原子が濃化した領域としてモデル化する。セル界面近傍の溶質原子の偏析が変形抵抗に与える影響を調査するため、Ni 基 FCC 合金(Ni-Fe-Cr 系)を対象として溶質濃度に濃淡がある結晶中を転位が通過する様子を分子動力学法により模擬した。一般に、FCC 金属中の刃状転位は 2 本の部分転位に拡張し、せん断応力の印加によって先行および後続の部分転位は互いに協調しながら運動する。一方で、高濃度 FCC 合金においては平均場的な Peierls 障壁よりも溶質濃度の局所ゆらぎによるピンニングの影響の方が強くなるため、後続部分転位は先行部分転位に即座に追従する訳ではなく、刃状転位の移動過程において部分転位間の積層欠陥領域が顕著に拡大する挙動が見られた。さらに、同じ温度、せん断応力下において、数%程度の溶質濃度の変化がもたらす局所ゆらぎが転位の移動速度に対して顕著な影響を与えることが認められた。

## 4. ま と め

本稿では金属積層造形(AM)により導入される人工界面および自己組織化ラメラ界面が弾性および塑性変形挙動に及ぼす影響を連続体解析により調査するためのアプローチ例を示した。さらに、金属 AM 材のモデル系として位置付けた高濃度固溶体合金におけるすべり・転位運動の原子レベルの解析例についても紹介した。今後は異なる空間スケール間の現

象を繋ぐため、特徴的なパラメータの抽出や粗視化手法を開発・導入することにより、空間スケールの大きく異なる複数の 3DP 特異界面を含む複雑な階層構造を持つ金属 AM 材の力学現象を理解し、さらに特性を最適化する材料設計にも貢献したい。

本研究は、JST-CREST ナノ力学 (Grant Number: JPMJCR2194)の支援を受けて実施したものである。

## 文 献

- (1) T. Ishimoto, K. Hagihara, K. Hisamoto, S.-H. Sun and T. Nakano: *Scr. Mater.*, **132**(2017), 34-38.
- (2) O. Gokcekaya, T. Ishimoto, S. Hibino, J. Yasutomi, T. Narushima and T. Nakano: *Acta Mater.*, **212**(2021), 116876.
- (3) D. Peirce, R. J. Asaro and A. Needleman: *Acta Metall.*, **31** (1983), 1951-1976.
- (4) T. Mayama, T. Ohashi, Y. Tadano, and K. Hagihara: *Mater. Trans.*, **56**(2015), 963-972.
- (5) T. Mayama, S. R. Agnew, K. Hagihara, K. Kamura, K. Shiraishi, M. Yamasaki and Y. Kawamura: *Int. J. Plasticity*, **154**(2022), 103294.
- (6) T. R. Bieler, P. Eisenlohr, C. Zhang, H. J. Phukan and M. A. Crimp: *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.*, **18**(2014), 212-226.
- (7) S. I. Rao, C. Varvenne, C. Woodward, T. A. Parthasarathy, D. Miracle, O. N. Senkov and W. A. Curtin: *Acta Mater.*, **125** (2017), 311-320.
- (8) B. Chena, S. Lia, H. Zong, X. Ding, J. Sun and E. Ma: *Proc. Natl. Acad. Sci.*, **117**(2020), 16199-16206.
- (9) A. Zunger, S.-H. Wei, L. G. Ferreira and J. E. Bernard: *Phys. Rev. Lett.*, **65**(1990), 353-356.
- (10) V. V. Bulatov and E. Kaxiras: *Phys. Rev. Lett.*, **78**(1997), 4221-4224.
- (11) S. H. Zhang, D. Legut and R. F. Zhang: *Comput. Phys. Commun.*, **240**(2019), 60-73.
- (12) R. C. Ehemann and J. W. Wilkins: *Phys. Rev. B*, **96**(2017), 184105 (13 pages).



眞山 剛

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★  
 2001年3月 北海道大学大学院工学研究科修士課程修了  
 2001年4月 北海道大学大学院工学研究科 助手  
 2008年2月 熊本大学大学院先導機構 特任助教  
 2017年4月~現職  
 専門分野：材料力学, 計算力学  
 ◎構造と材料の異方性に起因する力学現象を表現可能な解析手法の構築, およびその力学機能化への応用に従事。



君塚 肇

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★  
 1997年3月 早稲田大学大学院理工学研究科修士課程修了  
 1997年4月 株式会社日本総合研究所 研究技術職  
 2006年9月 大阪大学大学院工学研究科博士後期課程修了  
 2007年10月 大阪大学大学院基礎工学研究科 准教授  
 2020年4月~現職  
 専門分野：計算材料科学, 計算力学  
 ◎電子論・原子論的解析を軸とした材料物性のモデリングと予測に関する研究に従事。  
 ★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★