

対称双結晶の引張りに伴う不均一変形と GN 転位帯形成の結晶塑性解析*

近藤了嗣*¹ 大橋鉄也*²

Crystal Plasticity Analysis of Non-uniform Deformation in Symmetric Type Bi-Crystals under Tensile Load and Formation of Geometrically Necessary Dislocation Bands

Ryouji KONDOU*³ Tetsuya OHASHI

*3 Kitami Institute of Technology,
Koen-cho 165, Kitami-shi, Hokkaido, 090-8507, Japan

Slip deformation in symmetric type bi-crystal models subjected to tensile load is analyzed by a finite element crystal plasticity analysis code and accumulation of geometrically necessary dislocations (GNDs) is studied in detail. Uniform deformation was expected to take place because mutual constraint of crystal grains through the grain boundary plane does not occur in symmetric type bi-crystals, but, some results of the analysis show non-uniform deformation and the high density of GNDs accumulated in the form of band. Such kind of non-uniform deformation is observed regardless of the model size and the strain-hardening characteristics. Mechanism of non-uniform deformation and accumulation of GNDs in the form of band in the symmetric type bi-crystals is discussed from the viewpoint of the boundary condition and shape change of grains after slip deformation.

Key Words: Crystal Plasticity Analysis, Geometrically Necessary Dislocation, Grain Boundary, Grain Size Effect, Symmetric type Bi-crystal, Compatibility

1. 緒 言

金属結晶粒のすべり変形は、転位の運動により、結晶学的に定められた原子面が他の原子面と相対位置を変化させることによって生じているため、転位密度や結晶方位に強く依存する。金属多結晶の塑性変形は、結晶粒に生じるすべり変形の組み合わせで、転位密度や結晶方位に強く依存する一方、互いに独立ではなく、隣接結晶粒間で力学的な変形拘束を及ぼし合いながら生じている。このため、多結晶に塑性変形が生じると、通常、粒界における変位の連続性を満たすため、粒界近傍に不均一変形が生じると共に『幾何学的に必要な転位』(GN 転位: geometrically necessary dislocation)⁽¹⁾が堆積する。

多結晶における GN 転位の堆積は、粒界における変位の連続性を満たすため、粒界近傍に生じる不均一変形が主要な原因と考えられているが、これだけが原因とは言えない現象もある。例えば、GN 転位は、必ずしも、粒界近傍に堆積するだけではなく、結晶粒内部方向に発達した帯状の領域に高密度に堆積する場合がある⁽²⁾⁽³⁾。この GN 転位の構造を、その様相から『GN 転位帯』、あるいは、新たに形成された擬似的な結晶粒界と見なされているが、詳しくはわかっていない。しかしながら、転位群の運動や堆積は、極めて複雑な力学現象の原因であると共に結果であり、『GN 転位帯』の形成原因を実験手法により検討することは極めて困難である。

一方、近年、連続体力学手法を援用した理論的、解析的手法⁽⁴⁾⁽⁵⁾が実用的になり、従来の連続体力学手法では評価することができなかった平均結晶粒径など材料に内在する寸法効果の評価方法⁽³⁾⁽⁶⁾も検討され始め

* 原稿受付 2004年10月4日。

*¹ 正員, 北見工業大学 サテライトベンチャービジネスラボラトリー (〒090-8507 北海道北見市公園町 165)。

*² 正員, 北見工業大学 機械システム工学科。

E-mail: kondou@newton.mech.kitami-it.ac.jp

ている。これは、任意の形状・寸法、結晶方位、転位密度、材料定数をもつ材料に、任意の力学的境界条件を課し、材料内部の不均一変形や転位の堆積および転位群の運動を解析することができる。

本報告は『GN 転位帯』の形成原因を明らかにするため、多重結晶の最も基礎的なモデルである対称双結晶の引張変形の結晶塑性解析を行い、不均一変形と GN 転位について検討した結果を述べる。

2. モデル

解析モデルは、図 1 に示す二種類の双結晶で、モデル A、モデル B とした。モデルの寸法が変形状態や転位の堆積に及ぼす効果を検討するため、一辺の長さ l と厚さ t が、2000 μm と 100 μm 、200 μm と 10 μm 、20 μm と 1 μm の 3 種類の組み合わせを用いた。粒界面はモデル表面と直交している。モデルの有限要素分割は 8 節点六面体要素で均一に行っており、総要素数は、何れの場合も 3200 である。

モデル A、B における粒 1、2 が、各々、独立に変形したとき、粒界面内方向のひずみ成分に差が生じる組み合わせである場合、粒 1、2 が結合して変形すると結晶粒間に変形拘束が生じる。このような変形拘束の相互作用が生じない条件を『適合条件』⁽⁷⁾⁽⁸⁾と呼ぶ。モデル A、B の『適合条件』は次式で与えられる。

$$\varepsilon_{xx}^{(1)} = \varepsilon_{xx}^{(2)}, \quad \varepsilon_{zz}^{(1)} = \varepsilon_{zz}^{(2)}, \quad \varepsilon_{zx}^{(1)} = \varepsilon_{zx}^{(2)}, \quad (\text{Model A}) \quad (1)$$

$$\varepsilon_{yy}^{(1)} = \varepsilon_{yy}^{(2)}, \quad \varepsilon_{zz}^{(1)} = \varepsilon_{zz}^{(2)}, \quad \varepsilon_{yz}^{(1)} = \varepsilon_{yz}^{(2)}, \quad (\text{Model B}) \quad (2)$$

ここで、 $\varepsilon_{xx}^{(1)}$ 、 $\varepsilon_{xx}^{(2)}$ 等は粒 1、2 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）であり、右肩の添え字は結晶粒番号である。この『適合条件』を満足するものを『適合型』、満足しないものを『非適合型』と呼ぶ。なお、この『適合条件』は固体力学における適合条件と意味が異なることに注意を要する。

双結晶の非適合性は弾性異方性によっても誘起され、粒界近傍に不均一変形や多重すべりが生じることが

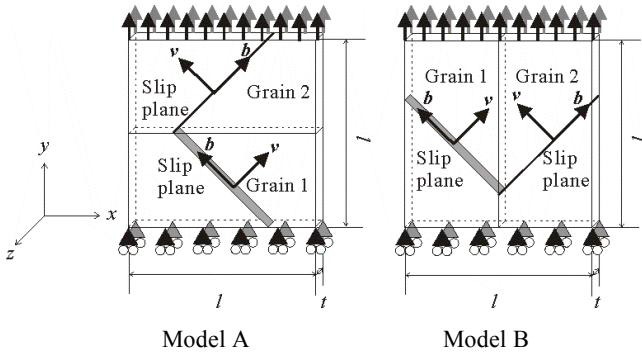


Fig. 1 Geometry and boundary condition for the models employed in this study

Hook と Hirth⁽⁹⁾によって述べられている。ここでは、弾性異方性の効果⁽⁹⁾が生じないような仮想的な面心立方晶金属を想定し、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 $2(S_{11} - S_{12})/S_{44}$ が 1 となる組み合わせ $S_{11}=1.0$ 、 $S_{12}=-0.25$ 、 $S_{44}=2.5 [\times 10^{-11} \text{m}^2/\text{N}]$ とした。

微小変形下で、すべりに伴う方位回転を無視できると仮定すれば、 n 番すべり系のすべり面上の塑性せん断ひずみ増分 $\dot{\gamma}^{(n)}$ によって、結晶粒に生じる塑性ひずみ増分は次式で表される。

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^p = \sum_n \dot{\gamma}^{(n)} P_{ij}^{(n)} \quad P_{ij}^{(n)} = \frac{1}{2} \{ v_i^{(n)} b_j^{(n)} + v_j^{(n)} b_i^{(n)} \} \quad \dots \quad (3)$$

ここで、 $P_{ij}^{(n)}$ は Schmid テンソル。 $v_i^{(n)}$ 、 $b_i^{(n)}$ はすべり面法線方向及びすべり方向の単位ベクトルである。

図 2 に示すように、 $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ の単位ベクトルで構成される結晶座標系と材料座標系 (x , y , z) の関係は、Euler 角 (κ , θ , ϕ) によって表される。座標変換は次式で表される。

$$\begin{pmatrix} [100] \\ [010] \\ [001] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin\theta\cos\phi & \cos\theta \\ \cos\kappa\sin\phi + \cos\theta\sin\kappa\cos\phi & \sin\theta\sin\kappa \\ -\sin\kappa\sin\phi + \cos\theta\cos\kappa\cos\phi & \sin\theta\cos\kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad \dots \quad (4)$$

粒 1 と 2 における Euler 角 (κ , θ , ϕ) を、それぞれ (77.0, 24.705, 77.636) (77.0, 24.705, 257.636) [deg]とする。この時、粒 1 の結晶方位は、主すべり系 $(11\bar{1})[101]$ の $\mathbf{v}^{(9th)}$ が $v_x^{(9th)}=0.7089$ 、 $v_y^{(9th)}=0.7053$ 、 $v_z^{(9th)}=0$ 、 $\mathbf{b}^{(9th)}$ が $b_x^{(9th)}=-0.7053$ 、 $b_y^{(9th)}=0.7089$ 、 $b_z^{(9th)}=0$ となる。粒 2 の結晶方位は、粒 1 を y 軸周りに 180° 回転させた方位となる。この場合、 $v_z^{(9th)}=b_z^{(9th)}=0$ のため、粒 1、2 に生じる塑性ひずみ成分は ε_{xx}^p 、 ε_{yy}^p 、 ε_{xy}^p のみとなる。また、粒 1、2 とも $v_x^{(9th)}b_x^{(9th)}=-0.4999$ 、 $v_y^{(9th)}b_y^{(9th)}=0.4999$ となるため、式(3)より、粒 1、2 における Schmid テンソル $P_{11}^{(9th)}$ 、 $P_{22}^{(9th)}$ の値が等しくなり、粒 1、2 に生じる ε_{xx}^p 、 ε_{yy}^p は等しくなり、モデル A、B ともに『適合条件』式(1)、(2)を満足する。また、粒 1、2 の主すべり系の $\mathbf{v}^{(9th)}$ と $\mathbf{b}^{(9th)}$ は、粒界に関して

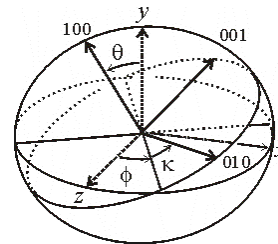


Fig. 2 Definition of Euler angles κ , θ , ϕ

対称となっているため、モデル A, B は寸法、形状が等しい対称双結晶となる。初期転位密度 ρ_0 は 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、上面の全節点に y 軸方向の一樣な強制変位を課し、平均引張りひずみ $\bar{\epsilon}_{yy}$ が 1% になるまで引張った。

3. 解析方法

3.1 有限要素法による変形の解析 すべり系の活性化条件は 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 番目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。

$$\begin{aligned} \theta^{(n)} &= P_{ij}^{(n)} \sigma_{ij} \\ \dot{\theta}^{(n)} &= P_{ij}^{(n)} \dot{\sigma}_{ij} \end{aligned} \quad \dots \dots \dots (5)$$

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。

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}_{ij} &= \dot{\epsilon}_{ij}^e + \dot{\epsilon}_{ij}^p \\ \dot{\epsilon}_{ij}^e &= S_{ijkl}^e \dot{\sigma}_{kl} \end{aligned} \quad \dots \dots \dots (6)$$

ここで、 S_{ijkl}^e は弾性コンプライアンスである。

ひずみ硬化係数を $h^{(nm)}$ とし、ひずみ硬化則が次式、

$$\dot{\theta}^{(n)} = \sum_m h^{(nm)} \dot{\gamma}^{(m)} \quad \dots \dots \dots (7)$$

で表されると仮定すると、弾塑性構成式⁽¹⁰⁾は次式で表される。

$$\dot{\sigma}_{ij} = \left[S_{ijkl}^e + \sum_n \sum_m \{h^{(nm)}\}^{-1} P_{ij}^{(n)} P_{kl}^{(m)} \right]^{-1} \dot{\epsilon}_{kl} \quad \dots \dots \dots (8)$$

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変形を解析する。

3.2 転位密度の解析 変形履歴を受けた材料内部に存在する転位は『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、これらの密度は変形の解析結果であるひずみの増分から計算される。

SS 転位密度の増分 $\dot{\rho}_s^{(n)}$ と塑性せん断ひずみ増分 $\dot{\gamma}^{(n)}$ の関係は次式によって表される⁽⁴⁾。

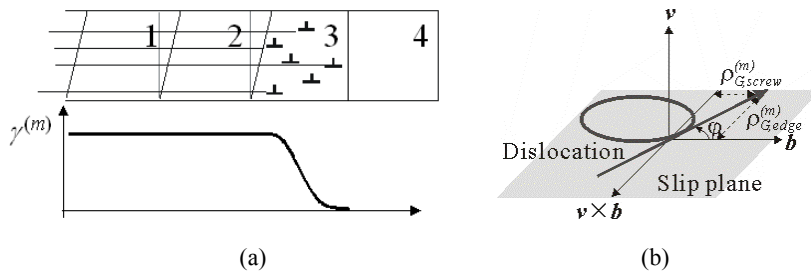


Fig. 3 Schematic illustration of relationship between geometrically necessary dislocations and gradient of plastic shear strain.

$$\dot{\rho}_s^{(n)} = \frac{c \dot{\gamma}^{(n)}}{\tilde{b} L^{(n)}} \quad \dots \dots \dots (9)$$

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。

結晶粒のすべり変形は、転位の運動により生じているため、図 3 (a) に示すように、転位が通過した領域には、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。したがって、塑性せん断ひずみ $\gamma^{(m)}$ 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⁽¹⁾。

転位線の方向がすべり方向に垂直なものを刃状転位、すべり方向に平行なものをらせん転位と呼ぶことから、図 3 (b) に示すように、 $\gamma^{(m)}$ の空間勾配に関して、すべり方向の成分を刃状転位密度成分 $\rho_{G,edge}^{(m)}$ 、すべり方向に垂直な方向の成分をらせん転位密度成分 $\rho_{G,screw}^{(m)}$ と呼ぶ。GN 転位密度ノルム $\|\rho_G^{(m)}\|$ は $\rho_{G,edge}^{(m)}$ と $\rho_{G,screw}^{(m)}$ により、次式で表される⁽⁵⁾。

$$\begin{aligned} \|\rho_G^{(m)}\| &= \sqrt{(\rho_{G,edge}^{(m)})^2 + (\rho_{G,screw}^{(m)})^2} \\ \rho_{G,edge}^{(m)} &= -\frac{1}{\tilde{b}} \frac{\partial \gamma^{(m)}}{\partial \xi^{(m)}} \\ \rho_{G,screw}^{(m)} &= \frac{1}{\tilde{b}} \frac{\partial \gamma^{(m)}}{\partial \zeta^{(m)}} \end{aligned} \quad \dots \dots \dots (10)$$

ここで、 ξ および ζ は、すべり面上のすべり方向に平行な方向と垂直な方向である。このように、GN 転位密度は $\gamma^{(m)}$ の空間勾配から求められるため、評価される量には寸法依存性がある。

3.3 変形履歴と寸法効果の評価方法⁽⁴⁾ 変形履歴を受けたすべり系の臨界分解せん断応力 $\theta^{(n)}$ は、修正 Bailey-Hirsch の式より、次のように表される。

$$\theta^{(n)} = \theta_0(T) + \sum_{m=1}^{12} a \mu \tilde{b} \Omega^{(nm)} \sqrt{\rho_s^{(m)}} \quad \dots \dots \dots (11)$$

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 程度の数値、 μ はせん断弾性係数、 $\Omega^{(nm)}$ は相互作用行列⁽⁴⁾である。相互作用行列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して及ぼす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の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' および R_4 で表すことができる。ここでは、等方硬化を想定し、 $R_1 = R_2 = R_3 = R_3' = R_4 = 1.01$ 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。

$$h^{(nm)} = \frac{1}{2} \frac{ac\mu\Omega^{(nm)}}{L^{(m)}\sqrt{\rho_S^{(m)}}} \dots\dots\dots (12)$$

式(9), (12)における平均自由行程 $L^{(n)}$ の計算方法には、塑性せん断ひずみに依存する Seeger モデル⁽¹¹⁾、多重すべりを考慮した修正 Seeger モデル⁽⁴⁾、転位密度依存型モデル⁽⁴⁾等、多数のモデルが提案されている。ここで、転位密度依存型モデルは、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概念に基づいており、状態量である転位密度に依存した形で表されている。ここでは、 $L^{(n)}$ に SS 転位と GN 転位が寄与する次のモデル⁽³⁾を用いる。

$$L^{(n)} = \frac{c^*}{\sqrt{\sum_m \omega^{(nm)} (\rho_S^{(m)} + \|\rho_G^{(m)}\|)}} \dots\dots\dots (13)$$

ここで、 c^* は材料定数で 1~100 程度の値⁽¹²⁾で、本報告では $c^*=1, 15, 100$ とした。 $\omega^{(nm)}$ は重み行列⁽²⁾⁽⁴⁾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' および w_4 で表すことができる。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は運動転位の捕捉に寄与しないと考慮して $w_0 = w_1 = 0, w_2 = w_3 = w_3' = w_4 = 1.0$ とした。

寸法依存性をもつ GN 転位密度が $L^{(n)}$ に寄与することにより、SS 転位の蓄積 (式(9)参照) に GN 転位が関与する。結果的に、臨界分解せん断応力、ひずみの硬化特性に寸法効果が発生する (式(11), (12)参照)。

3・4 増分解析 本解析は、3・1 節で述べた有限要素法による変形の解析、3・2 節で述べた転位密度の計算、3・3 節で述べたひずみ硬化の評価の三つの部分から構成されている。最初、弾性コンプライアンスと結晶方位から弾性変形の構成式を決定し、境界条件に応じた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、初期転位密度など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。変形の進行に伴って、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、本解析はすべり系の活動開始と停止毎に時間ステップを区切って増分解析を行っており、SS 転位密度 $\rho_S^{(m)}$ と GN 転位密度ノルム $\|\rho_G^{(m)}\|$ が、次の時間ステップにおける構成式を決定する内部状態変数となっている。

4. 解析結果と考察

4・1 応力-ひずみ関係 モデル A, B における全要素の垂直応力 σ_{yy} の平均値 $\bar{\sigma}_{yy}$ と、これの標準偏差 S の変化を図 4 に示す。 $\bar{\sigma}_{yy}$ に関しては、図 4 (a), (b) に示すように、モデル A と B の結果の相違は極めて僅かで、図から判別できない程度である。すなわち、モデル A と B の巨視的な機械的性質はほぼ等しい。何れの結果からも c^* の値が小さい程、ひずみ硬化が大きいこと、寸法 l による結果の相違は図から判別できない程度であることがわかる。

標準偏差 S に関しては、図 4 (c), (d) に示すように、モデル A と B で結果が異なっており、モデル A では c^* の値、寸法 l に関わらず、変形後も S が 0 に保たれており、モデル内部の応力分布が均一である。一方、モデル B では、変形初期の段階から平均引張りひずみ $\bar{\epsilon}_{yy}$ の増加に伴い S が発展しており、モデル内部に不均一な応力場が発生していることがわかる。

モデル B における不均一な応力場の発展は c^* の値に依存して結果が異なっており、 c^* の値が小さい程、不均一性の発達が悪化に生じる。 c^* の値が 1 の場合、寸法 l に関わらず、 S がほぼ線形的に発展している。 c^* の値が 15, 100 の場合、寸法 l に依存して結果が異なっており、寸法 l が 2000 μm , 200 μm の結果では、変形の進行に伴って S の発展が緩和されているが、寸法 l が 20 μm の結果では、 S が線形的に発展している。すなわち、寸法が小さい程、変形の進行に伴って、モデル内部の応力分布状態の不均一性が発展していることがわかる。

4・2 SS および GN 転位密度の発展 モデル A, B の全要素の主すべり系に堆積した SS 転位密度 $\rho_S^{(gh)}$ の平均値 $\bar{\rho}_S^{(gh)}$ と GN 転位密度 $\|\rho_G^{(gh)}\|$ の平均値 $\|\bar{\rho}_G^{(gh)}\|$ の発展を図 5 に示す。 $\bar{\rho}_S^{(gh)}$ に関しては、図 5 (a)~(c) に示すようにモデル A, B とともに平均引張りひずみ $\bar{\epsilon}_{yy}$ の増加に伴って線形的に増加している。 $\bar{\rho}_S^{(gh)}$ は材料定数 c^* の値に依存してオーダが異なり、 c^* の値が小さい程、オーダが高くなっている。モデル A と B での結果の相違、寸法による結果の相違は、極めて僅かであり、図から判別できない程度である。

$\|\bar{\rho}_G^{(gh)}\|$ に関しては、図 5 (d)~(f) に示すように、モデル A と B で結果が異なっている。モデル A では、寸法 l, c^* の値に関わらず、変形後も GN 転位が発生していない。これはモデル A が均一に変形していることを示している。一方、モデル B は、変形初期の段階から GN 転位が発生しており、平均引張りひずみ $\bar{\epsilon}_{yy}$ の増加に伴って密度が高くなっている。

対称双結晶の引張りに伴う不均一変形と
GN 転位帯形成の結晶塑性解析

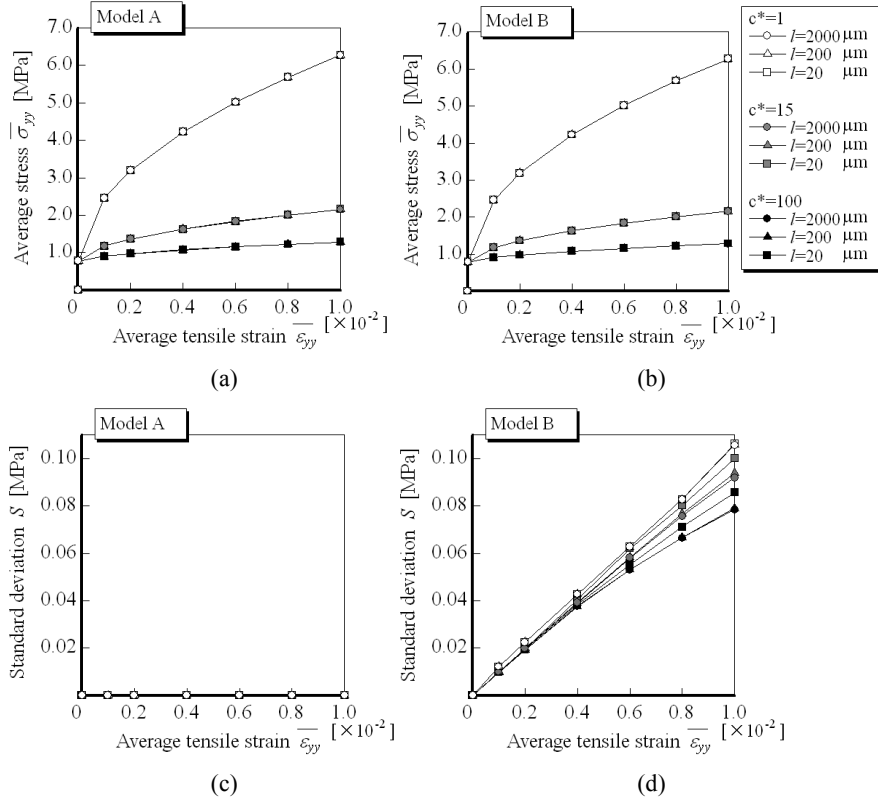


Fig. 4 (a), (b), Averaged value of normal stress $\bar{\sigma}_{yy}$, and (c), (d), its standard deviation S during tensile deformation.

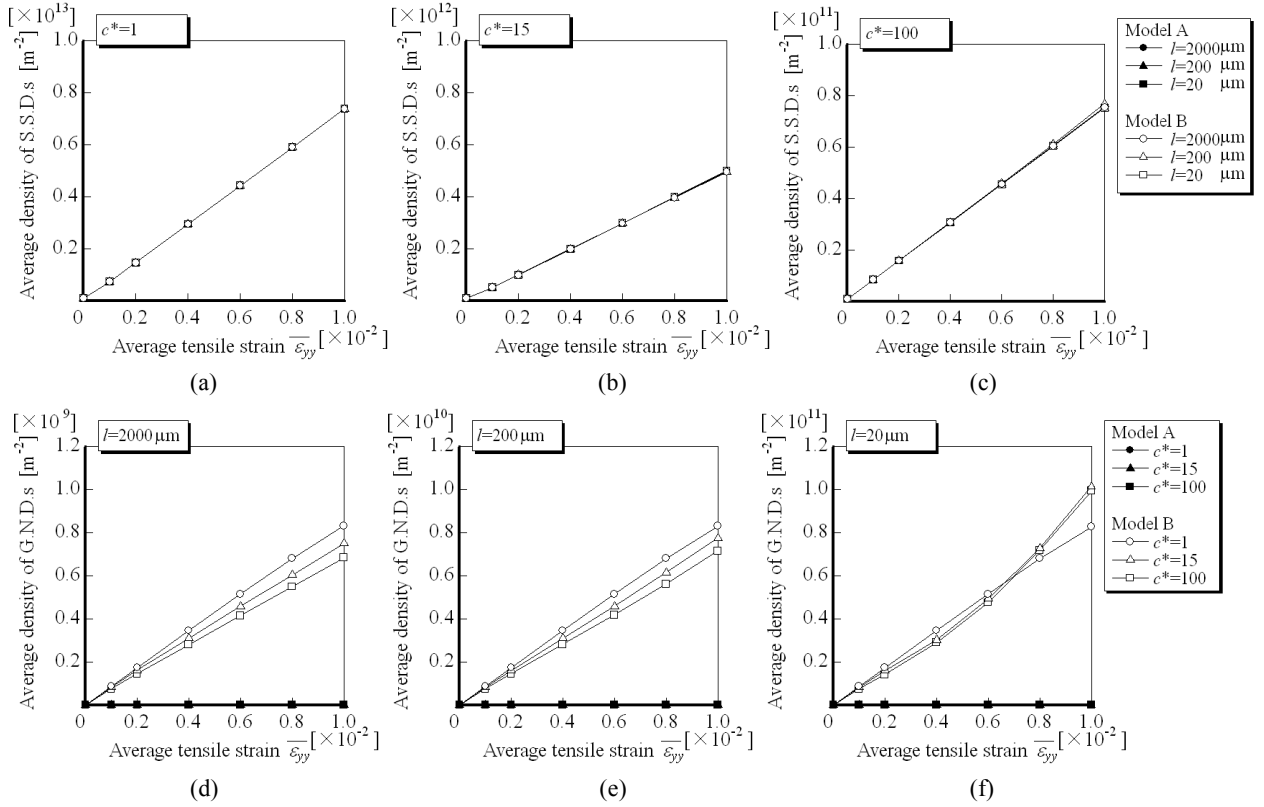


Fig. 5 (a), (b), (c), Average density of statistically stored dislocations on primary slip system $\bar{\rho}_s^{(9th)}$ and (d), (e), (f), Density of norm of geometrically necessary dislocations on primary slip system $\|\bar{\rho}_G^{9th}\|$ during tensile deformation.

モデル B に発生した GN 転位の密度には寸法依存性があり、寸法 l が小さい程、オーダが高くなる。 c^* の値との関係については、寸法 l が $2000\mu\text{m}$, $200\mu\text{m}$ の場合、図 5 (d), (e) に示すように、変形の進行に伴って線形的に増加しており、 c^* の値が小さい程、傾きが大きい。寸法 l が $20\mu\text{m}$ の場合、図 5 (f) に示すように、 c^* の値に依存して増加傾向が異なっている。

l が $20\mu\text{m}$ で c^* の値が 15, 100 の場合 (図 5 (f)), $\bar{\varepsilon}_{yy}$ が 0.4% 以降、急激な転位密度の上昇を示している。GN 転位密度には寸法依存性があり、SS 転位密度は c^* の値に強く依存するため、寸法 l が小さく、 c^* の値が大きい解析条件下では、GN 転位密度のオーダが SS 転位密度のオーダに達する場合がある (図 5 (b), (c), (f))。この場合、運動転位の平均自由行程 $L^{(n)}$ に対する GN 転位密度の寄与が顕著に現れ、GN 転位が堆積していた領域で、運動転位が停止し易くなる。運動転位が停止した場所には、塑性せん断ひずみの空間

勾配が生じるが、これは GN 転位に他ならない。このため、GN 転位密度が急激に上昇したと考えられる。

4・3 GN 転位の密度分布 GN 転位が変形初期の段階から発生していたモデル B に関して、平均引張りひずみ $\bar{\varepsilon}_{yy}$ が 0.1% の段階における GN 転位密度ノルム $\|\rho_G^{(gh)}\|$ の分布を図 6 に示す。GN 転位はモデル上面と粒界の交線近傍から結晶粒の内部方向に発達した帯状の領域に高密度に堆積する構造を形成している。すなわち、『GN 転位帯』を形成していることがわかる。なお、寸法 l , 材料定数 c^* の値に関わらず、『GN 転位帯』が形成された場所や発達方向は同じである。

平均引張りひずみ $\bar{\varepsilon}_{yy}$ が 1% になるまで引張った後における GN 転位密度のノルム $\|\rho_G^{(gh)}\|$ の分布を図 7 に示す。図 6 と 7 から明らかのように、本解析条件下では、変形が進行しても『GN 転位帯』の形成場所や発達方向は変化しておらず、新たな『GN 転位帯』も形成されていない。

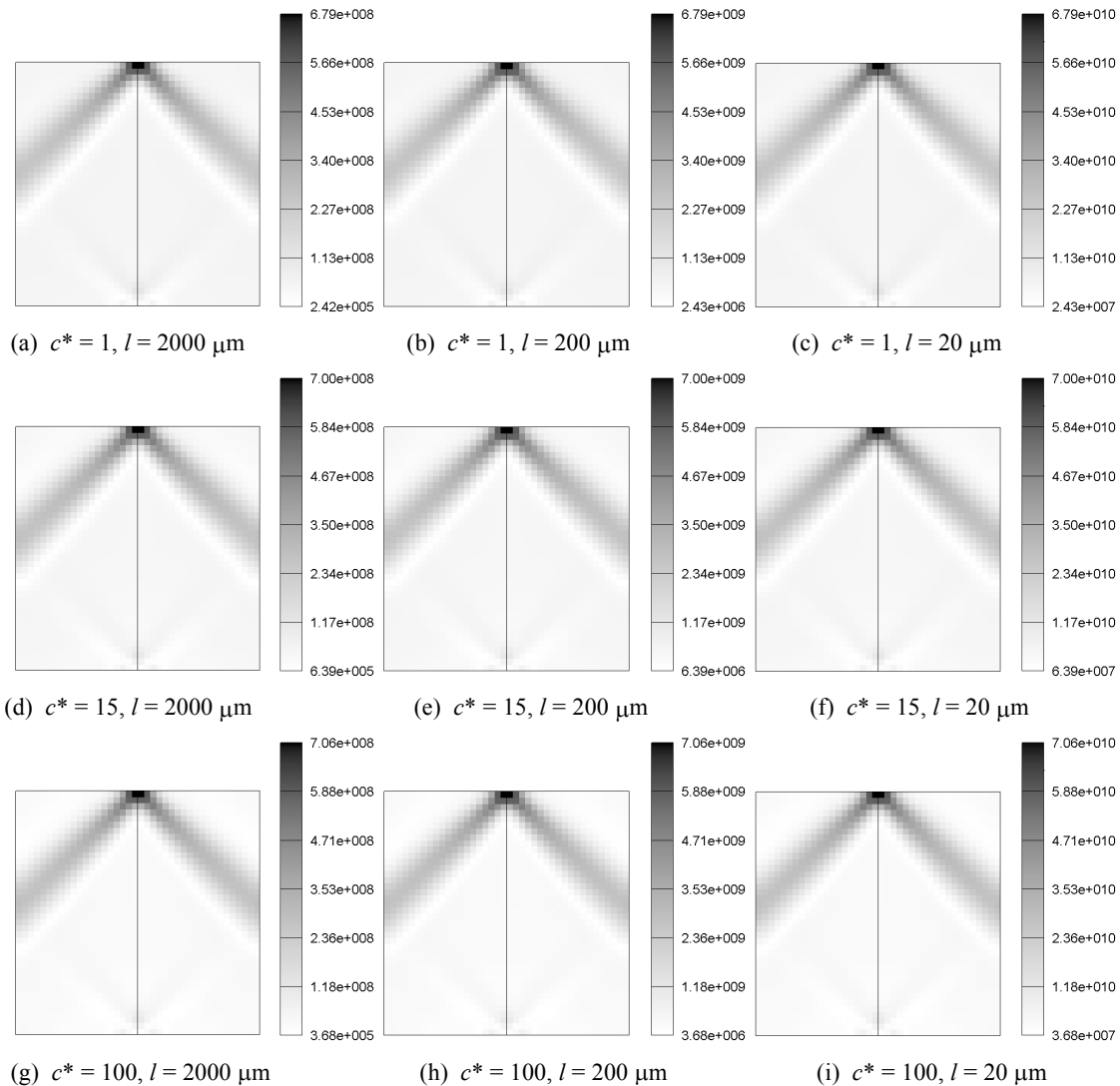


Fig. 6 Density distribution of norm of geometrically necessary dislocations when $\bar{\varepsilon}_{yy} = 0.1\%$. Unit of dislocation density is m^{-2}

c^* の値が 15, 寸法 l が 200 μm のモデルに平均引張りひずみ $\bar{\varepsilon}_{yy}$ が 0.1%生じた段階における 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 $\rho_{G,screw}^{(9th)}$ の分布を図 8 (a), (b)に示す. これらの様相と密度を比較すると, 図 6, 7 で見られた『GN 転位帯』が, ほぼ完全な刃状転位で形成されていることがわかる.

4・4 結晶粒の力学的境界条件とすべりの制約の関係
 c^* の値が 15, 寸法 l が 200 μm のモデルに平均引張りひずみ $\bar{\varepsilon}_{yy}$ が 0.1%生じた段階と, 1%まで引張った後における塑性せん断ひずみ $\gamma^{(9th)}$ の分布を図 9 (a), (b)に示す. 変形が進行しても変形場の構造 (ひずみの集中箇所など) が変化していないことがわかる. このため, $\gamma^{(9th)}$ の空間勾配である GN 転位密度は, 変

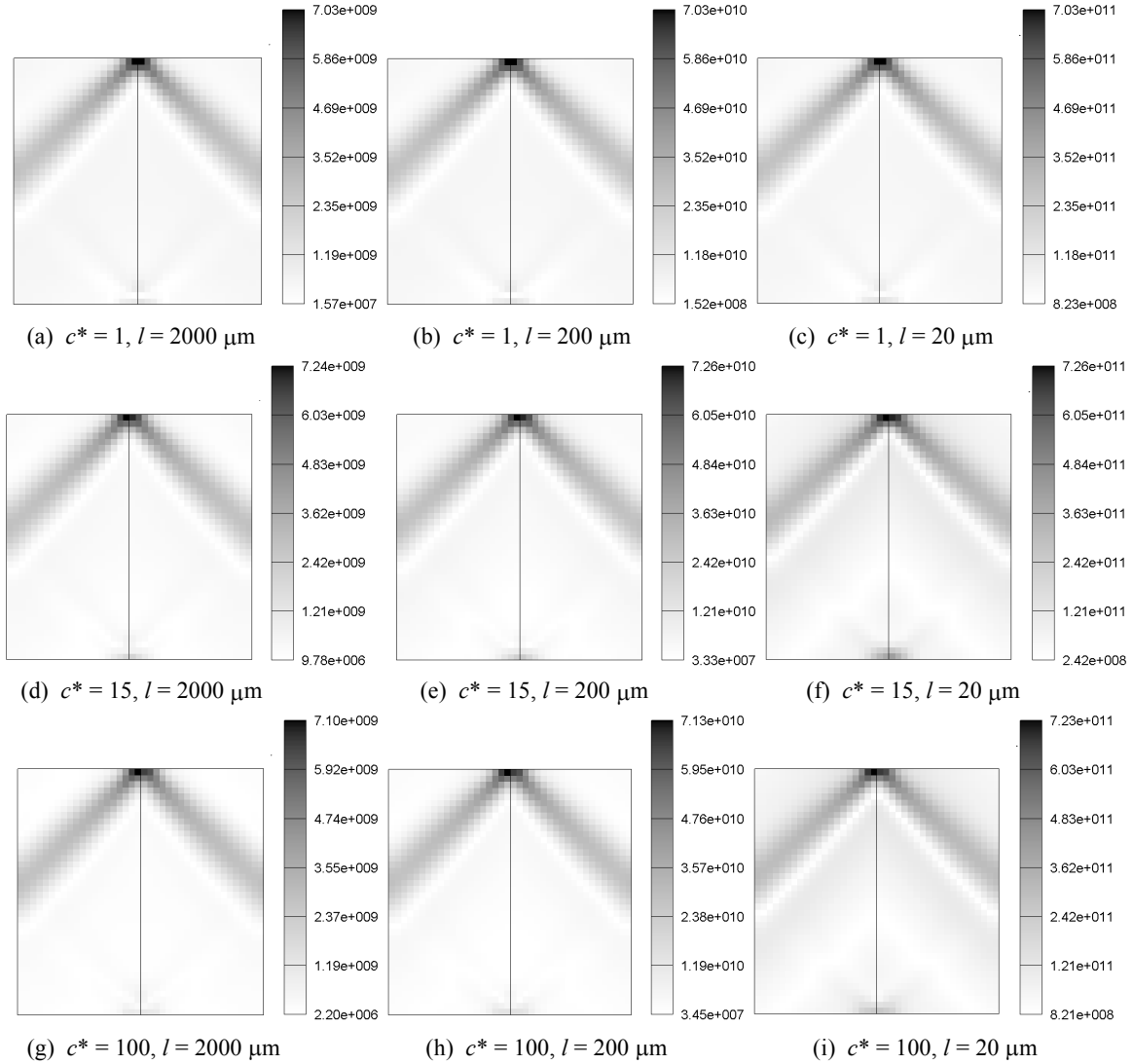


Fig. 7 Density distribution of norm of geometrically necessary dislocations when $\bar{\varepsilon}_{yy} = 1\%$. Unit of dislocation density is m^{-2}

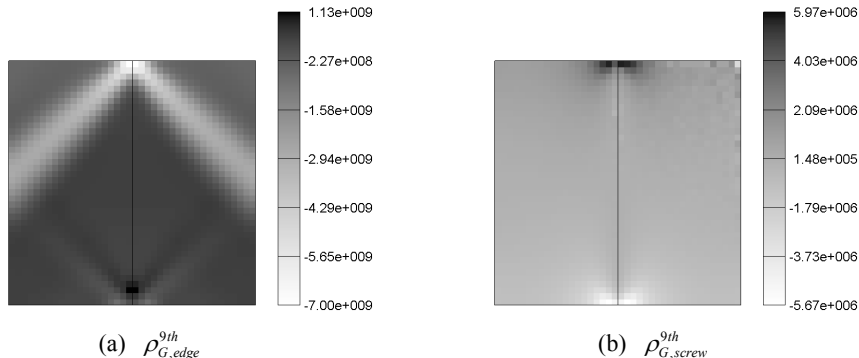


Fig. 8 Density distribution of edge and screw components of geometrically necessary dislocations when $\bar{\varepsilon}_{yy} = 0.1\%$, $l = 200\mu\text{m}$, $c^* = 15$. Unit of dislocation density is m^{-2}

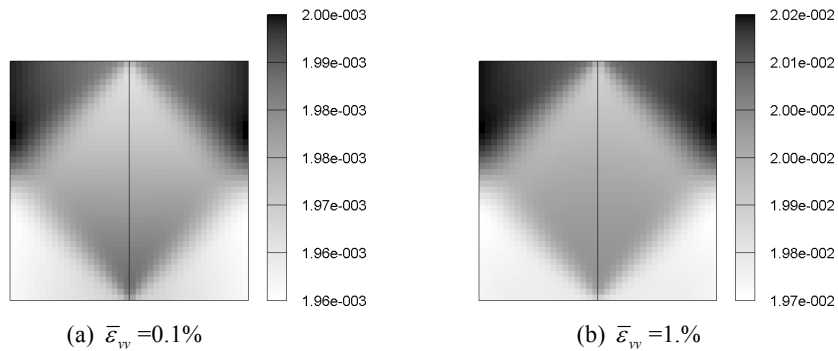


Fig. 9 Distribution of slip strain $\gamma^{(sl)}$ on primary slip system $l = 200\mu\text{m}$, $c^* = 15$.

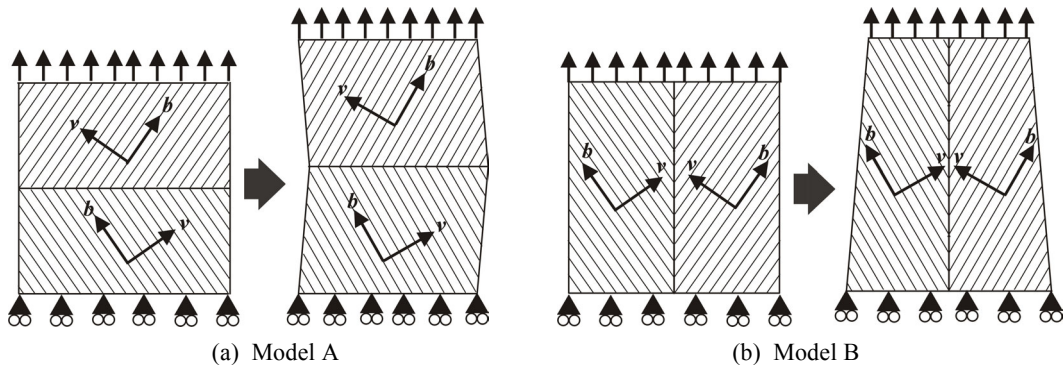


Fig. 10 Schematic illustration of constriction condition of slip deformation under tensile deformation.

形が進行しても、密度が上昇するだけで、構造は変化しないことがわかる。また、この結果から、『GN 転位帯』が粒界面とモデル上面の交線近傍から発生することは、初期条件の設定段階で決まっていたと考えられる。この場合、引張り変形を与えるため、モデルの上、底面に課した（強制変位と変位拘束の）境界条件と初期結晶方位が関与していると考えられる。

図 10 (a), (b)に、モデル A, B に強制引張り変位を与えた場合に生じるすべり変形を模式的に示す。モデル A はモデル側面が自由表面で、主すべり系のすべりに如何なる制約も働かないため、図 10 (a) に示すように、二つの結晶粒は平行六面体に均一に変形することができる。このため、変形が進行した段階でも GN 転位が発生しなかったと考えられる。

一方、モデル B では、図 10 (b) に示すように、変形後もモデル上、底面と粒界面は直交関係を維持するために、二つの結晶粒は平行六面体に変形できない。主すべり系のすべりに伴う形状変化がモデル上、底面と粒界面によって拘束され、主すべり系の自由なすべりが抑制される。このため、GN 転位が発生すると共に『GN 転位帯』が形成されたと考えられる。

以上のことから、『適合型』の対称双結晶でも、負荷の加え方によって、主すべり系のすべりに働く制約が異なり、すべりが制約される場合、不均一変形が生じると共に GN 転位が堆積し、『GN 転位帯』が形成されることがわかった。

5. 結 言

『適合型』の対称双結晶の引張りに伴う変形と転位蓄積の結晶塑性解析を行い、『GN 転位帯』の形成に関して検討した結果を以下に述べる。

- (1) 『適合型』の対称双結晶でも、外部からの負荷の加え方に依存して、不均一な変形を呈し、モデル内部に『GN 転位帯』を形成することがある。
- (2) 『GN 転位帯』の発生原因は、結晶粒界を通して結晶粒相互に働く変形拘束ではなく、課せられた力学的境界条件によって、主すべり系の自由なすべりに制約が働いたことが原因と考えられる。

参考文献

- (1) Ashby, M. F., *Acta Metall.*, **21** (1970), 399
- (2) 大橋鉄也, 第 180・181 回西山記念技術講座, 微視組織から材質予測へ—計算力学的アプローチ— (2004), 日本鉄鋼協会
- (3) Ohashi, T., *IUTAM Symposium on Mesoscopic Dynamics of Fracture Process and Materials Strength* (2004), 97
- (4) Ohashi, T., *Phil. Mag. A*, **70** - 5 (1994), 793
- (5) Ohashi, T., *Phil. Mag. Lett.* **75** - 2 (1997), 51
- (6) Fleck, N. A., Muller, G. M., Ashby, M. F., Hutchinson, J. W., *Acta Metall. Mater.*, **42** (1994), 475
- (7) Livingston, J. D. and Chalmers, B., *Acta Met.*, **5** (1957) 322
- (8) Hauser, J. J. and Chalmers, B., *Acta Met.*, **9** (1961) 802
- (9) Hook, R. E. and Hirth, J. P., *Acta Metall.*, **15** (1967) 535
- (10) Hill, R., *J. Mech. Phys. Sol.*, **14** (1966), 95
- (11) Seeger, A., Diehl, J., Mader, S. and Rebsock, H., *Phil. Mag., Ser. 8*, **2** (1957), 323
- (12) Kuhlmann-Wilsdorf, D., *Mat. Sci. Eng.*, **A113** (1989) 1