

# Cu-9at.% Al 合金対称双結晶の引張りにおける 微視的非適合性と転位密度不均質性の関係\*

近藤了嗣\*<sup>1</sup> 大橋鉄也\*<sup>2</sup> 三浦精\*<sup>3</sup>

## Relationship between Micro-Incompatibility and Heterogeneity of Dislocation Density Distribution in Cu-9at.% Al Symmetric Type Bicrystal Models under Tensile Loading

Ryouji KONDOU\*<sup>4</sup>, Tetsuya OHASHI and Sei MIURA

\*4 Faculty of Engineering, University of the Ryukyus

1 Senbaru Nishihara-cho Nakagami-gun Okinawa Japan 903-0213

Slip deformation in Cu-9 at.% Al symmetric type bicrystal models subjected to tensile loading is investigated by a finite element crystal plasticity analysis code. Accumulation of geometrically necessary dislocations (GNDs) and statistically stored dislocations (SSDs) are studied in detail. Results of the analysis show asymmetric non-uniform deformation and accumulation of GNDs on the primary and secondary slip systems with activity of secondary slip system near the grain boundary. Mechanism of asymmetric non-uniform deformation with GNDs accumulated near the grain boundary in the Cu-9at.% Al symmetric-type bicrystal models is discussed from the viewpoint effects of elastic anisotropy of Cu-9at.% Al and heterogeneity of initial statically stored dislocations density.

**Key Words:** Micro-Compatibility, Cu-9 at.% Al Symmetric type Bicrystals, Crystal Plasticity Analysis, Geometrically Necessary Dislocation, Statically Stored dislocation, Elastic Anisotropy

### 1. 緒 言

金属多結晶の塑性変形は、個々の結晶粒に生じる弾性変形とすべり変形の組み合わせであり、通常、隣接結晶粒間で、粒界を通した変形拘束の相互作用を伴う。この粒界の効果を検討するためには、現象を単純化するためにも、多結晶の最も基礎的なモデルである双結晶を用いることが有効である。実際に双結晶に外部負荷を与え、塑性変形させると、結晶粒間の弾性不適合応力<sup>(1)(2)</sup>、塑性ひずみの非適合性<sup>(1)</sup>、粒界に堆積した転位列による応力集中<sup>(3)</sup>などにより、粒界近傍に不均一変形が生じることが知られている。厳密には、これ

らの効果が重畳し、結晶粒間で変形の相互拘束が働くため、粒界近傍の不均一変形は極めて複雑な現象となる。このように現象に関与する要因が雑多な場合、解析手法による検討が有効である。例えば、大橋等<sup>(4)</sup>は、弾性異方性をもつ双結晶の引張りの弾性変形解析を行うことにより、変形初期段階における粒界近傍のすべり現象に、弾性応力場が支配的に寄与することを定量的に明らかにしている。

しかしながら、実験観察結果には、更に複雑な現象も報告されており、検討課題も多く残されている。例えば、三浦等<sup>(5)(6)</sup>が行った Cu-9at.%Al 合金対称双結晶の引張りの実験観察結果では、対称双結晶であるにも関わらず、粒界で非対称な不均一変形が生じている。粒界近傍の局所的な領域では、二次すべり系が活性化しているにも関わらず、活性化される転位源は粒界近傍に限られており、粒界そのものは、実効的な転位源

\* 原稿受付 2005年8月22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。  
(〒090-8507 北海道北見市公園町 165)。

\*3 正員, 崇城大学 工学部 機械工学科  
(〒860-0082 熊本県熊本市池田 4 丁目 22 番 1 号)。  
E-mail: kondou@teada.tec.u-ryukyu.ac.jp

として働いていない。これらの現象は、『微視的非適合性』(Micro-Incompatibility)と呼ばれている<sup>(5)(6)</sup>。

双結晶に生じる(準微視的な)すべり変形の不均一性と粒界における微視的非適合性は、スケールが異なる現象の特性である。これらに関連付けて論じるためには、すべり変形の素過程である(微視的な)転位群の運動、堆積から検討することが有効である。本報告はCu-9at.% Al合金対称双結晶の引張りに伴う粒界における微視的非適合性の機構を明らかにするために、すべり変形と転位の堆積の結晶塑性解析を行った結果を述べる。

## 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  $\sigma_{ij}$  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。

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

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  $\dot{\epsilon}_{ij}$  は弾性成分  $\dot{\epsilon}_{ij}^e$  と塑性成分  $\dot{\epsilon}_{ij}^p$  の和から次式で求められる。

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

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、

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

で表されると仮定すると、弾塑性構成式<sup>(7)</sup>は次式、

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

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** 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『幾何学的に必要な転位』(GN 転位: geometrically necessary dislocation)<sup>(8)</sup>の二種類に分類され、転位密度はひずみ増分から計算される。

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<sup>(9)</sup>。

$$\dot{\rho}_s^{(n)} = \frac{c \dot{\gamma}^{(n)}}{b L^{(n)}} \quad \dots \dots \dots (5)$$

ここで、 $c$  は 1 のオーダーの係数、 $\tilde{b}$  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。

すべり変形は転位の運動により生じるため、転位が通過した領域にすべりが生じ、転位が通過する前の領域には、まだ、すべりが生じない。従って、 $\gamma^{(m)}$  の空間勾配が生じている場所には、転位が存在していなければならない。これを GN 転位と呼ぶ<sup>(8)</sup>。ここで、すべり面上ですべり方向を  $\xi$ 、すべり方向に垂直な方向を  $\zeta$  と表せば、密度ノルム  $\|\rho_G^{(m)}\|$  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<sup>(10)</sup>。

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

**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<sup>(9)</sup>より、次式で求められる。

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

ここで、 $\theta_0$  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、 $\mu$  は結晶のせん断弾性係数、 $\Omega^{(nm)}$  は相互作用行列<sup>(9)</sup>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、等方硬化則を仮定し、 $R_1 = R_2 = R_3 = R_3' = R_4 = 1.01$  とした。この式は、運動転位と蓄積転位間に働く(極めて複雑と考えられる)多体相互作用を、蓄積転位が作る場の中を転位が運動するという描像に単純化している。

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。

$$h^{(nm)} = \frac{1}{2} \frac{ac_t \Omega^{(nm)}}{L^{(m)} \sqrt{\rho_S^{(m)}}} \dots \dots \dots (8)$$

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<sup>(11)(12)</sup>を用いた.

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

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は停止するという描像に基づいている. ここでは,  $c^*=15$  とした.  $\omega^{(nm)}$  は重み行列<sup>(11)(12)</sup>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に蓄積された転位が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ている. 最初に, 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し, 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, 構成式を動的に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. すなわち, SS 転位密度  $\rho_S^{(m)}$  と GN 転位密度ノルム  $\|\rho_G^{(m)}\|$  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 に示す対称双結晶である. 一辺の長さ  $l$  が 200 $\mu\text{m}$ , 厚さ  $t$  が 20 $\mu\text{m}$  である. 粒界面はモデル表面と直交している. 有限要素分割は 8 節点六面体要素で均一に行った. 総要素数は 6400 である.

この双結晶モデルが次式を満たす時, 引張り変形後も GN 転位の粒界堆積が生じない<sup>(13-15)</sup>.

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

ここで,  $\varepsilon_{yy}^{(1)}, \varepsilon_{yy}^{(2)}$  等は, 粒 1, 2 が独立に変形した時に生じるひずみ (弾性ひずみ成分と塑性ひずみ成分の和) 成分で, 右肩の添え字は結晶粒番号である.

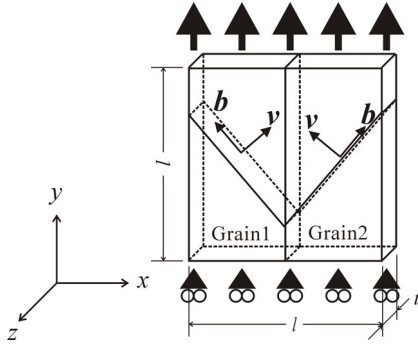


Fig. 1 Geometry and boundary condition for the models employed in this study

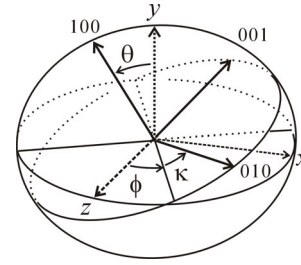


Fig. 2 Definition of Euler angles  $\kappa, \theta$  and  $\phi$

Table 1 Euler angle ( $\kappa, \theta, \phi$ ), components of normal direction and slip direction vector of the primary slip system and some values of Schmid tensor.

Grain	Euler angle ( $\kappa, \theta, \phi$ )	$b_x^{(9th)}$	$b_y^{(9th)}$	$b_z^{(9th)}$	$v_x^{(9th)}$	$v_y^{(9th)}$	$v_z^{(9th)}$	$P_{22}^{(9th)}$	$P_{33}^{(9th)}$	$P_{23}^{(9th)}$
1	77.333, 24.735, 77.333	-0.7071	0.7071	0	0.7071	0.7071	0	0.5000	0	0
2	77.333, 24.735, 257.333	0.7071	0.7071	0	-0.7071	0.7071	0	0.5000	0	0

Table 2 Slip system number, definition of slip systems and Schmid factor.

Num.	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Slip system	(111) [1 $\bar{1}$ 0]	(111) [01 $\bar{1}$ ]	(111) [10 $\bar{1}$ ]	( $\bar{1}$ 11) [110]	( $\bar{1}$ 11) [01 $\bar{1}$ ]	( $\bar{1}$ 11) [110]	(11 $\bar{1}$ ) [1 $\bar{1}$ 0]	(11 $\bar{1}$ ) [011]	(11 $\bar{1}$ ) [101]	(1 $\bar{1}$ 1) [110]	(1 $\bar{1}$ 1) [011]	(1 $\bar{1}$ 1) [10 $\bar{1}$ ]
Schmid Factor	0.2875	0.1820	0.4694	-0.2194	-0.0527	-0.1667	0.2500	0.2500	0.5000	0.3180	0.1208	0.1973

Euler 角による材料座標系  $(x, y, z)$  と結晶座標系  $([100], [010], [001])$  間の座標変換は図 2 で表され、座標変換行列は次式で表される。

$$\begin{pmatrix} [100] \\ [010] \\ [001] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin\theta\cos\phi & \cos\theta \\ \cos\kappa\sin\phi + \cos\theta\sin\kappa\cos\phi & \sin\theta\sin\kappa \\ -\sin\kappa\sin\phi + \cos\theta\cos\kappa\cos\phi & \sin\theta\cos\kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (11)$$

粒 1, 2 の初期結晶方位  $(\kappa, \theta, \phi)$  を表 1 に示す。モデルの  $y$  軸方向に外部負荷を与えた時の Schmid 因子の値は、粒 1, 2 共に等しく、表 2 の通りとなる。この場合、粒 1, 2 の主すべり系  $(11\bar{1})[101]$  に関して、 $v_z^{(9th)} = b_z^{(9th)} = 0$  となり、Schmid テンソルの値は等しく、 $P_{11}^{(9th)} = -0.5$ ,  $P_{22}^{(9th)} = 0.5$ ,  $P_{33}^{(9th)} = P_{12}^{(9th)} = P_{23}^{(9th)} = P_{31}^{(9th)} = 0$  となる。主すべり系の自由なすべりにより生じる塑性ひずみ増分は等しく、 $\dot{\epsilon}_{xx}^p$ ,  $\dot{\epsilon}_{yy}^p$  のみとなるため、粒界で塑性ひずみ成分の非適合性は生じない。また、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の非適合性<sup>(13-15)</sup>も生じない。

Cu-9at.%Al 合金の結晶基準軸方位の弾性コンプライアンスは、 $S_{11}=1.6793$ ,  $S_{12}=-0.7130$ ,  $S_{44}=1.3055$  [ $\times 10^{-11} \text{m}^2/\text{N}$ ]である<sup>(16)</sup>。弾性異方性比  $2(S_{11} - S_{12})/S_{44}$  は 3.66 となる。粒 1, 2 の材料座標系  $(x, y, z)$  における弾性コンプライアンス  $S_{ij}^{e(1)}$ ,  $S_{ij}^{e(2)}$  [ $\times 10^{-11} \text{m}^2/\text{N}$ ]は、次式のようになる。なお、右肩の添え字は結晶粒番号である。

$$\left[ S_{ij}^{e(1)} \right] = \begin{bmatrix} 1.172 & -0.640 & -0.278 & -0.145 & -0.290 & 0.870 \\ & 1.172 & -0.278 & -0.145 & 0.870 & -0.290 \\ & & 0.809 & 0.290 & -0.580 & -0.580 \\ & & & 1.596 & -0.580 & -0.580 \\ & \text{Symmetric} & & & 3.045 & 0.580 \\ & & & & & 3.045 \end{bmatrix} \quad (12)$$

$$\left[ S_{ij}^{e(2)} \right] = \begin{bmatrix} 1.172 & -0.640 & -0.278 & 0.145 & 0.290 & 0.870 \\ & 1.172 & -0.278 & 0.145 & -0.870 & -0.290 \\ & & 0.809 & -0.290 & 0.580 & -0.580 \\ & & & 1.596 & -0.580 & 0.580 \\ & \text{Symmetric} & & & 3.045 & -0.580 \\ & & & & & 3.045 \end{bmatrix} \quad (13)$$

この場合、 $y$  軸方向に外部負荷を与えた時、粒 1, 2 に生じる弾性ひずみ増分  $\dot{\epsilon}_{xx}^e$ ,  $\dot{\epsilon}_{yy}^e$ ,  $\dot{\epsilon}_{zz}^e$ ,  $\dot{\epsilon}_{xx}^e$  は等しくなるが、 $\dot{\epsilon}_{xy}^e$ ,  $\dot{\epsilon}_{yz}^e$  の符号が逆になるため (式(2)参照)、弾性ひずみ増分  $\dot{\epsilon}_{yz}^e$  に関して、粒界で非適合となる (式(10)参照)。

初期転位密度  $\rho_0$  は、 $1.0 \times 10^9$  [ $\text{m}^{-2}$ ] で均一の場合と、これに標準偏差  $S_{\rho_0}=1.0 \times 10^8$  [ $\text{m}^{-2}$ ],  $1.5 \times 10^8$  [ $\text{m}^{-2}$ ], 及び、 $2.0 \times 10^8$  [ $\text{m}^{-2}$ ] を与えた場合の四種類を行った。

このモデル底面の全節点の  $y$  軸方向の変位を拘束し、上面の全節点に  $y$  軸方向の一律な強制変位を課し、平均引張りひずみ  $\bar{\epsilon}_{yy}$  が 1% になるまで引張った。

## 4. 結果と考察

**4-1 微視的非適合性の実験観察結果** 三浦等が行った Cu-9at.%Al 合金対称双結晶に平均引張りひずみ  $\bar{\epsilon}_{yy}=0.3\%$  を与えた後の表面観察結果<sup>(5)(6)</sup>を図 3 に示す。

主すべり系のすべり線 (図中, Pri.線) が、粒界を境に左右交互に現れており、対称双結晶であるにも関わらず、微視的には非対称変形が生じていることがわかる。また、2 次すべり系が、粒界近傍の局所的な領域で活性化していることがわかるが (図中, Cri.線, Conj.線), エッチピットの分布から、粒界が実効的な転位源として働いていないことがわかる。この現象は微視的非適合性と呼ばれている<sup>(5)(6)</sup>。ここでは、これらの微視的非適合性について、結晶塑性解析を通して検討した結果を述べる。

**4-2 弾性異方性の効果** 平均引張りひずみ  $\bar{\epsilon}_{yy}$  が 0.1% になるまで引張った後の変形状態を図 4 に示す。なお、初期転位密度  $\rho_0$  は  $1.0 \times 10^9$  [ $\text{m}^{-2}$ ] で均一である。

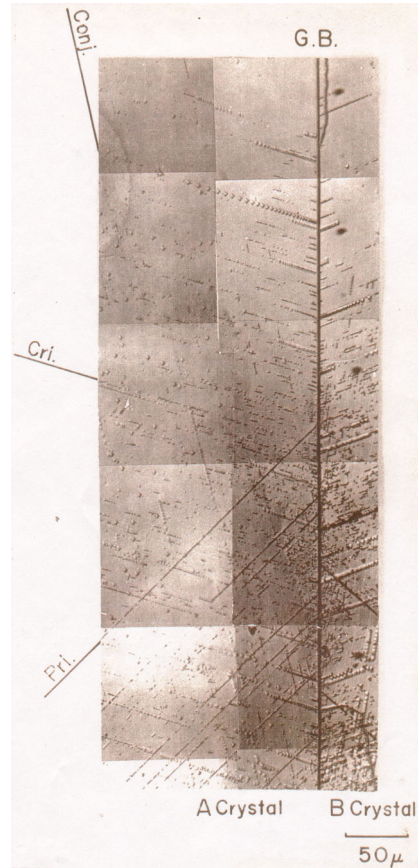


Fig. 3 Dislocation etch-pits configuration on slip lines observed in the symmetric type bicrystals when the average tensile strain  $\bar{\epsilon}_{yy}$  is 0.3%.

主すべり系  $(11\bar{1})[101]$  の塑性せん断ひずみ  $\gamma^{(9th)}$  と SS 転位密度  $\rho_S^{(9th)}$  の表示範囲は、最大値から最小値を示している。主すべり系に発生した GN 転位の刃状転位密度成分  $\rho_{G,edge}^{(9th)}$  と、らせん転位密度成分  $\rho_{G,screw}^{(9th)}$  の表示範囲は、 $-1.5 \times 10^{10} \sim 1.5 \times 10^{10} [\text{m}^{-2}]$ 、密度ノルム  $\|\rho_G^{(9th)}\|$  の表示範囲は  $0 \sim 1.5 \times 10^{10} [\text{m}^{-2}]$  である。2次すべり系上に発生した GN 転位の刃状転位密度成分  $\rho_{G,edge}^{(3rd)}$  と、らせん転位密度成分  $\rho_{G,screw}^{(3rd)}$  の表示範囲は、 $-3.0 \times 10^9 \sim 3.0 \times 10^9 [\text{m}^{-2}]$ 、密度ノルム  $\|\rho_G^{(3rd)}\|$  の表示範囲は、 $0 \sim 3.0 \times 10^9 [\text{m}^{-2}]$  である。

主すべり系  $(11\bar{1})[101]$  の塑性せん断ひずみ  $\gamma^{(9th)}$  の分布 (図 4 (a) 参照) から、対称双結晶であるにもかかわらず、粒界で非対称な不均一変形が生じていることがわかる。これに関して、粒界で弾性ひずみ増分  $\varepsilon_{yz}^e$  が非適合 (式(10)参照) の場合における対称双結晶の変形モデル<sup>(2)</sup>を図 5 に示す。この場合、結晶粒間で弾性不適合応力  $\sigma_{yz}$  が発生する。これは粒界に対して反対称に分布し、粒界面で不連続となる<sup>(4)</sup>。せん断応力成分  $\sigma_{xy}$  は粒界に対して対称に分布する<sup>(4)</sup>。

弾性ひずみ増分  $\varepsilon_{xy}^e$  (式(2), (12), (13)参照) , 及び、これに伴うせん断応力成分  $\sigma_{xy}$  の分布は粒界で対称となるため、これに起因する変形拘束の相互作用も粒界で対称となる。  $v_z^{(9th)} = b_z^{(9th)} = 0$  より、すべり方向に変形勾配が生じるため、刃状転位密度成分からなる GN

転位構造を形成する (図 4 (c)参照) .

弾性ひずみ増分  $\varepsilon_{yz}^e$  (式(2), (12), (13)参照) , 及び、これに伴うせん断応力成分 (弾性不適合応力)  $\sigma_{yz}$  の分布は粒界で反対称となるため、これに起因する変形拘束の相互作用も粒界で反対称となる。  $v_z^{(9th)} = b_z^{(9th)} = 0$  より、すべり方向に垂直な方向に変形拘束が働くため、らせん転位密度成分からなる GN 転位が発生する (図 4 (d)参照) . 結果的に刃状転位密度成分とらせん転位密度成分による混合 GN 転位の粒界堆積が生じる (図 4 (b)-(d)参照) と共に、ひずみ硬化が発展し、SS 転位の粒界堆積が生じる (図 4 (e)参照) .

主すべり系の空間的配置から、粒界近傍の局所的な変形には 2 次すべり系の活性化を必要とする。2 次すべり系の活性化に伴う粒界近傍における GN 転位の堆積 (図 4 (f)-(h) 参照) は、この場合、粒 2 側のみに見えるが、モデルの背面からは粒 1 側にも堆積している。このことは、 $\sigma_{yz}$  の分布が粒界で反対称となると共に、粒界で不連続であることに対応している。また、粒界が実効的な転位源とならなかったことを再現している。

平均引張りひずみ  $\bar{\varepsilon}_{yy} = 1\%$  の引張りを与えた後における変形状態を図 6 に示す。主すべり系  $(11\bar{1})[101]$  の塑性せん断ひずみ  $\gamma^{(9th)}$  と SS 転位密度  $\rho_S^{(9th)}$  の表示範囲は、最大値から最小値を示している。GN 転位密度の表示範囲は、比較のために図 4 と同じにしている。

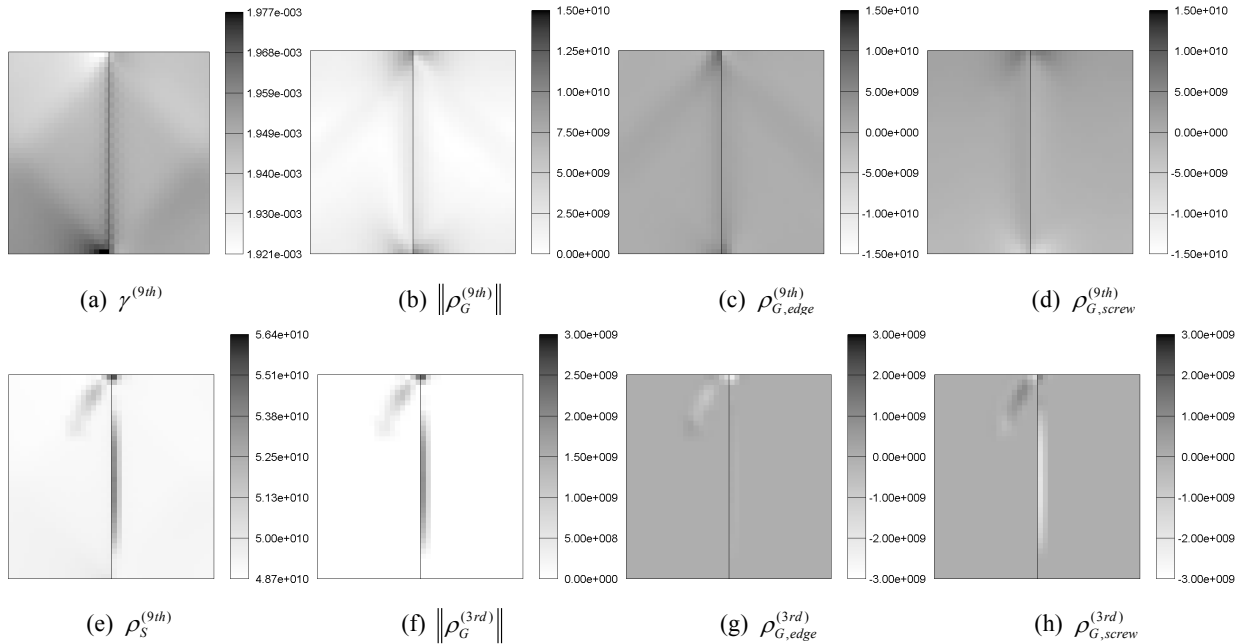


Fig. 4 (a): Distribution of plastic shear strain  $\gamma^{(9th)}$ , density distribution of (b): norm, (c): edge and (d): screw components of geometrically necessary dislocations and (e): statistically stored dislocations on the primary slip system  $(11\bar{1})[101]$ , density distribution of (f): norm, (g): edge and (h): screw components of geometrically necessary dislocations on the secondary slip systems  $(111)[10\bar{1}]$  when the average tensile strain  $\bar{\varepsilon}_{yy}$  is 0.1%, respectively. Unit of dislocation density is  $\text{m}^{-2}$ .

本解析条件下では、結晶粒間で塑性ひずみ成分の非適合性、主すべり系の自由なすべりによる結晶粒の形状変化の非適合<sup>(13-15)</sup>が生じない。このため、変形が進行した段階でも、弾性不適合応力に起因する粒界を通じた変形拘束の相互作用が、解析結果に反映される。即ち、変形初期の段階で粒界近傍に堆積した GN 転位により、この領域のひずみ硬化が発展し、変形の進行と共に、更に GN 転位の堆積と不均一変形場を更新させている。以上のことから、Cu-9at.%Al 合金対称双結晶の引張りに伴う粒界近傍の局所的な二次すべり系の活性化は、材料の弾性異方性に起因することがわかる。

**4・3 初期転位密度の不均質性の効果** 三浦等が行った Cu-9at.%Al 合金対称双結晶の引張りの表面観察結

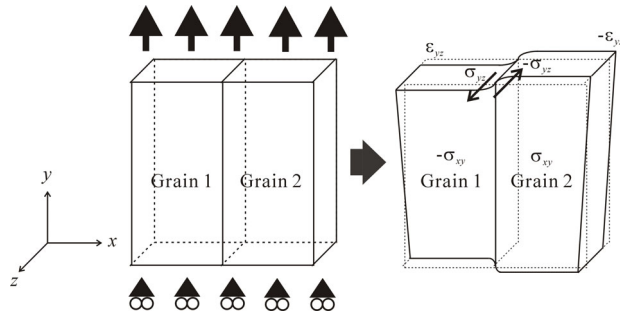


Fig. 5 Schematic illustration of deformation of model showing how stresses  $\pm\sigma_{xy}$ ,  $\pm\sigma_{yz}$  arise from incompatibility of components of elastic strains  $\epsilon_{yz}^e$  under the tensile loading

果では、主すべり系のすべり線が粒界を境に左右交互に現れており、微視的にも非対称な変形が生じている。この現象は弾性異方性の効果だけでは説明することができない。ここでは、実際の材料に内在する不均質性の影響について検討する。材料に内在する不均質性には、様々な要因が考えられるが、ここでは、初期転位密度  $\rho_0 = 1.0 \times 10^9$  [ $\text{m}^{-2}$ ] に標準偏差  $S_{\rho_0} = 1.0 \times 10^8$  [ $\text{m}^{-2}$ ],  $1.5 \times 10^8$  [ $\text{m}^{-2}$ ], 及び、 $2.0 \times 10^8$  [ $\text{m}^{-2}$ ] を与えた影響について検討する。

図 7 に平均引張りひずみ  $\bar{\epsilon}_{yy}$  が 1% になるまで引張りを与えた後における GN 転位密度のノルム分布を示す。なお、表示範囲は比較のため、図 4, 図 6 と同様、 $\|\rho_G^{(9th)}\|$  は  $0 \sim 1.5 \times 10^{10}$  [ $\text{m}^{-2}$ ],  $\|\rho_G^{(3rd)}\|$  は  $0 \sim 3.0 \times 10^9$  [ $\text{m}^{-2}$ ] とした。材料に内在する不均質性の影響により、主すべり系のすべり方向と直交する方向に発達した帯状の領域に、GN 転位が高密度に堆積していることがわかる。この GN 転位組織の様相は、粒界を境に左右非対称となっており、三浦等が行った実験観察結果を再現している。また、粒界近傍における 2 次すべり系に堆積した GN 転位密度分布も、場所的に不均質になっていることがわかる。

**4・4 回位型変形場による微視的非適合性の評価** 初期転位密度が不均質な結晶粒内の微小領域におけるすべり変形を図 8 (a) から (b), (b) から (c) の二段階に分けて考える。図 8 (a) から (b) の変形は、領域 1 のみが降

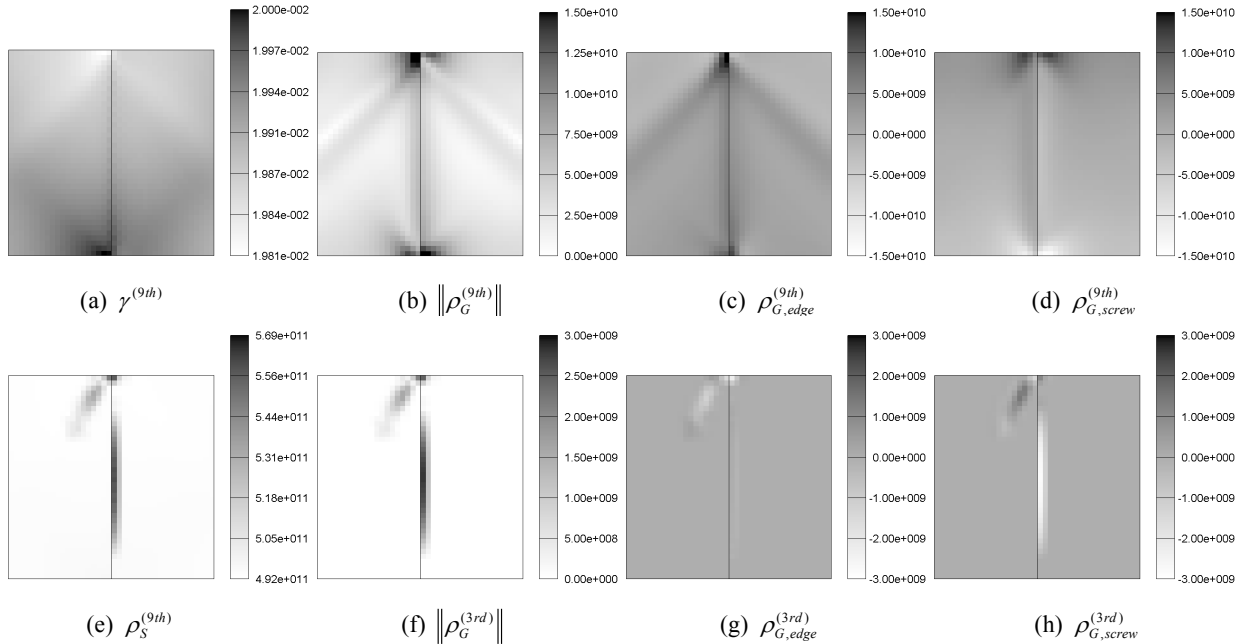


Fig. 6 (a): Distribution of plastic shear strain  $\gamma^{(9th)}$ , density distribution of (b): norm, (c): edge and (d): screw components of geometrically necessary dislocations and (e): statistically stored dislocations on the primary slip system  $(11\bar{1})[101]$ , density distribution of (f): norm, (g): edge and (h): screw components of geometrically necessary dislocations on the secondary slip systems  $(111)[10\bar{1}]$  when the average tensile strain  $\bar{\epsilon}_{yy}$  is 1.0 %, respectively. Unit of dislocation density is  $\text{m}^{-2}$ .

伏すると共に、周囲の領域と変位の連続性を満たすために必要な変形拘束を受けずに変形した段階で、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 8 (b)から(c)の変形は、周囲の領域と結合させ、変位の連続性を満足するように変形させた段階である。この変形段階で形成される変形場を、ここでは、領域 1, 2, 3, 4 の交線を回位芯とした仮想的な『回位』

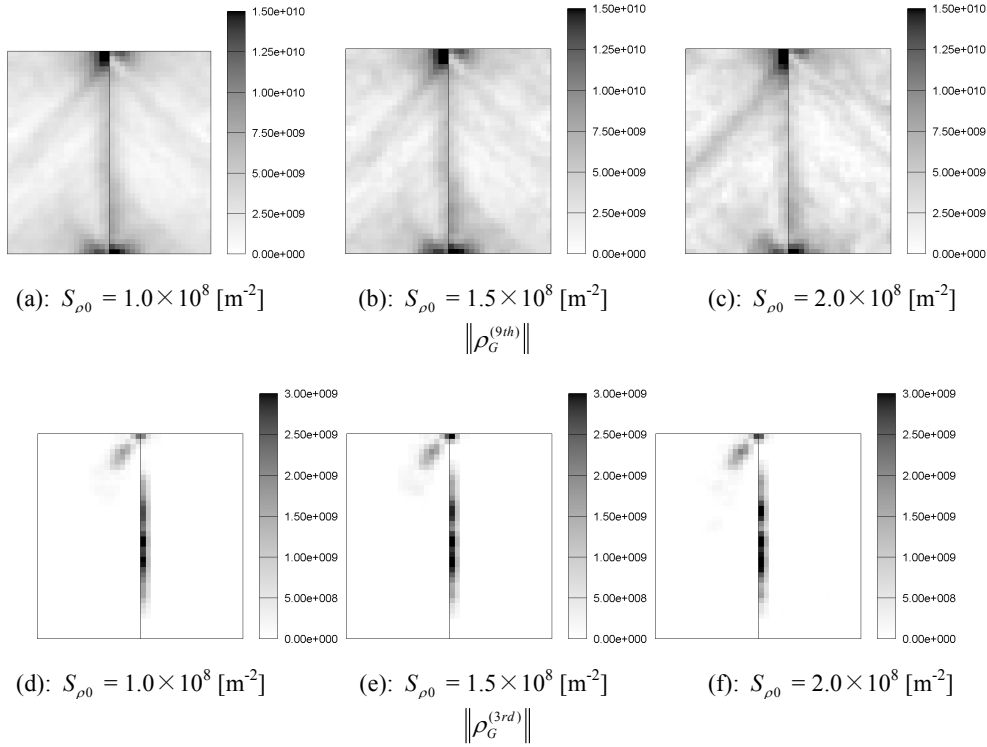


Fig. 7 Density distribution of norm of geometrically necessary dislocation on the (a)-(c) : primary  $(11\bar{1})[101]$  and (d)-(f): secondary slip systems  $(111)[10\bar{1}]$  when the average tensile strain  $\bar{\epsilon}_{yy}$  is 1%, respectively. Standard deviation of initial statically stored dislocation  $S_{\rho_0}$  is (a),(d):  $1.0 \times 10^8$  [ $\text{m}^{-2}$ ], (b),(e):  $1.5 \times 10^8$  [ $\text{m}^{-2}$ ] and (c), (f):  $2.0 \times 10^8$  [ $\text{m}^{-2}$ ] respectively.

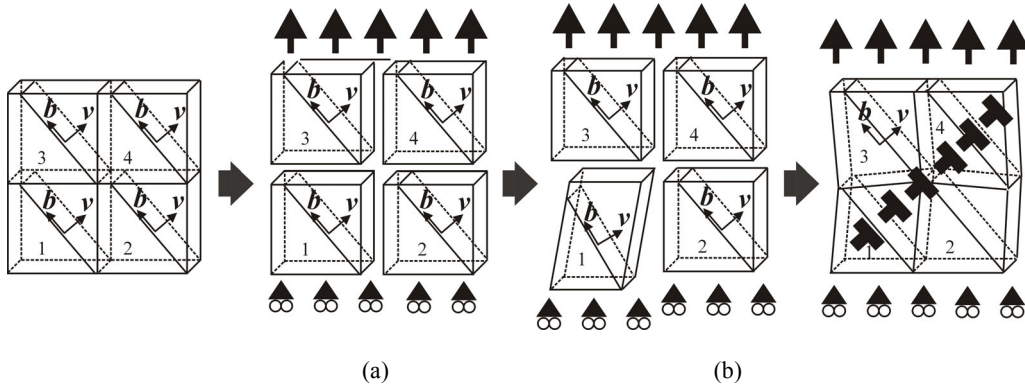


Fig. 8 Schematic illustration of (a) initial condition local area, (b) imaginary slip deformation without binding interaction, (c) imaginary wedge disclination type deformation with binding interaction.

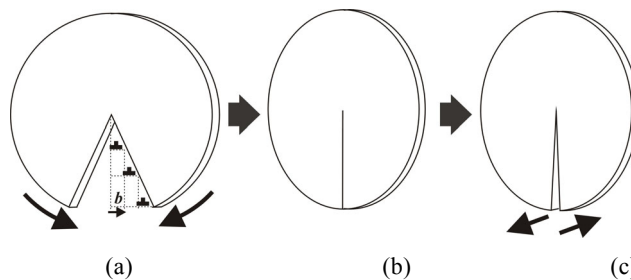


Fig. 9 Schematic illustration of (a) Initial condition with dislocation, (b) wedge and (c) twist disclination type deformation.

(Disclination) 型と考える。

回位は図 9 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形成される変形場で、図 9 (a)から(b)に示すような変形場を『くさび型回位』(Wedge disclination)、図 9 (c)のように、相対的なねじりを含む場合を『ねじれ型回位』(Twist disclination)と呼ぶ。回位における変位場は、半径方向に一律ではなく、半径方向の距離に比例して線形的に広がっている。図 9 (a)に示すように、回位芯の方向がすべり方向と直交している場合、刃状転位列で表現することができる。この刃状転位列は、主すべり系のすべり面上になければならないため、主すべり方向に垂直な方向に刃状転位からなる GN 転位組織を形成する。この GN 転位列が形成する内部応力場により、周囲の領域では、主すべり系、2 次すべり系の実効的な Schmid 因子の増減を招くため、2 次すべり系の活性化も、場所的に不連続となる(図 7(d)-(f))。このため、粒界近傍においては、主すべり系、2 次すべり系の活性化が微視的に左右非対称となる。転位相互作用により生じるひずみ硬化も場所的に不連続になるため、変形の進行と共に微視的非対称変形が発展する。不均質材料内部には、このような仮想的な回位芯が多数存在するため、結晶粒内の全領域で微視的な GN 転位組織が形成される。

## 5. 結 言

Cu-9at.%Al 合金対称双結晶の引張りに伴う粒界における微視的非適合性の原因を明らかにするため、引張りの結晶塑性解析を行い、弾性異方性の効果、初期転位密度の不均質性の影響について検討した結果を以下に述べる。

- (1) Cu-9at.%Al 合金対称双結晶の引張り後、粒界近傍の局所的な領域における 2 次すべり系の活性化の原因は、Cu-9at.%Al 合金の弾性異方性の効果により生じる弾性不適合応力である。
- (2) Cu-9at.%Al 合金対称双結晶の引張り後、主すべり系のすべり線が粒界で非対称に観察される微視的非適合性の原因は材料に内在する不均質性である。
- (3) 材料に内在する不均質性は、GN 転位組織の形成と共に内部応力場を発生させるため、その周囲の領域における主すべり系、2 次すべり系の実効的な Schmid 因子の増減を招き、変形の不均一性を発展させる。
- (4) 材料に内在する不均質性により生じる不均一変形場を、仮想的な回位型と考えることにより、微視

的不均一変形と微視的な GN 転位組織の形成を関連付けて評価することができる。

## 参考文献

- (1) Hirth, J. P., The influence of grain boundaries on mechanical properties, *Metall. Trans.*, **3** (1972) 3047-3067
- (2) Hook, R. E. and Hirth, J. P., The Deformation Behavior of Isoaxial Bicrystals of Fe-3% Si, *Acta Metall.*, **15** (1967) 535-551
- (3) Livingston, J. D. and Chalmers, B., Multi Slip in Bicrystal Deformation, *Acta Met.*, **5-6** (1957) 322-327
- (4) Ohashi T., et al., Elastic Incompatibility Stress in Bicrystal Body, *J. Japan Inst. Metals*, **44-8** (1980) 876-883
- (5) Miura S., et al., Study on The Deformation Mechanism of Cu-9at.% Al Alloy Bicrystals using an Etch Pitting Technique, *Suiyo Kwai-shi*, **19-9** (1982) 673-685
- (6) Hashimoto S. and Miura S., Dislocation Arrays and the Bauschinger Effects in Copper 9at.% Aluminum Bicrystals, *Mem. Fac. Eng. Kyoto Univ.*, **48-1** (1986) 1-29
- (7) Hill R., Generalized Constitutive Relations for Incremental Deformation of Metal Crystals by Multislip, *J. Mech. Phys. Sol.*, **14** (1966) 95-102
- (8) Ashby M. F., The Deformation of Plastically Non-homogenous Alloys, *Phil. Mag.*, **21** (1970) 399-424.
- (9) Ohashi T., Numerical Modeling of Plastic Multislip in Metal Crystals of fcc. Type, *Phil. Mag. A*, **70-5** (1994) 793-803
- (10) 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
- (11) 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
- (12) 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
- (13) 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
- (14) 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
- (15) 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
- (16) Simmons, G. and Wang, H., *Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties*, Second Edition (1971) 24, The M.I.T. press