

双結晶モデルに生じる GN 転位パターンと密度の粒界傾斜依存性

河野 義樹^{*1}, 田丸 直也^{*2}, 石井 悟^{*1}, 眞山 剛^{*3}, 近藤 了嗣^{*4}, 大橋 鉄也^{*5}

Grain boundary inclination dependence of GN dislocation patterns and density in bicrystal model

Yoshiki KAWANO^{*1}, Naoya TAMARU^{*2}, Satoru ISHII^{*1}, Tsuyoshi MAYAMA^{*3},
Ryouji KONDOU^{*4} and Tetsuya OHASHI^{*5}^{*1} National Institute of Technology, Asahikawa College, Department of Mechanical Systems Engineering
2-2 Shunkodai, Asahikawa-shi, Hokkaido 071-8142, Japan^{*2} National Institute of Technology, Asahikawa College, Advanced Course of Production System Engineering
2-2 Shunkodai, Asahikawa-shi, Hokkaido 071-8142, Japan^{*3} Priority Organization for Innovation and Excellence Department of Materials Science and Engineering, Magnesium Research Center
Kumamoto University, 2-39-1 Kurokami, Chuo-ku, Kumamoto 860-8555, Japan^{*4} Faculty of Engineering Department of Mechanical Systems Engineering, University of Ryukyus
1 Senbaru, Nishihara-cho, Nakagami-gun, Okinawa 903-0213, Japan^{*5} Department of Mechanical Engineering, Kitami Institute of Technology
165 Koen-cho, Kitami-shi, Hokkaido 090-8507, Japan

Received 21 November 2014

Abstract

Deformation behaviors of polycrystalline metals are quite complex, and we are not easy to directly investigate them; thus, analyses employing simple models such as bicrystals are required. In this study, we conducted crystal plasticity analysis of unidirectional tensile tests, using compatible-symmetric-type bicrystal models with the not-inclined grain boundary and incompatible-type bicrystal model with the inclined grain boundary; we investigated changes in patterns of geometrically necessary dislocation (GND) bands and the density of GNDs in the initial deformation. In the condition where the grain boundary contacted with the constrained faces, GND bands were formed and the distribution was changed with changing the inclination angle α of the grain boundary. In contrast, GNDs were not localized in high density in the condition where the grain boundary contacted with the free surfaces; the changes were caused by two-reasons: one was changes of compatibility of the bicrystal model with changing the inclination angle α , and the other was that deformation shapes of the bicrystal model under tensile loading were changed with changing the inclination angle α and the deformation was constrained by the constrained faces. The compatibility of and average density of GNDs in the bicrystal model could be estimated using differences of components of Schmid tensors between the crystal grains.

Key words : Crystal plasticity analysis, Bicrystal model, Geometrically necessary dislocations, Grain boundary inclination, Non-uniform deformation, Schmid tensor

1. 緒 言

金属多結晶体の変形挙動は極めて複雑であり、その変形挙動を理解するためには、各結晶粒間で変形と共に生

No.14-00630 [DOI: 10.1299/transjsme.14-00630], J-STAGE Advance Publication date : 4 March, 2015

^{*1} 正員, 旭川工業高等専門学校 (〒071-8142 北海道旭川市春光台 2-2)

^{*2} 学生員, 旭川工業高等専門学校

^{*3} 正員, 熊本大学大学院先端機構 (〒860-8555 熊本県熊本市中央区黒髪 2-39-1)

^{*4} 正員, 琉球大学 (〒903-0213 沖縄県中頭郡西原町字千原 1)

^{*5} 正員, フェロー, 北見工業大学 (〒090-8507 北海道北見市公園町 165)

E-mail of corresponding author: kawano@asahikawa-nct.ac.jp

じる力学的相互作用を理解する必要がある。この力学的相互作用を理解するためには、まずは現象を単純化して検討する必要がある。その具体的な試みの一つとして、最も単純な多結晶体である双結晶を用いた研究がある(猪子, 2011)。双結晶を用いた研究では、結晶方位制御された試料を変形させ、粒界の強度への寄与(万ら, 1991, Hirth, 1972, Hook and Hirth, 1967a, 1967b)、塑性ひずみの非適合性(Hook and Hirth, 1967b)、塑性変形の結晶方位差依存性(Zaefferer, et al., 2003)、粒界近傍への転位の堆積(Liang and Dunne, 2009)とそれによる応力集中(Livingston and Chalmers, 1957)、粒界とGN転位パターンとの関係(Zhang, et al., 1999)等、多方面の研究が実施されてきた。しかしながら、双結晶の変形下における現象も極めて複雑であり、様々な現象が重なった結果として変形が観測されるため、その詳細の理解は容易ではなく、結晶粒間に働く力学的相互作用を理解するためには、より単純化したモデルによる解析が必要である。

数値シミュレーションの手法を用いた解析は、外乱の少ない限定された条件で調査を実施できることから、双結晶の力学的な相互作用を理解するための強力なツールとなっている。数値シミュレーションを用いた手法は、分子動力学法(Molecular Dynamics, MD)等の離散的なモデルを用いた手法と、結晶塑性有限要素法等の連続体モデルを用いた手法に大別される。MDを用いた手法(Cahn and Taylor, 2004, Cahn, et al., 2006, Hansen, 2004, Ivanov and Mishin, 2008, Shibutani, et al., 2013)は、結晶粒界およびその近傍での転位の生成・活動を原子レベルのサイズから詳細に明らかにすることが可能である。しかしながら、その計算コストのために取り扱う事のできる試料のサイズは限られている。一方、結晶塑性有限要素法を用いた手法(Liang and Dunne, 2009, Ohashi, 1987, Zaefferer, et al., 2003)は、結晶粒界での原子の振舞いを詳細に追跡することは困難であるが、MDと比較して大きなサイズの試料を取り扱えるという利点がある。我々の研究グループの興味の対象は双結晶と実際の多結晶の変形挙動の理解を結びつける結晶粒レベルのサイズからの理解であり、これまで結晶塑性有限要素法を用いた双結晶の解析を実施してきた。

近藤, 大橋(2005a)は、結晶粒間に粒界の面積変化による変形拘束が生じない条件、所謂『適合条件』を満たす対称双結晶を用いた一軸引張りの結晶塑性解析を実施し、適合条件を満たす対称双結晶であっても、外部からの負荷の与え方や、課せられた力学的境界条件によって、すべり変形に制約が働き、幾何学的に必要な転位(GN転位, GND: Geometrically Necessary Dislocation)が高密度に堆積した帯状の領域(GN転位帯)を形成することを見出した。すなわち、このことは、適合条件を満たす双結晶の一見単純な引張変形においても、その変形は不均一であることを示している。不均一な変形は、材料の破壊に結びつくことから(Kang, et al., 2013, Tvergaard, 2014)、これに関する更なる調査は重要である。近藤他(2006)は、弾性異方性の効果や、2次すべり系の効果、材料に内在する初期不均一性を考慮することで、現実に対称双結晶で観測される粒界近傍で生じる非対称な変形(微視的非適合性, Micro-Incompatibility)の再現に成功した。また、Mayama, et al.(2009)は、近藤, 大橋(2005a)と同様の対称双結晶を用いて、一軸引張-圧縮の繰り返し変形の結晶塑性解析を実施し、GN転位密度の発展は、繰返し負荷時の最大ひずみ量に大きな影響を受けることを示した。

上記の様に、単純化した双結晶モデルを用いた結晶塑性有限要素法による解析は、結晶粒間に働く力学的相互作用や、それにより生じる不均一変形とGN転位の発展等の理解に成果を上げてきた。しかしながら、その一方で、双結晶を用いた研究は、多結晶体中に存在する結晶粒とは異なる境界条件で変形解析が実施されることや、制御された結晶方位や整った形状の結晶粒を用いた解析であるため、多結晶体の変形で実際に起こる現象と隔たりのあるのもまた事実であり、多結晶体の変形挙動をより深く理解するためには、そこで考慮されていない様々な効果の一つ一つを理解し、その知見を積み重ねていく必要がある。適合型対称双結晶の粒界を負荷方向に対して傾斜させた試料を一軸引張変形させた場合、双結晶の対称性の破れから、個々の結晶粒の変形形状は異なることが予測される。すなわち、この双結晶は『非適合型』となり、双結晶には粒界を通した変形拘束の力学的相互作用が働くと考えられる。しかしながら、その詳細は不明である。また、変形の際に試料に課される境界条件の影響を明らかにすることも、双結晶と現実の材料の変形挙動の理解を結びつけるためには必要である。本研究では、負荷方向に対する粒界の傾斜と不均一な変形との関係に着目して双結晶の結晶塑性解析を実施し、粒界の傾斜とGN転位帯の構造の関係および、それに対する拘束条件(境界条件)の影響について調査した。また、双結晶におけるGN転位の密度の評価法についても検討を行った。

2. 解析方法

本研究で実施する双結晶の一軸引張解析には、結晶塑性有限要素法解析コード clp (大橋, 1987, Ohashi, 1987, 1994, 1997, 2005, 近藤, 大橋, 2005a, 2005b, 2006a, 2006b, Mayama, et al., 2009, Ohashi and Kondou, 2013)を用いる。以下に、その解析コード中で、本研究で使用した数値モデルや、材料の幾何モデル、解析条件について述べる。

2・1 数値モデル

すべり系が活動を開始する条件として以下に示す Schmid 則を用いる。

$$\theta^{(n)} = P_{ij}^{(n)} \sigma_{ij} \quad (1a)$$

$$\dot{\theta}^{(n)} = P_{ij}^{(n)} \dot{\sigma}_{ij} \quad (1b)$$

$$P_{ij}^{(n)} = \frac{1}{2} (v_i^{(n)} b_j^{(n)} + v_j^{(n)} b_i^{(n)}) \quad (2)$$

ここで、 $\theta^{(n)}$ はすべり系 n の臨界分解せん断応力 (CRSS : Critical Resolved Shear Stress) であり、式(1a), (1b)の右辺は、そのすべり系に作用する分解せん断応力及びその増分である。 $P_{ij}^{(n)}$ は Schmid テンソル、 σ_{ij} は Cauchy 応力テンソル、 $v_i^{(n)}$ はすべり面の法線方向の単位ベクトル、 $b_j^{(n)}$ はすべり方向の単位ベクトルである。ひずみ硬化則は、塑性せん断ひずみの増分 $\dot{\gamma}^{(m)}$ を用いて以下の様に表されるものとする。

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

上式において、 $h^{(nm)}$ はひずみ硬化係数、 m, n は活動すべり系を意味しており、活動すべり系のみ和を取る。本解析においては微小変形を仮定し、弾塑性構成式は以下の式(Hill, 1966)に従うものとする。

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

S_{ijkl}^e は弾性コンプライアンスである。CRSS は、以下に示す修正した Bailey-Hirsch 型の式(Ohashi, 1987)に従うものとする。

$$\theta^{(n)} = \theta_0 + \sum_m \Omega^{(nm)} a \mu \tilde{b} \sqrt{\rho_s^{(m)}} \quad (5)$$

θ_0 は格子摩擦応力を含む転位強化以外の影響を表す項、 a は 0.1 程度の数値係数、 μ はせん断弾性係数、 \tilde{b} はバースベクトルの大きさ、 $\rho_s^{(m)}$ は m 番すべり系における統計的に蓄積する転位 (SS 転位 : Statistically Stored Dislocations) , $\Omega^{(nm)}$ は転位の相互作用の強さを表す係数行列である。SS 転位密度の増分は、以下の式を用いて評価する(Ohashi, 1994)。

$$\dot{\rho}_s^{(n)} = \frac{c \dot{\gamma}^{(n)}}{\tilde{b} L^{(n)}} \quad (6)$$

c は 1 のオーダの係数、 $L^{(n)}$ は運動転位の平均自由行程である。 $L^{(n)}$ は、SS 転位密度と GN 転位密度 $\rho_G^{(m)}$ のノルム $\|\rho_G^{(m)}\|$ の増大と共に短くなるという以下のモデルを用いた(Ohashi, 2005)。

$$L^{(n)} = \frac{c^*}{\sqrt{\sum_m \omega^{(nm)} (\rho_s^{(m)} + \|\rho_G^{(m)}\|)}} \quad (7)$$

c^* は10-100程度の値の材料定数であり、 $\omega^{(nm)}$ は転位同士の相互作用の強さを表す係数行列である。GN転位密度のノルムは、GN転位密度の刃状成分 $\rho_{G,edge}^{(m)}$ とらせん成分 $\rho_{G,screw}^{(m)}$ を用いて以下の様に表される(Ohashi, 1997).

$$\|\rho_G^{(m)}\| = \sqrt{(\rho_{G,edge}^{(m)})^2 + (\rho_{G,screw}^{(m)})^2} \quad (8)$$

$$\rho_{G,edge}^{(m)} = -\frac{1}{b} \frac{\partial \gamma^{(m)}}{\partial \xi^{(m)}} \quad (9)$$

$$\rho_{G,screw}^{(m)} = \frac{1}{b} \frac{\partial \gamma^{(m)}}{\partial \zeta^{(m)}} \quad (10)$$

$\xi^{(m)}$ と $\zeta^{(m)}$ はそれぞれ、すべり面上におけるすべり方向およびそれに垂直な方向を表している。ひずみ硬化係数は、式(3)および式(5)~(7)を用いて導かれ、以下の様になる(Ohashi and Kondou, 2013).

$$h^{(nm)} = \frac{a\mu c\Omega^{(nm)}}{2L^{(m)}\sqrt{\rho_s^{(m)}}} = \frac{a\mu c\Omega^{(nm)}}{2c^*} \sqrt{\frac{\sum_k \omega^{(mk)} (\rho_s^{(k)} + \|\rho_G^{(k)}\|)}{\rho_s^{(m)}}} \quad (11)$$

2・2 双結晶の幾何モデルおよび解析条件

本解析に用いた試料を図1に示し、解析に用いたパラメータを表1に示す。双結晶の一軸引張試験における変形初期では、弾性的非適合性(猪子, 1980)の効果により粒界近傍より塑性変形が開始するため、弾性異方性は不均一変形に対して重要な因子である(Hook and Hirth, 1967a, 近藤, 大橋, 2006, 大橋他, 1980)。しかしながら、変形の進行と共に弾性的非適合性の効果よりも塑性ひずみによる非適合性(Hook and Hirth, 1967b)が不均一変形に対して支配的となる(付録参照)。そこで、本研究では、解析結果を理解しやすくするため、材料は仮想的な等方弾性体とする。また、2次すべり系の活動によって生じる加工硬化や形状変化の影響を排除して結果を考察するため、塑性変形は主すべり系の活動によってのみ進行するものとする。

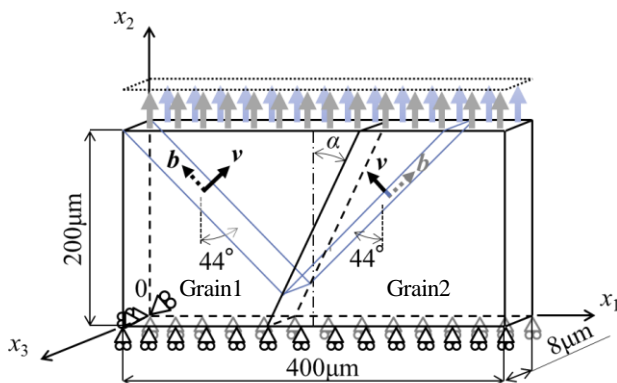


Fig. 1 Schematic of a bicrystal model. α is the angle between the grain boundary plane and tensile direction. v is the slip plane normal vector and b is the slip direction vector.

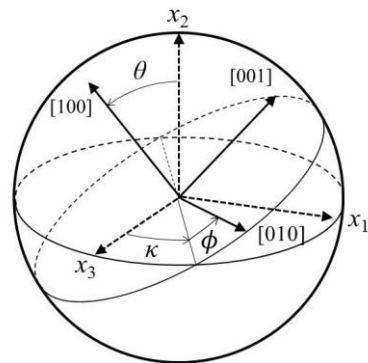


Fig. 2 Definition of Euler angles κ , θ and ϕ .

3つの単位ベクトル[100], [010], [001]を基本ベクトルとする結晶座標系と全体座標系(x_1, x_2, x_3)の回転関係は, Euler角の組(κ, θ, ϕ)を用いて図2の様に表し, それは以下の式により表現できる.

$$\begin{pmatrix} [100] \\ [010] \\ [001] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin\theta \cos\phi & \cos\theta & \sin\theta \sin\phi \\ \sin\kappa \cos\theta \cos\phi + \cos\kappa \sin\phi & \sin\kappa \sin\theta & -\sin\kappa \cos\theta \sin\phi + \cos\kappa \cos\phi \\ \cos\kappa \cos\theta \cos\phi - \sin\kappa \sin\phi & \cos\kappa \sin\theta & -\cos\kappa \cos\theta \sin\phi - \sin\kappa \cos\phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \quad (12)$$

本研究で用いる双結晶試料に与える結晶方位を表2に示す. 負荷方向に対してすべり面の成す角が45°の時には, GN転位帯は発生せず, 一方, すべり面の成す角が44°および46°の場合は, GN転位帯が形成するのが確認されている(近藤, 大橋, 2005a, 2005b). 本研究では, すべり面の成す角が44°となる様に Euler角を決定した. 境界条件は, 試料下面を x_2 軸方向固定とし, 試料上面に対して公称ひずみ1%の強制変位を x_2 軸方向に与える. 上記条件で, 双結晶の粒界の傾斜角 α を 0~90°の範囲で変化させて一軸引張の解析を実施する.

Table 1 Material parameters employed in the present simulations.

Elastic compliances, m^2/N	$S_{11} = 1.0 \times 10^{-11}, S_{12} = -0.25 \times 10^{-11}, S_{44} = 2.5 \times 10^{-11}$
Shear modulus, Pa	$\mu = 1/S_{44} = 0.4 \times 10^{11}$
Magnitude of Burgers vector, m	1.0×10^{-10}
θ_0 in Eq. (5), Pa	0.3×10^6
α in Eq. (5)	0.1
c in Eq. (6)	1.0
c^* in Eq. (7)	15
Interaction matrix in Eq. (5)	$\Omega^{(nm)} = 1.01$
Interaction matrix in Eq. (7)	$\omega^{(nm)}=0$ when primary as against primary or co-planar, else $\omega^{(nm)}=1.0$.
Initial density of SS dislocations, m^{-2}	9.0×10^9

Table 2 Crystal orientations and Schmid factors and tensors.

	Grain 1	Grain 2
Euler angles (κ, θ, ϕ)	(74.983, 24.535, 79.469)	(74.983, 24.535, 259.469)
Primary slip system	(11 $\bar{1}$)[101]	(11 $\bar{1}$)[101]
Slip direction vector (b_x, b_y, b_z)	(-0.6947, 0.7193, 0)	(0.6947, 0.7193, 0)
Slip plane normal vector (v_x, v_y, v_z)	(0.7193, 0.6947, 0)	(-0.7193, 0.6947, 0)
Schmid factor for loading in y-axis	0.4951	0.4951
Schmid tensor of primary slip system	$P_{ij}^{(primary)} = \begin{pmatrix} -0.4997 & 0.01739 & 0 \\ 0.01739 & 0.4997 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$P_{ij}^{(primary)} = \begin{pmatrix} -0.4997 & -0.01739 & 0 \\ -0.01739 & 0.4997 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

3. 解析結果と考察

3・1 GN 転位帯の形成と分布

近藤, 大橋 (2005b) は, 粒界に傾斜のない (粒界の傾斜角 $\alpha=0^\circ$) 適合型対称双結晶の一軸引張変形解析を実施し, 主すべり方向と負荷方向の成す角が44°の時において, 試料上面と粒界との交点より約45°方向に伸びる, ほぼ刃状成分から成る負のGN転位帯が発達するという結果を得た. 一方で, 近藤, 大橋 (2005a) は, それと同様の結晶方位で, 結晶粒界と試料の上面および下面が平行な適合型双結晶の場合 (粒界の傾斜角 $\alpha=90^\circ$ の場合),

GN 転位帯は形成されないという結果も得ている。本節では、粒界の傾斜角 α の変化とともに、GN 転位帯の分布がどのように変化するかを調査する。

図 3 に、公称ひずみ $\bar{\epsilon}_{22} = 1\%$ 時における、主すべり系の GN 転位密度の刃状成分の分布を示す。これらの図において、図の見やすさのため、カラーバーの示す最大値以上の値は最大値と同色、最小値以下の値は最小値と同色とした。本解析において、GN 転位はほぼ刃状成分から成ることを確認済みである。

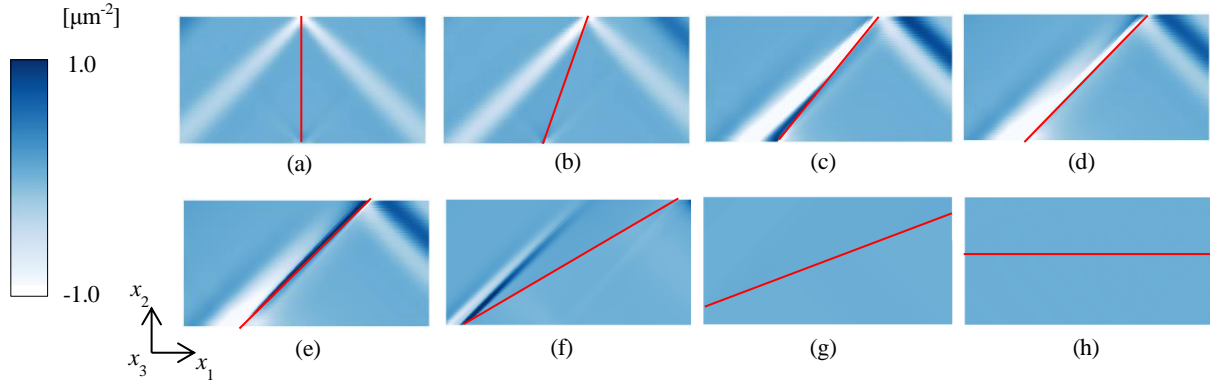


Fig. 3 Density distributions of edge components of geometrically necessary dislocations $\rho_{G,edge}^{(primary)}$ on the primary slip system when nominal strain $\bar{\epsilon}_{22} = 1\%$. (a) $\alpha = 0^\circ$, (b) $\alpha = 20^\circ$, (c) $\alpha = 40^\circ$, (d) $\alpha = 45^\circ$, (e) $\alpha = 46^\circ$, (f) $\alpha = 60^\circ$, (g) $\alpha = 70^\circ$ and (h) $\alpha = 90^\circ$.

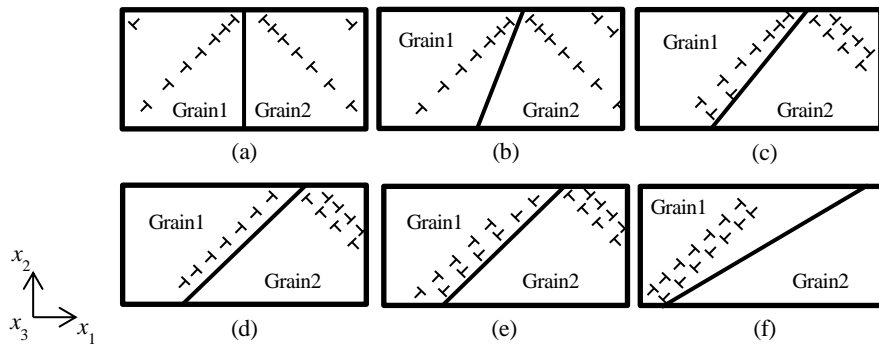


Fig. 4 Schematic of the GND bands shown in the Fig. 3. (a) $\alpha = 0^\circ$, (b) $\alpha = 20^\circ$, (c) $\alpha = 40^\circ$, (d) $\alpha = 45^\circ$, (e) $\alpha = 46^\circ$ and (f) $\alpha = 60^\circ$.

GN 転位帯の分布を観察する。粒界が試料の上面および下面と交わる場合（図 3 (a)-(f)），粒界の傾斜角 α の大きさに関わらず、GN 転位帯が粒界と試料の上面または下面の交わる箇所から伸びていることが観察できる。これは、近藤、大橋（2005a, 2005b）が適合型対称双結晶（粒界の傾斜角 $\alpha = 0^\circ$ ）で得た結果と同様である。本解析に用いた試料の上および下に、他の結晶粒が存在すると仮定すると、この位置は粒界 3 重点（3 重線）の位置であり、そこから GN 転位帯が伸びていることになる。3 重結晶を用いた解析（近藤、大橋、2006b, Mayama, et al., 2009, Ohashi and Kondou, 2013）でも同様の場所に GN 転位帯が形成されるのが観察されている。一方、粒界の傾斜が大きく、粒界が試料の側面と交わる場合（図 3 (g), (h)）は、GN 転位の密度は低く、粒界の傾斜角 $\alpha = 90^\circ$ の場合は、近藤、大橋（2005）の結果と同様に、GN 転位帯は形成されなかった。

GN 転位帯の分布をより詳細に調べると、上記の粒界 3 重点の位置から伸びる負の GN 転位帯以外にも GN 転位帯が形成されているのが観察でき、それらは粒界が傾斜した場合に分布が変化するのが確認できる。GN 転位帯の分布を模式的に示したものを図 4 に示す。粒界 3 重点の位置から伸びる負の GN 転位帯以外の GN 転位帯に対象を絞って観察すると、Grain1 側では、粒界の傾斜角 $\alpha = 45^\circ$ 近傍の場合（図 3 (c), (e), 図 4 (c), (e)），粒界近傍に符号が正の GN 転位帯が形成されている。Grain2 側では、粒界の傾斜の増加と共に試料の右上から正の GN 転位帯が発達し（図 3 (b), 図 4 (b)），さらに粒界の傾斜角 α が大きくなると粒界 3 重点から伸びる負の GN 転位帯と隣接する（図 3 (c)-(e), 図 4 (c)-(e)）。しかしながら、粒界の傾斜角 α がさらに大きくなり、粒界と試料側面が

交わる条件の場合 (図 3 (g), (h)), 粒界 3 重線から伸びる GN 転位帯の場合と同様に, これらの GN 転位帯も形成されない。

以上より, GN 転位帯の分布は粒界の傾斜角 α の変化と共に変化し, 特に, 粒界が試料上面および下面と交わる場合と, 試料側面から抜け出る場合では, GN 転位の堆積の仕方が大きく変化することがわかった. GN 転位は, ひずみにこう配のあるところに存在する転位である. したがって, この GN 転位帯の分布の変化は, 粒界の傾斜角 α の変化によって, ひずみの分布が変化したことを反映したものである. 次節では, 粒界の傾斜に伴うひずみの分布の変化を調査することにより, GN 転位帯の分布の変化原因を調査する。

3・2 ひずみの分布と GN 転位の分布

本解析では, GN 転位帯の分布は, 粒界の傾斜角 α の変化と共に変化した. 本節では, 主すべり系の塑性せん断ひずみ $\gamma^{(primary)}$ と GN 転位密度 $\rho_{G,edge}^{(primary)}$ の分布を比較しながら観察する. 図 5 に, 主すべり系における塑性せん断ひずみの分布を示す. 塑性せん断ひずみの分布 (図 5) と GN 転位密度の分布 (図 3) を比較すると, 塑性せん断ひずみのすべり方向へのこう配が大きいところに, GN 転位帯が形成されており, そのこう配が急な場所ほど, その密度が高いことが確認できる. 粒界の傾斜角 α と塑性せん断ひずみのこう配の大きさの関係に着目すると, 粒界の傾斜角 $\alpha = 45^\circ$ 近傍までは, α が大きくなると, 塑性せん断ひずみのこう配は大きくなり, それを超えて α が大きくなると, そのこう配は緩やかになる傾向にあることがわかる. さらに粒界の傾斜角 α が大きくなり, 粒界が試料側面と交わる条件の場合 (図 5 (g)), 各々の結晶粒で塑性せん断ひずみはほぼ一様となる. さらに粒界の傾斜角が大きくなり, 粒界が試料上面および下面と平行になると, 試料全体で塑性せん断ひずみは一様となる (図 5 (h)). 粒界の傾斜と共に起こる GN 転位密度分布の変化 (図 3) は, この塑性せん断ひずみの分布の変化を反映したものである。

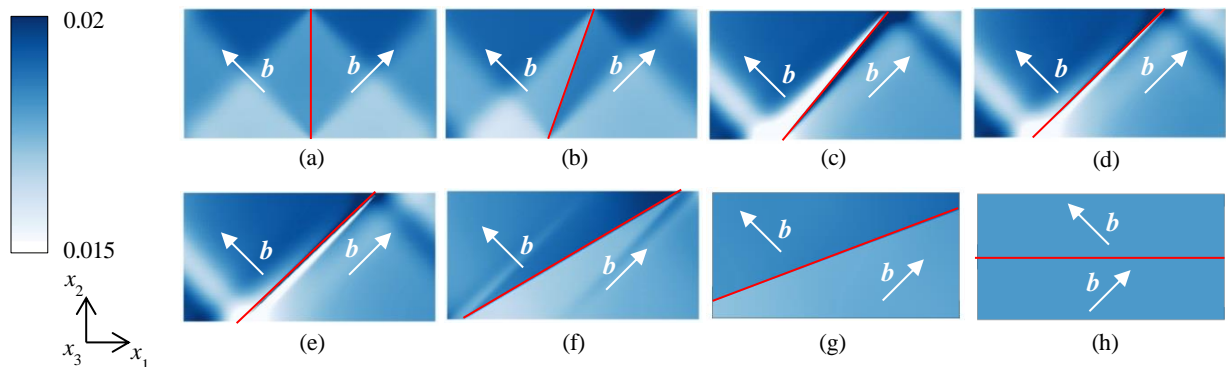


Fig. 5 Distributions of slip strain $\gamma^{(primary)}$ on the primary slip system when nominal strain $\bar{\epsilon}_{22} = 1\%$. (a) $\alpha = 0^\circ$, (b) $\alpha = 20^\circ$, (c) $\alpha = 40^\circ$, (d) $\alpha = 45^\circ$, (e) $\alpha = 46^\circ$, (f) $\alpha = 60^\circ$, (g) $\alpha = 70^\circ$ and (h) $\alpha = 90^\circ$. b is the slip direction vector.

粒界の傾斜と共に, 塑性せん断ひずみの分布が変化する原因は, 粒界が傾斜することにより, 2 つの結晶粒の形状が変化するため, それらが負荷を受けた際の変形形状も変化するためであると考えられる. すなわち, 粒界の傾斜角 α の変化と共に起る双結晶の非適合性の変化により, その粒界面の形状を一致させるために変形の不均一性は変化する. さらに, 試料上面および下面では負荷方向に垂直な平面を保つ必要があり, 粒界の傾斜と共に変化する試料の変形はその上面および下面で拘束されるため, 塑性せん断ひずみの分布は粒界の傾斜と共に変化し, これによっても変形の不均一性は変化する。

以上より, 本解析では, i) 双結晶の非適合性によって粒界面に生じる変形拘束と, ii) 試料上面と下面の変形拘束により, 変形に不均一性が導入されて GN 転位帯が形成されることがわかる. また, 双結晶の変形拘束のされ方およびその強さは粒界の傾斜角 α の変化と共に変化するため, 変形の不均一性が変化して GN 転位密度の分布と密度 (図 3) も変化することがわかる. 次節では, 粒界の傾斜と GN 転位の密度の関係について, より定量的に調べる。

3・3 GN 転位密度の Schmid テンソルによる評価

粒界の傾斜角の変化と共に双結晶の非適合性の強さは変化し、個々の結晶粒の変形形状を粒界面で一致させるための変形拘束と、試料に課せられた変形拘束が、塑性せん断ひずみのこう配の大きさを変化させる。そのこう配の変化と共に GN 転位密度の大きさも変化する。ここでは、双結晶が変形した際の、それを構成する結晶粒のひずみの違い、すなわち双結晶の非適合性の強さの違いが GN 転位密度に与える影響について調べる。

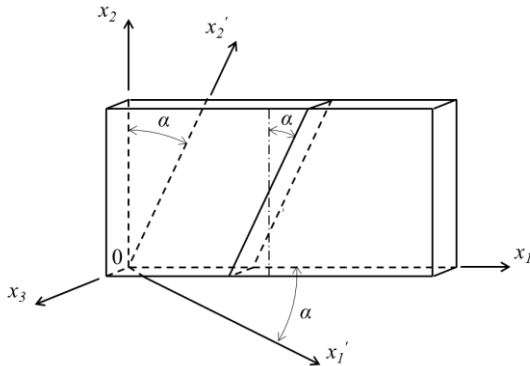


Fig. 6 Schematic of the rotation relation between global coordinate system x_1 - x_2 - x_3 and grain boundary coordinate system x_1' - x_2' - x_3 .

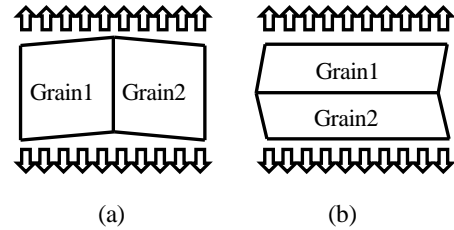


Fig. 7 Schematic of deformation shapes under tensile loading. (a) $\alpha=0^\circ$ and (b) $\alpha=90^\circ$.

まず、粒界の傾斜角 $\alpha=0^\circ$ の適合型対称双結晶の場合を考える。本解析では、個々の結晶粒は物性値に不均一がないため、2つの結晶粒 (Grain1 と Grain2) を粒界で切り離して x_2 軸方向に一軸引張変形させた場合、粒界に傾斜がなければ変形は均一に起こる。塑性せん断ひずみを γ とすると、単一すべりの場合、全体座標系 x_1 - x_2 - x_3 における塑性ひずみは、 $\varepsilon_{ij}^p = \gamma P_{ij}^{(primary)}$ と表せる。Grain1 と Grain2 の主すべり系における Schmid テンソルをそれぞれ P_{ij}^{Grain1} 、 P_{ij}^{Grain2} と置くと、Grain1 と Grain2 では、表 2 より、Schmid テンソルの垂直成分は等しく、そのせん断成分は、 x_2 軸方向に関しては x_2 軸と x_3 軸の作る面に関して対称であり、 x_3 軸方向成分はゼロであることから、以下の関係が成り立つ。

$$\begin{aligned} \gamma P_{11}^{Grain1} &= \gamma P_{11}^{Grain2} \\ \gamma P_{22}^{Grain1} &= \gamma P_{22}^{Grain2} \\ \gamma P_{33}^{Grain1} &= \gamma P_{33}^{Grain2} = 0 \\ \gamma P_{12}^{Grain1} &= -\gamma P_{12}^{Grain2} \\ \gamma P_{23}^{Grain1} &= \gamma P_{23}^{Grain2} = 0 \end{aligned} \tag{13}$$

以上より、Grain1 と Grain2 の塑性ひずみをそれぞれ $\varepsilon_{ij}^{Grain1}$ 、 $\varepsilon_{ij}^{Grain2}$ とすると、本双結晶は、 $\varepsilon_{22}^{Grain1} = \varepsilon_{22}^{Grain2}$ 、 $\varepsilon_{33}^{Grain1} = \varepsilon_{33}^{Grain2}$ 、 $\varepsilon_{23}^{Grain1} = \varepsilon_{23}^{Grain2}$ の条件を満たす適合型であることがわかる。本適合条件は、試料上下端面を平面にする条件を満たしているので、 $\varepsilon_{12}^{Grain1}$ と $\varepsilon_{12}^{Grain2}$ の符号の違いが GN 転位帯の形成をもたらす (近藤, 大橋, 2005a)。また、双結晶を構成する結晶粒の Schmid 因子が等しい場合、物性値に不均一性がなければ、個々の結晶粒の変形を考えた場合の塑性せん断ひずみ γ が等しいことから、その適合条件は Schmid テンソルを用いて評価できることがわかる。

次に、傾斜した粒界から見たときの2つの結晶粒の非適合性について調査するため、 x_3 軸回りに粒界の傾斜角 α だけ回転した座標系 x_1' - x_2' - x_3 から見た場合の Schmid テンソルについて考える。図 6 に座標系 x_1 - x_2 - x_3 と x_1' - x_2' - x_3 の回転関係を示す。この“粒界座標系”において、結晶方位は、元の座標系から反時計回りに角度 α だけ回転した様に見える。粒界座標系から見た時の Grain1 の Schmid テンソル $P^{RGrain1}$ は、全体座標系における Schmid テンソル P^{Grain1} と回転行列：

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (14)$$

を用いて,

$$\mathbf{P}^{RGrain1} = \mathbf{R}^T \mathbf{P}^{Grain1} \mathbf{R} \quad (15)$$

と表せる. ただし, T は転置を表す. したがって, Grain1側の粒界座標系での Schmid テンソルは,

$$\begin{aligned} P_{11}^{RGrain1} &= P_{11}^{Grain1} \cos^2 \alpha + P_{22}^{Grain1} \sin^2 \alpha - P_{12}^{Grain1} \sin 2\alpha \\ P_{22}^{RGrain1} &= P_{11}^{Grain1} \sin^2 \alpha + P_{22}^{Grain1} \cos^2 \alpha + P_{12}^{Grain1} \sin 2\alpha \\ P_{33}^{RGrain1} &= P_{33}^{Grain1} = 0 \\ P_{12}^{RGrain1} &= \frac{1}{2} (P_{11}^{Grain1} - P_{22}^{Grain1}) \sin 2\alpha + P_{12}^{Grain1} \cos 2\alpha \\ P_{13}^{RGrain1} &= P_{13}^{Grain1} \cos \alpha - P_{23}^{Grain1} \sin \alpha = 0 \\ P_{23}^{RGrain1} &= P_{13}^{Grain1} \sin \alpha - P_{23}^{Grain1} \cos \alpha = 0 \end{aligned} \quad (16)$$

となる. 同様にして, Grain2側での粒界座標系から見た時の Schmid テンソルは,

$$\begin{aligned} P_{11}^{RGrain2} &= P_{11}^{Grain2} \cos^2 \alpha + P_{22}^{Grain2} \sin^2 \alpha - P_{12}^{Grain2} \sin 2\alpha \\ &= P_{11}^{Grain1} \cos^2 \alpha + P_{22}^{Grain1} \sin^2 \alpha + P_{12}^{Grain1} \sin 2\alpha \\ P_{22}^{RGrain2} &= P_{11}^{Grain2} \cos^2 \alpha + P_{22}^{Grain2} \sin^2 \alpha + P_{12}^{Grain2} \sin 2\alpha \\ &= P_{11}^{Grain1} \cos^2 \alpha + P_{22}^{Grain1} \sin^2 \alpha - P_{12}^{Grain1} \sin 2\alpha \\ P_{33}^{RGrain2} &= P_{33}^{Grain1} = 0 \\ P_{12}^{RGrain2} &= \frac{1}{2} (P_{11}^{Grain2} - P_{22}^{Grain2}) \sin 2\alpha + P_{12}^{Grain2} \cos 2\alpha \\ &= \frac{1}{2} (P_{11}^{Grain1} - P_{22}^{Grain1}) \sin 2\alpha - P_{12}^{Grain1} \cos 2\alpha \\ P_{13}^{RGrain2} &= P_{13}^{Grain2} \cos \alpha - P_{23}^{Grain2} \sin \alpha = 0 \\ P_{23}^{RGrain2} &= P_{13}^{Grain2} \sin \alpha - P_{23}^{Grain2} \cos \alpha = 0 \end{aligned} \quad (17)$$

となる. したがって, 粒界座標系における Grain1 と Grain2 の塑性ひずみを, それぞれ $\varepsilon_{ij}^{RGrain1} = \gamma P_{ij}^{RGrain1}$, $\varepsilon_{ij}^{RGrain2} = \gamma P_{ij}^{RGrain2}$ とおくと, 粒界に傾斜がある ($\alpha \neq 0^\circ, 90^\circ$) 場合, $\varepsilon_{22}^{RGrain1} \neq \varepsilon_{22}^{RGrain2}$ となり, 非適合型となる.

近藤, 大橋 (2005b) は, 適合型双結晶に生じる GN 転位密度のノルムが Schmid テンソルを用いて評価できることを示した. ここでは, 粒界座標系での Schmid テンソルを用いて, 非適合型双結晶の GN 転位密度のノルムの評価を試みる. 式(16)と(17)より求めた Grain1 と Grain2 の粒界座標系における Schmid テンソルの粒界傾斜依存性を図 8 に示し, 本解析より得られた GN 転位密度ノルムの平均の粒界傾斜依存性を図 9 に示す.

粒界座標系における Schmid テンソルの成分の値 (図 8) は, Grain1 と Grain2 で, 粒界の傾斜角 α の変化と共に類似の変化を示すが, 僅かな差が見られる. この僅かな差が, 双結晶のひずみの不均一性を変化させ, GN 転位密度を変化させる. まず, Schmid テンソルの垂直成分 ($P_{22}^{RGrain1}$, $P_{22}^{RGrain2}$) に注目すると, 粒界の傾斜が 45° に近づく程, Grain1 と Grain2 でその差が大きくなる. このことは, 粒界の傾斜が 45° 近傍の場合に, 結晶粒個々の変形を考えた場合の, Grain1 と Grain2 での粒界面の形状 (面積) の差が大きく異なることを意味する.

塑性変形によって生じた粒界面の形状の差を埋めるためには、GN 転位が必要である。GN 転位密度ノルムの平均 (図 9) は、粒界の傾斜が 45°近傍で高い値となり、本解析結果はこのことと符合する。

次に、Schmid テンソルのせん断成分 ($p_{12}^{R_{Grain1}}$, $p_{12}^{R_{Grain2}}$) (図 8) に注目すると、粒界の傾斜角 $\alpha=45^\circ$ の場合は、その差はゼロであることがわかる。このことは、GN 転位密度の分布にも影響を与え、粒界の傾斜角 $\alpha=45^\circ$ の場合は、GN 転位密度は、その近傍の傾斜を有する場合よりも低い値を示す。粒界の傾斜がない場合 ($\alpha=0^\circ$, 90°) には、Grain1 と Grain2 での Schmid テンソルのせん断成分の差が最大となる。しかしながら、 $\alpha=90^\circ$ の時は、Schmid テンソルのせん断成分の差は最大であるが、試料上面と下面に課せられた境界条件により変形が拘束されることがないため (図 7) , この場合は GN 転位は発生しない。

本解析条件における Schmid テンソルの成分の値の差 (すなわち、双結晶の粒界面の形状を一致させるための変形拘束の強さ) と試料上面と下面に課せられた変形拘束のどちらが GN 転位の堆積に大きく寄与するのかを調査する。GN 転位密度ノルムの平均 (図 9) を見ると、粒界と試料の上面および下面が交わる場合には GN 転位の密度が高くなる。一方、粒界が試料側面と交わる条件 (粒界の傾斜角 α が大きい条件) の場合には、非適合性が強いほど GN 転位の密度は高くなるが、粒界と試料の上面および下面が交わる条件の場合と比較して、その値は低いことがわかる。これは、双結晶は粒界を境にして異なる形状に変形しようとするから、粒界近傍を平面に保つためには強い変形拘束が必要であり、本解析条件においては試料上面および下面に課せられた拘束条件が、双結晶の非適合性よりも GN 転位の堆積に大きく寄与することを意味する。

以上より、粒界が傾斜した場合に GN 転位密度の高さが変化するのは、双結晶の非適合性の強さの違いと試料上面および下面での変形拘束が原因であり、GN 転位密度のノルムの高さは粒界座標系から見たときの Schmid テンソルの値の差で見積もることができることがわかる。また、本解析で用いた双結晶の一軸引張試験の場合、その粒界の傾斜角の変化に起因した非適合性の強さの変化自体よりも、それによって生じる形状変化が境界によって拘束されることが、GN 転位の堆積量へ与える影響が大きいこともわかる。ただし本解析結果は、単一すべりを仮定した計算モデルを用いて得られたものであることは留意する必要がある。

本解析では、対称双結晶の粒界を傾斜させた場合の非適合性や、双結晶の境界に課される変形拘束が不均一変形および形成する GN 転位帯のパターン、GN 転位の密度に与える影響を明らかにした。これらの結果は、多結晶体中に存在する傾角粒界を有する結晶粒の変形挙動の理解に繋がるものである。また、双結晶の GN 転位密度の Schmid テンソルを用いた評価方法についても示した。本評価方法は、双結晶の非適合性の強さを評価することにより GN 転位の堆積のしやすさを評価するものであり、本研究で実施した様な二次元的な解析だけでなく、三次元の解析にも適用可能だと考えられる。今後は、この三次元の解析における本評価手法の有用性についても調査する必要がある。

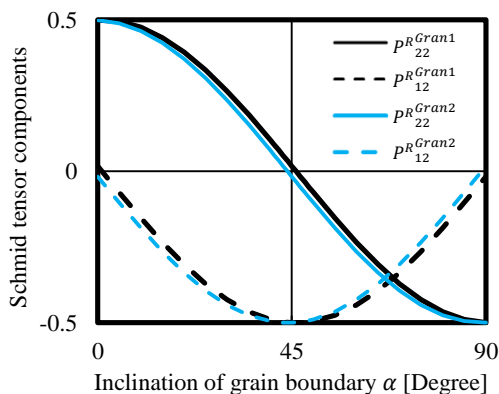


Fig. 8 Changes in Schmid tensor components with increasing inclination angle of grain boundary.

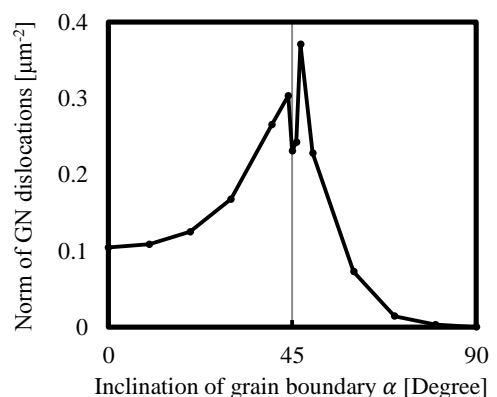


Fig. 9 Profile showing average norms of density of GN dislocations.

4. 結 言

本研究では、適合型の対称双結晶および、その粒界が負荷方向に対して傾斜した非適合型の双結晶を用いて、一軸引張の結晶塑性解析を実施し、形成する GN 転位帯および GN 転位密度の変化を調査した。結果をまとめると以下の様である。

- (1) 粒界と試料上面および下面とが交わる条件の場合、その交点を粒界 3 重点 (線) と考えると、粒界 3 重点の位置から結晶粒内部方向へ伸びる GN 転位帯が、粒界の傾斜角の変化に関わらず形成された。しかしながら変化も見られ、上記 GN 転位帯以外にも GN 転位帯は形成され、粒界の傾斜角が変化するとその分布も変化した。この原因は、粒界の傾斜角の変化により試料の変形状も変化し、それが境界によって拘束されることにより、変形の不均一性が変化するためであった。
- (2) 粒界に傾斜のない適合型の対称双結晶の場合に比べて、粒界の傾斜した非適合型の双結晶の場合の方が、変形の不均一性が強くなり、非適合性が強い場合ほど、GN 転位の密度は高くなった。
- (3) 本解析で用いた双結晶の GN 転位の密度の高さは、粒界の傾斜と共に回転する座標系での Schmid テンソルを考え、その成分の結晶粒間での差を用いて評価できることがわかった。
- (4) 本研究で用いた双結晶の場合、双結晶の非適合性の変化自体よりも、それによって生じた双結晶の形状変化が、課せられた境界条件によって拘束されることが、GN 転位の堆積量へ与える影響が大きいことがわかった。

文 献

- Cahn, J.W., Mishin, Y. and Suzuki, A., Coupled grain boundary motion to shear deformation, *Acta materialia*, Vol.54 (2006), pp.4953-4975.
- Cahn, J.W. and Taylor, A unified approach to motion of grain boundaries, relative tangential translation along grain boundaries, and grain rotation, *Acta Materialia*, Vol.52 (2004), pp.4887-4898.
- 万蘇春, 今井圭介, 尾中晋, <110>対称傾角粒界を有する銅双結晶の変形挙動, *材料*, Vol.40, No.449 (1991), pp.151-157.
- Hansen, N., Hall-Petch relation and boundary strengthening, *Scripta Materialia*, Vol.51 (2004), pp.801-806.
- Hill, R., Generalized constitutive relations for incremental deformation of metal crystals by multislip, *Journal of the mechanics and physics of solids*, Vol.14 (1966), pp.95-102.
- Hirth, J.P., The influence of grain boundaries on mechanical properties, *Metallurgical Transactions*, Vol.3, No.12 (1972), pp.3047-3096.
- Hook, R.E. and Hirth, J.P., The deformation behavior of isoaxial bicrystals of Fe-3%Si, *Acta Metallurgica*, Vol.15, No.3 (1967a), pp.535-551.
- Hook, R.E. and Hirth, J.P., The deformation behavior of non-isoaxial bicrystals of Fe-3% Si, *Acta Metallurgica*, Vol.15, No.7 (1967b), pp.1099-1110.
- 猪子富久治, 双結晶の変形と疲労, *軽金属*, Vol.30, No.9 (1980), pp.512-519.
- 猪子富久治, アルミニウム単結晶・双結晶の変形・再結晶 (3) -双結晶における粒界近傍の変形・再結晶 (<111>軸回転再結晶核とひずみ誘起粒界移動: SIBM), *軽金属*, Vol.61, No10 (2011), pp.553-567.
- Ivanov, V.A. and Mishin, Y., Dynamics and grain boundary motion coupled to shear deformation: An analytical model and its verification by molecular dynamics, *Physical review*, Vol.B78 (2008), pp.1-12.
- Kang, J., Wilkinson, D.S., Mishra, R.K., Yuan, W. and Mishra, R., Effect of inhomogeneous deformation on anisotropy of AZ31 magnesium sheet, *Materials science & engineering A*, Vol.567 (2013), pp.101-109.
- 近藤了嗣, 大橋鉄也, 対称双結晶の引張に伴う不均一変形と GN 転位帯形成の結晶塑性解析, *日本機械学会論文集 A 編*, Vol.71, No.705 (2005a), pp.809-814.
- 近藤了嗣, 大橋鉄也, 対称双結晶の引張に伴う 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, *日本機械学会論文集 A 編*, Vol.71, No.711 (2005b), pp.1451-1458.
- 近藤了嗣, 大橋鉄也, 傾角粒界を持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, *日本機械学会論文集 A 編*, Vol.72, No.713 (2006a), pp.16-23.
- 近藤了嗣, 大橋鉄也, 適合型三重結晶の引張りに伴う結晶粒の多体相互作用と回位型変位場の形成, *日本機械学会論文集 A 編*, Vol.72, No.718 (2006b), pp.937-944.
- 近藤了嗣, 大橋鉄也, 三浦精, Cu-9 at.% Al 合金対称双結晶の引張における微視的非適合性と転位密度不均一性の

関係, Vol.72, No.716 (2006), pp.222-229.

- Liang, H., Dunne, F.P.E., GND accumulation in bi-crystal deformation: Crystal plasticity analysis and comparison with experiments, *International Journal of Mechanical Sciences*, Vol.51 (2009), pp.326-333.
- Livingston, J.D. and Chalmers, B., Multiple slip in bicrystal deformation, *Acta Metallurgica*, Vol.5 (1957), pp.322-327.
- Mayama, T., Ohashi, T. and Kondou, R., Geometrically necessary dislocation structure organization in FCC bicrystal subjected to cyclic plasticity, *International Journal of Plasticity*, Vol.25, No.11 (2009), pp.2122-2140.
- 大橋鉄也, FCC 双結晶に生ずる不均一多重すべりの計算機シミュレーション, *日本金属学会誌*, Vol.51, No.1 (1987), pp.37-43.
- Ohashi, T., Computer simulation of non-uniform multiple slip in face centered cubic bicrystals, *Transactions of the Japan institute of metals*, Vol.28, No.11 (1987), pp.906-915.
- Ohashi, T., Numerical modelling of plastic multislip in metal crystal of f.c.c. type, *Philosophical magazine A*, Vol.70, No.5 (1994), pp.793-803.
- Ohashi, T., Finite-element analysis of plastic slip and evolution of geometrically necessary dislocations in fcc crystals, *Philosophical magazine letters*, Vol.75, No.2 (1997), pp.51-57.
- Ohashi, T., Crystal plasticity analysis of dislocation emission from micro voids, *International journal of plasticity*, Vol.21 (2005), pp.2071-2088.
- 大橋鉄也, 半沢宏, 岸田路也, 双結晶に生ずる弾性不適合応力, *日本金属学会誌*, Vol.44, No.8 (1980), pp.876-883.
- Ohashi, T. and Kondou, R., Evolution of dislocation patterns in a trycrystal model subjected to cyclic loading, *Philosophical magazine*, Vol.93, No.4 (2013), pp.366-387.
- Shibutani, Y., Hirouchi, T. and Tsuru, T., Transfer and incorporation of dislocations to $\Sigma 3$ tilt grain boundaries under uniaxial compression, *Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering*, Vol.7, No.6 (2013), pp.571-584.
- Tvergaard, V., Bifurcation into a localized mode from non-uniform periodic deformations around a periodic pattern of voids, *Journal of the mechanics and physics of solids*, No.69 (2014), pp.112-122.
- Zaefferer, S., Kuo, J.C., Zhao, Z., Winning, M. and Raabe, D., On the influence of the grain boundary misorientation on the plastic deformation of aluminum bicrystals, *Acta Materialia*, Vol.51 (2003), pp.4719-4735.
- Zhang, Z.F., Wang, Z.G. and Hu, Y.M., Effects of grain boundary on slip morphology and dislocation patterns in a fatigued copper bicrystal, *Scripta Materialia*, Vol.40, No.12 (1999), pp.1353-1358.

References

- Cahn, J.W., Mishin, Y. and Suzuki, A., Coupled grain boundary motion to shear deformation, *Acta materialia*, Vol.54 (2006), pp.4953-4975.
- Cahn, J.W. and Taylor, A unified approach to motion of grain boundaries, relative tangential translation along grain boundaries, and grain rotation, *Acta Materialia*, Vol.52 (2004), pp.4887-4898.
- Fang, S., Imai, K. and Onaka, S., Deformation behavior of copper bicrystals with $\langle 100 \rangle$ symmetrical tilt boundaries, *Journal of the society of materials science Japan*, Vol.40, No.449 (1991), pp.151-157 (in Japanese).
- Hansen, N., Hall-Petch relation and boundary strengthening, *Scripta Materialia*, Vol.51 (2004), pp.801-806.
- Hill, R., Generalized constitutive relations for incremental deformation of metal crystals by multislip, *Journal of the mechanics and physics of solids*, Vol.14 (1966), pp.95-102.
- Hirth, J.P., The influence of grain boundaries on mechanical properties, *Metallurgical Transactions*, Vol.3, No.12 (1972), pp.3047-3096.
- Hook, R.E. and Hirth, J.P., The deformation behavior of isoaxial bicrystals of Fe-3%Si, *Acta Metallurgica*, Vol.15, No.3 (1967a), pp.535-551.
- Hook, R.E. and Hirth, J.P., The deformation behavior of non-isoaxial bicrystals of Fe-3% Si, *Acta Metallurgica*, Vol.15, No.7 (1967b), pp.1099-1110.
- Inoko, F., Deformation and fatigue in bicrystals, *Journal of Japan Institute of Light Metals*, Vol.30, No.9 (1980), pp.512-519 (in Japanese).
- Inoko, F., Deformation and recrystallization of aluminum single- and bi-crystals (3): Deformation and recrystallization ($\langle 111 \rangle$ rotation recrystallization nuclei and strain induced grain boundary migration: SIBM), *Journal of Japan Institute of Light Metals*, Vol.61, No.10 (2011), pp.553-567 (in Japanese).
- Ivanov, V.A. and Mishin, Y., Dynamics and grain boundary motion coupled to shear deformation: An analytical model and

its verification by molecular dynamics, Physical review, Vol.B78 (2008), pp. 1-12.

- Kang, J., Wilkinson, D.S., Mishra, R.K., Yuan, W. and Mishra, R., Effect of inhomogeneous deformation on anisotropy of AZ31 magnesium sheet, Materials science & engineering A, Vol.567 (2013), pp.101-109.
- 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, Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A, Vol.71, No.705 (2005a), pp.809-814 (in Japanese).
- Kondou, R. and Ohashi, T., Relationship between formation of geometrically necessary dislocations and local strain hardening of slip systems in symmetric type bicrystals under tensile loading, Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A, Vol.71, No.711 (2005b), pp.1451-1458 (in Japanese).
- Kondou, R. and Ohashi, T., Grain boundary accumulation of geometrically necessary dislocation and asymmetric deformation in compatible-type bicrystals with tilt angle grain boundary under tensile loading, Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A, Vol.72, No.713 (2006a), pp.16-23 (in Japanese).
- Kondou, R. and Ohashi, T., Multi-body-interaction of crystal grains in compatible-type tricrystals under tensile loading and formation of disclination-type displacement field, Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A, Vol.72, No.718 (2006b), pp.937-944 (in Japanese).
- Kondou, R., Ohashi, T. and Miura, S., Relationship between micro-incompatibility and heterogeneity of dislocation density distribution in Cu-9 at.% Al symmetric type bicrystal models under tensile loading, Vol.72, No.716 (2006), pp.222-229.
- Liang, H., Dunne, F.P.E., GND accumulation in bi-crystal deformation: Crystal plasticity analysis and comparison with experiments, International Journal of Mechanical Sciences, Vol.51 (2009), pp.326-333.
- Livingston, J.D. and Chalmers, B., Multiple slip in bicrystal deformation, Acta Metallurgica, Vol.5 (1957), pp.322-327.
- Mayama, T., Ohashi, T. and Kondou, R., Geometrically necessary dislocation structure organization in FCC bicrystal subjected to cyclic plasticity, International Journal of Plasticity, Vol.25, No.11 (2009), pp.2122-2140.
- Ohashi, T., Computer simulation of non-uniform multiple slip in fcc bicrystals, Journal of the Japan Institute of Metals, Vol.51, No.1 (1987), pp.37-43 (in Japanese).
- Ohashi, T., Computer simulation of non-uniform multiple slip in face centered cubic bicrystals, Transactions of the Japan institute of metals, Vol.28, No.11 (1987), pp.906-915.
- Ohashi, T., Numerical modelling of plastic multislip in metal crystal of f.c.c. type, Philosophical magazine A, Vol.70, No.5 (1994), pp.793-803.
- Ohashi, T., Finite-element analysis of plastic slip and evolution of geometrically necessary dislocations in fcc crystals, Philosophical Magazine Letters, Vol.75, No.2 (1997), pp.51-57.
- Ohashi, T., Crystal plasticity analysis of dislocation emission from micro voids, International journal of plasticity, Vol.21 (2005), pp.2071-2088.
- Ohashi, T., Hanzawa, H. and Kishida, M., Elastic incompatibility stress in bicrystal body, Journal of the Japan Institute of Metals, Vol.44, No.8 (1980), pp.876-883 (in Japanese).
- Ohashi, T. and Kondou, R., Evolution of dislocation patterns in a tricrystal model subjected to cyclic loading, Philosophical magazine, Vol.93, No.4 (2013), pp.366-387.
- Shibutani, Y., Hirouchi, T. and Tsuru, T., Transfer and incorporation of dislocations to $\Sigma 3$ tilt grain boundaries under uniaxial compression, Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering, Vol.7, No.6 (2013), pp.571-584.
- Tvergaard, V., Bifurcation into a localized mode from non-uniform periodic deformations around a periodic pattern of voids, Journal of the mechanics and physics of solids, No.69 (2014), pp.112-122.
- Zaefferer, S., Kuo, J.C., Zhao, Z., Winning, M. and Raabe, D., On the influence of the grain boundary misorientation on the plastic deformation of aluminum bicrystals, Acta Materialia, Vol.51 (2003), pp.4719-4735.
- Zhang, Z.F., Wang, Z.G. and Hu, Y.M., Effects of grain boundary on slip morphology and dislocation patterns in a fatigued copper bicrystal, Scripta Materialia, Vol.40, No.12 (1999), pp.1353-1358.

付録 弾性異方性を考慮した双結晶塑性解析

弾性異方性の効果が GN 転位の堆積に与える影響を調査するため、本研究で実施した解析条件から、弾性係数のみを変化させて解析を実施した。弾性係数は、純 Cu と同様のものを用いた。図 10, 11 は、その解析結果であり、共に GN 転位密度の刃状成分を示している。図 10 は粒界の傾斜角 $\alpha = 0^\circ$ の場合であり、図 11 は $\alpha = 45^\circ$ の場合である。これらの図において、図の見やすさのため、カラーバーの示す最大値以上の値は最大値と同色、最小

値以下の値は最小値と同色とした。

解析結果を観察すると、弾性異方性の効果により、粒界近傍から塑性変形が開始し、粒界に符号が正の GN 転位が堆積する (図 10 (a), 図 11 (a))。しかし、変形が進行すると、塑性変形によって生じる結晶粒の形状変化が双結晶に非適合性を生み、これが不均一変形に対して支配的となるため、本論で実施した等方弾性体の解析の場合と同様に、粒界と試料上面との交点より粒内部方向へ、符号が負の GN 転位帯が発達するのが確認できる (図 10 (b) (c), 図 11 (b) (c))。

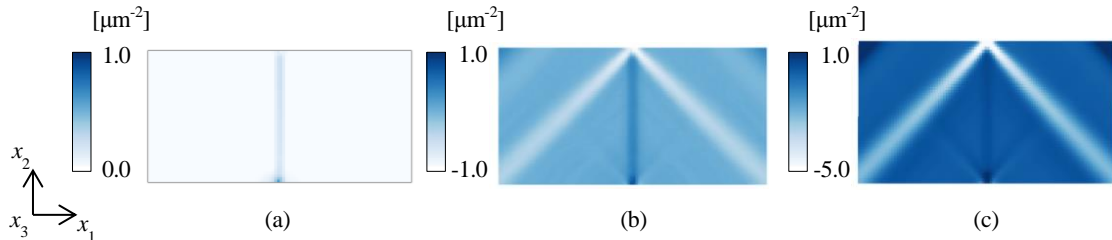


Fig. 10 Density distributions of edge components of geometrically necessary dislocations $\rho_{G,edge}^{(primary)}$ on the primary slip system when $\alpha = 0^\circ$. (a) $\bar{\epsilon}_{22} = 0.1\%$, (b) $\bar{\epsilon}_{22} = 1.0\%$ and (c) $\bar{\epsilon}_{22} = 5.0\%$.

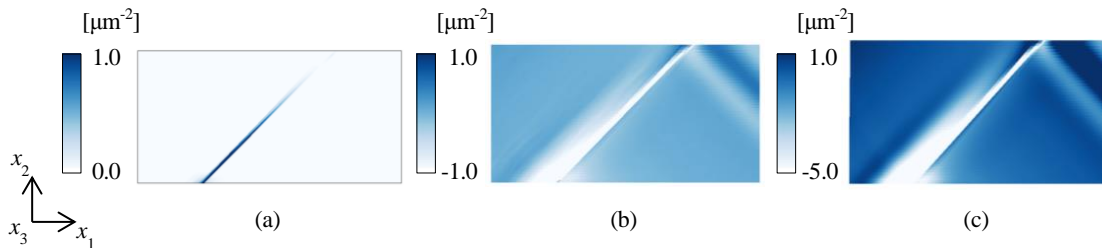


Fig. 11 Density distributions of edge components of geometrically necessary dislocations $\rho_{G,edge}^{(primary)}$ on the primary slip system when $\alpha = 45^\circ$. (a) $\bar{\epsilon}_{22} = 0.1\%$, (b) $\bar{\epsilon}_{22} = 1.0\%$ and (c) $\bar{\epsilon}_{22} = 5.0\%$.