

# 対称双結晶の引張りに伴う GN 転位の構造形成と

## すべり系の局所的なひずみ硬化の関係\*

近藤了嗣\*<sup>1</sup> 大橋鉄也\*<sup>2</sup>

### Relationship between Formation of Geometrically Necessary Dislocations and Local Strain Hardening of Slip Systems in Symmetric type Bicrystals under Tensile Loading

Ryouji KONDOU\*<sup>3</sup> Tetsuya OHASHI

\*3 Material Science and Processing Engineering, Department of Mechanical System Engineer,  
Faculty of Engineering, University of the Ryukyus  
1 Senbaru, Nishihara-cho, Nakagami-gun, Okinawa, 903-0213 Japan

Slip deformation in symmetric-type bicrystal models subjected to tensile load 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. Some results of the analysis show local strain hardening of slip systems and activity of secondary slip systems with accumulation of GNDs on primary slip system in the form of band. Mechanism of local strain hardening of primary slip systems in symmetric-type bicrystals is discussed from the viewpoint of dislocation interaction between primary and secondary slip systems and effects of high density pattern formation of GNDs on primary slip system.

*Key Words:* Crystal Plasticity Analysis, Geometrically Necessary Dislocation, Strain Hardening, Symmetric type Bi-crystal, Compatibility, Schmid Tensor

## 1. 緒 言

金属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に、粒界近傍に不均一変形が生じる共に『幾何学的に必要な転位』(GN 転位: geometrically necessary dislocation)<sup>(1)</sup>が堆積する。このことから、従来、多結晶に生じる不均一変形と GN 転位の堆積の原因は、弾性異方性の効果<sup>(2)</sup>やすべり変形の異方性の効果によって、粒界を通して結晶粒相互に働く変形拘束が主要なものと考えられてきた。

著者等は、粒界を通して結晶粒相互に変形拘束が働かない条件、所謂、粒界におけるひずみの『適合条件』<sup>(3)(4)</sup>を満足する対称双結晶の引張変形の結晶塑性解析を行い、対称双結晶でも負荷の与え方によって、

不均一変形が生じると共に、結晶粒内部方向に発達した帯状の領域に、GN 転位が高密度に堆積する(このように GN 転位が堆積する構造を『GN 転位帯』と呼んだ。)場合があることを既報<sup>(5)</sup>で述べた。このことから、金属多結晶に生じる不均一変形と GN 転位の発生、及び、GN 転位の構造形成の原因が、必ずしも、粒界を通して結晶粒相互に働く変形拘束だけとは限らないことが明らかとなり、負荷条件、粒界面、自由表面等、境界条件が結晶粒のすべり変形に及ぼす影響を評価する必要性が示された。

結晶粒に不均一変形が生じると、微視的な応力集中が発生し、主応力方向が負荷方向から外れ、主すべり系、二次すべり系における実効的な Schmid 因子の増減を招く<sup>(6)</sup>。また、GN 転位は、正負の不均衡性から、正負が対になった転位よりも、応力の減衰が小さく、長範囲に及ぶ内部応力場(背応力)を形成する<sup>(7)</sup>。従って、『GN 転位帯』のように、結晶粒内の局所的な領域に、GN 転位が高密度に堆積する構造を形成する

\* 原稿受付 2005年2月14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-ryukyuu.ac.jp

場合、後の変形挙動に極めて重要な影響を及ぼすと考えられる。

本報告では、対称双結晶の引張変形に伴う『GN 転位帯』の構造形成に関して、これの評価方法と、後の変形状態に及ぼす影響を明らかにするために、初期結晶方位が異なる種々の対称双結晶の引張変形の結晶塑性解析を行い、GN 転位密度分布の変化に関して、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  $\sigma_{ij}$  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。

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

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  $\dot{\epsilon}_{ij}$  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。

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

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、

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

で表されると仮定すると、弾塑性構成式<sup>(8)</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** 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>。

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

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。

結晶粒のすべり変形は、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、すべりが生じていない。従って、 $\dot{\gamma}^{(m)}$  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>(1)</sup>。

すべり面上におけるすべり方向を  $\xi$ 、すべり方向に垂直な方向を  $\zeta$  と表し、 $\dot{\gamma}^{(m)}$  の空間勾配に関して、すべり方向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成分をらせん転位密度成分  $\rho_{G,screw}^{(m)}$  とすると、GN 転位密度のノルム  $\|\rho_G^{(m)}\|$  は次式で表される<sup>(10)</sup>。

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

**2.3 変形履歴の評価方法** 変形履歴を受けた面心立方晶における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。

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

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 程度の数値、 $\mu$  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、 $R_4$  で表すことができる。ここでは、等方硬化を仮定し、 $R_1 = R_2 = R_3 = R_3' = R_4 = 1.01$  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、蓄積転位が作る等方均質な『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。

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

式(5), (8)における運動転位の平均自由行程  $L^{(n)}$  の計算方法には, SS 転位と GN 転位が寄与する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が運動転位の捕捉に寄与しないと考え,  $w_0=w_1=0, w_2=w_3=w_3'=w_4=1.0$  とした.

寸法依存性を持つ GN 転位密度が  $L^{(n)}$  に寄与するため, SS 転位の蓄積 (式(5)参照) に GN 転位が関与し, 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(7), (8)参照).

**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, 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, 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.

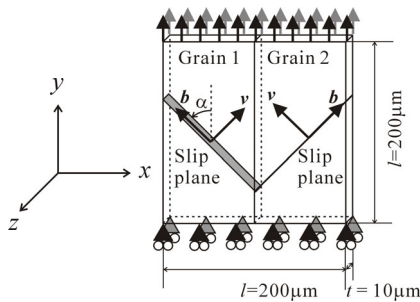


Fig. 1 Geometry and boundary condition for the models employed in this study

### 3. モデル

解析モデルは, 図 1 に示す対称双結晶で一辺の長さ  $l$  が  $200\mu\text{m}$ , 厚さ  $t$  が  $10\mu\text{m}$  となっている. 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 3200 である.

双結晶の粒 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』<sup>(3)(4)</sup>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. この場合, 次式で与えられる.

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

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) 成分であり, 右肩の添え字は結晶粒番号である.

材料は仮想的な面心立方晶金属とし, 弾性異方性の効果<sup>(2)</sup>による弾性不適合応力が生じないように, 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  $S_{11}=1.0 \times 10^{-11}$ ,  $S_{12}=-0.25 \times 10^{-11}$ ,  $S_{44}=2.5 \times 10^{-11} [\text{m}^2/\text{N}]$  とした.

$[100], [010], [001]$  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, 図 2 に示す Euler 角  $(\kappa, \theta, \phi)$  によって定義される. なお, Euler 角の定義の仕方は, 何種類かあるので注意を要する. Euler 角により, 材料座標系と結晶座標系間の座標変換行列は, 次式で与えられる.

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

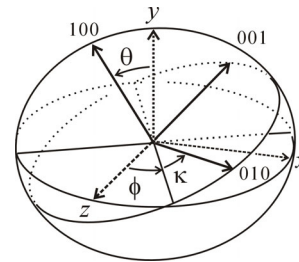


Fig. 2 Definition of Euler angles  $\kappa, \theta$  and  $\phi$

粒 1 の初期結晶方位は、表 1 に示す 11 通りの方位とし、粒 2 の初期結晶方位は、粒 1 を  $y$  軸周りに  $180^\circ$  回転させた方位とした。これらの方位は主すべり系  $(11\bar{1})[101]$  に関して、 $v_z^{(9th)} = b_z^{(9th)} = 0$  で、すべり方向  $\mathbf{b}^{(9th)}$  と負荷方向のなす角度  $\alpha$  が  $44^\circ \sim 46^\circ$  となる。この場合、主すべり系  $(11\bar{1})[101]$  の Schmid 因子の値は、ほぼ 0.5 となり、微小変形下では、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。

$v_z^{(9th)} = b_z^{(9th)} = 0$  であるので、粒 1, 2 における Schmid テンソル  $P_{33}^{(9th)}$ ,  $P_{23}^{(9th)}$ ,  $P_{31}^{(9th)}$  の値は 0 となり、粒 1, 2 に生じる塑性ひずみ成分  $\varepsilon_{xx}^p$ ,  $\varepsilon_{yy}^p$ ,  $\varepsilon_{zz}^p$  は 0 となる (式(2)参照)。また、粒 2 の方位は、粒 1 を  $y$  軸周りに  $180^\circ$  回転させた方位であるため、粒 1 と 2 で、 $v_x^{(9th)}$  と  $b_x^{(9th)}$  の符号が逆になるだけで、 $v_y^{(9th)}$  と  $b_y^{(9th)}$  の値は等しく、 $P_{22}^{(9th)}$  の値は等しくなり、粒 1, 2 に生じる  $\varepsilon_{yy}^p$  が等しくなり、適合条件式(10)を満足する。

初期転位密度  $\rho_0$  は  $1.0 \times 10^9$  [m<sup>-2</sup>] 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  $\bar{\varepsilon}_{yy}$  が 1% になるまで引張った。

#### 4. 解析結果と考察

**4・1 初期結晶方位による『GN 転位帯』の相違** 我々は既報<sup>(5)</sup>で、対称双結晶に強制変位による引張りを与えた場合、適合条件を満足していても、不均一変形が生じると共に、モデル上面 (或いは、底面) と粒界面の交点付近から、結晶粒内部方向に発達した帯状の領域に、GN 転位が高密度に堆積する場所があることを示した。この GN 転位構造を『GN 転位帯』と呼ぶ。この場合、『GN 転位帯』は、結晶粒の寸法やひずみの硬化特性に関わらず形成され、ほぼ完全な刃状転位密度成分  $\rho_{G,edge}^{(9th)}$  により構成される<sup>(5)</sup>。本報告では、初期結晶方位 (角度  $\alpha$ ) による『GN 転位帯』の相違を述べると共に、これの評価方法を述べる。

平均引張りひずみ  $\bar{\varepsilon}_{yy}$  が 0.01% の段階における主すべり系  $(11\bar{1})[101]$  の GN 転位の刃状転位密度成分  $\rho_{G,edge}^{(9th)}$  の分布を図 3 に示す。なお、このひずみ段階までは、何れの場合も、主すべり系の単一すべりによりモデルが変形していることを確認している。ここでは、初期結晶方位 (角度  $\alpha$ ) による『GN 転位帯』の相違を比較するために、GN 転位密度の表示範囲を  $-2.5 \times 10^9 \sim 2.5 \times 10^9$  [m<sup>-2</sup>] に固定してある。

角度  $\alpha$  が  $45^\circ$  の場合 (図 3 (f))、GN 転位が発生せず、角度  $\alpha$  が  $45^\circ$  から外れた場合、 $45^\circ$  から低角度側 (図 3 (a)~(e))、高角度側 (図 3 (g)~(k))、何れの場合も、モデル上面と粒界面の交点付近から、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構造、すなわち、『GN 転位帯』を形成する。『GN 転位帯』の密度と符号は、角度  $\alpha$  に依存して結果が異なっており、角度  $\alpha$  が  $45^\circ$  から離れるに従い、堆積する転位密度が高くなっていることがわかる。また、 $45^\circ$  から低角度側 (図 3 (a)~(e)) と、高角度側 (図 3 (g)~(k)) で『GN 転位帯』を形成する GN 転位の符号が逆になっていることがわかる。

**4・2 Schmid テンソルの値と『GN 転位帯』の関係** 対称双結晶モデルの上、底面に一樣変位が生じるように境界条件を課した場合、変形後もモデル上、底面と粒界面が直交関係を維持しなければならないため、主すべり系のすべりによる粒 1, 2 の形状変化がモデル上、底面と粒界面に拘束される。粒 1, 2 の主すべり系のすべりに伴う塑性ひずみ増分  $\varepsilon_{xy}^p$  は Schmid テンソル  $P_{12}^{(9th)}$  の値に依存するため (式(2)参照)、拘束される塑性ひずみ成分も  $P_{12}^{(9th)}$  の値に依存する。 $P_{12}^{(9th)}$  の値と符号は結晶方位に依存し、この場合、角度  $\alpha$  が  $45^\circ$  から低角度側と高角度側で、 $P_{12}^{(9th)}$  の符号が逆になるため (表 1 参照)、角度  $\alpha$  が  $45^\circ$  から低角度側 (図 3 (a)~(e)) と高角度側 (図 3 (g)~(k)) で、『GN 転位帯』を形成した GN 転位の符号も逆になる。

Table 1 Euler angle  $(\kappa, \theta, \phi)$ , angle between slip direction  $\mathbf{b}^{(9th)}$  and tensile loading direction  $\alpha$ , components of slip direction vector  $\mathbf{b}^{(9th)}$ , slip plane normal vector  $\mathbf{v}^{(9th)}$  and value of Schmid tensor  $P_{ij}^{(9th)}$ , ( $v_z^{(9th)} = b_z^{(9th)} = 0$ ,  $P_{33}^{(9th)} = P_{23}^{(9th)} = P_{31}^{(9th)} = 0$ )

$(\kappa, \theta, \phi)$ [deg]	$\alpha$ [deg]	$b_x^{(9th)}$	$b_y^{(9th)}$	$v_x^{(9th)}$	$v_y^{(9th)}$	$P_{11}^{(9th)}$	$P_{22}^{(9th)}$	$P_{12}^{(9th)}$
(74.983, 24.535, 79.470)	44.0	-0.6947	0.7193	0.7193	0.6947	-0.49970	0.49970	0.01745
(75.456, 24.572, 79.040)	44.2	-0.6972	0.7169	0.7169	0.6972	-0.49981	0.49981	0.01396
(75.927, 24.611, 78.611)	44.4	-0.6997	0.7145	0.7145	0.6997	-0.49989	0.49989	0.01047
(76.397, 24.650, 78.183)	44.6	-0.7022	0.7120	0.7120	0.7022	-0.49995	0.49995	0.00698
(76.866, 24.692, 77.757)	44.8	-0.7046	0.7096	0.7096	0.7046	-0.49999	0.49999	0.00349
(77.333, 24.735, 77.333)	45.0	-0.7071	0.7071	0.7071	0.7071	-0.50000	0.50000	0.00000
(77.799, 24.780, 76.910)	45.2	-0.7096	0.7046	0.7046	0.7096	-0.49999	0.49999	-0.00349
(78.263, 24.826, 76.489)	45.4	-0.7120	0.7022	0.7022	0.7120	-0.49995	0.49995	-0.00698
(78.725, 24.873, 76.070)	45.6	-0.7145	0.6997	0.6997	0.7145	-0.49989	0.49989	-0.01047
(79.186, 24.922, 75.652)	45.8	-0.7169	0.6972	0.6972	0.7169	-0.49981	0.49981	-0.01396
(79.645, 24.972, 75.236)	46.0	-0.7193	0.6947	0.6947	0.7193	-0.49970	0.49970	-0.01745

対称双結晶の引張りに伴う GN 転位の  
構造形成と局所的ひずみ硬化の関係

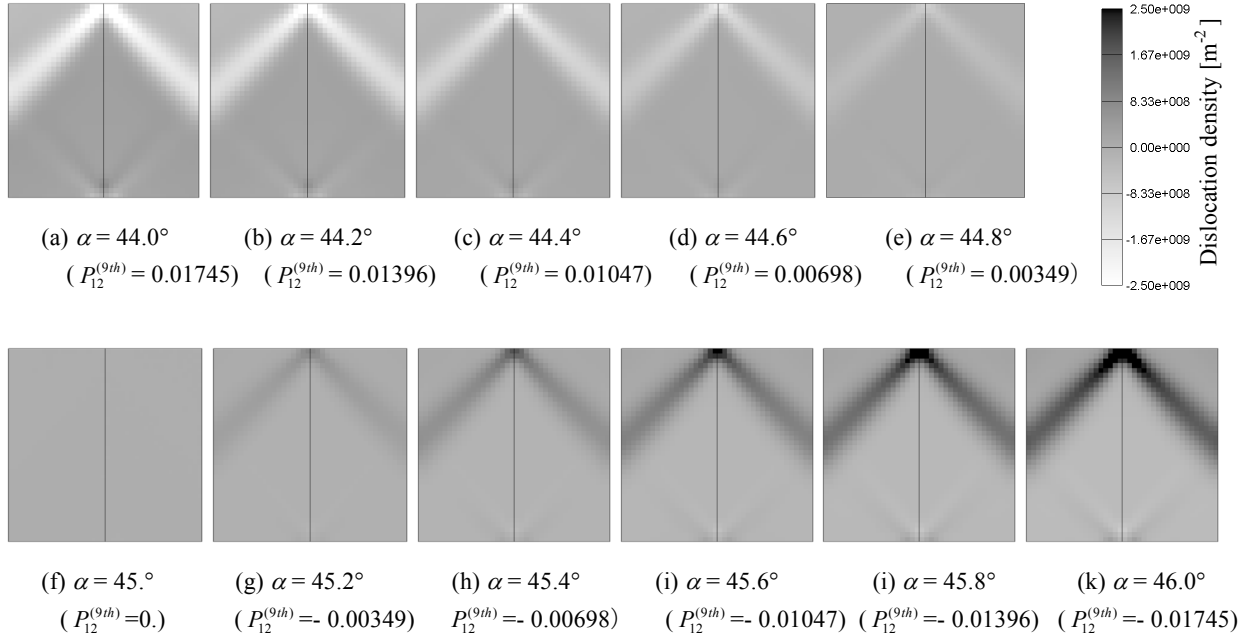


Fig. 3 Density distribution of edge components of geometrically necessary dislocations on primary slip system when average tensile strain  $\bar{\varepsilon}_{yy}$  is 0.01%.

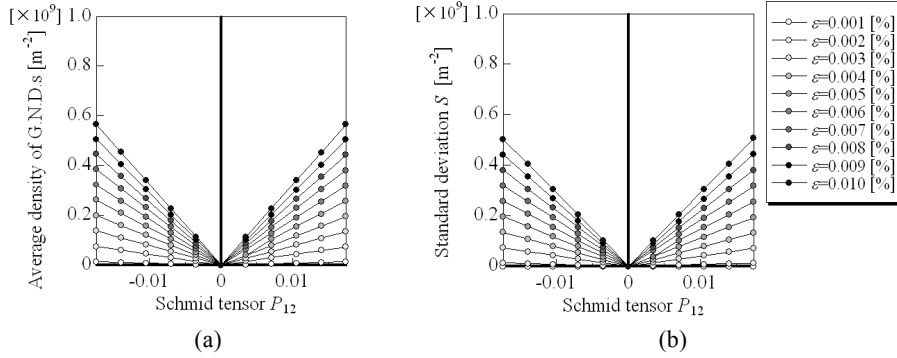


Fig. 4 (a) Averaged value of density of norm of geometrically necessary dislocations and (b) its standard deviation  $S$ , plotted against Schmid tensor  $P_{12}$ .

GN 転位が発生しない場合 (図 3 (f)), 主すべり系の自由なすべりによる粒 1, 2 の形状変化に如何なる拘束も働いていないことを示している. この条件は粒 1, 2 の塑性せん断ひずみ増分  $\dot{\varepsilon}_{yy}^p$  が 0 の時, すなわち,  $P_{12}^{(9th)}$  の値が 0 (角度  $\alpha$  が  $45^\circ$ ) の時に満たされる.

平均引張りひずみ  $\bar{\varepsilon}_{yy}$  が 0.01% までの各ひずみ段階における  $P_{12}^{(9th)}$  の値と GN 転位密度ノルム  $\|\rho_G^{(9th)}\|$  の全要素での平均値  $\|\rho_G^{(9th)}\|$  の関係を図 4 (a), これの標準偏差  $S$  との関係を図 4 (b) に示す.

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間,  $P_{12}^{(9th)}$  の絶対値  $\|P_{12}^{(9th)}\|$  の増加に従って, 堆積する GN 転位密度が, 線形的に高くなっていることがわかる.  $\bar{\varepsilon}_{yy}$  の増加に伴う GN 転位密度の増分も,  $\|P_{12}^{(9th)}\|$  に依存して大きくなることがわかる.

標準偏差  $S$  の値も  $\|P_{12}^{(9th)}\|$  の増加に従い, 線形的に上昇し, GN 転位密度分布の不均一性が発展することが

わかる.  $\bar{\varepsilon}_{yy}$  の増加に伴う  $S$  の発展も,  $\|P_{12}^{(9th)}\|$  に依存して顕著になることがわかる.  $S$  の発展は, 局所的な領域に GN 転位が堆積していること, すなわち, GN 転位の構造形成を意味している. この場合, 『GN 転位帯』を構成する GN 転位密度が, Schmid テンソルの値で評価できることがわかった.

**4-3 『GN 転位帯』とすべり系のひずみ硬化の関係**  
GN 転位は, 正負が不平衡となった転位のため, これを作る応力場は, 正負が対になっている転位を作る応力場より, 減衰が小さく, 長範囲に及ぶ<sup>(7)</sup>. また, すべりが不均一に生じると, 微視的な応力集中が生じ, 主応力軸が負荷方向から外れ, 主すべり系, 二次すべり系の臨界分解せん断応力の増減を招く<sup>(6)</sup>. ゆえに, 『GN 転位帯』のように同符号の GN 転位が局所的な領域に高密度に堆積した場合, 極めて強い内部応力場

対称双結晶の引張りに伴う GN 転位の  
構造形成と局所的ひずみ硬化の関係

を形成すると共に、局所的な領域における二次すべり系が活性化することが考えられる。ここでは、高密度な『GN 転位帯』を形成した角度 $\alpha$ が  $44^\circ$ と  $46^\circ$ のモデルの平均引張りひずみ $\bar{\epsilon}_{yy}$ が 0.1%、及び、1%まで引

張った段階における変形状態の相違を述べる。なお、塑性せん断ひずみと SS 転位密度に関しては、最大値から最小値までを表示し、GN 転位密度に関しては、比較のために、表示範囲を固定する。

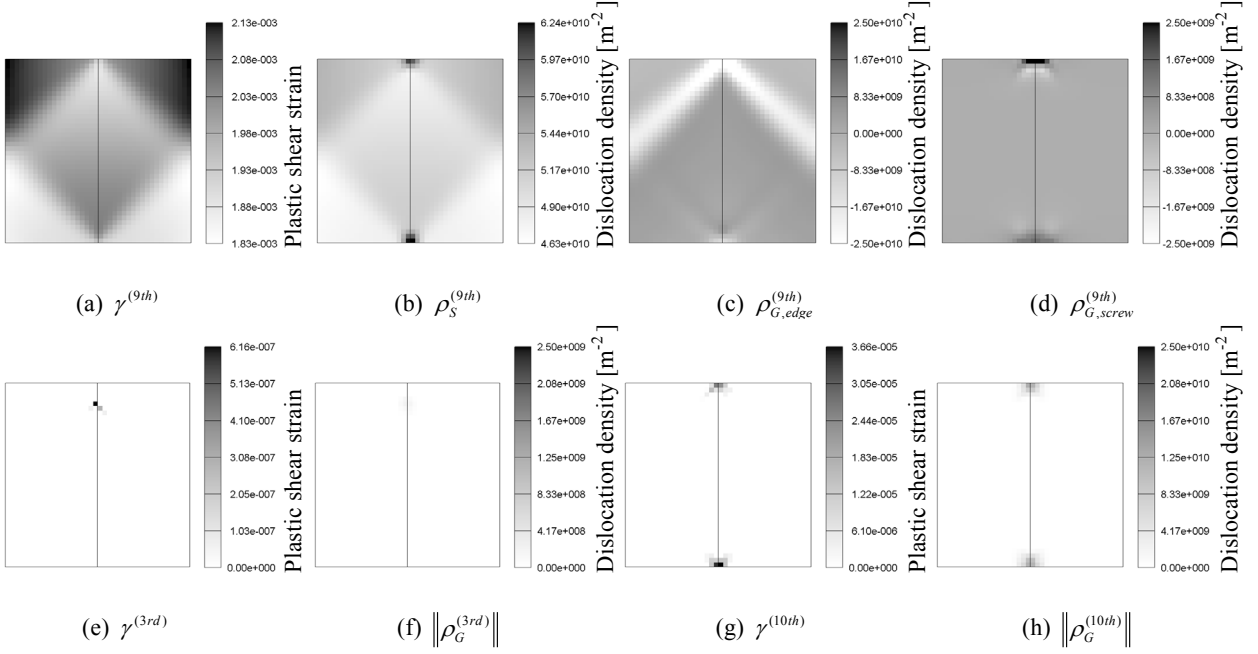


Fig. 5 (a) Distribution of plastic shear strain, (b) density distribution of statistically stored dislocations, (c) edge and (d) screw components of geometrically necessary dislocations on the primary slip system, (e), (g) distribution of plastic shear strain and (f), (h) density of norm of geometrically necessary dislocations on  $(111)[10\bar{1}]$  and  $(\bar{1}\bar{1}1)[110]$  slip systems when the average tensile strain  $\bar{\epsilon}_{yy}$  is 0.1% at the bicrystal model of  $\alpha = 44^\circ$ .

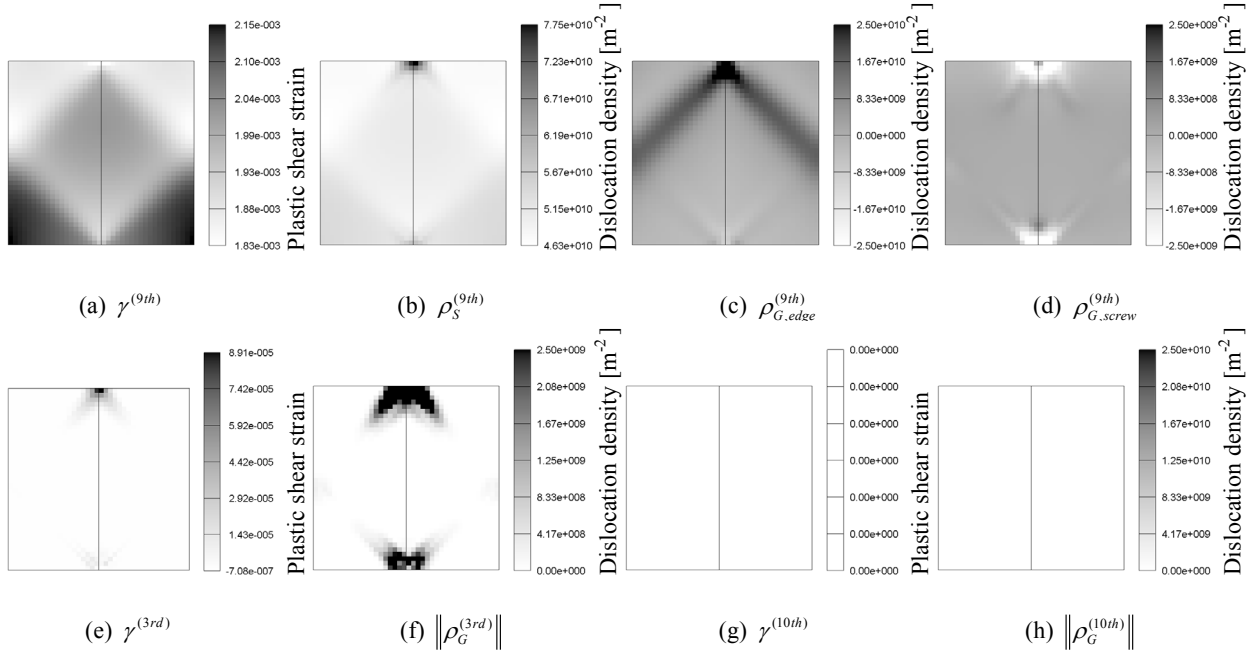


Fig. 6 (a) Distribution of plastic shear strain, (b) density distribution of statistically stored dislocations, (c) edge and (d) screw components of geometrically necessary dislocations on the primary slip system, (e), (g) distribution of plastic shear strain and (f), (h) density of norm of geometrically necessary dislocations on  $(111)[10\bar{1}]$  and  $(\bar{1}\bar{1}1)[110]$  slip systems when the average tensile strain  $\bar{\epsilon}_{yy}$  is 0.1% at the bicrystal model of  $\alpha = 46^\circ$ .

図 5 (e), (g)に示すように、主すべり系  $(11\bar{1})[101]$  の『GN 転位帯』の構造形成に起因して、二次すべり系  $(111)[10\bar{1}]$  と  $(1\bar{1}1)[110]$  が『GN 転位帯』近傍の極めて局所的な領域で活性化していることがわかる。なお、

二次すべり系に生じた塑性せん断ひずみ  $\gamma^{(3rd)}$  と  $\gamma^{(10th)}$  の量を、主すべり系に生じた塑性せん断ひずみ  $\gamma^{(9th)}$  (図 5 (a)) の量と比較すると、1/1000~1/100 程度と極めて僅かであるが、局所的な領域で生じているため、

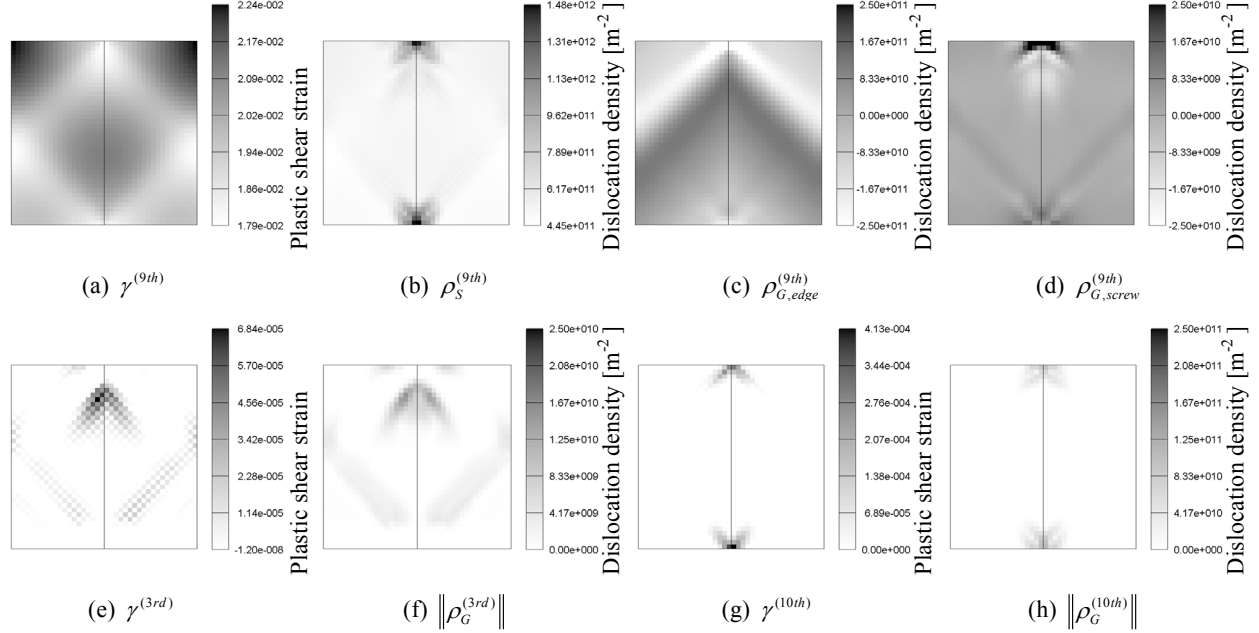


Fig. 7 (a) Distribution of plastic shear strain, (b) density distribution of statistically stored dislocations, (c) edge and (d) screw components of geometrically necessary dislocations on the primary slip system, (e), (g) distribution of plastic shear strain and (f), (h) density of norm of geometrically necessary dislocations on  $(111)[10\bar{1}]$  and  $(1\bar{1}1)[110]$  slip systems when the average tensile strain  $\bar{\epsilon}_{yy}$  is 1% at the bicrystal model of  $\alpha = 44^\circ$ .

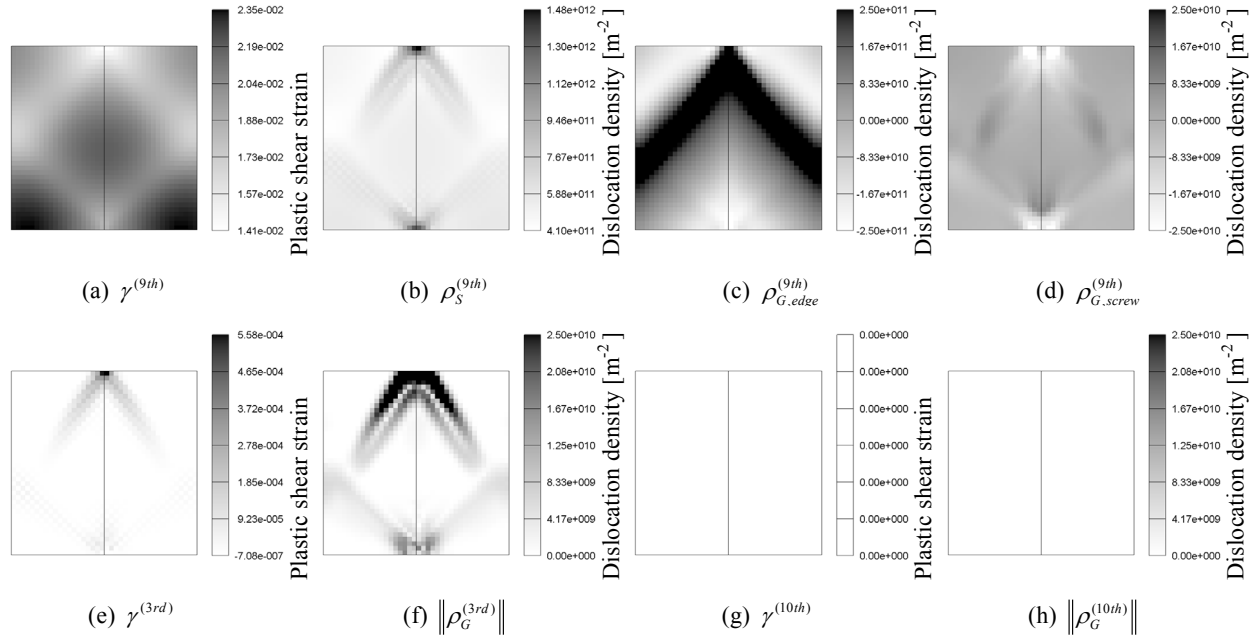


Fig. 8 (a) Distribution of plastic shear strain, (b) density distribution of statistically stored dislocations, (c) edge and (d) screw components of geometrically necessary dislocations on the primary slip system, (e), (g) distribution of plastic shear strain and (f), (h) density of norm of geometrically necessary dislocations on  $(111)[10\bar{1}]$  and  $(1\bar{1}1)[110]$  slip systems when the average tensile strain  $\bar{\epsilon}_{yy}$  is 1% at the bicrystal model of  $\alpha = 46^\circ$ .

急激な空間勾配が生じると共に、GN 転位が堆積する。特に、 $\|\rho_G^{(9th)}\|$  の堆積は顕著である (図 5 (h))。

二次すべり系に GN 転位が堆積した領域では、転位相互作用により、運動転位の平均自由行程が短縮されるため (式(9)参照)、この領域では、主すべり系の SS 転位密度が急激に上昇し (式(5)参照)、局所的な主すべり系のひずみ硬化を発生させる (式(8)参照)。このため、主すべり系の塑性せん断ひずみ  $\gamma^{(9th)}$  と SS 転位密度  $\rho_S^{(9th)}$  の分布の様相が異なる (図 5 (a), (b))。また、転位相互作用により、 $v_z^{(9th)} = b_z^{(9th)} = 0$  にも関わらず、厚さ方向にも  $\gamma^{(9th)}$  の空間勾配が生じ、らせん転位密度成分  $\rho_{G,screw}^{(9th)}$  が発生する (図 5 (d))。

主すべり系、二次すべり系の空間的配置は結晶方位に依存するため、活性化する二次すべり系の種類や場所は、角度  $\alpha$  (結晶方位) に依存して異なる (図 6)。角度  $\alpha$  が  $46^\circ$  の場合、 $(1\bar{1}1)[110]$  が活性化しない ( $\gamma^{(10th)}$  の最大値、最小値が共に 0) ため (図 6 (g))、主すべり系と二次すべり系  $(111)[10\bar{1}]$  のすべり変形によってのみ、モデルの変形が進行する。この結果、二次すべり系  $(111)[10\bar{1}]$  に堆積する GN 転位密度が高くなり (図 6 (e))、転位相互作用により、主すべり系に堆積する SS 転位密度 (図 6 (b))、及び、GN 転位のらせん転位密度成分 (図 6 (d)) も高密度に堆積し、主すべり系のすべり変形の不均一性の発展が顕著になる。

変形が進行した段階 (平均引張りひずみ  $\bar{\epsilon}_{yy} = 1\%$ ) における角度  $\alpha$  (結晶方位) による変形状態の相違を図 7、図 8 に示す。なお、GN 転位密度の表示範囲は、図 5、図 6 の 10 倍にしてある。

主すべり系の『GN 転位帯』の構造形成に起因する二次すべり系の活性化に伴う局所的なひずみ硬化の影響で、主すべり系のすべり変形の不均一性が発展し、新たな変形場が形成される。新たな変形場の形成に応じて、主すべり系、二次すべり系共に、新たな GN 転位構造を形成する。転位相互作用により、また、新たな局所的なひずみ硬化が発生する。この一連の変形機構の繰り返しによって、二次すべり系が活性化した以後の変形場の様相は、変形の進行と共に更新され、結晶方位による変形状態の相違も顕著になる。特に、主すべり系の  $\rho_S^{(9th)}$ 、 $\rho_{G,edge}^{(9th)}$ 、 $\rho_{G,screw}^{(9th)}$  の分布の相違は著しい (図 7(b)~(d)、図 8(b)~(d))。

以上の結果から、主すべり系の『GN 転位帯』が高密度に形成される場合、局所的な領域で二次すべり系が活性化し、転位相互作用の効果により、運動転位の平均自由行程が減少し、局所的なひずみ硬化を発生さ

せると共に、変形状態の不均一性を発展させることがわかった。

## 5. 結 言

対称双結晶の引張変形の結晶塑性解析を行い、『GN 転位帯』を形成する GN 転位密度と Schmid テンソルの値との関係、『GN 転位帯』が後の変形状態に及ぼす影響について検討した結果を以下に述べる。

- (1) 対称双結晶の引張りに伴う主すべり系における『GN 転位帯』は、主すべり系のすべりによる結晶粒の形状変化が (粒界や負荷条件など、境界条件により) 拘束されることにより生じ、『GN 転位帯』に堆積する GN 転位密度の量は、拘束される塑性ひずみ増分を決定する Schmid テンソルの値で評価できることがわかった。
- (2) 『GN 転位帯』のように、GN 転位が局所的な領域に高密度に堆積する GN 転位構造を形成すると、二次すべり系が活性化する。なお、二次すべり系に生じる塑性せん断ひずみは、主すべり系に生じる塑性せん断ひずみの僅か  $1/1000 \sim 1/100$  程度であるが、局所的な領域で生じているため、急激な空間勾配が生じ、GN 転位が高密度に堆積することがわかった。
- (3) 主すべり系の『GN 転位帯』が高密度に形成され、二次すべり系が活性化した以後の変形状態は、主すべり系と二次すべり系の転位相互作用により、運動転位の平均自由行程が短縮し、SS 転位が局所的に堆積すると共に、主すべり系の局所的なひずみ硬化を発生させ、変形の不均一性が急激に発展することがわかった。

## 参考文献

- (1) Ashby, M. F., *Phil. Mag.*, **21** (1970), 399-424
- (2) Hook, R. E. and Hirth, J. P., *Acta Met.*, **15** (1967), 535-551
- (3) Livingston, J. D. and Chalmers, B., *Acta Met.*, **5** (1957), 322-327
- (4) Hauser, J. J. and Chalmers, B., *Acta Met.*, **9** (1961), 802-818
- (5) 近藤了嗣, 大橋鉄也, *機論*, **A, 71** - 705 (2005), 809-816
- (6) 大橋鉄也, *金属学会誌*, **53** - 3 (1989), 290-295
- (7) 大橋鉄也, *機論*, **A, 68** - 675 (2002), 1490-1497.
- (8) Hill, R., *J. Mech. Phys. Sol.*, **14** (1966), 95-102
- (9) Ohashi, T., *Phil. Mag. A*, **70** - 5 (1994), 793-803
- (10) Ohashi, T., *Phil. Mag. Lett.*, **75** - 2 (1997), 51-57
- (11) Ohashi, T., *IUTAM Symposium on Mesoscopic Dynamics of Fracture Process and Materials Strength* (2004), 97-106
- (12) 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