適合型三重結晶の引張りに伴う結晶粒の多体相互作用と回位型変位場の形成*

近 藤 了 嗣 *1　　大 橋 鉄 也 *2

Multi-Body-Interaction of Crystal Grains in Compatible-type Tricrystals under Tensile Loading and Formation of Disclination-type Displacement Field

Ryouji KONDOU*3　Tetsuya OHASHI

*3 Faculty of Engineering, University of the Ryukyus
1 Senbaru, Nishihara-cho, Nakagami-gun, Okinawa, 903-0213 Japan

Slip deformation in compatible-type tri-crystal models subjected to tensile load is investigated by using a continuum-mechanics-based crystal plasticity analysis technique. Accumulation of geometrically necessary dislocations (GNDs) and statistically stored dislocations (SSDs) are studied in detail. Mutual constraint of grains through the grain boundary plane does not occur in the compatible type tri-crystals, but results of the analysis show non-uniform deformation and high density of GNDs accumulated in the form of band in each grain. Mechanism of non-uniform deformation and accumulation of GNDs in the form of band in the compatible-type tri-crystals is discussed from the viewpoint of multi-body interaction between constituent crystal grains. The multi-body interaction is shown to be caused by shape change of grains after slip deformation and contribute for the formation of disclination type displacement field at the grain boundary triple junction.

Key Words: Compatible type Tri-crystal, Crystal Plasticity Analysis, Geometrically Necessary Dislocation, Multi Body Interaction, Disclination

1．緒　　言

金属多結晶の塑性変形は，活性化した結晶粒に生じるすべり変形（及び，活性化していない結晶粒に生じる弾性変形）の組み合わせである．このため，通常，結晶粒界に堆積した転位列による応力集中(1)，弾性不適合応力(2)(3)，及び，塑性ひずみ成分の非適合性(2)などに起因して，粒界を通した変形拘束の相互作用（以後，『粒界の効果』と呼ぶ．）が生じる．この結果，個々の結晶粒の粒界近傍には不均一変形が生じ，この不均一変形に伴うひずみ勾配に応じて転位が堆積する．この転位は空間的に，そこになければならない転位であるため，『幾何学的に必要な転位』（GN 転位：geometrically necessary dislocation）(4)と呼ばれている．

金属多結晶における転位の堆積は，結晶粒のひずみ硬化の原因であると共に結果である．このため，外部負荷の増加と共に粒界近傍に転位が堆積し続けると，隣接結晶粒間における変形拘束の相互作用も，逐次更新される．その結果，金属多結晶の変形挙動は巨視的にも微視的（準微視的）にも極めて複雑な動的現象となる．この場合，すべり変形の素過程である転位の運動・堆積の増分解析から，ボトムアップ的に材料全体の変形を検討することが有効な手段となる．しかしながら，解析結果から結晶粒に生じる準微視的な変形と材料全体の巨視的変形が，どのように連動しているか，検討する事が重要な課題として残されている．

著者等は，弾性不適合応力の効果と塑性ひずみ成分の非適合性が生じない条件(1)(5)を満足する適合型双結晶の引張りに伴うすべり変形と転位の結晶塑性解析を通して，従来，不均一変形の主要な原因と考えられてきた『粒界の効果』を解析モデルから全て除去しても，

＊　原稿受付　2005 年 12 月 12 日．
＊1 正員，琉球大学 工学部 機械システム工学科
(〒903-0213 沖縄県中頭郡西原町字千原 1).
＊2 正員，北見工業大学 機械システム工学科.
E-mail: kondou@teada.tec.u-ryukyu.ac.jp

負荷の与え方[6]や初期結晶方位[7]に依存して，結晶粒内に不均一変形が生じると共に，キンク帯や 2 次すべり帯に相当する GN 転位組織[8]が形成されることを述べた．また，これらの現象が活性化した結晶粒のすべりによる形状変化が引張りの境界条件と粒界により相互拘束されることにより生じることを述べた[6-8]．

適合型双結晶の解析から得られた結果は，三つ以上の結晶粒間で働く力学的相互作用も『粒界の効果』だけとは限らず，活性化したすべり系のすべりによる結晶粒の形状変化の相互拘束（以後，『多体相互作用』と呼ぶ．）が働き，不均一変形が生じると共に転位組織が形成されることを示唆している．実際，大橋は，銅三重結晶の引張りに伴うすべり線と応力分布の解析を通して，三重結晶粒内の不均一変形の原因が『粒界の効果』だけとは限らないことを述べている[9]．また，比嘉らは，多結晶モデルの平面引張りの解析[10][11]を通して，多結晶モデル内の『遠隔効果』と『影響範囲』ついて検討し，影響範囲が半径 10 結晶粒にも及ぶこと[10]，巨視的変形応答を支配する結晶粒オーダの不均質変形構造に，変形抵抗となる応力支持構造と変形を担う変形吸収構造があることを述べている[10]．このように，結晶粒が『群』をなすことで生じる『多体相互作用』の効果[9-12]は，多結晶における全体の巨視的変形と個々の結晶粒に生じる変形を統一的に理解する上で極めて重要である．本報告では，『多体相互作用』に起因する結晶粒の不均一変形を検討するため，『粒界の効果』が生じない三重結晶の引張り変形の結晶塑性解析を行い，『多体相互作用』に伴う不均一変形と転位組織形成を関連付けて検討した結果を述べる．

2．解析方法

2･1 有限要素法による変形の解析　すべり系の活性化条件が，Schmid 則により与えられると仮定すると，活性化条件下における応力テンソル σ_{ij} と n 番すべり系の臨界分解せん断応力 $\theta^{(n)}$ の間に次式が成立する．

$$
\begin{aligned}
&P_{ij}^{(n)}\sigma_{ij}=\theta^{(n)}\\
&P_{ij}^{(n)}\dot{\sigma}_{ij}=\dot{\theta}^{(n)}\\
&P_{ij}^{(n)}=\frac{1}{2}\left\{v_i^{(n)}b_j^{(n)}+v_j^{(n)}b_i^{(n)}\right\}
\end{aligned}
\qquad \cdots\cdots (1)
$$

ここで，$P_{ij}^{(n)}$ はすべり面法線方向の単位ベクトルを $v_i^{(n)}$，すべり方向の単位ベクトルを $b_i^{(n)}$ とする n 番すべり系における Schmid テンソルである．

ひずみ増分 $\dot{\varepsilon}_{ij}$ は弾性成分 $\dot{\varepsilon}_{ij}^e$ と塑性成分 $\dot{\varepsilon}_{ij}^p$ の和から次式で求められる．

$$
\begin{aligned}
&\dot{\varepsilon}_{ij}=\dot{\varepsilon}_{ij}^e+\dot{\varepsilon}_{ij}^p\\
&\dot{\varepsilon}_{ij}^e=S_{ijkl}^e\dot{\sigma}_{kl}\\
&\dot{\varepsilon}_{ij}^p=\sum_n\dot{\gamma}^{(n)}P_{ij}^{(n)}
\end{aligned}
\qquad \cdots\cdots (2)
$$

ここで，S_{ijkl}^e は弾性コンプライアンス，$\dot{\gamma}^{(n)}$ は塑性せん断ひずみ増分である．

ひずみ硬化係数を $h^{(nm)}$ とし，ひずみ硬化則が次式，

$$\dot{\theta}^{(n)}=\sum_m h^{(nm)}\dot{\gamma}^{(m)} \qquad \cdots\cdots (3)$$

で表されると仮定すると，弾塑性構成式[13]は次式，

$$\dot{\sigma}_{ij}=\left[S_{ijkl}^e+\sum_n\sum_m\{h^{(nm)}\}^{-1}P_{ij}^{(n)}P_{kl}^{(m)}\right]^{-1}\dot{\varepsilon}_{kl} \qquad \cdots\cdots (4)$$

で表される．ただし，n，m は活動すべり系についてのみ和をとる．この弾塑性構成式をもとに有限要素法によりモデルの変形を解析する．

2･2 転位密度の解析　変形履歴を受けた結晶粒に存在する転位は『統計的に蓄積された転位』（SS 転位：statistically stored dislocations）と GN 転位の二種類に大別され，SS 転位密度増分 $\dot{\rho}_S^{(n)}$ と $\dot{\gamma}^{(n)}$ の関係は，次式によって表される[14]．

$$\dot{\rho}_S^{(n)}=\frac{c\dot{\gamma}^{(n)}}{\tilde{b}L^{(n)}} \qquad \cdots\cdots (5)$$

ここで，c は 1 のオーダの係数，$\tilde{b}$ はバーガースベクトルの大きさ，$L^{(n)}$ は運動転位の平均自由行程である．

活性化した結晶粒のすべり面上で，すべり方向をξ，すべり方向に垂直な方向をζとすれば，GN 転位の密度ノルム $\left\|\rho_G^{(m)}\right\|$ は，刃状転位密度成分 $\rho_{G,edge}^{(m)}$ と，らせん転位密度成分 $\rho_{G,screw}^{(m)}$ により，次式で表される[15]．

$$
\begin{aligned}
&\left\|\rho_G^{(m)}\right\|=\sqrt{\left(\rho_{G,edge}^{(m)}\right)^2+\left(\rho_{G,screw}^{(m)}\right)^2}\\
&\rho_{G,edge}^{(m)}=-\frac{1}{\tilde{b}}\frac{\partial\gamma^{(m)}}{\partial\xi^{(m)}}\\
&\rho_{G,screw}^{(m)}=\frac{1}{\tilde{b}}\frac{\partial\gamma^{(m)}}{\partial\zeta^{(m)}}
\end{aligned}
\qquad \cdots\cdots (6)
$$

2･3 変形履歴の評価方法　変形履歴を受けた面心立方晶金属のすべり系の臨界分解せん断応力 $\theta^{(n)}$ は，修正 Bailey-Hirsch の式[14]より表される．

$$\theta^{(n)}=\theta_0(T)+\sum_{m=1}^{12}a\mu\tilde{b}\Omega^{(nm)}\sqrt{\rho_s^{(m)}} \qquad \cdots\cdots (7)$$

ここで，θ_0は運動転位に対する変形履歴に依存しない抵抗値，a は 0.1 程度の値，μ は結晶のせん断弾性

係数，$\Omega^{(nm)}$ は相互作用行列[14]である．$\Omega^{(nm)}$ はすべり系上に堆積した転位が他のすべり系上の運動転位に対する障害の強度を表しており，同一すべり系上の転位同士の相互作用強度を基準単位とした 5 種類のパラメータ，R_1，R_2，R_3，R_3'，及び，R_4 で表される．ここでは，等方硬化，$R_1 = R_2 = R_3 = R_3' = R_4 = 1.01$ とした．

変形履歴を受けた材料のひずみの硬化係数 $h^{(nm)}$は次式で表される．

$$h^{(nm)} = \frac{1}{2}\frac{ac\mu\Omega^{(nm)}}{L^{(m)}\sqrt{\rho_S^{(m)}}} \quad \cdots\cdots (8)$$

式(5)，(8)における運動転位の平均自由行程 $L^{(n)}$ の計算には，SS 転位と GN 転位が寄与する次の転位密度依存型モデル[16][17]を用いた．

$$L^{(n)} = \frac{c^*}{\sqrt{\sum_m \omega^{(nm)}\left(\rho_S^{(m)} + \left\|\rho_G^{(m)}\right\|\right)}} \quad \cdots\cdots (9)$$

このモデルは，運動転位が堆積転位の平均間隔の c* 倍の距離を運動した後に停止するという描象に基づいている．ここでは，c*=15 とした．$\omega^{(nm)}$は重み行列[16][17]で運動転位と蓄積転位の相互作用を表しており，6 種類のパラメータ w_0，w_1，w_2，w_3，w_3'，及び，w_4 で表される．ここでは，自己すべり系と共面すべり系上の蓄積転位は運動転位の捕捉に寄与しない，$w_0 = w_1 = 0$，$w_2 = w_3 = w_3' = w_4 = 1.0$ とした．

2･4 増分解析　本解析は変形の解析（2･1 節），転位密度の計算（2･2 節），すべり系のひずみ硬化の評価（2･3 節）の三つの部分から構成され，最初，弾性コンプライアンスと初期結晶方位から弾性変形の構成式を決定し，降伏直前までの弾性変形を解析する．次に Schmid 則から活動すべり系を選択する．初期転位密度等から，ひずみの硬化係数を決定し，構成式を改訂し，すべり変形を解析する．変形の進行と共にすべり系のひずみ硬化が生じるため，構成式を改訂する必要がある．この非線形現象の解析のため，すべり系の活動開始と停止毎に時間ステップを区切り，増分解析を行う．即ち，SS 転位密度 $\rho_S^{(m)}$ と GN 転位密度ノルム $\left\|\rho_G^{(m)}\right\|$ が，次ステップにおける構成式を決定する内部状態変数となる．

3. モ　デ　ル

解析モデルは，図 1(c)に示す三重結晶で，対称双結晶（図 1(a)）の上に，『粒界の効果』が生じないように粒 3 を載せた（図 1(b)）モデルである．高さ l が 300μm，幅 w が 200μm，厚さ t が 10μm であり，粒界面はモデル表面と直交している．これの有限要素分割は，一辺の長さが 5μm の 8 節点六面体要素で均一に行った．総要素数 4800 である．

粒 1 と粒 2，粒 1 と粒 3，粒 2 と粒 3 の粒界においてひずみの非適合性が生じない条件[1][5]は，それぞれ，次式で表される．

$$\varepsilon_{yy}^{(1)} = \varepsilon_{yy}^{(2)},\quad \varepsilon_{zz}^{(1)} = \varepsilon_{zz}^{(2)},\quad \varepsilon_{yz}^{(1)} = \varepsilon_{yz}^{(2)} \quad \cdots\cdots (10)$$

$$\varepsilon_{xx}^{(1)} = \varepsilon_{xx}^{(3)},\quad \varepsilon_{zz}^{(1)} = \varepsilon_{zz}^{(3)},\quad \varepsilon_{zx}^{(1)} = \varepsilon_{zx}^{(3)} \quad \cdots\cdots (11)$$

$$\varepsilon_{xx}^{(2)} = \varepsilon_{xx}^{(3)},\quad \varepsilon_{zz}^{(2)} = \varepsilon_{zz}^{(3)},\quad \varepsilon_{zx}^{(2)} = \varepsilon_{zx}^{(3)} \quad \cdots\cdots (12)$$

なお，これらは粒 1，2，3 が独立に変形した時に生じるひずみ成分（弾性成分と塑性成分の和）で，右肩の添え字は結晶粒番号である．これらの条件を，三重結晶モデルが満たす場合，以後，『適合型三重結晶』と呼ぶ．

材料には仮想的な面心立方晶金属を用い，結晶基準軸方位の弾性コンプライアンスは，弾性異方性比が 1 になる組み合わせ，$S_{11} = 1.0$，$S_{12} = -0.25$，$S_{44} = 2.5$ [$\times 10^{-11}$ m^2/N]とした．この場合，粒界面で弾性異方

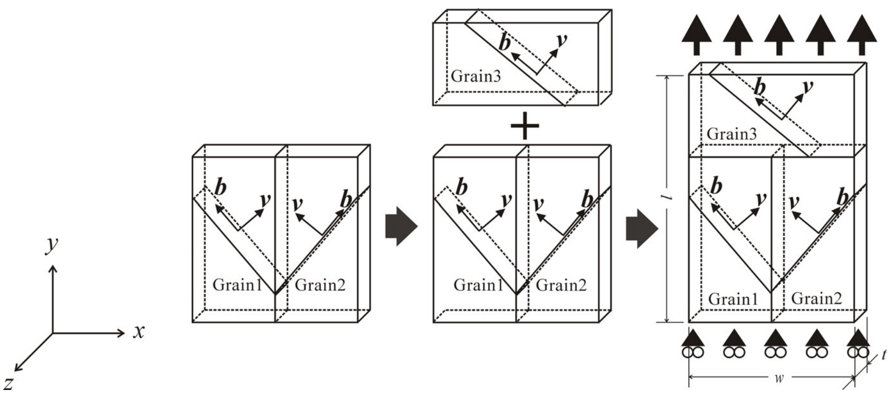


Fig. 1 Geometry and boundary condition for the models employed in this study. (a):Symmetric-type bicrystal model, (b):Relationship between symmetric-type bicrystal and compatible-type tricrystal model, (c): Compatible-type tricrystals

性の効果（弾性不適合応力）[2][3][18][19]は生じない．

[100]，[010]，[001]の単位ベクトルで表される結晶座標系と材料座標系（x，y，z）間の座標変換は，図2に示す Euler 角（κ, θ, ϕ）により定義される．座標変換行列は，次式で表される．

$$\begin{pmatrix}[100]\\ [010]\\ [001]\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\sin\theta\cos\phi & \cos\theta & \sin\theta\sin\phi\\ \cos\kappa\sin\phi+\cos\theta\sin\kappa\cos\phi & \sin\theta\sin\kappa & \cos\kappa\cos\phi-\cos\theta\sin\kappa\sin\phi\\ -\sin\kappa\sin\phi+\cos\theta\cos\kappa\cos\phi & \sin\theta\cos\kappa & -\sin\kappa\cos\phi-\cos\theta\cos\kappa\sin\phi\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\\ z\end{pmatrix} \quad \cdots (13)$$

粒 1，2，3 の初期結晶方位（Euler 角）と，主すべり系 $(11\bar{1})[101]$ のすべり方向，及び，すべり面法線方向ベクトルの成分，Schmid テンソルの値を表 1 に示す．ただし，本研究で用いたモデルでは，結晶粒 1，2，3 共に，y 軸方向の引張り負荷に対して，9 番すべり系が主すべり系となるように Euler 角を選択している．y 軸方向に引張負荷を与えた場合における 12 すべり系の Schmid 因子の値を表 2 に示す．この結晶方位では，粒 1，2，3 における主すべり系 $(11\bar{1})[101]$ の $\nu_z^{(9th)}$ 成分，$b_z^{(9th)}$ 成分の値は 0 となるため，Schmid テンソル $P_{33}^{(9th)}$，$P_{23}^{(9th)}$，$P_{31}^{(9th)}$ の値も 0 となる（式(1)参照）．このため，降伏直後の段階では，主すべり系の単一すべりにより，モデルの変形が進行するため（表 2 参照），粒 1，2，3 に生じる塑性ひずみ増分 $\dot{\varepsilon}_{zz}^{p}$，$\dot{\varepsilon}_{yz}^{p}$，$\dot{\varepsilon}_{zx}^{p}$ は 0 となる．また，粒 1，2，3 における Schmid テンソル $P_{22}^{(9th)}$ の値は等しいため，粒 1，2（対称双結晶部）に生じる $\dot{\varepsilon}_{yy}^{p}$ も等しくなり，式(10)を満足する[6][7]．

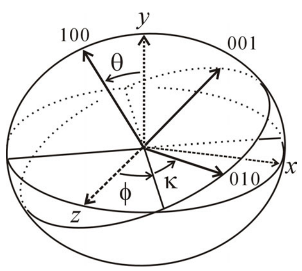


Fig. 2 Definition of Euler angles κ, θ and ϕ

粒 1，2 と粒 3 の初期結晶方位の組み合わせは，主すべり系 $(11\bar{1})[101]$ のすべり方向 $\boldsymbol{b}^{(9th)}$ と負荷方向のなす角度 α が，45°から低角度側と高角度側に等角度離れるような組み合わせ[8]，$\alpha^{(1)}=\alpha^{(2)}=44°$，$\alpha^{(3)}=46°$ とした．ここで，α の右肩の添え字は結晶粒番号である．この場合，粒 1，2 と粒 3 における $P_{11}^{(9th)}$ の値は等しくなり，粒 1，2，3 に生じる ε_{xx}^{p} が等しくなり，式(11),(12)を満足する．すなわち，式(10)～(12)を全て満足するため，このモデルに『粒界の効果』は生じない．

初期転位密度 ρ_0 は，これの不均質性に起因する影響[19]が生じないように 1.0×10^{9} [m^{-2}]で均一とした．このモデル底面の全節点の y 軸方向の変位を拘束し，モデル上面の全節点に y 軸方向の一様な強制変位を課し，平均引張りひずみ $\bar{\varepsilon}_{yy}$ が 1%になるまで引張った．

4．解析結果と考察

4·1 多体相互作用と回位型変形場の形成　著者等は既報[6][7]で，対称双結晶でも主すべり系のすべりによる形状変化の相互拘束の効果により，不均一変形が生じると共に，結晶粒内部に GN 転位組織が形成され，後の不均一変形状態を発展させることを述べた．ここでは，適合型三重結晶における『多体相互作用』がモデルの変形状態に及ぼす影響について検討した結果を述べる．

図 3 に平均引張りひずみ $\bar{\varepsilon}_{yy}$ が 0.01%の段階における変形状態を示す．塑性せん断ひずみ $\gamma^{(9th)}$ と SS 転位密度分布の表示範囲は，このひずみ段階における最大

Table 1 Euler angles（κ, θ, ϕ）, angle between slip direction and tensile direction α, components of slip direction vector $\boldsymbol{b}^{(9th)}$, slip plane normal vector $\boldsymbol{\nu}^{(9th)}$ and values of Schmid tensor $P_{ij}^{(9th)}$, ($\nu_z^{(9th)}=b_z^{(9th)}=0$, $P_{33}^{(9th)}=P_{23}^{(9th)}=P_{31}^{(9th)}=0$)

Grain Num.	（κ, θ, ϕ）[deg]	α [deg]	$b_x^{(9th)}$	$b_y^{(9th)}$	$\nu_x^{(9th)}$	$\nu_y^{(9th)}$	$P_{11}^{(9th)}$	$P_{22}^{(9th)}$	$P_{12}^{(9th)}$
1	(74.983, 24.535, 79.469)	44	-0.6947	0.7193	0.7193	0.6947	-0.4997	0.4997	0.0174
2	(74.983, 24.535,259.469)	44	0.6947	0.7193	-0.7193	0.6947	-0.4997	0.4997	-0.0174
3	(79.645, 24.973, 75.236)	46	-0.7193	0.6947	0.6947	0.7193	-0.4997	0.4997	-0.0174

Table 2 Value of Schmid factors of 12-slip systems when tensile direction is parallel to y-axis.

Grain Num.	(111)			$(\bar{1}11)$			$(11\bar{1})$			$(1\bar{1}1)$		
	$[1\bar{1}0]$	$[01\bar{1}]$	$[10\bar{1}]$	$[110]$	$[01\bar{1}]$	$[101]$	$[1\bar{1}0]$	$[011]$	$[101]$	$[110]$	$[011]$	$[10\bar{1}]$
	1st	2nd	3rd	4th	5th	6th	7th	8th	9th	10th	11th	12th
1	0.2945	0.1699	0.4645	-0.2146	-0.0435	-0.1666	0.2498	0.2498	0.4997	0.3298	0.1280	0.2018
2	0.2945	0.1699	0.4645	-0.2146	-0.0435	-0.1666	0.2498	0.2498	0.4997	0.3298	0.1280	0.2018
3	0.2803	0.1937	0.4740	-0.2241	-0.0575	-0.1666	0.2498	0.2498	0.4997	0.3060	0.1137	0.1923

値から最小値まで示し，GN 転位の刃状転位密度成分 $\rho^{(m)}_{G,edge}$ とらせん転位密度成分 $\rho^{(m)}_{G,screw}$ の表示範囲は，比較のために，-2.5×10^{9}〜2.5×10^{9} [m^{-2}]，-2.5×10^{8}〜2.5×10^{8} [m^{-2}]で固定してある．

『粒界の効果』が生じない適合型三重結晶でも，対称双結晶の場合[6][7]と同様，粒 1，2，3 において，主すべり系の自由なすべりにより生じる結晶粒の形状変化が相互拘束されるため，主すべり系の塑性せん断ひずみ $\gamma^{(9th)}$ が不均一に分布する（図 3 (a)）．

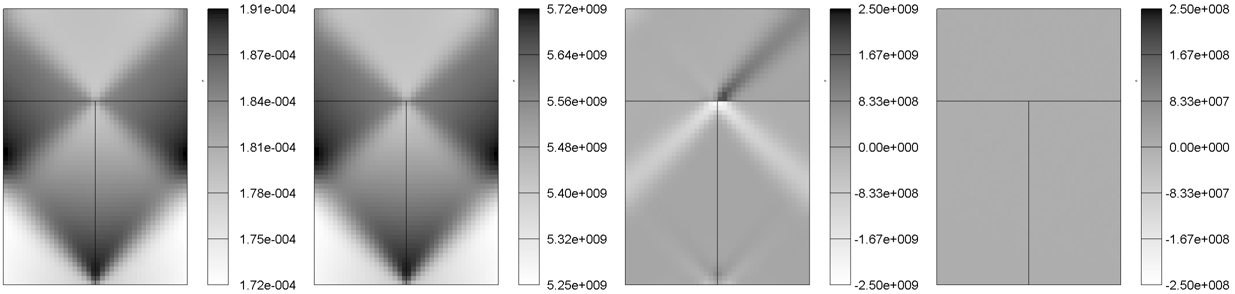
このひずみ段階（$\bar{\varepsilon}_{yy}$ =0.01%）では，主すべり系の単一すべりにより，モデルの変形が進行しているため，SS 転位密度分布の様相は，塑性せん断ひずみの分布の様相とほぼ等しくなる（図 3(a)，(b)）．

$\gamma^{(9th)}$ の空間微分量である GN 転位密度の分布は，粒界三重線近傍から，粒 1，2，3 の主すべり系のすべり方向に垂直な方向に発達した帯状の領域に高密度に堆積している．この転位組織は，ほぼ完全な刃状転位密度成分から構成されている（図 3(c)，(d)）．

この不均一変形と GN 転位組織形成を関連付けて評価するため，既報[8][19]で述べた双結晶の場合と同様，三重結晶のすべり変形を図 4 (a)から(b)，(b)から(c)の二段階に分けて考える．図 4 (a)から(b)の変形は，粒 1，2，3 が各々，独立に主すべり系の自由なすべりによって変形した段階で，主すべり系の空間的配置（初期結晶方位）と塑性せん断ひずみ $\gamma^{(9th)}$ に応じた形状変化が生じる．図 4 (b)から(c)の変形は，全ての粒界面を結合させ，境界条件と粒界における変位の連続性に適合するように変形させた段階である．ここで，図 4(c)のような変位場は，粒界三重線を芯とした仮想的な『くさび型回位』（Wedge type disclination）型の変位場と考えることができる．

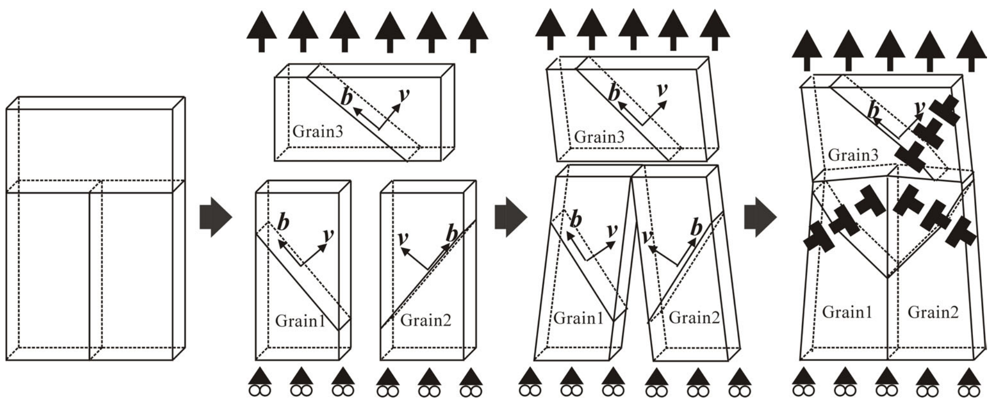
『回位』は図 5 に示すように，物体の一部に欠陥が生じた状態から，相対的な回転により変位場のくい違いを無くしたときに形成される変形場で，図 5 (a)から(b)に示すような変形場を『くさび型回位』（Wedge disclination），図 5 (a)から(c)のように相対的な回転に加えて，ねじりを含む場合を『ねじれ型回位』（Twist disclination）と呼ぶ．

『回位』における変位のくい違い量は，半径方向に一様ではなく，半径方向の距離に比例して線形的に広



(a) $\gamma^{(9th)}$　(b) $\rho^{(9th)}_{S}$　(c) $\rho^{(9th)}_{G,edge}$　(d) $\rho^{(9th)}_{G,screw}$

Fig. 3 (a): Distribution of plastic shear strain, (b): density distribution of statistically stored dislocations, density distribution of (c): edge and (d): screw components of geometrically necessary dislocations on the primary slip systems when the average tensile strain $\bar{\varepsilon}_{yy}$ is 0.01%, Unit of dislocation density is m^{-2}.



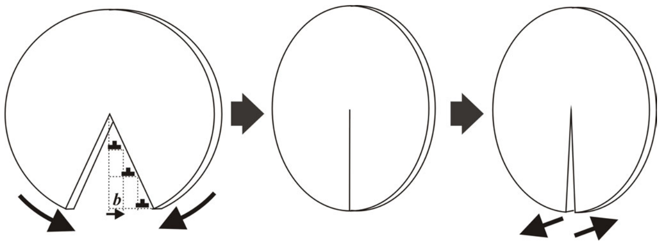
(a)　(b)　(c)

Fig. 4 Schematic illustration of (a) initial condition of each grain of compatible type tri-crystal, (b) imaginary slip deformation without multi - body interaction, (c) when crystal grains have to deform in compatible manner, the displacement field corresponds to that for wedge type disclination with its core placed at the grain boundary triple junction.

くなっている．図 5 (a)に示すように，くさび型回位の回位芯の方向がすべり方向と直交している場合，回位が作る変形場は刃状転位列が作る変形場で表現することができる．一方，主すべり系のすべりによる形状変化の相互拘束により生じる欠陥（GN 転位）は，主すべり系のすべり面上になければならない．このため，回位芯となる粒界三重線から，主すべり方向に垂直な方向（この解析条件下ではすべり面法線方向）に刃状転位密度成分からなる GN 転位列を形成する（図 3 参照）．

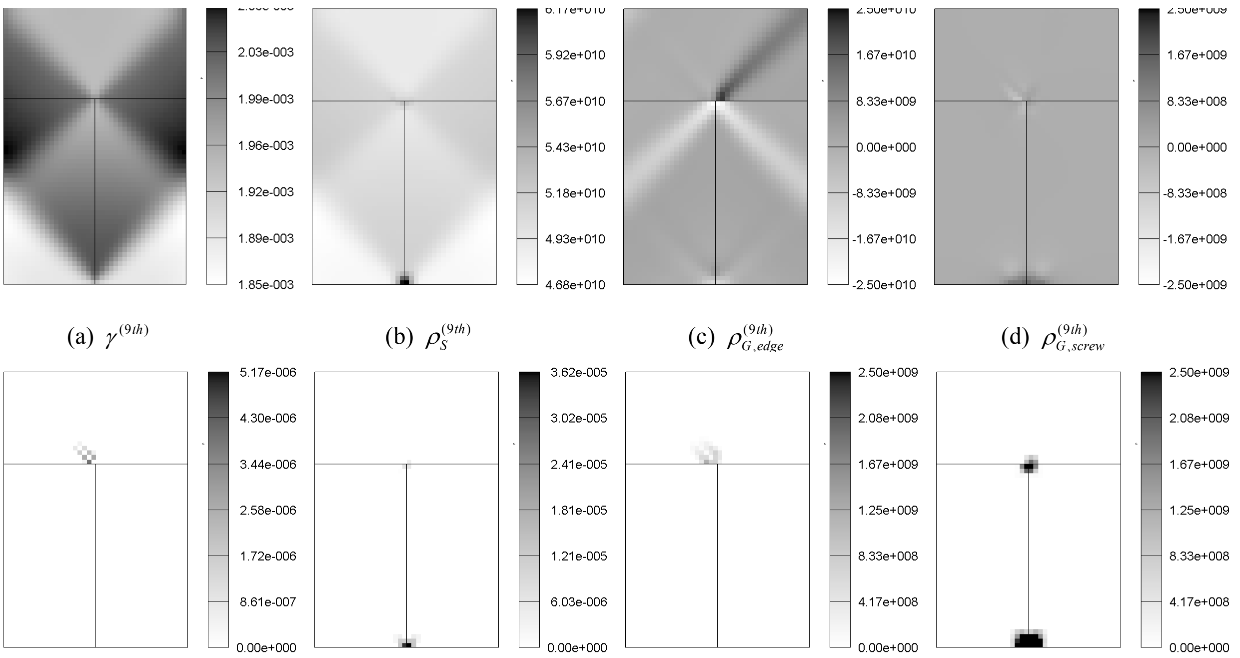
結晶粒が三つ以上の多結晶の場合でも，双結晶の場合[6-8]と同様，主すべり系のすべり変形による形状変化によって結晶粒間の『多体相互作用』が働く．このため，結晶粒内に不均一変形が生じると共に『キンク帯』に相当する GN 転位組織[8]が形成されることがわかる．また，仮想的な回位型の変位場を考えることにより，双結晶と三重結晶の変形場を関連付けて評価できることがわかる．しかしながら，対称双結晶の場合，変形が進行した段階でも，引張りの境界条件と粒界は直交関係を維持するため，変形前に変形の不均一性の発展と転位の堆積を評価できる[7]が，三重結晶の場合，変形の進行と共に粒界三重線周りの回位型の変位場が更新される．次節では，この影響について検討した結果を述べる．

4･2 多体相互作用による転位組織形成　図 6 に平均引張りひずみ $\bar{\varepsilon}_{yy}$ が 0.1%の段階における変形状態を示す．このひずみ段階では，3 番すべり系 $(111)[10\bar{1}]$，10 番すべり系 $(1\bar{1}1)[110]$ も活性化している．これらに生じた塑性せん断ひずみ $\gamma^{(3rd)}$ と $\gamma^{(10th)}$ の分布は最大値から最小値まで示す．転位密度分布に関しては，GN 転位の密度ノルム $\|\rho_G^{(3rd)}\|$，$\|\rho_G^{(10th)}\|$ の分布のみ示し，表示範囲は 0～2.5×10^9 [m^{-2}]で固定してある．



(a)　(b)　(c)

Fig. 5 Schematic illustration of (a) Initial condition with dislocation, (b) wedge and (c) twist disclination type deformation.



(a) $\gamma^{(9th)}$　(b) $\rho_S^{(9th)}$　(c) $\rho_{G,edge}^{(9th)}$　(d) $\rho_{G,screw}^{(9th)}$

(e) $\gamma^{(3rd)}$　(f) $\gamma^{(10th)}$　(g) $\|\rho_G^{(3rd)}\|$　(h) $\|\rho_G^{(10th)}\|$

Fig. 6 (a): Distribution of plastic shear strain, density distribution of (b): statistically stored dislocations, (c): edge and (d): screw components of geometrically necessary dislocations on the primary slip system $(11\bar{1})[101]$. (e),(f):Distribution of plastic shear strain and (g),(h): density distribution of norm of geometrically necessary dislocations on the secondary slip systems $(111)[10\bar{1}]$ and $(1\bar{1}1)[110]$ when the average tensile strain $\bar{\varepsilon}_{yy}$ is 0.1%, respectively. Unit of dislocation density is m^{-2}.

主すべり系の GN 転位組織が形成する内部応力場[20]の影響により，この近傍の局所的な領域では三軸応力場が形成され，主すべり系，2 次すべり系に働く臨界分解せん断応力の増減を招くため，局所的な領域で，3 番すべり系 $(111)[10\bar{1}]$，10 番すべり系 $(1\bar{1}1)[110]$ が活性化する（表 2，図 6(e)，(f)）．これらのすべり系における塑性せん断ひずみ量は，主すべり系の塑性せん断ひずみの 1/1000～1/100 程度であるが，その他の領域は活性化していないため，ひずみの空間勾配が生じる．即ち，局所的な領域に 2 次すべり系上の GN 転位が堆積する（図 6(g)，(h)）．

主すべり系と 3 番すべり系 $(111)[10\bar{1}]$，10 番すべり系 $(1\bar{1}1)[110]$ に堆積した転位の相互作用により，粒 1，2 では，粒界とモデル底面の交線近傍で，主すべり系上の SS 転位の局在化が生じる．これに起因して，主すべり系のひずみ勾配は三次元的に生じるため，らせん転位密度成分から構成される GN 転位も発生する．

更に変形が進行した段階を図 7 に示す．変形の進行と共に，変形の不均一性が発展し，活性化したすべり系上に，新たな転位組織を発展させている．特に，3 番すべり系 $(111)[10\bar{1}]$ における GN 転位の組織形成（図 7(e)，(g)）と，10 番すべり系 $(1\bar{1}1)[110]$ における GN 転位の局在化は顕著である（図 7(f)，(h)）．

3 番すべり系 $(111)[10\bar{1}]$ 上に GN 転位組織が形成されている領域では，3 番すべり系 $(111)[10\bar{1}]$ 上の GN 転位と主すべり系の運動転位の転位相互作用により（式(9)参照），主すべり系の運動転位の平均自由行程が減少する．このため，主すべり系上に SS 転位組織（図 7(b)）が形成される．また，主すべり系上の塑性せん断ひずみの空間勾配も三次元的に生じるため，らせん転位密度成分から構成される GN 転位組織が形成される（図 7(d)）．

降伏直後の段階では，粒 1，2 には，対称双結晶の引張りの場合[6][7]と同様，粒界面とモデル底面が直交関係を維持するために変形拘束が働く．しかしながら，変形が進行した段階では，粒界三重線周りの回位型の変位場（図 4(c)）により，粒 1，2 に働く応力場が三軸応力場となる．回位型の変位場により生じる粒 3 の『湾曲』に伴う GN 転位構造と，粒 3 のすべり変形による形状変化の影響により，この三軸応力場は粒 1 と 2（対称双結晶部）に非対称に作用する．このため，粒 1，2 の変形拘束の相互作用も非対称に働き，粒 1，2（対称双結晶部）の変形状態が非対称に発展する．また，粒 3 における『湾曲』は，モデル上面に課した引張りの境界条件により拘束されるため，粒 3 左上で『湾曲』の拘束に伴う GN 転位組織が形成される．これらの現象は双結晶では生じ得ない現象である．これに伴い，双結晶では見られない転位組織が形成される．

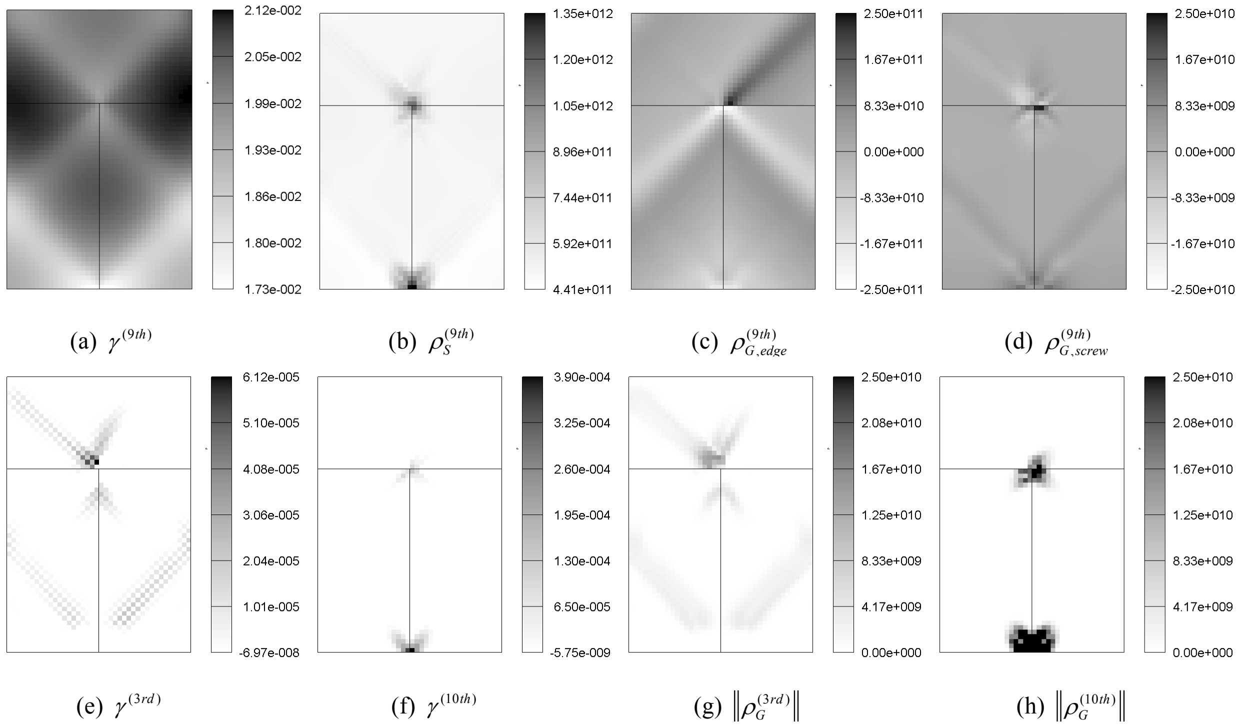


Fig. 7 (a): Distribution of plastic shear strain, density distribution of (b): statistically stored dislocations, (c): edge and (d): screw components of geometrically necessary dislocations on the primary slip system $(11\bar{1})[101]$. (e),(f):Distribution of plastic shear strain and (g),(h): density distribution of norm of geometrically necessary dislocations on the secondary slip systems $(111)[10\bar{1}]$ and $(1\bar{1}1)[110]$ when the average tensile strain $\bar{\varepsilon}_{yy}$ is 1%, respectively. Unit of dislocation density is m^{-2}.

粒 1，2 とモデル底面の交線，粒界三重線近傍における転位の局在化により，この部分ではひずみ硬化が進行するため，このひずみ段階からモデル中心部に主すべり系の塑性せん断ひずみの集中が生じ始める（図 7(a)）．これに伴い，新たなひずみの空間勾配が生じ，新たな GN 転位組織が形成される．このような変形の不均一性の進行は，転位の局在化が生じている中心，すなわち，粒界三重線がモデルの何処に位置しているかに依存する．このような多結晶における結晶粒の『多体相互作用』に起因する変形の不均一性の発展や転位の組織形成は，仮想的な回位型の変位場を検討することで，理解することが可能となることがわかる．

5. 結　　言

結晶粒間の『多体相互作用』が適合型三重結晶の引張変形に伴う変形状態と転位組織形成に及ぼす影響と，これの評価方法について検討した結果を以下に述べる．

(1) 粒界の効果が生じ得ない適合型三重結晶であっても，変形の進行と共に，活性化したすべり系のすべりによる結晶粒の形状変化が相互拘束され，不均一変形と転位組織を形成する．

(2) 活性化したすべり系のすべりによる結晶粒の形状変化の相互拘束，粒界三重線を回位芯とした仮想的な『回位型』の変位場と考えることにより，結晶粒に生じる不均一変形と GN 転位の組織形成を関連付けて評価することができると共に，双結晶と三重結晶の変形挙動を関連付けて評価することができる．

(3) 結晶粒が三つ以上の場合に生じる『多体相互作用』は，変形の進行と共に更新され，準微視的にも三軸応力場を形成し，これに伴う変形の不均一性と GN 転位組織の構造を更新させる．この結果，活性化したすべり系上に形成された GN 転位組織と運動転位の相互作用により，SS 転位が帯状の領域に高密度に堆積する転位組織を形成する場合がある．

参考文献

(1) Livingston, J. D. and Chalmers, B., Multi Slip in Bicrystal Deformation, *Acta Met*., **5** - 6 (1957) 322-327

(2) Hirth, J. P., The influence of grain boundaries on mechanical properties, *Metall. Trans*., **3** (1972) 3047–3067.

(3) Hook, R. E. and Hirth, J. P., The Deformation Behavior of Isoaxial Bicrystals of Fe-3% Si, *Acta Metall*., **15** (1967) 535-551

(4) Ashby M. F., The Deformation of Plastically Non-homogenous Alloys, *Phil. Mag.*, **21** (1970) 399-424

(5) Hauser, J. J. and Chalmers, B., The Plastic Deformation of Bicrystals of f.c.c. Metals, *Acta Met*., **9** – 9 (1961) 802-818

(6) Kondou R. and Ohashi T., Crystal Plasticity Analysis of Non-uniform Deformation in Symmetric Type Bi-Crystals under Tensile Load and Formation of Geometrically Necessary Dislocation Bands, *Trans. JSME*, *A*, **71**-705, (2005) 809-816

(7) Kondou R. and Ohashi T., Relationship between Formation of Geometrically Necessary Dislocations and Local Strain hardening of Slip Systems in Symmetric type Bi-Crystals under Tensile Loading, *Trans. JSME*, *A*, **71**-711, (2005), 1451-1458

(8) Kondou R. and Ohashi T., Relationship between Formation of Deformation bands and Geometrically Necessary Dislocation Pattern Formation in Compatible type Bi-Crystals with Tilt Angle Grain Boundary under Tensile Loading, *Trans. JSME*, *A*, **72**-713, (2006), 16-23

(9) Ohashi, T., Analysis of multiple slip in copper tricrystals, *Coll. de Phys. Coll. C1*, **51** (1990), pp. 593-598

(10) Higa Y., et al., Collective Behavior of Grins on Deformation of Single-Phase Polycrystalline Metals, *Trans. JSME*, A, **71**-710 (2005) 1292-1298

(11) Higa Y., et al., Computational Simulation of Characteristic Length Dependent Deformation Behavior of Polycrystalline Metals, *Trans. JSME*, A, **69**-679 (2003) 523-529

(12) Ohashi T., Distance between single crystal plasticity and polycrystal plasticity, *MECJ-04* (2004-9), 247-248

(13) Hill R., Generalized Constitutive Relations for Incremental Deformation of Metal Crystals by Multislip, *J. Mech. Phys. Sol.*, **14** (1966) 95-102

(14) Ohashi T., Numerical Modeling of Plastic Multislip in Metal Crystals of fcc. Type, *Phil. Mag.* A, **70** - 5 (1994) 793-803

(15) Ohashi T., Finite-Element Analysis of Plastic Slip and Evolution of Geometrically Necessary Dislocations in fcc Crystals, *Phil. Mag. Lett.* **75** - 2 (1997) 51-57

(16) Ohashi T., A New Model of Scale Dependent Crystal Plasticity Analysis, *IUTAM Symposium on Mesoscopic Dynamics of Fracture Process and Materials Strength* (2004) 97-106

(17) Ohashi T, Prediction of Macroscopic Mechanical Response of Metallic Materials Through Evaluation of Deformation Processes in Microstructure, The Iron and Steel Institute of Japan, *180･181 Nishiyama anniversary technique lecture*, (2004) 73-95

(18) Ohashi T., Hanzawa H., Kishida M., Elastic Incompatibility Stress in a Bicrystal Body, *J. Japan Inst. Metals*, **44**-8 (1980) 876-883

(19) Kondou R., Ohashi T., and Miura S., Relationship between Micro-Incompatibility and Heterogeneity of Dislocation Density Distribution in Cu-9at.% Al Symmetric Type Bicrystal Models under Tensile Loading, *Trans. JSME*, *A*, (2005) in press

(20) Ohashi T., Meso-scale Perspectives in the Analysis of Crystal Slip Deformation and Dislocation Accumulation, *Trans. JSME*, *A*, **68** - 675 (2002) 1490-1497