

結晶の塑性すべりと転位蓄積の解析へのメゾスケールアプローチ*

大橋 鉄也 *1

Meso-scale Perspectives in the Analysis of Crystal Slip Deformation and Dislocation Accumulation

Tetsuya OHASHI

* Kitami Institute of Technology

abstract

Deformation processes and accumulation of dislocations in metal microstructures is a matter of importance both in terms of solid mechanics and material science. On the basis of continuum mechanics, we can model the processes of generation, interaction, accumulation and annihilation of dislocations and the quantity evaluated by these models are called the statistically stored dislocations. At the same time we can evaluate the density distribution of dislocations in accordance to the spatial gradient of plastic shear strain distribution on crystal slip systems and these are called the geometrically necessary ones. Models for the evolution of the statistically stored dislocations include two important parameters of mean free path of dislocations and annihilations distance of them. Although the density of the geometrically necessary dislocations is defined in unambiguous manner, quality of data, which are obtained by numerical analysis, depends rather sensitively on the spatial resolution of the analysis.

Deformation in metal microstructures is inherently non-uniform in every aspect. Non-uniform deformation at the grain-size length scale originate from two and three dimensional mutual constraint between crystal grains and non-uniform distribution of dislocations within the grain interior arises not only from the non-uniform deformation of grains but also from interactions of dislocations. Approaches from crystal plasticity analysis for the prediction of dislocations' behavior and their structures in metal microstructure and some related ones are briefly discussed.

Key Words : Microstructure, Crystal Plasticity, Dislocation Structure, Strain Gradient, Modeling, Slip Deformation, Finite Element Analysis

1. 結 論

多くの結晶粒の集合体として構成されている多結晶体の巨視的な変形挙動を、その構成粒子の変形挙動と粒子間の相互作用の特徴から再構成し、予測する試みは Taylor の研究⁽¹⁾を源流のひとつとして長い間続けられている。有限要素法を中心とした固体力学計算技術および計算機の発達とともに、多結晶体の巨視的力学応答を、構成式として数学的に閉じた形で提示するのではなく、個々の結晶粒のすべり変形の数値解析の結果として求めてゆく方法は Lin *et al.*⁽²⁾、宮本ら⁽³⁾⁽⁴⁾、神馬⁽⁵⁾らによって示され、さまざまな展開がなされてきた。この場合、結晶粒の変形挙動については大幅に単純化した近似が導入されることが多いが、それでも結晶集合体として示す挙動の多様性はよく再現される場合が多い。また、Peirce, *et al.*⁽⁶⁾は結晶塑性解析を連続

体の変形に関する運動学的理論の枠組みの中に展開し、延性破壊の前駆現象としての Shear banding の現象を数値的に再現することに成功した。材料の不安定性についてはその後も広範な研究が展開されてきた⁽⁷⁾。

結晶粒個々の示す力学的挙動の詳細については、結晶中を運動する転位の素過程に関する物性理論的な研究⁽⁸⁾がベースとしてあり、分子動力学法を用いた原子論的研究⁽⁹⁾、転位の弾性場を媒介とした離散転位動力学法⁽¹⁰⁾、結晶塑性解析などの多くの研究が力学と材料科学との双方にまたがって展開されている。いっぽう電子顕微鏡などを用いた観察では、結晶粒内を運動し蓄積する多くの転位を観察することが出来、それら多数の転位群は結晶粒界や異相界面などによって制限された空間領域内で不均一に分布し特徴的なパターンを形成することがわかる。このような結晶粒径などを代表寸法とするような空間領域での転位群の挙動に関する議論は、塑性変形に関する原子論的な議論と、巨視的な構成関係に関する議論の中間に位置しそれらを結びつける上で重要であるが、現象のモデル化にはまだ

*原稿受付 2002年 5月 22日

*1 北見工業大学工学部

多くの解決すべき課題が多い。本稿では結晶のすべり変形における不均一性と転位の蓄積、ひずみ硬化のモデル化に焦点を当て、これまでの研究と今後の課題について検討する。

2. 転位密度の結晶塑性解析による評価

2.1 転位の生成

転位生成の基本的メカニズムとして Frank-Read 源の活動が良く知られている。Frank-Read 源は結晶の生成の過程などで導入された転位の一部がピン止めされた構造であり、すべり面に乗っている転位のセグメントが負荷の下で運動することによって転位ループを放出する。この過程に Frank-Read 源自身が増殖するメカニズムはないので、変形が進んでも Frank-Read 源の密度は変わらない。いっぽう、すべり面を運動する転位が何らかの原因によって交差すべり面を運動し、さらにもとのすべり面に戻るいわゆる 2 重交差すべりの過程が生ずると、転位線には Frank-Read 源と類似の構造が形成される。2 重交差すべりは変形の過程で生ずるので、これによる転位源の密度は変形とともに変化する。したがって、転位生成の概略のメカニズムとしては、変形の初期では Grown-in の Frank-Read 源が転位源として主要であり、変形が進んだ段階では 2 重交差すべりによって生成された転位源が重要となると考えられる。

結晶塑性解析では、転位源は材料中いたるところに存在し、運動転位の密度も一定⁽¹¹⁾と仮定することが多い。しかし、ナノ結晶材料や半導体電子素子ではこのような仮定が必ずしも妥当とは言えない。また、 μm オーダーの空間領域の結晶塑性解析でも、空間の離散化を細かくしてゆけば、個々の離散化領域に十分な転位源があると仮定することが難しくなる場合がある。転位源の密度分布、低転位密度材料の変形⁽¹²⁾、可動転位密度の発展⁽¹³⁾の問題は結晶塑性解析をより微視的な領域に適用してゆく場合にはより精密な取り扱いが必要になる。

2.2 統計的に蓄積する転位とその消滅

変形ともなう蓄積する転位は統計的に蓄積する転位 (Statistically stored dislocations, 以後 SS 転位と略す) と幾何学的に必要な転位 (Geometrically necessary dislocations, 以後 GN 転位と略す) に分けて考えることが出来る⁽¹⁴⁾。SS 転位の蓄積と消滅について検討する。

SS 転位の概念は、塑性変形を担う転位が材料中に存在するトラップサイトにランダムに捕捉されることを表現している。転位が運動をはじめからトラップサイトに捕捉されて運動を止めるまでの距離の平均値、すなわち転位の mean free path を L とすると、Orowan 方程式

$$\dot{\gamma} = \rho_{\text{mov}} \cdot \tilde{b} \cdot v \quad (1)$$

を用いて、

$$d\rho_{\text{Stor}} = \frac{c}{\tilde{b}L} d\gamma \quad (2)$$

と書くことが出来る⁽¹⁵⁾。ここで、 ρ は塑性せん断ひずみ、 \tilde{b} と v は転位のバーガスベクトルの大きさおよび平均速度であり、 ρ_{mov} と $d\rho_{\text{Stor}}$ は運動転位密度およびランダムな捕捉によって蓄積する転位の密度増分である。

転位がほかの転位などの障害物が分散した場を運動する場合の運動抵抗は障害物の平均間隔に比例すると考えるモデルは広く受け入れられている⁽¹⁶⁾。障害物を、材料中に蓄積した転位と考えると、考えているすべり系の臨界分解せん断応力 θ は

$$\theta = \alpha\mu\tilde{b}\sqrt{\rho} \quad (3)$$

である⁽¹⁶⁾。mean free path が一定であると仮定して式(2)を積分すると転位密度はひずみの 1 次の関数になるので、これを式(3)に代入すると放物型のひずみ硬化特性になる。また、mean free path が $1/\rho$ に比例する場合には直線型のひずみ硬化特性になる。

Fig. 1 は単結晶の荷重-伸び曲線の実験結果⁽¹⁷⁾である。単結晶では変形の最初の段階 (Stage I) ではほぼ放物型のひずみ硬化特性であり、その後直線型のひずみ硬化段階 (Stage II) を経て再びひずみ硬化係数が徐々に低下する Stage III が観察される。また Stage I の継続するひずみ区間の長さが結晶の初期方位によって大きく異なることも顕著な特徴である。

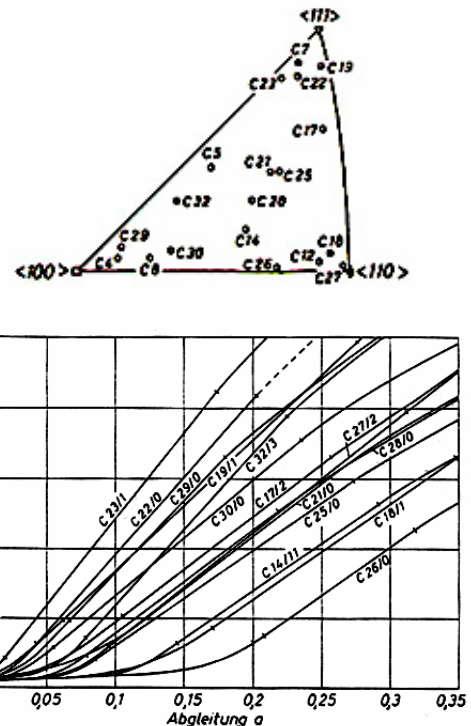


Fig. 1 Stress-strain curves for copper single crystals with various crystal orientations⁽¹⁷⁾. The vertical axis represents the resolved shear stress.

Stage I から II への自発的遷移の機構についてさまざまな議論がなされた⁽¹⁶⁾。その結果、Stage I から II への遷移は、すべりにもなう結晶方位の回転が主要な原

因ではないこと、Stage II への遷移にともなって微細な 2 次すべり系の活動がみられることなどがわかった⁽¹⁸⁾。いっぽう Seeger ら⁽¹⁹⁾はすべり線の長さを実験的に観察し、ひずみが一定値に達するまでは mean free path は定数で、その後はひずみに反比例して減少するモデルを提案した。このようにすると、計算された荷重-伸び曲線には当然 Stage I と II の領域が mean free path の関数形に応じて現れる。しかしこのモデルでは mean free path の減少開始点が材料パラメータとして固定されている点などのいくつかの課題がある。我々は組織中の微細な 2 次すべりが mean free path の減少開始のトリガーとなるように Seeger らのモデルを修正し、材料中に初期不均一性のある単結晶の荷重-伸び曲線を計算した⁽¹⁵⁾。結果を Fig. 2 に示す。Stage I から II への自発的遷移の開始点と初期結晶方位との対応は妥当なものであった。

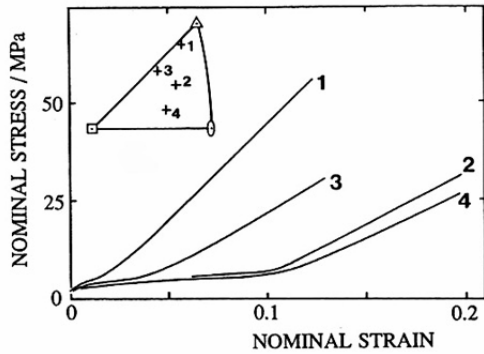


Fig. 2 Calculated stress-strain curves for Cu single crystals with different crystal orientation⁽¹⁵⁾. Model for the mean free path of dislocations were modified from that of Seeger *et al*⁽¹⁹⁾.

運動転位の mean free path が、結晶中に蓄積した転位の密度によって決定されるというモデルは Seeger らのモデルより物理的な描像が明瞭であるように思われる。たとえば Kocks は次式を提案した⁽²⁰⁾；

$$L \propto \frac{1}{\sqrt{\rho}} \quad (4)$$

ここで ρ は運動転位の障害として働く転位の密度であり、式(4)の右辺は障害として働く転位の平均間隔になっている。しかし運動転位と運動の障害となる転位との関係の詳細は区別していない。式(4)を精密化したたとえば、

$$L^{(n)} \propto \frac{1}{\sqrt{\sum_m \bar{\omega}^{(nm)} \rho^{(m)}}} \quad (5)$$

を考えることができる⁽¹⁵⁾。ここで物理量の肩についている添字はすべり系の識別記号である。また $\bar{\omega}^{(nm)}$ はすべり系 m に蓄積した転位がすべり系 n に属する運動転位に対して及ぼす抵抗の強さを表す重みである。このモデルについて検討した結果、 $\bar{\omega}^{(nm)}$ の対角項が優位の

場合には Stage I から II への遷移が実現されないことがわかった。対角成分を 0 とし、非対角優位とすることによって荷重-伸び曲線の方位依存性を良く表現することが出来る⁽¹¹⁾⁽¹⁵⁾。

転位の対消滅などによる密度の減少を Kocks は次のようにモデル化した⁽²⁰⁾；

$$d\rho_{\text{recov}} = \frac{d}{\bar{b}} \rho \cdot d\gamma \quad (6)$$

ここで d は長さのディメンジョンを持ったパラメータである。 d の物理的な解釈はいくつか可能であるが、互いに対消滅しうる転位の距離と考える描像⁽¹¹⁾は可能である。式(2)と(6)から

$$d\rho_{\text{SS}} = d\rho_{\text{Stor}} - d\rho_{\text{Recov}} \quad (7)$$

によって SS 転位の密度を評価し、それを式(3)に用いることによって Stage I から III までのひずみ硬化特性を表現するモデルを構築することができる⁽¹¹⁾。しかし対消滅や転位の再配列は本来熱活性化過程であるのに対して式(6)はそれを表現しているとは言えない。したがって温度と時間および熱活性化過程に関する活性化エネルギーを組み込んだモデルを結晶塑性解析の枠内に展開してゆく必要が残されており、そうする事によってクリープ変形の微視機構などに関して新しい展開が可能であると考えられる。

2.4 幾何学的に必要な転位の評価と結晶塑性解析における空間分解能

統計的に蓄積する転位では、転位の運動と蓄積、消滅の「過程」をモデル化することによってその密度発展を求めた。いっぽう、転位は変位の食い違いがそこにあることを表現しているから、すべり変形の結果と

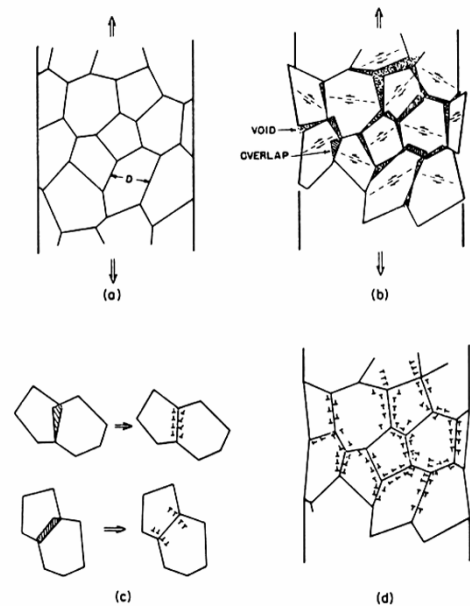


Fig. 3 Geometrically necessary dislocations which are introduced near grain boundaries to compensate differences of deformation between crystal grains⁽¹⁴⁾.

しての変形場に空間的な不均一性があれば、そこには転位がなければならぬ。このような変形の幾何学に結び付けられた転位は、転位密度テンソルの導入⁽²¹⁾、⁽²²⁾以来、転位の原子論的実体からの束縛を離れ、さまざまな展開がなされてきた⁽²³⁾。いっぽう Ashby⁽¹⁴⁾は変形の不均一性にもなう転位を「幾何学的に必要な転位」と呼び、不均一な塑性変形にもなう転位を、その蓄積過程と切り離して考え得ることを示した。Fig. 3は多結晶体中の粒界近傍に蓄積する転位に関する Ashby の説明である。転位が粒界に蓄積する機構として、粒内で発生した転位が粒界でその運動を止められるために粒界に転位の堆積が生ずると理解されることが多いが、Fig. 3では結晶粒間の変形の不均一性にもなう粒界近くに転位が存在しなければならないと説明した。

幾何学的に必要な転位の密度は次式で評価される⁽²⁴⁾、⁽²⁵⁾；

$$\rho_{G,edge}^{(n)} = -\frac{1}{b} \frac{d\gamma^{(n)}}{d\xi}, \quad (8)$$

$$\rho_{G,screw}^{(n)} = \frac{1}{b} \frac{d\gamma^{(n)}}{d\zeta}. \quad (9)$$

ここで $\rho_{G,edge}^{(n)}$ 、 $\rho_{G,screw}^{(n)}$ はそれぞれすべり系 n に蓄積した GN 転位の刃状成分とらせん成分の密度であり、 ξ と ζ はそれぞれバーガースベクトルに平行な方向、すべり面上でバーガースベクトルに垂直な方向である。GN 転位の密度はすべり系ごとに生じた塑性せん断ひずみの空間的な勾配に関係づけられているために、評価される量には寸法依存性がある。このことは、式(8)、(9)のように評価された量を式(3)に用いることによって、ひずみ硬化特性の寸法依存性を自然な形で導入することが出来ることを意味している⁽²⁶⁾。また転位密度がスカラ量としてではなく、刃状、らせんの成分ごとに分離して求められるために、それらを用いて転位の特性を決定することが可能である。たとえば空間中のある点におけるすべり系 n の転位密度成分が式(8)、(9)で与えられると、その点における転位線の方向ベクトル $\mathbf{l}^{(n)}$ は次式で計算することが出来る⁽²⁷⁾；

$$\mathbf{l}^{(n)} = \frac{1}{\|\rho_G^{(n)}\|} (\rho_{G,screw}^{(n)} \cdot \mathbf{b}^{(n)} + \rho_{G,edge}^{(n)} \cdot \mathbf{b}^{(n)} \times \mathbf{v}^{(n)}) \quad (10)$$

ここで $\|\rho_G^{(n)}\|$ は転位密度のノルム

$$\|\rho_G^{(n)}\| = \sqrt{(\rho_{G,screw}^{(n)})^2 + (\rho_{G,edge}^{(n)})^2} \quad (11)$$

である。式(10)、(11)を用いて金属の微視組織中に蓄積する GN 転位の立体的な構造を再構築することが可能である⁽²⁷⁾。

GN 転位に関する上記の2点、すなわち GN 転位密度は寸法依存性を持った量であること、および GN 転位の刃状およびらせん成分密度から転位の特性が計算

できることから、さまざまな応用展開が可能であると思われる。いっぽう GN 転位についてまだいくつか検討すべき課題がある。

最初は誤差の拡大の問題である。GN 転位は塑性変形の不均一性に随伴しており、不均一な塑性変形の解析は空間の離散化のうえで行なうことが通常であると考えられる。この場合、式(8)、(9)による GN 転位密度の評価は、実際には空間離散化の結果として得られる塑性せん断ひずみ分布の近似関数を微分することによって得られる。誤差を含む離散データを微分する際には微分操作による誤差の拡大が生ずる恐れがあり、それによって生ずるであろう artifact としての GN 転位に注意が必要である。

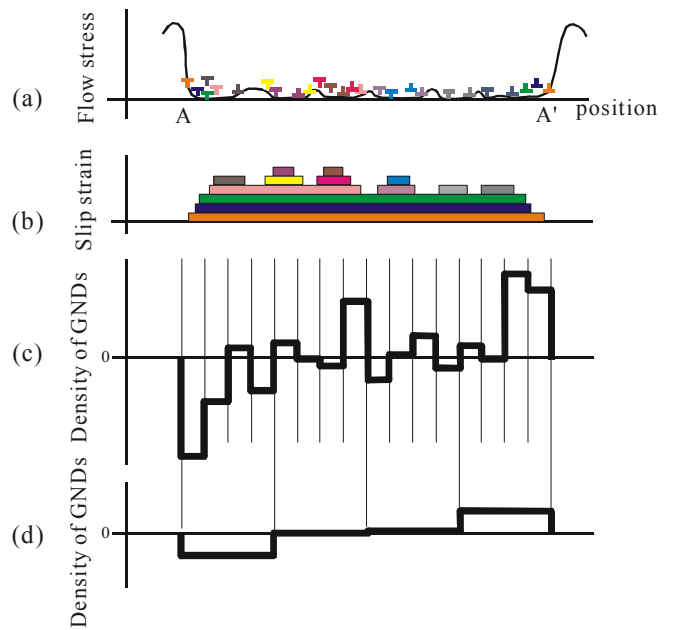


Fig. 4 (a) A schematic illustration of non-uniform distribution of flow stress levels and dislocation accumulation within a confined region between A and A', (b) distribution of plastic shear strain developed by the movement of dislocations, (c) and (d) density distribution of the geometrically necessary dislocations which are evaluated at two different level of spatial resolution.

次に空間分解能の問題を考える。微分値を有限長の区間における平均勾配に置き換えて計算するときには次のような問題がある。Fig.4 (a)はさまざまな不均一性を含む1次元的な微視構造の中で転位が運動し、運動の障害となっているものに捕捉される様子を模式的に示したものである。転位は正負の対で AA'の間に発生し、何らかの運動の後に捕捉される。転位の運動によって発生する塑性せん断ひずみの分布を模式的に Fig. 4 (b)に示した。解析に用いる空間離散化のメッシュサイズが無小ならば、得られる塑性せん断ひずみの分布は階段関数の重なったものになるであろう。そしてその分布を空間微分すると、塑性せん断ひずみが階段

関数的に変化する個所，すなわち転位が捕捉されて運動を止める個所に転位密度が δ 関数で与えられる．すなわち空間分解能が無限大の解析を行うことができれば，塑性ひずみ発生の原因となったすべての転位は，原理的に式(8)，(9)で検出可能である．空間分解能が有限の場合の例として，AA'の区間を16等分および4等分に離散化し，そのように離散化したそれぞれの区間内の塑性せん断ひずみの平均勾配から求められるGN転位の密度を模式的にFig. 4(c)と(d)に示した．このように有限の空間分解能でGN転位を評価すると，メッシュが粗くなり空間分解能が下がるほど転位密度のピーク値は低下してゆく．このとき1つの区間に本来含まれる正負の転位は（この場合は材料学的な意味ではなく，算法の意味で）対になって相殺され，GN転位としては計算されない．空間分解能が有限であることが原因でGN転位として計上されない転位を，SS転位として計上するというモデル化も可能であると思われるが，このときのSS転位のmean free pathをどのように設定すべきかはまだ明らかではない．

GN転位がどのように他の転位の運動に影響を及ぼすと考えるのが妥当かという点についても，検討の余地が大きい．ひずみ硬化の考え方として大きく分けて2種類のものがある．いっぽうは変形によって微視組織中に蓄積した転位が，その他の転位の運動の障害になり，転位を運動させるために必要となる外力が増大するというものであり，他方は，組織中に蓄積した転位によって形成される応力場（内部応力場，背応力などとよばれる）が外部から作用する応力場に重畳し，運動転位に作用する実効的な応力値が低下するというものである．GN転位は上述のように正負の転位が不平衡となっている量を取り出したものであり，それらの作る応力場は正負が対になった転位が作り出す応力場よりも減衰が小さく長範囲におよぶ応力場を形成する．この応力場が組織中の内部応力場を形成していると考えることが可能である．Mura⁽²³⁾は弾完全塑性特性を想定した微小平板の弾塑性曲げの問題で，塑性領域に存在しなければならない転位密度テンソルを求め，試料中に形成される応力場を曲げの弾性解と転位の自己応力場との和で与えられることを示した．同じ問題を我々は弾完全塑性に近似した結晶塑性有限要素法解析を行った．得られたGN転位密度と応力の分布はMuraの解とよく一致した．すなわちGN転位で作る内部応力場は，結晶塑性有限要素法では塑性変形による応力緩和として表現されていることになる．ひずみ勾配塑性論ではSS転位とGN転位の密度の和が運動転位の障害の強度を決定するとモデル化することが良く行われるが，このことはまだ議論の余地がある．

3. 不均一性から発達する転位構造

多結晶体を構成する結晶粒の内部におけるすべり変形現象の詳細を数値的な力学解析の手法によって検討する試みはくり返し続けられている^{(3)-(5) (11) (28)-(32)}．また，微視構造が複数の相からなる場合にもさまざまな

アプローチが試みられている^{(27) (33) (34)}．問題を単純化するために，きわめて多数の結晶粒を含む多結晶体ではなく，少数の結晶粒の集合体である多重結晶の変形が解析されている．多重結晶を構成する材料が単一の相からなる場合，考慮すべきパラメータは基本的に結晶粒界をはさむ二つの結晶粒相互の方位関係だけであるが生ずる現象は多様である．単相材料の多重結晶に生ずる変形と転位蓄積の詳細について検討する．

多重結晶の変形に関する研究には結晶粒の方位関係と形状を制御または人為的に決定したものと，特別の制御などをしないものがある．前者のモデルとして最もよく研究されているのは双結晶および3重結晶である．双結晶は2つの(多くは同型の直方体状の)結晶粒の接合したものであり，外力の作用による結晶粒相互の拘束の効果は大幅に単純化される．双結晶を構成する結晶粒をAとBとし，外力が結晶粒AとBにそれぞれ個別に作用する場合を想定する．AとBの界面になるべき面は結晶粒AとBにそれぞれあり，外力の作用下でそれらの面が同じ形状に変形するならば，結晶粒AとBが結合していても結晶粒間の力学的相互作用は生じない．逆に，それらの面の変形が同一でないならば，結晶粒AとBの集合体の変形では結晶粒間の変

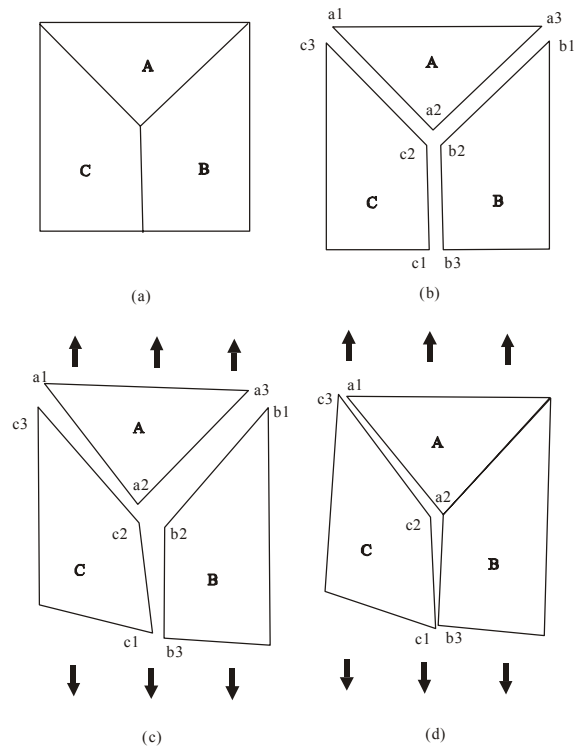


Fig. 5 (a), (b) Tricrystal model which consists of grains A, B and C, (c) deformation of grains when each ones deform independently under applied load, (d) deformation as an aggregate will cause mutual constraint between grains even if two dimensional constraints do not take place at grain boundary planes.

形に相互拘束が生じ，結晶粒界近傍で不均一変形や多重すべりが発生する．慣例上，このような双結晶を不適合型双結晶と呼ぶ．粒界面における「適合性」は塑

性すべりに関するものだけでは不十分であり、弾性異方性によって生ずる「不適合性」も粒界近傍の多重すべりの原因になる⁽³⁵⁾ことがよく知られている。

3重結晶は3個の結晶粒の集合体で、集合体中に3つの結晶粒界面と、それら3粒界が会する粒界3重線を含む。3重結晶の場合も粒界で隣り合う2つの結晶粒の相互拘束の有無は双結晶の場合と同様の「適合性」を基準にして理解することができる。しかし、すべての粒界面で「適合性」が満たされている場合でも、3重結晶に不均一な多重すべりが生ずることがある。Fig. 5(a)に示す2次元3重結晶でこのことを検討する。Fig. 5(a)の3重結晶は結晶粒A, B, Cからなり、結晶粒界(この場合は単なる線にすぎない) $\langle a_1-a_2 \rangle (= \langle c_3-c_2 \rangle)$, $\langle a_2-a_3 \rangle (= \langle b_2-b_1 \rangle)$, $\langle b_2-b_3 \rangle (= \langle c_2-c_1 \rangle)$ が粒界3重点 $a_2 (= b_2 = c_2)$ で接合する。ただし $\langle a_1-a_2 \rangle$ などは点 a_1 と a_2 を結ぶ粒界の意味である(Fig. 5(b)参照)。ある負荷の下でこれら3個の結晶粒が個別に変形した(Fig. 5(c))と想定したときに、粒界 $\langle a_1-a_2 \rangle$ の長さが $\langle c_3-c_2 \rangle$ の長さに等しく、ほかの2つの粒界についても同様であるときには、これら3結晶粒界で変形はいわゆる「適合」である。しかし、結晶粒A, B, Cが1つの集合体として変形するときには、たとえばFig. 5(d)に示したように角 $a_1-a_2-b_3$ が必ずしも角 $c_3-c_2-c_1$ に等しくなるとは限らないので、結局これらの結晶粒は変形を相互に拘束することになる。すなわち、個々の結晶粒界での「適合性」の有無では結晶粒界近傍の2次元的な相互拘束の有無が決まるに過ぎず、3個以上の結晶粒が関与する多重結晶では個々の結晶粒の変形後の立体形状が相互に許容できるように、結晶粒同士が変形後の立体形状を拘束する3次元的な相互拘束作用も生ずる。3次元的な相互拘束作用では粒界面に垂直な方向の面力も発生し、多重すべり領域が結晶粒界に制限されず粒内に筋状に発達する結果などをもたらすことがある⁽³⁶⁾。

結晶粒数が4個以上の多重結晶で、結晶粒形状や結晶方位などが十分制御されたモデルの計算例⁽³⁷⁾は我々の知る限り大変少ない。結晶粒形状や結晶方位について特別の制御を行わないものでは、5から10個程度の結晶粒から構成される多重結晶試料を実際に作成し変形実験を行うとともに、同じ試料の数値モデルの作成と変形解析を行なった例は数多くあり^{(3)-(5) (11) (31) (32) (38)}、不均一すべりの発生と発展、多重すべりの様相などに関する解析と実験の結果は概してよく一致する。

我々はFig. 6(a)に示す多重結晶板の引張変形を解析しGN転位の発展を求めた⁽³⁹⁾。このモデルでは各結晶粒はCuとし、結晶方位は乱数を用いて決定した。引張軸の方位をFig. 6(b)に示す。主すべり系に生じた塑性せん断ひずみとGN転位の分布をFig. 7に示す。結晶粒1の粒内と結晶粒4と6の粒界の近傍に最初に塑性すべりが発生する。変形の進行とともに、結晶粒1に生ずる塑性せん断ひずみは大きく成長してゆくが、結晶粒4と6の粒界の近傍に生じたすべり変形はほとんど発展しない。変形の進行とともに結晶粒2の内部でもすべり変形が始まる。(平均引張ひずみ) $= 3.65 \times 10^{-4}$

の段階では結晶粒1, 2の変形と、結晶粒3と5の粒界の近傍の変形が顕著である。GN転位は結晶粒界の近傍で密度が高くこれは塑性せん断ひずみが粒界近傍で減少することに随伴するものであるが、結果的に転位の粒界堆積を模擬していると考えられる。

Fig. 7のような転位の粒界堆積に相当する構造よりもっと微細なレベルでも転位群が特徴的な空間パターンを形成する。転位のパターン形成に関しては、転

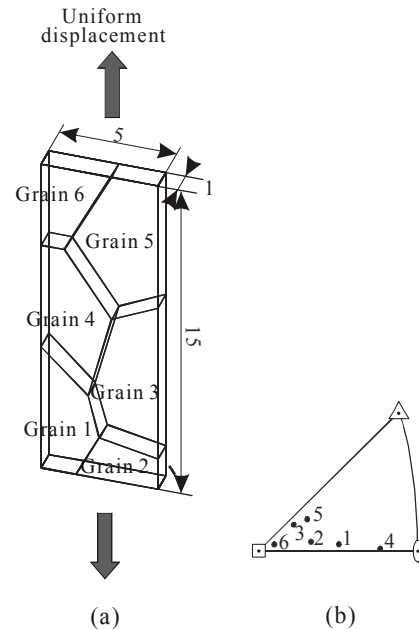


Fig. 6(a) Multi crystal model employed for the analysis, (b) crystal orientation for the grains 1-6. Unit of length is μm .

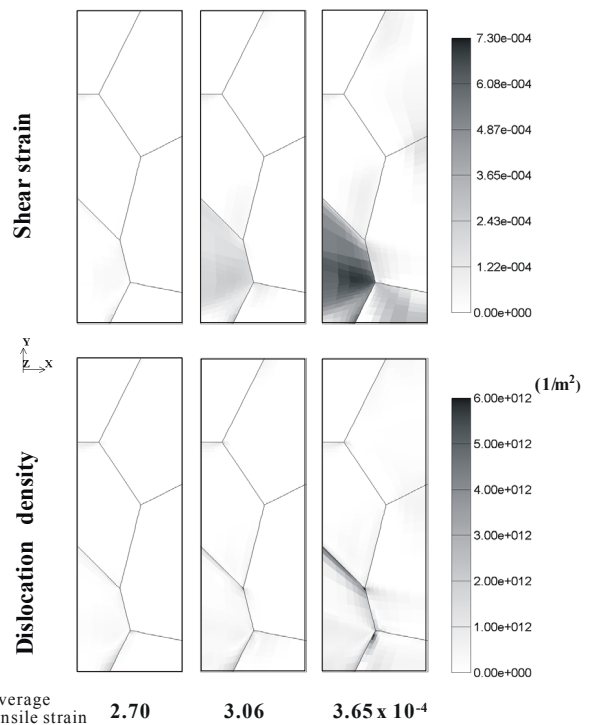


Fig. 7 Numerical results for the slip deformation analysis.

位動力学法によるシミュレーション⁽⁴⁰⁾，場の理論の枠組みをベースにしたアプローチ⁽⁴¹⁾，分岐現象としてのパターン形成と捉えるアプローチ⁽⁴²⁾，セル境界やセルブロック境界中の転位密度に関する発展方程式に基づくアプローチ⁽⁴³⁾などさまざまなアプローチが試みられている．パターン形成に関する解析・シミュレーションでは明示的にしろ暗示的にしろ，何らかの初期不均一性の存在を前提にしており，不均一性の空間周波数スペクトルに変形とともに卓越周波数が現れてくる機構に関する多面的な理解が必要であると思われる．また，転位反応なども含めたパターン形成の素過程やその妥当なモデル化の研究などがやりのこされている．

4. 結 言

金属の微視構造に生ずる変形と転位の運動のモデル化，評価の手法について，これまでにおこなわれてきた研究のいくつかを振り返り，今後の課題について検討した．過去 10 年程度の間材料の電子論，原子論に立脚したシミュレーションが活発に行われ，nm オーダーの領域に生ずる現象の理解が進んだ．また材料の塑性ひずみ勾配と関係付けられる幾何学的に必要な転位や，本報告ではふれなかったひずみの高次勾配に関する研究の進展により，従来の力学理論の枠組みをベースにして材料の変形の素過程にアプローチする糸口が形成されつつある．また，最近の転位動力学シミュレーションの発展などもあって，電子論・原子論と連続体力学・結晶塑性解析の間にあった寸法スケールの上での乖離状態が解消される希望も持ち得るようになってきた⁽¹⁰⁾．これらのアプローチはまた同時に固体力学と材料科学との境界領域を埋める作業でもある．これらの作業を完了するためには，マクロからナノメータ領域をカバーするそれぞれの解析，シミュレーション技術の対象範囲のいっそうの拡大が必要である．

5. 参考文献

- (1) Taylor, G.I., *J. Inst. Met.*, 62(1938), 307.
- (2) Lin, T.H. and Ito, M., *J. Mech. Phys. Solids*, 13(1965), 103.
- (3) 宮本博，白鳥正樹，三好俊郎，大藤誠，*日本機械学会誌*，74-624(1971)，53.
- (4) 宮本博，石川洋二，三好俊郎，*日本機械学会誌*，75-639(1972)，89.
- (5) 神馬敬，室田忠雄，一柳高時，*日本機械学会誌*，75-639(1972)，116.
- (6) Peirce, D., Asaro, R.J., and Needleman, A., *Acta Metall.* 30(1982), 1119., *ibid.*, 31(1983), 1951.
- (7) Tomita, Y., *Appl. Mech. Rev.* 47(1994) 171.
- (8) たとえば，鈴木秀次，*転位論入門*，アグネ，(1967).
- (9) たとえば，き裂と転位の原子論的シミュレーションについては，*MRS Bull.* 25(2000), 11.
- (10) たとえば，Bulatov, V.V., Tang, M., and Zbib, H.M., *MRS Bull.*, 26(2001), 191.
- (11) Teodosiu, C. and Raphanel, J.L., *Proc. Int. Seminar MECAMAT'91*, eds. Teodosiu, C., Raphanel, J.L., and Sidoroff, F. Balkema, (1993), 153.
- (12) 大橋鉄也，*日本機械学会・P-SC322 委員会研究会*，(1999).
- (13) Kameda, T. and Zikry, M.A., *Scripta Mat.*, 38(1998), 631.
- (14) Ashby, M.F., *Phil. Mag.* 21(1970), 399.
- (15) Ohashi, T., *Phil. Mag.*, A70(1994), 793.
- (16) たとえば，丸川健三郎，*新版転位論*，*日本金属学会編*，丸善，(1972)，pp49-96.
- (17) Diehl, V.J., *Z Metallk.*, 47(1956), 331.
- (18) Takamura, J., *Trans. Japan Inst. Metals*, 28(1987), 165.
- (19) Seeger, A., Diehl, J., Mader, S. and Rebstock, H., *Phil. Mag.*, Ser. 8, 2(1957), 323.
- (20) Kocks, U.F., *Trans. ASME, J. Eng. Mat. Tech.*, 98(1976)
- (21) Nye, J.F., *Acta Metall.*, 1(1953), 153.
- (22) Kroner, E., *Z. Phys.*, 142(1955) 463.
- (23) Mura, T., *Micromechanics of defects in solids*, Martinus Nijhoff pub., 1982.
- (24) Fleck, N.A., Muller, G.M., Ashby, M.F., Hutchinson, J.W., *Acta metall. mater.*, 42(1994), 475.
- (25) Ohashi, T., *Phil. Mag. Lett.*, 75(1997), 51.
- (26) たとえば Gao, H., Huang, Y., Nix, W.D., and Hutchinson, J.W., *J. Mech. Phys. Sol.*, 47(1999), 1239.
- (27) Ohashi, T., *J. Phys. IV France*, 9(1999), Pr9-279.
- (28) 大橋鉄也，*金属学会誌*，51(1987)，37.
- (29) Beaudoin, A.J., Acharya, A., Chen, S.R., Korzekwa, D.A. and Stout, M.G., *Acta Mat.*, 48(2000) 3409.
- (30) Bhattacharyya, A., El-Danaf, E., Kalidindi, S.R. and Doherty, R.D., *Int. J. Plasticity*, 17(2001) 861.
- (31) Eriean, P.P., Hoc, T.P. and Rey, C.C., *Mat. Res Soc. Symp. Proc.* 653(2001) Z7.11.1.
- (32) Delaere, F., Raphanel, J.L., and Rey, C., *Acta Mat.*, 48(2000) 1075.
- (33) 永山則之，阿部武治，長岐滋，*機論 A 編* 55-514(1986) 1365.
- (34) Ishikawa, N., Parks, D.M., Socrate, S. and Kurihara, M., *ISIJ Inter.*, 40(2000) 1170.
- (35) Hook, R.E. and Hirth, J.P., *Acta Met.*, 15(1967) 535.
- (36) Ohashi, T., *Coll. de Phys.*, C1/51(1990) 593.
- (37) Ohashi, T., *Trans. Japan Inst. Met.* 27(1986) 835.
- (38) Hashimoto, K. and Margolin, H., *Acta Met.*, 31(1983) 773, *ibid* 31(1983) 787.
- (39) 大橋鉄也，有塚雅人，*機械学会 M&M2002 (2002) 投稿中*.
- (40) Zbib, H.M., and de la Rubia, T.D., to appear in *Int J. Plast.*
- (41) 長谷部忠司，*機械学会第 14 回計算力学講演会講演論文集*，85.
- (42) 木性俊和，森田洋平，志澤一之，*機械学会第 14 回計算力学講演会講演論文集*，83.
- (43) Peeters, B., Seefeldt, M. Teodosiu, C. Kalidindi, S.R., Van Houtte, P. and Aernoudt, E., *Acta Mat.*, 49(2001) 1607.