

ミクロンスケールの塑性力学

大橋 鉄也* 黒田 充紀**

1. はじめに

塑性力学というと、一般に、応力テンソルを用いて降伏関数を表現し関連流動則により塑性ひずみ速度の方向を規定する巨視的な構成モデルが連想される。結晶塑性モデルは、結晶構造と結晶すべりという金属材料の物理を直接考慮できるが、数理的には、巨視的塑性モデルと類似性がある。すなわち、結晶すべりの運動学は、個々のすべり系に対するせん断応力に対して降伏条件式を記述した上で関連流動則を適用して得られるモデルと数理的に整合している¹⁾。本稿では、結晶塑性論の枠組みの中で、転位の運動と蓄積に起因する物理現象を表現しうる結晶すべり変形の数理モデルについて解説する。オリジナルの形の結晶塑性モデルは、巨視的な意味での初期異方性とその発達の予測、ひずみの局所化現象の予測などに対する際立った有効性¹⁾を有するものの、本来の意味でのミクロレベルでの現象を表現することはできない。最大の問題点は材料固有の寸法効果が含まれていないことである。寸法が小さくなると概して材料の強度は増すことが様々な事例を通して知られている。寸法効果の起源は、金属の変形の素過程である転位の運動と蓄積にある。結晶塑性モデルの枠組みに、転位の運動と蓄積に対する知見を適切な数理モデルとして取り入れることにより、連続体力学の範疇で、材料内の物理現象を考慮したシミュレーションが可能となる。結晶塑性モデルのような連続体理論の魅力は、大規模な境界値問題（例えば塑性加工問題）への応用が非常に容易なことである。以下では、転位の運動と蓄積に関する知見を結晶すべりのモデルに落とし込む手法を中心に述べる。結晶塑性理論の標準的な枠組みについては、例えば文献2)などに解説がある。

2. 結晶のすべり変形と転位の運動・蓄積

2.1 転位の運動と塑性ひずみの発生

十分に焼鈍された結晶中で転位は他の転位とともに網目構造を形成し、そのうちの一部がすべり面上にある³⁾。このような結晶に負荷が加えられると、すべり面上にある部分の転位が運動する。これはすべり面上に有限長の転位線素があり、その両端がピン止めされた状態で運動する状況にほぼ等しい。2点でピン止めされた転位線素は、負荷

応力が十分大きければループ状の転位を繰り返し放出する。このような転位の増力機構をFrank-Read機構と呼ぶ。このような転位増殖を起こさせるのに必要なせん断応力の最小値 τ_{∞} は近似的に次式で与えられる。

$$\tau_{\infty} = \frac{\mu \bar{b}}{L} \quad (1)$$

ここで μ はせん断弾性係数、 L はピン止めされた2点の間隔、 \bar{b} はバーガースベクトルの大きさである。式(1)は L が大きな転位源ほど小さな負荷応力の下で転位ループを放出することを表している。多結晶材料の降伏開始には結晶粒中にあるFrank-Read源のうち、 L の大きなものが重要な役割を果たす。しかし一方、 L が結晶粒径に比較しうるほど大きい場合には、転位ループ放出には結晶粒界も関与してくる。結晶粒径が d の一つの結晶粒を考え、その結晶粒内にはどのような寸法のFrank-Read源もありうる（ただし当然ながら $d > L$ ）として転位ループの放出に必要な最小のせん断応力を求めたところ、以下の関係が得られた⁴⁾。

$$\tau = 3\hat{\beta} \frac{\mu \bar{b}}{d} \quad (2)$$

ここで $\hat{\beta}$ は弱い寸法依存性を持った量であり、1程度の定数で近似することが出来る。式(2)は多結晶材料の降伏応力の結晶粒径依存性をもたらすひとつの原因になっている。

構造用金属材料中の転位密度 ρ は多くの場合、 10^{12} から 10^{15} m^{-2} 程度である。 $\rho = 10^{12} \text{ m}^{-2}$ のとき、一辺が $10 \mu\text{m}$ の立方体状の結晶粒の中にある転位の総延長は $1000 \mu\text{m}$ になる。このような場合には、多数の転位の集団的な挙動や相互作用が重要であり、塑性変形と転位の蓄積およびすべり系の加工硬化については、個々の転位の挙動に関する描像から発展させて、転位集団の挙動の描像を組み立てる必要がある。一方、転位密度が同じ値($\rho = 10^{12} \text{ m}^{-2}$)でも結晶粒径が $1 \mu\text{m}$ ならば、計算上はその中にはわずか1本の転位があるだけになり、転位の運動や増殖・蓄積には結晶粒界が大きな役割を果たすことになる。

2.2 すべり変形にともなう転位群の蓄積

結晶粒径が比較的大きな場合を想定し、転位の蓄積について考えることにする。連続体力学を基礎とした結晶塑性解析では、転位を統計的に蓄積する転位(Statistically stored dislocations, SS転位と略す)と幾何学的に必要な転位(Geometrically necessary dislocations, GN転位と略す)に分けて考える。

(1) 統計的に蓄積する転位

結晶粒中の転位源から転位ループが放出され、ある面積を掃いた後に運動を停止しそこに蓄積したとする。転位の

原稿受付 平成25年7月12日

* 北見工業大学 〒090-8507 北見市公園町165

** 山形大学 〒992-8510 米沢市城南4-13-16

1 運動によって塑性せん断ひずみが発生するとともに、結晶
中に蓄積する転位の総延長が増えるので、次の関係が得ら
れる⁵⁾⁶⁾。

$$d\rho_s^{(\alpha)} = c \frac{1}{bL^{(\alpha)}} d\gamma^{(\alpha)} \quad (3)$$

ここで c は放出された転位ループの形状の関数、 $\gamma^{(\alpha)}$ 、 $\rho_s^{(\alpha)}$
はそれぞれすべり系 α に生じた塑性せん断ひずみとSS転
位の密度であり、 $L^{(\alpha)}$ は転位の平均自由行程(Mean Free
Path, MFPと略す)である。

式(3)は塑性すべりが生ずるとこれによって蓄積密度が
増加するような転位集団があると言っているに過ぎない。
蓄積の原因も蓄積する個々の転位の詳細も与えられず、た
だひずみの増分と転位集団の密度の増分は比例すること、
そのときの比例係数に転位の平均自由行程が関与するこ
とだけを示している。このためこのようにして評価する蓄
積転位を、「統計的に蓄積する」という断り書き付きで呼
んでいる。

個々の転位に伴う応力場などには極性があるが、
様々な原因で様々な箇所に蓄積した転位の集団であるSS
転位では、全体として正と負の転位が対になって蓄積し長
範囲の応力場は作らないと考える。正負の転位が近い距離
にあると熱活性化の過程を経て対消滅が起こりうるので、
このことも考慮してSS転位の密度の増分は式(3)の修正形、

$$d\rho_s^{(\alpha)} = \left(\frac{c}{bL^{(\alpha)}} - \frac{D}{b} \rho_s^{(\alpha)} \right) d\gamma^{(\alpha)} \quad (4)$$

が良く使われる⁷⁾。 D は転位の消滅の頻度を決定する距
離である。

転位の平均自由行程はそれまでに結晶中にどのような
転位がどのような密度で蓄積しているかに依存する。また、
蓄積している転位間の距離と結晶粒径が同じ程度なら
ば、結晶粒径にも依存する。第一著者ら⁸⁾はMFPが蓄
積転位とともに結晶粒径などの微視組織因子も関与し
る以下のようなモデル、

$$L^{(\alpha)} = \text{Min} \left[\frac{c^*}{\sqrt{\sum_{\beta} w^{\alpha\beta} (\rho_s^{(\beta)} + \|\rho_G^{(\beta)}\|)}}, d \right] \quad (5)$$

を導入した。ここで $\|\rho_G^{(\beta)}\|$ は下に述べるように、すべり
系 β に蓄積したGN転位の密度ノルムであり、SS転位と
GN転位が重み $w^{\alpha\beta}$ を介してすべり系 α のSS転位の蓄
積に関与することになる。 c^* は数値係数で経験的に10
程度の値が良く使われる。一方 d は結晶粒径などであり、
結晶粒内に高密度に転位が蓄積していればそれらの平均
間隔の c^* 倍程度がMFPとなるが、 d が平均転位間距離の
 c^* 倍よりも小さくなればそれがMFPを決定するという
モデルである。

(2) 幾何学的に必要な転位

GN転位の概念は、「すべりによる塑性せん断ひずみの
発生が転位の運動によって生ずる」とことと直接関係する。

図1(a)に示すように、 ξ - ζ で張られる面をすべり面とし、
すべり方向を ξ とする3次元問題を考える。パーガースベ
クトルを \mathbf{b} 、すべり面法線方向単位ベクトルを \mathbf{n} とする

と、 ξ は \mathbf{b} に平行な方向であり、 ζ は $\mathbf{b} \times \mathbf{n}$ に平行な方向
である。転位ループ $\mathbf{a-b-c-d}$ が放出されたとすると、この
ループの内部では塑性せん断ひずみが一定であり、ルー
プ外では零（または、ループ内とは異なる値）である。
塑性せん断ひずみのプロファイルを図1(b)断面および
B-B'断面で描くと図1(b)および(c)のようになる。図1(a)
に明らかなように、転位セグメント $\mathbf{a-b}$ および $\mathbf{d-c}$ はす
べり方向に垂直であり、この部分は刃状転位である。同
じように、転位セグメント $\mathbf{a-d}$ および $\mathbf{c-b}$ はすべり方向
に平行であり、この部分はらせん転位である。このこと
から、塑性せん断ひずみの ξ 方向の勾配が零でなければ、
そこには転位の刃状成分があり、また塑性せん断ひずみ
の ζ 方向の勾配が零でなければ、そこには転位のらせん成
分があることになる。若干の検討を追加すると、GN転
位の刃状成分及びらせん成分の密度は次のように求めら
れる⁹⁾。

$$\rho_{G,\text{edge}}^{(\alpha)} = -\frac{1}{b} \frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial \xi^{(\alpha)}}, \quad \rho_{G,\text{screw}}^{(\alpha)} = \frac{1}{b} \frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial \zeta^{(\alpha)}}, \quad (6)$$

$$\|\rho_G^{(\alpha)}\| = \sqrt{(\rho_{G,\text{edge}}^{(\alpha)})^2 + (\rho_{G,\text{screw}}^{(\alpha)})^2} \quad (7)$$

ここで $\xi^{(\alpha)}$ と $\zeta^{(\alpha)}$ はそれぞれすべり系 α のすべり方向お
よび $\mathbf{b} \times \mathbf{n}$ の方向である。刃状およびらせん成分密度の
値は正にも負にもなり得るが、これは転位の理論におい
て正と負の刃状およびらせん転位が定義されることに対
応している。

GN転位の密度はひずみを空間座標で微分した量に比
例するので、寸法依存性を持つことになる。すなわち、
塑性せん断ひずみが増加する空間領域が小さいほど、GN
転位密度は高くなる。

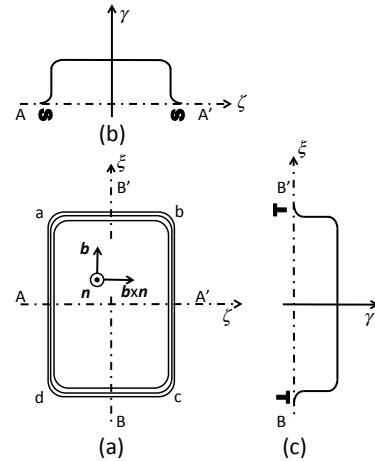


図1 塑性すべりに伴う幾何学的に必要な転位。(a) すべり面を
 ξ - ζ 面、すべり方向を ξ 方向とし、長方形の転位ループ $\mathbf{a-b-c-d}$
が放出されたとする。(b),(c) 断面 $\mathbf{A-A'}$ および $\mathbf{B-B'}$ におけ
る塑性せん断ひずみのプロファイル。塑性せん断ひずみの空間勾
配があるところには転位がなければならない。

2.3 臨界分解せん断応力

直線状の一本の転位のみが結晶のすべり面上にあると
き、それを動かすのに必要なせん断応力はPeierls-Nabarro
応力であり、第一原理計算などにより詳細に検討されて
いる。結晶粒中にあるFrank-Read型転位源から転位の増

殖を生じさせるために必要なせん断応力は式(1)または(2)で近似的に評価され、その値は例えば面心立方型(FCC)金属材料では通常 Peierls-Nabarro 応力よりも十分大きい。

結晶粒中に多数の転位がすでに蓄積している場合、すべり変形を生じさせるために必要な応力、すなわち臨界分解せん断応力(Critical resolved shear stress, CRSS と略すこともある) g を Taylor は次のモデルで表した。

$$g = a\mu\tilde{b}\sqrt{\rho_a} \quad (8)$$

ρ_a は結晶粒中に蓄積している転位の密度であり、変形で結晶粒中に転位が蓄積することによって臨界分解せん断応力が増加するいわゆる Taylor 型の硬化則と呼ばれるモデルである。 a は数値係数で 0.3 から 0.6 程度である¹⁰⁾。

材料の変形履歴は主として転位の密度・種類・空間パターンの形で材料中に残される。したがって、材料の力学特性を変形履歴に依存する形で記述するうえで、式(8)の Taylor 型の表現は適切かつ自然である。Taylor の考え方は、全体としてニュートラルな性質を持った転位集団が蓄積しているときに、運動転位がそれを通過するのに必要な応力が、転位密度の 1/2 乗に比例すると言うものであると理解している。すなわち、この転位密度は SS 転位の密度である。一方、Fleck ら¹¹⁾はここに GN 転位の密度も加えるモデルを提案した。こうすると、GN 転位密度に寸法依存性があるので、すべり変形抵抗が寸法依存性をもつ事になる。しかし ρ_a を SS 転位の密度だけで構成しても、式(5)のように転位の平均自由行程(MFP)に GN 転位が関与するならば、SS 転位にも寸法依存性が生ずるために、すべり変形抵抗は間接的に寸法依存性をもつことになる。

媒体中に溶質原子などが分布しそれらも転位の運動に関与する場合には、CRSS として Bailey-Hirsch のモデル¹⁰⁾が提案されている。

$$g = g_0 + a\mu\tilde{b}\sqrt{\rho_a} \quad (9)$$

g_0 は溶質原子や Peierls 障壁などの転位以外の障害物による運動抵抗をまとめた項であり、格子摩擦抵抗などと称される。一般にこれらの障害物を乗り越える過程は熱活性化過程であると考えられており、温度に依存する。この右辺第 1 項 g_0 は、その原因となっているものが原子スケールの広がりしかもたないのに対し、右辺第 2 項はそれよりも遙かに大きなスケールで広がるすべり変形抵抗である。

転位の運動しうる結晶面とすべり方向の組合せはすべり系と呼ばれる。あるすべり系に関する CRSS に対するほかのすべり系からの寄与を分離して表現すると、次のような修正 Bailey-Hirsch モデル⁵⁾⁶⁾、

$$g^{(\alpha)} = g_0^{(\alpha)}(T) + \sum_{\beta=1}^N \Omega^{(\alpha\beta)} a\mu\tilde{b}\sqrt{\rho_s^{(\beta)}} \quad (10)$$

が考えられる。右辺第 2 項にある $\Omega^{(\alpha\beta)}$ はすべり系 α と β の相互作用行列であり、運動する転位と蓄積している転位の組み合わせによって相互作用の仕方が異なることをこれによって表現する。 N はすべり系の数である。式(10)

では右辺第 1 項もすべり系（および双晶系）ごとに異なる表現を与えた。これは、数値解析上は全く簡単な追加処理であるが、多くの稠密六方型金属結晶などのように、すべり系ごとに CRSS やその温度特性が大きく異なる材料の解析を行う際に決定的に重要になる場合がある。

すでに述べたように、式(9)や(10)の右辺は原子スケールの広がりしか持たない変形抵抗と、それよりも大きな、転位の密度分布を物理描像とするような広がりをもつ変形抵抗で構成されている。しかしさらに、2.1 および 2.2 項で述べたように、結晶粒界や異相界面など、微視組織に見られる種々の内部界面も転位の運動には大きな障害になる。転位ループの放出に対する結晶粒界の効果は式(2)のように近似することが出来るので、我々はこれを組み込んだモデル⁴⁾、

$$g^{(\alpha)} = g_0^{(\alpha)}(T) + \sum_{\beta=1}^N \Omega^{(\alpha\beta)} a\mu\tilde{b}\sqrt{\rho_s^{(\beta)}} + 3\hat{\beta}\frac{\mu\tilde{b}}{d} \quad (11)$$

を提案した（拡張 Bailey-Hirsch モデル）。右辺第 3 項が転位ループ放出に対する粒界からの抵抗を表す項である。

3. GN 転位と内部応力そして界面の影響

3.1 高次勾配結晶塑性理論

転位は結晶格子に歪み（弾性変形）をもたらす。既に述べたように、SS 転位群は正負の符号を持つ同数の転位がランダムに存在している状況をその描像とするため、これらの転位群がもたらす内部応力の乱れの影響は極めて狭い範囲に限られる。一方、GN 転位群は正負いずれかの符号を持つ転位の集団であり、それらが作り出す内部応力は長範囲に及び、その方向性によって、外力に呼応して動き出そうとするすべり変形を妨げるか、あるいは助長するように働き、巨視的なすべり変形挙動に直接的な影響をもたらすと考えられる。

Evers ら¹²⁾は、GN 転位密度が着目する物質点まわりに線形的に変化するという近似を導入して、転位論に基づく計算を行い、GN 転位群がもたらす内部応力は第一次近似的に GN 転位密度の 1 次の空間勾配で表現できることを示した。Groma ら¹³⁾も数値計算による考察を通して同じ形式のモデルに到達している。

ここでは、上記の考え方を、広く用いられている結晶塑性理論に適用する方法¹⁴⁾¹⁵⁾について示す。Peirce ら¹⁶⁾の提案したすべり速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ の式にこの内部応力モデルを導入すると形式的には次のようになる。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \text{sgn}(\tau_{\text{eff}}^{(\alpha)}) \dot{\gamma}_0 \left(\frac{|\tau_{\text{eff}}^{(\alpha)}|}{g^{(\alpha)}} \right)^{1/m} \quad (12)$$

$$\tau_{\text{eff}}^{(\alpha)} = \tau^{(\alpha)} + \tau_{\text{GND}}^{(\alpha)} \quad (13)$$

ここに、 $\tau^{(\alpha)}$ は外力に起因する分解せん断応力、 $\tau_{\text{GND}}^{(\alpha)}$ は GN 転位密度の 1 次空間勾配に起因する内部応力、 $\dot{\gamma}_0$ は基準すべり速度（材料定数）、 $\tau_{\text{eff}}^{(\alpha)}$ はすべりを駆動する有効せん断応力である。 $\tau_b^{(\alpha)} = -\tau_{\text{GND}}^{(\alpha)}$ とおけば、 $\tau_b^{(\alpha)}$ はいわゆる背応力(backstress)と解することができる。最も簡単な場合として、刃状転位のみを考慮し、かつ背応力のすべり系間の相互作用がないものと仮定すると、 $\tau_b^{(\alpha)}$ は

1 次式のように書くことができる。

$$\tau_b^{(\alpha)} = B \frac{\partial \rho_{\text{G,edge}}^{(\alpha)}}{\partial x_j} s_j = -\frac{B}{b} \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x_i \partial x_j} s_i^{(\alpha)} s_j^{(\alpha)} \quad (14)$$

5 ここに、 B は材料の特徴長さを規定する係数であり、マイクロ曲げ試験などにより実験的に見積もることができる。また、 x_j は物質点座標、 s_j はすべり方向を表す単位ベクトルの成分である。GN 転位密度はすべりの1次勾配に相当するので、背応力はすべりの2次勾配に相当する量となる。負荷方向が逆転しても（分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ の符号が反転しても）式(14)の形で与えられる背応力 $\tau_b^{(\alpha)}$ の符号は直ちには変化しない。つまり負荷方向逆転前後で $\tau_{\text{eff}}^{(\alpha)}$ の絶対値は大きく変化する。これは Bauschinger 効果のオリジンであると解釈できる。

15 上記の内部応力（背応力）モデルを導入した結晶塑性理論を境界値問題に適用することを考える。式(6)₁をGN転位密度とすべり勾配の平衡の式と見てその弱形式を求めると（ここでは、刃状成分を例に説明するが、らせん成分の場合も式展開は同様である）、次のようになる。

$$\left. \begin{aligned} \int_V \rho_{\text{G,edge}}^{(\alpha)} \delta w \, dV &= \frac{1}{b} \int_V \gamma^{(\alpha)} s_j^{(\alpha)} \frac{\partial \delta w}{\partial x_j} \, dV \\ &+ \frac{1}{b} \int_V \gamma^{(\alpha)} \frac{\partial s_j^{(\alpha)}}{\partial x_j} \delta w \, dV - \frac{1}{b} \int_S \gamma^{(\alpha)} s_j^{(\alpha)} n_j \delta w \, dS \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

25 ここに、 V は物体の体積、 S は物体の表面積、 δw は適当な重み関数、 n_i は物体表面の単位法線ベクトルである。この式から GN 転位密度 $\rho_{\text{G,edge}}^{(\alpha)}$ を節点量とする有限要素法方程式が得られる。これと、通常の仮想仕事の原理に基づく有限要素方程式（構成式には式(12)を導入した結晶塑性モデルを適用）を連立させて解けば、GN 転位起因の内部応力効果を考慮した結晶塑性解析ができる。特に注目すべきは、式(15)の右辺第2項において表面におけるすべりの境界条件が要求される点である。例えば、 $\dot{\gamma}^{(\alpha)} s_j^{(\alpha)} n_j = 0$ と設定すれば、これは表面の法線方向には塑性流れが起こらないことを意味し、転位が貫通できない界面の存在を表現する。従来の連続体力学の枠組みでは、応力と変位の境界条件は考慮できたが、ひずみ相当量の境界条件は設定できなかった。ひずみ勾配に関する微分方程式を支配方程式に追加し、ひずみあるいはひずみ勾配の境界条件を設定できるよう拡張された理論は、higher-order theories と呼ばれる。

Gurtin⁽¹⁸⁾⁽¹⁹⁾は、拡張された仕事の原理の成立を仮定して、上記の理論とは独立に、高次勾配結晶塑性理論を提案した。ここでは、上述の転位論ベースの背応力モデルと Gurtin の勾配結晶塑性理論に等価性があること⁽¹⁴⁾を示す。今、背応力（簡単のため再び刃状転位のみを考慮；式(14)）が、次式のようなベクトル量 $\xi_i^{(\alpha)}$ の発散で与えられているものと仮定する。すなわち、

$$\xi_i^{(\alpha)} = -B \rho_{\text{G,edge}}^{(\alpha)} s_i^{(\alpha)} \Rightarrow \tau_b^{(\alpha)} = -\frac{\partial \xi_i^{(\alpha)}}{\partial x_i} = B \frac{\partial \rho_{\text{G,edge}}^{(\alpha)}}{\partial x_j} s_j \quad (16)$$

上式によると、すべり速度の式(12)は次式の形に書き換えることができる。

$$\tau_p^{(\alpha)} - \tau^{(\alpha)} - \frac{\partial \xi_i^{(\alpha)}}{\partial x_i} = 0 \quad (17)$$

ここに、

$$\tau_p^{(\alpha)} = \text{sgn}(\tau_{\text{eff}}^{(\alpha)}) g^{(\alpha)} \left(\frac{|\dot{\gamma}^{(\alpha)}|}{\dot{\gamma}_0} \right)^m \quad (18)$$

と置いた。式(17)は勾配項により拡張されたすべり系の降伏条件式と見ることができる。この降伏条件式を仮想仕事の原理式に代入して発散定理を用いると次式に至る。

$$\left\{ \int_V \left[\sigma_{ij} \delta \epsilon_{ij}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \left(\tau_p^{(\alpha)} \delta \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \xi_i^{(\alpha)} \frac{\partial \delta \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial x_i} \right) \right] dV \right. \\ \left. = \int_S T_i \delta u_i \, dS + \int_S \sum_{\alpha} n_i^{(\alpha)} \xi_i^{(\alpha)} \delta \dot{\gamma}^{(\alpha)} \, dS \right\} \quad (19)$$

この式が、Gurtin⁽¹⁸⁾が基礎として導入した仮想仕事の原理の表現である。式(19)においては、応力 σ_{ij} と弾性ひずみ速度 $\dot{\epsilon}_{ij}^{(\alpha)}$ 、 $\tau_p^{(\alpha)}$ とすべり速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 、 $\xi_i^{(\alpha)}$ とすべり速度の勾配 $\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)} / \partial x_i$ とが、それぞれ仕事率共役の形になっている。 $\xi_i^{(\alpha)}$ は、すべりの空間勾配との共役量である「高次応力」と解釈され、「高次表面力」($\xi_i^{(\alpha)} n_i$)の境界条件が右辺第2項で設定される。この理論では、まず初めに、式(19)における仕事率共役性の存在が前提条件として設定される。続いてヘルムホルツの自由エネルギー ψ が、通常の弾性ひずみエネルギーに加えて GN 転位の寄与を包含すると仮定される。これらより、熱力学第2法則に基づく不等式

$$\dot{\psi} - \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij}^{(\alpha)} - \sum_{\alpha} \left(\tau_p^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \xi_i^{(\alpha)} \frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial x_i} \right) \leq 0 \quad (20)$$

から $\xi_i^{(\alpha)}$ の構成式が決定されるが、 ψ に $\rho_{\text{G,edge}}^{(\alpha)}$ の2次式を含める場合、 $\xi_i^{(\alpha)}$ は式(16)で仮定したものと同形になり、2つの理論は等価となる。つまり、背応力が式(16)の形に書ける場合には、2つの理論は一致する。ただし、Gurtin 理論では、背応力の式は材料の物理（転位論）から導かれるのではなく、自由エネルギーの式を $\rho_{\text{G,edge}}^{(\alpha)}$ （一般的には $\rho_{\text{G,screw}}^{(\alpha)}$ も考慮）を用いてどのように仮定するかで決まる。いずれにしても、異なる着想と視点から導かれた2つの定式化において、片方がもう片方の形式に書き換え可能であるという数学的等価性の存在は興味深い。

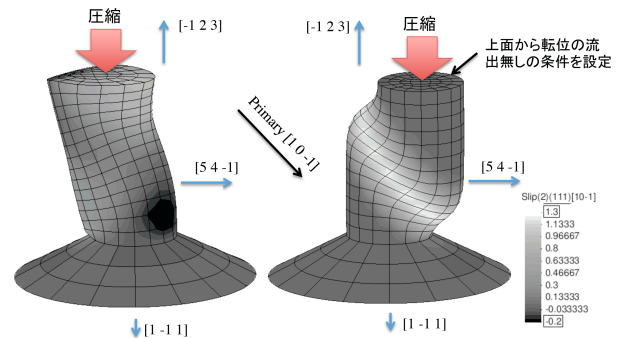


図2 微小 FCC 単結晶マイクロピラー（単一すべり方位）の圧縮問題の結晶塑性解析⁽²⁰⁾（変形と主すべり系すべり量の分布）。

1 3.2 界面の性質と力学応答

高次勾配理論の際立った特徴は、すべりあるいは GN 転位密度（またはそれらの時間変化率）の境界条件を設定できることである。界面において $\gamma^{(\alpha)}$ またはその勾配の値が規定されると、材料内部には必然的にすべりの空間勾配が生じる。転位が貫通できない界面において転位がパイアップしてすべりの高次勾配が生じる状況はその典型的な描像である。

界面の境界条件と連動する高次勾配効果は、材料の力学応答を本質的に変化させるほど重要な意味を持つ。ここでは、その一例を紹介する。図 2 に微小 FCC 単結晶のマイクロピラー（直径 $20\mu\text{m}$ 程度を想定）を平面ポンチで圧縮する様子を従来の結晶塑性論と高次勾配結晶塑性論で解析した結果²⁰⁾を示す。圧縮軸は $[\bar{1}23]$ 方向に一致しており、これは典型的な単一すべりの方位である。高次勾配結晶塑性論においては、ピラー上面に $\dot{\gamma}^{(\alpha)}s_j^{(\alpha)}n_j=0$ 、 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}p_j^{(\alpha)}n_j=0$ （後者はらせん転位に関わる条件； $p_j^{(\alpha)}$ はすべり面上で $s_j^{(\alpha)}$ と直交する方向）の条件を与えている。これは前述のとおり、この表面から転位の流出がない条件である。実験ではダイヤモンドポンチでピラーを軸方向に押すことに対応して、モデル上はポンチとピラー上面の接触効果により転位が表面から外に出ることが制限されているという設定である。実験で観察されるピラーの変形モード²¹⁾は、高次勾配結晶塑性論による解析結果に酷似している。ピラー上面で $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ が零に拘束されたために内部にすべりの高次勾配が誘発され、それが背応力となって塑性変形を阻害する。結果としてピラー上面から主すべり系バーガースベクトルに沿う方向に位置する材料が非常に硬い応答を示してデッド領域化している。

この解析は界面効果の単なる一例であるが、界面に起因する現象が材料のマクロな力学応答を本質的に支配していることを強く示唆するものである。ヘテロな内部微視構造を持つ材料の内部に目を向ければ、介在物と母材の間、多相材料の相間、粒界など多種多様かつ多量の界面が存在する。すなわち、内部微視構造とその材料のマクロな力学特性の関係性を理解し、かつそれを理論的に再現・予測するためには、様々な界面におけるミクロスコピックな境界条件を明らかにすることが不可欠である。しかしながら、この方面の研究は、上記の議論の重要性が必ずしも学界に浸透しているとは言い難い現状の中で、今のところそれほど進んでいない状況にある。

4. おわりに

本稿では、2.において、臨界分解応力（あるいはすべり抵抗） $g^{(\alpha)}$ の転位の運動と蓄積に関する知見を活用した定式化を示した。3.では GN 転位の配列が作り出す長範囲内部応力（背応力）のモデルとそれに付随する界面効果について解説した。両者を統合したモデルは、例えば、式(12) に式(11)の $g^{(\alpha)}$ を適用することによって達成

される。原理的には、このようなモデルを用いて、ヘテロな材料内のミクロ現象に起因して生じるマクロ特性をシミュレートする道が開かれている。しかし、先に述べたように、そこに含まれる界面の特性等、未解明な点が多く存在し、研究課題は山積する。これらの課題解決に対しては、実験観察はもちろんのこと、分子動力学や第一原理計算のようなより微視的な視点からの物理計算の成果を有効に活用することが肝要である。より確からしいモデル構築への道のりは、まさしく材料科学と材料力学の融合の過程であり、それは、魅力的な力学特性を有する新材料の開発に有効なツールとなることが期待される「材料の力学」の構築に他ならない。

参 考 文 献

- 1) 桑原利彦・黒田充紀・高橋進・高村正人・瀧澤英男・森謙一郎：塑性と加工，52-600 (2011) 88-95.
- 2) 黒田充紀・志澤一之：塑性と加工，43-495 (2002)，299-309.
- 3) Hull, D. & Bacon, D.J.: *Introduction to Dislocations*, 4th ed., Butterworth Heinemann, Oxford, 2005.
- 4) Ohashi, T., Kawamukai, M., & Zbib, H.M.: Int. J. Plasticity, 23 (2007), 897-914.
- 5) Ohashi, T.: Trans. Japan Inst. Met., 28 (1987), 906-915.
- 6) Ohashi, T.: Phil. Mag. A., 70 (1994), 793-803.
- 7) Kocks, U.F.: Trans. ASME, J. Eng. Mater. Tech., 98 (1976), 76-85.
- 8) Ohashi, T., Tsugawa, R. & Ogasawara, T.: Mater. Sci. Forum, 584-586 (2008), 1063-1068.
- 9) Ohashi, T.: Phil. Mag. Lett., 75(1997), 51-57.
- 10) 加藤雅治，入門 転位論，裳華房，1999.
- 11) Fleck, N.A., Muller, G.M., Ashby, M.F. & Hutchinson, J.W.: Acta Metall. Mater., 42 (1994), 475-487.
- 12) Evers, L.P., Brekelmans & W.A.M., Geers, M.G.D.: J Mech. Phys. Solids, 52 (2004), 2379-2401.
- 13) Groma, I., Csikor F.F. & Zaiser, M.: Acta Mater., 51 (2003), 1271-1281.
- 14) Kuroda, M. & Tvergaard, V.: J. Mech. Phys. Solids, 56 (2008), 1591-1608.
- 15) Kuroda, M. & Tvergaard, V.: J. Mech. Phys. Solids, 56 (2008), 2573-2584.
- 16) Peirce, D., Asaro, R.J. & Needleman A.: Acta Metall., 31 (1983), 1951-1976.
- 17) Stölken, J.S. & Evans, A.G.: Acta Mater., 46 (1998), 5109-5155.
- 18) Gurtin, M.E.: J. Mech. Phys. Solids, 50 (2002), 5-32.
- 19) Gurtin, M.E.: Int. J. Plast., 24 (2008), 702-725.
- 20) Kuroda, M.: Acta Mater., 61 (2013), 2283-2297.
- 21) Uchic, M.D., Dimiduk, D.M., Florando J. & Nix, W.D. Science, 305 (2004), 986-989.