

# 傾角粒界をもつ適合型双結晶の引張りに伴う 非対称変形と GN 転位の粒界堆積\*

近藤了嗣\*<sup>1</sup> 大橋鉄也\*<sup>2</sup>

## Grain Boundary Accumulation of Geometrically Necessary Dislocation and Asymmetric Deformation in Compatible-type Bicrystals with Tilt Angle Grain Boundary 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 compatible type bi-crystal models with tilt angle grain boundary 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. Uniform deformation was expected to take place because mutual constraint of crystal grains through the grain boundary plane does not occur in compatible-type bicrystals, but some results of the analysis show asymmetric deformation with accumulation of GNDs near the grain boundary caused by difference of strain hardening of slip systems, kink bands perpendicular to the primary slip direction and secondary slip bands parallel to the primary slip plane with accumulation of GNDs on the primary slip system in the form of band. Mechanism of dislocation pattern formation in the bicrystals with tilt angle grain boundary is discussed from the viewpoint of imaginary disclination type deformation field with pair body interaction.

**Key Words:** Compatible type Bi-Crystals, Tilt Angel Grain Boundary, Crystal Plasticity Analysis, Geometrically Necessary Dislocation, Dislocation Pattern Formation, Disclination, Kink Band, Secondary Slip Band.

### 1. 緒 言

金属多結晶の塑性変形は、活性化した結晶粒に生じるすべり変形（及び、活性化していない結晶粒に生じる弾性変形）の組み合わせである。結晶粒間では、すべり変形の異方性や弾性異方性の効果<sup>(1)</sup>による変形拘束の相互作用が働くため、粒界近傍にすべり（塑性せん断ひずみ）の空間勾配が生じ、『幾何学的に必要な転位』（GN 転位：geometrically necessary dislocation）<sup>(2)</sup>が堆積する。このため、多結晶における GN 転位の堆積は、従来、粒界を通した変形拘束が主要な原因と

考えられてきた。しかしながら、粒界で変位の連続性を満たし、変形拘束の相互作用が働かない条件<sup>(3)(4)</sup>を満足する対称双結晶でも、負荷の与え方<sup>(5)</sup>や初期結晶方位<sup>(6)</sup>に依存して、不均一変形が生じ、結晶粒内部に GN 転位組織を形成する場合がある。この現象の検討を通して、著者等は、多結晶における GN 転位の堆積が主すべり系のすべりによる形状変化の『非適合』によっても生じ<sup>(5)(6)</sup>、結晶粒内に発達した GN 転位組織が、変形の不均一性を発展させることを述べた<sup>(6)</sup>。このように、双結晶を用いた検討は、粒界の効果を検討する上で有効的である。

実際が多結晶と同様に双結晶が傾角粒界をもつ場合、すべり系の空間的配置が粒界で非対称となる。この双結晶に不均一変形が生じ、粒界で非対称な GN 転位組織が発達すると、双結晶の変形拘束の相互作用（以後、

\* 原稿受付 2005年6月13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

『対相互作用』と呼ぶ。) そのものに重要な影響を及ぼすことが考えられる。本報告では、傾角粒界をもつ双結晶の引張りの結晶塑性解析を行い、粒界で非対称な不均一変形と GN 転位の安定構造が、後の変形に及ぼす影響と、これの評価方法につい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  $v_j^{(n)}$ 、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>(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** 変形履歴を受けた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 GN 転位の二種類に大別され、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>(8)</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。

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、すべりが生じていない。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>(2)</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>(9)</sup>。

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

**2.3 変形履歴の評価方法** 変形履歴を受けた面心立方金属材料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>(8)</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 程度の値、 $\mu$  は結晶のせん断弾性係数、 $\Omega^{(nm)}$  は相互作用行列<sup>(8)</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、 $R_1 = R_2 = R_3 = R_3' = R_4 = 1.01$  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。

$$h^{(nm)} = \frac{1}{2} \frac{a c \mu \tilde{b} \Omega^{(nm)}}{L^{(m)} \sqrt{\rho_s^{(m)}}} \quad \dots \dots \dots (8)$$

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>(10)(11)</sup>を用いた。

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

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、停止するという描象に基づいている。ここでは、 $c^*=15$  とした。 $a^{(mm)}$  は重み行列<sup>(10)(11)</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上の蓄積転位は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、最初、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する。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。即ち、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 に示す双結晶で傾角粒界をもつ。一辺の長さ  $l$  が  $200\mu\text{m}$ 、厚さ  $t$  が  $10\mu\text{m}$  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、一辺の長さが  $5\mu\text{m}$  の 8 節点六面体要素で均一に行った。総要素数は 3200 である。この双結晶モデルが次式<sup>(3)(4)</sup>を満たす時、粒界における変位の連続性を満足し、次式を満たす双結晶モデルを『適合型』と呼ぶ。

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

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

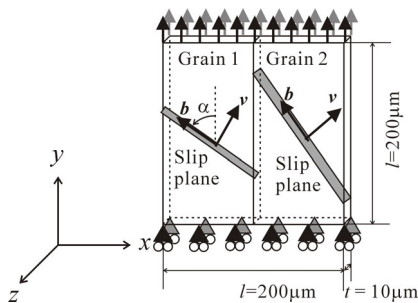


Fig. 1 Geometry and boundary condition for the models employed in this study

和) 成分であり、右肩の添え字は結晶粒番号である。

材料には弾性異方性の効果<sup>(1)</sup>が生じない面心立方晶金属を仮定し、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  $S_{11}=1.0 \times 10^{-11}, S_{12}=-0.25 \times 10^{-11}, S_{44}=2.5 \times 10^{-11} [\text{m}^2/\text{N}]$  とした。

$[100], [010], [001]$  の単位ベクトルで表される結晶座標系と材料座標系  $(x, y, z)$  間の座標変換は、図 2 に示す Euler 角  $(\kappa, \theta, \phi)$  により定義される。座標変換行列は、次式で表される。

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

粒 1, 2 の初期結晶方位 (Euler 角) を、表 1, 2 に示す。何れの方位も、主すべり系  $(11\bar{1})[101]$  に関して、 $v_z^{(9th)} = b_z^{(9th)} = 0$  となるため、Schmid テンソル  $P_{33}^{(9th)}, P_{23}^{(9th)}, P_{31}^{(9th)}$  の値は 0 となり、粒 1, 2 の塑性ひずみ増分  $\varepsilon_{zz}^p, \varepsilon_{yz}^p, \varepsilon_{zx}^p$  は 0 となる。

粒 1, 2 の初期結晶方位の組み合わせは、主すべり系  $(11\bar{1})[101]$  のすべり方向  $b^{(9th)}$  と負荷方向がなす角度  $\alpha$  が、 $45^\circ$  から高角度側と低角度側に等角度、離れるような組み合わせ、 $\alpha^{(1)}=46^\circ$  と  $\alpha^{(2)}=44^\circ, \alpha^{(1)}=47^\circ$  と  $\alpha^{(2)}=43^\circ, \alpha^{(1)}=48^\circ$  と  $\alpha^{(2)}=42^\circ, \alpha^{(1)}=49^\circ$  と  $\alpha^{(2)}=41^\circ, \alpha^{(1)}=50^\circ$  と  $\alpha^{(2)}=40^\circ$  とした。なお、 $\alpha$  の右肩の添え字は、結晶粒番号である。この場合、粒 1, 2 における  $P_{22}^{(9th)}$  の値は等しくなるため、粒 1, 2 に生じる  $\varepsilon_{yy}^p$  が等しくなり、式(10)を満足する。

初期転位密度  $\rho_0$  は  $1.0 \times 10^9 [\text{m}^{-2}]$  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  $y$  軸方向の一様な強制変位を課し、平均引張りひずみ  $\bar{\varepsilon}_{yy}$  が 1% になるまで引張った。

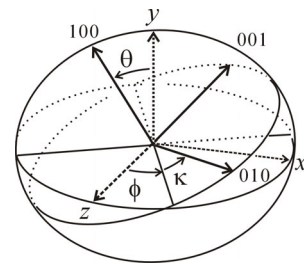


Fig. 2 Definition of Euler angles  $\kappa, \theta$  and  $\phi$

Table 1 Euler angle  $(\kappa, \theta, \phi)$ , angle between slip direction 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  $P_{ij}^{(9th)}$ , ( $v_z^{(9th)} = b_z^{(9th)} = 0$ ,  $P_{33}^{(9th)} = P_{23}^{(9th)} = P_{31}^{(9th)} = 0$ )

Grain Num.	$(\kappa, \theta, \phi)$ [deg]	$\alpha$ [deg]	$b_x^{(9th)}$	$b_y^{(9th)}$	$v_x^{(9th)}$	$v_y^{(9th)}$	$P_{11}^{(9th)}$	$P_{22}^{(9th)}$	$P_{12}^{(9th)}$
1	(88.414, 26.260, 67.325)	50	-0.7660	0.6428	0.6428	0.7660	-0.4924	0.4924	-0.0868
	(86.301, 25.890, 69.223)	49	-0.7547	0.6561	0.6561	0.7547	-0.4951	0.4951	-0.0696
	(84.132, 25.551, 71.177)	48	-0.7431	0.6691	0.6691	0.7431	-0.4973	0.4973	-0.0523
	(81.912, 25.245, 73.182)	47	-0.7314	0.6820	0.6820	0.7314	-0.4988	0.4988	-0.0349
	(79.645, 24.973, 75.236)	46	-0.7193	0.6947	0.6947	0.7193	-0.4997	0.4997	-0.0174
2	(74.983, 24.535, 79.469)	44	-0.6947	0.7193	0.7193	0.6947	-0.4997	0.4997	0.0174
	(72.600, 24.370, 81.639)	43	-0.6820	0.7314	0.7314	0.6820	-0.4988	0.4988	0.0349
	(70.190, 24.243, 83.835)	42	-0.6691	0.7431	0.7431	0.6691	-0.4973	0.4973	0.0523
	(67.760, 24.156, 86.052)	41	-0.6561	0.7547	0.7547	0.6561	-0.4951	0.4951	0.0696
	(65.317, 24.106, 88.282)	40	-0.6428	0.7660	0.7660	0.6428	-0.4924	0.4924	0.0868

Table 2 Slip system number, Schmid-boas notation, and Schmid factor.

Num.	Notation	Schmid factor									
		$\alpha = 50$	$\alpha = 49$	$\alpha = 48$	$\alpha = 47$	$\alpha = 46$	$\alpha = 44$	$\alpha = 43$	$\alpha = 42$	$\alpha = 41$	$\alpha = 40$
1	(111)[1 $\bar{1}$ 0]	0.2507	0.2582	0.2657	0.2730	0.2803	0.2945	0.3015	0.3083	0.3151	0.3216
2	(111)[01 $\bar{1}$ ]	0.2372	0.2269	0.2162	0.2051	0.1937	0.1699	0.1576	0.1450	0.1322	0.1191
3	(111)[10 $\bar{1}$ ]	0.4880	0.4851	0.4818	0.4781	0.4740	0.4645	0.4591	0.4534	0.4472	0.4407
4	( $\bar{1}$ 11)[110]	-0.2418	-0.2375	-0.2332	-0.2287	-0.2241	-0.2146	-0.2097	-0.2047	-0.1997	-0.1945
5	( $\bar{1}$ 11)[01 $\bar{1}$ ]	-0.0776	-0.0725	-0.0674	-0.0624	-0.0575	-0.0481	-0.0435	-0.0390	-0.0346	-0.0304
6	( $\bar{1}$ 11)[101]	-0.1641	-0.1650	-0.1658	-0.1663	-0.1666	-0.1666	-0.1663	-0.1658	-0.1650	-0.1641
7	(1 $\bar{1}$ 1)[1 $\bar{1}$ 0]	0.2462	0.2476	0.2486	0.2494	0.2498	0.2498	0.2494	0.2486	0.2476	0.2462
8	(1 $\bar{1}$ 1)[011]	0.2462	0.2476	0.2486	0.2494	0.2498	0.2498	0.2494	0.2486	0.2476	0.2462
9	(1 $\bar{1}$ 1)[101]	0.4924	0.4951	0.4973	0.4988	0.4997	0.4997	0.4988	0.4973	0.4951	0.4924
10	(1 $\bar{1}$ 1)[110]	0.2552	0.2683	0.2811	0.2937	0.3060	0.3298	0.3412	0.3522	0.3630	0.3733
11	(1 $\bar{1}$ 1)[011]	0.0866	0.0932	0.0999	0.1068	0.1137	0.1280	0.1352	0.1426	0.1500	0.1575
12	(1 $\bar{1}$ 1)[10 $\bar{1}$ ]	0.1686	0.1751	0.1812	0.1869	0.1923	0.2018	0.2059	0.2096	0.2129	0.2158

#### 4. 解析結果と考察

**4-1 初期結晶方位による GN 転位組織の相違** 著者等は既報<sup>(5)(6)</sup>で、対称双結晶でも負荷の与え方<sup>(5)</sup>や初期結晶方位の組み合わせ方<sup>(6)</sup>によって、不均一変形が生じると共に粒内に発達した帯状の領域に GN 転位が高密度に堆積すること、結晶粒内部に発達した GN 転位組織が変形の不均一性を発展させること<sup>(6)</sup>を述べた。ここでは、双結晶が傾角粒界をもち、主すべり系の空間的配置が粒界で非対称の場合に発生する GN 転位組織が、後の変形状態に及ぼす影響を述べる。

図 3 に平均引張りひずみ  $\bar{\epsilon}_{yy}$  は 0.01% の段階における初期結晶方位による変形状態の違いを示す。塑性せん断ひずみ  $\gamma^{(9th)}$  の表示範囲は、このひずみ段階における最大値から最小値まで示し、GN 転位の刃状転位密度成分  $\rho_{G,edge}^{(m)}$  と、らせん転位密度成分  $\rho_{G,screw}^{(m)}$  の表示範囲は、比較のために  $-2.0 \times 10^{10} \sim 2.0 \times 10^{10}$  [m<sup>-2</sup>] で固定してある。

主すべり系の自由なすべりによる結晶粒の形状変化が、粒界と境界条件により拘束される（これを、形状変化の『非適合』と呼ぶ。）ため、主すべり系の塑性せん断ひずみ  $\gamma^{(9th)}$  が不均一に分布する（図 3 (a)-(d) 参照）。粒 1, 2 の主すべり系の空間的配置が粒界で非対称となるため、 $\gamma^{(9th)}$  の分布も粒界で非対称となる。 $\gamma^{(9th)}$  の空間微分量である GN 転位は、モデル上、底面と粒界の交線近傍から、主すべり系のすべり面法線方向に発達した帯状の領域に、高密度に堆積している（図 3(e)-(h) 参照）。この GN 転位組織は、ほぼ完全な刃状転位密度成分から構成されており、密度は粒 1, 2 の Schmid テンソル  $P_{12}^{(9th)}$  の絶対値に比例して高くなっている（図 3 (e)-(h), (i)-(l), 表 1 参照）。

GN 転位が高密度に堆積している  $\alpha^{(1)} = 49^\circ$  の結果では、粒 1 のモデル下面と粒界面の交線近傍の局所的な領域で、極めて僅かではあるが、らせん転位密度成分が堆積している。これは、この領域における 2 次すべり系の活性化を示している<sup>(6)</sup>。

表 2 に示すように、 $\alpha$  が  $45^\circ$  から高角度側の方位では、すべり系  $(111)[10\bar{1}]$  の Schmid 因子が高くなると共に、すべり系  $(1\bar{1}\bar{1})[110]$  の Schmid 因子が低くなる。逆に、 $45^\circ$  から低角度側の方位では、すべり系  $(111)[10\bar{1}]$  の Schmid 因子が低くなると共に、すべり系  $(1\bar{1}\bar{1})[110]$  の Schmid 因子が高くなる。 $\alpha^{(1)}=49^\circ$  の場合、すべり系  $(111)[10\bar{1}]$  が活性化し易くなるため、このひずみ段階 ( $\bar{\epsilon}_{yy} = 0.01\%$ ) から、主すべり系の GN 転位組織が形成する内部応力場<sup>(12)</sup>によって、局所的な領域で、すべり系  $(111)[10\bar{1}]$  が活性化する。

更に、すべり系  $(111)[10\bar{1}]$  が活性化し易い  $\alpha^{(1)}=50^\circ$  の結果を図 4 に示す。粒 1 で主すべり系  $(11\bar{1})[101]$  とすべり系  $(111)[10\bar{1}]$  の二重すべりが生じるため (図 4 (a), (e)参照) , 2 次すべり系の活性化に伴う GN 転位の組織形成も顕著である (図 4 (d), (g)参照) .

粒 2 では、モデル上、底面と粒界面の交線近傍の局所的な領域で、すべり系  $(1\bar{1}\bar{1})[110]$  が活性化しているが (図 4 (h)参照) , その他の領域は、主すべり系の単一すべりにより変形している。このため、粒 1, 2 の粒界近傍で、主すべり系  $(11\bar{1})[101]$  と 2 次すべり系  $(111)[10\bar{1}]$  の塑性せん断ひずみに空間勾配が生じ、GN 転位の粒界堆積が生じる (図 4 (c)-(d), (g)参照) . 更に、粒 1, 2 で活性化しているすべり系の違いにより、すべり系のひずみ硬化の差が生じるため、粒 1, 2 の粒界を通した変形拘束の相互作用、即ち、『対相互作用』そのものが、変形の進行と共に更新される。

平均引張りひずみ  $\bar{\epsilon}_{yy}=1\%$  の引張りを与えた結果を図 5 に示す。粒 1, 2 で活性化しているすべり系の相違により、SS 転位密度分布の相違が顕著になる (図 5 (a)-(b), (e)-(f)参照) . 即ち、すべり系のひずみ硬化

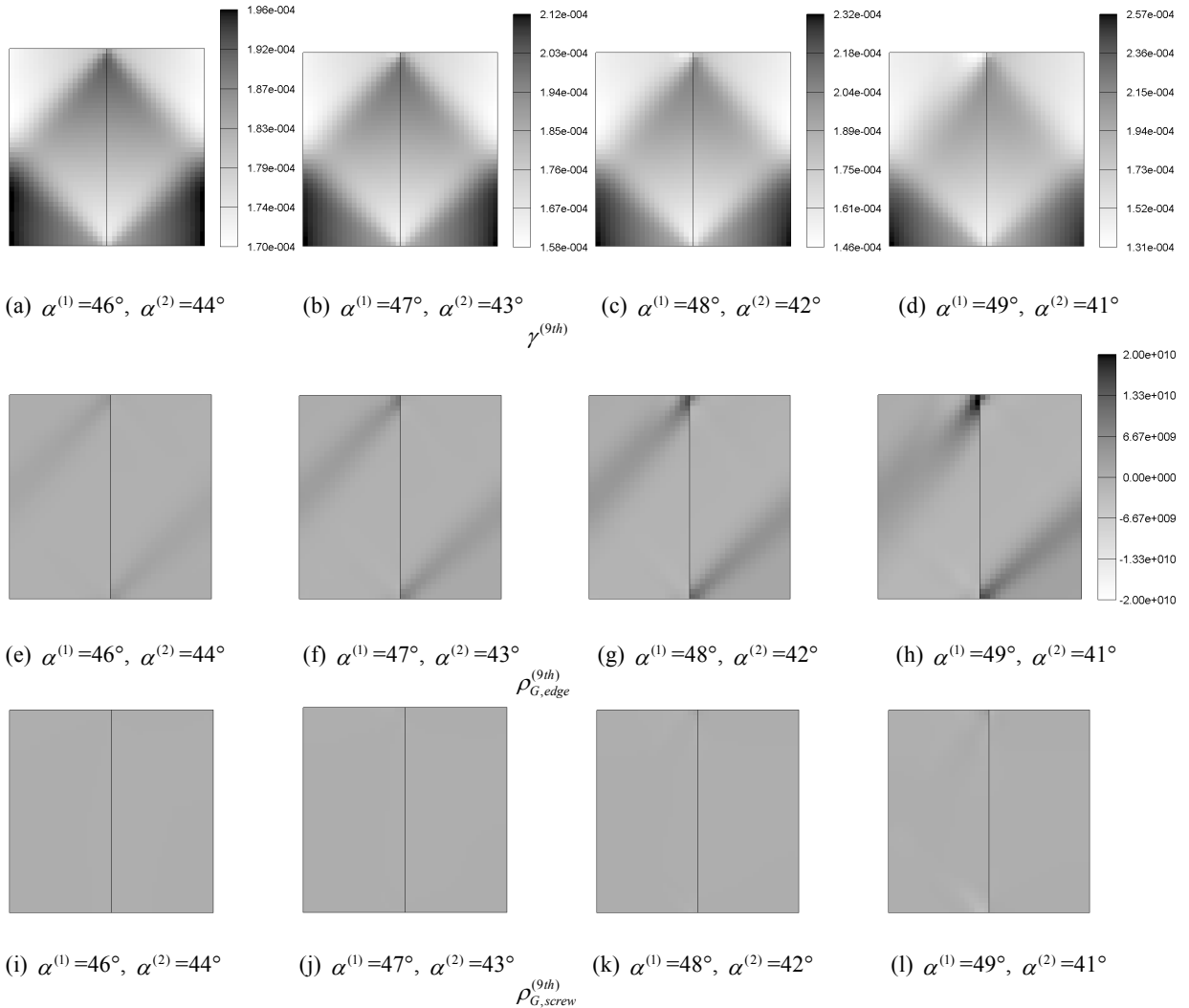


Fig. 3 (a)-(d): Distribution of plastic shear strain, Density distribution of (e)-(h): edge and (i)-(l): screw components of geometrically necessary dislocations on the primary slip systems when average tensile strain  $\bar{\epsilon}_{yy}$  is 0.01%. Unit of dislocation is  $m^{-2}$ .

の差が顕著になる。GN 転位の粒界堆積と組織形成が進展し（図 5 (c)-(d), (g)-(h)参照），変形状態が顕著に更新される。特に，粒 1 における (111)[10 $\bar{1}$ ] の塑性せん断ひずみ  $\gamma^{(3rd)}$  の分布の変化は著しい（図 5 (e)参照）。

**4・2 回位型変形場による対相互作用の評価** 双結晶が傾角粒界をもつ場合，活性化するすべり系の違いにより，GN 転位の粒界堆積が生じる場合がある。この場合，変形の進行と共に，双結晶の『対相互作用』そのものが更新される。この不均一変形と GN 転位の組織形成を関連付けて評価するため，図 6 に示すように，双結晶のすべり変形を，図 6 (a)から(b), (b)から(c)の二段階に分けて考える。図 6 (a)から(b)の変形は，粒 1, 2 が各々，独立に主すべり系のすべりによって変形した段階で，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 6 (b)から(c)の変形は，粒 1, 2 の粒界面を結合させ，境界条件に適合するように変形させた段階である。この変形場をモデル上，底面と粒界面の交線を回位芯とした仮想的な『回位』（Disclination）型の変形場と考える。

『回位』は図 7 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 7 (a)から(b)に示すような変形場を『くさび型回位』（Wedge disclination），図 7 (a)から(c)のように相対的な回転に加えて，ねじりを含む場合を『ねじれ型回位』（Twist disclination）と呼ぶ<sup>(13)</sup>。

『回位』における欠陥は，半径方向に一様ではなく，半径方向の距離に比例して線形的に広がっている。図 7 (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。主すべり系のすべりによる形状変化の『非適合』により生じる欠陥（GN 転位）は，主すべり系のすべり面上になければならない。このため，回位芯となるモデル上面（或いは，下面）と粒界の交線から，主すべり方向に垂直な方向（この解析条件下では，すべり面法線方向）に刃状転位密度成分からなる GN 転位列を形成する（図 3 (e)-(h)参照）。

結晶粒のすべり変形の Stage I から Stage II への遷移段階で転位の安定構造である変形帯（キंक帯や 2 次すべり帯）が発達することが知られている。キंक帯は主すべり方向に垂直な方向，2 次すべり帯は主すべ

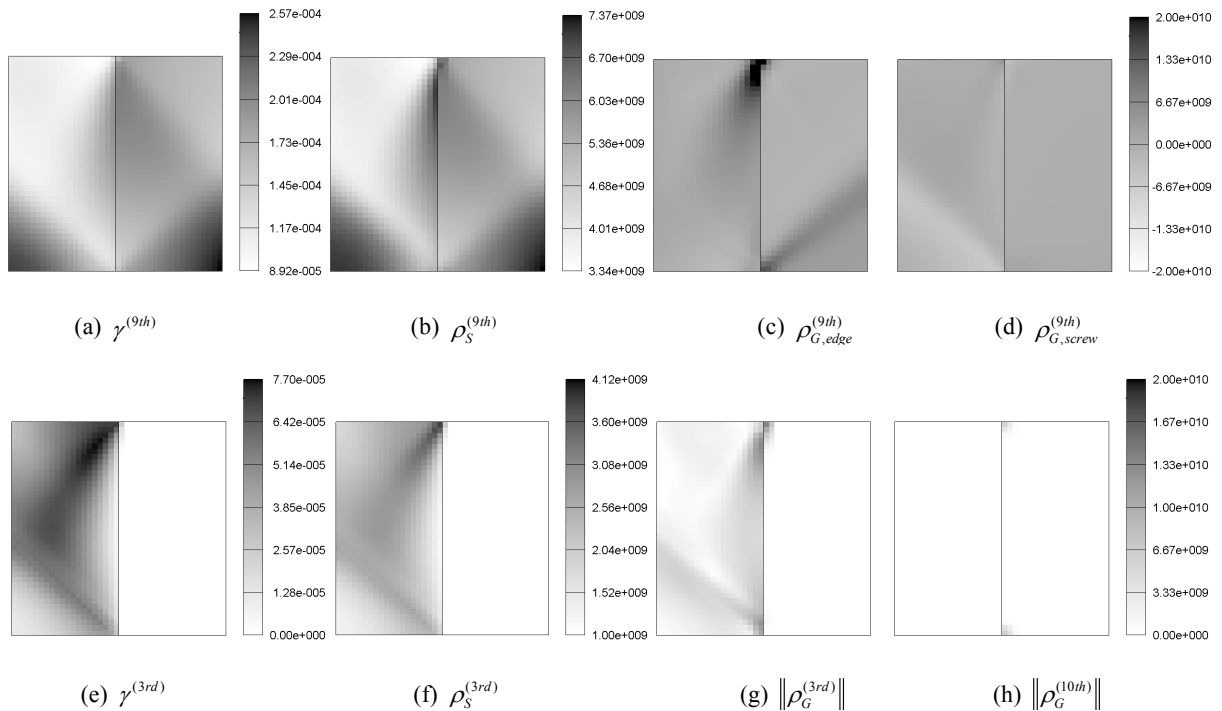


Fig. 4 (a): Distribution of plastic shear strain, (b): density distribution of statistically stored dislocations, density distribution of (c): edge and (d): screw components of geometrically necessary dislocations on the primary slip systems. (e): distribution of plastic shear strain, (f): density distribution of statistically stored dislocations, (g), (h): density distribution of norm of geometrically necessary dislocations on the secondary slip systems when the average tensile strain  $\bar{\epsilon}_{\text{ty}}$  is 0.1%. Unit of dislocation is  $\text{m}^{-2}$ .  $\alpha^{(1)}$  is  $50^\circ$ .

り面に平行な方向に発達する<sup>(14)</sup>. 即ち, 主すべり系上に堆積した刃状転位列からなる GN 転位の組織形成は『キंक帯』の形成を再現している.

変形の進行と共に (この場合, 粒 1 下面, 粒 2 上面側の) 『回位型』の変形場を進展させるためには, 2 次すべり系が活性化しなければならない. 2 次すべり

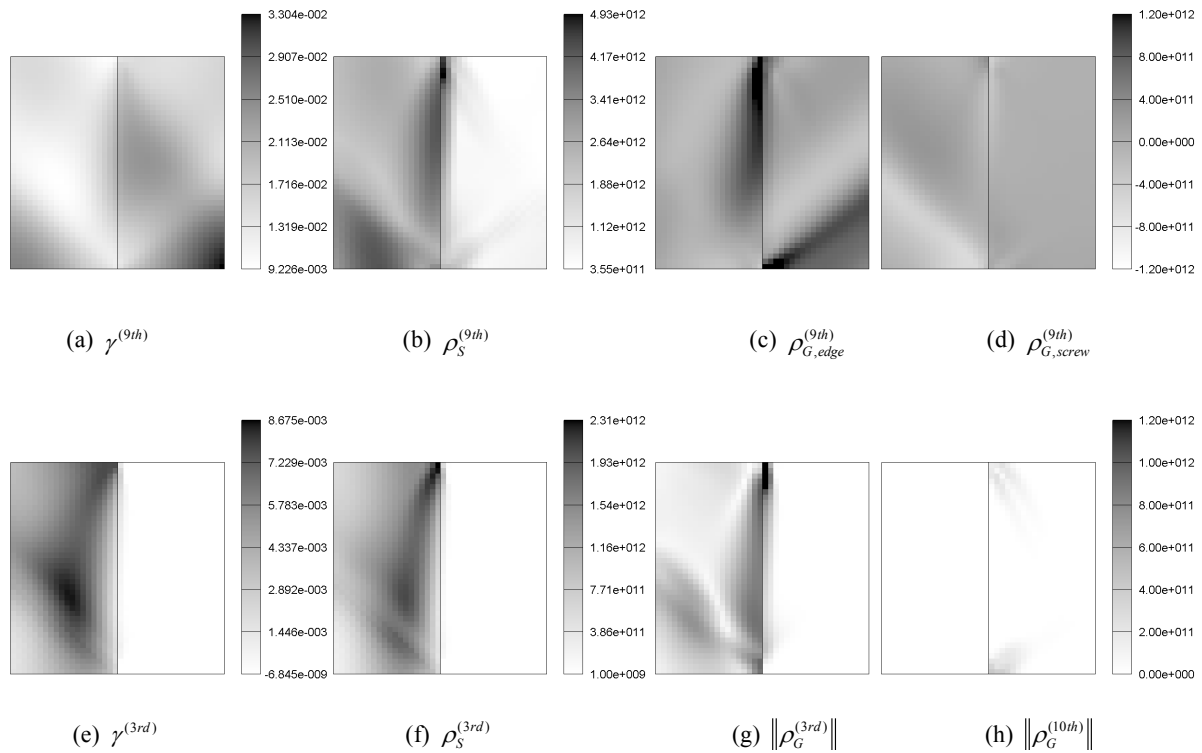


Fig. 5 (a): Distribution of plastic shear strain, (b): density distribution of statistically stored dislocations, density distribution of (c): edge and (d): screw components of geometrically necessary dislocations on the primary slip systems. (e): distribution of plastic shear strain, (f): density distribution of statistically stored dislocations, (g), (h): density distribution of norm of geometrically necessary dislocations on the secondary slip systems when the average tensile strain  $\bar{\epsilon}_{yy}$  is 1%. Unit of dislocation is  $m^{-2}$ .  $\alpha^{(1)}$  is  $50^\circ$ .

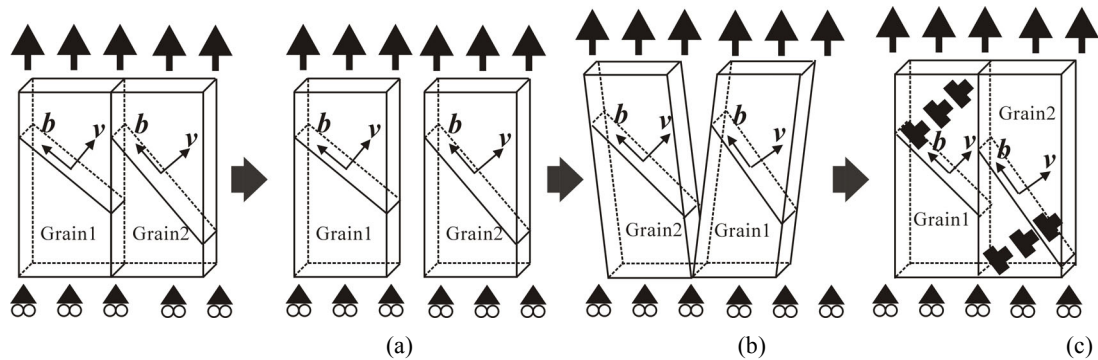


Fig. 6 Schematic illustration of (a) initial condition of compatible type bi-crystal with tilt angle grain boundary, (b) imaginary slip deformation without per body interaction, (c) imaginary wedge disclination type deformation with per body interaction.

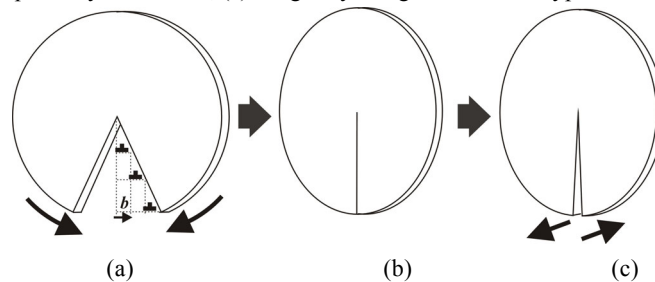


Fig. 7 Schematic illustration of (a) Initial condition with dislocation, (b) wedge and (c) twist disclination type deformation.

系の活性化と共に、回位芯を通過する主すべり系のすべり面上、即ち、主すべり系のすべり面に平行な方向に発達した帯状の領域では、2次すべり系に GN 転位が高密度に堆積する (図 4 (g)参照)。この GN 転位の組織形成は『2次すべり帯』の形成を再現している。

図 7 (c)に示す『ねじれ型回位』を考えれば、形状変化の『非適合』により形成される GN 転位組織と、ひずみの『非適合』により生じた GN 転位の粒界堆積の重畳を評価できる (図 5 (c)-(d)参照)。

以上、述べたように、双結晶の不均一変形をモデル上面 (及び、下面) と粒界の交線を回位芯とした仮想的な『回位型』と考えれば、傾角粒界をもつ双結晶に生じる粒界で非対称な不均一変形と GN 転位の組織形成を関連付けて評価できる。

## 5. 結 言

傾角粒界をもつ適合型双結晶の引張変形に伴う粒界で非対称な GN 転位の組織形成が、後の変形状態に及ぼす影響と、これの評価方法を検討した結果を以下に述べる。

- (1) 双結晶が傾角粒界をもつ場合、適合型であっても、変形の進行と共に、主すべり系のすべりによる結晶粒の形状変化の『非適合』に起因する不均一変形と GN 転位の組織形成に加えて、活性化したすべり系のひずみ硬化の差により、粒界堆積が生じる場合がある。
- (2) 双結晶の不均一変形場を、モデル上面 (或いは、下面) と粒界の交線を回位芯とした仮想的な『回位型』の変形場と考えることにより、結晶粒に生じる不均一変形と GN 転位の組織形成を関連付けて評価することができる。
- (3) 仮想的な『回位型』の変形場は刃状転位列により表され、刃状転位列は活動すべり系のすべり面上になければならない。このため、主すべり系の単一すべりにより、形状変化の『非適合』が生じる場合、回位芯からすべり面法線方向上に刃状転位密度成分からなる GN 転位列が発生する。これは『キンク帯』の形成を再現している。

- (4) 変形の進行と共に、仮想的な『回位型』の変形場を進展させるためには、2次すべり系が活性化しななければならない。主すべり系のすべり面に平行な方向に発達した帯状の領域で、2次すべり系上に GN 転位が高密度に堆積する。これは『2次すべり帯』の形成を再現している。

## 参考文献

- (1) Hook, R. E. and Hirth, J. P., The Deformation Behavior of Isoaxial Bicrystals of Fe-3% Si, *Acta Metall.*, **15** (1967) 535-551
- (2) Ashby M. F., The Deformation of Plastically Non-homogenous Alloys, *Phil. Mag.*, **21** (1970) 399-424
- (3) Livingston, J. D. and Chalmers, B., Multi Slip in Bicrystal Deformation, *Acta Met.*, **5** - 6 (1957) 322-327
- (4) Hauser, J. J. and Chalmers, B., The Plastic Deformation of Bicrystals of f.c.c. Metals, *Acta Met.*, **9** - 9 (1961) 802-818
- (5) 近藤了嗣, 大橋鉄也, 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, *機論, A*, **71**-705 (2004) 809-816
- (6) 近藤了嗣, 大橋鉄也, 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, *機論, A*, **71**-711 (2005) 1451-1458
- (7) Hill R., Generalized Constitutive Relations for Incremental Deformation of Metal Crystals by Multislip, *J. Mech. Phys. Sol.*, **14** (1966) 95-102
- (8) Ohashi T., Numerical Modeling of Plastic Multislip in Metal Crystals of fcc. Type, *Phil. Mag. A*, **70** - 5 (1994) 793-803
- (9) 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
- (10) 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
- (11) 大橋鉄也, 日本鉄鋼協会, 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) 73-95
- (12) 大橋鉄也, 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, *機論, A*, **68** - 675 (2002) 1490-1497.
- (13) 加藤雅治, 入門 転位論 (1999) 168, 裳華房
- (14) Higashida K., Takamura J. and Narita N., The Formation of Deformation Bands in F.C.C. Crystals, *Mat. Sci. Eng.*, **81** (1986) 239-258