

転位パターンニングおよびGN転位の蓄積に基づく
マルチスケール結晶塑性モデルと
そのシミュレーション

2006年9月

青柳 吉輝

目次

第1章 序論	1
1.1 本研究の背景	1
1.1.1 マルチスケールモデリング	1
1.1.2 金属の微視的構造	2
1.1.3 金属単結晶の加工硬化特性	3
1.1.4 自己組織化現象	5
1.1.5 超微細結晶粒金属材料	6
1.2 本研究に关系する従来の研究	6
1.2.1 マルチスケール結晶塑性モデル	6
1.2.2 転位の自己組織化モデル	8
1.2.3 転位場の微分幾何学的表現	9
1.2.4 強ひずみ加工による UFG 創製	9
1.3 本研究の目的	10
1.4 本論文の構成	11
1.5 本論文で用いる記号	12
第2章 運動学	21
2.1 変形こう配の分解	21
2.2 ひずみの弾・塑性分解	22
2.2.1 ひずみの定義	22
2.2.2 弾・塑性ひずみの各配置への変換則	23
2.3 ひずみ速度の弾・塑性分解	24
2.3.1 金属材料における仮定	24
2.3.2 各配置における弾・塑性のひずみ速度の導出	24
2.4 変形速度の弾・塑性分解	25
2.4.1 速度こう配の弾・塑性分解	25
2.4.2 各配置における変形速度	26
2.4.3 ひずみ速度と変形速度	26
2.4.4 ひずみ尺度と変形尺度	27
2.5 塑性変形速度，塑性スピンの導出	28
2.5.1 すべりテンソルの定義	28
2.5.2 塑性変形速度，塑性スピン	28
2.6 転位密度の幾何学的表現	29

2.6.1	転位密度の定義の選択	29
2.6.2	従来の転位密度テンソルにおける問題点	31
2.6.3	不適合度の必要性	31
2.6.4	GN 転位密度テンソル	33
2.6.5	GN 不適合度	36
2.6.6	GN 結晶欠陥の成分	37
2.6.7	動的回復	38
2.7	粒子画像に基づく転位密度の表現	41
第 3 章	内力の定義と釣合い方程式	43
3.1	内力の定義	43
3.2	釣合い方程式の導出	44
3.3	連続の式	45
3.4	転位密度の釣合い方程式	45
3.5	エネルギー方程式	46
3.6	エントロピー不等式	46
第 4 章	構成式および反応-拡散方程式の導出	47
4.1	Clausius-Duhem の不等式	47
4.2	構成式の保存部分	49
4.2.1	熱力学的制限	49
4.2.2	速度形弾性構成式	50
4.2.3	化学ポテンシャルの構成式	51
4.3	構成式の散逸部分	51
4.3.1	熱力学的制限	51
4.3.2	転位密度流束の構成式	52
4.3.3	転位の反応項の構成式	54
4.3.4	転位の生成・消滅項の構成式	56
4.4	反応-拡散方程式	57
4.5	硬化則および各速度係数の引数の検討	58
4.6	線形安定性解析	58
4.6.1	ゆらぎの導入	59
4.6.2	特性方程式	59
4.6.3	絶対安定条件	60
4.6.4	不安定化する臨界条件	60
4.6.5	Hopf 分岐	61
4.6.6	Turing 分岐	61
4.6.7	不安定線図	62
4.6.8	Turing 構造の特性波長	63

第 5 章	転位-結晶塑性論	65
5.1	結晶塑性論に基づく応力速度の導出	65
5.2	転位蓄積および転位相互作用を考慮した硬化則の導出	67
5.2.1	ひずみ速度依存形硬化則	67
5.2.2	従来の結晶塑性論における硬化係数	68
5.2.3	転位密度を考慮した硬化係数	68
5.3	転位運動の相互作用	69
5.3.1	結晶のすべり系	69
5.3.2	相互作用の影響	70
5.3.3	相互作用行列	74
5.4	転位の平均飛行距離	74
5.4.1	修正 Seeger モデル	74
5.4.2	3 段階加工効果モデル	75
5.4.3	転位密度依存形モデル	75
5.5	応力効果係数モデル	76
5.5.1	ステージ遷移に関する応力効果係数モデル	76
5.5.2	応力増加に伴うセル再分割に関する応力効果係数モデル	77
5.6	仮想仕事率の原理の変形	78
5.7	接線係数法	80
5.8	結晶基底ベクトルの更新	81
5.9	仮想仕事率の原理式の離散化	82
5.9.1	平面ひずみ問題	82
5.9.2	3 次元問題	85
第 6 章	転位パターンニングに対する FDM 解析	89
6.1	差分方程式	89
6.2	Neumann の安定条件	90
6.3	境界条件および材料定数	90
6.4	ステージ II のセル構造に対する転位モデルの検討	92
6.4.1	拡散係数比についての検討	92
6.4.2	速度係数パラメータについての検討	93
6.5	ステージ II のセル構造の再分割に対する転位モデルの検討	94
6.5.1	拡散係数比についての検討	94
6.5.2	速度係数パラメータについての検討	95
6.6	ステージ III に対する転位モデルの検討	99
6.6.1	拡散係数比についての検討	99
6.6.2	係数パラメータについての検討	99
6.7	各ステージにおける転位パターンの自己組織化過程	104

第 7 章	FEM-FDM 連動転位-結晶塑性シミュレーション	109
7.1	FEM-FDM 連動転位-結晶塑性解析のアルゴリズム	109
7.2	FEM-FDM 連動転位-結晶塑性シミュレーション	110
7.2.1	解析モデル	110
7.2.2	FEM-FDM 連成方法	110
7.2.3	境界条件および材料定数	113
7.2.4	解析結果および考察	113
第 8 章	GN 転位-結晶塑性 FEM シミュレーション	121
8.1	GN 転位-結晶塑性解析のアルゴリズム	121
8.2	GN 結晶欠陥の数値計算	122
8.3	FCC 単結晶に対する FEM 解析の結果およびその考察	125
8.3.1	材料定数および境界条件	125
8.3.2	GN 結晶欠陥の導入方法	126
8.3.3	解析結果および考察	127
8.3.4	本モデルの妥当性の検証	129
8.4	結晶粒微細化に関する計算手法	130
8.4.1	結晶粒微細化の判定方法	131
8.4.2	粒径依存のひずみ速度感度	131
8.4.3	粒界の発現と GN 転位	133
8.5	結晶粒微細化に関する FEM 解析の結果およびその考察	133
8.5.1	材料定数および境界条件	133
8.5.2	解析結果および考察	135
第 9 章	結 論	141
9.1	本論文の結論	141
9.1.1	GN 結晶欠陥に関する結論	141
9.1.2	転位パターンニングに関する結論	142
9.1.3	結晶粒微細化に関する結論	142
9.2	今後の課題と展開	143
9.2.1	転位パターンニング	143
9.2.2	転位-結晶塑性モデル	143
9.2.3	UFG 創製シミュレーション	144
9.2.4	マルチスケールモデリング	145
謝 辞		147
参考文献		149
主論文に関する原著論文および口頭発表論文		155
学術誌論文		155
国際会議論文		155

国際会議発表	156
国内会議発表	156
補足 A 第 1 章の補足	159
A.1 結晶塑性論	159
A.2 結晶粒界	159
A.3 UFG の特性	160
A.4 UFG の創製	161
A.5 転位密度の定義	161
A.6 Frank-Read 源	161
A.7 SS 転位密度	162
A.8 GN 転位密度	163
A.9 ダイポール	163
補足 B 第 2 章の補足	165
B.1 下部構造スピンの導出	165
B.2 Mandel-Kratochvil 速度の導出	165
B.3 Cotter-Rivlin 速度の導出	166
B.4 従来の転位密度テンソル	166
B.4.1 塑性変位こう配に基づく転位密度テンソル	167
B.4.2 Teodosiu による転位密度テンソル	167
B.4.3 Busso らによる転位密度速度テンソル	168
B.5 GN 不適合度テンソルの成分	169
補足 C 第 3 章の補足	171
C.1 転位密度の釣合い方程式 (3.21) の導出	171
補足 D 第 4 章の補足	173
D.1 式 (4.6) の導出	173
D.2 異方性弾性係数	173
D.3 式 (4.32) の相当量表示	175
D.3.1 第 1 項の相当量表示	175
D.3.2 第 2 項の相当量表示	175
D.4 転位の反応	175
D.5 特性方程式 (4.73) の導出	176
D.6 Hopf 分岐の式 (4.85) の導出	177
D.7 Turing 分岐の式 (4.91) の導出	178
補足 E 第 5 章の補足	179
E.1 自己硬化	179
E.2 潜在硬化	180
E.3 転位の切り合い運動	180

E.4	セル波長の式 (5.37) の導出	180
E.5	Cauchy 応力に基づいた分解せん断応力速度の導出	181
E.6	Kirchhoff 応力に基づいた分解せん断応力速度の導出	182
E.7	接線係数法を適応した弾性係数テンソルの非対称性	184
E.8	結晶基底の更新における問題点	184
補足 F	第 6 章の補足	185
F.1	差分方程式 (6.1) の導出	185
F.2	Neumann の安定条件の式 (6.2) の導出	186
F.3	拡張転位	187
補足 G	第 7 章の補足	189
G.1	連立一次方程式の解法	189
補足 H	第 8 章の補足	191
H.1	介在物周辺の転位描像	191
H.1.1	材料定数および境界条件	191
H.1.2	解析結果および考察	192

第1章

序論

1.1 本研究の背景

1.1.1 マルチスケールモデリング

金属材料の強さ，加工硬化などの力学的性質は材料の微視的構造や結晶組織などに大きく依存することが知られている．特に，合金元素の添加制御，塑性加工，熱処理，再結晶などを施し金属組織を変化させることによって，金属材料の機械的性質，すなわち構造物の機能と信頼性の向上が図られている．

金属結晶の塑性変形を微視的に観察すると，すべりは結晶欠陥の1つである転位の運動によって引き起こされること，ならびに，結晶の加工硬化は，介在物，結晶粒界あるいは林立転位などなんらかの障害物によって転位運動が阻害されることによる転位の蓄積に起因していることが知られている．すなわち，結晶の塑性変形を微視的に捉えた場合，その素過程は転位運動と転位蓄積であるといえる．しかしながら，従来の連続体力学に基づく大変形解析の手法には，このような転位に代表される微視的情報は考慮されておらず，引張試験などの実験結果から同定した硬化曲線を用いた現象論的(巨視的)手法のみが採用されている．そのため，解析の精密化を図ると構成則の複雑化を招き，実験に依存する物質定数の増加につながるという悪循環に陥る．このような状況の打開を目指し，転位などの微視的な情報に基づいて巨視的な変形挙動表現するマルチスケールモデリングの発展へ期待が寄せられている．巨視的な実験データを不要とする閉じた計算学的解析手法であるマルチスケールモデリングの手法としては，1つ1つの原子の運動から材料全体の挙動を予測するような“微細構造積上げ形”の手法と，変形場，結晶場，転位場あるいは原子場といった異なるスケールの階層の現象を記述するそれぞれの支配方程式を結びつけることによって，各階層の情報の相互作用から材料の変形挙動および微細構造の変化を同時に表現する“多階層橋渡し形”の手法の2種類に大別することができる．前者の場合，材料を構成する最小スケールから全ての挙動を表現できるように詳細計算という点では有用であるが，現在の計算機能力では扱える原子数の数は 10^9 個程度であり，解析対象の寸法はナノメートルオーダーにとどまっている．また，計算機の能力が向上し，扱える原子数の数が増えたとしても，材料内に膨大に存在する結晶欠陥や粒界などの不均一性を表現しきれないといった問題も残されている．後者の手法では，微視的な挙動を粗視化することによってマクロとミクロの相互関係を解明し，両者の間で情報のやり取りをするため，その理論体系は複雑になるが，巨視的な変形挙動を精度よく短時間でシミュレートすることが可能である．新材料開発の分野でも，創製すべき材料の圧延組織や超微細組織を予測するシミュレーションを望む声が上がっており，以上のようなマクロとミクロの挙動の相互作用を解明するマルチスケールモデリングの試みによって材料特性を飛躍的に向上させた新材料の創製が簡便になると考えられる．

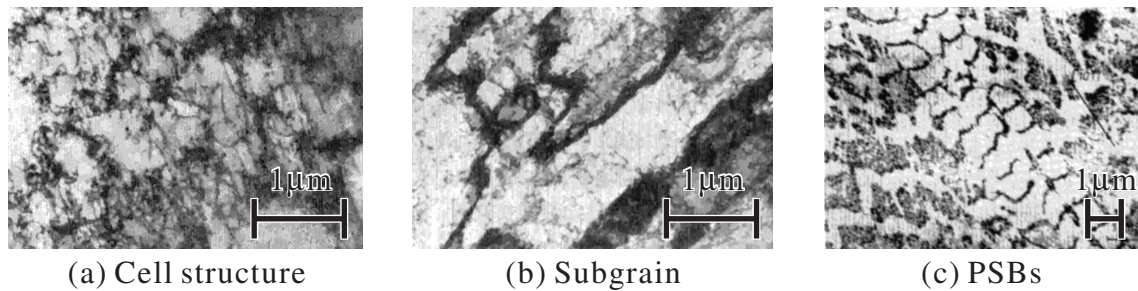


Fig. 1.1 Dislocation patterns⁽¹⁾⁽²⁾

一方、金属材料が塑性変形を受けると図 1.1 のようなセル構造、サブグレインあるいは固執すべり帯 (PSBs : Persistent Slip Bands) といった転位下部構造が発現することが知られている⁽¹⁾⁽²⁾。PSBs は金属単結晶の主すべり面と垂直な面に形成される梯子状の転位の空間パターンで、金属単結晶において繰り返し負荷条件下でのみ発現する現象である。これに対し、セル構造およびサブグレインは金属結晶の主すべり面に形成される格子状の空間パターンであり、結晶構造によらず、あらゆる負荷条件下において発現する現象であることが実験により明らかにされている。このような転位下部構造の発現は、巨視的な変形応答にも影響を与えるため、転位パターンングに関するモデリングは種々の金属の微細組織の変化および加工硬化現象の解明につながるものとして期待されている。

近年、このような転位の情報を結晶塑性論 [補足 A.1] の枠組みに取り込み、よりミクロな立場から結晶塑性論を本質論に近づけようとするマルチスケールモデリングの試みが世界的レベルで盛んに行われるようになってきているが、マルチスケールモデリングに関する研究は端緒についたばかりであり、その完成度を高めることは重要である。

1.1.2 金属の微視的構造

金属は図 1.2 のように面心立方格子 (FCC)、体心立方格子 (BCC) あるいは六方最密格子 (HCP) といった金属原子が規則正しく配置した結晶構造を有している。しかしながら、このような構造が完全に規則正しく続く完全結晶は現実には存在せず、なんらかの結晶欠陥が存在する。このような結晶欠陥には、点欠陥である原子空孔、進入型原子および置換型原子、線欠陥である転位、面欠陥である結晶粒界、双晶粒界および積層欠陥あるいは体積欠陥である析出物およびポイドなどが挙げられる⁽³⁾。それらの中でも、局所的な原子配列の乱れである転位は、結晶の塑性変形の素過程である“すべり”の発生を担っている。金属結晶の塑性変形は、結晶のある特定の面 (すべり面) を境に、その上下の原子群が相対的にずれることによって発生する。このような結晶のせん断変形のことを“すべり”と呼ぶ。しかしながら、すべり面の上下の原子が同時にせん断変形を起こすとすると、理論的に算出される材料の降伏応力は、実際の降伏応力の 10^4 倍にもなってしまう⁽³⁾。理論値よりもはるかに低い応力で塑性変形が起こるのは結晶中に転位が存在しているためである。図 1.3 のように、余分な原子面を有する原子配列の乱れ (図中の記号 \perp 部) が結晶内を移動することによって、結果的にある原子面を境に結晶がせん断変形を受けた状態となる。このような局所的な原子配列の乱れが転位であり、転位が通過した領域にはすべりが発生することになる。なお、実際の転位は図 1.4 に示すような線欠陥であり、すべりが発生した領域とまだすべっていない領域の境界線とみなすこともできる。また、1 本の転位線が通過することによって生じる原子配列の相対的なずれをベクトル

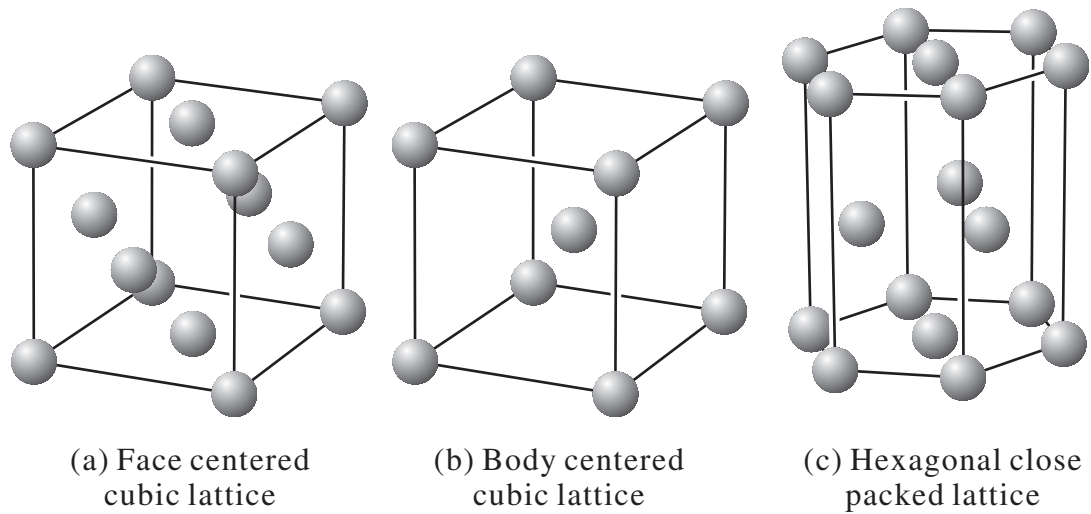


Fig. 1.2 Crystal structures

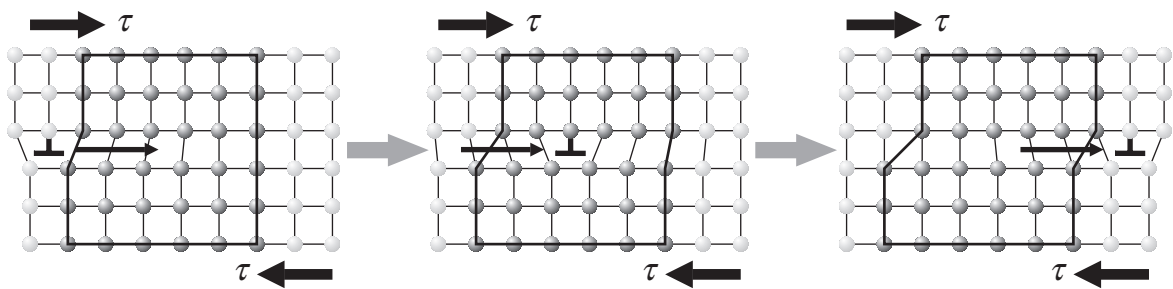


Fig. 1.3 Slip of crystal and dislocation movement

で表したものを Burgers ベクトルと呼ぶ。図 1.4(a) のように Burgers ベクトルの向きと転位線の方が垂直な場合はこの転位を刃状転位と呼び、図 1.4(b) のように Burgers ベクトルの向きと転位線の方が平行な場合はこの転位をらせん転位と呼ぶ。このような転位に代表される結晶のさまざまなミクロ挙動に関する研究の歴史は古く、詳細に関しては既存の文献にゆだねることとする⁽³⁾⁽⁴⁾⁽⁵⁾。

1.1.3 金属単結晶の加工硬化特性

金属単結晶の一般的な加工硬化曲線は図 1.5 のように表され、大きく 3 段階 (ステージ) に分けることができる。

まず、ステージ I と呼ばれる容易すべり段階では 1 次すべり系 (主すべり系) のみが活動するため、転位線が平均的に分布し、比較的転位密度は低く、加工硬化率も低い状態にある。

一方、変形が進むと結晶の回転が起こり、応力の増加とともに 1 次すべり系に加え 2 次すべり系が活動し始め、次の段階に移行する。ステージ II と呼ばれる線形硬化段階では、2 次すべり系に発生した転位線が林立転位となって主すべり面上で活動する転位線の移動を大きく妨げるため、加工硬化率が増加する。また、転位セル構造と呼ばれる転位下部組織が形成される。このセル構造の形成機構は次のように考えられ

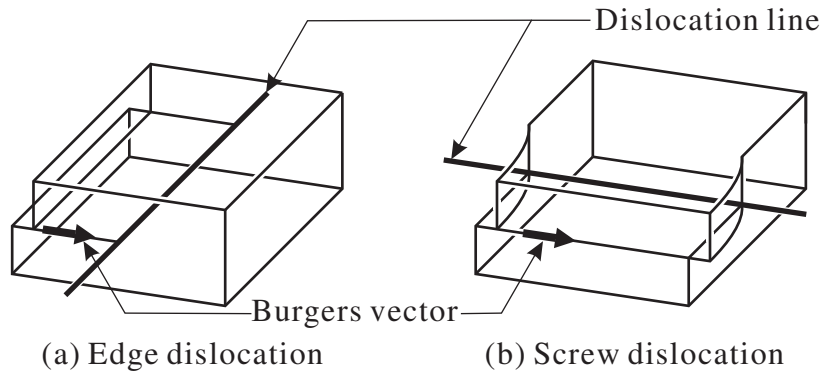


Fig. 1.4 Components of dislocation

ている．結晶の回転および応力の増加の影響によって2次すべり系が活動を始め，1次すべり系の転位線との間で相互作用や反応が頻繁に起きるようになり，ステージIにおいて一様に分布していた転位群が乱れ，タングルと呼ばれる転位のもつれ合いが発生する．そのもつれた部分にさらに転位が堆積して，もつれ合いが激しくなることで図1.6(a)に示すような転位セル構造が形成される．図1.6において，黒い部分は転位線が絡み合った部分であり，これをセル壁と呼ぶ．セル内部では転位密度が低いが局所的には転位密度が高い部分もある．セル構造が形成された後，さらに変形が進み，負荷される応力が増加すると，それに伴い，転位源から転位ループが頻繁に発生しだす．そのため，図1.6(b)のようにセル内部においても転位線の絡み合いが頻繁に起こって新たな転位壁が形成され，すでに形成されたセル構造がさらに細かく分割される．

ステージIIにおいて変形が進んでセル壁中の転位密度が増加し，セル壁にやってきた転位とセル壁中の異符号の転位が合体消滅する確率が高くなると，図1.6(c)に示すように，セル壁は薄く明瞭になり，比較的粒界に近い構造に遷移する．この段階がステージIIIと呼ばれる動的回復段階である．温度と積層欠陥エネルギーが大きいほど，このステージの始まる応力は小さいため，ステージIIIでは，拡張しているらせん転位が熱エネルギーの助けを借りて，ある長さにわたって完全転位に収縮して交差すべりを起こし，別のすべり面上の異符号のらせん転位と結合中和して消滅すると考えられている．また，熱活性による点欠陥の拡散に起因するダイポールの消滅や，負荷応力の増加によるLomer-Cottrell固着の分解といった現象も頻繁に起こり始める．このような転位の消滅が動的回復であり，これによって転位密度の増加する早さが減少するので加工硬化率が変形とともに低下する．さらに同ステージでは，塑性変形の進行に伴う局所的結晶回転に起因して転位壁に沿った領域は小傾角粒界[補足A.2]を形成する．小傾角粒界を形成するに当たって転位の対消滅が頻繁に生じるため，対を成す異符号の転位群はほとんど消滅する．その結果，粒界には同符号の転位のみが残り長範囲応力場を形成する．ステージIIIにおける転位組織は様相および性質が多結晶粒に似ているものの，通常が多結晶体ほど隣接粒との方位差は有していないことから，それらはサブグレインと呼ばれる．

なお，セル構造やサブグレインといった集団転位が織り成す空間パターンの形成メカニズムは非平衡開放系の科学として分類され，一種の自己組織化現象であるとされている．

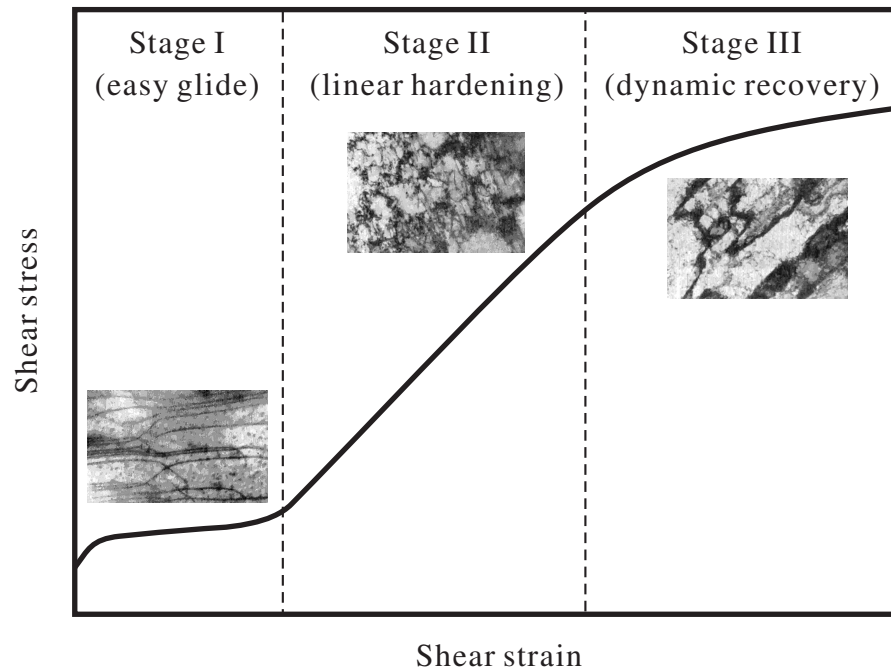


Fig. 1.5 Schematic diagram of hardening curve of single crystal

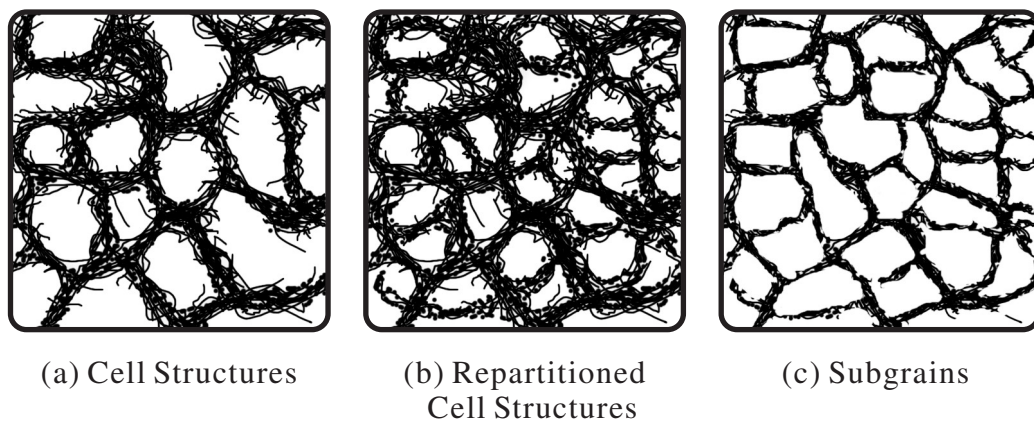


Fig. 1.6 Self-organization patterning of dislocation

1.1.4 自己組織化現象

自然界では、無秩序な状態から空間的にある秩序構造（パターン）が形成されるといった現象が観察されている。キリンの斑点模様、シマウマの縞模様、モミジの葉のフィンガリング構造、雪の結晶などはその一例であり、このような空間パターンリングは自己組織化現象として一般的にもよく知られている⁽⁶⁾⁽⁷⁾。

自己組織化現象は平衡状態から遠く離れた非平衡開放系においてのみ起こる現象であり、系内に膨大に存在する抑制因子および活性因子が相互作用することによって初期のゆらぎが成長してひとつひとつの存在因子からは予想もできないような多様な秩序構造が発現する現象である。平衡系とは内部で熱および物質の移動がない系である。これに対し非平衡系とは熱および物質の移動がある状態の系のことである。平

衡系および非平衡系が内部における熱および物質の移動に関する系で表しているのに対して、外界との物質あるいはエネルギーのやり取りに関する系は孤立系、閉じた系および開放系のように分類される。孤立系とは外界との物質およびエネルギーのやり取りが全くない系である。閉じた系とはエネルギーのやり取りのみ存在する系であり、開放系とは物質およびエネルギーのやり取りが存在する系である。近年、非平衡開放系の重要性が主張され始め、それに関連する研究が盛んに行われている⁽⁸⁾。非平衡開放系がつくる様々なパターンは、物質やエネルギーの外界からの供給と外界への排出をもって形成されると同時に維持される。このような構造を散逸構造と呼ぶ⁽⁹⁾。代表的な散逸構造の例としては、ベナール対流現象が挙げられる。ベナール対流による秩序構造は柱状構造であるが、外部からの熱供給を停止させると秩序構造は崩壊することが知られている。すなわち、散逸構造の形成条件として、絶えず外界との物質およびエネルギーのやり取りを続けることが必要不可欠である。なお、自己組織化現象はエントロピー増大則(自然現象は放っておくと無秩序さが増す方向に進むという物理法則)に反しているかのように思われるが、パターン形成され、それが維持される場合には、内部エントロピー生成速度は常に正になるため、エントロピー増大則には反してはいない。

一方、転位セル構造やサブグレイン、PSBsといった自己組織化現象は、不動転位および可動転位がそれぞれ抑制因子および活性因子として膨大に存在し、かつそれらが生成・消滅・反応(相互作用)を繰り返しており、まさに非平衡開放系の現象であるが、それらの構造は除荷後も維持されることから、厳密には散逸構造の痕跡というべきものであるといえる。

1.1.5 超微細結晶粒金属材料

現在使用されている構造用金属材料における平均粒径は最小でも10 μm 程度であるのに対し、平均粒径を1 μm あるいはサブミクロンオーダーにまで超微細化して、様々な材料特性を向上させようという超微細粒金属に関する研究が材料組織制御の分野で注目を集めている⁽¹⁰⁾⁽¹¹⁾⁽¹²⁾。通常、超微細粒(UFG: Ultrafine-Grain)[補足 A.3]は、従来の塑性加工技術では与えることのできないほどの強ひずみを温間あるいは冷間において材料に付与することによって誘起される。そのため、工業用バルク材料としての形を保ちつつ、効率よく強ひずみを付与する加工方法に関する研究が盛んに行われている。これまでに提案されている強ひずみ加工の方法としては、繰り返し重ね接合圧延(ARB)法⁽¹³⁾⁽¹⁴⁾⁽¹²⁾、高圧力捺り(HPT)法⁽¹⁵⁾、せん断押し出し(ECAP)法⁽¹⁵⁾、溝ロール2方向圧延法⁽¹⁶⁾などがある[補足 A.4 参照]。以上のような新たな加工プロセスを構築する際には、実験的経験に基づいて試行錯誤を繰り返すことが多かったが、コンピュータの性能や解析技術の発達とともに、これらの加工法の開発と計算力学の分野で得られた知見を結びつけることが材料組織制御の分野でも期待されている。組織形成過程予測の計算機シミュレーションによる数値実験を手がかりとして微細組織の持つ、結晶粒度分布、結晶粒方位分布、集合組織を最適制御することができれば、材料特性を飛躍的に向上させた新材料の創製が簡便になる。

1.2 本研究に関する従来の研究

1.2.1 マルチスケール結晶塑性モデル

Peirceら⁽¹⁷⁾によって結晶塑性論を用いた数値解析手法が紹介されて以来、1990年代後半から現在にかけて、転位の運動や蓄積の情報を単結晶の加工硬化則に導入することにより、巨視的変形場の情報と微視的転位場の情報のやり取りを可能とした結晶塑性論(転位-結晶塑性論)に関する研究が盛んに行われてい

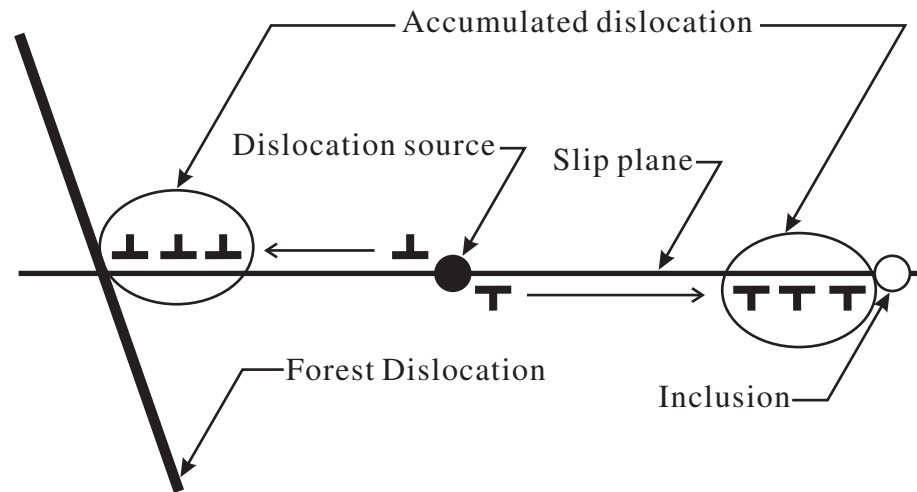


Fig. 1.7 Accumulation of dislocations

る。その際に、転位密度の定義 [補足 A.5] をどのような描像に基づいて定めるかが重要となってくる。転位-結晶塑性論で考慮される結晶欠陥とは図 1.7 に表されるように、Frank-Read 源 [補足 A.6] と呼ばれる転位源から発生した転位が介在物や結晶粒界、他のすべり系からの影響を受けるなどして堆積したものである。このような結晶欠陥をすべて統計的に蓄積する転位密度 (SS 転位密度) [補足 A.7] を用いて表す手法、幾何学的に必要な転位密度 (GN 転位密度) [補足 A.8] を用いて表す手法、SS 転位密度と GN 転位密度を組み合わせて表す手法が主流となっている。

SS 転位密度を用いた転位-結晶塑性解析の例としては、CSL (coincidence site lattice) 結晶粒界を有する多結晶体のトリプルジャンクション周辺に関する詳細な変形解析が Zikry ら⁽¹⁸⁾⁽¹⁹⁾ によって報告されている。また、Teodosiu⁽²⁰⁾ はダイポール [補足 A.9] の消滅に起因する動的回復項を導入した硬化則を提案している。

一方、GN 転位密度は、Ashby⁽²¹⁾ によって定義された量であり、SS 転位密度と同じ次元を有する。GN 転位密度に基づくマルチスケール塑性解析の例としては、曲げを受ける平板に分布する刃状転位の様子⁽²²⁾、介在物まわりに形成される転位ループの描像⁽²³⁾⁽²⁴⁾ などが大橋によって再現されている。また、2 相ニッケル基超合金の変形解析⁽²⁵⁾、GN 転位密度の発展式を用いた粗大粒多結晶塑性解析⁽²⁶⁾ が Busso らによって行われている。GN 転位密度を用いると、転位の刃状およびらせん成分の区別が可能となり、転位ループの形状など結晶欠陥の幾何学的描像を浮き彫りにできる。また、すべりのこう配に起因する寸法効果を表現するのに適している。その反面、GN 転位密度には可動と不動といった概念がないために、転位のダイナミクスを記述することができず、ダイポールやトライポールなどの異符号の転位対群を表現できないという難点もある。

Fleck ら⁽²⁷⁾ は、硬化則に SS 転位密度だけでなく GN 転位密度をも取り入れることを提案しており、比嘉ら⁽²⁸⁾ は両転位密度を同時に考慮して 2 相ニッケル基超合金を例に均質化法を組み合わせたマルチスケール結晶塑性解析を行っている。Ohashi⁽²⁹⁾ は硬化則には SS 転位密度のみを考慮し、GN 転位密度の情報は転位の平均飛行距離モデルへ反映させることにより寸法依存性についての検討を行っている。これらの研究に代表される手法は、SS 転位密度と GN 転位密度のそれぞれの欠点を補うのに有用である。しかしながら、通常、SS 転位密度は発展式を用いて増分計算を行うことにより得られ、GN 転位密度はその時刻のすべり分布のこう配を算出することにより得られる。したがって、これらの量を同時に考慮することは、統

計的非状態量である SS 転位密度と幾何学的状態量である GN 転位密度といった異なる種類の量が転位密度に混在することになる。また、このような転位密度情報の導入方法に関してはいずれのモデルにも一長一短があり、定説がないのが現状である。

一方、Busso⁽²⁶⁾ や Teodosiu⁽³⁰⁾ らは配置の概念を導入し、GN 転位の存在を結晶の不連続性と結びつけ、転位密度を塑性変位こう配を用いて記述しているが、通常の連続体モデルを用いた場合、理論上これらの量は零となる。転位-結晶塑性解析を行う場合には、転位の存在を結晶の塑性変形の素過程であるすべりと結びつけるのが望ましい。

また、転位-結晶塑性論のみならず、転位をマイクロ場の支配因子としたマルチスケール解析の研究も数多く行われている。Delaire ら⁽³¹⁾ は動的回復を考慮した SS 転位密度の発展式を用い、銅粗大結晶粒を想定した解析を行っている。また、佐々木・石川⁽³²⁾ は Estrin⁽³³⁾ が提案した転位密度に基づく構成モデルを参考に、ポテンシャル関数に転位密度を導入している。Gurtin⁽³⁴⁾ は転位密度テンソルを用いて背応力を表現しているが、従来のひずみこう配理論と同様に非対称応力や偶応力に相当する内力が生じ、それに対する境界条件が明確に定まらないという問題を有している。同時に、ひずみこう配項に乗じる人工的特性長の物理的意味が明確には定義されていない。

1.2.2 転位の自己組織化モデル

転位組織の空間パターンニングは、結晶内に存在する膨大な数の集団転位による分岐現象として発現するものである。この種の発展式は Turing 分岐を発現させ得る非線形連立反応-拡散方程式としてしばしば記述される。転位源から発生した転位が林立転位などの障害物に捕らえられて不動化するという離散的な転位の挙動を可動転位が不動化して不動転位になるといったような転位の反応としてモデル化することによって、転位のダイナミクスを記述したものが反応-拡散系のモデルである。上記のような転位の反応は、離散転位動力学⁽³⁵⁾⁽³⁶⁾ などを用いることによって離散的に表現することは可能であるが、集団転位の自己組織化現象を表現するためには膨大な数の転位線を不均一に配置する必要があり、現状の計算機能力では再現不可能であると考えられる。

Walgraef-Aifantis⁽³⁷⁾⁽³⁸⁾⁽³⁹⁾ は、FCC 単結晶の疲労現象として発生する固執すべり帯 (PSBs=persistent slip bands) の空間パターンニングを再現するために、化学反応系で提案されたブラッセレータモデル⁽⁴⁰⁾ を離型とした可動・不動転位密度に対する連立反応-拡散方程式 (WA モデル) を提唱している。Glazov-Laird⁽⁴¹⁾ は、上記の方程式系を用いた 1 次元数値シミュレーションを行い、Shibutani⁽⁴²⁾ は反応-拡散方程式を 2 次元問題へ適用し、Vein 構造および Ladder 構造を再現している。Morita ら⁽⁴³⁾ は WA モデルにおける転位の生成・消滅・反応項をさらに精密化したモデルを提案している。一方、セル構造の自己組織化モデルとして、庄司・毛利⁽⁴⁴⁾ は 1 次元反応-拡散方程式を提案している。また、長谷部⁽⁴⁵⁾ は場の量子論に基づく Ginzburg-Landau 方程式を提案し、長範囲弾性応力場の情報をもとに応力状態に起因するセル形状の変化を再現している。このように転位パターンニングに関する様々な研究が行われているが、サブグレイン遷移に関する転位パターンニングの研究の例はなく、結晶の塑性変形と転位パターンニングの相互関係を直接結びつけたマルチスケールモデルへと発展させた例は見られない。

1.2.3 転位場の微分幾何学的表現

GN 転位密度は Kondo⁽⁴⁶⁾⁽⁴⁷⁾⁽⁴⁸⁾⁽⁴⁹⁾ によって体系化された非 Riemann 塑性論における微分幾何学的空間のねじれに相当し、転位線などの小域的結晶欠陥を表すため、ダイポール、原子空孔、転傾などの大域的結晶欠陥を表現できないとされている。すなわち、長範囲応力場を形成する GN 転位は、転位対などの結晶欠陥の情報を表現することができない。SS 転位密度には転位の正負の概念がないので、このような短範囲応力場を形成する大域的結晶欠陥を表すことができる。以上のことから、結晶中の全転位密度を算出するために、GN 転位密度に SS 転位密度を足し合わせる方法が提案されているが、前述のとおり SS 転位密度は統計量であり、幾何学量である GN 転位密度と同時に考慮することは異なる種類の量が転位密度に混在することになる。GN 転位密度を転位密度の定義に用いる際には、GN 転位密度では表すことのできない結晶欠陥の情報を何らかの形で幾何学量として表現するのが望ましい。結晶欠陥場の微分幾何学によると、空間のねじれである転位密度テンソルは GN 転位に相当し、空間の Riemann-Christoffel 曲率に対応する Kröner⁽⁵⁰⁾ によって定義された不適合度テンソルはその他の結晶欠陥に相当するといわれているため、不適合度テンソルを用いることによって幾何学的に大域的結晶欠陥を表現することができる可能性が示唆されている。結晶欠陥を幾何学的立場で捉える際には転位密度の定義に GN 転位密度のみならず不適合度も併せて考慮する必要があるといえる。しかしながら、不適合度テンソルが転位密度としての次元を有するという幾何学的根拠に関する議論はされておらず、不適合度テンソルと GN 転位密度では表現できない結晶欠陥の関係を幾何学的に考察する必要がある。また、変形場の情報から計算される微分幾何学的表現のみでは動的回復現象に代表される転位のダイナミクスを表現することができないといった問題も有している。

1.2.4 強ひずみ加工による UFG 創製

結晶粒超微細化による金属材料の高強度化は、結晶粒径の変化による寸法効果 (Hall-Petch 効果) に関係づけられる。転位密度の定義に幾何学的に必要な転位密度 (GN 転位密度) を用いると、すべりのこう配という幾何学的特性から、自然に寸法効果を表現できるため、GN 転位密度を硬化則などに導入し、粒径に依存した寸法効果を再現しようという研究⁽²⁶⁾⁽⁵¹⁾⁽²⁸⁾ も行われている。しかしながら、これらの研究はいずれも解析モデルの初期結晶粒径を変化させることにより寸法効果を表現しており、変形によって誘起される微細粒の存在まで考慮するには至っていない。強ひずみ加工による金属の結晶粒超微細化は、初期段階において応力の増加とともに転位セル構造が再分割され、サブグレインへと遷移し、隣接するサブグレイン間における方位差が大きくなり、GN 粒界などの変形誘起大角粒界に囲まれた領域 (サブディヴィジョン) を形成するという過程を経ていることが実験的に知られている⁽¹²⁾⁽⁵²⁾⁽⁵³⁾。このような微細組織の変化によって形成される UFG の粒サイズは、実験室レベルで 1 μm 以下まで微細化可能となっているが、UFG 創製メカニズムおよび結晶粒微細化による材料特性の変化を数値解析的アプローチによって解明しようとする例はほとんど見られない。このような金属の微細組織形成過程を計算力学的に再現できれば、強ひずみ冷間・温間圧延における力学的制御方法を探る一助になる。上記のような解析を行うためには、大変形問題に対応したマルチスケールモデリングとシミュレーション手法の構築が必要であるが、超微細粒組織の形成過程を再現できる数理モデルは提案されていない。また、結晶粒微細化に伴ってひずみ速度感度指数が増加することが実験によって報告⁽¹¹⁾⁽⁵⁴⁾ されているが、このような結晶粒微細化によって材料特性が変化するような現象を表現する数値解析モデルは提案されていない。このことは、変形によって誘起された粒の情報を明確に判定する数値解析方法が提案されていないことにも起因する。

Inoue ら⁽⁵⁵⁾⁽⁵⁶⁾ は試料内部の大ひずみ領域を FEM 解析の結果から予測し、圧縮加工による強ひずみ付与

の効率化を図っている．しかしながら，現在の数値解析技術では，力学条件などのマクロ場の情報のみを予測することはある程度可能であるが，強ひずみ誘起による結晶粒超微細化といったマクロ場とミクロ場の相互作用による材料微細組織の変化を表現するには至っていない．一方，これまでに提案されたほとんどの転位-結晶塑性モデルにおいては解析対象の変形が微小であり，単結晶加工硬化曲線に見られる3段階硬化を考慮した例はほとんど見られない．Teodosiu⁽²⁰⁾ や Essmann-Mughrabi⁽⁵⁷⁾ が提案した動的回復項を硬化則や転位密度に用いた解析においても，明確な単結晶の3段階硬化曲線は再現されていない．Ohashi⁽⁵⁸⁾ は多重すべり系に拡張した転位の平均飛行距離モデルを用い，ステージIIまでの加工硬化曲線を表しているが，ステージIIIには至っていない．強ひずみ加工のような大きい変形を扱う場合には，大変形問題特有の現象を考慮する必要があると考えられるが，単結晶の3段階硬化を考慮してステージIII特有の動的回復現象をモデル化した例もほとんどない．

1.3 本研究の目的

そこで本研究では，UFG創製プロセスを例とし，セル構造およびサブグレインの自己組織化を表現する反応-拡散方程式を熱力学的手法を介して導出し，ダイポールの対消滅率および不動転位の蓄積率の増減を考慮した転位の反応速度係数をモデル化することによって，ステージII後半におけるセル構造の再分割を表現する．また，転位のダイナミクスに基づく動的回復モデルを反応-拡散方程式に導入することによってステージIIIにおけるサブグレイン遷移を再現する．さらに，金属単結晶の3段階硬化における応力情報を反映させるために，反応-拡散方程式における転位反応項，転位生成・消滅項および拡散項に分解せん断応力を変数とする速度係数モデルを提案する．これらのモデルを用いた数値解析から，応力の増加に伴うセル構造の形成，セルの再分割過程およびサブグレインの形成の表現を試みる．また，反応-拡散方程式から得られた転位密度情報を結晶塑性論の硬化則に導入することで，転位自己組織化を伴った転位-結晶塑性モデルを構築し，転位場と変形場の連動解析の手法を提案する．その際，ステージIIIにおける動的回復現象の影響を考え，転位の平均飛行距離をステージIIIで回復させるようにモデル化し，ステージIIまでの転位の平均飛行距離の変化を表す修正 Seeger モデル⁽²²⁾ をステージIIIまで拡張する．加えて，転位-結晶塑性解析の手法ならびにその注意点に関して詳細に述べる．以上の理論を用いてアルミニウム単結晶平板を想定し，単純引張変形させる場合のFEM解析および，自己組織化における転位情報を得る手段としてFDM解析を行い，本モデルによって単結晶の3段階硬化に対応した転位パターンングが表現できること，ならびにステージIからステージIIIにわたる3段階加工硬化特性に転位密度が及ぼす影響について検討する．

また，結晶欠陥場の幾何学的描像に基づいて，GN転位密度およびSS転位密度に相当する不適合度を同時に考慮した転位-結晶塑性モデルを提案する．まず，結晶欠陥の表現として結晶塑性論の体系に適合するようにすべりを用いてGN転位密度テンソルおよびGN不適合度テンソルを定義する．なお，これらを幾何学的に必要な結晶欠陥としてGN結晶欠陥として定義し，その幾何学的意味について考察する．さらに，単結晶の加工硬化曲線に見られる3段階硬化におけるステージIIIで顕著に現れる転位の動的回復現象を表すため，幾何学的議論に基づいて転位対の消滅率を導出する．以上の転位密度をBailey-Hirshの式を介して結晶塑性論の硬化係数に導入するとともに，転位密度依存形の転位の平均飛行距離モデルを用いることによって，転位場と変形場を連成させたマルチスケール結晶塑性モデルを構築する．さらに，硬化係数および転位密度依存形の転位の平均飛行距離モデルにおける転位密度にGN転位密度を導入した場合と導入しない場合の数値解析の結果を比較し，実現象との整合性を確かめる．また，実験によって明らかとなっている強ひずみ加工による結晶粒微細化，サブディヴィジョン形成時のGN粒界の発現および微細化に起

因するひずみ速度感度の上昇といった現象を数値解析によって定性的に再現することを試みる。その際に、結晶粒の微細化が材料特性に与える影響を調べるために、誘起された大角粒界によって分割される新たな粒の形成を数値解析的に判断する方法、ならびに結晶粒微細化に伴うひずみ速度感度の変化が変形に及ぼす影響を検討するため、粒径依存のひずみ速度感度指数モデルを提案する。以上のモデルを用いて、強ひずみを付与した FCC 多結晶に対して GN 転位-結晶塑性 FEM 解析を行い、結晶欠陥および結晶方位の分布を可視化する。得られた結果に基づいて、粒内に誘起される GN 粒界の形成について考察し、UFG 創製シミュレーションの準備段階として、結晶粒微細化の過程を再現することを試みる。

1.4 本論文の構成

第 2 章では、中間配置 (Isoclinic 配置⁽⁵⁹⁾) を定義し、さらにその配置において回復可能な量と経路に依存する回復不可能な量が存在することを示す。これによって、Isoclinic 配置が構成式の参照配置として熱力学的体系に整合していることを明らかにする。次に初期配置においてすべりテンソルを定義し、それに基づいて塑性変形速度および塑性スピンを導出する。さらに、結晶塑性論の体系に適するよう、孤立転位に対応する GN 転位密度および転位対に対応する GN 不適合度を新たに定義し、それらを GN 結晶欠陥と定義する。また、幾何学的状態量である GN 結晶欠陥に整合するよう、転位対の消滅に起因する動的回復現象のモデルを新たに提案する。自己組織化に関する転位の情報として、粒子画像に基づく転位密度の表現についても触れておく。

第 3 章では、自由エネルギーの引数として内部変数を決定し、それらに共役な内力を定義して、諸釣合い方程式を導出する。まず、第 4 章で示される Clausius-Duhem の不等式との整合性から、保存量としての転位密度および非保存量の転位密度流束の時間積分値を全自由エネルギーの内部変数として導入する。次に、仮想仕事率の原理から境界条件および力学的釣合い方程式を、熱力学第 1 法則からエネルギー方程式を、質量保存則から連続の式を導出する。また、転位密度の釣合い方程式を転位密度の保存則から導出する。さらに、秩序形成に寄与する転位拡散の影響を拡散のエントロピー流束として代入した熱力学第 2 法則からエントロピー不等式を導出する。

第 4 章では、エントロピー増大則を満足するように、エネルギー共役量の仕事率を保存部分と散逸部分に分離⁽⁶⁰⁾して諸構成式を具体的に導出する。また、転位密度流束の構成式を第 3 章で得た釣合い方程式に適用することで、セル構造やサブグレインなどの転位パターンを表現する反応-拡散方程式を構築する。保存部分からは弾性構成式と化学ポテンシャルの構成式が導出される。一方、散逸部分からは最大散逸速度の原理に基づき、転位密度流束および転位反応項の構成式が導出される。また、転位密度流束の構成式に化学ポテンシャルの構成式を代入することで、転位密度流束の転位密度依存性を示す。同様に、転位反応項の構成式に化学ポテンシャルの構成式を代入することによって、転位密度を用いて転位反応項を記述する。得られた諸構成式を転位密度の釣合い方程式に代入し、転位生成、ダイポールの対消滅およびらせん転位の対消滅のモデルに従って転位の生成・消滅項を導入することで、転位パターンニングに関する支配方程式として可動および不動転位密度による連立形反応-拡散方程式が得られる。そして、散逸関数を相当量表示することで、分解せん断応力の硬化則を与える関数形に転位密度が導入されること、および分解せん断応力の影響が応力効果係数に反映されることの熱力学的整合性を示す。また、転位パターンニングが発現する場合の反応-拡散方程式における各速度係数の値の範囲を限定するために、反応-拡散方程式に対して線形安定性解析を行い、時間的リズムを発現する Hopf 分岐および空間不均一構造を発現する Turing 分岐の発生条件を調べるとともに、セル構造およびサブグレインの自発的特性長さを求める。

第5章では、第4章で得た弾性構成式から、結晶塑性タイプの弾粘塑性構成式を導出し、結晶の硬化則に転位密度の情報を反映させるための一般論を展開する。多重すべり系に拡張した Bailey-Hirsch の式を用いて、Pan-Rice 形の硬化則の流れ応力に転位密度を導入し、転位場と変形場の情報のやり取りを可能とする転位-結晶塑性論を構築する。一方、応力情報を反応-拡散方程式に導入する手段として、応力効果係数を分解せん断応力の関数としてモデル化し、変形場の情報を転位場の方程式系に反映させる。また、第7章と第8章で実行する転位-結晶塑性 FEM 解析の準備として、仮想仕事率の原理を Updated Lagrange 形式に変形し、すべり速度項が持つ強い非線形性を緩和するために接線係数法を適用して結晶塑性論の弾粘塑性構成式を数値解析に適した形に変形する。さらに、仮想仕事率の原理式および結晶塑性タイプの構成式を用いて、要素剛性方程式を導く。その際に、数値解析上の注意点について詳述する。

第6章では、反応-拡散方程式を差分近似して2次元問題に対する FDM 解析を行う。反応-拡散方程式における各材料係数は、反応および生成・消滅モデルに対する速度係数および拡散係数であり、それらは実験では測定不可能である。そこで、FDM 解析の結果に基づいて各速度係数が転位パターンニングに及ぼす影響について検討し、転位セル構造の形成、セル構造の再分割およびサブグレインの形成が再現される各速度係数を決定する。

第7章では、結晶粒超微細化プロセスの初期段階の現象である変形に伴うセル形成、セル再分割およびサブグレイン遷移を再現することを目的とする。前章の応力効果係数モデルに加え、反応-拡散方程式から得られる不動転位密度を転位場の情報として結晶の硬化係数に反映させることで転位-結晶塑性連成解析を行う。解析対象をアルミニウム単結晶平板とし、平面ひずみ問題に対する変形場の FEM 解析と反応-拡散方程式を用いた転位場の FDM 解析を同時に実行する。得られた結果から、不動転位密度やすべりの分布および結晶方位の変化を可視化し、単結晶の3段階硬化に適合するようにセル組織形成およびサブグレイン形成が再現されていることを論じる。

第8章では、結晶粒超微細化プロセスの中期段階の現象であるサブディヴィジョンの形成を再現することを目的とする。転位場の情報として GN 結晶欠陥の蓄積状況を結晶の硬化係数に反映させた転位-結晶塑性解析を行う。圧縮条件下におけるアルミニウム多結晶平板を対象とした数値解析の結果から、動的回復現象が転位場および変形場に及ぼす影響について考察し、本研究で提案した動的回復モデルならびに転位密度依存形の転位平均飛行距離モデルの妥当性について検討する。また、GN 粒界が粒内に誘起される過程を再現し、GN 粒界によって初期結晶粒が複数の粒に微細化されるメカニズムを明らかにする。

第9章は結論であり、本研究で得られた成果を要約している。また、本研究の今後の展開についても述べる。

1.5 本論文で用いる記号

本論文では特に断りのないかぎり物理量を表すスカラーを斜字体の細字で、ベクトルを斜字体の小文字の太字で、2階以上のテンソルを斜字体の大文字の太字で表す。そして、初期配置、第1中間配置、第2中間配置および現配置における配置表示記号はそれぞれ $\beta_{(l)}$, $\beta_{(M)}$, $\beta_{(m)}$ および $\beta_{(c)}$ のように表わす。また、テンソルの配置表示記号は次のように表わす。

初期配置	: $A_{(l)}$
第1中間配置	: $A_{(M)}$
第2中間配置	: $A_{(m)}$
現配置	: A

ベクトルおよびテンソルの成分はそれぞれ小文字及び大文字の斜字体で表し，ラテンおよびギリシャ添字を付して， $a_i, b_i, c_i, \dots, A_{ij}, B_{ij}, C_{ij}, \dots$ のように表す．

なお，線形変換，微分の関係の後形記法で表し，直接表示および指標表示による線形変換，内積，外積，テンソル積および2重積を次のように表す．

$$\begin{aligned}
 \text{線形変換} & : \mathbf{A}\mathbf{B} \quad , \quad A_{ik}B_{kj} \\
 \text{内積} & : \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \quad , \quad A_{ij}B_{ij} \\
 \text{外積} & : \mathbf{A} \times \mathbf{B} \quad , \quad e_{jlm}A_{il}B_{mk} \\
 \text{テンソル積} & : \mathbf{A} \otimes \mathbf{B} \quad , \quad A_{ij}B_{kl} \\
 \text{2重積} & : \mathbf{e} \cdot \cdot \mathbf{A} \quad , \quad e_{ijk}A_{kj} \\
 & : \mathbf{A} : \mathbf{B} \quad , \quad A_{ijkl}B_{kl}
 \end{aligned}$$

また，微分の関係直接表示および指標表示により次のように表す．

$$\begin{aligned}
 \text{微分作用素} & : \nabla \quad , \quad \cdot_i \\
 \text{こう配} & : \text{grad}A \quad , \quad A_{i,j,k} \\
 \text{発散} & : \text{div}A \quad , \quad A_{i,j,j} \\
 \text{回転} & : \text{curl}A \quad , \quad e_{jkl}A_{il,k}
 \end{aligned}$$

ここで，記号 $(\cdot)_i$ は x_i による微分を表し，記号 e_{ijk} は交代記号を表す．最後に，今までの記号に関する規約で，1つの項に現れる2つ1組の指標については，1~3の総和記号を省略する．いわゆる総和の規約を適用する．例えば， $\sum_{j=1}^3 A_{ij}b_j = A_{ij}b_j$ のように記号 $\sum_{j=1}^3$ を省略する．

以下に，主な記号の意味をまとめて示しておく．

主な記号

- $\overset{\Delta}{\underline{A}}$: 2階のテンソル \underline{A} の Cotter-Rivlin 速度
 $\overset{\nabla}{\underline{A}}$: 2階のテンソル \underline{A} の Mandel-Kratochvil 速度
 $\overset{\circ}{\underline{A}}$: 2階のテンソル \underline{A} の Jaumann 速度
 $\overset{\square}{\underline{A}}$: 2階のテンソル \underline{A} の Truesdell 速度
 \underline{A}_A : 2階のテンソル \underline{A} の反対称部分
 \underline{A}_S : 2階のテンソル \underline{A} の対称部分
 \underline{A}^T : 2階のテンソル \underline{A} の転置
 $\|\underline{A}\|$: \underline{A} のノルム
 $\widetilde{\underline{A}}$: \underline{A} の J 倍を表す記号 (ただし, J は F の Jacobian)
 $\check{\underline{A}}$: \underline{A} の仮想量を表す記号
 $\dot{\underline{A}}$: \underline{A} の物質時間微分
 \underline{A}^e : \underline{A} の弾性部分
 \underline{A}^p : \underline{A} の塑性部分
 $\underline{A}^{(\alpha)}$: α すべり系に関する量
 $\underline{A}^{[n]}$: 転位成分に関する記号 ($[n] = m$: 可動成分, $[n] = i$: 不動成分)
 \mathbf{A} : 背応力を表すテンソル
 A : $D^m, D^i, K_0, K_1 \sim K_4$ および L_1 に相当する応力効果係数
 A^I : ステージ I における速度係数
 A^{II} : ステージ II 前半における速度係数
 A^{II*} : セル再分割後の速度係数
 A^{III} : ステージ III における速度係数
 a : 0.1 のオーダーの数値定数
 a_0 : 自己硬化の相互作用を表すパラメータ
 a_1 : 同一すべり面, 同一すべり方向および Hirth 固着の相互作用を表すパラメータ
 a_2 : 可動ジヨグ形成の作用を表すパラメータ
 a_3 : Lomer-Cottrell 固着の作用を表すパラメータ
 \mathbf{B} : 正味の Burgers ベクトル
 $[\mathbf{B}]$: 変位-ひずみマトリクス
 B_0 : 転位の生成項における反応速度係数
 B_2 : 転位の消滅項における反応速度係数

\tilde{b}	: Burgers ベクトルの大きさ
$C^{(1)}, C^{(2)}$: 不変量を作る係数テンソル
C^e	: 4 階の異方性弾性係数テンソル
C^{tan}	: 接線係数表示された異方性弾性係数テンソル
c	: 1 のオーダーの数値定数
c^*	: 可動転位が不動化するまでに通過する林立転位の本数
c_e	: 全転位ループにおける刃状成分の存在比を表す数値係数
D	: 変形速度テンソル
$D^{[n]}$: 拡散係数
d^*	: 拡散係数比 ($d^* \equiv D^i/D^m$)
E	: ひずみテンソル
$[E]$: 速度-速度こう配マトリクス
E	: ヤング率
\bar{E}^p	: 変形尺度による塑性ひずみテンソル
e_{ijk}	: 交代記号
F	: 変形こう配テンソル
\bar{F}	: 変形こう配テンソルの弾・剛体回転以外の部分
F^*	: 変形こう配テンソルの塑性以外の部分
$[F]$: 幾何学的非線形性に起因するマトリクス
$\{\Delta\bar{F}\}$: 全体外力増分ベクトル
f	: 物体力密度ベクトル
f	: 転位の対消滅の空間頻度を表す数値係数
$[G]$: 幾何学的非線形性に起因するマトリクス
G	: Gibbs 関数
$G^{[n]}$: 転位の湧き出し項
$G_p^{[n]}$: 転位の生成・消滅項
$G_r^{[n]}$: 転位の反応項
g	: 温度こう配ベクトル
g	: 計量テンソルの行列式
$g_r^{[n]}$: $G_r^{[n]}$ の時間積分値
$g^{(\alpha)}$: 結晶のすべりに対する抵抗を表す流れ応力

- H : 単位体積あたりのエントロピー
 h : 差分格子の間隔
 h_0 : 初期硬化率を表す係数
 h_p : 硬化率関数
 $h^{(\alpha\beta)}$: α すべり系に β すべり系が及ぼす硬化に関する硬化係数
 I : 恒等テンソル
 I : 最大散逸速度の原理における汎関数
 J : ヤコビアン ($J \equiv \det F$)
 J_1, J_2 : $\tilde{T}_{(m)}$ に対する不変量
 $[K]$: 全体剛性マトリクス
 K : 運動エネルギー密度
 K_0 : 可動転位の不動化に関する転位の反応項における反応速度係数
 K_1 : 不動転位の可動化に関する転位の反応項における反応速度係数
 K_2 : 2 次の転位蓄積に関する転位の反応項における反応速度係数
 K_3 : 3 次の転位蓄積に関する転位の反応項における反応速度係数
 K_4 : 4 次の転位蓄積に関する転位の反応項における反応速度係数
 K_1^H : Hopf 分岐を起こす応力振幅
 K_1^T : Turing 分岐を起こす応力振幅
 k : FDM 解析における時間ステップ
 $k_1 \sim k_4$: 速度係数の変化のしやすさを表す数値パラメータ
 $[k^E]$: 要素剛性マトリクス
 L : 速度こう配テンソル
 L_1 : 反応-拡散方程式における動的回復項の係数テンソル
 $L^{(\alpha)}$: 転位の平均飛行距離
 $L_0^{(\alpha)}$: 初期の転位の平均飛行距離
 $L_a^{(\alpha)}$: ステージ III 開始時の転位の平均飛行距離
 $L_b^{(\alpha)}$: サブグレイン形成後の転位の平均飛行距離
 l : 転位間距離
 l_b : Burgers 回路の代表寸法
 m : ひずみ速度感度指数
 $m^{[n]}$: 転位密度流束ベクトル

$m^{(\alpha)}$: すべり面の法線方向を表す結晶基底ベクトル
N	: 応力速度に共役な内力に相当するテンソル
$[N]$: 形状関数マトリクス
n	: 微小面積要素の単位法線ベクトル
P	: 内力のなす仕事率
P_B	: 物体力のなす仕事率
P_b	: 純粋な物体力のなす仕事率
P_I	: 慣性力のなす仕事率
P_s	: 表面力のなす仕事率
$P^{(\alpha)}$: 結晶基底テンソル ($P^{(\alpha)} \equiv s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)}$)
P_η	: 異符号の転位が対消滅を起こしうる領域と Burgers 回路の面積比
$p^{[n]}$: 転位密度流束 $m^{[n]}$ に共役な内力に相当するベクトル
Q_b	: 体積に供給される単位時間あたりの熱量
Q_s	: 表面に供給される単位時間あたりの熱量
q	: 熱流束ベクトル
q	: 潜在硬化の大きさを表すパラメータ
\check{q}	: 空間周波数を決定する波数ベクトル
R^*	: 弾・剛体回転を表す直交テンソル (Isoclinic 配置を与える直交テンソル)
r	: 放射熱密度
S^e	: 三角形要素の面積
$s^{(\alpha)}$: すべり方向を表す結晶基底ベクトル
T	: Cauchy 応力テンソル
\tilde{T}	: Kirchhoff 応力テンソル
\hat{T}	: 有効応力
t	: 解析時刻
$\overset{(n)}{t}$: けん引力ベクトル
$t^{(\alpha)}$: $s^{(\alpha)}$ および $m^{(\alpha)}$ に垂直な方向を表す結晶基底ベクトル ($t^{(\alpha)} = s^{(\alpha)} \times m^{(\alpha)}$)
$t^{(\alpha)}$: 可動転位の平均寿命
Δt_c	: FEM 解析における時間増分
Δt_d	: FDM 解析における時間増分
U	: 強制変位

- \widehat{U} : 単位体積あたりの内部エネルギー
 \widehat{U}^e : 弾性ストレッチテンソル
 $\{\Delta U\}$: 全体変位増分ベクトル
 \mathbf{u} : 変位ベクトル
 $\{\Delta \mathbf{u}\}$: 節点変位増分ベクトル
 v : 物質体積
 \mathbf{v} : 物体力の速度ベクトル
 v^I : 節点 I における節点速度
 $v^{(\alpha)}$: 可動転位の平均速度
 \mathbf{W} : 連続体スピンテンソル
 \mathbf{W}^* : 下部構造スピンテンソル ($\mathbf{W}^* \equiv \mathbf{W} - \mathbf{W}^p$)
 \mathbf{w} : \mathbf{W} に双対な軸性ベクトル
 \mathbf{x} : 物質点の位置ベクトル
 x_I : 節点 I の x 座標
 y_c : 転位対の消滅距離 (ダイポールが形成される最小のすべり面間距離)
 y_I : 節点 I の y 座標
 α : 構造全体の GN 転位密度テンソル
 α_K : Kröner による転位密度テンソル
 $\alpha^{[n]}$: 粒子描像に基づく転位密度
 $\alpha_0^{[n]}$: 基準状態における転位密度
 $\alpha^{(\alpha)}$: GN 転位密度テンソル
 $\alpha_e^{(\alpha)}$: GN 転位密度の刃状成分
 $\alpha_s^{(\alpha)}$: GN 転位密度のらせん成分
 $\beta_{(c)}$: 現配置
 $\beta_{(I)}$: 初期配置
 $\beta_{(M)}$: 第 1 中間配置
 $\beta_{(m)}$: 第 2 中間配置 (Isoclinic 配置)
 γ : すべりテンソル
 γ : 全すべり
 γ^* : 2 次すべり系が活動し始めるときのすべり値
 γ^{**} : ステージ III へ遷移し始めるときのすべり値

$\gamma_{(i)}$: 内部エントロピー生成密度
γ_r	: 参照すべり値
$\gamma^{(\alpha)}$: 活動すべり系 α のすべり
$\dot{\gamma}_0^{(\alpha)}$: 参照すべり速度
Δ	: 特性方程式の定数項
$\hat{\varepsilon}$: 内部変数が存在する場合の内部エネルギー密度
ϵ_{ijk}	: 非 Riemann 空間における Levi-Civita の記号
η	: 構造全体の GN 不適合度テンソル
η	: エントロピー密度
η_K	: Kröner による不適合度テンソル
$\eta^{(\alpha)}$: GN 不適合度テンソル
$\eta^{(\alpha)}$: 転位対密度
$\eta_{ce}^{(\alpha)}$: GN 不適合度の同一すべり面上にある正負の刃状転位対成分
$\eta_{cs}^{(\alpha)}$: GN 不適合度の同一すべり面上にある正負のらせん転位対成分
$\eta_{de}^{(\alpha)}$: GN 不適合度の異なるすべり面上にある正負の刃状転位対成分
$\eta_{ds}^{(\alpha)}$: GN 不適合度の異なるすべり面上にある正負のらせん転位対成分
θ	: 温度
θ^{tan}	: 接線係数
κ	: 特性方程式の 1 次の係数
Λ	: 転位平均飛行距離に影響を及ぼす材料定数
$\hat{\lambda}$: Lagrange の未定乗数
$\check{\lambda}$: 自発的特性波長
μ	: 弾性せん断剛性率
$\bar{\mu}$: 転位密度流束の時間積分値を表すベクトル
ν	: ポアソン比
$\xi^{[n]}$: 線形安定性解析における摂動項の振幅
\mathbf{II}	: 第 1 種 Piola-Kirchhoff 応力テンソル
$\mathbf{II}^{[n]}$: 化学ポテンシャルに相当するテンソル
ρ	: 密度
$\rho^{(\alpha)}$: 全転位密度
$\rho_0^{(\alpha)}$: 初期転位密度

- $\rho_e^{(\alpha)}$: 刃状転位密度
 $\rho_h^{(\alpha)}$: 硬化係数における転位密度
 $\rho_L^{(\alpha)}$: 転位平均飛行距離における転位密度
 $\rho_m^{(\alpha)}$: 可動転位密度
 $\rho_R^{(\alpha)}$: 対消滅を起こした転位密度
 $\rho_s^{(\alpha)}$: らせん転位密度
 $\rho_a^{(\alpha)}$: GN 転位密度のノルム
 $\rho_\eta^{(\alpha)}$: GN 不適合度のノルム
 τ^* : ステージ II 開始時の分解せん断応力
 τ^{**} : ステージ III 開始時の分解せん断応力
 τ^K : ステージ II におけるセルの再分割開始時の分解せん断応力
 $\tau^{(\alpha)}$: 分解せん断応力
 $\tau_0^{(\alpha)}$: 臨界分解せん断応力
 $\tau_y^{(\alpha)}$: 参照分解せん断応力
 Φ : 散逸関数
 $\bar{\Psi}$: 全自由エネルギー
 $\bar{\Psi}_d$: 全自由エネルギーの散逸部分
 $\bar{\Psi}_k$: 全自由エネルギーの通常の力学部分
 ψ : 単位体積あたりの全自由エネルギー
 $\Omega_0 \sim \Omega_3$: 転位相互作用行列の成分行列
 $\Omega^{(\alpha\beta)}$: すべり系 α, β 間の相互作用行列
 ω : ゆらぎの時間的な角振動数
 $\omega_{\alpha\beta}$: 自己硬化を除く転位の相互作用重み行列

第2章

運動学

本章では、運動学を従来の結晶塑性論に基づいて論ずる。ただし、本研究では Shizawa-Zbib⁽⁶¹⁾ に代表される、第2中間配置 (Isoclinic 配置)⁽⁵⁹⁾ の導入による明確な4配置構成を用いているところが従来とは異なる。さらに、その配置において回復可能な量と経路に依存する回復不可能な量が存在することを示す。これによって、Isoclinic 配置が構成式の参照配置として熱力学的体系に整合していることを明らかにする。次に初期配置においてすべりテンソルを定義し、それに基づいて塑性変形速度および塑性スピンを導出する。また、結晶欠陥場の幾何学的描像に基づいて転位密度および不適合度の必要性を示し、結晶塑性論の体系に適するよう、孤立転位に対応する GN 転位密度および転位対に対応する GN 不適合度を新たに定義する。それらを GN 結晶欠陥と定義する。また、幾何学的状態量である GN 結晶欠陥に整合するよう、転位対の消滅に起因する動的回復現象のモデルを新たに提案する。自己組織化に関する転位の情報として、粒子描像に基づく転位密度の表現についても触れておく。

2.1 変形こう配の分解

本研究では、下部構造スピン: $W^* \equiv W - W^p$ [補足 B.1] を共回転速度に用いるために、Shizawa-Zbib⁽⁶¹⁾ の議論に基づき、図 2.1 に示すような中間配置を考える。ここで、 W および W^p はそれぞれ連続体スピンおよび塑性スピンである。図 2.1 では、初期配置 $\beta_{(I)}$ から現配置 $\beta_{(C)}$ への変形過程を次のように分解することを想定している。まず初期配置 $\beta_{(I)}$ から塑性変形こう配 F^p により第1中間配置 $\beta_{(M)}$ へ、次に弾性ストレッチ \hat{U}^e により第2中間配置 $\beta_{(m)}$ へ、さらに第2中間配置 $\beta_{(m)}$ から剛体・弾性回転 R^* により現配置 $\beta_{(C)}$ に写像されるという配置である。このことは変形こう配 F を次のように分解することに他ならない。

$$F = R^* \bar{F} = F^* F^p = R^* \hat{U}^e F^p \dots \dots \dots (2.1)$$

ここで、 R^* はそれぞれ剛体・弾性回転を表す直交テンソル、 \hat{U}^e は弾性回転を完全に取除いた弾性ストレッチを表すテンソルであり、 F^p は塑性変形を表すテンソルである [図 2.1 参照]。また、 $\bar{F} = \hat{U}^e F^p$ 、 $F^* = R^* \hat{U}^e$ である。本研究では、 $\beta_{(C)}$ における任意の2階のテンソルを \underline{A} とし、 $\beta_{(m)}$ 、 $\beta_{(M)}$ および $\beta_{(I)}$ においてはそれぞれ $\underline{A}_{(m)}$ 、 $\underline{A}_{(M)}$ および $\underline{A}_{(I)}$ と表記する。また、 \underline{A} は $\underline{A}_{(m)} = R^{*T} \underline{A} R^*$ のように変換され、 $\underline{A}_{(m)}$ の速度は

$$\dot{\underline{A}}_{(m)} = R^{*T} \overset{\nabla}{\underline{A}} R^*, \quad \overset{\nabla}{\underline{A}} \equiv \dot{\underline{A}} - W^* \underline{A} + \underline{A} W^* \dots \dots \dots (2.2)$$

で与えられる [補足 B.2 参照]。式 (2.2) における共回転速度 $\overset{\nabla}{\underline{A}}$ は Mandel-Kratochvil 速度⁽⁶²⁾⁽⁶³⁾ となる。したがって、構成式の参照配置として $\beta_{(m)}$ を採用すれば、共回転速度のスピンが W^* となることがわかる。一

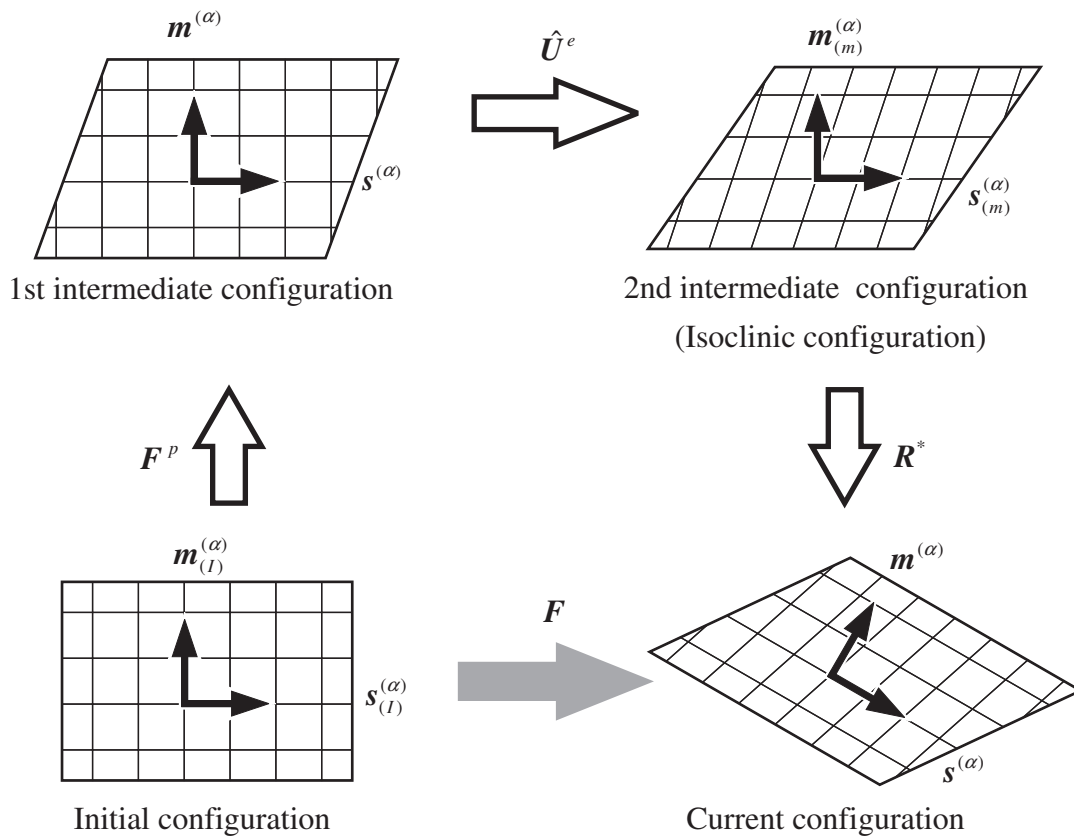


Fig. 2.1 Configurations and crystal grids

方, 図 2.1 のように, 各配置におけるすべり方向の結晶基底ベクトル $s^{(\alpha)}$ およびすべり面の法線方向の結晶基底ベクトル $m^{(\alpha)}$ を定義すれば, 初期配置から第 1 中間配置⁽⁶⁴⁾⁽⁶⁵⁾への写像は, 結晶のすべり変形であるため結晶基底の向きは変化しない. 第 1 中間配置から第 2 中間配置 (Isoclinic 配置) への写像は弾性ストレッチ変形であるため, 格子は引張, 圧縮ならびにせん断変形を受ける. さらに, Isoclinic 配置から現配置までは剛体・弾性回転を受けて写像されるため, 結晶基底の向きは変化する.

2.2 ひずみの弾・塑性分解

2.2.1 ひずみの定義

従来と同様に微小線素の 2 乗の差を用いて, ひずみを定義する. 図 2.1 より各配置での微小線素ベクトル間の関係は次のように表される.

$$dx = R^* dx_{(m)} \dots \dots \dots (2.3)$$

$$dx_{(m)} = \hat{U}^e dx_{(M)} \dots \dots \dots (2.4)$$

$$dx_{(M)} = F^p dx_{(I)} \dots \dots \dots (2.5)$$

弾性ひずみおよび塑性ひずみの参照配置が第 1 中間配置 $\beta_{(M)}$ および初期配置 $\beta_{(I)}$ であることを考慮し，微小線素 ds の 2 乗の差を変形させると次式のようになる．

$$\begin{aligned} ds^2 - ds_{(I)}^2 &= ds^2 - ds_{(M)}^2 + ds_{(M)}^2 - ds_{(I)}^2 \\ &= (dx \cdot dx - dx_{(M)} \cdot dx_{(M)}) + (dx_{(M)} \cdot dx_{(M)} - dx_{(I)} \cdot dx_{(I)}) \\ &= (F^* dx_{(M)} \cdot F^* dx_{(M)} - dx_{(M)} \cdot dx_{(M)}) + (F^p dx_{(I)} \cdot F^p dx_{(I)} - dx_{(I)} \cdot dx_{(I)}) \\ &= 2E_{(M)}^e \cdot dx_{(M)} \otimes dx_{(M)} + 2E_{(I)}^p \cdot dx_{(I)} \otimes dx_{(I)} \dots \dots \dots (2.6) \end{aligned}$$

ただし，式 (2.6) における Green ひずみの弾性部分 $E_{(M)}^e$ および塑性部分 $E_{(I)}^p$ は次式のように定義される．

$$E_{(M)}^e \equiv \frac{1}{2}(F^{*T} F^* - I) = \frac{1}{2}(\hat{U}^{eT} \hat{U}^e - I) \dots \dots \dots (2.7)$$

$$E_{(I)}^p \equiv \frac{1}{2}(F^{pT} F^p - I) \dots \dots \dots (2.8)$$

ここで， I は恒等テンソルを表す．式 (2.3)，式 (2.4) および式 (2.5) を式 (2.6) に適用すれば，各配置における弾性ひずみはそれぞれ

$$\left. \begin{aligned} E_{(I)}^e &\equiv \frac{1}{2}(F^T F - F^{pT} F^p), & E_{(m)}^e &\equiv \frac{1}{2}(I - \hat{U}^{e-T} \hat{U}^{e-1}) \\ E^e &\equiv \frac{1}{2}(I - F^{*-T} F^{*-1}) \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (2.9)$$

のように定義できる．また，各配置における塑性ひずみはそれぞれ次式のように定義できる．

$$\left. \begin{aligned} E_{(M)}^p &\equiv \frac{1}{2}(I - F^{p-T} F^{p-1}), & E_{(m)}^p &\equiv \frac{1}{2}(\hat{U}^{e-T} \hat{U}^{e-1} - \bar{F}^{-T} \bar{F}^{-1}) \\ E^p &\equiv \frac{1}{2}(F^{*-T} F^{*-1} - F^{-T} F^{-1}) \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (2.10)$$

2.2.2 弾・塑性ひずみの各配置への変換則

各配置での弾性ひずみは次式のような関係として表現できる．

$$\begin{aligned} E_{(I)}^e \cdot dx_{(I)} \otimes dx_{(I)} &= E_{(M)}^e \cdot dx_{(M)} \otimes dx_{(M)} = E_{(m)}^e \cdot dx_{(m)} \otimes dx_{(m)} \\ &= E^e \cdot dx \otimes dx \dots \dots \dots (2.11) \end{aligned}$$

同様に各配置での塑性ひずみは次式のような関係として表現できる．

$$\begin{aligned} E_{(I)}^p \cdot dx_{(I)} \otimes dx_{(I)} &= E_{(M)}^p \cdot dx_{(M)} \otimes dx_{(M)} = E_{(m)}^p \cdot dx_{(m)} \otimes dx_{(m)} \\ &= E^p \cdot dx \otimes dx \dots \dots \dots (2.12) \end{aligned}$$

式 (2.11) に式 (2.3)，式 (2.4) および式 (2.5) を代入すれば，弾性ひずみの変換則が次式のように得られる．

$$E^e = R^* E_{(m)}^e R^{*T} = R^* (\hat{U}^{e-T} E_{(M)}^e \hat{U}^{e-1}) R^{*T} \dots \dots \dots (2.13)$$

同様に，式(2.12)に式(2.3)，式(2.4)および式(2.5)を代入すれば，塑性ひずみの変換則が次式のように得られる．

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^p &= \mathbf{R}^* \mathbf{E}_{(m)}^p \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* (\hat{\mathbf{U}}^{e-T} \mathbf{E}_{(M)}^p \hat{\mathbf{U}}^{e-1}) \mathbf{R}^{*T} \\ &= \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^{e-T} (\mathbf{F}^{p-T} \mathbf{E}_{(I)}^p \mathbf{F}^{p-1}) \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (2.14) \end{aligned}$$

式(2.13)および式(2.14)から，ひずみの変換則が次式のように得られる．

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \mathbf{R}^* \mathbf{E}_{(m)} \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* (\hat{\mathbf{U}}^{e-T} \mathbf{E}_{(M)} \hat{\mathbf{U}}^{e-1}) \mathbf{R}^{*T} \\ &= \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^{e-T} (\mathbf{F}^{p-T} \mathbf{E}_{(I)} \mathbf{F}^{p-1}) \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (2.15) \end{aligned}$$

2.3 ひずみ速度の弾・塑性分解

2.3.1 金属材料における仮定

金属材料に対して通常通り，弾性変形は微小であり塑性変形は有限であると仮定する．すなわち，弾性ストレッチ $\hat{\mathbf{U}}^e$ が2次に関する項においては $\hat{\mathbf{U}}^e = \mathbf{I}$ とみなす．一方， \mathbf{R}^* には弾性回転が含まれているが，剛体回転と区別することができないので， \mathbf{R}^* に関しては微小弾性変形の仮定は適用しない．微小弾性変形の仮定を導入すると，第1中間配置におけるひずみ $\mathbf{E}_{(M)}$ および第2中間配置におけるひずみ $\mathbf{E}_{(m)}$ は式(2.15)から次式のように近似できる．

$$\mathbf{E}_{(m)} = \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \mathbf{E}_{(M)} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \approx \mathbf{E}_{(M)} \dots\dots\dots (2.16)$$

2.3.2 各配置における弾・塑性のひずみ速度の導出

微小弾性変形の仮定を考慮して式(2.13)を書き直すと，弾性ひずみの変換則は

$$\mathbf{E}^e = \mathbf{R}^* \mathbf{E}_{(m)}^e \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* \mathbf{E}_{(M)}^e \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (2.17)$$

となる．弾性変形の参照配置は第1中間配置 $\beta_{(M)}$ であるため， $\mathbf{E}_{(M)}^e$ の物質時間導関数を考えれば次式のようなになる．

$$\dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e = \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e = (\mathbf{R}^{*T} \dot{\mathbf{E}}^e \mathbf{R}^*) \dots\dots\dots (2.18)$$

Mandel-Kratochvil 速度を用いれば，弾性ひずみ速度の変換則は次式のように得られる．

$$\overset{\nabla}{\mathbf{E}}^e = \mathbf{R}^* \overset{\nabla}{\mathbf{E}}_{(m)}^e \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* \overset{\nabla}{\mathbf{E}}_{(M)}^e \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (2.19)$$

ここで， $\overset{\nabla}{\mathbf{E}}^e$ は

$$\overset{\nabla}{\mathbf{E}}^e \equiv \dot{\mathbf{E}} - \mathbf{W}^* \mathbf{E} + \mathbf{E} \mathbf{W}^* \dots\dots\dots (2.20)$$

で与えられる．ただし， $\mathbf{W}^* \equiv \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T}$ である．同様に微小弾性変形の仮定を考慮して式(2.14)を書き直すと，塑性ひずみの変換則は次式のように得られる．

$$\mathbf{E}^p = \mathbf{R}^* \mathbf{E}_{(m)}^p \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* \mathbf{E}_{(M)}^p \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* (\mathbf{F}^{p-T} \mathbf{E}_{(I)}^p \mathbf{F}^{p-1}) \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (2.21)$$

塑性変形の参照配置が初期配置 $\beta_{(I)}$ であることを考慮し, $E_{(I)}^p$ の物質時間微分は

$$\dot{E}_{(I)}^p = (F^{pT} E_{(M)}^p F^p)^\dot{=} = (F^{pT} E_{(m)}^p F^p)^\dot{=} = (F^{pT} R^{*T} E^p R^* F^p)^\dot{=} \dots \dots \dots (2.22)$$

となり, $\dot{E}_{(I)}^p = (F^{pT} E_{(M)}^p F^p)^\dot{=}$ を計算すれば

$$\begin{aligned} \dot{E}_{(I)}^p &= \dot{F}^{pT} E_{(M)}^p F^p + F^{pT} \dot{E}_{(M)}^p F^p + F^{pT} E_{(M)}^p \dot{F}^p \\ &= F^{pT} (\dot{E}_{(M)}^p + L_{(M)}^{pT} E_{(M)}^p + E_{(M)}^p L_{(M)}^p) F^p \dots \dots \dots (2.23) \end{aligned}$$

となる. 式 (2.22) における他の関係も同様に計算すれば

$$\dot{E}_{(I)}^p = \bar{F}^T (\dot{E}_{(m)}^p + \bar{L}_{(m)}^T E_{(m)}^p + E_{(m)}^p \bar{L}_{(m)}) \bar{F} \dots \dots \dots (2.24)$$

$$\dot{E}_{(I)}^p = F^T (\dot{E}^p + L^T E^p + E^p L) F \dots \dots \dots (2.25)$$

が得られる. ただし, $L_{(M)}^p \equiv \dot{F}^p F^{p-1}$, $\bar{L}_{(m)} \equiv \dot{\bar{F}} \bar{F}^{-1}$ および $L \equiv \dot{F} F^{-1}$ は各配置における速度こう配である. 式 (2.23), 式 (2.24) および式 (2.25) から塑性ひずみ速度の変換則が次式のように得られる.

$$\hat{E}^p = R^* \hat{E}_{(m)}^p R^{*T} = R^* \hat{E}_{(M)}^p R^{*T} = R^* (F^{p-T} \dot{E}_{(I)}^p F^{-1}) R^{*T} \dots \dots \dots (2.26)$$

ここで, \hat{A} は初期配置 $\beta_{(I)}$ を参照したときの Cotter-Rivlin 速度であり, それぞれ次式のように定義できる [補足 B.3 参照].

$$\hat{E}_{(M)}^p \equiv \dot{E}_{(M)}^p + L_{(M)}^{pT} E_{(M)}^p + E_{(M)}^p L_{(M)}^p \dots \dots \dots (2.27)$$

$$\hat{E}_{(m)}^p \equiv \dot{E}_{(m)}^p + \bar{L}_{(m)}^T E_{(m)}^p + E_{(m)}^p \bar{L}_{(m)} \dots \dots \dots (2.28)$$

$$\hat{E}^p \equiv \dot{E}^p + L^T E^p + E^p L \dots \dots \dots (2.29)$$

2.4 変形速度の弾・塑性分解

2.4.1 速度こう配の弾・塑性分解

現配置 $\beta_{(e)}$ および初期配置 $\beta_{(I)}$ における速度こう配は次式のように表現される.

$$L = \dot{F} F^{-1}, \quad L_{(I)} = F^{-1} L F = F^{-1} \dot{F} \dots \dots \dots (2.30)$$

また, 速度こう配の変換則は式 (2.30) から

$$L = R^* L_{(m)} R^{*T} = R^* (\hat{U}^e L_{(M)} \hat{U}^{e-1}) R^{*T} = R^* \hat{U}^e (F^p L_{(I)} F^{p-1}) \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dots \dots \dots (2.31)$$

と得られる⁽⁶⁶⁾. ここで, 式 (2.1) を式 (2.30)₁ に代入すると次式のようになる.

$$\begin{aligned} L &= \dot{F} F^{-1} \\ &= (R^* \hat{U}^e F^p) (R^* \hat{U}^e F^p)^{-1} \\ &= \dot{R}^* R^{*T} + R^* \dot{U}^e \hat{U}^{e-1} R^{*T} + R^* \hat{U}^e \dot{F}^p F^{p-1} \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dots \dots \dots (2.32) \end{aligned}$$

式 (2.32) から，現配置における速度こう配の弾性および塑性部分は次式のように定義される．

$$\mathbf{L}^e \equiv \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T} + \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (2.33)$$

$$\mathbf{L}^p \equiv \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (2.34)$$

2.4.2 各配置における変形速度

式 (2.33) を用いれば，現配置 $\beta_{(c)}$ における変形速度の弾性部分 \mathbf{D}^e は次式のように与えられる．

$$\mathbf{D}^e = (\mathbf{L}^e)_S = [\dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T} + \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T}]_S = \mathbf{R}^* (\hat{\mathbf{U}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1})_S \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (2.35)$$

また，式 (2.31) および式 (2.33) から，第2中間配置 $\beta_{(m)}$ における変形速度の弾性部分 $\mathbf{D}_{(m)}^e$ は

$$\mathbf{D}_{(m)}^e = (\mathbf{L}_{(m)}^e)_S = (\hat{\mathbf{U}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1})_S \dots\dots\dots (2.36)$$

となる．一方，式 (2.34) および微小弾性変形の仮定を用いて現配置 $\beta_{(c)}$ における変形速度の塑性部分 \mathbf{D}^p は

$$\mathbf{D}^p = (\mathbf{L}^p)_S = [\mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T}]_S = \mathbf{R}^* (\dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1})_S \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (2.37)$$

と書ける．式 (2.31) および式 (2.34) から，第1中間配置 $\beta_{(M)}$ および第2中間配置 $\beta_{(m)}$ における変形速度の塑性部分 $\mathbf{D}_{(M)}^p$ および $\mathbf{D}_{(m)}^p$ は次式のように表される．

$$\mathbf{D}_{(m)}^p = (\mathbf{L}_{(m)}^p)_S = (\dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1})_S = (\mathbf{L}_{(M)}^p)_S = \mathbf{D}_{(M)}^p \dots\dots\dots (2.38)$$

2.4.3 ひずみ速度と変形速度

ひずみ速度と変形速度の弾性部分における関係を求めるため，まず式 (2.7) の両辺を物質時間微分すると次式ようになる．

$$\dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e = \frac{1}{2} (\dot{\mathbf{U}}^{eT} \hat{\mathbf{U}}^e + \hat{\mathbf{U}}^{eT} \dot{\mathbf{U}}^e) \dots\dots\dots (2.39)$$

一方，式 (2.36) は次式のように分解できる．

$$\mathbf{D}_{(m)}^e = (\hat{\mathbf{U}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1})_S = \frac{1}{2} [(\hat{\mathbf{U}}^{e-T} \dot{\mathbf{U}}^{eT}) + (\dot{\mathbf{U}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1})] \dots\dots\dots (2.40)$$

微小弾性変形の仮定を用いれば，式 (2.39) および式 (2.40) から次式の関係が得られる．

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{(m)}^e &= \frac{1}{2} [(\hat{\mathbf{U}}^{e-T} \dot{\mathbf{U}}^{eT} \hat{\mathbf{U}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1}) + (\hat{\mathbf{U}}^{e-T} \hat{\mathbf{U}}^{eT} \dot{\mathbf{U}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1})] \\ &= \frac{1}{2} \hat{\mathbf{U}}^{e-T} (\dot{\mathbf{U}}^{eT} \hat{\mathbf{U}}^e + \hat{\mathbf{U}}^{eT} \dot{\mathbf{U}}^e) \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \\ &= \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \\ &= \dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e \dots\dots\dots (2.41) \end{aligned}$$

また，ひずみ速度と変形速度の塑性部分の関係を求めるために，まず式 (2.8) の両辺を物質時間微分すると次式が得られる．

$$\dot{\mathbf{E}}_{(I)}^p \equiv \frac{1}{2} (\dot{\mathbf{F}}^{pT} \mathbf{F}^p + \mathbf{F}^{pT} \dot{\mathbf{F}}^p) \dots\dots\dots (2.42)$$

一方，式 (2.34) は次式のように分解できる．

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{(M)}^p &= (\dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1})_S \\ &= \frac{1}{2} [(\mathbf{F}^{p-T} \dot{\mathbf{F}}^{pT}) + (\dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1})] \dots \dots \dots (2.43) \end{aligned}$$

式 (2.42) および式 (2.43) から次式の関係が得られる．

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{(M)}^p &= \frac{1}{2} [(\mathbf{F}^{p-T} \dot{\mathbf{F}}^{pT} \mathbf{F}^p \mathbf{F}^{p-1}) + (\mathbf{F}^{p-T} \mathbf{F}^{pT} \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1})] \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{F}^{p-T} (\dot{\mathbf{F}}^{pT} \mathbf{F}^p + \mathbf{F}^{pT} \dot{\mathbf{F}}^p) \mathbf{F}^{p-1} \\ &= \mathbf{F}^{p-T} \dot{\mathbf{E}}_{(I)}^p \mathbf{F}^{p-1} \dots \dots \dots (2.44) \end{aligned}$$

式 (2.35)，式 (2.36) および式 (2.41) から各配置における弾性変形速度と弾性ひずみ速度の関係が

$$\mathbf{D}^e = \mathbf{R}^* \mathbf{D}_{(m)}^e \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* \dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e \mathbf{R}^{*T} \dots \dots \dots (2.45)$$

と得られ，式 (2.37)，式 (2.38) および式 (2.44) から各配置における塑性変形速度と塑性ひずみ速度の関係が

$$\mathbf{D}^p = \mathbf{R}^* \mathbf{D}_{(m)}^p \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* \mathbf{D}_{(M)}^p \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* \mathbf{F}^{p-T} \dot{\mathbf{E}}_{(I)}^p \mathbf{F}^{p-1} \mathbf{R}^{*T} \dots \dots \dots (2.46)$$

と得られる．式 (2.19) と式 (2.45) および式 (2.26) と式 (2.46) を比べると，各配置における弾性および塑性ひずみと変形速度の関係はそれぞれ次式ようになる．

$$\mathbf{D}^e = \overset{\nabla}{\mathbf{E}}^e, \quad \mathbf{D}_{(m)}^e = \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e \dots \dots \dots (2.47)$$

$$\mathbf{D}^p = \overset{\Delta}{\mathbf{E}}^p, \quad \mathbf{D}_{(m)}^p = \overset{\Delta}{\dot{\mathbf{E}}}_{(m)}^p, \quad \mathbf{D}_{(M)}^p = \overset{\Delta}{\dot{\mathbf{E}}}_{(M)}^p \dots \dots \dots (2.48)$$

2.4.4 ひずみ尺度と変形尺度

式 (2.47) および式 (2.48) を用いて第 2 中間配置 $\beta_{(m)}$ での変形速度は次式のように表現できる．

$$\mathbf{D}_{(m)} = \mathbf{D}_{(m)}^e + \mathbf{D}_{(m)}^p = \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e + \overset{\Delta}{\dot{\mathbf{E}}}_{(m)}^p \dots \dots \dots (2.49)$$

式 (2.49) を物質時間積分すれば

$$\left. \begin{aligned} \int_t \mathbf{D}_{(m)} dt &= \int_t \mathbf{D}_{(m)}^e dt + \int_t \mathbf{D}_{(m)}^p dt = \mathbf{E}_{(m)}^e + \overline{\mathbf{E}}_{(m)}^p \\ \text{or} \\ \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e + \overset{\Delta}{\dot{\mathbf{E}}}_{(m)}^p &= \mathbf{D}_{(m)}^e + \mathbf{D}_{(m)}^p \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (2.50)$$

となる．すなわち，式 (2.50) から

$$\overline{\mathbf{E}}_{(m)}^p \neq \mathbf{E}_{(m)}^p \dots \dots \dots (2.51)$$

であることがわかる．式 (2.51) における塑性ひずみ $\overline{\mathbf{E}}_{(m)}^p$ は熱力学的状態変数となり得ない回復不可能な経路に依存する塑性変形尺度と定義できる．それに対し，弾性ひずみ $\mathbf{E}_{(m)}^e$ は熱力学的状態変数となる回復可能な弾性ひずみ尺度であると定義できる．以上のことから，現配置から弾剛体回転を取り除いた第 2 中間配置 $\beta_{(m)}$ は客観性を有するので，第 2 中間配置を構成式の参照配置に選ぶのが妥当であるといえる．

2.5 塑性変形速度，塑性スピンの導出

2.5.1 すべりテンソルの定義

図 2.1 に示すような金属結晶の活動すべり系 α に対して，すべり方向の結晶基底ベクトルを $s^{(\alpha)}$ ，すべり面の法線方向の結晶基底ベクトルを $m^{(\alpha)}$ とおく．ここで， $()^{(\alpha)}$ はすべり系 α に関する量を表す．初期配置 $\beta_{(I)}$ における速度こう配の塑性部分 L^p は，全すべり系のすべり速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ の総和をとり，次式で表される．

$$L_{(I)}^p = F^{p-1} \dot{F}^p \equiv \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} s_{(I)}^{(\alpha)} \otimes m_{(I)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.52)$$

ここで， $\gamma^{(\alpha)}$ は活動すべり系 α のすべりである．同様に，各配置における速度こう配の塑性部分は，すべり速度および結晶基底ベクトルを用いて

$$\left. \begin{aligned} L^p &= \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)}, & L_{(m)}^p &= \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} s_{(m)}^{(\alpha)} \otimes m_{(m)}^{(\alpha)}, \\ L_{(M)}^p &= \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes m_{(M)}^{(\alpha)} \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (2.53)$$

と表される．微小弾性変形の仮定のもとで，式 (2.31)，式 (2.52) および式 (2.53) から，結晶基底の変換則が次式のように得られる．

$$\begin{aligned} s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)} &= R^* (s_{(m)}^{(\alpha)} \otimes m_{(m)}^{(\alpha)}) R^{*T} = R^* (s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes m_{(M)}^{(\alpha)}) R^{*T} \\ &= R^* F^p (s_{(I)}^{(\alpha)} \otimes m_{(I)}^{(\alpha)}) F^{p-1} R^{*T} \dots \dots \dots (2.54) \end{aligned}$$

一方，初期配置 $\beta_{(I)}$ におけるすべりテンソル $\gamma_{(I)}$ は $L_{(I)}^p$ の時間積分より

$$\gamma_{(I)} \equiv \int_t L_{(I)}^p dt = \sum_{\alpha} \gamma^{(\alpha)} s_{(I)}^{(\alpha)} \otimes m_{(I)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.55)$$

と定義される．ただし， $s_{(I)}^{(\alpha)} = m_{(I)}^{(\alpha)} = \mathbf{0}$ を考慮してある．さらに，式 (2.54) の変換則を適用することにより，各配置におけるすべりテンソルは次のようになる．

$$\left. \begin{aligned} \gamma &= \sum_{\alpha} \gamma^{(\alpha)} s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)}, & \gamma_{(m)} &= \sum_{\alpha} \gamma^{(\alpha)} s_{(m)}^{(\alpha)} \otimes m_{(m)}^{(\alpha)}, \\ \gamma_{(M)} &= \sum_{\alpha} \gamma^{(\alpha)} s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes m_{(M)}^{(\alpha)} \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (2.56)$$

2.5.2 塑性変形速度，塑性スピン

速度こう配 L を対称部分と反対称部分に分ければ

$$L = D + W \dots \dots \dots (2.57)$$

となる．ここで， $D = L_S$ は変形速度テンソルおよび $W = L_A$ はスピンテンソルである．変形速度こう配テンソルの弾性部分 L^e は対称部分のみであり，剛体の変形速度こう配テンソル L^* は反対称部分のみであるため， D および W は格子の伸び，格子の回転ならびに結晶のすべりに起因する成分を用いて次式のように分解することができる．

$$D = D^e + D^p \dots \dots \dots (2.58)$$

$$W = W^* + W^p \dots\dots\dots (2.59)$$

ここで、 D^e および D^p はそれぞれ変形速度の弾性部分および塑性部分であり、 W^p および W^* はそれぞれ塑性スピンおよび下部構造スピン⁽⁶²⁾⁽⁶³⁾ である。式 (2.58) および式 (2.59) と式 (2.32) を比較することによって

$$L^p = D^p + W^p = R^* \hat{U}^e \dot{F}^p F^{p-1} \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dots\dots\dots (2.60)$$

$$L^e = D^e = R^* \dot{U}^e \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dots\dots\dots (2.61)$$

$$W^* = \dot{R}^* R^{*T} \dots\dots\dots (2.62)$$

が得られる。ここで、 L^p を第 1 中間配置に戻し、式 (2.53) を考慮すれば以下の関係が得られる。

$$L_{(M)}^p = D_{(M)}^p + W_{(M)}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes m_{(M)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.63)$$

式 (2.60) および式 (2.63) から、塑性変形こう配 F^p の発展方程式が

$$\dot{F}^p F^{p-1} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes m_{(M)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.64)$$

のように得られる。次に、式 (2.63) の右辺を対称部分と反対称部分に分解することによって

$$D_{(M)}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} P_{S(M)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.65)$$

$$W_{(M)}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} P_{A(M)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.66)$$

が得られる。ここで、 $P_{(M)}^{(\alpha)} = s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes m_{(M)}^{(\alpha)}$ であり、 $P_{S(M)}^{(\alpha)}$ および $P_{A(M)}^{(\alpha)}$ はそれぞれ次式で表される。

$$P_{S(M)}^{(\alpha)} = \frac{1}{2} (s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes m_{(M)}^{(\alpha)} + m_{(M)}^{(\alpha)} \otimes s_{(M)}^{(\alpha)}) \dots\dots\dots (2.67)$$

$$P_{A(M)}^{(\alpha)} = \frac{1}{2} (s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes m_{(M)}^{(\alpha)} - m_{(M)}^{(\alpha)} \otimes s_{(M)}^{(\alpha)}) \dots\dots\dots (2.68)$$

なお、 $P_{S(M)}^{(\alpha)}$ は Schmid テンソルである。

2.6 転位密度の幾何学的表現

従来の転位-結晶塑性論に関する研究では転位密度の表現として SS 転位密度のみ、GN 転位密度のみ、あるいは SS 転位密度および GN 転位密度の両方を考慮しているものが多い。本節では転位密度の定義の選択に関する比較および検討を行い、特に、結晶塑性論に適した転位場の微分幾何学的表現について言及する。

2.6.1 転位密度の定義の選択

結晶欠陥は短範囲応力場および長範囲応力場を形成する結晶欠陥の 2 種類に大別することができる。図 2.2 のように、林立転位のような潜在的な障害物の影響などによって Burgers 回路内に堆積している正負の転位対 (ρ_S) は短範囲応力場を形成する結晶欠陥に相当し、SS 転位で表現される。通常、SS 転位密度は発展式を用い積分計算を行うことにより得られるため、非状態量となる。一方、林立転位などの障害物に塞き止められることなく結晶内を運動し続け、結晶粒界など転位が通過することのできない領域に堆積する

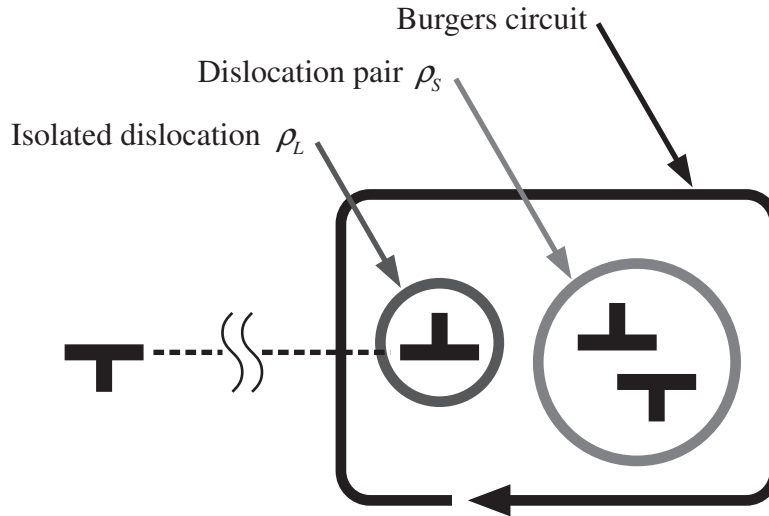


Fig. 2.2 Definition of dislocation density

転位 (ρ_L) は、対を成す異符号の転位が Burgers 回路外の遠方に存在するため長範囲応力場を形成する結晶欠陥に相当する．このような孤立した転位を表現するには、すべりのこう配で表される GN 転位が有用である．しかしながら、GN 転位では、その正負の転位の打ち消し合いにより、短範囲応力場を形成する結晶欠陥の情報を表現することができない．ここで、GN 転位密度と SS 転位密度は分解能の違いによって互いに入れ替わる量であることに注意されたい．すなわち、Burgers 回路を転位対が含まれないほど小さくすれば全ての転位は独立に Burgers 回路内に含まれ GN 転位密度で表現することができる．

Burgers 回路内の全ての結晶欠陥を表現するためには SS 転位密度と GN 転位密度を同時に考慮する必要があるが、このことは結晶欠陥の情報に異なる種類の量、すなわち幾何学的状態量と統計的非状態量が同時に考慮されることになる．いま、任意の物質点 x_0 の近傍 $x_0 + \Delta x$ における転位密度 $\rho(x_0 + \Delta x)$ は、 x_0 における転位密度 $\rho(x_0)$ のすべりこう配による高次展開として次式のように書ける．

$$\rho(x_0 + \Delta x) = \rho(x_0) + \zeta_1 \frac{\partial \gamma}{\partial x_{i1}} + \zeta_2 \frac{\partial^2 \gamma}{\partial x_{i1} \partial x_{i2}} + \cdots + \zeta_n \frac{\partial^n \gamma}{\partial x_{i1} \partial x_{i2} \cdots \partial x_{in}} + \cdots \quad (2.69)$$

GN 転位密度はすべりの 1 次こう配であるので、式 (2.69) 右辺第 2 項に相当する．2 次以上の高次こう配である右辺第 3 項以降は GN 転位密度では表現できないダイポールなどの転位対 (2 次こう配) やトライポールなどの多重極 (3 次以上) に相当する．詳細は後述するが、結晶欠陥場の微分幾何学によると、GN 転位は非 Riemann 空間⁽⁴⁶⁾⁽⁴⁷⁾⁽⁴⁸⁾⁽⁴⁹⁾のねじれに相当し、このねじれのみでは同空間の曲率に相当するその他の結晶欠陥 (ダイポールや空孔など) を表現することはできない．したがって、非 Riemann 空間の曲率テンソルを縮約した不適合度テンソルを用いることにより、SS 転位密度の代わりに短範囲応力場を形成する結晶欠陥の情報を幾何学量として表現することが可能となる．そこで、次節からは、結晶の塑性変形の素過程であるすべり系 α のすべり $\gamma^{(\alpha)}$ に基づいて、結晶塑性論に適合する形で GN 転位密度テンソルおよび GN 不適合度テンソルを新たに定義する．なお、不適合度は式 (2.69) におけるすべりの 2 次こう配に相当するが、多重極などに相当する 2 次こう配以降は存在確率および影響が少ないとみなし本研究では考慮しない．不適合度に関する詳細は次項以降で述べる．

2.6.2 従来の転位密度テンソルにおける問題点

Kröner⁽⁵⁰⁾ や Teodosiu⁽³⁰⁾ は転位運動に起因する塑性変形と転位密度を関連付け、転位密度テンソルを塑性変位こう配テンソルあるいは弾性変形こう配テンソルを用いて表現している。しかしながら、これらの転位密度テンソルはいずれも金属の塑性変形を転位運動による結晶格子の不連続変形あるいは転位群が作る結晶格子の弾性場と結びつけ論じているが、結晶塑性論などを用いてマクロスコピック (メゾスコピック) な解析を行おうとすると、不完全結晶を完全結晶へと写像したり、転位が織り成す弾性場を計算するのは容易ではない。さらには、すべり系の概念は導入されておらず、転位-結晶塑性論の加工硬化則へ転位の情報を用いるのは困難である。Busso ら⁽²⁵⁾ の定義した転位密度テンソルは Kröner や Teodosiu のものと同様ではあるが、転位密度テンソルを速度形とすることによってすべり系の情報を取り込んでいる。なお、Kröner, Teodosiu および Busso らが定義した転位密度テンソルを補足 B.4 に紹介しておく。そこで本研究では、結晶塑性論における塑性変形の素過程であるすべりを用いて転位-結晶塑性論の表現と整合した転位密度テンソルを定義する。

2.6.3 不適合度の必要性

転位や原子空孔といった材料における欠陥は結晶欠陥場の幾何学的描像⁽⁶⁷⁾⁽⁶⁸⁾ によって表現できる。この結晶欠陥は小域的結晶欠陥と大域的結晶欠陥の2つに分類される。小域的結晶欠陥とは転位等の線欠陥を表し、大域的結晶欠陥とはダイポールや原子空孔といったその他の欠陥を表す。図 2.3 の不完全結晶において、1つの転位を囲むように小域的に Burgers 回路 (a) を考え、それを完全結晶に写像した場合、この転位は Burgers ベクトル b を用いて表現できる。しかしながら、図 2.3 にあるようにダイポールの状態で存在する転位を囲むように大域的に Burgers 回路 (b) を考え、それを完全結晶に写像した場合、それぞれの Burgers ベクトル b は打ち消しあい、欠陥は消失することになる。このため、このような大域的な欠陥は Burgers ベクトル b を用いて表現できない。そこで、 \check{b} というベクトルを考え、このベクトル \check{b} の向きの変化をもってこのような欠陥を表現する。このように Burgers ベクトル b により表現される欠陥を小域的結晶欠陥、Burgers ベクトル b では表現できないが \check{b} というベクトルにより表現される欠陥を大域的結晶欠陥という。

また、小域的結晶欠陥および大域的結晶欠陥は、非 Riemann 幾何学におけるねじれテンソル \underline{S}^{ijk} および曲率テンソルに \underline{R}^{ijkl} を用いて表現される。なお、 $(\)$ を有する量は幾何学空間における量を表しており、材料空間における量とは異なる。まず、幾何学空間はねじれのみを持つ遠隔平行性空間、曲率のみを持つ Riemann 空間およびねじれおよび曲率を持つ非 Riemann 空間の3つに分類される [図 2.4 参照]。図 2.4 はそれぞれの空間において、物体の切り口にあるベクトルがどのように動くのかを示したものである。遠隔平行性空間ではねじれのみが存在するためベクトルは平行にねじれ、Riemann 空間では曲率のみが存在するため切り口は扇形に、つまりベクトルは回転する。そして非 Riemann 空間ではねじれおよび曲率が存在するため、これら2つが合成された形になる。この平行にずれる切り口のベクトルが Burgers ベクトル b に、回転する切り口のベクトルがベクトル \check{b} に対応しているため、小域的結晶欠陥および大域的結晶欠陥は、ねじれテンソル \underline{S}^{ijk} および曲率テンソル \underline{R}^{ijkl} によって表現される。さらに、このねじれおよび曲率を縮約すると次式のようになる。

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{ij} &\equiv \frac{1}{2} \epsilon_{ikl} \underline{S}^{klj} \\ \eta_{ij} &\equiv \frac{1}{4g} \epsilon_{ikl} \epsilon^{jmn} \underline{R}^{klmn} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (2.70)$$

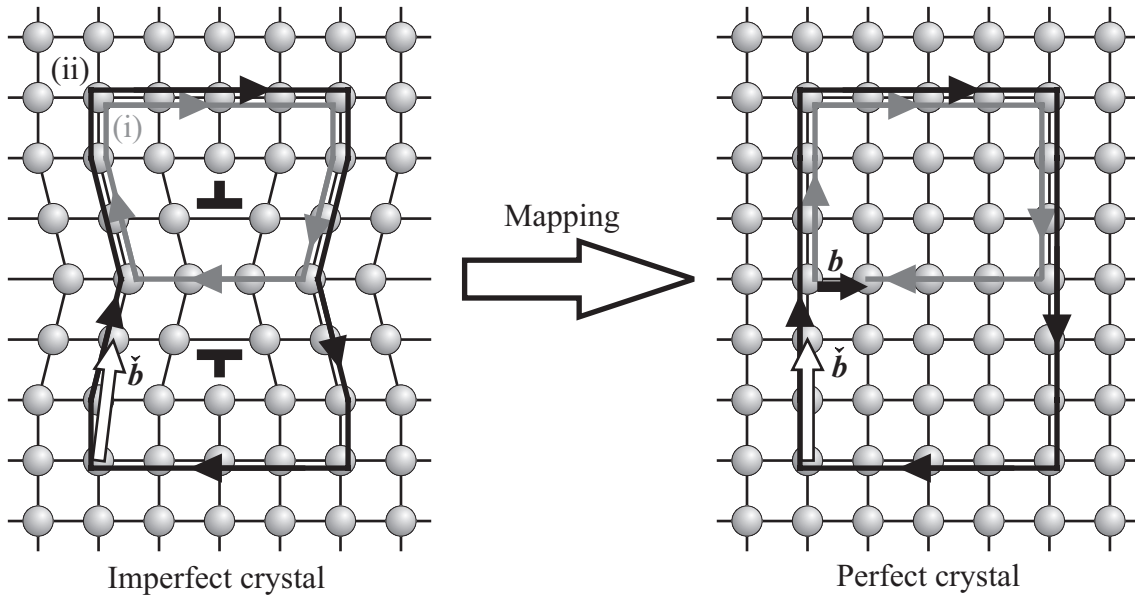


Fig. 2.3 Crystal defects

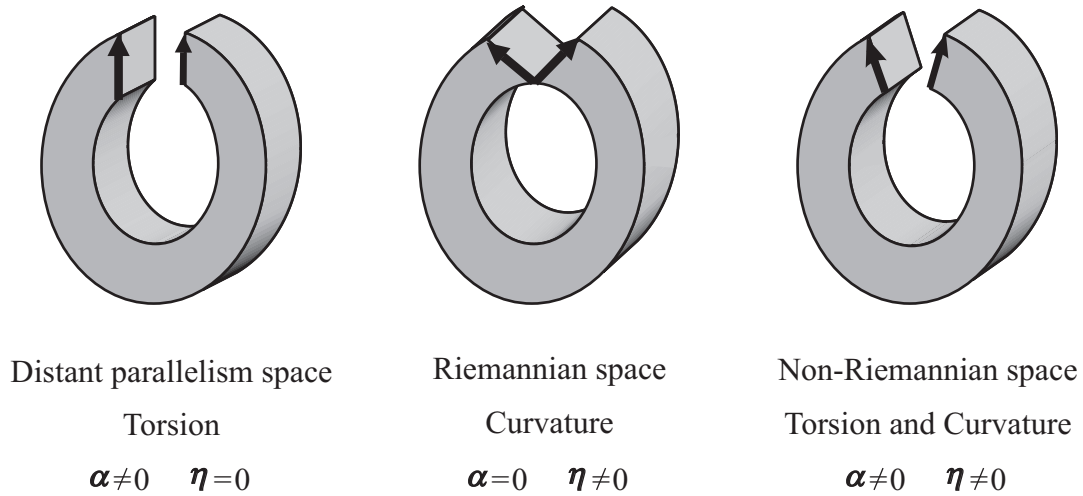


Fig. 2.4 Geometrical space

式 (2.70) における α_{ij} および η_{ij} は転位密度および不適合度である。また、 ϵ_{ijk} は Levi-Civita の記号および g は計量テンソルの行列式である。以上のことから、転位やそれ以外の結晶欠陥 (ダイポール, 原子空孔, 転傾など) の情報を取り込むには転位密度および不適合度が必要であることがわかる。

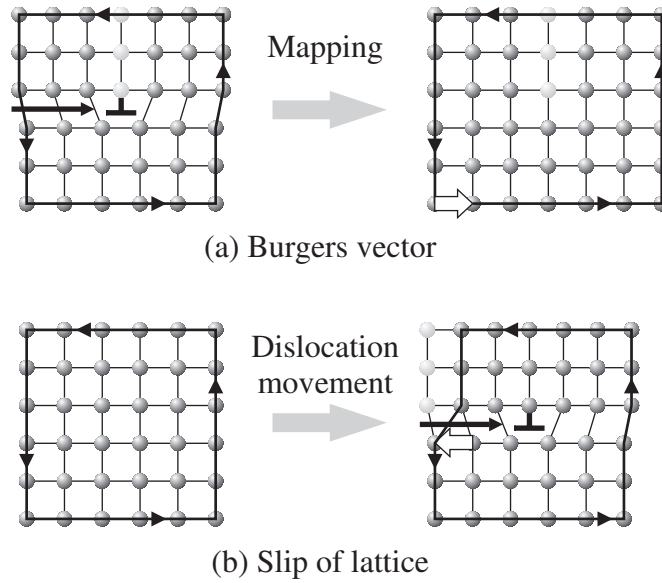


Fig. 2.5 Crystal structure around dislocation

2.6.4 GN 転位密度テンソル

任意の Burgers 回路内における正味の Burgers ベクトルは，一般的に転位密度テンソル α_K を用いて次式のように表される．

$$\mathbf{B} = \int_S \alpha_K n dS \dots\dots\dots (2.71)$$

ここで， S ， dS および \mathbf{n} はそれぞれ Burgers 回路で囲まれた面，Burgers 回路内の微小面積要素および dS の単位法線ベクトルである．しかしながら，式 (2.71) における α_K の次元は単位面積当たりの正味の Burgers ベクトルであるため，通常の転位密度の定義である単位体積当たりの転位線の長さという次元を有するよう，初期配置において式 (2.71) を次式のように書き改める．

$$\mathbf{B}_{(I)}^{(\alpha)} = \int_{S_{(I)}} \tilde{b} \alpha_{(I)}^{(\alpha)} dS_{(I)} \dots\dots\dots (2.72)$$

ここで， \tilde{b} は Burgers ベクトルの大きさ， $dS_{(I)}$ は $n_{(I)} dS_{(I)}$ であり，式 (2.72) はすべり系 α の転位の影響による正味の Burgers ベクトルを示している．式 (2.72) からわかるように， $\alpha_{(I)}^{(\alpha)} n_{(I)}$ は単位面積当たりの転位線の本数と Burgers ベクトルの方向を表している．一方，正味の Burgers ベクトルは微分量 $d\mathbf{B}_{(I)}^{(\alpha)}$ を用いて

$$\mathbf{B}_{(I)}^{(\alpha)} = - \oint_{L_{(I)}} d\mathbf{B}_{(I)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.73)$$

と表現できる．ここで， $d\mathbf{B}_{(I)}^{(\alpha)}$ は転位が Burgers 回路を横切ったときに生じる微小な結晶格子のずれであり，式 (2.73) に負号がついているのは，右ねじの法則に従うと Burgers ベクトルと結晶格子のずれの方向が逆になるためである (図 2.5 参照)．また， $d\mathbf{B}_{(I)}^{(\alpha)}$ と微小線素 dX の関係は図 2.6 に示すように，結晶のすべり方向 $s_{(I)}^{(\alpha)}$ ，すべり面の法線方向 $\mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)}$ およびすべり $\gamma^{(\alpha)}$ を用いて次式のように表される．

$$d\mathbf{B}_{(I)}^{(\alpha)} = ds_{(I)}^{(\alpha)} = \gamma^{(\alpha)} (dX \cdot \mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)}) s_{(I)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.74)$$

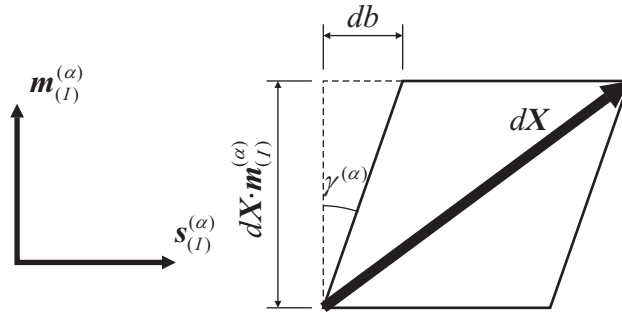


Fig. 2.6 Net Burgers vector due to slip

式 (2.74) を式 (2.73) に代入することによって,

$$\mathbf{B}_{(I)}^{(\alpha)} = - \oint_{L_{(I)}} \gamma^{(\alpha)} (s_{(I)}^{(\alpha)} \otimes m_{(I)}^{(\alpha)}) dX \dots\dots\dots (2.75)$$

が得られる. 式 (2.72) および式 (2.75) からすべり系 α の転位密度テンソルが Stokes の回転定理を用いることによって

$$\tilde{b}\alpha_{(I)}^{(\alpha)} = -\text{curl}_{(I)}(\gamma^{(\alpha)} s_{(I)}^{(\alpha)} \otimes m_{(I)}^{(\alpha)}) \dots\dots\dots (2.76)$$

となる. したがって, 全すべり系の転位密度の総和である転位密度テンソル $\alpha_{(I)}$ が

$$\alpha_{(I)} = \sum_{\alpha} \alpha_{(I)}^{(\alpha)} = -\frac{1}{\tilde{b}} \text{curl}_{(I)} \gamma_{(I)} \dots\dots\dots (2.77)$$

と得られる. ここで, 式 (2.77) と Kröner⁽⁵⁰⁾ が塑性変位こう配 β を用いて定義した転位密度テンソル α_K :

$$\alpha_K = -\text{curl} \beta \dots\dots\dots (2.78)$$

を比較すると, 次元が異なるため式 (2.77) は \tilde{b} で除されているが, 結晶の塑性変形の指標となる $\gamma_{(I)}$ 回転を用いて転位密度を表している点で同様の表現であり, 塑性変位こう配 β にすべりテンソル $\gamma_{(I)}$ が対応していることがわかる. また, 初期配置において $s_{(I)}^{(\alpha)}$ および $m_{(I)}^{(\alpha)}$ は結晶粒内では一様であるから, 式 (2.77) は

$$\alpha_{(I)} = \frac{1}{\tilde{b}} \sum_{\alpha} s_{(I)}^{(\alpha)} \otimes m_{(I)}^{(\alpha)} \times \nabla_{(I)} \gamma^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.79)$$

と書ける. ここで, $s_{(I)}^{(\alpha)} \otimes m_{(I)}^{(\alpha)}$ の変換式 (2.54) を式 (2.79) に適応することにより, 各配置における α が

$$\alpha = \frac{1}{\tilde{b}} \sum_{\alpha} s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)} \times \nabla \gamma^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.80)$$

$$\alpha_{(m)} = \frac{1}{\tilde{b}} \sum_{\alpha} s_{(m)}^{(\alpha)} \otimes m_{(m)}^{(\alpha)} \times \nabla_{(m)} \gamma^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.81)$$

$$\alpha_{(M)} = \frac{1}{\tilde{b}} \sum_{\alpha} s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes m_{(M)}^{(\alpha)} \times \nabla_{(M)} \gamma^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.82)$$

のように得られる. また, 式 (2.80) をすべり面内の結晶基底 $s^{(\alpha)}$ および縦法線ベクトル $t^{(\alpha)}$ のみで表示するために, $m^{(\alpha)} = t^{(\alpha)} \times s^{(\alpha)}$ を式 (2.80) に代入すると

$$\alpha = \frac{1}{\tilde{b}} \sum_{\alpha} s^{(\alpha)} \otimes (t^{(\alpha)} \times s^{(\alpha)}) \times \nabla \gamma^{(\alpha)}$$

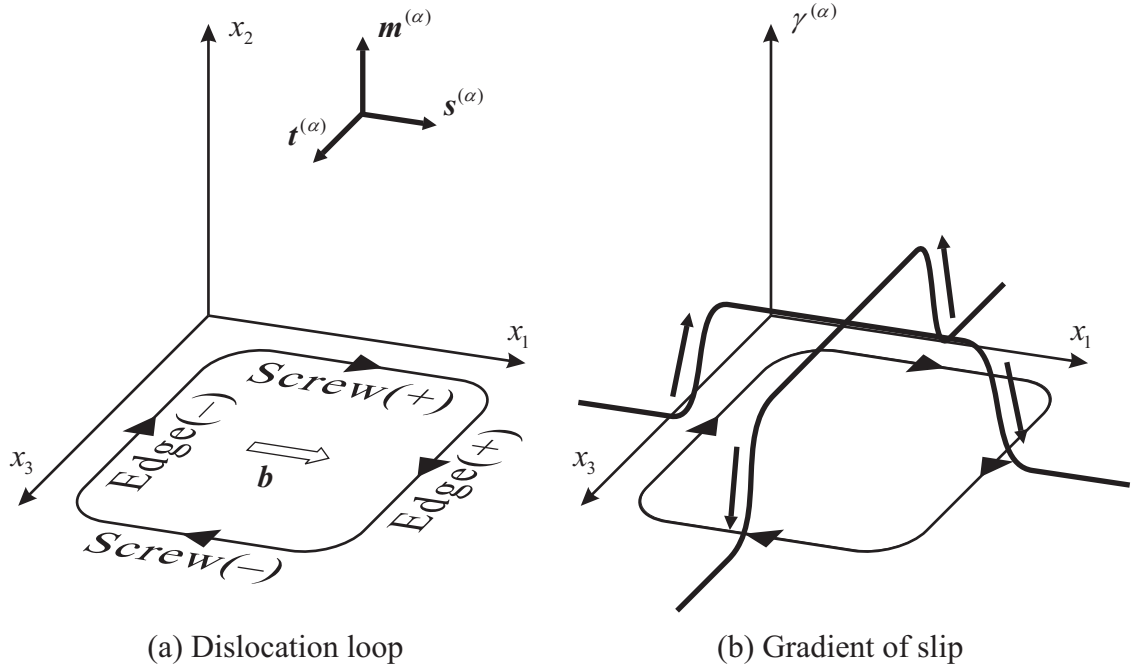


Fig. 2.7 A local coordinate system and crystal bases

$$= \frac{1}{b} \sum_{\alpha} \{ \nabla \gamma^{(\alpha)} \cdot t^{(\alpha)} (s^{(\alpha)} \otimes s^{(\alpha)}) - \nabla \gamma^{(\alpha)} \cdot s^{(\alpha)} (s^{(\alpha)} \otimes t^{(\alpha)}) \} \dots \dots \dots (2.83)$$

を得る．また，図 2.7(a) のように $x_1 x_3$ 面がすべり面に一致し，すべり方向が x_1 と一致するように局所座標系を設定すると，結晶基底ベクトル $s^{(\alpha)}$ および $m^{(\alpha)}$ は図 2.7(a) のようになる．Ashby⁽²¹⁾ は，すべり系に生じたすべり γ にこう配があるときに，そこに導入されなければならない幾何学的に必要な転位の密度として GN 転位密度を定義している．後に Ohashi⁽²²⁾ は，これを 3 次元に拡張して刃状転位密度 ρ_e およびらせん転位密度 ρ_s を

$$\rho_e = -\frac{1}{b} \frac{\partial \gamma}{\partial x_1} \dots \dots \dots (2.84)$$

$$\rho_s = \frac{1}{b} \frac{\partial \gamma}{\partial x_3} \dots \dots \dots (2.85)$$

のように与えている．図 2.7(b) のように，すべりの分布からすべりこう配の符号を考えれば，各転位密度成分の符号が図 2.7(a) のように定まる．式 (2.84) および式 (2.85) から式 (2.83) は

$$\alpha = \sum_{\alpha} (\rho_s^{(\alpha)} s^{(\alpha)} \otimes s^{(\alpha)} + \rho_e^{(\alpha)} s^{(\alpha)} \otimes t^{(\alpha)}) \dots \dots \dots (2.86)$$

と書ける．以上のことから α は Ashby の定義した GN 転位密度を一般化したものであり，これを GN 転位密度テンソルと定義する．

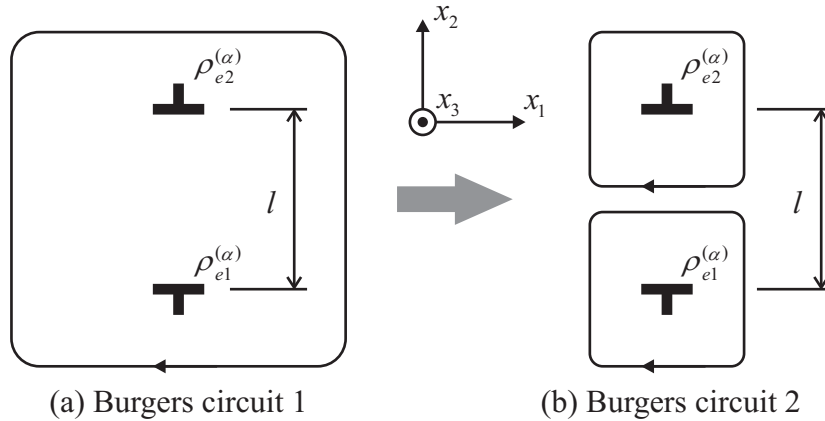


Fig. 2.8 Two adjacent dislocations in Burgers circuits

2.6.5 GN 不適合度

塑性ひずみの適合条件から，Kröner⁽⁵⁰⁾ は現配置における不適合度テンソル η_K を

$$\eta_K = \text{curl}(\text{curl} \bar{E}^p) = \bar{E}^p \times (\nabla \otimes \nabla) \dots \dots \dots (2.87)$$

と与えている．ここで， \bar{E}^p は塑性ひずみテンソルであり，式 (2.87) を指標表示すれば

$$\eta_{Kij} = \bar{E}^p_{kl,mn} e_{ikm} e_{jln} \dots \dots \dots (2.88)$$

となる．式 (2.87) で $\eta_K = 0$ とすれば，これは通常のひずみの適合条件に一致するため， $\eta_K \neq 0$ ではひずみが適合しないことになる．したがって η_K は転位以外のほとんどの結晶欠陥 (ダイポール，空孔，転傾，...) を表現できるとされている．ここで，式 (2.87) を塑性変位こう配に相当するすべりテンソル γ を用いて

$$\eta_K = \gamma_S \times (\nabla \otimes \nabla) \dots \dots \dots (2.89)$$

と書き直す．さらに，同一結晶内では結晶基底は空間的にほぼ一様であるため，粒内で結晶基底の空間こう配がほぼ零であると考えられる．したがって，式 (2.89) は

$$\eta_K = \sum_{\alpha} \eta_K^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} P_S^{(\alpha)} \times (\nabla \gamma^{(\alpha)} \otimes \nabla) \dots \dots \dots (2.90)$$

となる．なお，不適合度テンソルの配置変換則は Schmid テンソル $P_S^{(\alpha)}$ の変換則に基づくが， $P_S^{(\alpha)}$ はその対称性から式 (2.54) を用いても形を維持したまま初期配置から現配置まで変換することができない．このことは，対称テンソルである D^p や η_K に関しても同様であることに注意されたい．

式 (2.90) で得られた不適合度テンソルは転位密度の次元を有するものの，転位密度の定義である単位体積当たりの転位線の長さを明確に表しているとはいえない．そこで，転位対密度を直接表現できるように幾何学的議論に基づいて η_K を修正する．図 2.8(a) のように GN 転位密度ではカウントできない 1 組の転位対を例として考える．図 2.8(b) のように，分解能を上げて 2 個の転位を独立に囲むような Burgers 回路をとり，各回路内の GN 転位の刃状転位密度をそれぞれ $\rho_{e1}^{(\alpha)} (< 0)$ および $\rho_{e2}^{(\alpha)} (> 0)$ とすれば，転位対の密度 $\eta^{(\alpha)}$ はこれらの差を用いて次のように表すことができる．

$$\eta^{(\alpha)} = \rho_{e2}^{(\alpha)} - \rho_{e1}^{(\alpha)} = l \frac{\rho_{e2}^{(\alpha)} - \rho_{e1}^{(\alpha)}}{\Delta x_2} = l \frac{\Delta \rho_e^{(\alpha)}}{\Delta x_2} \dots \dots \dots (2.91)$$

ここで、 l は転位間距離であり、この例では $l = 1/\sqrt{\rho_e^{(\alpha)}} = \Delta x_2$ にて与えられる。また、式 (2.91) の $\eta^{(\alpha)}$ は、 $\rho_{e1}^{(\alpha)}$ および $\rho_{e2}^{(\alpha)}$ が異符号の場合 (すなわち転位対の場合) のみ値を有し、同符号の場合は零となる。次に、式 (2.91) を連続分布転位モデルへ拡張すれば、

$$\eta^{(\alpha)} = l \frac{\partial \rho_e^{(\alpha)}}{\partial x_2} \dots \dots \dots (2.92)$$

と書ける。ただし、この場合の転位間距離 l はその点における GN 転位密度のノルム $\rho_\alpha^{(\alpha)}$ を用いて $l = 1/\sqrt{\rho_\alpha^{(\alpha)}}$ のように表されることになる。さらに、式 (2.84) を式 (2.92) に代入すれば次式を得る。

$$\eta^{(\alpha)} = -\frac{l}{\tilde{b}} \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x_1 \partial x_2} = -\frac{l}{\tilde{b}} \gamma_{,12}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.93)$$

となり、 $\eta^{(\alpha)}$ がすべりの 2 次こう配で表されていることがわかる。このことから、すべりの 2 次こう配 $\gamma_{,12}^{(\alpha)}$ は異なるすべり面上にある正負の転位対 (ダイポールなど) の存在を意味していることがわかる。ここで、すべり系 α に対する不適合度テンソル $\eta_K^{(\alpha)}$ は式 (2.90) から次式のように書ける。

$$\eta_K^{(\alpha)} = \mathbf{P}_S^{(\alpha) \times} (\nabla \gamma^{(\alpha)} \otimes \nabla) \dots \dots \dots (2.94)$$

図 2.7(a) に示す局所座標系において、 $\eta_K^{(\alpha)}$ の 33 成分は $\eta_{K33}^{(\alpha)} = -\gamma_{,12}^{(\alpha)}$ となることから、式 (2.93) における $\eta^{(\alpha)}$ は $\eta_{K33}^{(\alpha)}$ に l/\tilde{b} を乗じた量であることがわかる。また、他の成分に関しても上述と同様の検討を行えば、いずれの転位対密度も $\eta_K^{(\alpha)}$ の各成分に l/\tilde{b} を乗じた量となることが確かめられる。したがって、式 (2.90) の不適合度テンソル η_K を転位密度としての次元を有するように拡張すれば、

$$\eta = \frac{l}{\tilde{b}} \eta_K = \frac{l}{\tilde{b}} \sum_{\alpha} \mathbf{P}_S^{(\alpha) \times} (\nabla \gamma^{(\alpha)} \otimes \nabla) \dots \dots \dots (2.95)$$

となる。式 (2.95) で定義された η は、すべりの曲率が存在する箇所に GN 転位では表現できない結晶欠陥 (ダイポール、原子空孔、転傾など) が存在することを表しているため、幾何学的に必要な不適合度 (GN 不適合度) テンソルと呼ぶことができる。式 (2.95) を用いて数値解析を行う場合には、隣接要素の平均 GN 転位密度が同符号になることもあるが、平均 GN 転位密度の差が転位対の存在に相当する。ただし、数値解析では有限要素等が Burgers 回路に相当するため、 η で表現し得る転位対密度は当然その分解能 (メッシュサイズ) に依存する。なお、本研究では簡単化のため数値解析の際は転位間距離 l を一定とする。また、式 (2.80) および式 (2.95) で表される結晶欠陥は幾何学的に必要なものであるため、本研究では両者をあわせて GN 結晶欠陥と定義することにする。

2.6.6 GN 結晶欠陥の成分

式 (2.80) および式 (2.95) の各密度をすべり系 α に対して書けば

$$\alpha^{(\alpha)} \equiv \alpha_s^{(\alpha)} s^{(\alpha)} \otimes s^{(\alpha)} + \alpha_e^{(\alpha)} s^{(\alpha)} \otimes t^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.96)$$

$$\eta^{(\alpha)} \equiv \eta_{cs}^{(\alpha)} (s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)})_S + \eta_{ds}^{(\alpha)} (s^{(\alpha)} \otimes t^{(\alpha)})_S + \eta_{ce}^{(\alpha)} (m^{(\alpha)} \otimes t^{(\alpha)})_S + \eta_{de}^{(\alpha)} t^{(\alpha)} \otimes t^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.97)$$

となる．なお，式 (2.97) の導出には $s^{(\alpha)} = m^{(\alpha)} \times t^{(\alpha)}$ および $m^{(\alpha)} = t^{(\alpha)} \times s^{(\alpha)}$ という関係を用いている [補足 B.5 参照]．式 (2.96) において， $\alpha_s^{(\alpha)}$ および $\alpha_e^{(\alpha)}$ はそれぞれ転位密度のらせん成分および刃状成分を表し，図 2.7(a) に示す局所座標系において，すべり $\gamma^{(\alpha)}$ を用いて次のように具体化される．

$$\alpha_s^{(\alpha)} = \frac{1}{\tilde{b}} \gamma_{,3}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.98)$$

$$\alpha_e^{(\alpha)} = -\frac{1}{\tilde{b}} \gamma_{,1}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.99)$$

式 (2.97) における $\eta_{cs}^{(\alpha)}$ ， $\eta_{ds}^{(\alpha)}$ ， $\eta_{ce}^{(\alpha)}$ および $\eta_{de}^{(\alpha)}$ はそれぞれ同一すべり面上にある正負のらせん転位の対 [図 2.9(a) 参照]，異なるすべり面に存在する正負のらせん転位の対 [図 2.9(b) 参照]，同一すべり面上にある正負の刃状転位の対 [図 2.9(c) 参照] および異なるすべり面に存在する正負の刃状転位の対 (特に転位ダイポール) [図 2.9(d) 参照] を表し，各成分の具体系は

$$\eta_{cs}^{(\alpha)} = -\frac{l}{\tilde{b}} \gamma_{,33}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.100)$$

$$\eta_{ds}^{(\alpha)} = \frac{l}{\tilde{b}} \gamma_{,32}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.101)$$

$$\eta_{ce}^{(\alpha)} = \frac{l}{\tilde{b}} \gamma_{,13}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.102)$$

$$\eta_{de}^{(\alpha)} = -\frac{l}{\tilde{b}} \gamma_{,12}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.103)$$

となる．さらに，GN 転位密度 $\alpha^{(\alpha)}$ のノルム $\rho_\alpha^{(\alpha)}$ および GN 不適合度 $\eta^{(\alpha)}$ のノルム $\rho_\eta^{(\alpha)}$ はそれぞれ

$$\rho_\alpha^{(\alpha)} \equiv \|\alpha^{(\alpha)}\| \dots\dots\dots (2.104)$$

$$\rho_\eta^{(\alpha)} \equiv \|\eta^{(\alpha)}\| \dots\dots\dots (2.105)$$

となる．なお， $\rho_\alpha^{(\alpha)}$ および $\rho_\eta^{(\alpha)}$ は，その定義からそれぞれ Burgers 回路内において単体で存在する同符号の転位および転位対の堆積を意味している．

2.6.7 動的回復

全ての結晶欠陥を幾何学量で表現する場合は，すべり系 α に蓄積された転位密度 $\rho^{(\alpha)}$ を初期転位密度 $\rho_0^{(\alpha)}$ に長範囲応力場を形成する GN 転位密度のノルム $\rho_\alpha^{(\alpha)}$ ならびに短範囲応力場を形成する GN 不適合度のノルム $\rho_\eta^{(\alpha)}$ を加えて

$$\rho^{(\alpha)} = \rho_0^{(\alpha)} + \rho_\alpha^{(\alpha)} + \rho_\eta^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.106)$$

と表す．ここで，GN 不適合度はすべりの 2 次こう配に相当するが，式 (2.69) におけるすべりの 3 次以上の高次こう配に関してはその影響は小さいものと考え本研究では考慮しない．

式 (2.106) を用いることによって全ての結晶欠陥を幾何学量として表現することができる．しかしながら，ある時刻の変形状態のみで決まる GN 転位密度および GN 不適合度では転位のダイナミクスを表すことはできない．Essmann-Mughrabi⁽⁵⁷⁾ は，刃状転位の対消滅に関する動的回復を表す増分形モデルを

$$d\rho_e^- = \frac{2\rho_e y_e c_e d\gamma}{\tilde{b}} \dots\dots\dots (2.107)$$

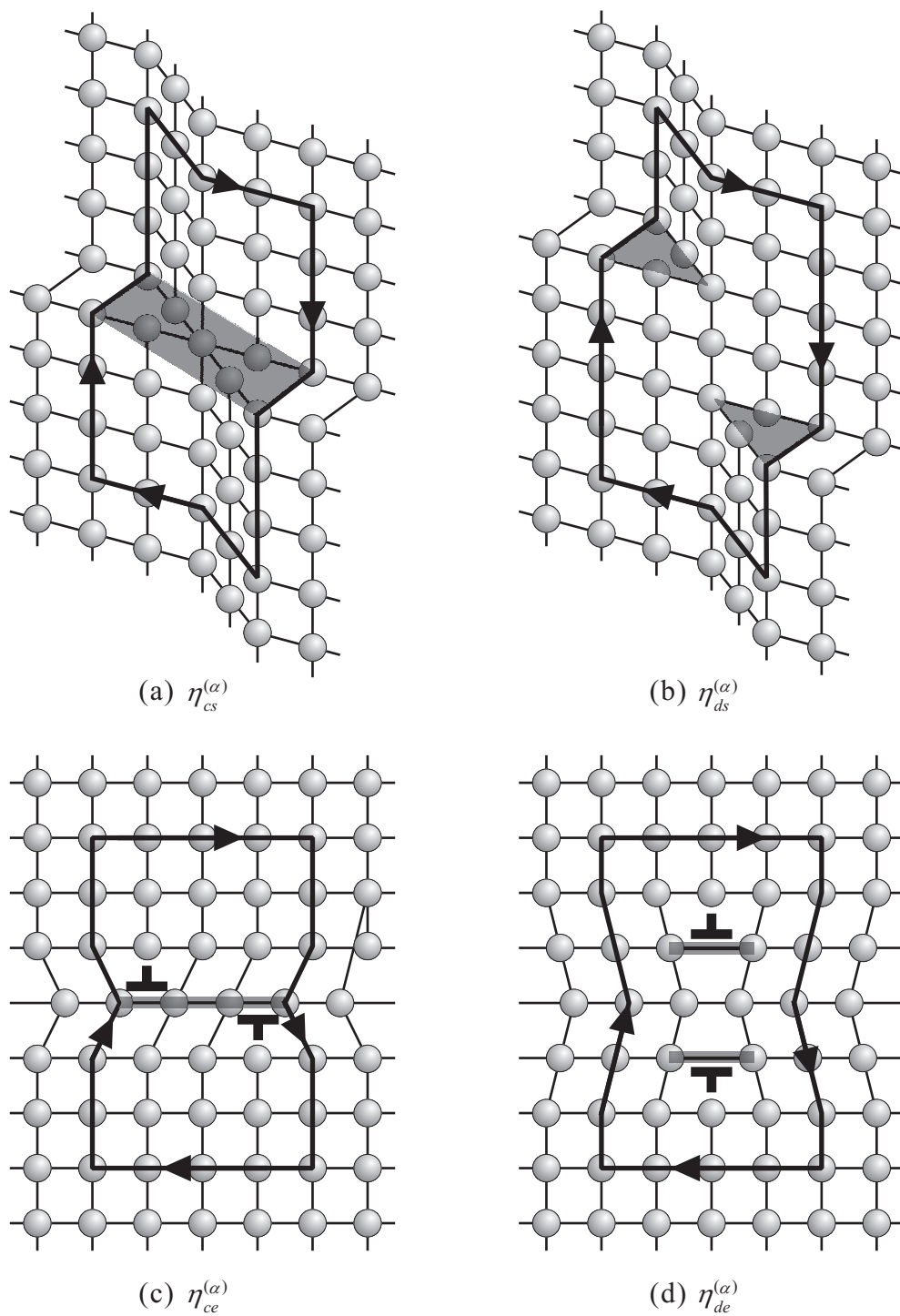


Fig. 2.9 Component of GN incompatibility

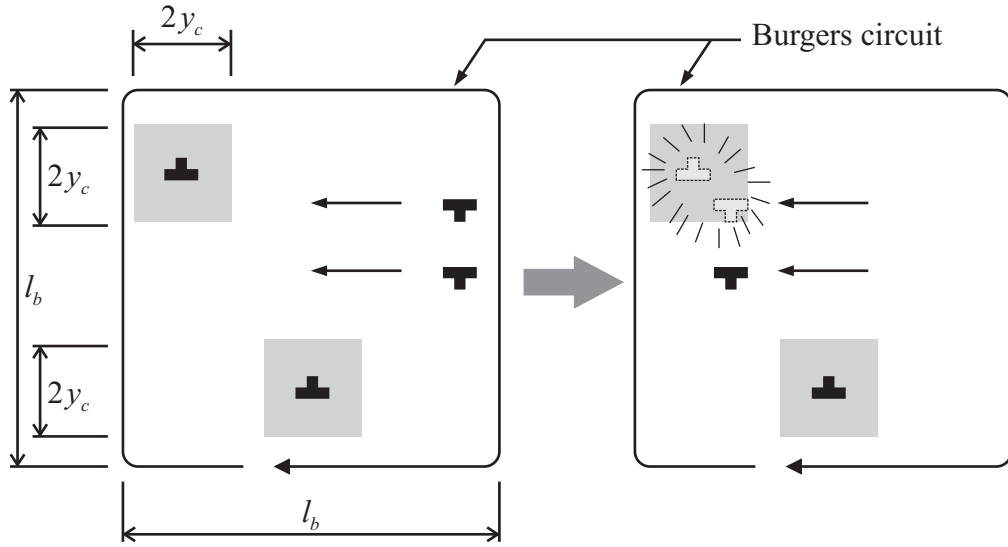


Fig. 2.10 Annihilation of dislocation pairs

のように提案している．ここで、 y_e は異符号の刃状転位対の消滅距離、 c_e は刃状転位の運動に起因するすべりの発生割合を表す数値係数である．しかしながら、GN 結晶欠陥を用いて、この増分式を書いた場合、上述の幾何学的状態量の表現とは整合しない．動的回復現象にはらせん転位の交差すべりによる転位の反応消滅、点欠陥の拡散に起因するダイポールの対消滅、Lomer-Cottrell 固着の分解、あるいは異符号の転位の衝突による転位の対消滅などがあるが、本研究では特に転位の対消滅に着目し、幾何学的な観点から動的回復現象をモデル化する．図 2.10 に示す代表寸法が l_b である Burgers 回路内にある 1 つの転位ペアの消滅率 P_η は、異符号の転位が対消滅を起こし得る領域 (グレーの領域) と Burgers 回路の面積の割合 $4y_c^2/l_b^2$ および Burgers 回路内の転位対の数 $l_b^2 \rho_\eta^{(\alpha)}$ を用いて次式のように表される．

$$P_\eta = f \frac{4y_c^2}{l_b^2} l_b^2 \rho_\eta^{(\alpha)} = 4fy_c^2 \rho_\eta^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.108)$$

ここで、 y_c は転位対の消滅距離 (ダイポールが形成される最小のすべり面間距離) および f は対消滅の空間頻度を表す数値係数である．したがって、 $\rho_\eta^{(\alpha)}$ で表される転位対のうち、対消滅を起こした転位対密度 $\rho_R^{(\alpha)}$ は

$$\rho_R^{(\alpha)} = P_\eta \rho_\eta^{(\alpha)} = 4fy_c^2 \rho_\eta^{(\alpha)2} \dots\dots\dots (2.109)$$

のように得られる．以上より動的回復を考慮した全転位密度は、転位密度の初期値 $\rho_0^{(\alpha)}$ および上述の $\rho_\alpha^{(\alpha)}$ 、 $\rho_\eta^{(\alpha)}$ および $\rho_R^{(\alpha)}$ を用いて次式のように書ける．

$$\rho^{(\alpha)} = \rho_0^{(\alpha)} + \rho_\alpha^{(\alpha)} + \rho_\eta^{(\alpha)} - \rho_R^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.110)$$

消滅した転位対の密度 $\rho_R^{(\alpha)}$ が元の転位対密度 $\rho_\eta^{(\alpha)}$ を超えることはあり得ないため、必ず $\rho_R^{(\alpha)} \leq \rho_\eta^{(\alpha)}$ とする．

2.7 粒子描像に基づく転位密度の表現

PSBs, セル構造およびサブグレインといった転位パターンニングは, 集団転位の自己組織化によって形成される. このような自己組織化問題においては, 個々の転位がどのような符号を有しているかということよりも, 転位が存在するか否かを調べるのが重要である. したがって, 本研究において自己組織化現象を議論する際には, 転位密度の大きさのみに着目し, 可動転位密度 $\alpha^{m(\alpha)}$ および不動転位密度 $\alpha^{i(\alpha)}$ を用いて転位密度を表現する. なお, これ以降, 可動転位と不動転位を一緒に扱う場合には $\alpha^{m(\alpha)}$ および $\alpha^{i(\alpha)}$ をまとめて次式のようにする.

$$\alpha^{m(\alpha)}, \alpha^{i(\alpha)} \rightarrow \alpha^{[n](\alpha)} \quad ([n] = m, i) \dots\dots\dots (2.111)$$

また, 可動転位密度および不動転位密度に関してはすべり系間の相互作用を考慮をしないため, すべり系に関する表記を省略し $\alpha^{[n]}$ と表す.

第3章

内力の定義と釣合い方程式

本章では自由エネルギーの引数として内部変数を決定し、それらに共役な内力を定義して、諸釣合い方程式を導出する。まず、本章において新たに定義する転位密度の釣合い方程式および第4章で示される Clausius-Duhem の不等式との整合性が保たれるように、保存量としての転位密度および転位密度流束に関する量を内部変数として導入する。仮想仕事率の原理から境界条件および力学的釣合い方程式が導出される。次に、仮想仕事率の原理から境界条件および力学的釣合い方程式を、熱力学第1法則からエネルギー方程式を、質量保存則から連続の式を導出する。また、転位密度の釣合い方程式を転位密度の保存則から導出する。さらに、秩序形成に寄与する転位拡散の影響を拡散のエントロピー流束として代入した熱力学第2法則からエントロピー不等式を導出する。その結果、釣合い方程式系としては従来の理論に転位密度の釣合い方程式が加えられる。

3.1 内力の定義

まず、全自由エネルギーの引数を考え内力を定義する。保存量としての転位密度および転位密度流束の時間積分値を内部変数として全自由エネルギーの引数に導入すれば、第2中間配置 $\beta_{(m)}$ における全自由エネルギーの関数形は次式のようなになる。

$$\bar{\Psi} = \bar{\Psi}_k(\theta, \bar{\mathbf{E}}_{(m)}; \bar{\mathbf{E}}_{(m)}^p, \mathbf{D}_{(m)}^p) + \bar{\Psi}_d(\alpha^{[n]}, \bar{\boldsymbol{\mu}}_{(m)}^{[n]}) \dots \dots \dots (3.1)$$

ここで、 $\bar{\Psi} \equiv \rho_0 \bar{\psi}$ は全自由エネルギー、 $\bar{\psi}$ は $\bar{\Psi}$ の単位体積あたりの全自由エネルギー、 ρ_0 は初期配置 $\beta_{(I)}$ での密度であり、 $\bar{\Psi}_k$ は通常の力学部分を、 $\bar{\Psi}_d$ は転位密度に関係する部分を表す。なお、式(3.1)における「;」の左に記した量は巨視的変数、右に記した量は内部変数であることを意味している。また、 θ は温度であり、 $\bar{\boldsymbol{\mu}}_{(m)}^{[n]}$ は次式によって定義される転位密度流束ベクトル $\mathbf{m}_{(m)}^{[n]}$ の時間積分値である。

$$\bar{\boldsymbol{\mu}}_{(m)}^{[n]} \equiv \int_t \mathbf{m}_{(m)}^{[n]} dt \quad \text{or} \quad \dot{\bar{\boldsymbol{\mu}}}_{(m)}^{[n]} \equiv \mathbf{m}_{(m)}^{[n]} \dots \dots \dots (3.2)$$

式(3.2)を用いて式(3.1)の全自由エネルギー $\bar{\Psi}$ の物質時間微分を導出すれば

$$\begin{aligned} \dot{\bar{\Psi}} &= \dot{\bar{\Psi}}_k(\theta, \bar{\mathbf{E}}_{(m)}; \bar{\mathbf{E}}_{(m)}^p, \mathbf{D}_{(m)}^p) + \dot{\bar{\Psi}}_d(\alpha^{[n]}, \bar{\boldsymbol{\mu}}_{(m)}^{[n]}) \\ &= -H\dot{\theta} + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)} - \tilde{\mathbf{A}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^p + \tilde{\mathbf{N}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p - \sum_n \tilde{\Pi}^{[n]} \dot{\alpha}^{[n]} - \sum_n \tilde{\mathbf{p}}_{(m)}^{[n]} \cdot \mathbf{m}_{(m)}^{[n]} \dots \dots \dots (3.3) \end{aligned}$$

となる．得られた式 (3.3) から各内力を熱力学的力として定義すれば次式のようなる．

$$\left. \begin{aligned} -H &= -\rho_0\eta \equiv \frac{\partial \bar{\Psi}_k}{\partial \theta}, & \bar{T}_{(m)} &\equiv \frac{\partial \bar{\Psi}_k}{\partial \bar{E}_{(m)}}, & -\bar{A}_{(m)} &\equiv \frac{\partial \bar{\Psi}_k}{\partial \bar{E}_{(m)}^p} \\ \bar{N}_{(m)} &\equiv \frac{\partial \bar{\Psi}_k}{\partial \bar{D}_{(m)}^p}, & -\bar{\Pi}^{[n]} &\equiv \frac{\partial \bar{\Psi}_d}{\partial \alpha^{[n]}}, & -\bar{p}_{(m)}^{[n]} &\equiv \frac{\partial \bar{\Psi}_d}{\partial \bar{\mu}_{(m)}^{[n]}} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (3.4)$$

ただし， \bar{N} は Jacobian : $J \equiv \det F$ により $\bar{N} \equiv JN$ と定義され， H はエントロピー， η はエントロピー密度， $\bar{T}_{(m)}$ は Kirchhoff 応力， $\bar{A}_{(m)}$ は背応力， $\bar{N}_{(m)}$ は塑性変形速度に共役な応力， $\bar{\Pi}^{[n]}$ は化学ポテンシャルの役割を示す量であり， $\bar{p}_{(m)}^{[n]}$ は $m_{(m)}^{[n]}$ に共役な内力となり，これは第4章にて化学ポテンシャル $\bar{\Pi}^{[n]}$ のこう配として定義するものである．次に，式 (3.3) の両辺に J^{-1} をかけ，現配置へ戻せば

$$\rho \dot{\psi} = -\rho\eta\dot{\theta} + T \cdot D - A \cdot D^p + N \cdot \dot{D}^p - \sum_n \Pi^{[n]} \dot{\alpha}^{[n]} - \sum_n p^{[n]} \cdot m^{[n]} \dots\dots\dots (3.5)$$

が得られる．ここで， T は Cauchy 応力である．

3.2 釣合い方程式の導出

まず，力学的釣合い方程式を仮想仕事率の原理に基づいて導出する．仮想仕事率の原理を定式化すれば次式のようなる．

$$\oint_a \check{P}_s da + \int_v \check{P}_B dv = \int_v \check{P} dv \dots\dots\dots (3.6)$$

ここで， \check{P}_s ， \check{P}_B および \check{P} はそれぞれ表面力，物体力および内力のなす仮想仕事率である．また， a は体積 v を囲む物質面， v は物質体積， da は微小面積要素および dv は微小体積要素である．仮想仕事率の原理は一般に「表面力のする仮想仕事率と物体力のする仮想仕事率の総和は，内力のする仮想仕事率に等しい．」と述べられ，式 (3.6) における \check{P}_s ， \check{P}_B および \check{P} は次式のように表現できる．

$$\check{P}_s = \overset{(n)}{t} \cdot \check{v} \dots\dots\dots (3.7)$$

$$\check{P}_B = \check{P}_b - \check{P}_I = \rho f \cdot \check{v} - \rho \check{v} \cdot \check{v} = \rho(f - \check{v}) \cdot \check{v} \dots\dots\dots (3.8)$$

$$\check{P} = \rho \left. \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \theta, \alpha^{[n]}, \bar{\mu}^{[n]}} \right| = T \cdot \check{D} \dots\dots\dots (3.9)$$

ここで， \check{P}_b は純粋な物体力 ρf のなす仮想仕事率， \check{P}_I は慣性力 $\rho \check{v}$ のなす仮想仕事率， v は物質点の速度， ρ は密度， $\overset{(n)}{t}$ はけん引力， f は物体力密度および \check{D} は変形速度 D の仮想量を表している．次に，速度こう配 L の仮想量 \check{L} および連続体スピン W の仮想量 \check{W} を用いて式 (3.9) における \check{D} を書き直せば

$$\begin{aligned} \check{P} &= T \cdot \check{D} = T \cdot (\check{L} - \check{W}) \\ &= \text{div}(T^T \check{v}) - (\text{div}T) \cdot \check{v} - (e \cdot T) \cdot \check{w} \dots\dots\dots (3.10) \end{aligned}$$

となる．ここで， \check{w} は反対称テンソル \check{W} に双対な軸性ベクトルを表している．仮想仕事率の原理式 (3.6) に式 (3.7)，式 (3.8) および式 (3.10) を代入し，Gauss の発散定理を用いれば

$$\oint_a \overset{(n)}{t} \cdot Tn \cdot \check{v} da + \int_v \left\{ \text{div}T + \rho(f - \check{v}) \right\} \cdot \check{v} - (e \cdot T) \cdot \check{w} dv = 0 \dots\dots\dots (3.11)$$

が得られる．ここで， \mathbf{n} は微小面積要素の単位法線ベクトルを表している．任意の仮想量 \dot{v} ， \dot{w} に大して式 (3.11) が成立することを考慮すれば，次式の関係が得られる．

$$\mathbf{e} \cdot \mathbf{T} = \mathbf{0} \dots\dots\dots (3.12)$$

$$\mathbf{t}^{(n)} = \mathbf{T} \mathbf{n} \dots\dots\dots (3.13)$$

$$\text{div} \mathbf{T} + \rho(\mathbf{f} - \dot{v}) = \mathbf{0} \dots\dots\dots (3.14)$$

得られたこれらの釣合い方程式は，通常の力学的釣合い方程式であり，式 (3.12) は角運動方程式，式 (3.13) は Cauchy の基本定理および式 (3.14) は運動方程式である．

3.3 連続の式

まず，質量保存則を定式化すれば次式のようになる．

$$\frac{D}{Dt} \int_v \rho dv = 0 \dots\dots\dots (3.15)$$

次に，式 (3.15) を局所化するために Reynolds の輸送定理を適用すれば，連続の式が

$$\dot{\rho} + \rho \text{div} \mathbf{v} = 0 \dots\dots\dots (3.16)$$

と得られる．式 (3.16) は通常の連続の式である．

3.4 転位密度の釣合い方程式

転位密度の保存則は，保存則の一般形に従うとして次式のように書く．

$$\frac{D}{Dt} \int_v \alpha^{[n]} dv = - \oint_a \mathbf{m}^{[n]} \cdot \mathbf{n} da + \int_v G^{[n]} dv \dots\dots\dots (3.17)$$

ここで， $G^{[n]}$ は転位湧き出し項を表しており，次式に示すように転位生成・消滅項 $G_p^{[n]}$ および転位反応項 $G_r^{[n]}$ に分解可能である．

$$G^{[n]} = G_p^{[n]} + G_r^{[n]} \dots\dots\dots (3.18)$$

また，転位反応項 $G_r^{[n]}$ は転位間の相互作用を表しているため次式を満たす．

$$\sum_n G_r^{[n]} = 0 \dots\dots\dots (3.19)$$

式 (3.17) の左辺に Reynolds の輸送定理を適用し，右辺第 1 項に Gauss の発散定理を用いれば

$$\int_v \frac{\partial \alpha^{[n]}}{\partial t} dv + \int_v \text{div}(\alpha^{[n]} \mathbf{v}) dv = - \int_v \text{div} \mathbf{m}^{[n]} dv + \int_v G^{[n]} dv \dots\dots\dots (3.20)$$

が得られる．ここで，材料の非圧縮性の仮定に基づき式 (3.20) について流れ場がないことを考慮して局所化を行えば，転位密度の釣合い方程式が次式のように得られる [補足 C.1 参照]．

$$\frac{\partial \alpha^{[n]}}{\partial t} = -\text{div} \mathbf{m}^{[n]} + G^{[n]} \dots\dots\dots (3.21)$$

式 (3.21) は第 4 章において諸構成式および反応-拡散方程式を導出する際に重要な役割を果たす．

3.5 エネルギー方程式

熱力学第1法則は「系内の全エネルギーの時間変化は、単位時間あたりに系になされる外力の仕事と系に供給される熱量の総和に等しい。」と述べられており、熱力学第1法則を定式化すれば次式のようになる。

$$\oint_a (P_s + Q_s) da + \int_v (P_b + Q_b) dv - \frac{D}{Dt} \int_v \rho(\hat{\varepsilon} + K) dv = 0 \dots\dots\dots (3.22)$$

ここで、 $\hat{\varepsilon}$ は内部エネルギー密度であり、表面に供給される単位時間あたりの熱量 Q_s 、体積に供給される単位時間あたりの熱量 Q_b および運動エネルギー密度 K は、それぞれ次式のように定義される。

$$Q_s \equiv -q \cdot n, \quad Q_b \equiv \rho r, \quad K \equiv \frac{1}{2} v^2 \dots\dots\dots (3.23)$$

ここで、 q は熱流束ベクトルおよび r は放射熱密度である。

一方、前述の仮想仕事率の原理 (3.6) から仮想量を現実量に置き換えることにより力学的エネルギー釣合い方程式が

$$\oint_a P_s da + \int_v P_b dv - \frac{D}{Dt} \int_v \rho K dv - \int_v P dv = 0 \dots\dots\dots (3.24)$$

と得られる。ここで、式 (3.22) と式 (3.24) の差を考え、得られた結果を局所化すればエネルギー方程式が次式のように得られる。

$$T \cdot D - \text{div} q + \rho(r - \dot{\hat{\varepsilon}}) = 0 \dots\dots\dots (3.25)$$

得られた式 (3.25) は内部変数を陰に含む内部エネルギー密度 $\hat{\varepsilon}$ が用いられている点が通常のエネルギー方程式と異なっているが、形式は類似している。

3.6 エントロピー不等式

熱力学第2法則は「系内のエントロピーの時間変化は、系に供給されるエントロピーよりも大きく、その差は内部エントロピー生成によって補われる。」と述べられており、熱力学第2法則あるいはエントロピー増大則を定式化すれば次式のようになる。

$$\int_v \rho \gamma_{(i)} dv = \frac{D}{Dt} \int_v \rho \eta dv - \left(- \oint_a s \cdot n da + \int_v \rho b dv \right) \geq 0 \dots\dots\dots (3.26)$$

ここで、 $\gamma_{(i)}$ は内部エントロピー生成密度、 s は局所エントロピー流束ベクトル、 b は体積供給エントロピー密度である。なお、 s および b はそれぞれ

$$s = \frac{q}{\theta} - \sum_n \frac{\Pi^{[n]} m^{[n]}}{\theta}, \quad b = \frac{r}{\theta} - \sum_n \frac{G_p^{[n]} \Pi^{[n]}}{\theta \rho} \dots\dots\dots (3.27)$$

であり、式 (3.27)₁ 右辺第2項は転位密度流束に起因する拡散のエントロピー流束を意味し、式 (3.27)₂ 右辺第2項は転位発生に起因する拡散のエントロピー密度を意味する。式 (3.26) を局所化すれば、転位密度流束によるエントロピー流束を考慮したエントロピー不等式が

$$\rho \gamma_{(i)} = \rho \eta - \left(- \text{div} \frac{q}{\theta} + \sum_n \text{div} \frac{\Pi^{[n]} m^{[n]}}{\theta} + \frac{\rho r}{\theta} - \sum_n \frac{G_p^{[n]} \Pi^{[n]}}{\theta} \right) \geq 0 \dots\dots\dots (3.28)$$

のように得られる。

第4章

構成式および反応-拡散方程式の導出

本章ではエントロピー増大則を満足するように、エネルギー共役量の仕事率を保存部分と散逸部分に分離⁽⁶⁰⁾して構成式を具体的に導出する。また、転位密度流束の構成式を第3章で得た釣合い方程式に適用することで、セル構造やサブグレインなどの転位パターンを表現する反応-拡散方程式を構築する。保存部分からは弾性構成式と化学ポテンシャルの構成式が導出される。一方、散逸部分からは最大散逸速度の原理に基づき、転位密度流束および転位反応項の構成式が導出される。また、転位密度流束の構成式に化学ポテンシャルの構成式を代入することで、転位密度流束の転位密度依存性を示す。さらに、化学ポテンシャルの構成式を代入した転位反応項の構成式と転位密度流束の構成式を転位密度の釣合い方程式に代入し、転位の生成・消滅項を転位生成、ダイポールの対消滅およびらせん転位の対消滅のモデルに従い導入すれば、場の方程式として可動および不動転位密度による連立反応-拡散方程式が得られる。そして、散逸関数を相当量表示することで、分解せん断応力の硬化則を与える関数形に転位密度が導入されること、および分解せん断応力の影響が応力効果係数に反映されることの熱力学的整合性を示す。また、転位パターンリングが発現する場合の反応-拡散方程式における各速度係数の値の範囲を限定するために、反応-拡散方程式に対して線形安定性解析を行い、時間的に周期的な振動である Hopf 分岐および空間的に周期的な振動である Turing 分岐の発生条件を調べるとともに、セル構造およびサブグレインの自発的特性長さを求める。

4.1 Clausius-Duhem の不等式

式(3.28)の両辺に $\theta \geq 0$ を乗じ、式(3.25)を用いて供給熱の項 $\text{div} \mathbf{q} - \rho r$ を消去し、また、均一温度場の仮定に基づいて温度こう配ベクトル $\text{grad} \theta / \theta$ の項を無視すれば

$$\Phi \equiv \rho \theta \gamma_{(i)} = \rho \theta \dot{\eta} - \rho \dot{\varepsilon} + \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} - \sum_n \Pi^{[n]} \text{div} \mathbf{m}^{[n]} - \sum_n \mathbf{p}^{[n]} \cdot \mathbf{m}^{[n]} + \sum_n G_p^{[n]} \Pi^{[n]} \geq 0 \dots \dots \dots (4.1)$$

が得られる。ただし、 $\mathbf{p}^{[n]}$ は化学ポテンシャルのこう配として

$$\mathbf{p}^{[n]} \equiv \text{grad} \Pi^{[n]} \dots \dots \dots (4.2)$$

で定義される量であり、 Φ は散逸関数である。ここで、転位密度の釣合い方程式(3.21)を用いて式(4.1)右辺第4項を消去すると Clausius-Duhem の不等式として次式が得られる。

$$\Phi \equiv \rho \theta \gamma_{(i)} = \rho \theta \dot{\eta} - \rho \dot{\varepsilon} + \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} + \sum_n \Pi^{[n]} \dot{\alpha}^{[n]} - \sum_n \mathbf{p}^{[n]} \cdot \mathbf{m}^{[n]} - \sum_n G_r^{[n]} \Pi^{[n]} \geq 0 \dots \dots \dots (4.3)$$

式 (4.3) の両辺を J 倍し、さらに第2中間配置 $\beta_{(m)}$ へ回転させれば次式が得られる。

$$\tilde{\Phi} = \theta \dot{H} - \dot{\hat{U}} + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)} + \sum_n \tilde{\Pi}^{[n]} \dot{\alpha}^{[n]} - \sum_n \tilde{\mathbf{p}}_{(m)}^{[n]} \cdot \mathbf{m}_{(m)}^{[n]} - \sum_n \tilde{G}_r^{[n]} \Pi^{[n]} \geq 0 \dots \dots \dots (4.4)$$

ただし、 $H \equiv \rho_0 \eta$, $\hat{U} \equiv \rho_0 \hat{\varepsilon}$, $\tilde{\Pi}^{[n]} \equiv J \Pi^{[n]}$, $\tilde{\mathbf{p}}_{(m)}^{[n]} \equiv J \mathbf{p}_{(m)}^{[n]}$, $\tilde{G}_r^{[n]} \equiv J G_r^{[n]}$ である。ここで、温度とエントロピーの独立-従属関係を逆転させるために、式 (4.4) に対して Legendre 変換： $\hat{\Psi} = \hat{U} - \theta H$ を行い、熱力学的ポテンシャルを内部エネルギー \hat{U} から Helmholtz の自由エネルギー $\hat{\Psi}$ へ変換すれば

$$\tilde{\Phi} = -(\dot{\hat{\Psi}} + H\dot{\theta}) + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)} + \sum_n \tilde{\Pi}^{[n]} \dot{\alpha}^{[n]} - \sum_n \tilde{\mathbf{p}}_{(m)}^{[n]} \cdot \mathbf{m}_{(m)}^{[n]} - \sum_n \tilde{G}_r^{[n]} \Pi^{[n]} \geq 0 \dots \dots \dots (4.5)$$

が得られる。また、式 (3.3) と式 (4.5) を比較すれば散逸関数 $\tilde{\Phi}$ は全自由エネルギーの散逸部分 $\bar{\Psi}_d$ であることがわかり、次式のような関係が得られる [補足 D.1 参照]。

$$\dot{\hat{\Psi}} = \dot{\Psi} + \tilde{\mathbf{A}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^p - \tilde{\mathbf{N}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p \dots \dots \dots (4.6)$$

ただし、 Ψ は自由エネルギーの保存部分である。Clausius-Duhem の不等式は物体内部での微視的な非可逆過程の進むべき方向を表すものであるため、式 (4.6) を式 (4.5) に代入し、内部変数のする仕事を陽に表示すると

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi} = & -(\dot{\Psi} + H\dot{\theta}) + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^e + \tilde{\hat{\mathbf{T}}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^p + \tilde{\mathbf{N}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p \\ & + \sum_n \tilde{\Pi}^{[n]} \dot{\alpha}^{[n]} - \sum_n \tilde{\mathbf{p}}_{(m)}^{[n]} \cdot \mathbf{m}_{(m)}^{[n]} - \sum_n \tilde{G}_r^{[n]} \Pi^{[n]} \geq 0 \dots \dots \dots (4.7) \end{aligned}$$

となる。ここで、 $\mathbf{D}_{(m)} = \mathbf{D}_{(m)}^e + \mathbf{D}_{(m)}^p$ という関係を用いている。また、 $\hat{\mathbf{T}}$ は次式のように定義される有効応力である。

$$\tilde{\hat{\mathbf{T}}}_{(m)} \equiv \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} - \tilde{\mathbf{A}}_{(m)} \dots \dots \dots (4.8)$$

ここで、通常はエントロピーおよび応力を構成量に、温度およびひずみをその引数に選び、構成式の導出の議論を展開する。しかしながら、塑性現象では応力を熱力学的に明確に弾塑性分解することができない。そのため、弾性ひずみおよび塑性ひずみの熱力学的な分解が明確になるように、ひずみあるいはひずみ速度を構成量に、応力や応力速度をその引数となるように選ぶ必要がある。そこで、状態量としての Gibbs 関数 $G \equiv \Psi - \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{E}_{(m)}^e$ を導入する。Gibbs 関数 G を時間微分し式 (4.7) に代入すると、散逸関数は次式のようなになる。

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi} = & -(\dot{G} + H\dot{\theta} + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{E}_{(m)}^e - \sum_n \tilde{\Pi}^{[n]} \dot{\alpha}^{[n]}) + \tilde{\hat{\mathbf{T}}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^p \\ & + \tilde{\mathbf{N}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p - \sum_n \tilde{\mathbf{p}}_{(m)}^{[n]} \cdot \mathbf{m}_{(m)}^{[n]} - \sum_n \tilde{G}_r^{[n]} \Pi^{[n]} \geq 0 \dots \dots \dots (4.9) \end{aligned}$$

以上のように、Gibbs 関数 G を Legendre 変換し、熱力学ポテンシャルを Ψ から G へ変更することによって、応力と弾性ひずみの間で構成量としての役割を逆転させることができる。

4.2 構成式の保存部分

4.2.1 熱力学的制限

式 (4.9) から自由エネルギーの保存部分 G の引数となる可能性のあるものは次式のようになる .

$$G = G(\theta, \dot{\theta}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{N}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{p}}_{(m)}^{[n]}, \Pi^{[n]}, \alpha^{[n]}, \dot{\alpha}^{[n]}) \dots \dots \dots (4.10)$$

ここで, 等存在の公理⁽⁶⁹⁾ から, 他の構成量 $H, \mathbf{E}_{(m)}^e, \tilde{\Pi}^{[n]}, \mathbf{D}_{(m)}^p, \mathbf{m}_{(m)}^{[n]}$ および $\tilde{G}_r^{[n]}$ の引数も熱力学ポテンシャル G と同様に以下のように選ぶ .

$$\left. \begin{aligned} H &= H(\theta, \dot{\theta}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{N}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{p}}_{(m)}^{[n]}, \Pi^{[n]}, \alpha^{[n]}, \dot{\alpha}^{[n]}) \\ \mathbf{E}_{(m)}^e &= \mathbf{E}_{(m)}^e(\theta, \dot{\theta}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{N}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{p}}_{(m)}^{[n]}, \Pi^{[n]}, \alpha^{[n]}, \dot{\alpha}^{[n]}) \\ \tilde{\Pi}^{[n]} &= \tilde{\Pi}^{[n]}(\theta, \dot{\theta}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{N}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{p}}_{(m)}^{[n]}, \Pi^{[n]}, \alpha^{[n]}, \dot{\alpha}^{[n]}) \\ \mathbf{D}_{(m)}^p &= \mathbf{D}_{(m)}^p(\theta, \dot{\theta}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{N}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{p}}_{(m)}^{[n]}, \Pi^{[n]}, \alpha^{[n]}, \dot{\alpha}^{[n]}) \\ \mathbf{m}_{(m)}^{[n]} &= \mathbf{m}_{(m)}^{[n]}(\theta, \dot{\theta}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{N}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{p}}_{(m)}^{[n]}, \Pi^{[n]}, \alpha^{[n]}, \dot{\alpha}^{[n]}) \\ \tilde{G}_r^{[n]} &= \tilde{G}_r^{[n]}(\theta, \dot{\theta}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{N}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{p}}_{(m)}^{[n]}, \Pi^{[n]}, \alpha^{[n]}, \dot{\alpha}^{[n]}) \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (4.11)$$

また, 式 (4.10) を式 (4.9) に代入し鎖状則で展開することで次式が得られる .

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi} &= -\left(H + \frac{\partial G}{\partial \theta}\right)\dot{\theta} - \left(\mathbf{E}_{(m)}^e + \frac{\partial G}{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}}\right) \cdot \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)} \\ &\quad - \sum_n \left(-\tilde{\Pi}^{[n]} + \frac{\partial G}{\partial \alpha^{[n]}}\right)\dot{\alpha}^{[n]} - \left(\frac{\partial G}{\partial \dot{\theta}}\ddot{\theta} + \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}} \cdot \ddot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)} + \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}} \cdot \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}\right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial G}{\partial \tilde{\mathbf{N}}_{(m)}} \cdot \dot{\tilde{\mathbf{N}}}_{(m)} + \sum_n \frac{\partial G}{\partial \tilde{\mathbf{p}}_{(m)}^{[n]}} \cdot \dot{\tilde{\mathbf{p}}}_{(m)}^{[n]} + \sum_n \frac{\partial G}{\partial \Pi^{[n]}} \dot{\Pi}^{[n]} + \frac{\partial G}{\partial \dot{\alpha}^{[n]}} \ddot{\alpha}^{[n]}\right) \\ &\quad + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^p - \sum_n \tilde{\mathbf{p}}_{(m)}^{[n]} \cdot \mathbf{m}_{(m)}^{[n]} - \sum_n \tilde{G}_r^{[n]} \Pi^{[n]} \geq 0 \dots \dots \dots (4.12) \end{aligned}$$

式 (4.12) 右辺第 4 小括弧内における各項は各速度に対し線形であり, 式 (4.10) および式 (4.11) を考慮すれば, 不等式 (4.12) が常に成り立つ条件として次式が得られる .

$$\frac{\partial G}{\partial \dot{\theta}} = 0, \quad \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}} = \mathbf{0}, \quad \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}} = \mathbf{0}, \quad \frac{\partial G}{\partial \tilde{\mathbf{N}}_{(m)}} = \mathbf{0}, \quad \frac{\partial G}{\partial \tilde{\mathbf{p}}_{(m)}^{[n]}} = \mathbf{0}, \quad \frac{\partial G}{\partial \Pi^{[n]}} = 0, \quad \frac{\partial G}{\partial \dot{\alpha}^{[n]}} = 0 \dots \dots \dots (4.13)$$

したがって, 式 (4.13) から G の引数を次式のように制限することができる .

$$G = G(\theta, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \alpha^{[n]}) \dots \dots \dots (4.14)$$

また, ここでは強い非平衡性を無視し, 通常通りエントロピー H は温度速度 $\dot{\theta}$ に依存しないとする . この結果, 式 (4.12) の右辺第 1 括弧, 第 2 括弧および第 3 括弧を持つ項の各項も各速度について線形となり次式が得られる .

$$H = -\frac{\partial G}{\partial \theta}, \quad \mathbf{E}_{(m)}^e = -\frac{\partial G}{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}}, \quad \tilde{\Pi}^{[n]} = \frac{\partial G}{\partial \alpha^{[n]}} \dots \dots \dots (4.15)$$

式 (4.14) および式 (4.15) より，エントロピーの引数および化学ポテンシャルの引数も次式のように制限可能である．

$$\left. \begin{aligned} H &= H(\theta, \tilde{T}_{(m)}, \alpha^{[n]}) \\ \mathbf{E}_{(m)}^e &= \mathbf{E}_{(m)}^e(\theta, \tilde{T}_{(m)}, \alpha^{[n]}) \\ \tilde{\Pi}^{[n]} &= \tilde{\Pi}^{[n]}(\theta, \tilde{T}_{(m)}, \alpha^{[n]}) \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (4.16)$$

なお，理論の単純化を図るため，保存過程が結合的であると考え，Gibbs 関数 G の関数形を次式のようにおく．

$$G = G(\theta, \tilde{T}_{(m)}, \alpha^{[n]}) \equiv G_E(\theta, \tilde{T}_{(m)}) + G_\alpha(\alpha^{[n]}) \dots\dots\dots (4.17)$$

これに従えば，式 (4.15) はそれぞれ次式のようになる．

$$H = -\frac{\partial G_E}{\partial \theta}, \quad \mathbf{E}_{(m)}^e = -\frac{\partial G_E}{\partial \tilde{T}_{(m)}}, \quad \tilde{\Pi}^{[n]} = \frac{\partial G_\alpha}{\partial \alpha^{[n]}} \dots\dots\dots (4.18)$$

4.2.2 速度形弾性構成式

式 (4.18)₂ から弾性ひずみの構成式を具体化するために， G_E をその引数を作る不変量の多項式として表現することを考える．本研究では単結晶材料および単結晶から構成される多結晶材料を対象にしているため，応力場に異方性を取り込む必要がある．そこで，異方性を導入するためにその引数を作る係数テンソル不変量で展開する．まず， $\tilde{T}_{(m)}$ が作る係数テンソル不変量は次式のようになる．

$$J_1 = \mathbf{C}^{(1)} \cdot \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \quad J_2 = \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{C}^{(2)} : \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \dots\dots\dots (4.19)$$

ただし，ここでは金属を対象としているため，微小弾性変形の仮定に基づいて弾性構成式は線形となるよう係数テンソル不変量を選んである．ここで， $\mathbf{C}^{(1)}$ および $\mathbf{C}^{(2)}$ は不変量を作る係数テンソルである．この結果， G_E の引数は次式のように不変量で書き換えることができる．

$$G_E = G_E(\theta, J_1, J_2) \dots\dots\dots (4.20)$$

式 (4.19) を式 (4.18)₂ に代入して展開すれば次式が得られる．

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{(m)}^e &= -\frac{\partial G_E}{\partial J_1} \frac{\partial J_1}{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}} - \frac{\partial G_E}{\partial J_2} \frac{\partial J_2}{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}} \\ &= \mathbf{C}^{(1)'} + \mathbf{C}^{(2)'} : \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \dots\dots\dots (4.21) \end{aligned}$$

ここで，式 (4.21) において温度 θ に関する項は無視し，各係数は次式のように定義してある．

$$\mathbf{C}^{(1)'} \equiv -\frac{\partial G_E}{\partial J_1} \mathbf{C}^{(1)}, \quad \mathbf{C}^{(2)'} \equiv -\frac{\partial G_E}{\partial J_2} \mathbf{C}^{(2)} \dots\dots\dots (4.22)$$

ここで， $\tilde{\mathbf{T}}_{(m)} = \mathbf{0}$ のとき， $\mathbf{E}_{(m)}^e = \mathbf{0}$ とすれば， $\mathbf{C}^{(1)'} = \mathbf{0}$ となる．よって式 (4.21) は次式のようになる．

$$\mathbf{E}_{(m)}^e = \mathbf{C}^{(2)'} : \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \dots\dots\dots (4.23)$$

さらに、微小弾性変形の仮定に基づいて $J \approx 1$ とすれば、Kirchhoff 応力は Cauchy 応力に置き換えることができる。したがって、式 (4.23) は次式のように完全に線形化できる。

$$\mathbf{E}_{(m)}^e = \mathbf{C}^{(2)'} : \mathbf{T}_{(m)} \dots \dots \dots (4.24)$$

さらに、(4.24) の両辺を物質時間微分し現配置へ戻せば、共回転速度で表現された速度形弾性構成式が

$$\overset{\nabla}{\mathbf{T}} = \mathbf{C}^e : \overset{\nabla}{\mathbf{E}}^e \dots \dots \dots (4.25)$$

と得られる。ここで、 \mathbf{C}^e は次式のように定義される。

$$\mathbf{C}^e \equiv \mathbf{C}^{(2)'}{}^{-1} \dots \dots \dots (4.26)$$

また、 \mathbf{C}^e は次式のような性質を持つため、その成分は 21 成分に制限される [補足 D.2 参照]。

$$C_{ijkl}^e = C_{jikl}^e = C_{klij}^e \dots \dots \dots (4.27)$$

4.2.3 化学ポテンシャルの構成式

式 (4.18)₃ を式 (4.17) 右辺第 2 項を考慮し、また $\alpha^{[n]} = 0$ を基準状態とし、このとき $\widetilde{\Pi}^{[n]} = 0$ となるとして基準状態近傍で展開すると次式のようになる。

$$\widetilde{\Pi}^{[n]} = a_0^{[n]} + a_1^{[n]} \alpha^{[n]} + a_2^{[n]} \alpha^{[n]3} + \dots \dots \dots (4.28)$$

ただし、 $a_0^{[n]}$ 、 $a_1^{[n]}$ 、 $a_2^{[n]}$... は定数である。ここで構成式が線形となり、しかも $\alpha^{[n]} = 0$ のとき $\widetilde{\Pi}^{[n]} = 0$ となることを考慮すると次式が成り立つ。

$$a_0^{[n]} = a_2^{[n]} = a_3^{[n]} = \dots = 0 \dots \dots \dots (4.29)$$

以上から、式 (4.28) は次式のようになる。

$$\widetilde{\Pi}^{[n]} = a_1^{[n]} \alpha^{[n]} \dots \dots \dots (4.30)$$

ここで、 $J \approx 1$ から化学ポテンシャルの構成式は次式のように具体化される。

$$\Pi^{[n]} = a^{[n]} \alpha^{[n]} \dots \dots \dots (4.31)$$

ただし、 $a^{[n]} = a_1^{[n]}$ である。

4.3 構成式の散逸部分

4.3.1 熱力学的制限

式 (4.13) および式 (4.15) を考慮して保存部分を取り除けば、式 (4.12) は次式のように散逸仕事率のみ残る。

$$\Phi = \hat{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^p + \mathbf{N}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p - \sum_n \mathbf{p}_{(m)}^{[n]} \cdot \dot{\mathbf{m}}_{(m)}^{[n]} - \sum_n G_r^{[n]} \Pi^{[n]} \geq 0 \dots \dots \dots (4.32)$$

なお、不等式 (4.32) の両辺には J^{-1} が乗じられている。式 (4.32) から、散逸関数を構成している引数は

$$\Phi = \Phi(\hat{\mathbf{T}}_{(m)}, \mathbf{N}_{(m)}, \mathbf{p}_{(m)}^{[n]}, \Pi^{[n]}) \dots \dots \dots (4.33)$$

となる．一方，構成式の散逸部分は，非可逆過程の進むべき方向を定めた最大散逸速度の原理⁽⁷⁰⁾によって決定される．これは「物質の散逸課程は，系の散逸速度を最大にする方向に進み，各熱力学的速度は次の汎関数を最大にする」というものである．古典的な最大塑性仕事の原理は，この原理に包含されている．同原理は一般に式(4.33)を付帯条件として，次式の汎関数 I に極値解を与えることで定式化される．

$$I = \int_v \left\{ \hat{T}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^p + N_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p - \sum_n \mathbf{p}_{(m)}^{[n]} \cdot \mathbf{m}_{(m)}^{[n]} - \sum_n G_r^{[n]} \Pi^{[n]} - \hat{\lambda} \left[\Phi - \left(\hat{T}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^p + N_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p - \sum_n \mathbf{p}_{(m)}^{[n]} \cdot \mathbf{m}_{(m)}^{[n]} - \sum_n G_r^{[n]} \Pi^{[n]} \right) \right] \right\} dv \dots \dots \dots (4.34)$$

ここで， $\hat{\lambda}$ は Lagrange の未定乗数である．式(4.34)より汎関数 I の引数も散逸関数と同様に次式のように選ぶことができる．

$$I = I(\hat{T}_{(m)}, N_{(m)}, \mathbf{p}_{(m)}^{[n]}, \Pi^{[n]}) \dots \dots \dots (4.35)$$

式(4.34)の第1変分を求めると次式が得られる．

$$\delta I = \int_v \left\{ (1 + \hat{\lambda}) \left[\left(\mathbf{D}_{(m)}^p - \bar{\nu} \frac{\partial \Phi}{\partial \hat{T}_{(m)}} \right) \cdot \delta \hat{T}_{(m)} + \left(\dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p - \bar{\nu} \frac{\partial \Phi}{\partial N_{(m)}} \right) \cdot \delta N_{(m)} + \sum_n \left(-\mathbf{m}_{(m)}^{[n]} - \bar{\nu} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{p}_{(m)}^{[n]}} \right) \cdot \delta \mathbf{p}_{(m)}^{[n]} + \sum_n \left(-G_r^{[n]} - \bar{\nu} \frac{\partial \Phi}{\partial \Pi^{[n]}} \right) \delta \Pi^{[n]} \right] \right\} dv \dots \dots \dots (4.36)$$

ここで， $\bar{\nu} \equiv \hat{\lambda} / (1 + \hat{\lambda})$ である．汎関数 I の極値条件 $\delta I = 0$ が任意の変分に対して常に成立するためには各変分の係数が零でなければならない．したがって，本変分問題の極値解として次式を得る．

$$\mathbf{D}_{(m)}^p = \bar{\nu} \frac{\partial \Phi}{\partial \hat{T}_{(m)}}, \quad \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p = \bar{\nu} \frac{\partial \Phi}{\partial N_{(m)}}, \quad \mathbf{m}_{(m)}^{[n]} = -\bar{\nu} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{p}_{(m)}^{[n]}}, \quad G_r^{[n]} = -\bar{\nu} \frac{\partial \Phi}{\partial \Pi^{[n]}} \dots \dots \dots (4.37)$$

式(4.33)を式(4.37)に適応すれば，各構成量の引数も Φ の引数と同様に

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{D}_{(m)}^p &= \mathbf{D}_{(m)}^p(\hat{T}_{(m)}, N_{(m)}, \mathbf{p}_{(m)}^{[n]}, \Pi^{[n]}) \\ \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p &= \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p(\hat{T}_{(m)}, N_{(m)}, \mathbf{p}_{(m)}^{[n]}, \Pi^{[n]}) \\ \mathbf{m}_{(m)}^{[n]} &= \mathbf{m}_{(m)}^{[n]}(\hat{T}_{(m)}, N_{(m)}, \mathbf{p}_{(m)}^{[n]}, \Pi^{[n]}) \\ G_r^{[n]} &= G_r^{[n]}(\hat{T}_{(m)}, N_{(m)}, \mathbf{p}_{(m)}^{[n]}, \Pi^{[n]}) \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (4.38)$$

となる．以上のことから，散逸量の構成式は，散逸関数によって支配されていることがわかる．通常の塑性論においては式(4.37)₁および式(4.37)₂に基づいて塑性構成式を導くが，結晶塑性論においては式(2.65)から \mathbf{D}^p が運動学的に決定されるので塑性構成式が不要である．

4.3.2 転位密度流束の構成式

式(4.32)の第1項および第2項を結晶塑性モデルに適合するよう相当量を用いて表示すれば，次式のような散逸関数が得られる [補足 D.3 参照] ．

$$\Phi = \sum_\alpha \tau^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \sum_\alpha \nu^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} - \sum_n \mathbf{p}_{(m)}^{[n]} \cdot \mathbf{m}_{(m)}^{[n]} - \sum_n G_r^{[n]} \Pi^{[n]} \geq 0 \dots \dots \dots (4.39)$$

ここで、 $\tau^{(\alpha)}$ は有効分解せん断応力および $\nu^{(\alpha)}$ はすべり速度に共役な分解応力である。式 (4.39) に対して 4.3.1 項と同様の検討を加えることによって、 Φ の引数を

$$\Phi = \Phi(\tau^{(\alpha)}, \nu^{(\alpha)}, \mathbf{p}_{(m)}^{[n]}, \Pi^{[n]}) \dots \dots \dots (4.40)$$

と制限できる。また、変分問題の極値解として

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \bar{\nu} \frac{\partial \Phi}{\partial \tau^{(\alpha)}}, \quad \dot{\nu}^{(\alpha)} = \bar{\nu} \frac{\partial \Phi}{\partial \nu^{(\alpha)}}, \quad \mathbf{m}_{(m)}^{[n]} = -\bar{\nu} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{p}_{(m)}^{[n]}}, \quad G_r^{[n]} = -\bar{\nu} \frac{\partial \Phi}{\partial \Pi^{[n]}} \dots \dots \dots (4.41)$$

が得られ、 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 、 $\dot{\nu}^{(\alpha)}$ 、 $\mathbf{m}_{(m)}^{[n]}$ および $G_r^{[n]}$ の引数は

$$\left. \begin{aligned} \dot{\gamma}^{(\alpha)} &= \dot{\gamma}^{(\alpha)}(\tau^{(\alpha)}, \nu^{(\alpha)}, \mathbf{p}_{(m)}^{[n]}, \Pi^{[n]}) \\ \dot{\nu}^{(\alpha)} &= \dot{\nu}^{(\alpha)}(\tau^{(\alpha)}, \nu^{(\alpha)}, \mathbf{p}_{(m)}^{[n]}, \Pi^{[n]}) \\ \mathbf{m}_{(m)}^{[n]} &= \mathbf{m}_{(m)}^{[n]}(\tau^{(\alpha)}, \nu^{(\alpha)}, \mathbf{p}_{(m)}^{[n]}, \Pi^{[n]}) \\ G_r^{[n]} &= G_r^{[n]}(\tau^{(\alpha)}, \nu^{(\alpha)}, \mathbf{p}_{(m)}^{[n]}, \Pi^{[n]}) \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (4.42)$$

となる。式 (4.41)₃ を現配置表示すると次式のようになる。

$$\mathbf{m}^{[n]} = -\bar{\nu} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{p}^{[n]}} \dots \dots \dots (4.43)$$

ここで、式 (4.43) における散逸関数 Φ をその引数を作るスカラー不変量多項式で表現するため、 $\mathbf{p}^{[n]}$ の不変量を考えれば

$$I_{p1} = \mathbf{p}^{[n]} \cdot \mathbf{p}^{[n]} \dots \dots \dots (4.44)$$

のみとなる。したがって、散逸関数の関数形は次式のようになる。

$$\Phi = \Phi(\tau^{(\alpha)}, \nu^{(\alpha)}, I_{p1}, \Pi^{[n]}) \dots \dots \dots (4.45)$$

式 (4.45) を考慮して式 (4.43) を展開すれば、

$$\mathbf{m}^{[n]} = -\bar{\nu} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \tau^{(\alpha)}} \frac{\partial \tau^{(\alpha)}}{\partial \mathbf{p}^{[n]}} + \frac{\partial \Phi}{\partial \nu^{(\alpha)}} \frac{\partial \nu^{(\alpha)}}{\partial \mathbf{p}^{[n]}} + \frac{\partial \Phi}{\partial I_{p1}} \frac{\partial I_{p1}}{\partial \mathbf{p}^{[n]}} + \frac{\partial \Phi}{\partial \Pi^{[n]}} \frac{\partial \Pi^{[n]}}{\partial \mathbf{p}^{[n]}} \right) \dots \dots \dots (4.46)$$

となる。単純化のため式 (4.46) における右辺第 1 項、第 2 項および第 4 項を消去すれば、

$$\mathbf{m}^{[n]} = -\bar{\nu} \frac{\partial \Phi}{\partial I_{p1}} \frac{\partial I_{p1}}{\partial \mathbf{p}^{[n]}} = -\bar{\nu}_1 \frac{\partial \mathbf{p}^{[n]} \cdot \mathbf{p}^{[n]}}{\partial \mathbf{p}^{[n]}} = -2\bar{\nu}_1 \mathbf{p}^{[n]} \dots \dots \dots (4.47)$$

のように書き換えられる。ここで、 $\bar{\nu}_1 = \bar{\nu} \partial \Phi / \partial I_{p1}$ である。式 (4.2) を式 (4.47) に代入することによって

$$\mathbf{m}^{[n]} = -2\bar{\nu}_1 \text{grad} \Pi^{[n]} \dots \dots \dots (4.48)$$

となり、転位流は、化学ポテンシャルのこう配を駆動力として生じ、ポテンシャルの高い方から低い方へ流れることがわかる。さらに、式 (4.31) を (4.48) に代入すれば、均一温度場における転位密度流束 $\mathbf{m}^{[n]}$ の構成式が

$$\begin{aligned} \mathbf{m}^{[n]} &= -2\bar{\nu}_1 \text{grad}(a^{[n]} \alpha^{[n]}) \\ &= -2\bar{\nu}_1 a^{[n]} \text{grad} \alpha^{[n]} \end{aligned}$$

$$\equiv -D^{[n]} \text{grad} \alpha^{[n]} \dots \dots \dots (4.49)$$

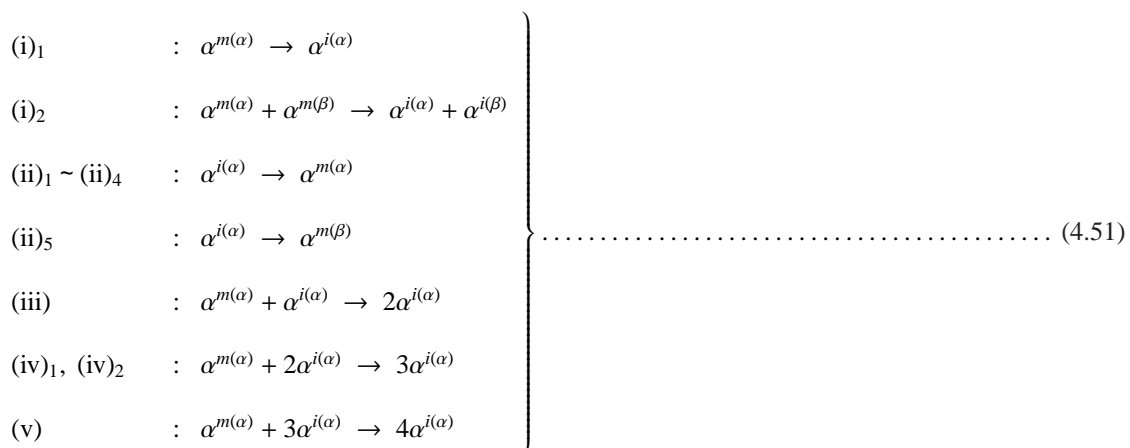
と得られる．ここで，拡散係数 $D^{[n]}$ は

$$D^{[n]} = 2\bar{v}_1 a^{[n]} = 2\bar{v} \frac{\partial \Phi}{\partial I_{p1}} a^{[n]} \dots \dots \dots (4.50)$$

と表され，転位の動きやすさに関する係数を意味する．このように，転位密度流束は化学ポテンシャルを介して転位密度依存性を持つといえる．

4.3.3 転位の反応項の構成式

本研究において転位の反応 [補足 D.4] は図 4.1 のモデルに従うものとする．図 4.1(i)₁ のモデルはダイポールの生成，図 4.1(i)₂ のモデルは Lomer-Cottrell 固着による可動転位の不動化過程を表している．また，図 4.1(ii)₁ のモデルは林立転位等の障害物によって不動化していた転位が外力の作用によって可動転位へと自由化する過程，図 4.1(ii)₂ はダイポール分解および図 4.1(ii)₃ は Lomer-Cottrell 固着に起因する不動転位の分解過程を表している．さらに，図 4.1(ii)₄ および (ii)₅ はそれぞれ熱活性に伴う刃状転位転位の上昇運動およびらせん転位の交差すべりにより不動転位が可動化する過程を表している．ここで，らせん転位が交差すべりをするメカニズムとして，転位線全体が収縮するか，転位線の一部が収縮し交差すべりが生じてから，現すべり面に残っている部分が次第に他すべり面に移ってくるといった挙動が考えられている．この場合，転位線が収縮するためのエネルギーが熱活性化過程で起こりうる程度の大きさであれば，高温であるほど交差すべりが起こりやすい．また，図 4.1(iii)，(iv)₁ および (v) のモデルは既に障害物にトラップされて不動化している転位に可動転位が次々と堆積して不動転位が蓄積する過程を表している．なお，図 4.1(iv)₂ はトライポールの生成過程を表している．本モデルでは図 4.1(v) に示す 4 次の転位蓄積項までしか考慮していないが，実現象としては 5 次以降に相当する転位蓄積も生じると考えられる．ただし，5 次以降の転位蓄積項を考慮しても発現する転位パターンの傾向にほとんど変化がないため，5 次以降の転位蓄積を無視し，転位セル構造の形成を記述する数理モデルの転位蓄積項としては 4 次までの転位蓄積モデルを採用する⁽⁷¹⁾．以上のモデルに基づき，これらの転位挙動をすべり系 α に対する反応式で書くと次式のようなになる．



また，他のすべり系に対する反応式は，式 (4.51) における α を β に置き換えたものとなり，他のすべり系においても同じ反応が起こっていることになる．以降では簡単化のためにすべり系 α に対する反応のみを考え，反応-拡散方程式の導出に関しては他のすべり系に関する項は考慮しないため， $()^{(\alpha)}$ の記述を省略

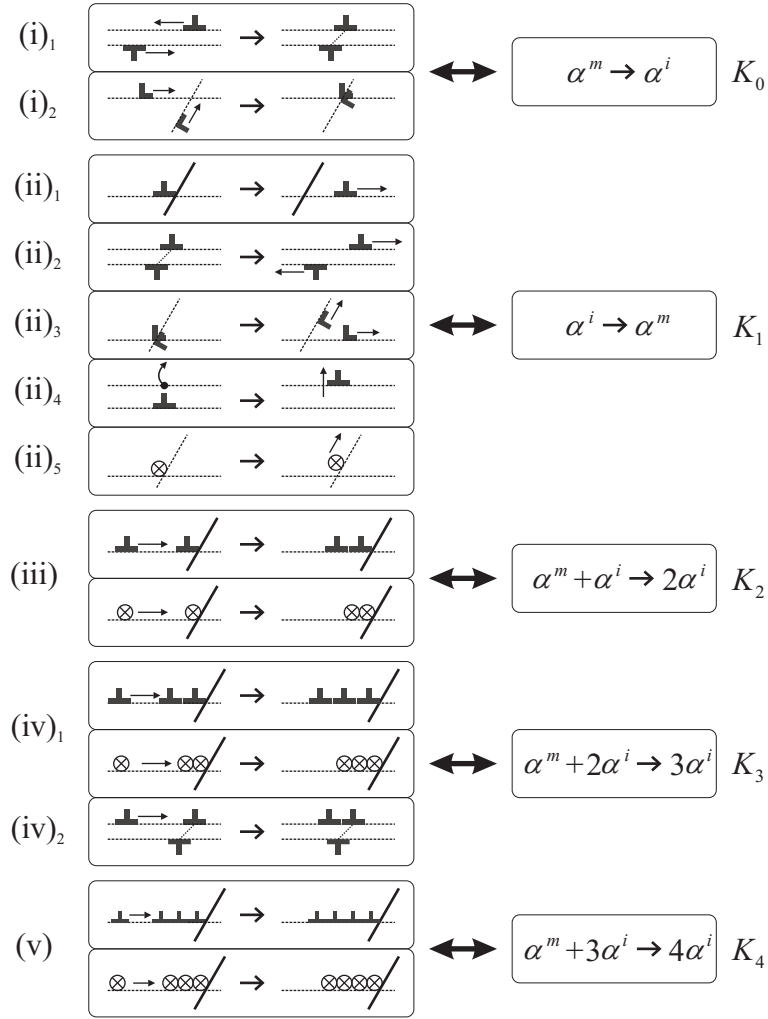


Fig. 4.1 Reaction models of dislocations

する．したがって，反応式 (4.51) は次式のようにまとめることができる．

$$\left. \begin{aligned} \alpha^m \rightarrow \alpha^i, & \quad \alpha^i \rightarrow \alpha^m, & \quad \alpha^m + \alpha^i \rightarrow 2\alpha^i, \\ \alpha^m + 2\alpha^i \rightarrow 3\alpha^i, & \quad \alpha^m + 3\alpha^i \rightarrow 4\alpha^i \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (4.52)$$

次に，転位反応項の式 (4.41)₄ に式 (4.31) を代入すると次式のようなになる．

$$G_r^{[n]} = -\bar{\nu} \frac{\partial \Phi}{\partial \Pi^{[n]}} = r^{[n]} \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha^{[n]}} \dots\dots\dots (4.53)$$

ここで， $r^{[n]} \equiv -\bar{\nu}/a^{[n]}$ である．式 (4.52) から転位の反応項の構成式には α^m ， α^i ， $\alpha^m \alpha^i$ ， $\alpha^m \alpha^i{}^2$ および $\alpha^m \alpha^i{}^3$ を有する項のみを考慮すればよいので，式 (4.53) を展開した結果は次式のようなになる．

$$\begin{aligned} G_r^{[n]} = & r^{[n]} \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha^m \alpha^{[n]}} \frac{\partial \alpha^m \alpha^{[n]}}{\partial \alpha^{[n]}} + r^{[n]} \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha^i \alpha^{[n]}} \frac{\partial \alpha^i \alpha^{[n]}}{\partial \alpha^{[n]}} + r^{[n]} \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha^m \alpha^i \alpha^{[n]}} \frac{\partial \alpha^m \alpha^i \alpha^{[n]}}{\partial \alpha^{[n]}} \\ & + r^{[n]} \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha^m \alpha^i{}^2 \alpha^{[n]}} \frac{\partial \alpha^m \alpha^i{}^2 \alpha^{[n]}}{\partial \alpha^{[n]}} + r^{[n]} \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha^m \alpha^i{}^3 \alpha^{[n]}} \frac{\partial \alpha^m \alpha^i{}^3 \alpha^{[n]}}{\partial \alpha^{[n]}} \end{aligned}$$

$$= b_1^{[n]} \alpha^m + b_2^{[n]} \alpha^i + b_3^{[n]} \alpha^m \alpha^i + b_4^{[n]} \alpha^m \alpha^{i^2} + b_5^{[n]} \alpha^m \alpha^{i^3} \dots (4.54)$$

ただし、各係数は次式のように定義される。

$$\left. \begin{aligned} b_1^m &\equiv 2r^m \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha^{m^2}}, & b_2^m &\equiv r^m \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha^m \alpha^i}, & b_3^m &\equiv 2r^m \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha^{m^2} \alpha^i}, \\ b_4^m &\equiv 2r^m \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha^{m^2} \alpha^{i^2}}, & b_5^m &\equiv 2r^m \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha^{m^2} \alpha^{i^3}}, \\ b_1^i &\equiv r^i \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha^m \alpha^i}, & b_2^i &\equiv 2r^i \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha^{i^2}}, & b_3^i &\equiv 2r^i \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha^m \alpha^{i^2}}, \\ b_4^i &\equiv 3r^i \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha^m \alpha^{i^3}}, & b_5^i &\equiv 4r^i \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha^m \alpha^{i^4}} \end{aligned} \right\} \dots (4.55)$$

式(4.54)を式(4.51)の反応モデルに従い整理すれば、転位反応項の構成式として次式を得る。

$$\left. \begin{aligned} G_r^m &= -K_0 \alpha^m + K_1 \alpha^i - K_2 \alpha^m \alpha^i - K_3 \alpha^m \alpha^{i^2} - K_4 \alpha^m \alpha^{i^3} \\ G_r^i &= K_0 \alpha^m - K_1 \alpha^i + K_2 \alpha^m \alpha^i + K_3 \alpha^m \alpha^{i^2} + K_4 \alpha^m \alpha^{i^3} \end{aligned} \right\} \dots (4.56)$$

ただし、各係数は次式のように定義される。

$$\left. \begin{aligned} K_0 &\equiv b_1^m \equiv -b_1^i, & K_1 &\equiv -b_2^m \equiv b_2^i, & K_2 &\equiv -b_3^m \equiv b_3^i, \\ K_3 &\equiv b_4^m \equiv -b_4^i, & K_4 &\equiv -b_5^m \equiv b_5^i \end{aligned} \right\} \dots (4.57)$$

このように転位反応項 $G_r^{[n]}$ は化学ポテンシャルを介して転位密度依存性を持つ。

4.3.4 転位の生成・消滅項の構成式

転位の生成、消滅モデルは図4.2に従うものとする。図4.2(i)のモデルは転位源から転位ループが発生する過程を表している。ただしステージII以降では、2次すべり系の活動が活発化することで短範囲に林立転位が存在するため、発生した転位は全てある時間経過の後、林立転位等の障害物にトラップされるものとする。また、図4.2(ii)のモデルは点欠陥の拡散に伴う転位ダイポールの対消滅を表している。さらに図4.2(iii)は動的回復を表すモデルであり、タンブルにおける不動転位に異符号の可動転位が出会うことで転位の対消滅が生じる過程を示している。これはステージIII以降において顕著に起こる現象である。以上のモデルをすべり系 α に対する反応式で書くと、次式のように表すことができる。

$$\left. \begin{aligned} \text{(i)} & : 0 \rightarrow \alpha^{i(\alpha)} \\ \text{(ii)} & : 2\alpha^{i(\alpha)} \rightarrow 0 \\ \text{(iii)} & : \alpha^{m(\alpha)} + \alpha^{i(\alpha)} \rightarrow 0 \end{aligned} \right\} \dots (4.58)$$

また、他のすべり系に対する反応式は式(4.58)における α を β に書き換えたものであり、他のすべり系においても同様の反応が起こっているといえる。そこで、前項と同様に (α) の記述を省略し、式(4.58)を

$$0 \rightarrow \alpha^i, \quad 2\alpha^i \rightarrow 0, \quad \alpha^m + \alpha^i \rightarrow 0 \dots (4.59)$$

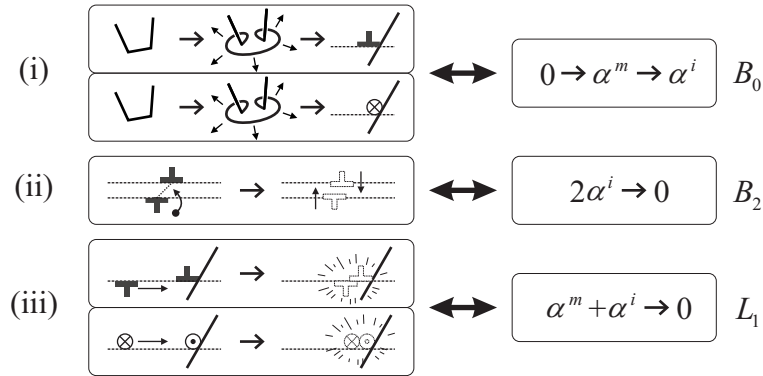


Fig. 4.2 Production and annihilation models of dislocations

のように書き換える．反応式 (4.59) のモデルに従い転位生成・消滅項を導入すれば， G_p^m および G_p^i はそれぞれ次式のようになる．

$$\left. \begin{aligned} G_p^m &= -L_1 \alpha^m \alpha^i \\ G_p^i &= B_0 - B_2 \alpha^i{}^2 - L_1 \alpha^m \alpha^i \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (4.60)$$

4.4 反応-拡散方程式

式 (4.49) を用いて転位密度流束 $m^{[n]}$ の発散を求めれば

$$-\text{div} m^{[n]} = \text{div}(D^{[n]} \text{grad} \alpha^{[n]}) = \nabla \cdot (D^{[n]} \nabla \alpha^{[n]}) \dots \dots \dots (4.61)$$

となる．ここで，式 (4.56)，式 (4.60) および式 (4.61) の各構成式を転位密度の釣り合い方程式 (3.21) に代入すれば，可動転位密度および不動転位密度に対する反応-拡散方程式がそれぞれ次式のように得られる．

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \alpha^m}{\partial t} &= \nabla \cdot (D^m \nabla \alpha^m) - K_0 \alpha^m + K_1 \alpha^i - K_2 \alpha^m \alpha^i - K_3 \alpha^m \alpha^i{}^2 - K_4 \alpha^m \alpha^i{}^3 \\ &\quad - L_1 \alpha^m \alpha^i \\ \frac{\partial \alpha^i}{\partial t} &= \nabla \cdot (D^i \nabla \alpha^i) + K_0 \alpha^m - K_1 \alpha^i + K_2 \alpha^m \alpha^i + K_3 \alpha^m \alpha^i{}^2 + K_4 \alpha^m \alpha^i{}^3 \\ &\quad - L_1 \alpha^m \alpha^i + B_0 - B_2 \alpha^i{}^2 \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (4.62)$$

得られた反応-拡散方程式 (4.62) は可動転位密度および不動転位密度による連立形反応-拡散方程式であるため，集団転位によるセル構造やサブグレインなどの自己組織化による空間パターンングを表現することが可能である．なお，本研究において拡散係数 $D^{[n]}$ は解析領域で一定としているため， $D^{[n]}$ の空間こう配は零となる．

4.5 硬化則および各速度係数の引数の検討

式 (4.39) に、 $\Phi = \dot{\bar{\Psi}}_d$ という関係を代入すれば、

$$\dot{\bar{\Psi}}_d = \sum_{\alpha} \tau^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \nu^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} - \sum_n \mathbf{m}_{(m)}^{[n]} \cdot \dot{\mathbf{p}}_{(m)}^{[n]} - \sum_n G_r^{[n]} \dot{\Pi}^{[n]} \geq 0 \dots\dots\dots (4.63)$$

となる。ここで、 $G_r^{[n]} \equiv \dot{g}_r^{[n]}$ とおき、式 (3.2) を考慮して式 (4.63) に対して Legendre 変換：

$$\bar{G}_d = \bar{\Psi}_d + \bar{\boldsymbol{\mu}}_{(m)}^{[n]} \cdot \mathbf{p}_{(m)}^{[n]} + g_r^{[n]} \Pi^{[n]} \dots\dots\dots (4.64)$$

を施せば、次式が得られる。

$$\dot{\bar{G}}_d = \sum_{\alpha} \tau^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \nu^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} - \sum_n \bar{\boldsymbol{\mu}}_{(m)}^{[n]} \cdot \dot{\mathbf{p}}_{(m)}^{[n]} - \sum_n g_r^{[n]} \dot{\Pi}^{[n]} \geq 0 \dots\dots\dots (4.65)$$

式 (4.65) から、 \bar{G}_d の関数形は以下のように決定できる。

$$\bar{G}_d = \bar{G}_d(\gamma^{(\alpha)}, \dot{\gamma}^{(\alpha)}, \mathbf{p}_{(m)}^{[n]}, \Pi^{[n]}) \dots\dots\dots (4.66)$$

また、等存在の公理から有効分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ の関数形も \bar{G}_d と同様に次式のようになる。

$$\tau^{(\alpha)} = \tau^{(\alpha)}(\gamma^{(\alpha)}, \dot{\gamma}^{(\alpha)}, \mathbf{p}_{(m)}^{[n]}, \Pi^{[n]}) \dots\dots\dots (4.67)$$

式 (4.67) の有効分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ の硬化則を与える関数形には、化学ポテンシャル $\Pi^{[n]}$ を介して転位密度が導入されることになる。以上の検討から、有効分解せん断応力に転位密度を導入することが熱力学的体系にも整合しているといえる。

一方、式 (4.50) および式 (4.55) から、反応-拡散方程式 (4.62) における拡散係数および各速度係数は式 (4.45) に示す散逸関数と同様の引数を持つことがわかる。ここで、各速度係数および拡散係数を以下のようにまとめて、

$$K_0, K_1, K_2, K_3, K_4, B_0, B_2, L_1, D^m, D^i \rightarrow A \dots\dots\dots (4.68)$$

のように応力効果係数 A として代表させれば、 A の引数は次式のように表すことができる。

$$A = A(\tau^{(\alpha)}, \nu^{(\alpha)}, I_{p1}, \Pi^{[n]}) \dots\dots\dots (4.69)$$

したがって、各速度係数および拡散係数は分解せん断応力などに依存していることがわかる。

4.6 線形安定性解析

線形安定性解析とは、Turing 不安定性を議論するために、非線形問題の解を基準状態と摂動項との和であるとして式を摂動展開した上で高次の非線形項を無視し系を線形化し簡単化することによって、摂動に対する系の応答を調べることで系の安定性を調べる解析方法である。その線形安定性解析において、時間的に周期的な振動である Hopf 分岐および空間的に周期的な振動である Turing 分岐の条件が得られる。さらに、Turing 分岐および Hopf 分岐における応力振幅項と拡散係数比の関係、セル構造およびサブグレイン構造の特性長さを与える波長が定式化され、セル構造の形成領域が応力振幅と拡散係数の比に依存することがわかる⁽⁴¹⁾⁽⁴²⁾。

4.6.1 ゆらぎの導入

安定性の性質は様々な種類の摂動を与えた際の系の応答によって決まる．そこで，内部ゆらぎや外部かく乱に常に影響されているある X_e について，状態変数の集合である基準状態 X_0 を考える．外力がなく，完全に一様で時間依存しない環境に置かれていて，まったくバイアスの掛かっていない系の場合には， X_0 は時間依存しない空間的に一様な解を表わし，そのような条件のもとでの存在が予想される．これは系内に自己組織化および複雑な振る舞いが存在しないことを意味する．さらに一般に， X_0 として外的条件のもとで許される限りの高い対称性を持つ状態を選ぶことができる．つまり， X_0 は平衡からの距離を増大させていったときに，平衡に近い振舞いの延長線である熱力学的分岐上に存在する．このように考えると，自己組織化とは， X_0 から新しいタイプの解への移行と見ることができる．

そこでまず，可動転位密度 α^m および不動転位密度 α^i を基準状態およびゆらぎを表す摂動項との和として次のように表す．

$$\left. \begin{aligned} \alpha^m &= \alpha_0^m + \tilde{\alpha}^m = \alpha_0^m + \xi^m \exp[i\tilde{q} \cdot \mathbf{x} + \omega t] \\ \alpha^i &= \alpha_0^i + \tilde{\alpha}^i = \alpha_0^i + \xi^i \exp[i\tilde{q} \cdot \mathbf{x} + \omega t] \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (4.70)$$

ここで， α_0^m および α_0^i はそれぞれ可動転位密度および不動転位密度の基準状態， $\tilde{\alpha}^m$ および $\tilde{\alpha}^i$ はそれぞれ可動転位密度および不動転位密度のゆらぎ， ξ はゆらぎの振幅， \tilde{q} は空間周波数を定める波数ベクトル， \mathbf{x} は位置ベクトルおよび ω は時間的な角振動数であり，ゆらぎ $\tilde{\alpha}^m$ および $\tilde{\alpha}^i$ には時間的・空間的な全ての周波数成分が含まれていることがわかる．すなわち，定常解が不安定化したときに期待される構造の周波数は，全てこの中から選択されると考えてよい．また， i は $i^2 = -1$ で定義される量である．

4.6.2 特性方程式

式 (4.62) に定常解 $\alpha^m = \alpha_0^m$ および $\alpha^i = \alpha_0^i$ を代入すれば，空間的にも時間的にも定常な基準状態の式が

$$\left. \begin{aligned} -K_0\alpha_0^m + K_1\alpha_0^i - K_2\alpha_0^m\alpha_0^i - K_3\alpha_0^m\alpha_0^{i^2} - K_4\alpha_0^m\alpha_0^{i^3} - L_1\alpha_0^m\alpha_0^i &= 0 \\ K_0\alpha_0^m - K_1\alpha_0^i + K_2\alpha_0^m\alpha_0^i + K_3\alpha_0^m\alpha_0^{i^2} + K_4\alpha_0^m\alpha_0^{i^3} - L_1\alpha_0^m\alpha_0^i + B_0 - B_2\alpha_0^{i^2} &= 0 \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (4.71)$$

と得られる．式 (4.71) は，基準状態では可動転位密度も不動転位密度も変化しない平衡状態を意味する．さらに式 (4.70) を式 (4.62) に代入した結果を，式 (4.71) の関係を考慮して整理すれば次式が得られる．

$$\left. \begin{aligned} \omega\xi^m &= \left(-D^m\tilde{q}^2 - K_0 - K_2\alpha_0^i - K_3\alpha_0^{i^2} - K_4\alpha_0^{i^3} - L_1\alpha_0^i\right)\xi^m \\ &\quad + \left(K_1 - K_2\alpha_0^m - 2K_3\alpha_0^m\alpha_0^i - 3K_4\alpha_0^m\alpha_0^{i^2} - L_1\alpha_0^m\right)\xi^i \\ \omega\xi^i &= \left(K_0 + K_2\alpha_0^i + K_3\alpha_0^{i^2} + K_4\alpha_0^{i^3} - L_1\alpha_0^i\right)\xi^m \\ &\quad + \left(-D^i\tilde{q}^2 - K_1 + K_2\alpha_0^m + 2K_3\alpha_0^m\alpha_0^i + 3K_4\alpha_0^m\alpha_0^{i^2} - 2B_2\alpha_0^i - L_1\alpha_0^m\right)\xi^i \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (4.72)$$

ただし，線形安定性の原理⁽⁸⁾に基づき， $\xi^{[n]}$ に関する非線形項の寄与は無視し，系を線形化してある．ここで，式 (4.72) に示した連立方程式から得られるヤコビ行列の固有値 ω を用いて，波数 \tilde{q} に対する安定性の性質について検討する．固有値 ω は次式で示される特性方程式の解として得られる [補足 D.5 参照]．

$$\omega^2 - \kappa\omega + \Delta = 0 \dots\dots\dots (4.73)$$

ただし, κ および Δ は次式のように表される.

$$\begin{aligned} \kappa = & -(D^m + D^i)\dot{q}^2 - K_0 - K_2\alpha_0^i - K_3\alpha_0^{i^2} - K_4\alpha_0^{i^3} - 2B_2\alpha_0^i \\ & - K_1 + K_2\alpha_0^m + 2K_3\alpha_0^m\alpha_0^i + 3K_4\alpha_0^m\alpha_0^{i^2} - L_1\alpha_0^m - L_1\alpha_0^i \dots \dots \dots (4.74) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta = & D^m D^i \dot{q}^4 - \left\{ -D^m \left(2B_2\alpha_0^i + K_1 - K_2\alpha_0^m - 2K_3\alpha_0^m\alpha_0^i \right. \right. \\ & \left. \left. - 3K_4\alpha_0^m\alpha_0^{i^2} + L_1\alpha_0^m \right) - D^i \left(K_0 + K_2\alpha_0^i + K_3\alpha_0^{i^2} + K_4\alpha_0^{i^3} + L_1\alpha_0^i \right) \right\} \dot{q}^2 \\ & + 2 \left(B_2\alpha_0^i + L_1\alpha_0^m \right) \left(K_0 + K_2\alpha_0^i + K_3\alpha_0^{i^2} + K_4\alpha_0^{i^3} \right) \\ & + 2L_1\alpha_0^i \left(K_1 - K_2\alpha_0^m - 2K_3\alpha_0^m\alpha_0^i - 3K_4\alpha_0^m\alpha_0^{i^2} + B_2\alpha_0^i \right) \dots \dots \dots (4.75) \end{aligned}$$

4.6.3 絶対安定条件

ゆらぎを含む α^m および α^i の解の形は式 (4.70) であるから, (4.73) の2つの解を ω_1 および ω_2 としたとき

$$\omega_1 \leq 0, \quad \omega_2 \leq 0 \dots \dots \dots (4.76)$$

とともに満たせば, $t \rightarrow \infty$ のときゆらぎの項は $\exp(\omega t) \rightarrow 0$ と収束し, α^m および α^i の解は絶対安定となる. 一方,

$$\omega_1 > 0, \quad \omega_2 > 0 \dots \dots \dots (4.77)$$

を満たせば, ゆらぎは発散するため, α^m および α^i の解は絶対不安定となる. ここで, 式 (4.76) を満足するための κ および Δ の条件を導くために, 式 (4.73) の解を

$$\omega = \frac{\kappa \pm \sqrt{\kappa^2 - 4\Delta}}{2} \dots \dots \dots (4.78)$$

と書けば, 2根 ω_1 および ω_2 が常に負となるための条件が次式のように得られる.

$$\kappa \leq 0, \quad \Delta \geq 0 \dots \dots \dots (4.79)$$

このことは, 空間的に一様な摂動が加えられても, 拡散の入った式において空間的に一様な定常解は元の定常状態に戻ることを意味している. すなわち, 空間的な一様解は安定定常状態となる.

4.6.4 不安定化する臨界条件

式 (4.76) に示す条件から外れたとき, 系は時間的あるいは空間的に不安定となる. 式 (4.78) において $\kappa = 0$ とすれば, 角振動数の解が

$$\omega = \pm \sqrt{-\Delta} = \pm i \sqrt{\Delta} \dots \dots \dots (4.80)$$

となる. 式 (4.80) において $\Delta > 0$ のとき, 式 (4.70) の解は時間的な周期解となる. 一方, 式 (4.78) において $\Delta = 0$ とすれば次式が得られる.

$$\omega = \frac{\kappa \pm \kappa}{2} = 0, \quad \kappa \dots \dots \dots (4.81)$$

式 (4.81) から, $\exp(\omega t) = 1$, $\exp(\kappa t)$ となり, $\kappa \leq 0$ であることを考慮すれば, 式 (4.70) の解は時間的な振動のない空間的な周期的振動を表すことがわかる. ただし, ここでは時間と共に転位密度が零へ収束することを避けるために, $\exp(\omega t) = 1$ を選択する. 以上によって, この系が不安定化する臨界条件は次式のようになる.

$$\kappa = 0, \Delta > 0 \dots\dots\dots (4.82)$$

$$\kappa < 0, \Delta = 0 \dots\dots\dots (4.83)$$

4.6.5 Hopf 分岐

式 (4.82) に示す不安定条件を満たすとき, 系は時間的な振動を起こす. この時間的な振動を Hopf 分岐という. 以下では Hopf 分岐を起こす条件について導出する. 式 (4.82)₁ を式 (4.74) に適用すれば

$$\begin{aligned} \kappa = & -(D^m + D^i)\check{q}^2 - K_0 - K_2\alpha_0^i - K_3\alpha_0^{i^2} - K_4\alpha_0^{i^3} - 2B_2\alpha_0^i \\ & - K_1 + K_2\alpha_0^m + 2K_3\alpha_0^m\alpha_0^i + K_4\alpha_0^m\alpha_0^{i^2} - L_1\alpha_0^m - L_1\alpha_0^i = 0 \dots\dots\dots (4.84) \end{aligned}$$

となる. ここで, 式 (4.82)₂ によって式 (4.75) における \check{q}^2 が虚数になることを考慮し, Hopf 分岐を起こす振幅を $K_1 \equiv K_1^H$ とおいて式 (4.84) を整理すれば, 応力振幅 K_1^H の式が次のように得られる [補足 D.6 参照].

$$K_1^H = \frac{X(X + 2B_2\alpha_0^i)}{-K_0 + K_3\alpha_0^{i^2} + 2K_4\alpha_0^{i^3} - 2L_1\alpha_0^i} \dots\dots\dots (4.85)$$

ただし, X は

$$X \equiv K_0 + K_2\alpha_0^i + K_3\alpha_0^{i^2} + K_4\alpha_0^{i^3} + L_1\alpha_0^i \dots\dots\dots (4.86)$$

である. 式 (4.85) には拡散係数 $D^{[m]}$ が含まれていないことから, Hopf 分岐においては応力振幅 K_1^H が拡散係数に依存しないことがわかる.

4.6.6 Turing 分岐

式 (4.83) に示す不安定条件を満たすとき, 系は空間的な振動を起こす. この空間的な振動を Turing 分岐という. 以下では Turing 分岐を起こす条件について導出する. 式 (4.75) を式 (4.86) を用いて整理し, 式 (4.83)₂ の条件を考慮すれば次式が得られる.

$$\begin{aligned} \Delta = D^m D^i \check{q}^4 - \left\{ -D^m \left(2B_2\alpha_0^i + K_1 - \alpha_0^m Y + L_1\alpha_0^m \right) - D^i X \right\} \check{q}^2 \\ + 2B_2\alpha_0^i X + 2L_1\alpha_0^m \left(2X - \alpha_0^i Y - L_1\alpha_0^i \right) = 0 \dots\dots\dots (4.87) \end{aligned}$$

ただし Y は

$$Y \equiv K_2 + 2K_3\alpha_0^i + 3K_4\alpha_0^{i^2} \dots\dots\dots (4.88)$$

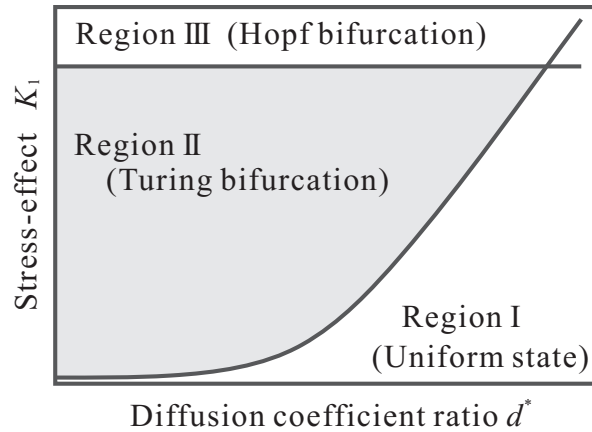


Fig. 4.3 Instability diagram with K_1 and d^*

と定義される。Turing 分岐が起こるのは式 (4.79) の安定領域から $\Delta = 0$ となった瞬間の臨界状態であるから、 $\Delta = \Delta(\check{q}^2)$ の極小値が零となる場合である。この極小値を与える \check{q}^2 は式 (4.75) から次式のように与えられる。

$$\check{q}^2 = \frac{1}{2D^m D^i} \left\{ -D^m (2B_2 \alpha_0^i + K_1 - \alpha_0^m Y + L_1 \alpha_0^m) - D^i X \right\} \dots \dots \dots (4.89)$$

式 (4.89) を式 (4.87) に代入して整理すれば次式を得る。

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4D^m D^i} \left\{ -D^m (2B_2 \alpha_0^i + K_1 - \alpha_0^m Y + L_1 \alpha_0^m) - D^i X \right\}^2 \\ & = 2B_2 \alpha_0^i X + 2L_1 \alpha_0^m (2X - \alpha_0^i Y - L_1 \alpha_0^i) \dots \dots \dots (4.90) \end{aligned}$$

ここで、Turing 分岐を起こす振幅を $K_1 \equiv K_1^T$ とおき、式 (4.90) を整理すれば、Turing 分岐を起こす応力振幅 K_1^T の条件が

$$K_1^T = \frac{X \left(2B_2 \alpha_0^i \pm 2 \sqrt{2d^* \{ B_2 \alpha_0^i X + L_1 \alpha_0^m (2X - \alpha_0^i Y - L_1 \alpha_0^i) \} + d^* X} \right)}{-K_0 + K_3 \alpha_0^i{}^2 + 2K_4 \alpha_0^i{}^3 - 2L_1 \alpha_0^i} \dots \dots \dots (4.91)$$

と得られる [補足 D.7 参照]。また、 d^* は次式に示す拡散係数の比である。

$$d^* \equiv \frac{D^i}{D^m} \dots \dots \dots (4.92)$$

4.6.7 不安定線図

横軸を拡散係数比 d^* および縦軸を応力振幅 K_1 とし、式 (4.85) および式 (4.91) から得られる不安定線図を図 4.3 に示す。ここで、Hopf 分岐よりも先に Turing 分岐が起こり定定的な空間構造が作られるためには

$$K_1^T < K_1^H \dots \dots \dots (4.93)$$

の関係が成り立たなければならない。この関係を考慮し、時間的振動を表す Hopf 分岐直線が $\kappa = 0$ を表し、空間的振動を表す Turing 分岐曲線が $\Delta = 0$ を表すことと照らし合わせる。まず、Hopf 分岐直線より上の領域 I は、 $\kappa > 0$ かつ $\Delta > 0$ に相当し、一様な定常状態となる。また、同様の考え方で領域 III では時間

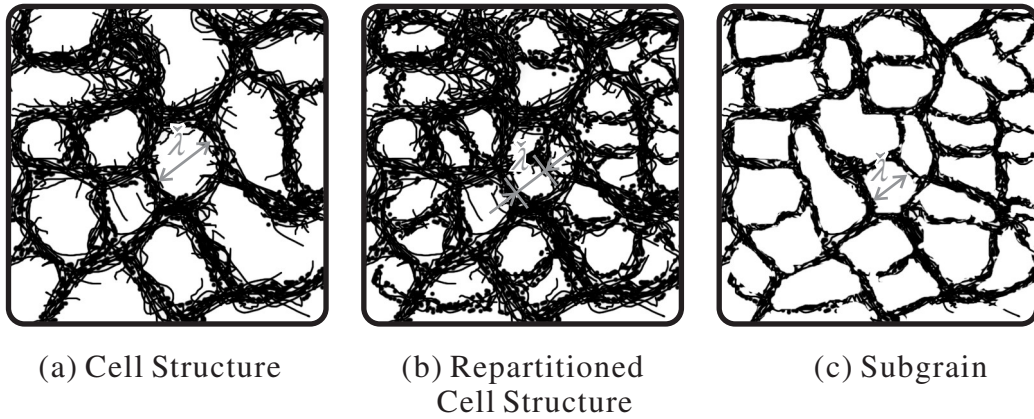


Fig. 4.4 Wavelength of cell and subgrain

的振動が起こる．一方，セル構造やサブグレインは Turing 構造であるため，領域 II における自己組織化した空間パターンが形成されると考えられる．すなわち，初期状態においては転位が一様な定常状態であるが，応力振幅の増加に伴いセル構造およびサブグレインが形成されるといえる．以上の検討から，セル構造およびサブグレインが形成される条件は応力振幅 K_1 および拡散係数の比 d^* に依存するといえる．

4.6.8 Turing 構造の特性波長

式 (4.89) から転位セル構造およびサブグレインの波数が求まる．したがって，Turing 構造は系のサイズに依存しない固有の波長を持つといえる．ここでは，転位セル構造およびサブグレインの自発的特性波長を定式化する．式 (4.90) を式 (4.89) に代入し， \tilde{q} について解けば，次式を得る．

$$|\tilde{q}| = \left(\frac{2Z}{D^m D^i} \right)^{\frac{1}{4}} \dots\dots\dots (4.94)$$

ただし， Z は

$$Z \equiv X(B_2 \alpha_0^i + L_1 \alpha_0^m) + L_1 \alpha_0^m (K_0 - K_3 \alpha_0^{i^2} - 2K_4 \alpha_0^{i^3}) \dots\dots\dots (4.95)$$

である．式 (4.94) によってセル構造およびサブグレインの自発的特性波長 λ が次式のように得られる [図 4.4 参照]．

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{2\pi}{|\tilde{q}|} \\ &= 2\pi \left(\frac{D^m D^i}{2Z} \right)^{\frac{1}{4}} \dots\dots\dots (4.96) \end{aligned}$$

以上からセル波長およびサブグレイン波長は定式化することができ，またその大きさは拡散係数に依存するといえる．

第5章

転位-結晶塑性論

第4章において転位密度を材料の硬化則へ導入することの熱力学的整合性を示した。そこで本章では、第4章で得た速度形弾性構成式の弾性変形速度を全変形速度と塑性変形速度の差で表し、塑性変形速度をすべりによって書き表すことで結晶塑性タイプの弾粘塑性構成式を導出する。その際、従来 Peirce らによって格子回転にもとづく Jaumann 速度として表現されていた部分が Mandel-Kratovich 速度であったことを論じる。また、結晶の硬化則に転位密度の情報を反映させるための一般論を展開する。多重すべり系に拡張した Bailey-Hirsch の式を用いて、Pan-Rice 形の硬化則の流れ応力に転位密度を導入し、転位場と変形場の情報のやり取りを可能とする転位-結晶塑性論を構築する。一方、応力情報を反応-拡散方程式に導入する手段として、応力効果係数を分解せん断応力を引数として関数化し、変形場の情報を転位場の方程式系に反映させる。また、第7章および第8章で実行する転位-結晶塑性 FEM 解析の準備として、仮想仕事率の原理を Updated Lagrange 形式に変形し、すべりの持っている強い非線形性を緩和するために接線係数法を適用して結晶塑性論の弾粘塑性構成式を数値解析に適した形に変形する。さらに、仮想仕事率の原理式および結晶塑性タイプの構成式を用いて、要素剛性方程式を導く。その際に、数値解析上の注意点について詳述する。

5.1 結晶塑性論に基づく応力速度の導出

本節では、第4章において示された速度形弾性構成式を結晶塑性論に適する形で表現する。まず、速度形弾性構成式は式 (4.25) であり、次に再度示す。

$$\overset{\nabla}{T} = C^e : \overset{\nabla}{E}^e$$

ここで、 $\overset{\nabla}{T}$ は Cauchy 応力の共回転速度であり、 $\overset{\nabla}{T}$ および $\overset{\nabla}{E}^e$ は下部構造スピン $W^* = W - W^p$ を用いて

$$\overset{\nabla}{T} = \dot{T} - W^* T + T W^* \dots \dots \dots (5.1)$$

$$\overset{\nabla}{E}^e = D^e = \dot{E}^e - W^* E^e + E^e W^* \dots \dots \dots (5.2)$$

と具体化される。また、 C^e は4階の異方性弾性係数であるが、弾性変形の等方性を仮定するならば、ヤング率およびポアソン比から決定することができる。

次に、式 (4.25) に式 (5.2) を代入した結果を第2中間配置配置における変形速度の弾性部分を全変形速度と塑性部分の差で表し、式 (2.65) と同様に変形速度の塑性部分をすべりおよび Schmid テンソルを用いて

書き直せば .

$$\begin{aligned}\overset{\nabla}{T}_{(m)} &= C_{(m)}^e : D_{(m)}^e \\ &= C_{(m)}^e : (D_{(m)} - D_{(m)}^p) \\ &= C_{(m)}^e : D_{(m)} - C_{(m)}^e : \sum_{\alpha} P_S^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.3)\end{aligned}$$

が得られる . 式 (5.3) の両側から R^* および R^{*T} を乗じて現配置に変換すると次式のような速度形弾粘塑性構成式が得られる .

$$\overset{\nabla}{T} = C^e : D - C^e : \sum_{\alpha} P_S^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.4)$$

次に , Cauchy 応力の Mandel-Kratovichil 速度 $\overset{\nabla}{T}$ を Jaumann 速度 $\overset{\circ}{T}$ とそれ以外の部分に分解すると , 次のように変形できる .

$$\begin{aligned}\overset{\nabla}{T} &= \dot{T} - W^* T + T W^* \\ &= \dot{T} - (W - W^p) T + T (W - W^p) \\ &= \overset{\circ}{T} + (W^p T - T W^p) \dots \dots \dots (5.5)\end{aligned}$$

ここで , $\overset{\circ}{T}$ は次式で与えられる Jaumann 速度であり , その共回転スピンは連続体スピン W である .

$$\overset{\circ}{T} = \dot{T} - W T + T W \dots \dots \dots (5.6)$$

また , 塑性スピンの式 (2.66) のようにすべりと結晶基底を用いて表されることを考慮すれば , 式 (5.5) における右辺の第 2 項および第 3 項は

$$W^p T - T W^p = \sum_{\alpha} \beta^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.7)$$

のように表される . ただし , $\beta^{(\alpha)}$ は次式で定義される .

$$\beta^{(\alpha)} \equiv P_A^{(\alpha)} T - T P_A^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.8)$$

式 (5.7) を式 (5.5) に代入すれば

$$\overset{\nabla}{T} = \overset{\circ}{T} - W T + T W + \sum_{\alpha} \beta^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.9)$$

となる . 式 (5.4) に式 (5.9) を代入し , すべり速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ に関する項をと

$$\begin{aligned}\overset{\circ}{T} &= C^e : D - C^e : \sum_{\alpha} P_S^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} - \sum_{\alpha} \beta^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \\ &= C^e : D - \sum_{\alpha} \mathcal{E}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.10)\end{aligned}$$

となる . ここで , $\mathcal{E}^{(\alpha)}$ は次式のように定義される .

$$\mathcal{E}^{(\alpha)} \equiv C^e : P_S^{(\alpha)} + \beta^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.11)$$

式 (5.10) は Jaumann 速度を共回転速度に選んだ構成式のように見えるが、ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ に関する項を右辺に移項したために左辺が Jaumann 速度形式となったに過ぎず、式 (5.6) は Mandel-Kratochvil 速度を共回転速度に選んだ式 (5.10) と等価なものである。以上のように、結晶塑性論の構成式は、降伏関数を用いる現象論的塑性論で与えられるような塑性構成式および塑性スピンの発展方程式を一切用いていない。結晶塑性論に必要なものは式 (5.10) の弾粘塑性構成式と次節で示す速度形硬化則のみであり、体系が非常に簡潔である。

5.2 転位蓄積および転位相互作用を考慮した硬化則の導出

次に、ひずみ速度依存形の硬化則を紹介し、加工硬化則における硬化係数に転位密度および転位相互作用行列を介して、転位の蓄積およびすべり系間の相互作用の影響を導入する。

5.2.1 ひずみ速度依存形硬化則

ひずみ速度依存性の結晶すべりモデルにおいて、すべり面上におけるせん断すべり速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ は、すべり面上の Schmid の分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ と現変形状態の内部構造の変化によって決まるパラメータを用いて決定される。せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ に対する硬化則として、次のような Hutchinson⁽⁷²⁾ や Pan-Rice⁽⁷³⁾ が用いた指数則を用いる。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0^{(\alpha)} \left[\frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right] \left[\left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right| \right]^{\frac{1}{m}-1} \dots\dots\dots (5.12)$$

ここで、 $\dot{\gamma}_0^{(\alpha)}$ は参照すべり速度、 $\tau^{(\alpha)}$ は分解せん断応力、 $g^{(\alpha)}$ は流れ応力および m はひずみ速度感度指数である。ここで、 $\tau^{(\alpha)}$ は巨視的変形場の情報と結びつけるため、Cauchy 応力 T の α すべり系への写像として結晶基底ベクトル $s^{(\alpha)}$ および $m^{(\alpha)}$ を両側から乗ずることにより

$$\tau^{(\alpha)} = s^{(\alpha)} \cdot T m^{(\alpha)} = P^{(\alpha)} \cdot T \dots\dots\dots (5.13)$$

で得られるものとする。また、流れ応力 $g^{(\alpha)}$ は現在の結晶のすべりに対する抵抗を示す関数であり、この値は次式のように全すべり量 γ に依存するものとする。

$$g^{(\alpha)} = g^{(\alpha)}(\gamma) \dots\dots\dots (5.14)$$

$$\gamma = \sum_{\alpha} |\gamma^{(\alpha)}| \dots\dots\dots (5.15)$$

流れ応力 $g^{(\alpha)}$ に対する発展方程式は次式で与えられる。

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h^{(\alpha\beta)} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \dots\dots\dots (5.16)$$

ここで、 $h^{(\alpha\beta)}$ はすべり系間の相互作用を表す硬化係数であり、 $\alpha = \beta$ のときは自己のすべり系に存在する転位に堆積に起因する自己硬化を、 $\alpha \neq \beta$ のときは他のすべり系に存在する転位の堆積に起因する潜在硬化を意味する [補足 E.1 および補足 E.2 参照]。結晶塑性論においては、硬化係数 $h^{(\alpha\beta)}$ が材料の加工硬化特性をほぼ支配しているため、硬化係数のモデルを以下に決定するかが重要になってくる。

5.2.2 従来の結晶塑性論における硬化係数

Peirce ら⁽¹⁷⁾ は硬化係数 $h^{(\alpha\beta)}$ を次式のように与えている .

$$h^{(\alpha\beta)} = qh_p + (1 - q)h_p\delta^{(\alpha\beta)} \dots\dots\dots (5.17)$$

前述の通り $\alpha = \beta$ のときは自己硬化を表し $h^{(\alpha\beta)} = h_p$ となり , $\alpha \neq \beta$ のときは潜在硬化を表し $h^{(\alpha\beta)} = qh_p$ となる . 自己硬化に対する潜在硬化の割合を表す q の値は $1.0 < q < 1.4$ の範囲が適当であるとされている . さらに , 硬化率関数 h_p は

$$h_p(\gamma) = h_0 \operatorname{sech}^2(\gamma/\gamma_0) \dots\dots\dots (5.18)$$

で表される . ここで , h_0 は初期硬化率 , また γ_0 は次式にて定義される量である .

$$\gamma_0 \equiv (\tau_s - \tau_0)/h_0 \dots\dots\dots (5.19)$$

ただし , τ_s は $\tau - \gamma$ 曲線における飽和せん断応力である .

5.2.3 転位密度を考慮した硬化係数

式 (5.17) で表される硬化係数は実験で得られた硬化曲線から同定されたものであるため , 非常に簡単なモデルではあるが , 巨視的な変形挙動を再現することに適している . しかしながら , 金属結晶の加工硬化は蓄積した転位が他の転位の運動を妨害することに起因しており , より微視的な観点から金属の塑性変形を表現するためには転位の情報を導入した硬化係数のモデルが必要である . そこで本研究では , 式 (5.16) で用いる硬化係数 $h^{(\alpha\beta)}$ として , 転位蓄積および転位相互作用の影響を取り入れたものを考える .

材料科学の分野では , 分解せん断応力が転位密度の平方根に比例するという実験結果に基づき , 次のような Bailey-Heirsch の式が重宝されている .

$$g = \tau_y + a\mu\tilde{b}\sqrt{\rho} \dots\dots\dots (5.20)$$

ここで , τ_y は参照応力 , a は 0.1 オーダーの数値係数 , μ は弾性せん断剛性率および \tilde{b} は Burgers ベクトルの大きさを表す . 式 (5.20) における g は式 (5.12) における $g^{(\alpha)}$ に相当するため , 流れ応力 $g^{(\alpha)}$ に関する自己硬化および潜在硬化を表現できるように式 (5.20) を多重すべり系に拡張すれば

$$g^{(\alpha)} = \tau_y^{(\alpha)} + \sum_{\beta} \Omega^{(\alpha\beta)} a\mu\tilde{b}\sqrt{\rho^{(\beta)}} \dots\dots\dots (5.21)$$

となる . ここで , $\Omega^{(\alpha\beta)}$ はすべり系 $\alpha - \beta$ 間における転位運動の相互作用を表す行列であり , 具体形は後述するが , Franciosi ら⁽⁷⁴⁾⁽⁷⁵⁾⁽⁷⁶⁾ はその成分を各すべり系間の相対位置関係により (a) 自己硬化 , (b) 同すべり面 , Hirth 固着およびキルク形成 , (c) 可動ジョグ形成および (d) Lomer-Cottrell 固着の 4 種類に分類している . Ohashi⁽⁵⁸⁾ はこれらの成分をさらに細かく分類しており , 各成分の値はいずれも 1.0 ~ 2.0 となっている . また , $\rho^{(\beta)}$ はすべり系 β に蓄積された転位の密度である . 流れ応力 $g^{(\alpha)}$ の発展式 (5.16) と比較するため , 式 (5.21) を時間微分すれば

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} \Omega^{(\alpha\beta)} a\mu\tilde{b} \frac{\dot{\rho}^{(\beta)}}{2\sqrt{\rho^{(\beta)}}} \dots\dots\dots (5.22)$$

となる．一方，可動転位の平均速度 $v^{(\alpha)}$ とすべり速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ の間には Orowan の式の関係が成立する．

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \tilde{b} \rho_m^{(\alpha)} v^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.23)$$

ここで， $\rho_m^{(\alpha)}$ は可動転位密度である．また，平均寿命 $t^{(\alpha)}$ の後に可動転位が停止し，結晶中に堆積するとすれば，蓄積転位密度の発展式は

$$\dot{\rho}^{(\alpha)} = c \frac{\rho_m^{(\alpha)}}{t^{(\alpha)}} \dots \dots \dots (5.24)$$

となる．ここで， c は 1 のオーダーの数値係数である．さらに，平均寿命 $t^{(\alpha)}$ および平均速度 $v^{(\alpha)}$ から，可動転位の平均飛行距離 $L^{(\alpha)}$ が

$$L^{(\alpha)} = t^{(\alpha)} v^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.25)$$

と求まる．式 (5.23) および式 (5.25) を用いて式 (5.24) を変形すると，転位密度速度とすべり速度の関係式が

$$\dot{\rho}^{(\alpha)} = \frac{c}{\tilde{b}} \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}}{L^{(\alpha)}} \dots \dots \dots (5.26)$$

と得られる．式 (5.26) を式 (5.22) に代入することによって，転位蓄積の情報を導入した流れ応力の発展式が次式のように得られる．

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} \frac{1}{2} ac\mu \frac{Q^{(\alpha\beta)} \dot{\gamma}^{(\beta)}}{L^{(\beta)} \sqrt{\rho^{(\beta)}}} \dots \dots \dots (5.27)$$

式 (5.27) を式 (5.16) と比較すれば，硬化係数 $h^{(\alpha\beta)}$ は次式のように表される．

$$h^{(\alpha\beta)} = \frac{1}{2} ac\mu \frac{Q^{(\alpha\beta)}}{L^{(\beta)} \sqrt{\rho^{(\beta)}}} \dots \dots \dots (5.28)$$

式 (5.28) を硬化係数として式 (5.16) に用いることによって，転位蓄積が加工硬化へ及ぼす影響を無理なく表現することができる．

Fleck ら⁽²⁷⁾ は SS 転位密度と GN 転位密度を足し合わせ，式 (5.28) へ反映させており，Ohashi⁽²⁹⁾ は Weertman⁽⁷⁷⁾ の見解に基づき，自己硬化に寄与する GN 転位密度は加工硬化に用いず潜在硬化に寄与する SS 転位密度のみを考慮し，GN 転位密度の情報は転位の平均飛行距離のみに導入している．

5.3 転位運動の相互作用

5.3.1 結晶のすべり系

FCC 結晶のすべり面およびすべり方向をミラー指数を用いて表すと，通常に観察されるすべり面は $\{\bar{1}11\}$ であり，すべり方向は $\langle \bar{1}11 \rangle$ である． $\{\bar{1}11\}$ 面には結晶学的に等価で方位の異なるものが $(\bar{1}11)$ ， (111) ， $(\bar{1}\bar{1}1)$ および $(1\bar{1}1)$ と 4 つあり，その各々が面内に 3 個の $\langle \bar{1}11 \rangle$ 方向を含む．たとえば， (111) 面は $[\bar{1}10]$ ， $[\bar{1}01]$ および $[0\bar{1}1]$ の 3 個を含む．したがって，FCC 結晶では結晶学的に等価なすべり系が 12 個存在する．ここで，これら 12 個のすべり系相互の間の幾何学的関係を直感的に見やすくした Thompson の 4 面体⁽⁷⁸⁾ を用いて，FCC 結晶のすべり面 $(\bar{1}11)$ ， (111) ， $(\bar{1}\bar{1}1)$ および $(1\bar{1}1)$ をそれぞれ A，B，C および D と記号付け，すべり方向 $[011]$ ， $[0\bar{1}1]$ ， $[101]$ ， $[\bar{1}01]$ ， $[\bar{1}10]$ および $[110]$ をそれぞれ 1，2，3，4，5，および 6 と記号付ける．以上の記号を用いて，FCC 結晶の 12 個のすべり系は A2，A3，A6，B2，B4，B5，C1，C3，C5，D1，D4 および D6 と表すことができる [図 5.1 参照]．

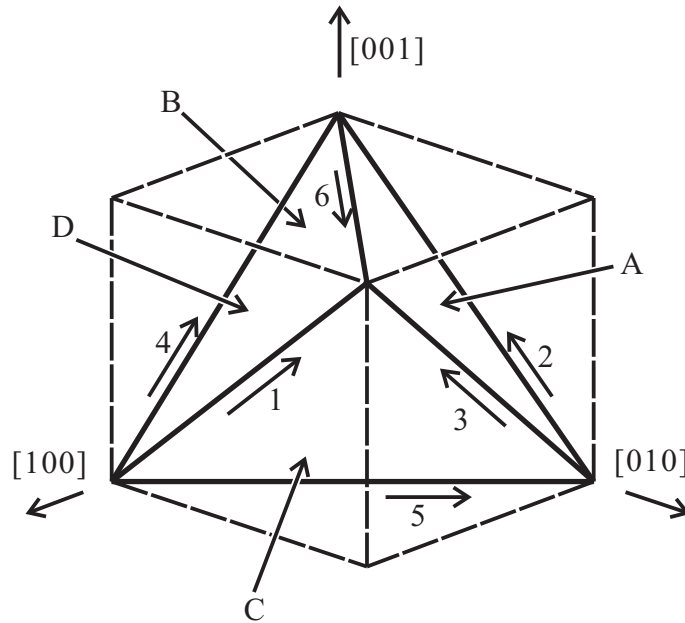


Fig. 5.1 Thompson's tetrahedron

結晶に外部応力を作用させた場合，これら結晶学的に等価なすべり系がすべて同等に活動することはない．外部応力のすべり面に沿うすべり方向のせん断応力成分の値が最も大きいすべり系が優先的に活動しやすいことが知られている．外部応力のすべり面に沿うすべり方向へのせん断応力成分を，そのすべり系に関する分解せん断応力という．外力を結晶に作用させているときには，各すべり系には，外力の方向がすべり面およびすべり方向となす角の大きさに応じて，それぞれ大きさの異なる分解せん断応力が働いている．変形していない結晶に外力を加えた場合，最初に優先的に活動するすべり系を主すべり系あるいは1次すべり系とよび，それ以外のすべり系を総称して2次すべり系をいう．

表 5.1 は FCC 結晶の 12 個のすべり系に対する他のすべり系からの影響，相互作用を表したものである．係数 a_0 , a_1 , a_2 および a_3 はその相互作用行列 $^{(22)(74)(75)(76)}$ の成分である．

5.3.2 相互作用の影響

転位運動の相互作用を考えると，12 のすべり系はそれぞれすべて等価であるので，ある 1 つのすべり系に注目すればよい．表 5.2 は主すべり系を B4 としたときに他のすべり系，つまり 2 次すべり系の影響を表したものである．

自己硬化とは同じすべり系による相互作用を表したものである．B4 を 2 次すべり系とすると，主すべり系と同じなので自己硬化となっているのが確認できる．

同一すべり面は同じすべり面からの，同一すべり方向は同じすべり方向を持つすべり系からの相互作用である．B2, B5 は同じすべり面であるので同一すべり面の関係にあり，D4 はすべり方向が同じなので同一すべり方向の関係にある．

可動ジョグ形成は主すべり系と 2 次すべり系が図 5.2(a) および (b) のような位置関係にあるときのことをいう．このとき転位の切り合い運動が起こり図 5.2(a) においてジョグを形成する [補足 E.3 参照] ．

Table 5.1 The interaction matrix $\mathcal{Q}^{(\alpha\beta)}$ for slip system $\{111\}, \langle 110 \rangle$

	A2	A3	A6	B2	B4	B5	C1	C3	C5	D1	D4	D6
A2	SH	Copl	Copl	Coli	GJ	GJ	HL	GJ	LC	HL	LC	GJ
A3		SH	Copl	GJ	HL	LC	GJ	Coli	GJ	LC	HL	GJ
A6			SH	GJ	Coli	HL	LC	GJ	HL	GJ	GJ	Coli
B2				SH	Copl	Copl	HL	LC	GJ	HL	GJ	LC
B4					SH	Copl	LC	HL	GJ	GJ	Coli	GJ
B5						SH	GJ	GJ	Coli	LC	GJ	HL
C1							SH	Copl	Copl	Coli	GJ	GJ
C3								SH	Copl	GJ	HL	Coli
C5			Symmetric						SH	GJ	LC	HL
D1										SH	Copl	Copl
D4											SH	Copl
D6												SH

- SH : Self hardening (a_0) HL : Hirth Lock system (a_1)
Copl : Coplanar system (a_1) GJ : Glissile jog formation (a_2)
Coli : Colinear system (a_1) LC : Lomer-Cottrell lock formation (a_3)

Table 5.2 Dislocation interactions for B4 slip system

Slip system	Plane	Direction	Dislocation interaction
A2	$(\bar{1}11)$	$[0\bar{1}1]$	Glissile jog
A3	$(\bar{1}11)$	$[101]$	Hirth lock system
A6	$(\bar{1}11)$	$[110]$	Lomer-Cottrell lock formation
B2	(111)	$[0\bar{1}1]$	Coplanar system
B4	(111)	$[\bar{1}01]$	Self hardening
B5	(111)	$[\bar{1}10]$	Coplanar system
C1	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$[011]$	Lomer-Cottrell lock formation
C3	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$[101]$	Hirth lock system
C5	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$[\bar{1}10]$	Glissile jog
D1	$(1\bar{1}1)$	$[011]$	Glissile jog
D4	$(1\bar{1}1)$	$[\bar{1}01]$	Colinear system
D6	$(1\bar{1}1)$	$[110]$	Glissile jog

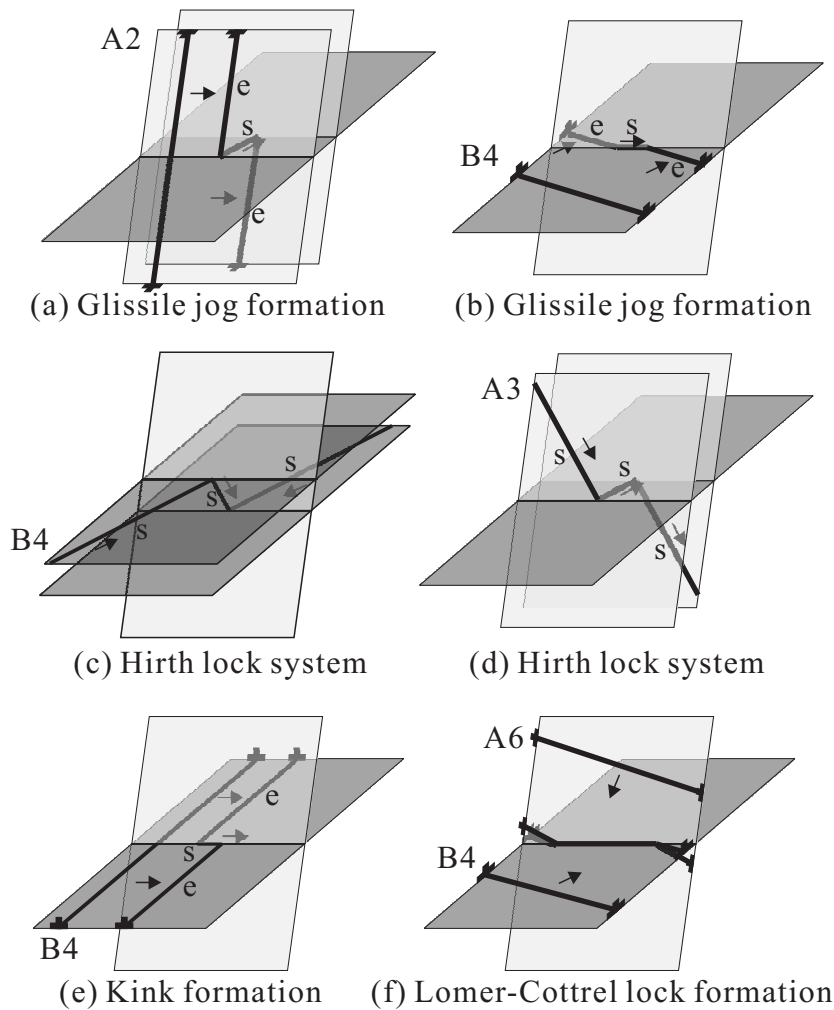


Fig. 5.2 Dislocation interactions

Hirth 固着は主すべり系と2次すべり系が図 5.2(c) および (d) のような位置関係にあるときのことをいう。この場合、らせん転位の上にはジョグが形成されるので、それが他の部分と同じように運動しようとするとき非保存運動となり、点欠陥を発生あるいは吸収しなければならない。このことは非常に大きな抵抗を伴うので、結晶が十分に高温にある場合を除けば、ジョグの部分は動けない。残りのらせん転位の部分のみが運動すれば、図 5.3 に示すようなジョグを終点とする長い刃状転位のダイポールが形成される⁽⁷⁹⁾。このように転位が運動した跡に残される運動できない部分をトレールとよび、また、その一部分が上昇運動するなどして運動する部分から切り離されてしまったものをデブリーと呼ぶ。

同一すべり方向では各すべり系の転位の片方が刃状転位でもう一方がらせん転位の場合図 5.2(e) のようにキックを形成する。この場合すべり方向が同一なので比較的すべりやすいと考えられる。

Lomer-Cottrell 固着は主すべり系と2次すべり系が図 5.2(f) のような位置関係にあるときのことをいう。(111) 面上を運動する不完全転位の和 $(a/6)[11\bar{2}] + (a/6)[2\bar{1}\bar{1}]$ と $(\bar{1}11)$ 面上を運動する不完全転位 $(a/6)[\bar{1}\bar{2}1] + (a/6)[\bar{2}\bar{1}\bar{1}]$ が図 5.4 に示すように出会うと、ステアロッド転位 $(a/6)[0\bar{1}\bar{1}]$ と各面上の帯状の積層欠陥、それにそれらの端となる $(a/6)[2\bar{1}\bar{1}]$ と $(a/6)[\bar{2}\bar{1}\bar{1}]$ の部分転位の組がつくられる。これがそれらに後続して (111)

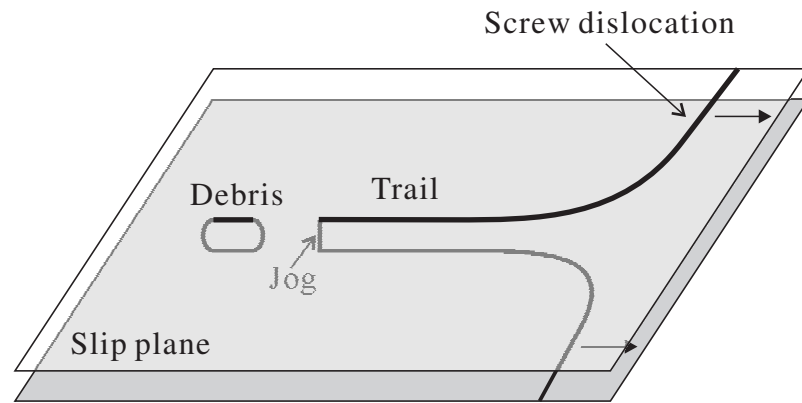


Fig. 5.3 Debris and trail from jog

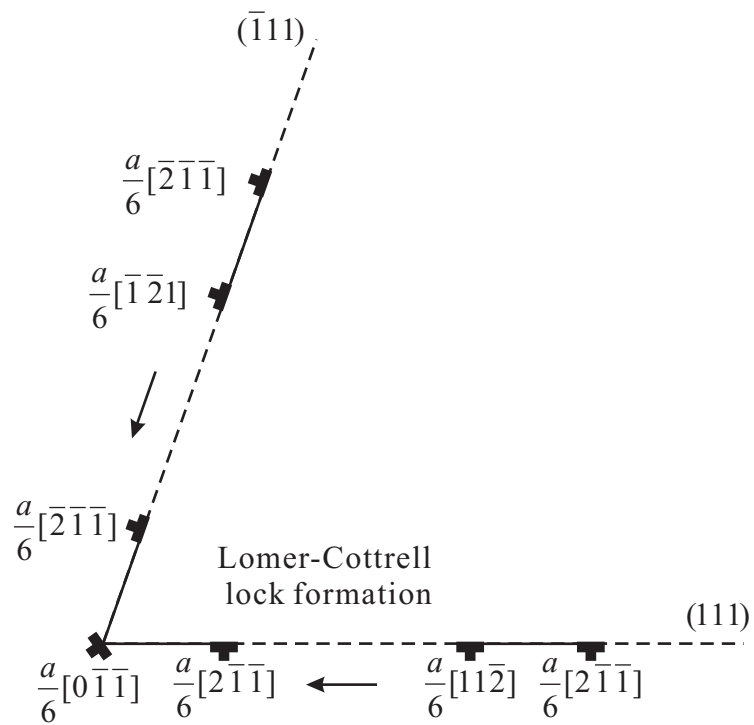


Fig. 5.4 Lomer-Cottrell lock formation

面や $(\bar{1}11)$ 面の上を運動してくる転位に対する障害となるので、加工硬化の現象に対して重要な役割を果たすものと考えられる。

5.3.3 相互作用行列

表 5.1 や係数 a_0, a_1, a_2 および a_3 などを用いて相互作用行列 $\Omega^{(\alpha\beta)}$ は以下のように表される .

$$[\Omega^{(\alpha\beta)}] = \begin{bmatrix} \Omega_0 & \Omega_1 & \Omega_2 & \Omega_3 \\ & \Omega_0 & \Omega_3 & \Omega_2 \\ & & \Omega_0 & \Omega_1 \\ \text{Symmetric} & & & \Omega_0 \end{bmatrix} \dots\dots\dots (5.29)$$

さらに, この行列内の成分 $\Omega_0, \Omega_1, \Omega_2$ および Ω_3 はそれぞれ以下のような 3×3 の行列を表す .

$$[\Omega_0] = \begin{bmatrix} a_0 & a_1 & a_1 \\ & a_0 & a_1 \\ \text{Symmetric} & & a_0 \end{bmatrix}, \quad [\Omega_1] = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ & a_1 & a_2 \\ \text{Symmetric} & & a_1 \end{bmatrix},$$

$$[\Omega_2] = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_2 \\ & a_1 & a_3 \\ \text{Symmetric} & & a_1 \end{bmatrix}, \quad [\Omega_3] = \begin{bmatrix} a_1 & a_3 & a_2 \\ & a_1 & a_2 \\ \text{Symmetric} & & a_1 \end{bmatrix} \dots\dots\dots (5.30)$$

式 (5.30) の行列内の成分 a_0 は自己硬化の, a_1 は同一すべり面, 同一すべり方向および Hirth 固着の, a_2 は可動ジョグ形成の, a_3 は Lomer-Cottrell 固着の関係にあるすべり系の相互作用を表すパラメータである . また, 先程述べたようなすべり系の影響を考えるとそれぞれの係数は $a_0 \leq a_1 \leq a_2 \leq a_3$ という関係にあるのがわかる .

5.4 転位の平均飛行距離

5.4.1 修正 Seeger モデル

転位の平均飛行距離の決定方法については各種提案されているが, Ohashi⁽²²⁾ によって多重すべりに対応するよう修正された Seeger⁽⁸⁰⁾ のモデルは次式のように表される .

$$L^{(\alpha)} = \begin{cases} L_0^{(\alpha)} & ; \text{ single slip} \\ \frac{\Lambda}{\sum_{\beta} |\gamma^{(\beta)}| - (\gamma^* - \Lambda/L_0^{(\alpha)})} & ; \text{ multiple slip} \dots\dots\dots (5.31) \end{cases}$$

ここで, $L_0^{(\alpha)}$ は初期の転位平均飛行距離, γ^* は多重すべりが始まったときのすべりの値を表し, Λ は材料定数である . 式 (5.31) において, 多重すべりが始まるまでの領域, すなわち容易すべり領域 (ステージ I) までには他のすべり系からの影響は初期状態とほぼ変わらないため, 転位の平均飛行距離は $L^{(\alpha)} = L_0^{(\alpha)}$ と一定である . 一方, 多重すべりが始まると転位の運動を阻害する林立転位の数が増加するため $L^{(\alpha)}$ は減少し, 転

位は堆積しやすくなり容易すべり領域に比べ硬化の割合が大きくなる．これが線形硬化領域 (ステージ II) である．

5.4.2 3段階加工効果モデル

転位の平均飛行距離のモデルに式 (5.31) を用いればステージ I からステージ II への遷移が表せるが，単結晶の3段階硬化における動的回復領域 (ステージ III) を表現することはできない．そこで本研究では単結晶の3段階硬化を表現するために，修正された Seeger の転位平均飛行距離モデルを次式のように拡張する．

$$L^{(\alpha)} = \begin{cases} L_0^{(\alpha)} & ; \text{ stage I} \\ \frac{\Lambda}{\gamma - (\gamma^* - \Lambda/L_0^{(\alpha)})} & ; \text{ stage II} \dots\dots\dots (5.32) \\ L_a^{(\alpha)} + (L_b^{(\alpha)} - L_a^{(\alpha)}) \left\{ \sin^2 \left(\pi \frac{\gamma - \gamma^{**}}{\gamma_r} \right) \right\} & ; \text{ stage III} \end{cases}$$

ただし， $\gamma > \gamma^{**} + \gamma_r/2$ のときは $L^{(\alpha)} = L_b^{(\alpha)}$ とする．ここで， $L_0^{(\alpha)}$ は初期の転位平均飛行距離， γ は式 (5.15) で表される全すべり量， γ^* は多重すべりが始まったときのすべりの値， $L_a^{(\alpha)}$ および γ^{**} は stage III が開始するときの $L^{(\alpha)}$ および γ の値， γ_r は参照すべり値， Λ は材料定数である．図 5.5(a) に式 (5.31) および式 (5.32) を用いた際の転位平均飛行距離とすべりの関係を示す．また，図 5.5(b) には式 (5.26) を用いて転位密度を計算したときのすべりと流れ応力の関係を示す．図 5.5 において，青色のものは転位平均飛行距離モデルに式 (5.31) を，赤色のものは式 (5.32) を用いたものである．図 5.5 を見ると，ステージ III 特有の加工硬化率の減少および転位の平均飛行距離の増加が再現されているのがわかる．

5.4.3 転位密度依存形モデル

一方，Ohashi⁽²²⁾ は転位の運動距離の変化を転位が横切る林立転位の本数と関連付け，次式のような転位密度依存形モデルを提案している．

$$L^{(\alpha)} = \frac{c^*}{\sqrt{\sum_{\beta} \omega^{(\alpha\beta)} \rho^{(\beta)}}} \dots\dots\dots (5.33)$$

$$\omega^{(\alpha\beta)} = \frac{|\Omega^{(\alpha\beta)} - \Omega^{(\alpha\alpha)}|^p}{\sum_{\gamma} |\Omega^{(1\gamma)} - \Omega^{(11)}|^p} \dots\dots\dots (5.34)$$

ここで c^* は可動転位が不動化するまでに通過する林立転位の本数， $\omega^{(\alpha\beta)}$ は自己硬化を除く転位の相互作用重み行列および p は数値パラメータである．式 (5.28) に式 (5.33) を代入すると，硬化係数 $h^{(\alpha\beta)}$ は

$$h^{(\alpha\beta)} = \frac{ac\mu\Omega^{(\alpha\beta)}}{2c^*} \sqrt{\frac{\sum_{\gamma} \omega^{(\beta\gamma)} \rho_L^{(\gamma)}}{\rho_h^{(\beta)}}} \dots\dots\dots (5.35)$$

となる．ここで， $\rho_h^{(\beta)}$ および $\rho_L^{(\gamma)}$ は式 (5.28) および式 (5.33) における $\rho^{(\beta)}$ に相当し，それぞれ転位密度による加工硬化への寄与および転位運動の障害に関する転位密度を意味する．

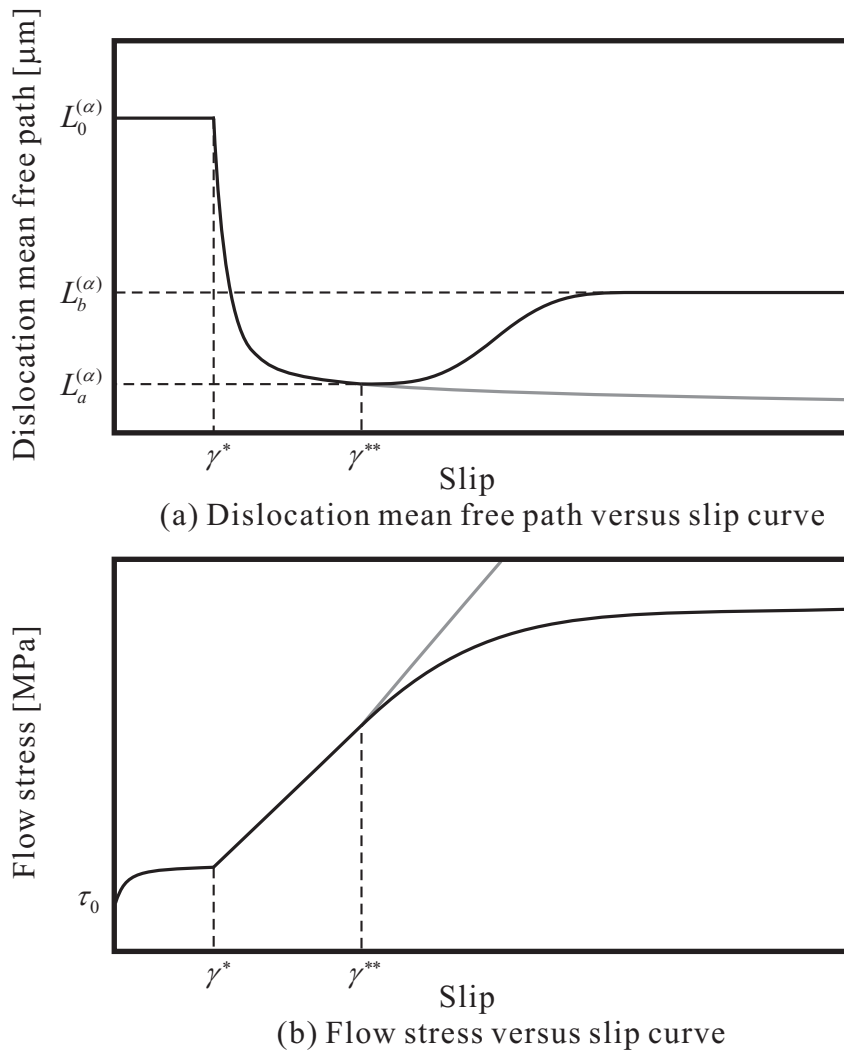


Fig. 5.5 Effect of mean free path on three-stage hardening

5.5 応力効果係数モデル

本節では、転位パターンニングと金属単結晶の3段階硬化を対応させるに、巨視的な応力情報として分解せん断応力を反応-拡散方程式の各速度係数に反映させる応力効果係数モデルを提案する。同時に、自発的特性長さと速度係数との関係を考慮し、セル構造の再分割に適した速度係数の設定および応力効果係数モデルについて検討する。

5.5.1 ステージ遷移に関する応力効果係数モデル

ステージIからステージIIへの遷移、ステージIIで一度形成されたセル構造が再分割することで転位組織が変化する過程およびステージIIからステージIIIへの遷移に際して、応力状態の変化に伴い式(4.62)における拡散係数および反応速度係数の値も変化する。そこで、応力状態に依存する形で拡散係数および反

応速度係数を表現するために、式 (4.69) で表される各速度係数の関数形を

$$A = A^I + A^{III} + (A^{II} - A^I) \tanh \{k_1(\tau^{(\alpha)} - \tau^*)\} + (A^{II*} - A^{II}) \tanh \{k_2(\tau^{(\alpha)} - \tau^K)\} \\ + (A^{III} - A^{II*}) \tanh \{k_3(\tau^{(\alpha)} - \tau^{**})\} \dots \dots \dots (5.36)$$

のように表し、応力効果係数モデルとする。ここで、 k_1, k_2 および k_3 は各速度係数の変化のしやすさを表す数値パラメータであり、 A^I, A^{II}, A^{II*} および A^{III} はそれぞれステージ I, ステージ II の前半, ステージ II の後半およびステージ III における各速度係数の値である。また、 τ^* および τ^{**} はそれぞれステージ II およびステージ III が開始する際の分解せん断応力の閾値である。なお、 τ^K は、ステージ II でセルの再分割による転位組織の変化に起因する速度係数の変化に関する分解せん断応力の閾値である。式 (5.36) を用いることで、各ステージの特徴を持つ各速度係数の値を自律的に変化させることができ、ステージ II における転位組織の変化に伴う速度係数の変化にも対応することができる。式 (5.36) で表される応力効果係数モデルには転位の反応項および回復項である $D^m, D^i, K_0, K_1 \sim K_4$ および L_1 にのみ適用する。転位の生成・消滅項 B_0 および B_2 に対する応力効果係数モデルについては後述する。

5.5.2 応力増加に伴うセル再分割に関する応力効果係数モデル

セル構造の大きさ (セルサイズ) は負荷された応力の増加に伴い、ほぼ反比例的に減少することが実験的に知られている⁽⁸¹⁾。一般的な金属結晶中に見られるセル構造の再分割という転位微細組織の変化を数値解析的に再現するためには、セル構造が形成されるステージ II において、応力の増加に伴うセルサイズの減少を再現する必要がある。セルサイズは 4.6 節の線形安定性解析から得られるセル波長の式 (4.96) を用いることによってほぼ予測することができる。式 (4.96) を見ると、セル波長は反応-拡散方程式の各速度係数に関係していることがわかる。しかしながら、式 (5.36) に示す応力硬化係数モデルを用いて各速度係数を表す場合、各ステージにおいて速度係数の値はほぼ一定であるため、応力の増加に伴うセルサイズの減少を表現することは難しい。そこで、セルの再分割を表現し得る応力硬化係数モデルを新たに提案する。

セル波長と速度係数の関係を明確にするため、式 (4.86) および式 (4.95) を用いて式 (4.96) を整理すると

$$\lambda = 2\pi \left\{ \frac{D^m D^i}{2(K_0 + 21K_2\alpha_0^i + L_1\alpha_0^i)(B_2\alpha_0^i + L_1\alpha_0^m) + 2L_1\alpha_0^m(K_0 - 25K_2\alpha_0^i)} \right\}^{\frac{1}{4}} \dots \dots \dots (5.37)$$

となる [補足 E.4 参照]。式 (5.37) から、セル波長を減少させるためには、応力の増加に伴い拡散係数を減少させるか反応速度係数を増加させればよいことがわかる。ただし、拡散係数は転位の動きやすさを意味しているため、応力の増加に伴って減少するとは考えにくい。各反応速度係数 K_0, K_2, B_2 および L_1 は第 4 章で述べたとおり、転位のダイナミクスに関する現象を表している。反応速度係数 K_0, K_2 および B_2 はステージ II における転位の反応を表すモデルであるのに対し、 L_1 は熱活性を伴う可動転位および不動転位の対消滅を表すモデルである。これは動的回復の原因としてステージ III で顕著に見られる現象であるため、ステージ II において L_1 が増加し、動的回復が起こる確率が増大するとは考えられない。ステージ II においては、加工硬化に起因して負荷応力が増加することで熱拡散が起こり転位運動が活発化する。したがって、可動転位が不動化して転位が蓄積する確率を示す反応速度係数 K_0, K_2 が応力増加に対して徐々に増加することは物理的に矛盾することになる。一方、熱拡散によってダイポールが対消滅する確率が高まることを考えれば、応力の増加に伴ってダイポールの対消滅率を意味する B_2 の値が増加することはステージ II 特有の転位挙動と整合しているといえる。しかしながら、セル構造の再分割過程の直接の原因は

転位蓄積であるため、転位の対消滅を表す B_2 の変化によってセル構造の再分割を表すことは実現象と矛盾している。ただし、転位の生成・消滅項の基準状態の式 (4.71) から得られる関係

$$B_0 = B_2 \alpha_0^i{}^2 + 2L_1 \alpha_0^m \alpha_0^i \dots \dots \dots (5.38)$$

を見ると、ステージ II において L_1 が表す動的回復が起こらないことを考慮すれば、消滅項 B_2 の増加に伴い生成項 B_0 も増加することがわかる。このことは応力の増加によって可動転位の線形生成率が高くなり、可動転位が林立転位等の障害物に捕獲され蓄積する確率が高まることを示す。以上のことから、式 (5.40) をセル構造が再分割される応力効果係数モデルとして採用することは妥当であるといえる。そこで、 B_2 項に関する応力効果係数を新たにモデル化することによって、応力の増加に伴うセル波長の減少の再現を試みる。

まず、式 (5.37) を見ると、右辺中括弧内の分母は B_2 に関する 1 次の関数であることがわかる。したがって、セル波長は B_2 の 1/4 乗にほぼ反比例することになり、 B_2 を分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ の 4 乗に比例するように増加させることによって、セル波長は応力の増加に対してほぼ反比例することが予想できる。そこで、 B_2 を次式のようにモデル化する。

$$B_2 = p_1 \tau^{(\alpha)4} + p_2 \dots \dots \dots (5.39)$$

ここで、 p_1 および p_2 は数値パラメータである。式 (5.39) を式 (5.37) に代入し、他の速度係数を一定とした場合のセル波長 λ と分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ の関係を図 5.6 に示す。各速度係数は式 (4.71) の関係を満たし、拡散係数は図 4.3 に示す不安定線図の領域 II に入るように決定している。図 5.6 から明らかなように、セル波長はおよそ $4\mu\text{m}$ から $1\mu\text{m}$ 程度まで減少しており、ステージ II において一度形成されたセル構造が再分割されセルサイズが減少することがよく表現されている。また、 B_2 の代わりに K_0 および K_2 に式 (5.39) を適用した結果を見ると、セル波長の減少は B_2 に対して適用した結果に比べてセル波長の減少はあまり生じていない。以上のことから、式 (5.39) の関数形をセル構造の再分割に関する応力効果係数モデルとして採用することは妥当であるといえる。ただし、本研究ではセル再分割後のサブグレイン遷移までを数値解析的に再現することを目的としているため、転位パターンニングの特性波長の減少を再現する式 (5.39) を適用するのはステージ II の途中までとし、式 (5.39) を次式のように拡張する。

$$\left. \begin{aligned} B_2 &= p_1 \tau^{(\alpha)4} + p_2 && ; (\tau^{(\alpha)} < \tau^K) \\ B_2 &= B_2^{\text{II}*} + B_2^{\text{III}} + (B_2^{\text{III}} - B_2^{\text{II}*}) \tanh \{k_4(\tau^{(\alpha)} - \tau^{**})\} && ; (\tau^{(\alpha)} \geq \tau^K) \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (5.40)$$

ここで、 $B_2^{\text{II}*} = p_1 \tau^{K4} + p_2$ である。

5.6 仮想仕事率の原理の変形

式 (3.6) の仮想仕事率の原理式に式 (3.7) から式 (3.9) を代入し、左辺と右辺を入れ替えれば

$$\int_v \mathbf{T} \cdot \dot{\mathbf{D}} dv = \oint_a \mathbf{t}^{(n)} \cdot \dot{\mathbf{v}} da + \int_v \rho(\mathbf{f} - \dot{\mathbf{v}}) \cdot \dot{\mathbf{v}} dv \dots \dots \dots (5.41)$$

となる。ここで \mathbf{S} は仮想量を表す。仮想仕事率の原理式 (5.41) の形では応力速度で与えられた構成式をそのまま適用することはできない。そこで、本研究で用いる Updated Lagrangian 形式に式の変形を行う。ま

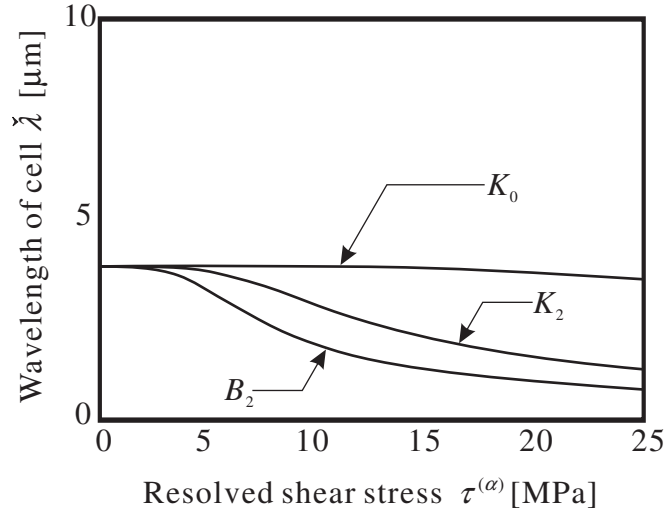


Fig. 5.6 Wavelength of cell versus resolved shear stress curves

ず，式 (5.41) を初期配置表示に戻せば次のようになる．

$$\int_{v_0} \mathbf{II} \cdot \text{Grad} \dot{v} dv_0 = \oint_{a_0} \overset{(0)}{\mathbf{t}} \cdot \dot{v} da_0 + \int_{v_0} \rho_0 \mathbf{f} \cdot \dot{v} dv_0 \dots\dots\dots (5.42)$$

ここで，以下のような変換法則が用いられている．

$$\mathbf{n} da = J \mathbf{F}^{-T} \mathbf{n}_0 da_0, \quad dv = J dv_0, \quad \mathbf{T} = J^{-1} \mathbf{II} \mathbf{F}^T, \quad \overset{(n)}{\mathbf{t}} = \mathbf{T} \mathbf{n}, \quad \overset{(0)}{\mathbf{t}} = \mathbf{II} \mathbf{n}_0$$

ただし，下付き 0 のついているものは初期配置における量であり， \mathbf{II} は第 1 種 Piola-Kirchhoff 応力 (公称応力) である．さらに， $\dot{v} = \mathbf{0}$ の条件で式 (5.42) の両辺を物質時間微分すると次式を得る．

$$\int_{v_0} \dot{\mathbf{II}} \cdot \text{Grad} \dot{v} dv_0 = \oint_{a_0} \overset{(0)}{\dot{\mathbf{t}}} \cdot \dot{v} da_0 + \int_{v_0} \rho_0 \dot{\mathbf{f}} \cdot \dot{v} dv_0 \dots\dots\dots (5.43)$$

この式は仮想仕事率の原理の total Lagrange 形式となる．

次に，式 (5.43) の $\dot{\mathbf{II}}$ を Cauchy 応力の共回転速度に変換する．

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{II}} \mathbf{F}^T &= J(\overset{\square}{\mathbf{T}} + \mathbf{LT}) = J(\overset{\circ}{\mathbf{T}} - \mathbf{P} : \mathbf{D} + (\text{tr} \mathbf{L}) \mathbf{T} + \mathbf{LT}) \\ &= J \left(J^{-1}(\overset{\circ}{\mathbf{T}} - \tilde{\mathbf{P}} : \mathbf{D}) + \mathbf{LT} \right) \dots\dots\dots (5.44) \end{aligned}$$

ここで $\overset{\square}{\mathbf{T}}$ は Truesdell 速度， $\overset{\circ}{\mathbf{T}}$ は Jaumann 速度， $\tilde{\mathbf{T}}$ は Kirchhoff 応力であり， $\tilde{\mathbf{T}} \equiv J \mathbf{T}$ と定義されている．ただし， J は変形こう配 \mathbf{F} の Jacobian である．また， $\overset{\square}{\mathbf{T}}$ および \mathbf{P} は次式にて定義される．

$$\overset{\square}{\mathbf{T}} \equiv \dot{\mathbf{T}} - \mathbf{LT} - \mathbf{TL}^T + (\text{tr} \mathbf{L}) \mathbf{T} \dots\dots\dots (5.45)$$

$$P_{ijkl} \equiv \delta_{il} T_{kj} + T_{ik} \delta_{jl}, \quad \tilde{P}_{ijkl} \equiv \delta_{il} \tilde{T}_{kj} + \tilde{T}_{ik} \delta_{jl} \dots\dots\dots (5.46)$$

式 (5.44) を式 (5.43) に代入し，現配置へ進めれば次式を得る．

$$\int_v \left[J^{-1}(\overset{\circ}{\mathbf{T}} - \tilde{\mathbf{P}} : \mathbf{D}) \cdot \dot{\mathbf{D}} + (\mathbf{LT}) \cdot \dot{\mathbf{L}} \right] dv = \oint_a \overset{(a)}{\mathbf{t}} \cdot \dot{v} da + \int_v \rho \mathbf{f} \cdot \dot{v} dv \dots\dots\dots (5.47)$$

ここで $\overset{\bar{}}{t} da \equiv \overset{\circ}{t} da_0$ とする . Updated Lagrangian 形式においては現配置が参照配置となるため $\overset{\circ}{t} \rightarrow \overset{\bar{}}{t}$ および $J \rightarrow 1$ を考慮すると , Updated Lagrangian 形式の仮想仕事率の原理が以下のように得られる .

$$\int_v \left[(\overset{\circ}{T} - P : D) \cdot \overset{\circ}{D} + (LT) \cdot \overset{\circ}{L} \right] dv = \oint_a \overset{\circ}{t} \cdot \overset{\circ}{v} da + \int_v \rho f \cdot \overset{\circ}{v} dv \dots \dots \dots (5.48)$$

5.7 接線係数法

5.1 節にて定義された単結晶の弾粘塑性構成式 (5.10) を仮想仕事率の原理式 (5.48) に導入することにより有限要素剛性方程式が導出されるが , この状態では有限要素解析において非常に小さい時間ステップを用いて解析をしなければならない . そこで , 比較的大きな時間増分でも安定した数値解析が行えるように Peirce ら (82) によって提案された接線係数法による補間を行う .

時刻 t におけるすべり系 α でのすべり増分を次式のように定める .

$$\Delta \gamma^{(\alpha)} = \gamma_{t+\Delta t}^{(\alpha)} - \gamma_t^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.49)$$

ここで , Δt は時間増分を示す . 式 (5.49) における $\Delta \gamma^{(\alpha)}$ を時刻 t および $t + \Delta t$ における $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ の値で線形補間を用いて近似すると

$$\Delta \gamma^{(\alpha)} = [(1 - \theta^{tan}) \dot{\gamma}_t^{(\alpha)} + \theta^{tan} \dot{\gamma}_{t+\Delta t}^{(\alpha)}] \Delta t \dots \dots \dots (5.50)$$

となる . ここで , θ^{tan} は $0 \leq \theta^{tan} \leq 1$ の係数であり , $\theta^{tan} = 0$ のとき Euler 法 , $\theta^{tan} = 1/2$ のとき Crank-Nicolson 法および $\theta^{tan} = 1$ のとき完全に陰的な積分法になる . 次に , 式 (5.12) に 1 次のテイラー展開を施し , $\Delta \tau^{(\alpha)} = \dot{\tau}^{(\alpha)} \Delta t$ および $\Delta g^{(\alpha)} = \dot{g}^{(\alpha)} \Delta t$ という関係を用いて時刻 $t + \Delta t$ における $\dot{\gamma}_{t+\Delta t}^{(\alpha)}$ を

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}_{t+\Delta t}^{(\alpha)} &= \dot{\gamma}_t^{(\alpha)} + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \right)_t \Delta \tau^{(\alpha)} + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial g^{(\alpha)}} \right)_t \Delta g^{(\alpha)} \\ &= \dot{\gamma}_t^{(\alpha)} + \text{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \dot{\gamma}_0^{(\alpha)} \left(\left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right| \right)^{\frac{1}{m}} \left[\frac{\Delta t}{m} \left(\frac{\dot{\tau}^{(\alpha)}}{\tau^{(\alpha)}} - \frac{\dot{g}^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right) \right] \dots \dots \dots (5.51) \end{aligned}$$

のように近似する . ここで , $\dot{\tau}^{(\alpha)} = P_S^{(\alpha)} \cdot \overset{\nabla}{T} = (C^e : P_S^{(\alpha)}) \cdot D^e$ という関係 [補足 E.5] および式 (5.12) を用いて式 (5.51) を書き直した結果を , 式 (5.50) に代入することによって

$$\begin{aligned} \Delta \gamma^{(\alpha)} &= \dot{\gamma}_t^{(\alpha)} \Delta t + \frac{\theta^{tan} \Delta t \dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{m \tau^{(\alpha)}} \left[(C^e : P_S^{(\alpha)}) \cdot D \right] \Delta t - \frac{\theta^{tan} \Delta t \dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{m \tau^{(\alpha)}} \sum_{\beta} (C^e : P_S^{(\alpha)}) \cdot P_S^{(\beta)} \dot{\gamma}^{(\beta)} \Delta t \\ &\quad - \frac{\theta^{tan} \Delta t \dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{m g^{(\alpha)}} \sum_{\beta} h^{(\alpha\beta)} \text{sgn}(\dot{\gamma}^{(\beta)}) \dot{\gamma}^{(\beta)} \Delta t \dots \dots \dots (5.52) \end{aligned}$$

が得られる . Peirce ら (17) は Kirchhoff 応力を用いているため $\dot{\tau}^{(\alpha)} = \Xi^{(\alpha)} \cdot D^e$ と表現しているが [補足 E.6] , 分解せん断応力の理論的意味から Cauchy 応力を用いて式 (5.52) のように表すのが妥当である . 式 (5.52) を整理すれば以下のように書ける .

$$\sum_{\beta} N^{(\alpha\beta)} \Delta \gamma^{(\beta)} = \left(\dot{\gamma}_t^{(\alpha)} + \Lambda^{(\alpha)} \cdot D \right) \Delta t \dots \dots \dots (5.53)$$

ただし, $\text{sgn}(\dot{\gamma}^{(\beta)}) = \text{sgn}(\tau^{(\beta)})$ とし, $\dot{\gamma}_t^{(\alpha)}$, $\Lambda^{(\alpha)}$ および $N^{(\alpha\beta)}$ は以下のように定める.

$$\dot{\gamma}_t^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0^{(\alpha)} \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \left(\left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right| \right)^{\frac{1}{m}-1} \dots\dots\dots (5.54)$$

$$\Lambda^{(\alpha)} = \left(\frac{\theta^{tan} \Delta t \dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{m \tau^{(\alpha)}} \right) (\mathbf{C}^e : \mathbf{P}_S^{(\alpha)}) \dots\dots\dots (5.55)$$

$$N^{(\alpha\beta)} = \delta^{(\alpha\beta)} + \left(\frac{\theta^{tan} \Delta t \dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{m} \right) \left[\frac{(\mathbf{C}^e : \mathbf{P}_S^{(\alpha)}) \cdot \mathbf{P}_S^{(\beta)}}{\tau^{(\alpha)}} + \text{sgn}(\tau^{(\beta)}) \frac{h^{(\alpha\beta)}}{g^{(\alpha)}} \right] \dots\dots\dots (5.56)$$

次に, 式 (5.53) を $\Delta \gamma^{(\alpha)}$ について解くために, $N^{(\alpha\beta)}$ の逆行列を $M^{(\alpha\beta)}$ で表し,

$$\dot{\mathbf{v}}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} M^{(\alpha\beta)} \dot{\gamma}_t^{(\beta)} \dots\dots\dots (5.57)$$

$$\mathbf{Y}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} M^{(\alpha\beta)} \Lambda^{(\beta)} \dots\dots\dots (5.58)$$

とおくと式 (5.53) は

$$\Delta \gamma^{(\alpha)} = \left(\dot{\mathbf{v}}^{(\alpha)} + \mathbf{Y}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{D} \right) \Delta t \dots\dots\dots (5.59)$$

と表すことができる. 式 (5.59) の両辺を Δt で除し, 式 (5.10) に代入すると, 次の構成式を得る.

$$\dot{\mathbf{T}} = \mathbf{C}^{tan} : \mathbf{D} - \sum_{\alpha} \mathbf{E}^{(\alpha)} \dot{\mathbf{v}}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (5.60)$$

ここで, 係数 \mathbf{C}^{tan} は次式で表される.

$$\mathbf{C}^{tan} = \mathbf{C}^e - \sum_{\alpha} \mathbf{E}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{Y}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (5.61)$$

接線係数法が適用された式 (5.60) を Update Lagrangian 形式の仮想仕事の原理式 (5.48) に代入し離散化すれば, 要素剛性方程式が得られ, 通常の FEM 解析の手法を用いることにより, 転位-結晶塑性解析が可能となる. なお, 接線係数法が適用された \mathbf{C}^{tan} は一般に非対称 [補足 E.7] になるため, 有限要素法に適用する場合は後述する剛性マトリクスも非対称となり, 非対称ソルバーを用いる必要がある.

5.8 結晶基底ベクトルの更新

結晶基底ベクトル $s^{(\alpha)}$ および $m^{(\alpha)}$ は結晶格子とともに回転するため, 結晶基底の発展式は下部構造スピン \mathbf{W}^* を用いて

$$\dot{s}^{(\alpha)} = \mathbf{W}^* s^{(\alpha)} \dots\dots\dots (5.62)$$

$$\dot{m}^{(\alpha)} = \mathbf{W}^* m^{(\alpha)} \dots\dots\dots (5.63)$$

のように与えられる⁽⁸³⁾⁽⁸⁴⁾. しかしながら, 式 (5.62) および式 (5.63) を単純に適用し, 時間増分を求めて結晶基底を更新すると, 結晶基底の単位性および直交性が保たれなくなる恐れがある [補足 E.8 参照]. そこで, 本研究ではテイラー展開を利用した次式を用いて結晶基底ベクトルを更新する⁽⁸⁵⁾⁽⁸⁶⁾.

$$\dot{s}_{t+\Delta t}^{(\alpha)} = \Delta \mathbf{R}^* s_t^{(\alpha)} \dots\dots\dots (5.64)$$

$$\dot{m}_{t+\Delta t}^{(\alpha)} = \Delta R^* m_t^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.65)$$

$$R^* = I + \frac{\sin \omega}{\omega} W^* \Delta t + \frac{1 - \cos \omega}{\omega^2} W^{*2} (\Delta t)^2 \dots \dots \dots (5.66)$$

$$\omega^2 = -\frac{\text{tr}\{(W^* \Delta t)^2\}}{2} \dots \dots \dots (5.67)$$

以上の方法を用いることによって、大变形問題を想定した数値解析を行っても、結晶基底ベクトル $s^{(\alpha)}$ および $m^{(\alpha)}$ の単位性および直交性が十分に保たれる。

5.9 仮想仕事率の原理式の離散化

有限要素法とは、微分方程式で表される場の境界値問題を積分形で記述して解くための解析手法の1つで、連続体を有限の大きさに分割して扱うのが特徴である。したがって、要素内の任意の位置における物理量は要素を分割する各節点における量の内挿で表される。各節点における量、すなわち離散化された量の計算には、マトリクスあるいは列ベクトルを用いると都合がよい。ただし、ここでいうベクトルとは物理的なベクトル量ではなく、ある量の成分を適当に並べたものを意味する。本節以降、物理量 A のマトリクス表示を $[A]$ 、列ベクトル表示を $\{A\}$ で表す。そこで本節では前節より得られた接線係数法適用後の結晶塑性構成式をマトリクス表示し、FEM 解析の定式化を行う⁽⁸⁷⁾⁽⁸⁸⁾。

接線係数表示の弾粘塑性構成式 (5.60) を Updated Lagrangian 形式の仮想仕事率の原理式 (5.48) に代入し整理すれば

$$\begin{aligned} & \int_V [\{ (C^{tan} - P) : D \} \cdot \dot{D} + (LT) \cdot \dot{L}] dv \\ & = \oint_a \dot{t} \cdot \dot{v} da + \int_V \rho \dot{f} \cdot \dot{v} dv + \int_V \sum_{\alpha} \Xi^{(\alpha)} \dot{v}^{(\alpha)} dv \dots \dots \dots (5.68) \end{aligned}$$

となる。式 (5.68) を離散化することによって、要素剛性方程式が導かれる。

5.9.1 平面ひずみ問題

まず、式 (5.60) を平面ひずみの場合についてマトリクス表示すると次式のようになる。

$$\begin{Bmatrix} \dot{T}_{11} \\ \dot{T}_{22} \\ \dot{T}_{12} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111}^{tan} & C_{1122}^{tan} & C_{1112}^{tan} \\ C_{2211}^{tan} & C_{2222}^{tan} & C_{2212}^{tan} \\ C_{1211}^{tan} & C_{1222}^{tan} & C_{1212}^{tan} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} D_{11} \\ D_{22} \\ D_{12} \end{Bmatrix} + \sum_{\alpha} \begin{Bmatrix} \Xi_{11}^{(\alpha)} \\ \Xi_{22}^{(\alpha)} \\ \Xi_{12}^{(\alpha)} \end{Bmatrix} \dot{v}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.69)$$

また、式 (5.68) には、変形速度 D の他に速度こう配 L も含まれている。平面ひずみの場合、 D は D_x, D_y および D_{xy} が独立な非零成分であるが、 L は L_x, L_y, L_{xy} および L_{yx} の 4 成分が非零かつ独立となる。

$$\left. \begin{aligned} L_x &= \frac{\partial v_1}{\partial x} = \sum_I \frac{\partial N^I}{\partial x} v_1^I \\ L_y &= \frac{\partial v_2}{\partial y} = \sum_I \frac{\partial N^I}{\partial y} v_2^I \\ L_{xy} &= \frac{\partial v_1}{\partial y} = \sum_I \frac{\partial N^I}{\partial y} v_1^I \\ L_{yx} &= \frac{\partial v_2}{\partial x} = \sum_I \frac{\partial N^I}{\partial x} v_2^I \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (5.70)$$

ただし、 v_1^I および v_2^I は節点 I における節点速度の x 成分および y 成分である。また、 N^I は形状関数である。本研究で用いる 3 角形要素の場合、形状関数 N^I は次式で表される。

$$\left. \begin{aligned} N^1 &= \frac{1}{2S^e} \{(x_2y_3 - x_3y_2) + (y_2 - y_3)x + (x_3 - x_2)y\} \\ N^2 &= \frac{1}{2S^e} \{(x_3y_1 - x_1y_3) + (y_3 - y_1)x + (x_1 - x_3)y\} \\ N^3 &= \frac{1}{2S^e} \{(x_1y_2 - x_2y_1) + (y_1 - y_2)x + (x_2 - x_1)y\} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (5.71)$$

ここで、 S^e は三角形要素の面積を表し、 $x_1, x_2, x_3, y_1, y_2, y_3$ は 1 つの三角形要素を形成する 3 つの節点の x 座標および y 座標である。形状関数を用いて形状関数マトリクス $[N]$ を以下のように定める。

$$[N] = [N^1, N^2, N^3] \quad (N^i = N^i I, \quad i = 1, 2, 3) \dots\dots\dots (5.72)$$

ここで、 N^i は 2×2 の行列であり、 I は 2×2 の単位行列である。さらに、式 (5.70) をマトリクス形式で示すと

$$\left\{ \begin{array}{l} L_x \\ L_y \\ L_{xy} \\ L_{yx} \end{array} \right\} = \left[\begin{array}{cccccc} \frac{\partial N^1}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N^3}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^1}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N^3}{\partial y} \\ \frac{\partial N^1}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N^3}{\partial y} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^1}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N^3}{\partial x} \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{l} v_1^1 \\ v_2^1 \\ v_1^2 \\ v_2^2 \\ v_1^3 \\ v_2^3 \end{array} \right\} \dots\dots\dots (5.73)$$

となり、まとめて表記すれば

$$\{L\} = [E]\{v\} \dots\dots\dots (5.74)$$

と書ける。一方、 D の成分は $D_x = L_x, D_y = L_y, 2D_{xy} = L_{xy} + L_{yx}$ であるので

$$\left\{ \begin{array}{l} D_x \\ D_y \\ 2D_{xy} \end{array} \right\} = \left[\begin{array}{cccccc} \frac{\partial N^1}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N^3}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^1}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N^3}{\partial y} \\ \frac{\partial N^1}{\partial y} & \frac{\partial N^1}{\partial x} & \frac{\partial N^2}{\partial y} & \frac{\partial N^2}{\partial x} & \frac{\partial N^3}{\partial y} & \frac{\partial N^3}{\partial x} \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{l} v_1^1 \\ v_2^1 \\ v_1^2 \\ v_2^2 \\ v_1^3 \\ v_2^3 \end{array} \right\} \dots\dots\dots (5.75)$$

と書け、まとめて記述すれば

$$\{D\} = [B]\{v\} \dots\dots\dots (5.76)$$

となる。なお、 $[B]$ は B マトリクスと称され、要素節点変位と要素内ひずみを結びつける行列の表示として慣用されている。

一方、弾粘塑性構成式 (5.69) は増分形で表現することができる。仮想仕事率の原理も増分形で表現すると、変位や応力の加え合わせが簡単にできる。そこで、式 (5.74) および式 (5.76) を増分形に書き直し

$$\left. \begin{aligned} \{L\Delta t\} &= [E]\{\Delta u\} \\ \{D\Delta t\} &= [B]\{\Delta u\} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (5.77)$$

と表す。ここで、 $\{\Delta u\}$ は節点変位増分である。以上の関係を用いて、仮想仕事率の原理式 (5.68) を離散化すれば、最終的に次式のような要素剛性方程式が得られる。

$$\int_{v^E} \{[B]^T ([C^{tan}] - [F])[B] + [E]^T [G][E]\} dv \{\Delta u\} \\ = \oint_{a^E} [N]^T \{\Delta \mathbf{t}\} da + \int_{v^E} [N]^T \{\Delta f\} dv + \int_{v^E} [B]^T \sum_{\alpha} \{\boldsymbol{\varepsilon}\}^{(\alpha)} \Delta \tilde{v}^{(\alpha)} dv \dots\dots\dots (5.78)$$

ここで、 $[F]$ および $[G]$ はそれぞれ次式で表される。

$$[F] = \begin{bmatrix} 2T_{11} & 0 & T_{12} \\ & 2T_{22} & T_{12} \\ \text{Symmetric} & & \frac{1}{2}(T_{11} + T_{22}) \end{bmatrix} \dots\dots\dots (5.79)$$

$$[G] = \begin{bmatrix} T_{11} & 0 & T_{12} & 0 \\ & T_{22} & 0 & T_{12} \\ & & T_{22} & 0 \\ \text{Symmetric} & & & T_{11} \end{bmatrix} \dots\dots\dots (5.80)$$

式 (5.78) は通常の静的陽解法における要素剛性方程式の形で

$$[k^E]\{\Delta u\} = \{\Delta \bar{f}\} \dots\dots\dots (5.81)$$

とまとめることができる。ただし、要素剛性マトリクス $[k^E]$ および外力ベクトル $\{\Delta \bar{f}\}$ はそれぞれ

$$[k^E] = \int_{v^E} \{[B]^T ([C^{tan}] - [F])[B] + [E]^T [G][E]\} dv \dots\dots\dots (5.82)$$

$$\{\Delta \bar{f}\} = \oint_{a^E} [N]^T \{\Delta \mathbf{t}\} da \\ + \int_{v^E} [N]^T \{\Delta f\} dv + \int_{v^E} [B]^T \sum_{\alpha} \{\boldsymbol{\varepsilon}\}^{(\alpha)} \Delta \tilde{v}^{(\alpha)} dv \dots\dots\dots (5.83)$$

である．構造全体に対して式 (5.82) の和をとれば，次式のような全体剛性方程式が得られる．

$$[K]\{\Delta U\} = \{\Delta \bar{F}\} \dots\dots\dots (5.84)$$

$$[K] = \sum_E [k^E] \dots\dots\dots (5.85)$$

ここで， $\{\Delta U\}$ および $\{\Delta \bar{F}\}$ は構造の全節点について番号順にそれぞれ節点変位増分および節点力増分を並べてできるベクトルである．また， \sum_E は要素から構造全体への和を意味し， $[K]$ は全体剛性マトリクスと呼ばれる．

式 (5.84) が弾性境界値問題と異なるのは，節点力と変位の関係ではなく，節点力増分と変位増分の関係であること，剛性マトリクスの中に，構成関係式 $[C^{tan}]$ だけでなく，幾何学的非線形性⁽⁸⁹⁾⁽⁸⁷⁾⁽⁸⁸⁾ に起因する $[F]$ および $[G]$ という 2 つのマトリクスが付加されていること，粘塑性特有の項が付加されている点などである．

5.9.2 3次元問題

3次元においても，離散化の手続きは平面ひずみの場合とまったく同様である．ただし，3次元の場合には平面ひずみの場合と異なり，応力あるいは速度こう配などのテンソルはすべての成分が非零であるので，テンソル成分をベクトルの形に並べ直すことはせず，そのままの表現を用いて有限要素法に適応するよう離散化する．

まず，次式のように仮想仕事率の原理式 (5.68) の左辺を Q^E とおき，要素剛性マトリクスを求める過程を考える．

$$Q^E = \int_{v^E} [\{ (C^{tan} - P) : D \} \cdot \check{D} + (LT) \cdot \check{L}] dv \dots\dots\dots (5.86)$$

式 (5.86) に $D = L_S$ を考慮し整理すると

$$Q^E = \int_{v^E} (C : L) \cdot \check{L} dv \dots\dots\dots (5.87)$$

となる．ただし，

$$C = C^{tan} + S \dots\dots\dots (5.88)$$

$$S_{ijkl} = \frac{1}{2} (T_{jl}\delta_{ik} - T_{ik}\delta_{jl} - T_{il}\delta_{jk} - T_{jk}\delta_{il}) \dots\dots\dots (5.89)$$

である．本研究では図 5.7 に示すような 8 節点アイソパラメトリック要素を用いる．この要素の形状関数は，自然座標系で，

$$N^k = \frac{1}{8} (1 + \xi^k \xi^k)(1 + \eta^k \eta^k)(1 + \zeta^k \zeta^k) \quad (k = 1, \dots, 8) \dots\dots\dots (5.90)$$

と表せる．ただし， ξ^k ， η^k および ζ^k は節点 k の自然座標値である．この形状関数を用いて，要素内の任意

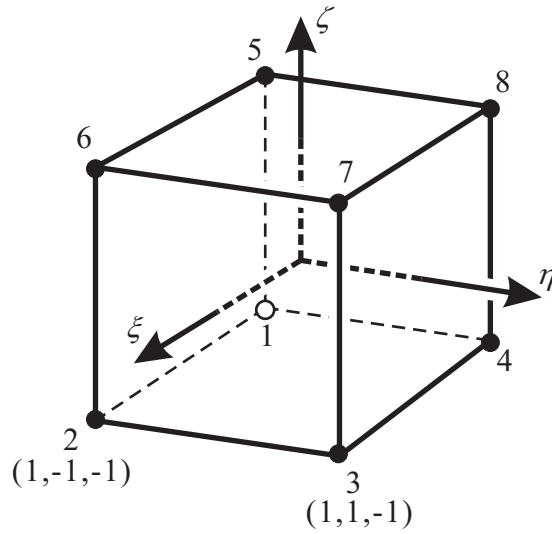


Fig. 5.7 Eight-node isoparametric element

の点の空間における位置 x , 速度 v および仮想速度 \check{v} を表すと

$$\left. \begin{aligned} x &= \sum_k N^k x^k \\ v &= \sum_k N^k v^k \\ \check{v} &= \sum_k N^k \check{v}^k \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (5.91)$$

と書ける．ここで、 x^k 、 v^k および \check{v}^k は節点 k における位置座標、速度および仮想速度である．本研究では式 (5.87) の右辺の積分項の計算を 8 積分点で行う完全積分法を用いる．まず、速度こう配 L および仮想速度こう配 \check{L} は

$$\left. \begin{aligned} L &= \sum_k (\text{grad} N^k \otimes v^k)^T \\ \check{L} &= \sum_k (\text{grad} N^k \otimes \check{v}^k)^T \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (5.92)$$

と表される．これらの関係を式 (5.87) に代入すれば、要素剛性マトリクスが

$$\begin{aligned} Q^E &= \int_{v^E} (C : L) \cdot \check{L} dv \\ &= \int_{v^E} \left\{ C : \sum_k (\text{grad} N^k \otimes \check{v}^k)^T \right\} \cdot \sum_l (\text{grad} N^l \otimes v^l)^T dv \\ &= \sum_k \check{v}^k \sum_l \left(\int_{v^E} \text{grad} N^k C \text{grad} N^l dv \right) v^l \\ &= \sum_k \check{v}^k \sum_l [k^E]^{kl} v^l \dots\dots\dots (5.93) \end{aligned}$$

と求まる．ここで， $[k^E]^{kl}$ は次式に示す節点 k と l に関する要素剛性マトリクスである．

$$[k^E]^{kl} = \int_{v^E} \text{grad}N^k C \text{grad}N^l dv \dots \dots \dots (5.94)$$

構造全体に対して式 (5.94) の和をとり，全体剛性方程式を求めるのは平面ひずみ問題と同様である．

第6章

転位パターンニングに対するFDM解析

本章では，第4章で得られた反応-拡散方程式 (4.62) を用いて FDM 解析を行う⁽⁴¹⁾⁽⁴²⁾．シミュレーションを行うに際して，反応-拡散方程式に差分近似を用いて差分方程式へと変換する．差分近似とは，偏微分方程式の数値解法の1つで接線のこう配を曲線上の近接2点間のこう配で近似するものである⁽⁹⁰⁾．反応-拡散方程式における各材料定数は，反応および生成・消滅モデルに対する速度係数および拡散係数であり，それらの測定は困難であるため，各モデルが示す項がパターンに及ぼす影響について検討し，転位セル構造の形成，セル構造の再分割およびサブグレインの形成ができるように各速度係数を決定する．ただし材料定数は各ステージにおいて基準条件式 (4.71) および本章で示す Neumann の安定条件を満たすようにする．なお，すべての解析例は自作の FDM ソースコードによるものである．

6.1 差分方程式

式 (4.62) を 2 次元 FDM 解析に適した形にするため，差分近似を施し差分方程式に変換する．まず，図 6.1 に示すような差分格子を考える．解析領域を 1 辺の長さが W の正方形とし， x 方向の格子間隔 Δx および y 方向の格子間隔 Δy を等しいものとして $\Delta x = \Delta y = h$ とすれば，解析領域の格子点数は $(W/h + 1) \times (W/h + 1)$ となる．さらに，時刻 t における任意の点 (x, y) の α^m および α^i の値を $\alpha_{x,y,t}^m$ および $\alpha_{x,y,t}^i$ と表す．時間増分を $\Delta t = k$ とし，式 (4.62) を差分近似をすれば，次式のような差分方程式が得られる [補足 F.1 参照]．

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{x,y,t+\Delta t}^m - \alpha_{x,y,t}^m &= \frac{kD^m}{h^2} \left(\alpha_{x+\Delta x,y,t}^m + \alpha_{x-\Delta x,y,t}^m + \alpha_{x,y+\Delta y,t}^m + \alpha_{x,y-\Delta y,t}^m - 4\alpha_{x,y,t}^m \right) \\ &\quad + k \left(-K_0 \alpha_{x,y,t}^m + K_1 \alpha_{x,y,t}^i - K_2 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^i - K_3 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^{i^2} \right. \\ &\quad \left. - K_4 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^{i^3} - L_1 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^i \right) \\ \alpha_{x,y,t+\Delta t}^i - \alpha_{x,y,t}^i &= \frac{kD^i}{h^2} \left(\alpha_{x+\Delta x,y,t}^i + \alpha_{x-\Delta x,y,t}^i + \alpha_{x,y+\Delta y,t}^i + \alpha_{x,y-\Delta y,t}^i - 4\alpha_{x,y,t}^i \right) \\ &\quad + k \left(K_0 \alpha_{x,y,t}^m - K_1 \alpha_{x,y,t}^i + K_2 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^i + K_3 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^{i^2} \right. \\ &\quad \left. + K_4 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^{i^3} - L_1 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^i + B_0 - B_2 \alpha_{x,y,t}^{i^2} \right) \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (6.1)$$

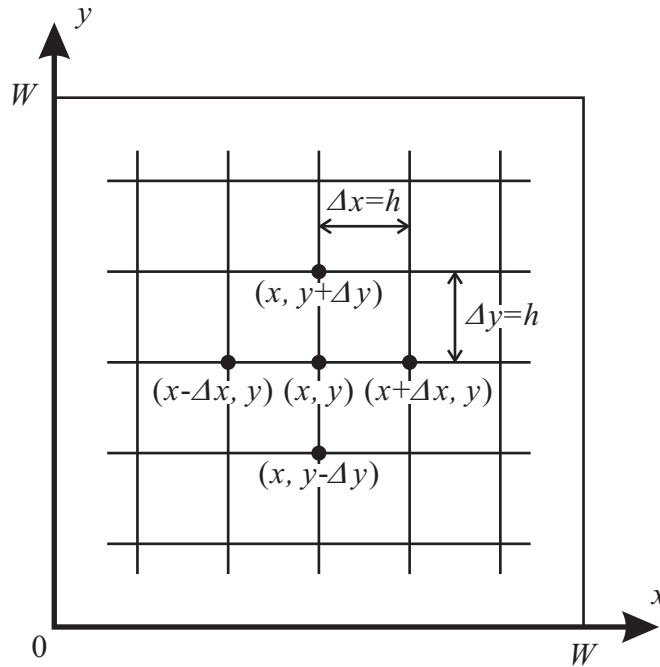


Fig. 6.1 Grids for finite difference method

6.2 Neumann の安定条件

式 (6.1) において、 $\alpha_{x,y,t+\Delta t}^{[n]}$ が正であるための必要十分条件を考えれば、Neumann の安定条件として次式を得る [補足 F.2 参照] .

$$\left. \begin{aligned} k^m &\leq \frac{1}{4D^m/h^2 + K_0 + K_2\alpha_{x,y,t}^i + K_3\alpha_{x,y,t}^{i^2} + K_4\alpha_{x,y,t}^{i^3} + L_1\alpha_{x,y,t}^i} \\ k^i &\leq \frac{1}{4D^i/h^2 + K_1 + L_1\alpha_{x,y,t}^i + B_2\alpha_{x,y,t}^i} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (6.2)$$

式 (6.2) は時間ステップ，格子間隔，速度係数および拡散係数の関係として満たすべき条件であり，それらは互いに依存性を持つことから，各々を独立に定めることができない。

6.3 境界条件および材料定数

初期条件として可動転位密度の初期値 α_0^m および不動転位密度の初期値 α_0^i には，それぞれ約 10% のゆらぎを与えるものとする．解析領域は $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$ の xy 平面として，初期条件，格子間隔および時間増分を次式のように設定する．

$$\left. \begin{aligned} W &= 10\ \mu\text{m}, & h &= 0.1\ \mu\text{m}, & k &= 0.1\ \text{ms}, \\ \alpha_0^m &= 150/\mu\text{m}^2, & \alpha_0^i &= 1000/\mu\text{m}^2 \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (6.3)$$

したがって、解析領域の格子点数は 101×101 となる。また、境界条件には次式に示す境界値およびこう配に関する周期境界条件を用いる。

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{x,0}^m &= \alpha_{x,W}^m, \quad \alpha_{x,0}^i = \alpha_{x,W}^i && \text{at } 0 < x < W \\ \alpha_{0,y}^m &= \alpha_{W,y}^m, \quad \alpha_{0,y}^i = \alpha_{W,y}^i && \text{at } 0 < y < W \\ \alpha_{0,0}^m &= \alpha_{0,W}^m = \alpha_{W,W}^m = \alpha_{W,0}^m, \quad \alpha_{0,0}^i = \alpha_{0,W}^i = \alpha_{W,W}^i = \alpha_{W,0}^i \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (6.4)$$

本解析で用いる各数値パラメータに関しては、ステージ I では転位同士の相互作用があまり起こらない段階なので自己組織化による空間パターンが発現しないように、ステージ II ではセル構造およびセル構造の再分割過程が発現するように、ステージ III ではサブグレインの空間パターンが発現するように、式 (4.71) に示す条件に基づき式 (5.36) および式 (5.40) における各係数パラメータおよび拡散係数を次式のように設定する。

$$\left. \begin{aligned} K_0^I &= 0 /s^1, & K_1^I &= 2.52 /s^1, & K_2^I &= 0.8 \mu\text{m}^2/\text{ks}, \\ K_3^I &= 12 \mu\text{m}^4/\text{Ms}, & K_4^I &= 4 \mu\text{m}^6/\text{Gs}, & L_1^I &= 0 \mu\text{m}^2/\text{ks}, \\ D^{mI} &= 14 \mu\text{m}^2/\text{ks}, & D^{iI} &= 0.136 \mu\text{m}^2/\text{ks}, \\ d^{*I} &= \frac{D^{iI}}{D^{mI}} = 0.00971 \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (6.5)$$

$$\left. \begin{aligned} K_0^{II} &= 18 /s, & K_1^{II} &= 116 /s, & K_2^{II} &= 36 \mu\text{m}^2/\text{ks}, \\ K_3^{II} &= 540 \mu\text{m}^4/\text{Ms}, & K_4^{II} &= 180 \mu\text{m}^6/\text{Gs}, & L_1^{II} &= 0 \mu\text{m}^2/\text{ks}, \\ D^{mII} &= 16100 \mu\text{m}^2/\text{ks}, & D^{iII} &= 1570 \mu\text{m}^2/\text{ks}, \\ d^{*II} &= \frac{D^{iII}}{D^{mII}} = 0.0971 \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (6.6)$$

$$\left. \begin{aligned} K_0^{II*} &= 18 /s, & K_1^{II*} &= 320 /s, & K_2^{II*} &= 101 \mu\text{m}^2/\text{ks}, \\ K_3^{II*} &= 1510 \mu\text{m}^4/\text{Ms}, & K_4^{II*} &= 504 \mu\text{m}^6/\text{Gs}, & L_1^{II*} &= 0 \mu\text{m}^2/\text{ks}, \\ D^{mII*} &= 16100 \mu\text{m}^2/\text{ks}, & D^{iII*} &= 1570 \mu\text{m}^2/\text{ks}, \\ d^{*II*} &= \frac{D^{iII*}}{D^{mII*}} = 0.0971 \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (6.7)$$

$$\left. \begin{aligned} K_0^{III} &= 0 /s, & K_1^{III} &= 307 /s, & K_2^{III} &= 97.2 \mu\text{m}^2/\text{ks}, \\ K_3^{III} &= 1460 \mu\text{m}^4/\text{Ms}, & K_4^{III} &= 486 \mu\text{m}^6/\text{Gs}, & L_1^{III} &= 3 \mu\text{m}^2/\text{ks}, \\ D^{mIII} &= 16100 \mu\text{m}^2/\text{ks}, & D^{iIII} &= 627 \mu\text{m}^2/\text{ks}, \\ d^{*III} &= \frac{D^{iIII}}{D^{mIII}} = 0.0389 \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (6.8)$$

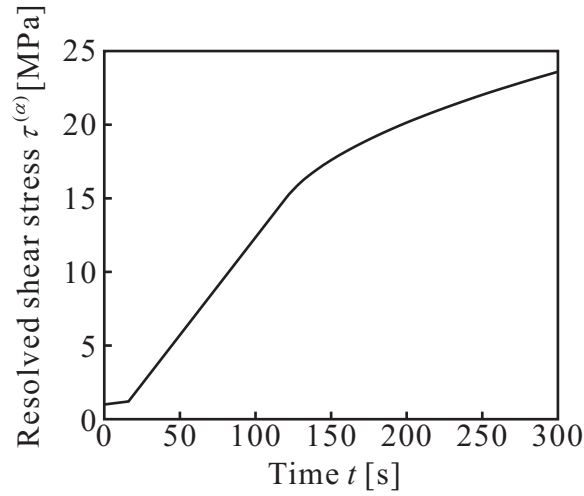


Fig. 6.2 Resolved shear stress versus time curve

$$\left. \begin{aligned}
 \tau^* &= 1.2 \text{ MPa}, & \tau^K &= 11.3 \text{ MPa}, \\
 \tau^{**} &= 15 \text{ MPa}, & k_1 = k_2 = k_3 = k_4 &= 8000 / \text{MPa}, \\
 p_1 &= 0.00016 \mu\text{m}^2 / (\text{MPa}^4 \text{ks}), & p_2 &= 0.1 \mu\text{m}^2 / \text{ks}, \\
 B_2^{\text{II}*} &= 2.71 \mu\text{m}^2 / \text{ks}, & B_2^{\text{III}} &= 0.94 \mu\text{m}^2 / \text{ks}
 \end{aligned} \right\} \dots (6.9)$$

なお、今後特に指定がない場合は上式の値を用いる。応力効果係数モデルには式 (5.36) および式 (5.40) を適用するが、本章にて行う数値解析は転位場のパターンニングの再現を目的とした FDM 解析であり、FEM 等から得られる変形場の情報である分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ の情報を得ることができない。そこで、時刻 t の増加とともに $\tau^{(\alpha)}$ が増加することを想定し、図 6.2 に示すように、時刻 t と分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ の関係を次式のように与える。

$$\left. \begin{aligned}
 \tau^{(\alpha)} &= 0.0125 t + 1 & ; & \quad (\tau^{(\alpha)} < \tau^*) \\
 \tau^{(\alpha)} &= 0.132692 t - 0.92308 & ; & \quad (\tau^* \leq \tau^{(\alpha)} < \tau^{**}) \\
 \tau^{(\alpha)} &= 0.8 (t - 110.9128)^{\frac{1}{2}} + 12.58841 & ; & \quad (\tau^{(\alpha)} \geq \tau^{**})
 \end{aligned} \right\} \dots (6.10)$$

式 (6.10) を用いることによって図 6.2 に示すような擬似的な単結晶の 3 段階硬化を応力効果係数モデルへと仮想的に反映させる。

6.4 ステージ II のセル構造に対する転位モデルの検討

6.4.1 拡散係数比についての検討

セル構造が成長することでセルサイズが最大となるステージ II 前半の不安定線図および空間的不均一性の起こる領域 II 内で拡散係数比を変化させた場合の解析結果を図 6.3 に示す。同図はステップ数が 560,000

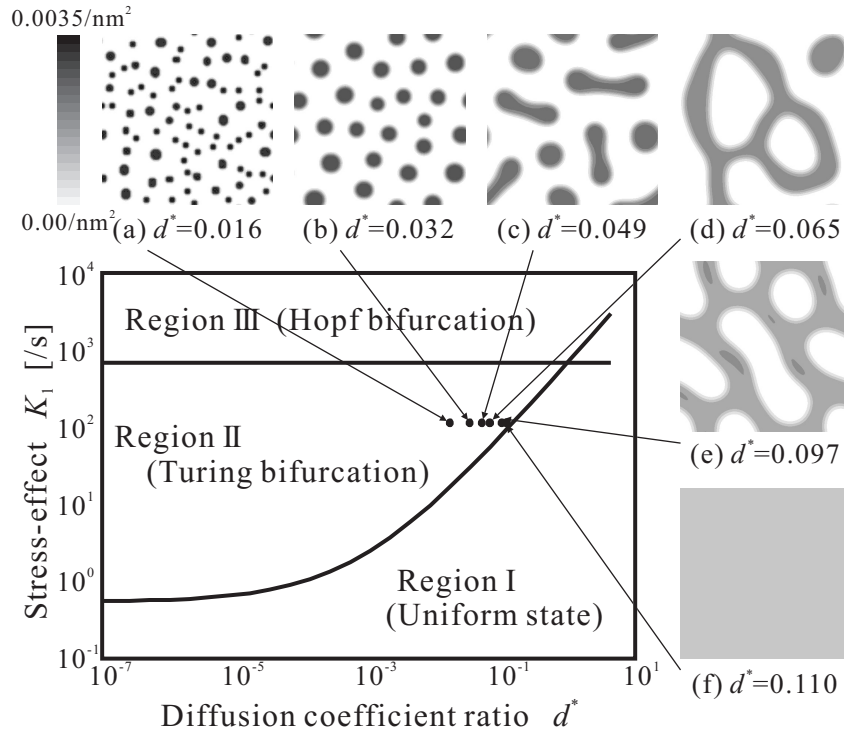


Fig. 6.3 Pattern dependence on d^* for cell pattern in stage II

のとき、すなわち $\tau^{(\alpha)} = 6.5 \text{ MPa}$ のときの不動転位密度分布を表している。図 6.3 を見ると、拡散係数比が Turing 分岐境界曲線から離れて、平衡から遠い非平衡状態にある条件では、図 6.3(a) のようにドット状に不動転位が散在するが、拡散係数比の値を 1 に近づけ、系が平衡状態に近づくにつれて、点在する不動転位パターンの波長は大きくなり、転位密度が薄くなりながら図 6.3(b) に示す Vein 構造のようなパターンが表れる。さらに Turing 分岐境界曲線に近づくと、図 6.3(c) のように不動転位の高密度領域が結合し、図 6.3(d) のようなスピノーダル分解に似たパターンが発現する。一方、図 6.3(e) に示すように、Turing 分岐境界曲線の近傍の領域では径が $4 \mu\text{m}$ 程度のセル構造が発現するが、拡散係数比の値を Turing 分岐境界曲線に近づけすぎると、図 6.3(f) のような空間均一状態となりパターンは形成されない。以上のことから、セル構造は Turing 分岐境界曲線より負の方向に約 5% 程離れた微小範囲でのみ形成されることがわかる。

6.4.2 速度係数パラメータについての検討

可動転位が不動化する過程を示す K_2 項が転位パターンニングに及ぼす影響について調べるために K_2^{II} の値を変化させて解析を行った結果を図 6.4 に示す。図 6.4(a)、図 6.4(b)、図 6.4(c)、図 6.4(d)、図 6.4(e) および図 6.4(f) はそれぞれ K_2^{II} を $24 \mu\text{m}^2/\text{ks}$ 、 $30 \mu\text{m}^2/\text{ks}$ 、 $36 \mu\text{m}^2/\text{ks}$ 、 $60 \mu\text{m}^2/\text{ks}$ 、 $100 \mu\text{m}^2/\text{ks}$ および $140 \mu\text{m}^2/\text{ks}$ と変化させた場合の不動転位密度の分布図である。図 6.4(a) から図 6.4(f) ではいずれもセル構造が形成されているが、セルサイズはほぼ同じであり、 K_2 の値の変化がセル構造のパターンニングに与える影響はあまり顕著に見られない。しかしながら、 K_2 の値が増加するにつれ、セル壁(不動転位の高密度領域)とセル内部(不動転位の低密度領域)の境界が明瞭となる様子が確認できる。このように、2 次の転位蓄積を表すモデルである K_2 は転位密度の空間こう配の大きさを左右するため、本モデルにおいて重要な項であるといえ

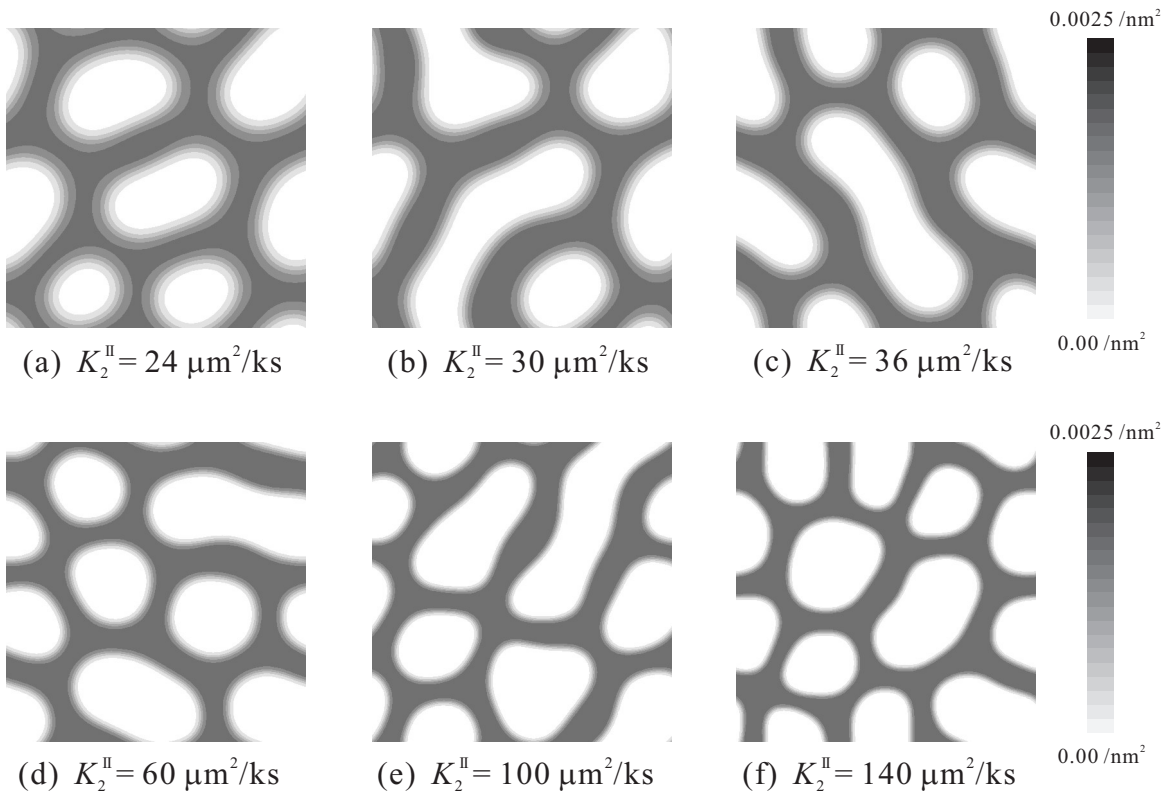


Fig. 6.4 Pattern dependence on reaction-term K_2^{II}

る．また，実際にはセル構造はサブグレインに比べて転位の高密度領域と低密度領域の境界が明瞭ではないため，セル内部からセル壁に向かって徐々に転位密度の値が変化するのが望ましい．したがって，適度に転位密度の空間こう配が存在する図 6.4(c) に示す転位パターンをセルパターンとし， K_2^{II} の値は $36 \mu\text{m}^2/\text{ks}$ とする．以上の検討から，ステージ II 特有の物理現象を表すモデルにおける係数パラメータに適当な値を導入することで，ステージ II における転位組織形成が再現可能となることがわかる．

6.5 ステージ II のセル構造の再分割に対する転位モデルの検討

6.5.1 拡散係数比についての検討

一度形成されたセル構造が再分割する過程を示すステージ II 後半の不安定線図および空間的不均一性の起こる領域 II で拡散係数比を変化させたときの定常解を図 6.5 に示す．同図はステップ数が 1,120,000 のとき，すなわち $\tau^{(a)} = 13.9 \text{ MPa}$ のときの不動転位密度の分布図である．図 6.5 を見ると，拡散係数比が Turing 分岐境界曲線から離れ，系が平衡から遠い非平衡状態にある場合には，図 6.5(a) のようにセル構造を模ったような環状のパターンとその周りにドットパターンやスピノーダル分解のようなパターンが散在しているが，拡散係数比の値を 1 に近づけ，系を平衡状態へ近づけるにつれて図 6.5(b) のように環状パターン周辺のドットパターンの数やスピノーダル分解的パターンの波長が減少する．ついには図 6.5(c) のようにドットパターンが存在しなくなり，環状のパターンのみが存在するようになる．さらに Turing 分岐境界曲線に拡散係数比が近づくと，図 6.5(d) のように環状パターンは隣合う環状パターンと結合するようにラビリン

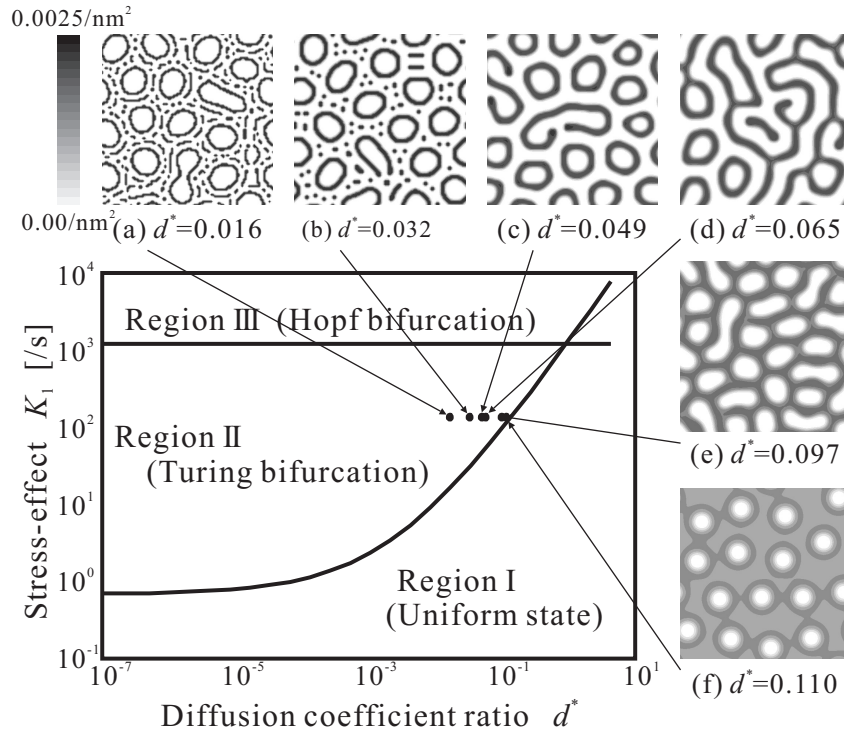


Fig. 6.5 Pattern dependence on d^* for repartitioned cell pattern in stage II

的パターンが発現する。また，Turing 分岐境界曲線近傍のある一定領域のみで図 6.5(e) に示すセルサイズが $1\mu\text{m}$ 程度のセル構造が発現し，その領域を超えて拡散係数比の値を Turing 分岐境界曲線に近づけると，図 6.3(f) のような空間均一状態に近い円形パターンが形成される。セル構造が Turing 分岐境界曲線より負の方向に約 5% 程離れた微小範囲でのみ形成されることは 6.4 節と同様である。

実験によって観察されたセル構造の TEM 写真⁽¹⁾ および本解析で得られた再分割後のセルパターンを図 6.6 に示す。本解析結果におけるセル壁内の平均転位密度は $1200/\mu\text{m}^2$ であり，セル内部の平均転位密度は $200/\mu\text{m}^2$ となっている。セル内部の転位密度がセル壁内の転位密度の数分の 1 以下となっており，このことは実験的観察事実⁽¹⁾ とほぼ整合する。以上のことから，セル壁およびセル内部の平均転位密度の密度差に関して本モデルは妥当であるといえる。また，セル構造の波長は $1\mu\text{m} \sim 2\mu\text{m}$ 程度となっており，図 6.6 における解析結果および実験的観察はパターンとしてよく一致していることが確認できる。ステージ II における再分割されたセル構造の自己組織化現象を表現する数理モデルとして本モデルが定量的にも妥当であることがわかる。なお，ステージ II においては，定常状態における特性波長の式 (4.96) に式 (6.6) に示す材料定数の値を代入すると，セル構造の理論波長 λ は $1.77\mu\text{m}$ となり，セル構造の波長は反応-拡散モデルにおいて予想し得ることがわかる。

6.5.2 速度係数パラメータについての検討

図 6.7(a)，図 6.7(b)，図 6.7(c)，図 6.7(d) および図 6.7(e) はそれぞれ，ダイポールの対消滅を表す B_2 項のモデルである式 (5.40) における応力増加に関する数値パラメータ p_1 を $0.000001\mu\text{m}^2/(\text{MPa}^4\text{ks})$ ， $0.00002\mu\text{m}^2/(\text{MPa}^4\text{ks})$ ， $0.0001\mu\text{m}^2/(\text{MPa}^4\text{ks})$ ， $0.00016\mu\text{m}^2/(\text{MPa}^4\text{ks})$ および $0.00032\mu\text{m}^2/(\text{MPa}^4\text{ks})$ と変化させ

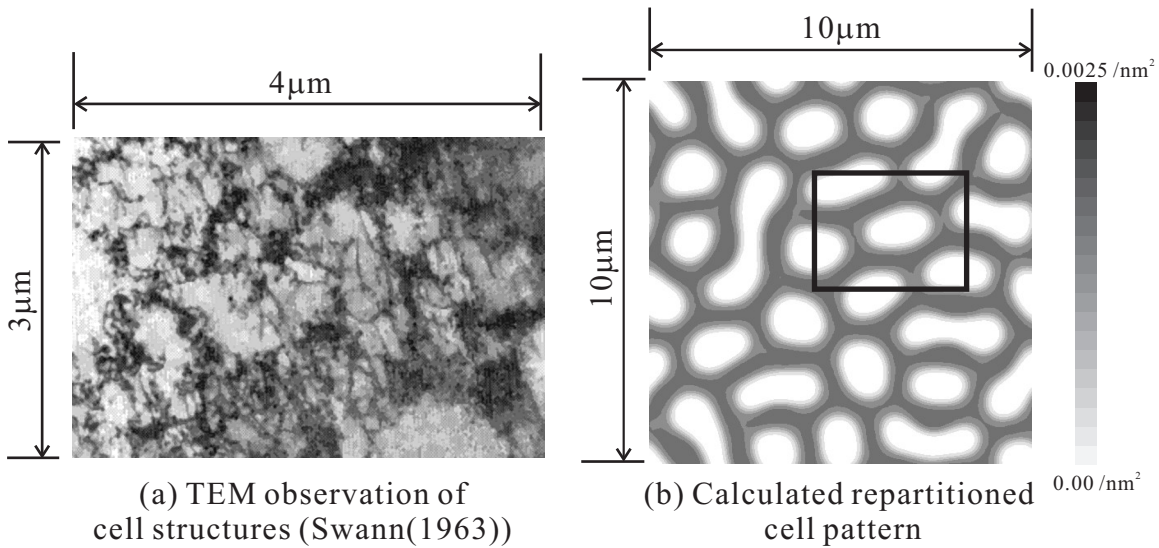


Fig. 6.6 Comparison of repartitioned cell structures between calculation and TEM observation⁽¹⁾ in stage II

た場合の転位パターンニングであり、セルが一度形成し終えるステージ II の途中からのパターンを時系列で表している。ただし、式 (5.40) における p_2 の値は $p_2 = 0.1 \mu\text{m}^2/\text{ks}$ と一定としている。図 6.7(a) を見ると、セルサイズが大きくなりながらセル同士が合体し、回復を起こしながら $4 \mu\text{m}$ 程度のセル構造が形成され定常状態となっているのがわかる。図 6.7(b) では $4 \mu\text{m}$ 程度のセル構造が形成された後、セルサイズが若干小さくなりながら楕円形から折れ曲がったセルへと変化し定常状態となる。図 6.7(c) を見ると、形成されたセル構造は形が崩れ始め、ラビリンズのパターンへと変化し定常化しているのが観察できる。さらに p_1 の値を高くした図 6.7(d) では $4 \mu\text{m}$ 程度のセルの形が崩れた後、セル中央部から千切れるように再分割し、およそ $2 \mu\text{m}$ 程度のセル構造が形成され定常化する。さらに p_1 の値が高くなると図 6.7(e) のように、セルが一度は再分割されるものの、その後は空間均一状態になる。このように、式 (5.40) で表される応力増加に伴って転位の生成・消滅率が増加する応力効果係数モデルを用いることで図 6.7(d) のようなセル構造の再分割過程が再現でき、式 (5.40) で表される B_2 項に対する応力効果係数モデルは重要なモデルといえる。

可動転位が不動化する過程を示す K_2 の値を、ステージ II 前半の値である $K_2^{\text{II}} = 36 \mu\text{m}^2/\text{ks}$ からステージ II 後半の値 $K_2^{\text{II}*}$ として $36 \mu\text{m}^2/\text{ks}$, $100 \mu\text{m}^2/\text{ks}$, $180 \mu\text{m}^2/\text{ks}$ および $270 \mu\text{m}^2/\text{ks}$ へと変化させたときの解析結果を、それぞれ図 6.8(a), 図 6.8(b), 図 6.8(c), 図 6.8(d) および図 6.8(e) に示す。図 6.8(a) を見ると、 K_2 の値は変化していないが、円形状のパターンが規則正しく形成されており、セル内部とセル壁の境界部における転位密度の空間こう配が低いため、明確なセルが形成されているとはいえない。一方、 K_2 項の値が高くなると図 6.8(b) のように、形状およびセルサイズにある程度のゆらぎを有する径が約 $2 \mu\text{m}$ 程度のセル構造パターンが形成される。図 6.8(a) と比較して、セル壁は薄くなり、セル壁との転位密度差はより明確になっている。さらに K_2 項の値を高くした解析結果である 6.8(c) を見ると、図 6.8(b) に比べセル径は減少し、転位壁が薄くなり、形状およびセルサイズがほぼ同じセルパターンが一様に分布しているのがわかる。また、 K_2 項の値をさらに高めると、図 6.8(d) のように転位壁が厚い四角形状のパターンが形成される。同図の結果では図 6.8(c) よりもセル内部とセル壁との転位密度こう配がさらに高くなる。以上のように、ステージ II 後半のセル再分割過程において、転位蓄積を表す K_2 項はセルの再分割後の形状に大きな影響を

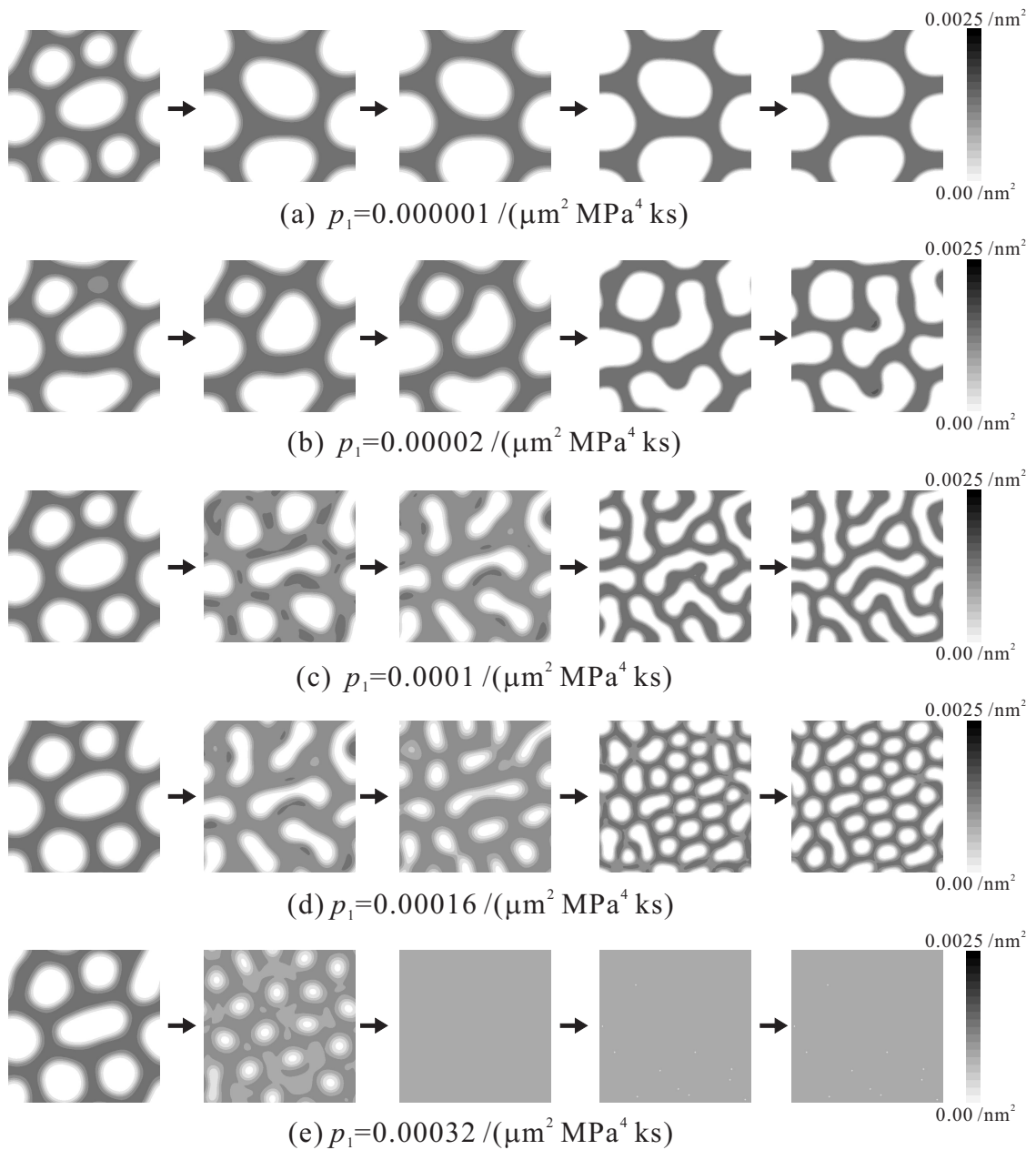


Fig. 6.7 Pattern dependence on p_1 for annihilation-term B_2

与え、 K_2 項の値が高いほどセルサイズが減少し、セル壁内とセル内部の転位密度こう配が高くなる傾向がある。本研究ではセルサイズおよび形状に適度なゆらぎを発生する $K_2^{\text{II}*} = 100 \mu\text{m}^2/\text{ks}$ を用いてセル構造の再分割過程を再現する。

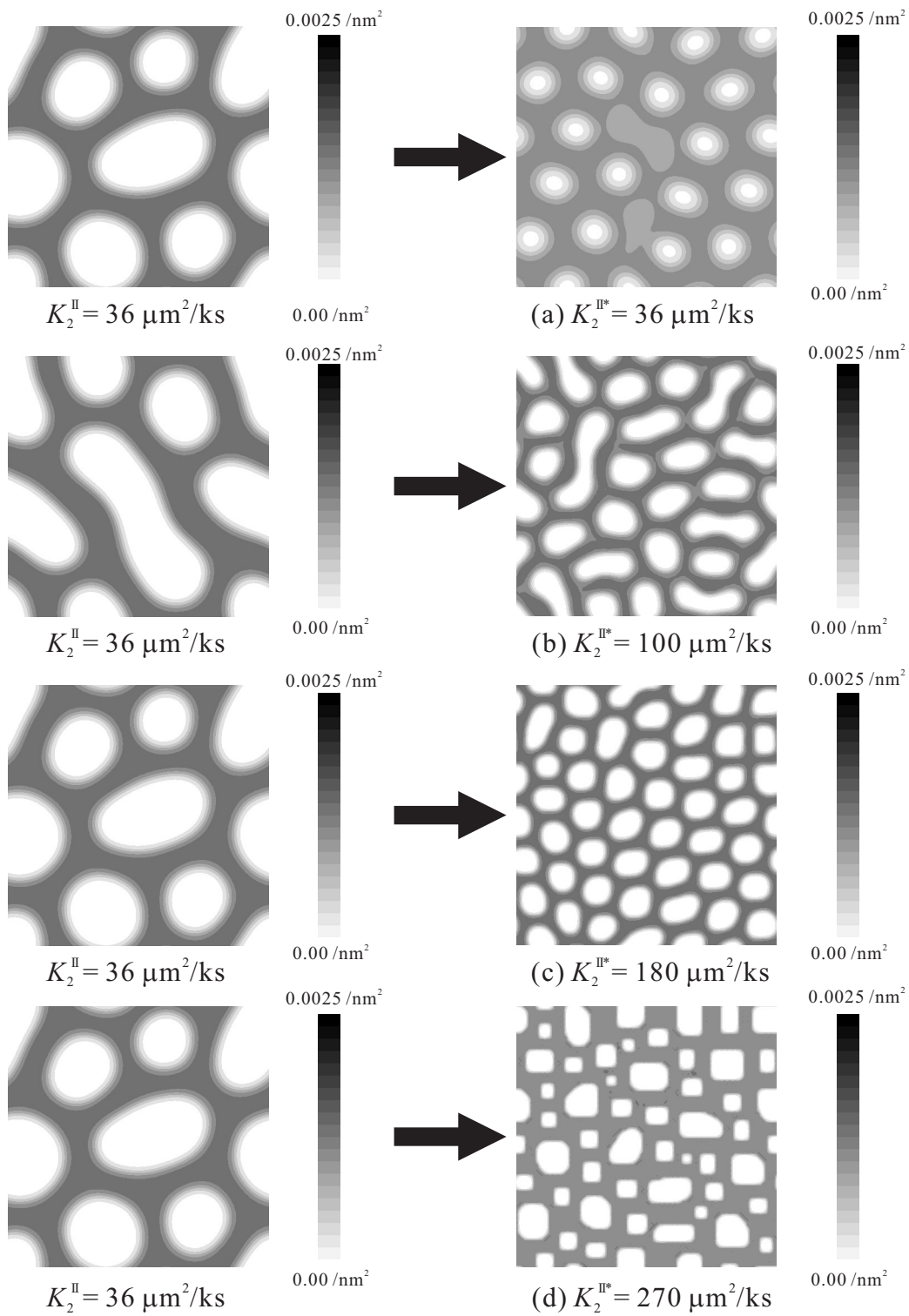


Fig. 6.8 Pattern dependence on reaction-term $K_2^{\text{II}^*}$

6.6 ステージ III に対する転位モデルの検討

6.6.1 拡散係数比についての検討

ステージ III における不安定線図および空間的不均一の起こる領域 II で拡散係数比を変化させたときの定常解を図 6.9 に示す．通常，サブグレインは再分割されたセル構造が遷移して形成されるパターンであるため，まずはステージ II 前半でセル構造が形成し，ステージ II の後半においてセル構造が再分割しなければ，ステージ III においてサブグレインが形成することはない．そこで本節では，ステージ I およびステージ II における A^I , A^{II} , A^{II*} , p_1 および p_2 の値として，式 (6.5)，式 (6.6) および式 (6.7) に示す値を用い，図 6.3(e) および図 6.5(e) の転位パターンが発現した後，ステージ III において拡散係数比を変化させステージ III における定常状態が発現するまで計算をしている．図 6.9(a) から，拡散係数比が Turing 曲線より遠い場合は，セル壁の転位密度が低く，セル壁内が虫食い状態となったセル構造に似たパターンが発現しているのがわかる．拡散係数比の値を 1 に近づけるにつれて，図 6.9(b) のようにセル壁内の虫食いが次第に減少し，図 6.9(c) のような虫食いが若干残る，やや角張った転位パターンが形成される．一方，図 6.9(d) に示すように，Turing 曲線近傍のある一定領域においては，セル内部とセル壁の転位密度差が大きくなり，セル壁が薄く，形状が円形状から四角形状に変化したサブグレインパターンが発現している．しかしながら，拡散係数比の値を Turing 分岐境界曲線に近づけすぎると，図 6.9(e) のようにセル壁の転位密度が低くなり，セル壁とセル内部との転位密度こう配が低い円形状のパターンが形成される．さらに非平衡度を下げると図 6.9(e) のような転位密度差が小さく，ほぼ空間均一状態に近いセルに似たパターンが発現する．これらの傾向および観察による TEM による実験結果⁽¹⁾ と本解析結果を比較した図 6.10 から，図 6.9(d) における拡散係数比の値を用いた際に発現した転位パターンは，再分割されたセルがサブグレインへ遷移したものであるとみなすことができる．ただし，この転位パターンが実際にサブグレインであるかは各サブグレイン内の結晶方位等を議論しなければならない．これについては第 7 章において変形場との連動解析によって検討する．

6.6.2 係数パラメータについての検討

ステージ III は，熱エネルギーの増加に起因する動的回復段階である．ステージ III になると，熱エネルギーの増加に伴い拡張転位 [補足 F.3] が収縮して完全転位になることで，らせん転位の交差すべりが発生しやすくなる．そのため，高密度となったタングル状の不動転位に異符号の可動転位が出会う確率が高まり，らせん転位の対消滅が頻繁に起こる．一方，ステージ II において多数のダイポールが対消滅することで，転位壁に存在する不動転位は同符号のものが多くなり，ダイポールのような異符号の不動転位対の存在は減少する．したがって，ステージ III では，熱拡散に起因してダイポールが対消滅する確率は減少する．また，応力が増加することによって転位運動が活発化し，転位ループが障害物を乗り越える確率が増加するため，転位の堆積率および不動転位の線形生成率は減少する．以上のように，ステージ III においては，ダイポールの対消滅率は減少するものの，らせん転位の交差すべりに起因する転位の対消滅率が増加し，転位の堆積率および不動転位の線形生成率が減少するため，結果として不動転位の増加率が減少し，ステージ II に比べて加工硬化率は減少する．

本研究で提案した数理モデルにおいては，ダイポールの対消滅率は B_2 に，交差すべりに起因する転位の対消滅率は B_2 に，転位の堆積率は K_0 , K_2 , K_3 および K_4 に，不動転位の線形生成率 B_0 に相当しており，各速度係数の値に関してはその増減に関して検討する必要がある．なお $K_0 \sim K_4$ に関しては基準状態の条

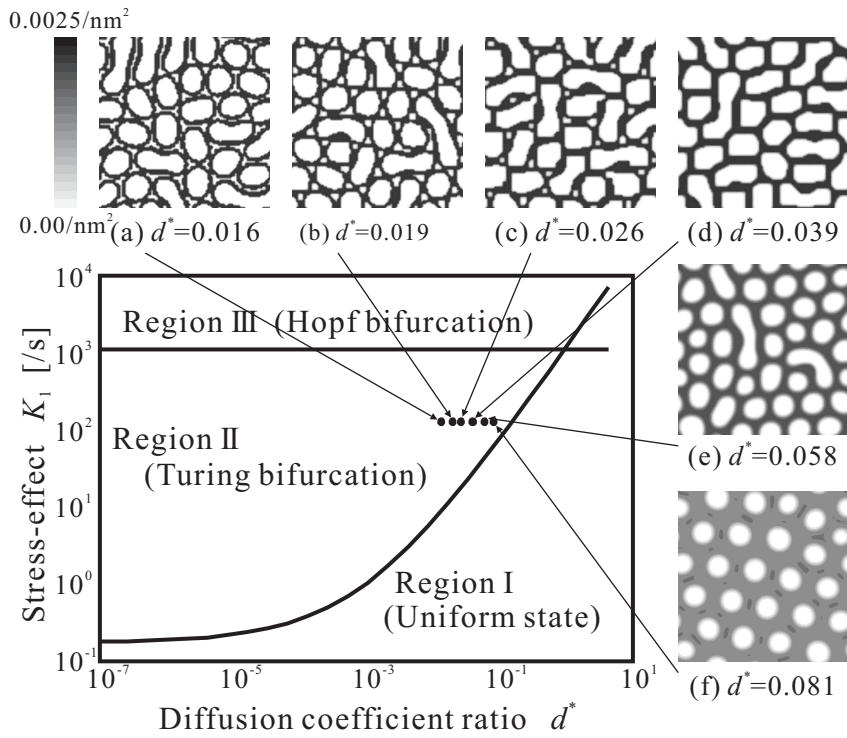


Fig. 6.9 Pattern dependence on d^* for subgrain pattern in stage III

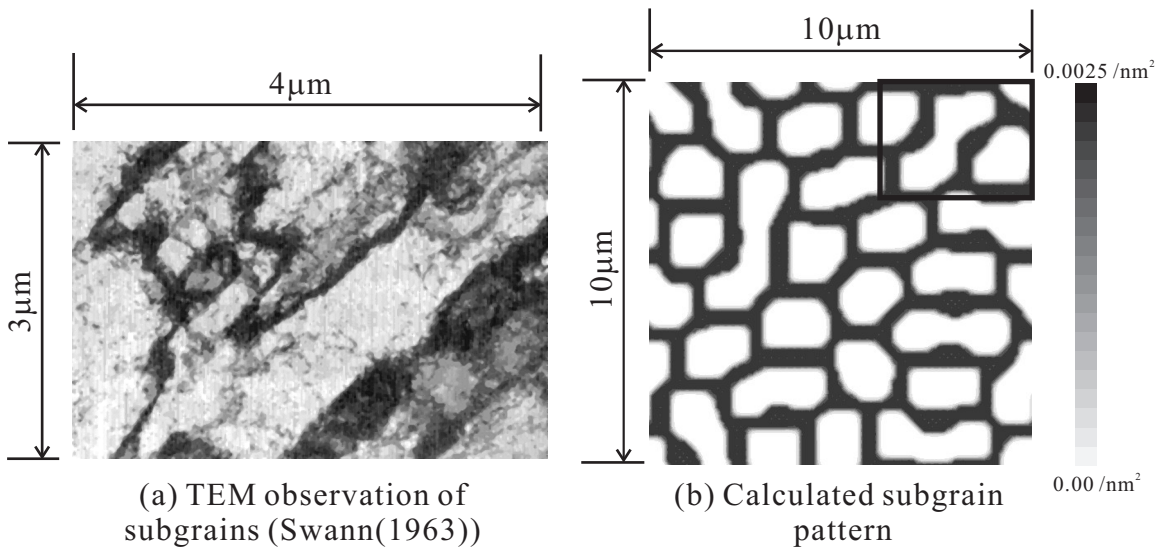


Fig. 6.10 Comparison of subgrains between calculation and TEM observation⁽¹⁾ in stage III

件式 (4.71) から, 1 つの K の値を代表して決定すれば他の値はそれに伴って増減する. 同様に B_0 の値は条件式 (5.38) が適用され, B_2 および L_1 の値によって決定される. そこで, 本研究では K_2 , B_2 および L_1 を代表させて値の検討を行う.

まず, K_2 の値が転位パターンニングに及ぼす影響について検討する. 図 6.11(a), 図 6.11(b), 図 6.11(c) および図 6.11(d) は $K_2^{\text{II}*} = 100 \mu\text{m}^2/\text{ks}$ から K_2^{III} の値をそれぞれ $36 \mu\text{m}^2/\text{ks}$, $72 \mu\text{m}^2/\text{ks}$, $97 \mu\text{m}^2/\text{ks}$ および $180 \mu\text{m}^2/\text{ks}$ と変化させた場合の解析結果である. 図 6.11(a) では, スピノーダル分解のようなパターンへと変化している. 図 6.11(b) を見ると, ラビリンス的パターンへと変化しているのがわかる. 図 6.11(a) および図 6.11(b) のようなパターンが形成されるのは, 2 次の転位蓄積を表す K_2 項の反応が減少することによって, 転位壁が消滅する確率が高まるためだと考えられる. 一方, 図 6.11(c) のように, ステージ III 遷移に際して適度に K_2 の値を低くすると, $2 \mu\text{m}$ 程度の径を有するサブグレインパターンが形成される. ステージ III 遷移において K_2 の値を極端に高くすると, 図 6.11(d) に示すように, 転位壁内の転位密度が低くなり, 転位壁が明瞭なセルパターンが形成される. このようなパターンが形成されるのは, K_2 の増加に伴って式 (4.71) の基準式における K_1 が上昇し, 不動転位が可動化しやすくなるためであると考えられる. したがって, ステージ III においてサブグレインパターンを発現させるためには, 転位の蓄積を表す K_2 の値をわずかに低くする必要があるといえる.

次に, B_2 の値を変化させた際に発現する転位パターンについて考察する. 図 6.12(a), 図 6.12(b), 図 6.12(c) および図 6.12(d) は $B_2^{\text{II}*} = 2.71 \mu\text{m}^2/\text{ks}$ から B_2^{III} の値をそれぞれ $0.48 \mu\text{m}^2/\text{ks}$, $0.94 \mu\text{m}^2/\text{ks}$, $2.71 \mu\text{m}^2/\text{ks}$ および $3.41 \mu\text{m}^2/\text{ks}$ に変化させて得られた解析結果である. 図 6.12(a) の結果を見ると, 高密度の転位壁を有するセル構造が形成されており, セル壁とセル内部の間で転位密度こう配が高くなっているのがわかる. ステージ III 遷移の際に適度に B_2 の値を低くすると, 図 6.12(b) のようにセル壁が薄く角ばったサブグレインパターンが形成される. ステージ III 遷移で B_2 の値を変化させない場合, 図 6.12(c) のように若干線素が角ばったスピノーダル分解的なパターンが形成される. 一方, B_2 の値が高くなると, 図 6.12(c) よりも波数が増えたスピノーダル分解的なパターンが形成される. 以上の結果から, ステージ III においてサブグレインパターンを形成させるためには, 転位の対消滅を表す B_2 項を 30% 程度まで低くしなければならないということがわかる.

最後に, L_1 の値が転位パターンニングに及ぼす影響について検討する. 図 6.13(a), 図 6.13(b), 図 6.13(c) および図 6.13(d) は $L_1^{\text{II}*} = 0 \mu\text{m}^2/\text{ks}$ から L_1^{III} の値をそれぞれ $0 \mu\text{m}^2/\text{ks}$, $3 \mu\text{m}^2/\text{ks}$, $7 \mu\text{m}^2/\text{ks}$ および $12 \mu\text{m}^2/\text{ks}$ に変化させた際の解析結果である. 動的回復現象を考慮していない図 6.13(a) の結果では, 形成されたセル構造が合体する傾向が強まり, ラビリンス的なパターンへと変化し, サブグレインパターンは形成されない. 動的回復を考慮した図 6.13(b) を見ると, 隣り合うセル同士は合体することなく, ステージ II で形成されたセルパターンに即したサブグレインパターンが形成される. また, L_1 の値を高くすると図 6.13(c) のように, 図 6.13(b) のパターンよりも転位壁が厚くなり, 径が若干小さくなったサブグレインパターンが形成される. さらに L_1 の値が高い図 6.13(d) の結果を見ると, 転位壁は厚くなり, 径が小さくなっていることから, 形成された転位パターンの特性波長 λ が減少しているのが確認できる. 反応-拡散モデルにおける特性波長 λ は, 式 (5.37) のように L_1 に関する 2 次の項を含んでおり, 他の速度係数の変化に比べて特性波長の変化に大きく影響を与えるため, L_1 の値の増加に起因する特性波長の減少が顕著に現れる. また, L_1 の値が高くなると転位壁が厚くなるのは, 式 (5.38) に示すように, L_1 の値が増加すると不動転位の線形成率を表す B_0 の値も増加することに起因する. 本モデルにおいて L_1 項は, 高密度の転位壁にたどり着いた可動転位が転位壁内の異符号の不動転位と出会い対消滅するモデルを意味するが, L_1 の値が高すぎると, 転位壁内の不動転位が消滅するのと同時に, B_0 の値の増加によって, まだ転位を捕獲していない 2 次すべり系の林立転位といった純粋な障害物も増加してしまう. このことはステージ III における現象とは矛

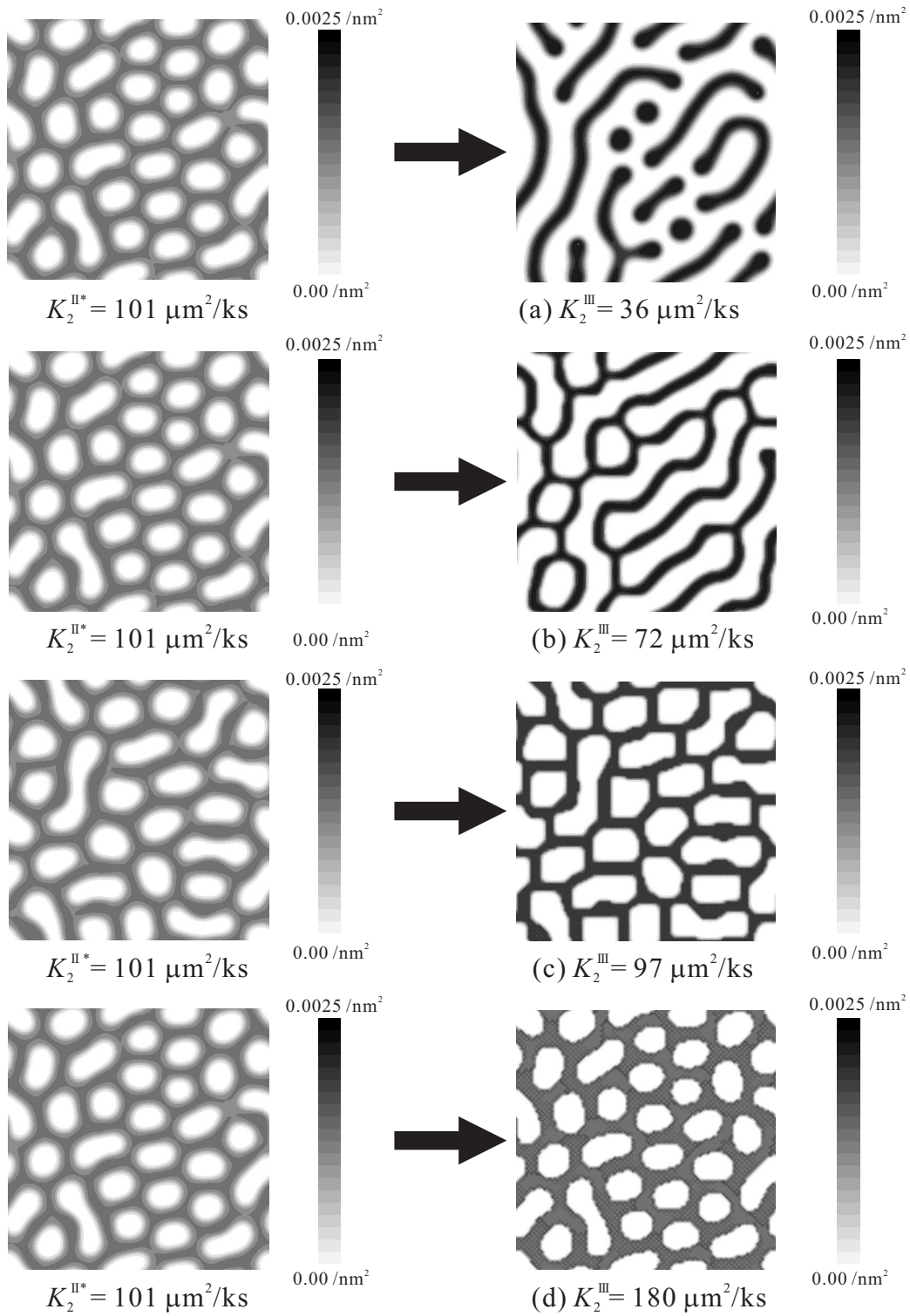


Fig. 6.11 Pattern dependence on reaction-term K_2^{III}

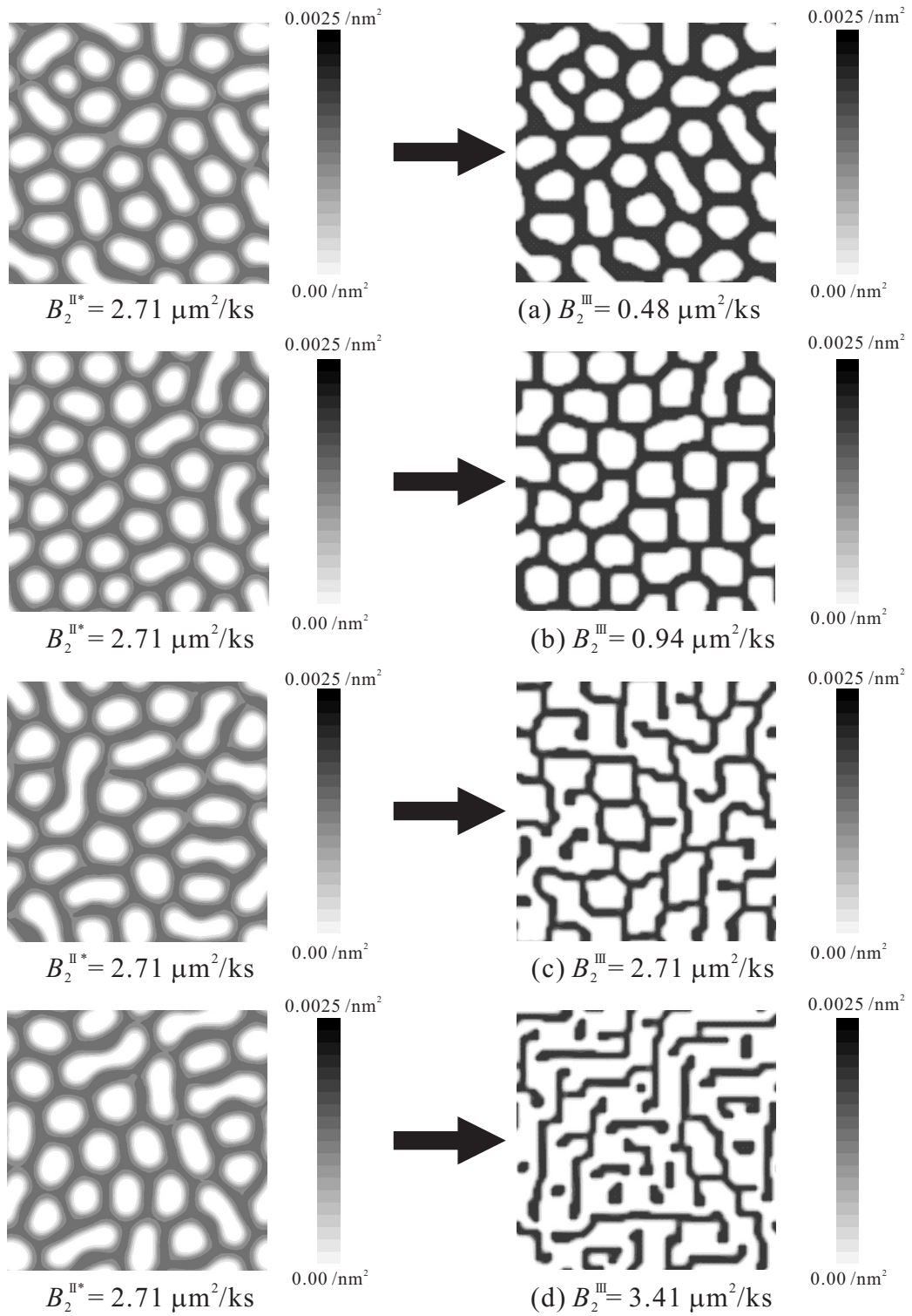


Fig. 6.12 Pattern dependence on annihilation-term B_2^{III}

盾している．このように，ステージ III においてサブグレインパターンが発現するためには，動的回復現象を表す L_1 項の値を適度な大きさに設定する必要があるといえる．

また，ステージ II 前半でセル構造が再分割した後， K_2 項をステージ II 後半で増加させずに，解析領域でセル内部に対してセル壁が占める面積比が大きくなることを再現しないままステージ III へ遷移した場合の転位パターンニングについて検討する．図 6.14(a)，図 6.14(b)，図 6.14(c) および図 6.14(d) は $K_2^{II*} = K_2^{II}$ とし，ステージ III における拡散係数比 d^{*III} をそれぞれ 0.0680，0.0583，0.0486 および 0.0389 と変化させた場合の解析結果である．図 6.14(a) および図 6.14(b) を見ると，ステージ II において形成されたセル壁が厚い円形のセル構造が，セル壁が薄くなったセル構造へと遷移しているのが確認できる．一方，図 6.14(c) ではラビリンス的パターンへ，図 6.14(d) ではスピノードル分解に似たパターンへ遷移している．拡散係数比 d^* が各ステージのパターンに影響を与えることは前述したとおりだが，図 6.14 の傾向は図 6.3 および図 6.5 に示されるステージ II におけるパターンニングの傾向と酷似しており，図 6.9(d) のようなサブグレインパターンを形成することはない．ステージ II においてセル構造が再分割された後，解析領域内でセル内部に対するセル壁の占める面積割合が増加させるために，転位の蓄積を表す K_2 項を上昇させなければ，ステージ II において形成されたセルパターンはサブグレインパターンへと遷移しないことがわかる．

6.7 各ステージにおける転位パターンの自己組織化過程

前節において各ステージにおける各速度係数の値が転位パターンニングへ与える影響を検討したが，それらの検討の結果を反映し，各ステージ特有の転位パターンが発現するよう各速度係数をチューニングして解析を行った結果を図 6.15 に示す．図 6.15(a) から図 6.15(p) は各応力の値に対応した転位パターンである．なお，各数値パラメータは式 (6.5) から式 (6.9) に示すとおりである．ステージ I における解析結果である図 6.15(a) を見ると，不動転位密度は平均的に分布しているのがわかる．ステージ II に遷移すると，図 6.15(b) から図 6.15(e) に示すように，初期状態からステージ I にかけて発生した転位密度のゆらぎが徐々に成長し，隣合うセル同士が合体しながら回復を起こし図 6.15(f) に示すような $4\mu\text{m}$ 程度の径を有するセル構造が形成される．その後，図 6.15(g) から図 6.15(k) に示すように，セルの形が中央部から分割し，図 6.15(l) のようにセル壁が若干薄くなりながら径 $2\mu\text{m}$ 程度のセル構造が形成される．一方，ステージ III に遷移した後の結果である図 6.15(m) から図 6.15(p) を見ると，セル壁は薄く角ばり，セル壁内の転位密度が高くなり，セル壁とセル内部の間の転位密度こう配が高いサブグレインパターンへと遷移し，その後定常状態になっているのがわかる．このように，各ステージ特有の機構や転位パターンの特徴を考慮し，セル構造およびサブグレインパターンの自己組織化過程を示す反応-拡散モデルに応力増加に伴うダイポールの対消滅率の増加を表す応力効果係数を導入することで，一度形成したセル構造が再分割し，サブグレインパターンへと遷移する過程を再現することができる．

以上の検討から得られた結果を考慮して第7章においてFDM-FEM連動解析を行う．

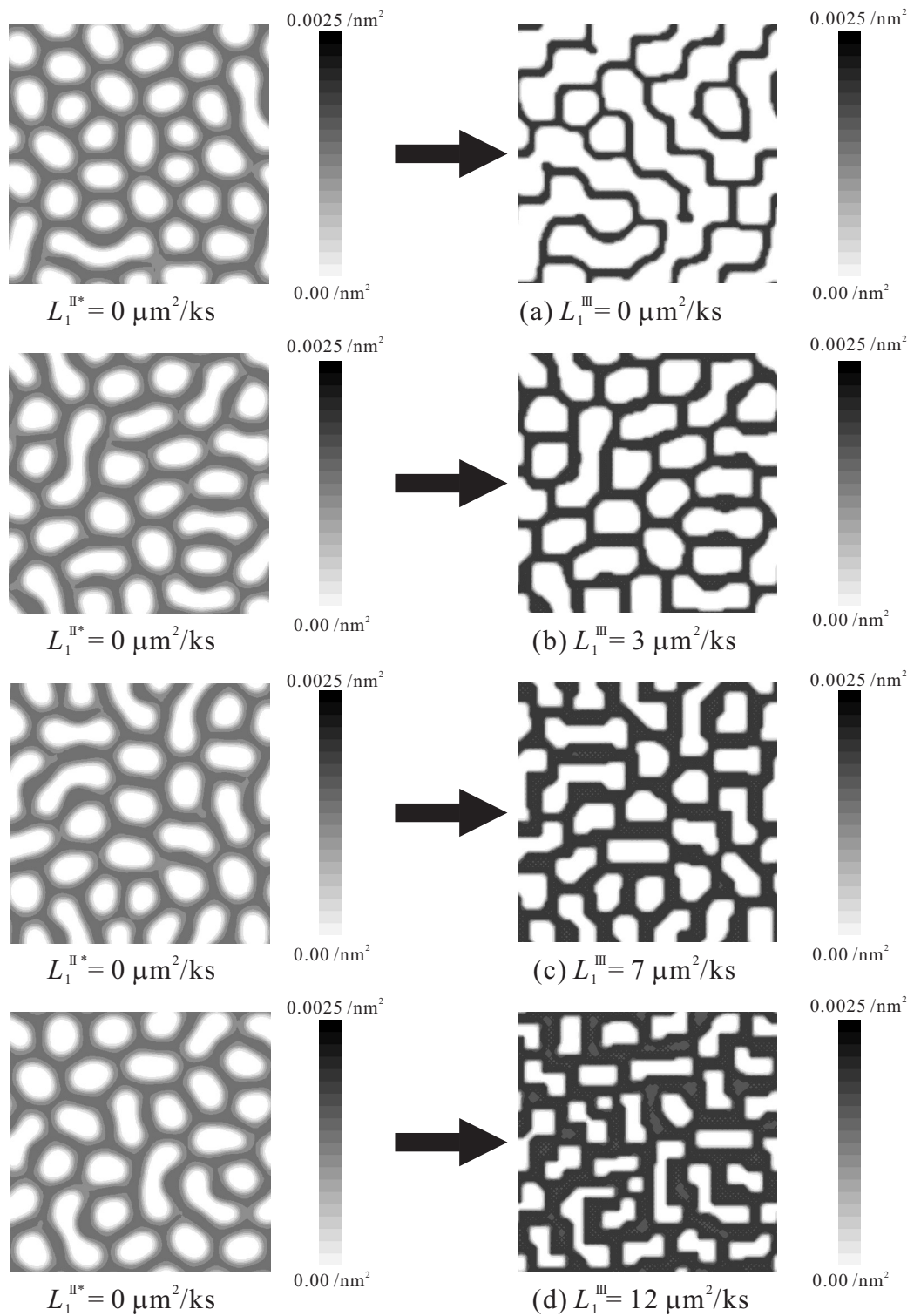


Fig. 6.13 Pattern dependence on recovery-term L_1^{III}

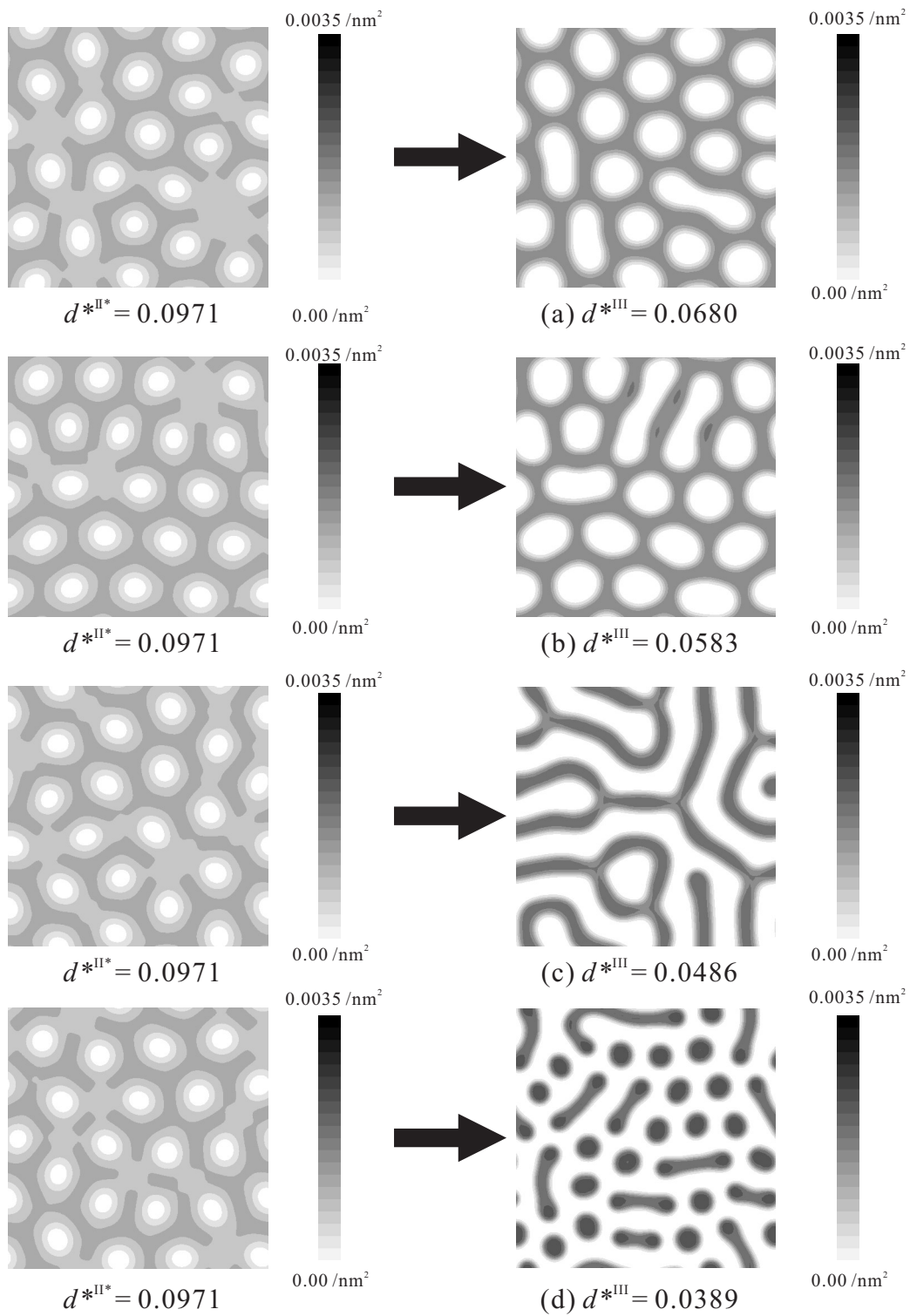


Fig. 6.14 Pattern dependence on d^* where $K_2^{II*} = K_2^{II}$

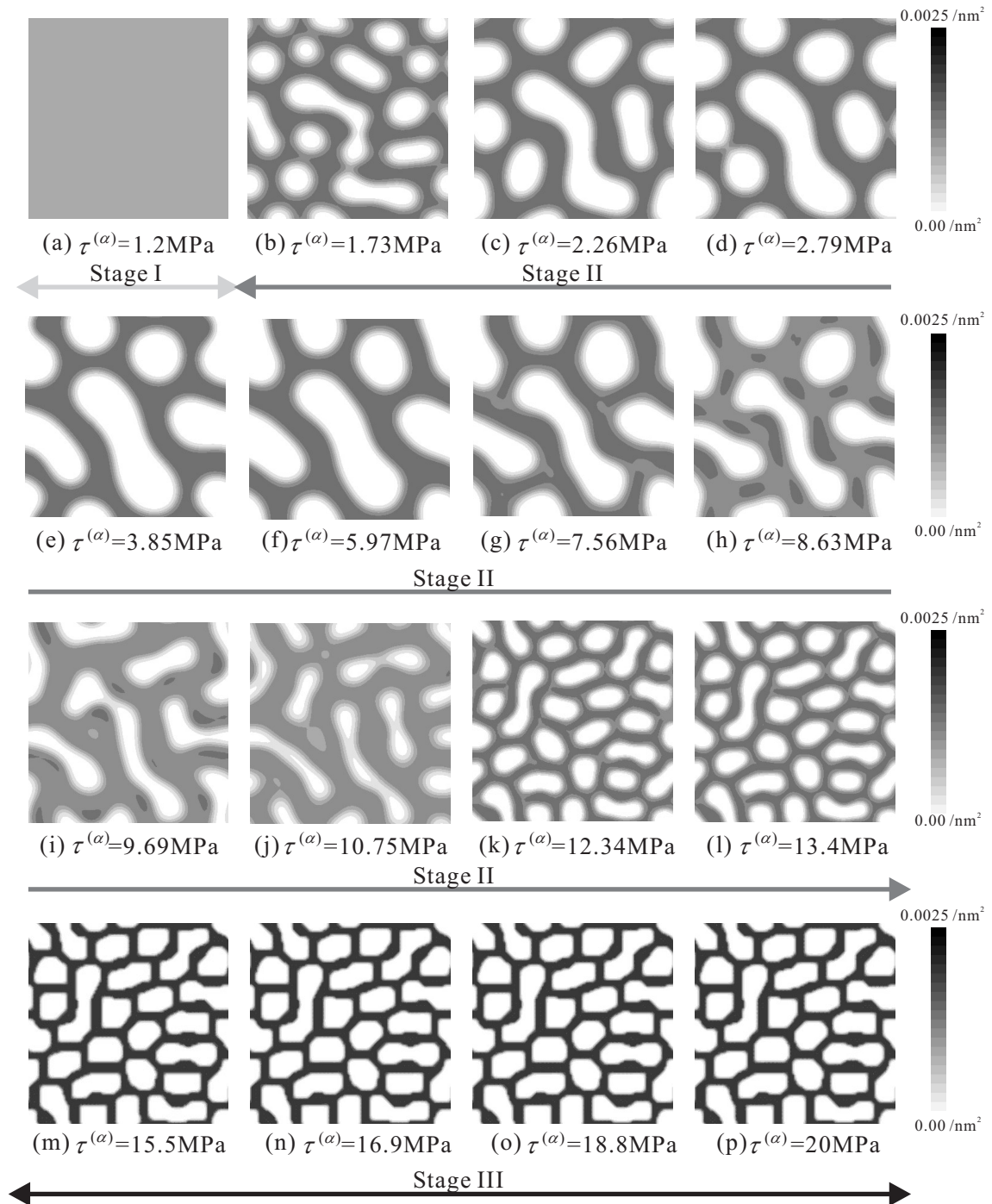


Fig. 6.15 Pattern formation process in each stage

第7章

FEM-FDM連動転位-結晶塑性シミュレーション

本章では、結晶超微細化プロセスの初期段階の現象である変形に伴うセル形成、セル再分割およびサブグレイン遷移を再現することを目的とする。第5章の応力効果係数モデルを用いて変形場の情報を反応-拡散方程式に反映させ、反応-拡散方程式から得られる不動転位密度を転位場の情報として結晶の硬化係数に反映させることによって転位-結晶塑性連成解析を行う。解析対象はアルミニウム単結晶平板として、Asaroの平面2重すべりモデルを採用した平面ひずみ問題を考える。解析によって得られた結果から不動転位密度やすべりの分布および結晶方位の変化を可視化することで、単結晶の3段階硬化に適合するようにセル構造の形成、セル構造の再分割およびサブグレインの発現が再現されていることを論じる。また得られた加工硬化曲線から、不動転位密度およびすべりが3段階硬化に及ぼす影響について検討する。なお、すべての解析例は自作の結晶塑性 FEM ソースコード [補足 G.1] および FDM ソースコードによるものである。

7.1 FEM-FDM 連動転位-結晶塑性解析のアルゴリズム

本節では、実際に解析を行う際の手順を簡単に紹介する。

- (1) 要素データや材料定数・数値パラメータなどの初期値の決定および各値の初期化。
- (2) 応力の値を応力効果係数の式 (5.36) および式 (5.40) に用い、差分近似した反応-拡散式 (6.1) を用いた FDM 解析から可動および不動転位密度増分を算出し、各転位密度を更新。
- (3) 式 (5.32) を用いて転位の平均飛行距離を算出。
- (4) (2) および (3) で求めた不動転位密度および転位の平均飛行距離を用い、式 (5.28) から硬化係数を算出。
- (5) 式 (5.12) によってすべり速度を算出。
- (6) 式 (5.59) および式 (5.60) からそれぞれすべり増分および応力増分を算出し、すべり、応力、結晶基底、流れ応力などの値を更新。
- (7) 式 (5.60) を用いて要素剛性方程式を算出。
- (8) 要素剛性方程式に対する FEM 解析から節点変位を求め、節点座標を更新。
- (9) 指定の変形率に達していなければ (2) に戻る。
- (10) 解析終了。

7.2 FEM-FDM 連動転位-結晶塑性シミュレーション

結晶超微細化プロセスの初期段階の現象である変形に伴うセル形成，セル再分割およびサブグレイン遷移を再現することを目的とする．解析対象をアルミニウム単結晶平板とし，端面強制変位を与えた際の平面ひずみ問題を FEM 解析および FDM 解析の連成解析を行う．

7.2.1 解析モデル

FEM 解析の対象は FCC 材料であるアルミニウムの単結晶平板を想定して，端面はシアフリー，強制変位を与えた場合の平面ひずみ問題に対して静的陽解法を用いた FEM 解析を行う．静的陽解法を用いると局所的に釣合いがくずれのおそれがあるが，本解析における不釣合い力のオーダーは最大でも 10^{-5} 程度であり，十分に許容できる範囲であるといえる．シミュレーションを行う．また，平面ひずみ問題の場合，解析面である xy 平面上にすべり方向 $s^{(\alpha)}$ およびすべり面の法線方向 $m^{(\alpha)}$ を含ませる必要があるが，図 7.1(a) のように同時に 2 つのすべり系を xy 平面上に乗せることはできない．そこで，図 7.1(b) に示すように，実際には傾いている FCC 単結晶のすべり面を仮想的に z 方向に一樣であるとした Asaro⁽⁸³⁾ による平面 2 重すべりモデルを用いる．このとき 2 つのすべり系は B4, C1 に相当し，すべり系の相互作用は表 5.2 から Lomer-Cottrell 固着の関係にあることがわかる．その他のすべり系は活動しないと仮定するので，他の相互作用を考慮する必要がなくなる．本解析ではセル形成，セル再分割およびサブグレイン遷移の再現を目的としているため，ステージ I の範囲を極端に短くするよう，各すべり系の結晶基底を図 7.2 のように定め，結晶の初期方位 $\phi_0 = 28^\circ$ ， $\psi_0 = 32^\circ$ と設定する．また，いずれのすべり面も解析面に垂直であることから，図 7.2 における xy 面を $(1\bar{2}1)$ と定め， xy 面に 1 辺が $L = H = 9.9\mu\text{m}$ とした正方形の上面に初期強制変位を与えた場合の単純引張問題を考える．解析モデルの端面はせん断自由であり，端面変位速度は一定とし変形履歴は線形増分法で計算される．解析対象において変形場の FEM 解析に用いる要素は四角形をしており，それぞれ対角線を結んでできる 4 つの三角形要素 (Crossed triangle method) からなる．境界条件に関する詳細は後述する．なお，FDM 解析に関する解析手法は第 6 章と同様である．

7.2.2 FEM-FDM 連成方法

FEM 解析における要素と FDM 解析における格子の対応は，図 7.3 に示すようでありである．FEM における図 7.3(i) の $1 \times 1 \times 4$ 要素は，FDM 解析の図 7.3(ii) の 3×3 の格子に対応している．FDM 解析で計算された不動転位密度の情報を FEM 要素に受け渡す場合は，1 つの FEM 要素内に含まれるすべての FDM 格子点の不動転位密度の平均値を算出し，その値をその FEM 要素の不動転位密度の値とする．一方，FEM 解析で得られる応力情報は，解析領域全体の平均応力を求め，その値を FDM のすべての格子点に与える．すなわち，FDM 解析においては，解析領域で応力の値が一樣であるとしている．

本解析では変形場の巨視的な変形速度である端面変位速度が $0.01\mu\text{m/s}$ であるのに対し，転位場での転位運動速度は実験的観察事実から $0.1\mu\text{m/s} \sim 10000\mu\text{m/s}$ となっており，変形場の運動速度と転位場の運動速度の間には 100 倍以上の差がある．転位運動速度は，応力条件や転位運動の抵抗となる介在物の多さなどの総合的な結果によるものであり，応力依存性も高く転位運動速度のオーダーにはかなりの幅があるが，巨視的変形場に比べれば運動速度ははるかに高い．両者で同精度の解を得るためには，変形場の FEM 解析の時間ステップよりも，転位場の FDM 解析の時間ステップを細かくとる必要がある．本研究では解析の安定性および解析時間の短縮を図るため，図 7.4 に示すように，転位-結晶塑性 FEM 解析の 1 ステップ

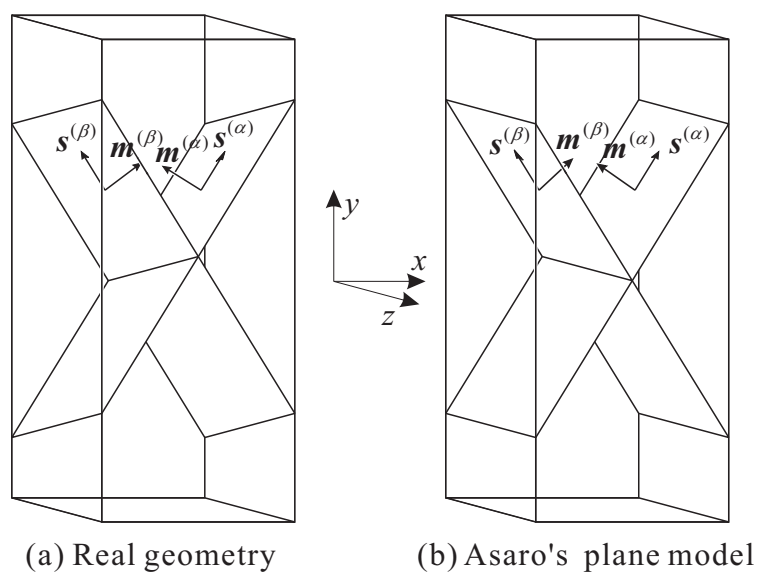


Fig. 7.1 Asaro's 2 slip model

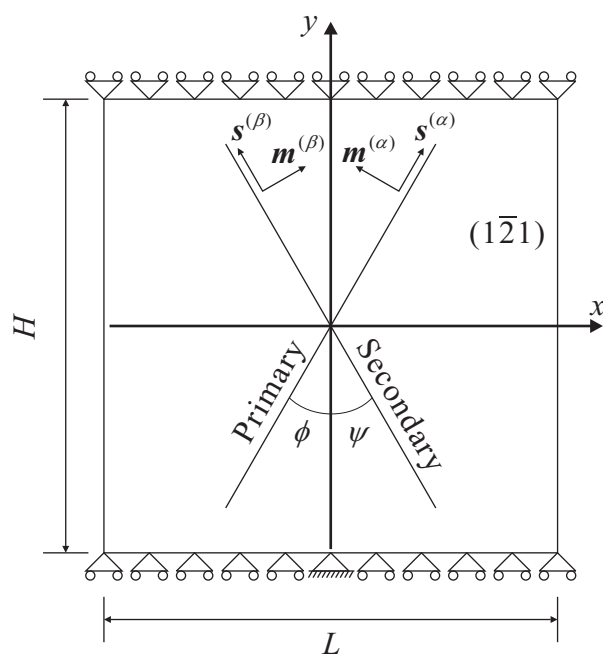


Fig. 7.2 Computational model

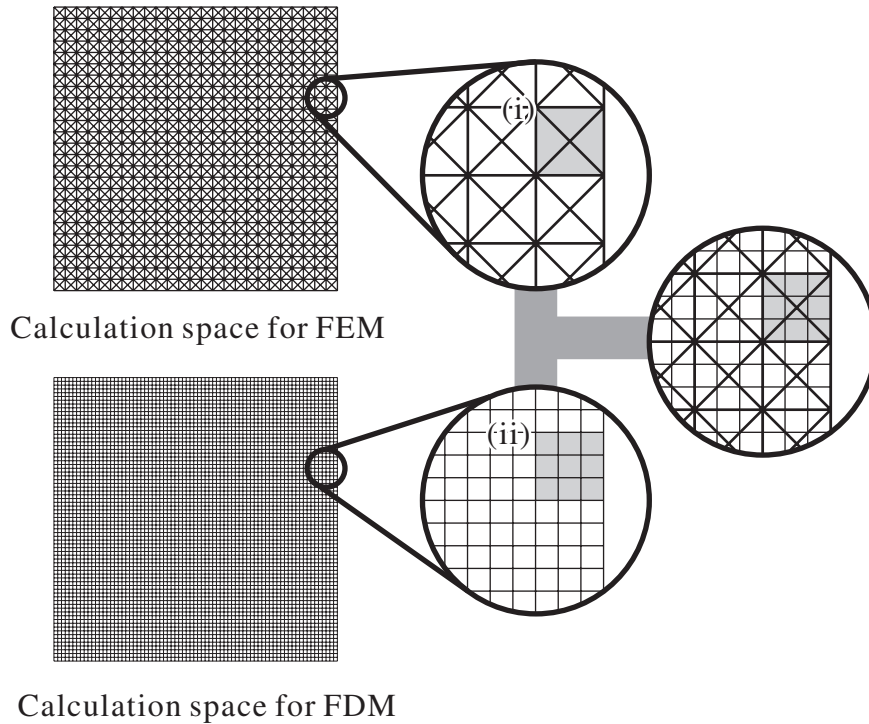


Fig. 7.3 Calculation space for FE and FD analyses

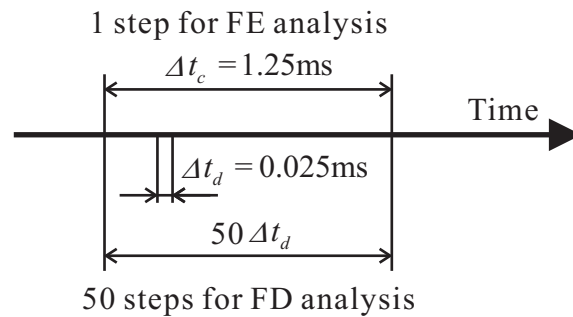


Fig. 7.4 Difference of time scale for FE and FD simulations

に対し，反応-拡散方程式に関する FDM 解析の 50 ステップを対応させることにより，時間スケールの差を補完する．ここで， Δt_c および Δt_d はそれぞれ FEM 解析および FDM 解析における時間刻み幅であり， $\Delta t_c = 1.25 \text{ ms}$ および $\Delta t_d = 0.025 \text{ ms}$ である．

7.2.3 境界条件および材料定数

FEM 解析の領域は端面で自由端とし，上端に 20% の強制変位を y 方向に与えることとする．また，変位 u および荷重 T を用いることでの境界条件が次式のように与えられる．

$$\left. \begin{aligned} T_x = T_y = 0 & \quad (\text{at } x = 0.5L) \\ u_y = 0, \quad T_x = 0 & \quad (\text{at } y = -0.5H) \\ T_x = T_y = 0 & \quad (\text{at } x = -0.5L) \\ u_y = U, \quad T_x = 0 & \quad (\text{at } y = 0.5H) \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (7.1)$$

ここで， U は端面強制変位である．また，要素数は $33 \times 33 \times 4$ および全変形時間は $t = 200$ s とする．材料定数および数値パラメータに関しては以下のように定める．

$$\left. \begin{aligned} E = 60.84 \text{ GPa}, \quad \nu = 0.3, \quad \tilde{b} = 0.256 \text{ nm}, \\ \Lambda = 0.1 \mu\text{m}, \quad m = 0.005, \quad a = 0.12, \quad c = 1.6, \\ \theta^{an} = 1, \quad k_1 = k_2 = k_3 = k_4 = 8000 \text{ /MPa}, \\ \gamma^* = 0.02, \quad \gamma^{**} = 0.1, \quad \gamma_r = 1, \quad \dot{\gamma}_0 = 0.001 \text{ /s}, \\ L_0^{(\alpha)} = 10 \mu\text{m}, \quad L_a^{(\alpha)} = 1.1 \mu\text{m}, \quad L_b^{(\alpha)} = 5.0 \mu\text{m}, \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (7.2)$$

また，転位場の FDM 解析における材料定数および境界条件については式 (6.3)，式 (6.4)，式 (6.5)，式 (6.6)，式 (6.7)，式 (6.8) および式 (6.9) の値を用いる．初期条件として可動転位密度の初期値 α_0^m および不動転位密度の初期値 α_0^i には，それぞれ約 10% のゆらぎを与えるものとする．解析領域は $9.9 \mu\text{m} \times 9.9 \mu\text{m}$ の xy 平面とするので，FDM 解析における初期条件，格子間隔および時間増分が以下のように決定する．

$$\left. \begin{aligned} W = 9.9 \mu\text{m} \quad h = 0.1 \mu\text{m}, \quad k = 0.025 \text{ ms}, \\ \alpha_0^m = 150 \text{ /}\mu\text{m}^2, \quad \alpha_0^i = 1000 \text{ /}\mu\text{m}^2 \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (7.3)$$

7.2.4 解析結果および考察

図 7.5 および図 7.6 は，それぞれ各応力値に対応する不動転位密度およびすべりの分布図である．ここで，転位密度およびすべりの分布は，各すべり系の値を足し合わせた全転位密度および全すべりの分布である．図 7.5(a) を見ると，ステージ I では平均的に不動転位密度が分布し初期のゆらぎが成長していき，ステージ II ($\tau^{(\alpha)} = 1.2 \text{ MPa}$) に遷移する図 7.5(b) 以降ではさらにゆらぎが成長し，図 7.5(f) においてセル径が $4 \sim 5 \mu\text{m}$ 程度のセル構造が形成される．さらに図 7.5(h) から図 7.5(l) においては，変形が進むにつれ一度形成したセル構造が中央部分から分裂するように変化し，セル構造の再分割過程が確認される．また，図 7.6(a) から図 7.6(l) においては，すべりの分布に多少の局所化が見られるものの，マイクロシアバンドは確認できず，セル構造およびセル構造の再分割過程が巨視的な変形にはあまり影響を及ぼしていないのが確認できる．一方，図 7.5(m) から図 7.5(p) のように，ステージ III ($\tau^{(\alpha)} = 15 \text{ MPa}$) に入るとセル壁が次第に薄くなり形状は円形から角張ったサブグレインパターンへと遷移し，セル構造よりも転位壁の転位密度が

増加していることがわかる．サブグレインパターンに対応する図 7.6(m) から図 7.6(p) を見ると，ステージ III のすべり分布図は，転位壁に対応した変形の局所化が見られサブグレインの高密度壁に沿ったマイクロシアバンドを確認できる．

図 7.7 図 7.8 および図 7.9 はそれぞれ応力の値が $\tau^{(a)} = 5.9 \text{ MPa}$ ($U/L = 0.048$) $\tau^{(a)} = 13.2 \text{ MPa}$ ($U/L = 0.10$) および $\tau^{(a)} = 25.5 \text{ MPa}$ ($U/L = 0.20$) における解析結果であり，図 7.7，図 7.8 および図 7.9 の図 (a)，図 (b)，図 (c)，図 (d) および図 (e) はそれぞれ不動転位転位密度，すべり，変形後の要素形状，結晶方位の回転角および GN 転位の分布を表している．GN 転位密度に関する計算方法の詳細は次章にゆだが，本章では GN 転位密度の値は単にすべりの分布から算出しているだけで，転位密度として硬化則などに反映させてはいない点に注意されたい．なお，各図 (d) における角度は初期結晶方位からの相対的な回転角を表している．また，各図 (e) の GN 転位密度は，平面ひずみ問題においてその刃状転位密度に相当し，赤の記号は正の，青の記号は負の GN 転位密度を示している．図 7.7(a) では転位セル構造が形成されているが，図 7.7(b) を見るとすべりは一様であり変形の局所化は見られない．図 7.7(d) では初期結晶方位からの回転角もほぼ一様であり，回転角度は $-3^\circ \sim +3^\circ$ である．また，図 7.7(e) では GN 転位の蓄積は見られない．図 7.8(b) では再分割されたセルパターンに対応したすべり分布は多少の局所化が見られるものの，明確なマイクロシアバンドの形成は確認することはできない．図 7.8(e) では図 7.7(d) に比べ結晶回転が大きくなる領域があるが，回転角度は $-5^\circ \sim +6^\circ$ 程度であり，図 7.8(a) のセルパターンのセル内部に対応する粒内の結晶方位の平均値の絶対値は 1° 程度である．一方，図 7.8(a) のようにサブグレインパターンが形成される場合では，図 7.8(b) のように図 7.8(a) が表すサブグレインパターンに沿ってすべり値が高く，また，サブグレイン内部のすべり値は低いことが確認でき，すべり面にほぼ平行である $0.1\mu\text{m} \sim 1\mu\text{m}$ 程度の幅を持つマイクロシアバンドの形成が確認できる．また，図 7.8(d) ではすべり面の回転角度は $-9^\circ \sim +10^\circ$ 程度であり，サブグレインパターンに対応した隣り合う粒間の結晶方位差が $-2^\circ \sim +3^\circ$ 程度と数度程度となっており，小傾角粒界の形成が確認できる．図 7.8(e) では転位密度が高いサブグレイン壁に対応するように小傾角粒界の中央を境に同符号の GN 転位が蓄積している．これらの GN 転位はサブグレインの粒界に相当するため，Sub-GN 粒界と称することにする．以上のことから，本解析で発現した転位パターンは結晶論的にもセル構造が回復しながら形成され，セル構造が再分割を経た後にサブグレインへ遷移しているといえる．

次にステージ II におけるセル構造の再分割過程からステージ III 遷移に関する数理モデルの妥当性について検討する．図 7.10 は反応-拡散方程式に可動-不動転位の対消滅率が表す動的回復項を無視しステージ III への遷移を考慮せずに速度係数の設定をし，また転位の平均飛行距離のモデルにも動的回復を考慮せずに得られた解析結果である．図 7.9 と比較して図 7.10 では，ステージ II においてはセル構造の形成，およびセル構造の再分割は確認できるが，応力の値がステージ III に遷移しても転位壁が薄く角張ったサブグレインパターンへと遷移せずセルパターンのまま定常状態となる．また，セルパターンに対応したすべり値が高くなっているが，図 7.9(b) のようにマイクロシアバンドの形成するまでには至っていない．同様に，GN 転位の蓄積や結晶方位の回転も図 7.9 に比べてあまり見られない．以上の結果から，応力増加に伴うセル構造の再分割過程を経た後にステージ III でサブグレインへ遷移させるには，反応-拡散方程式に可動-不動転位の対消滅率の増加を，転位の平均飛行距離には動的回復による転位の平均飛行距離の増加を考慮する必要があり，本解析におけるステージ III 遷移を考慮した数理モデルは妥当であるといえる．

図 7.11 は本解析で得られたあるサブグレイン壁およびサブグレイン内部における分解せん断応力-すべり曲線を示している．サブグレイン壁内部の要素 (i) ~ (v) ではステージ I の領域は短く，その後加工硬化率は上昇し，ステージ II へと遷移する．さらに加工硬化率は減少し，ステージ III へと遷移し，いずれも金属単結晶の 3 段階硬化が適切に表現されている．また，荷重方位の近い実験結果⁽⁹¹⁾ と比較しても非常に酷似した曲線となっている．また，サブグレイン内部の要素 (vi) では他の曲線に比べ高い値を示している

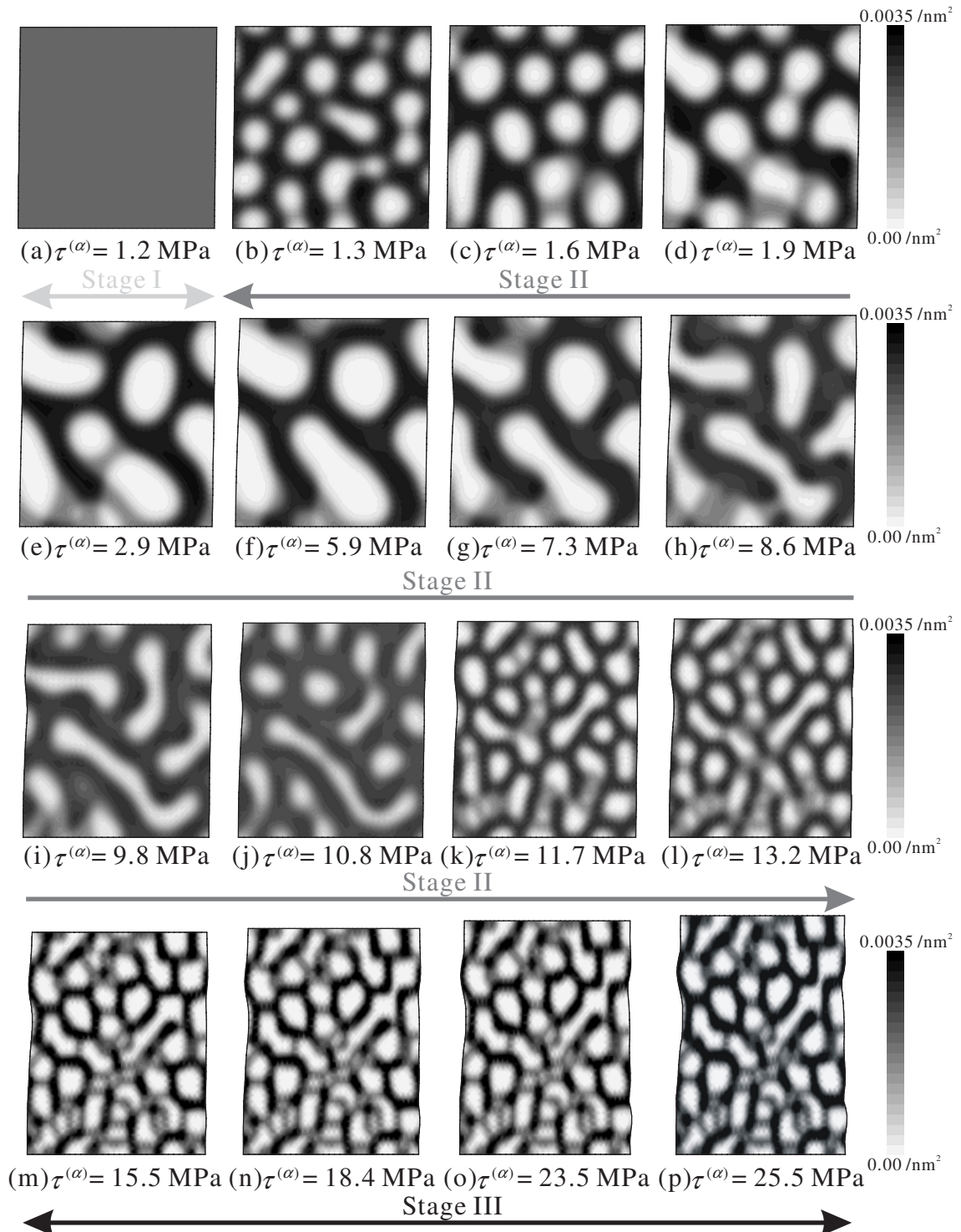


Fig. 7.5 Distributions of dislocation density

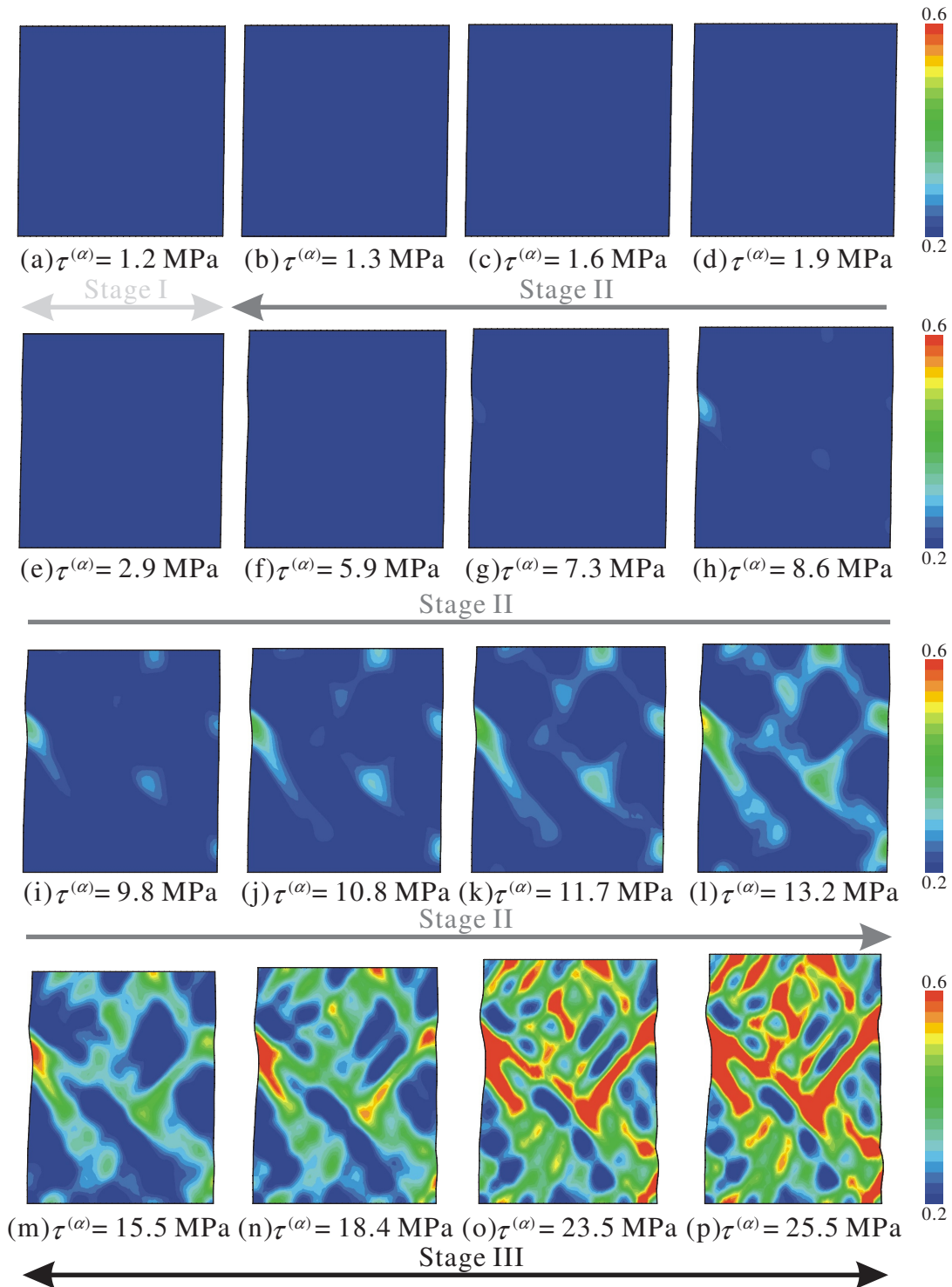


Fig. 7.6 Distributions of slip

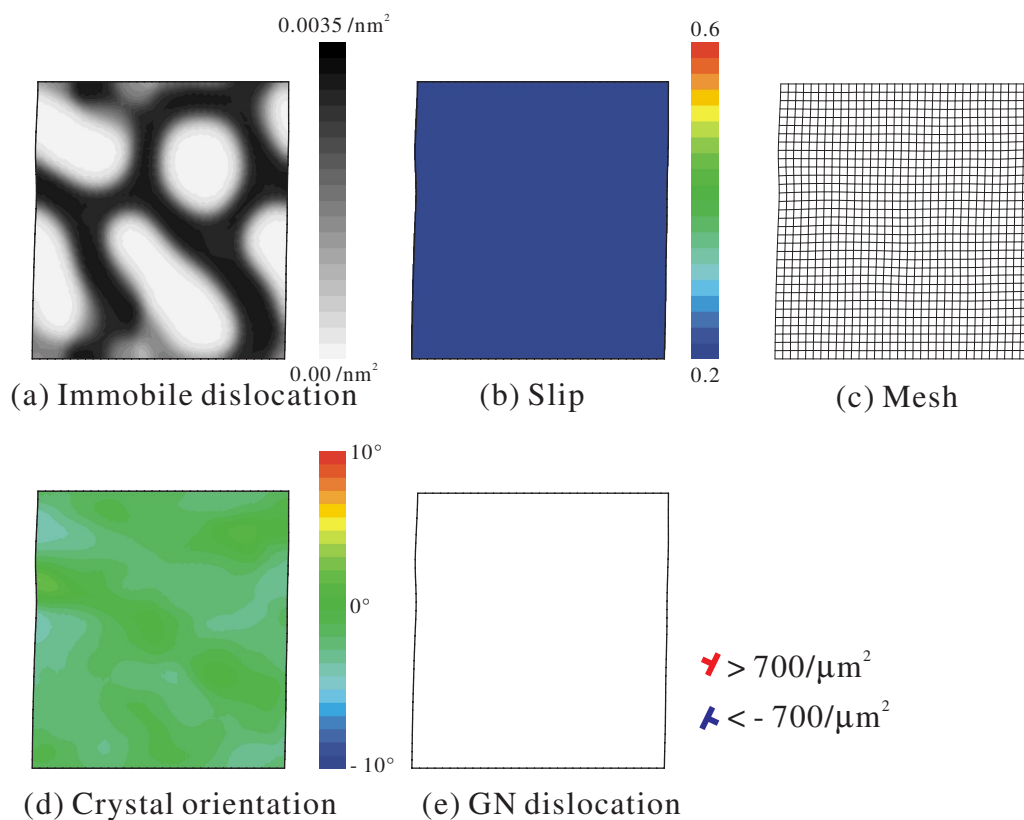


Fig. 7.7 Distributions of slip, dislocation densities, crystal orientation and mesh in the first half of stage II ($U/L = 0.048$)

が、転位密度の低い領域で加工硬化が顕著に起こるといふ硬化係数の式 (5.28) の性質に起因しているためだと考えられる。

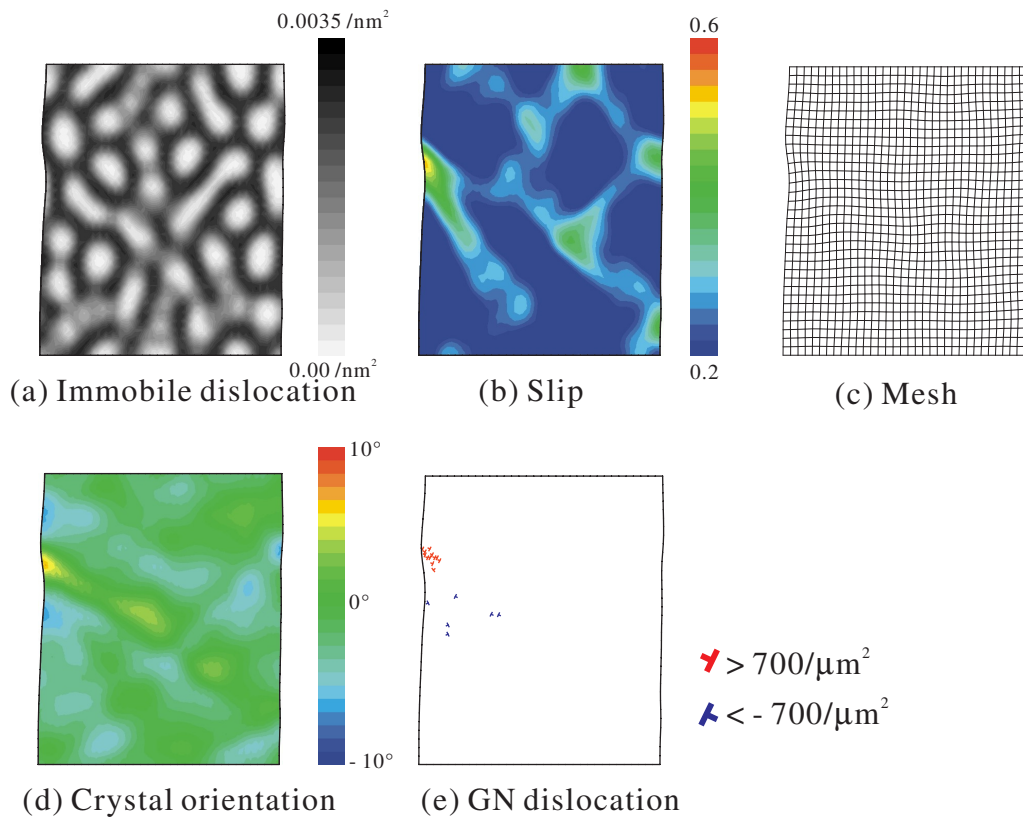


Fig. 7.8 Distributions of slip, dislocation densities, crystal orientation and mesh in the later half of stage II ($U/L = 0.10$)

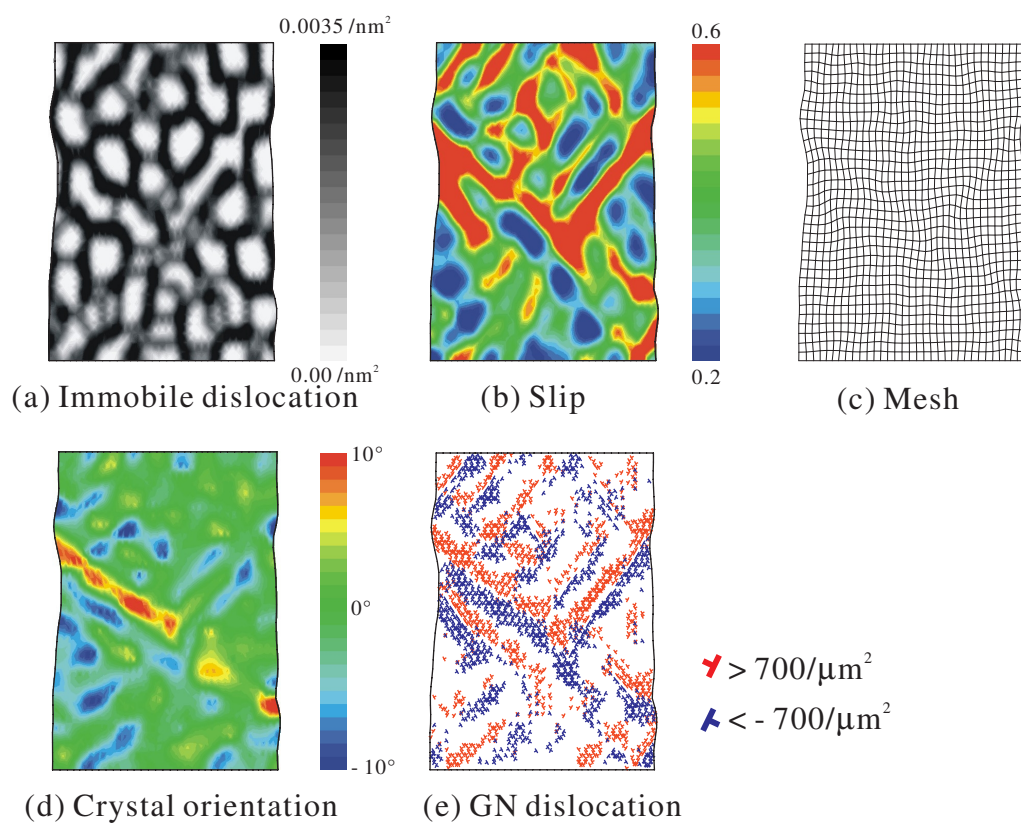


Fig. 7.9 Distributions of slip, dislocation densities, crystal orientation and mesh for stage **III** ($U/L = 0.20$)

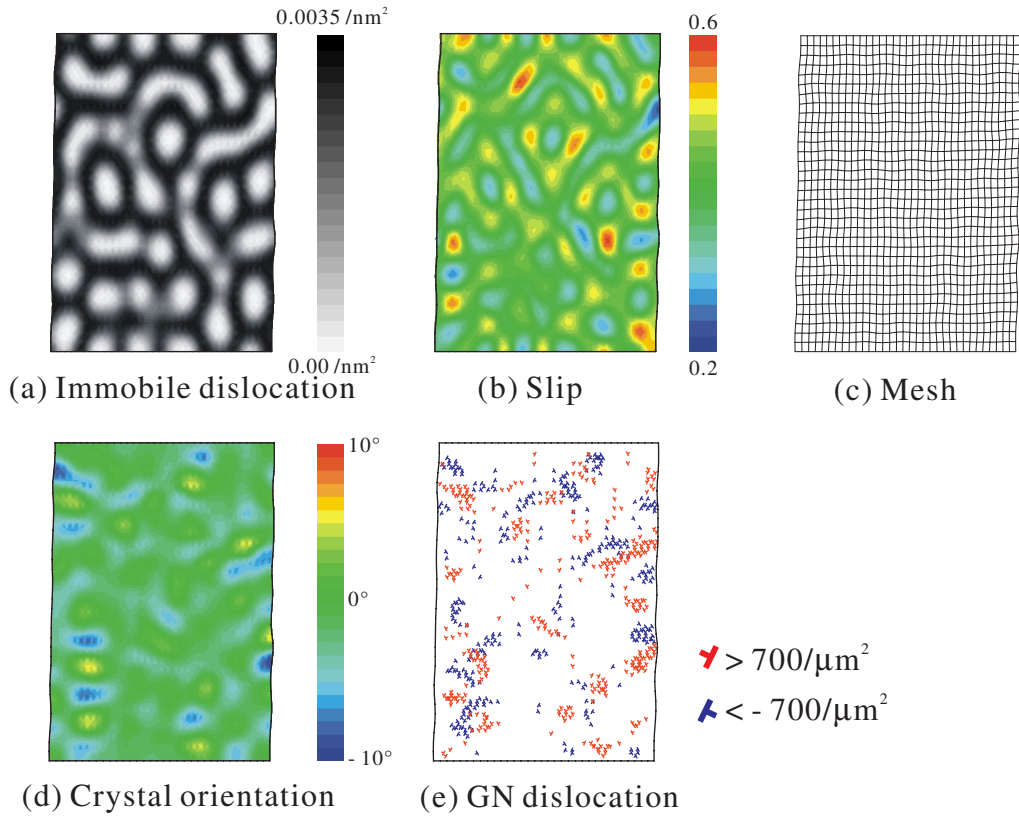


Fig. 7.10 Distributions of slip, dislocation densities, crystal orientation and mesh obtained by calculation without the models for stage III ($U/L = 0.20$)

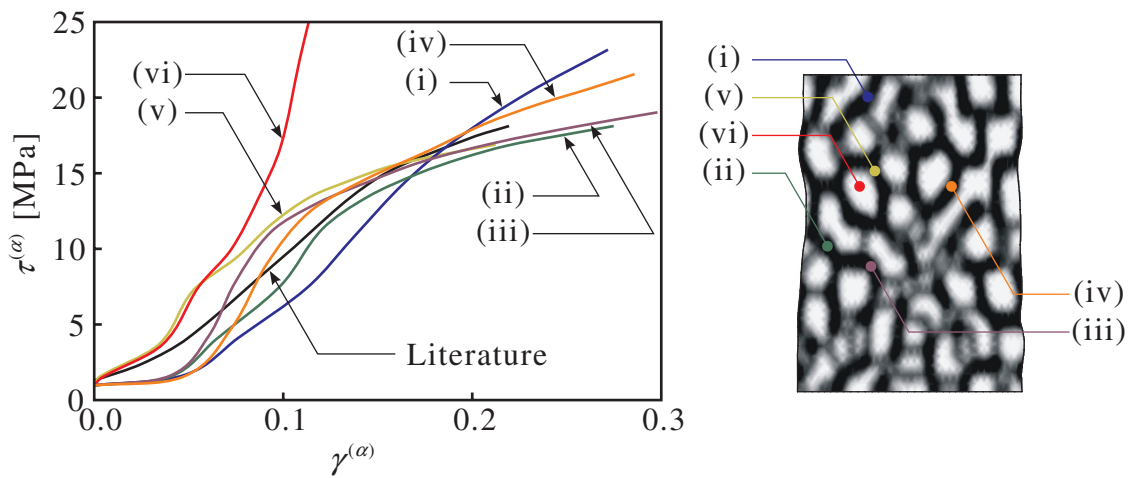


Fig. 7.11 Resolved shear stress versus slip curves⁽⁹¹⁾

第8章

GN転位-結晶塑性FEMシミュレーション

本章では、結晶超微細化プロセスの中期段階の現象であるサブディヴィジョンの形成を再現することを目的とする。まずは第5章にて示した結晶塑性タイプの弾粘塑性構成式およびGN転位密度、GN不適合度および動的回復を考慮したGN不適合度を導入した硬化則を用いたGN転位-結晶塑性FEM解析の手順を示す。また、GN転位密度およびGN不適合度を算出する手法にも触れる。以上のモデルに基づき、GN転位-結晶塑性FEMシミュレーションを行い、結果についての検討、考察を行う。解析対象はアルミニウム多結晶平板とする。解析結果からすべり、GN転位密度、GN不適合度、動的回復を考慮したGN不適合度および結晶方位の分布を可視化する。得られた結果に基づいて、動的回復現象が転位場および変形場に及ぼす影響について考察し、本研究で提案した動的回復モデルならびに転位密度依存形の転位平均飛行距離モデルの妥当性について検討する。また、GN粒界が粒内に誘起される過程を再現し、GN粒界によって初期結晶粒が複数の粒に微細化されるメカニズムを明らかにする。以上の検討からUFG創製シミュレーションの準備段階として、強ひずみによる結晶粒微細化への予測を試みる。なお、すべての解析例は自作の結晶塑性FEMソースコードによるものである。

8.1 GN転位-結晶塑性解析のアルゴリズム

本節では、実際に解析を行う際の手順を簡単に紹介する。

- (1) 要素データや材料定数・数値パラメータなどの初期値の決定および各値の初期化。
- (2) すべりの値を用い、式(2.80)および式(2.95)からGN結晶欠陥を算出。式(2.109)より動的回復項を算出。
- (3) (2)で求めた転位密度を式(5.33)に代入し転位の平均飛行距離を算出。
- (4) (2)および(3)で求めた転位密度および転位の平均飛行距離を用い、式(5.28)から硬化係数を算出。
- (5) 式(5.12)によってすべり速度を算出。
- (6) 式(5.59)および式(5.60)からそれぞれすべり増分および応力増分を算出し、すべり、応力、結晶基底、流れ応力などの値を更新。
- (7) 式(5.60)を用いて要素剛性方程式を算出。
- (8) 要素剛性方程式から節点変位を求め、節点座標を更新。
- (9) 指定の変形率に達していなければ(2)に戻る。
- (10) 解析終了。

8.2 GN 結晶欠陥の数値計算

図 2.7 のような局所座標系を考えると，式 (2.98) および式 (2.99) から，GN 転位密度の各成分 $\alpha_s^{(\alpha)}$ および $\alpha_e^{(\alpha)}$ は次式のように表される．

$$\alpha_s^{(\alpha)} = \frac{1}{\bar{b}} \frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial x_3} \dots\dots\dots (8.1)$$

$$\alpha_e^{(\alpha)} = \frac{1}{\bar{b}} \frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial x_1} \dots\dots\dots (8.2)$$

全体座標系 (x, y, z) における結晶基底ベクトルを

$$\mathbf{s}^{(\alpha)} = s_x^{(\alpha)} \mathbf{e}_x + s_y^{(\alpha)} \mathbf{e}_y + s_z^{(\alpha)} \mathbf{e}_z \dots\dots\dots (8.3)$$

$$\mathbf{m}^{(\alpha)} = m_x^{(\alpha)} \mathbf{e}_x + m_y^{(\alpha)} \mathbf{e}_y + m_z^{(\alpha)} \mathbf{e}_z \dots\dots\dots (8.4)$$

$$\mathbf{t}^{(\alpha)} = t_x^{(\alpha)} \mathbf{e}_x + t_y^{(\alpha)} \mathbf{e}_y + t_z^{(\alpha)} \mathbf{e}_z \dots\dots\dots (8.5)$$

と表せば，式 (8.1) および式 (8.2) は全体座標系において結晶基底およびすべりのこう配を用いて次のように書くことができる．

$$\alpha_s^{(\alpha)} = \frac{1}{\bar{b}} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial x} t_x^{(\alpha)} + \frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y} t_y^{(\alpha)} + \frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial z} t_z^{(\alpha)} \right) \dots\dots\dots (8.6)$$

$$\alpha_e^{(\alpha)} = -\frac{1}{\bar{b}} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial x} s_x^{(\alpha)} + \frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y} s_y^{(\alpha)} + \frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial z} s_z^{(\alpha)} \right) \dots\dots\dots (8.7)$$

また，図 2.7 のような局所座標系において，式 (2.100)，式 (2.101)，式 (2.102) および式 (2.103) の GN 不適合度の各成分 $\eta_{cs}^{(\alpha)}$ ， $\eta_{ds}^{(\alpha)}$ ， $\eta_{ce}^{(\alpha)}$ ，および $\eta_{de}^{(\alpha)}$ は次式のように表される．

$$\eta_{cs}^{(\alpha)} = -\frac{l}{\bar{b}} \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x_3 \partial x_3} \dots\dots\dots (8.8)$$

$$\eta_{ds}^{(\alpha)} = \frac{l}{\bar{b}} \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x_3 \partial x_2} \dots\dots\dots (8.9)$$

$$\eta_{ce}^{(\alpha)} = \frac{l}{\bar{b}} \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x_1 \partial x_3} \dots\dots\dots (8.10)$$

$$\eta_{de}^{(\alpha)} = -\frac{l}{\bar{b}} \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x_1 \partial x_2} \dots\dots\dots (8.11)$$

GN 転位密度と同様に，結晶基底ベクトル式 (8.3)，式 (8.4) および式 (8.5) を式 (8.8)，式 (8.9)，式 (8.10) および式 (8.11) に適応すれば，

$$\begin{aligned} \eta_{cs}^{(\alpha)} = & -\frac{l}{\bar{b}} \left(\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x \partial x} t_x^{(\alpha)} t_x^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y \partial x} t_y^{(\alpha)} t_x^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial z \partial x} t_z^{(\alpha)} t_x^{(\alpha)} \right. \\ & + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x \partial y} t_x^{(\alpha)} t_y^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y \partial y} t_y^{(\alpha)} t_y^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial z \partial y} t_z^{(\alpha)} t_y^{(\alpha)} \\ & \left. + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x \partial z} t_x^{(\alpha)} t_z^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y \partial z} t_y^{(\alpha)} t_z^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial z \partial z} t_z^{(\alpha)} t_z^{(\alpha)} \right) \dots\dots\dots (8.12) \end{aligned}$$

$$\eta_{ds}^{(\alpha)} = \frac{l}{\bar{b}} \left(\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x \partial x} t_x^{(\alpha)} m_x^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y \partial x} t_y^{(\alpha)} m_x^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial z \partial x} t_z^{(\alpha)} m_x^{(\alpha)} \right)$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x \partial y} t_x^{(\alpha)} m_y^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y \partial y} t_y^{(\alpha)} m_y^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial z \partial y} t_z^{(\alpha)} m_y^{(\alpha)} \\
& + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x \partial z} t_x^{(\alpha)} m_z^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y \partial z} t_y^{(\alpha)} m_z^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial z \partial z} t_z^{(\alpha)} m_z^{(\alpha)} \Big) \dots \dots \dots (8.13)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\eta_{ce}^{(\alpha)} = \frac{l}{\tilde{b}} & \left(\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x \partial x} s_x^{(\alpha)} t_x^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y \partial x} s_y^{(\alpha)} t_x^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial z \partial x} s_z^{(\alpha)} t_x^{(\alpha)} \right. \\
& + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x \partial y} s_x^{(\alpha)} t_y^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y \partial y} s_y^{(\alpha)} t_y^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial z \partial y} s_z^{(\alpha)} t_y^{(\alpha)} \\
& \left. + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x \partial z} s_x^{(\alpha)} t_z^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y \partial z} s_y^{(\alpha)} t_z^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial z \partial z} s_z^{(\alpha)} t_z^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (8.14)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\eta_{de}^{(\alpha)} = -\frac{l}{\tilde{b}} & \left(\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x \partial x} s_x^{(\alpha)} m_x^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y \partial x} s_y^{(\alpha)} m_x^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial z \partial x} s_z^{(\alpha)} m_x^{(\alpha)} \right. \\
& + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x \partial y} s_x^{(\alpha)} m_y^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y \partial y} s_y^{(\alpha)} m_y^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial z \partial y} s_z^{(\alpha)} m_y^{(\alpha)} \\
& \left. + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x \partial z} s_x^{(\alpha)} m_z^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y \partial z} s_y^{(\alpha)} m_z^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial z \partial z} s_z^{(\alpha)} m_z^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (8.15)
\end{aligned}$$

となる．ここで，Burgers 回路の代表寸法 l は要素を形成するメッシュサイズとする．

式 (8.6) および式 (8.7) のすべりこう配 $\partial \gamma^{(\alpha)} / \partial x$ ， $\partial \gamma^{(\alpha)} / \partial y$ および $\partial \gamma^{(\alpha)} / \partial z$ は，各要素の積分点の $\gamma^{(\alpha)}$ 値から各節点におけるすべりの値 $\gamma_{node}^{(\alpha)k}$ を求め，形状関数 N^k のこう配を用いて

$$\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial x} = \sum_k \frac{\partial N^k}{\partial x} \gamma_{node}^{(\alpha)k} \dots \dots \dots (8.16)$$

$$\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y} = \sum_k \frac{\partial N^k}{\partial y} \gamma_{node}^{(\alpha)k} \dots \dots \dots (8.17)$$

$$\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial z} = \sum_k \frac{\partial N^k}{\partial z} \gamma_{node}^{(\alpha)k} \dots \dots \dots (8.18)$$

のように算出する．すべりこう配をいかに精度よく計算するかは $\gamma_{node}^{(\alpha)k}$ の求め方により大きく左右されるが，本研究では各節点の値は隣接する要素の積分点の値を平均化して求めている．この方法は要素形状および積分点の数によらないため，あらゆる FEM 解析に適用できる．一方，式 (8.12)，式 (8.13)，式 (8.14) および式 (8.15) におけるすべりの 2 次こう配に関しては，1 次要素を用いた場合は零になってしまう．そこで，式 (8.16)，式 (8.17) および式 (8.18) で求めたすべりの 1 次こう配を同様に節点に振り分け，

$$\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x \partial x} = \sum_k \frac{\partial N^k}{\partial x} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial x} \right)_{node}^k \dots \dots \dots (8.19)$$

$$\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x \partial y} = \sum_k \frac{\partial N^k}{\partial x} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y} \right)_{node}^k \dots \dots \dots (8.20)$$

$$\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x \partial z} = \sum_k \frac{\partial N^k}{\partial x} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial z} \right)_{node}^k \dots \dots \dots (8.21)$$

$$\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y \partial x} = \sum_k \frac{\partial N^k}{\partial y} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial x} \right)_{node}^k \dots \dots \dots (8.22)$$

$$\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y \partial y} = \sum_k \frac{\partial N^k}{\partial y} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y} \right)_{node}^k \dots \dots \dots (8.23)$$

$$\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y \partial z} = \sum_k \frac{\partial N^k}{\partial y} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial z} \right)_{node}^k \dots \dots \dots (8.24)$$

$$\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial z \partial x} = \sum_k \frac{\partial N^k}{\partial z} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial x} \right)_{node}^k \dots \dots \dots (8.25)$$

$$\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial z \partial y} = \sum_k \frac{\partial N^k}{\partial z} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y} \right)_{node}^k \dots \dots \dots (8.26)$$

$$\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial z \partial z} = \sum_k \frac{\partial N^k}{\partial z} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial z} \right)_{node}^k \dots \dots \dots (8.27)$$

のように求める。

平面ひずみ問題に対する解析を行う際には通常 Asaro の平面 2 重すべりモデルが用いられるが、この場合 x_3 方向の変化は考慮しないので $\partial \gamma^{(\alpha)} / \partial x_3 = 0$ となり、これを式 (8.1) および式 (8.2) に代入すると GN 転位密度の成分は刃状成分 $\alpha_e^{(\alpha)}$ のみに制限され、次式のように表される。

$$\alpha_e^{(\alpha)} = -\frac{1}{b} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial x} s_x^{(\alpha)} + \frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y} s_y^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (8.28)$$

同様に、 $\partial \gamma^{(\alpha)} / \partial x_3 = 0$ を式 (8.8)、式 (8.9)、式 (8.10) および式 (8.11) に代入すると GN 不適合度の成分は異なるすべり面上にある刃状転位の対を表す成分 $\eta_{de}^{(\alpha)}$ のみに限定され、次式のように表される。

$$\eta_{de}^{(\alpha)} = -\frac{l}{b} \left(\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x \partial x} s_x^{(\alpha)} m_x^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y \partial x} s_y^{(\alpha)} m_x^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x \partial y} s_x^{(\alpha)} m_y^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y \partial y} s_y^{(\alpha)} m_y^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (8.29)$$

$\eta_{de}^{(\alpha)}$ はダイポール成分に相当するため、以下では $\eta_{de}^{(\alpha)}$ をダイポール密度と称する。また、すべりのこう配は、次のように書き換えられる。

$$\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial x} = \sum_k \frac{\partial N^k}{\partial x} \gamma_{node}^{(\alpha) k} \dots \dots \dots (8.30)$$

$$\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y} = \sum_k \frac{\partial N^k}{\partial y} \gamma_{node}^{(\alpha) k} \dots \dots \dots (8.31)$$

さらに、すべりの 2 次こう配は、次のように表される。

$$\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x \partial x} = \sum_k \frac{\partial N^k}{\partial x} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial x} \right)_{node}^k \dots \dots \dots (8.32)$$

$$\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial x \partial y} = \sum_k \frac{\partial N^k}{\partial x} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y} \right)_{node}^k \dots \dots \dots (8.33)$$

$$\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y \partial x} = \sum_k \frac{\partial N^k}{\partial y} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial x} \right)_{node}^k \dots \dots \dots (8.34)$$

$$\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y \partial y} = \sum_k \frac{\partial N^k}{\partial y} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y} \right)_{node}^k \dots \dots \dots (8.35)$$

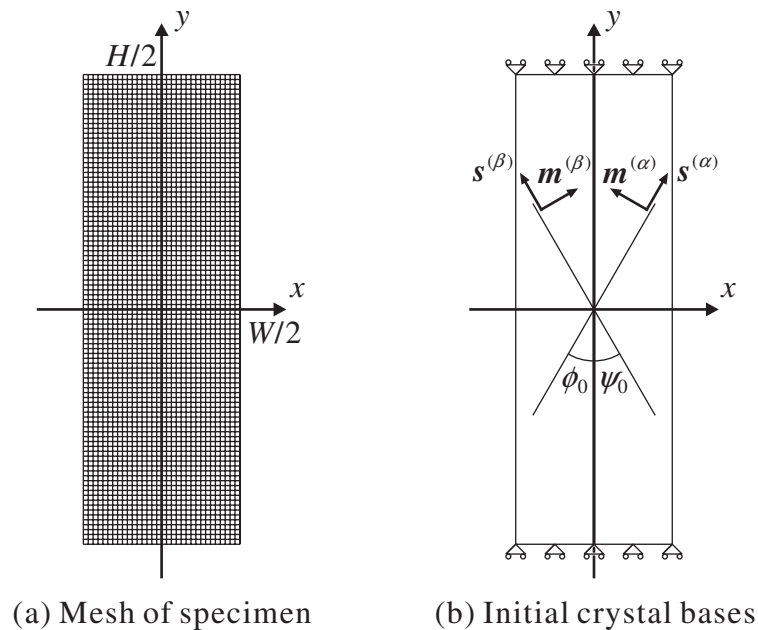


Fig. 8.1 Computational model

本章では主に平面ひずみ問題を想定して数値解析を行うため、式 (8.28) および式 (8.29) に示す成分のみが算出される。上記の成分以外の値は 3 次元解析を行った場合に現れる。そこで、補足 H.1 に、3 次元問題を想定した解析例として、GN 転位密度テンソルおよび GN 不適合度テンソルのその他の成分に関する考察を示しておく。

8.3 FCC 単結晶に対する FEM 解析の結果およびその考察

本節では、結晶粒微細化シミュレーションの準備段階として、単結晶平板に対する単純引張問題を想定した GN 転位-結晶塑性解析を行い、実験から得られる単結晶の加工硬化曲線と比較し、本モデルの妥当性を検証する。

8.3.1 材料定数および境界条件

本節における解析では、解析対象をアルミニウム単結晶平板とし、長手方向の強制変位を与えた際の平面ひずみ問題を静的陽解法を用いて FEM 解析を行う。静的陽解法を用いると局所的に釣合いがくずれのおそれがあるが、本解析における不釣合い力のオーダーは最大でも 10^{-5} 程度であり、十分に許容できる範囲であるといえる。解析モデルには第 7 章と同様に、平面ひずみ問題に適した Asaro の平面 2 重すべりモデルを用い、図 8.1(a) に示すように、変形前の解析メッシュは長さ H 、幅 W 、アスペクト比 $L/W = 3$ とし、試験片寸法は $W = 100\mu\text{m}$ とする。さらに、 x 方向に 32 分割、 y 方向に 96 分割され、1 つの四角形要素は 4 つの三角形要素、すなわち Crossed triangles 要素で構成される。また、図 8.1(b) のように各すべり系の結晶基底ベクトルの方向を定め、結晶の初期方位は $\phi_0 = 30^\circ$ 、 $\psi_0 = 30^\circ$ とする。解析領域の境界条件は図 8.1(b) のように端面でせん断自由であり、変位 u および荷重 T を用いて次のように規定される。

$$\left. \begin{aligned} T_x = T_y = 0 & \quad (\text{at } x = 0.5W) \\ u_y = 0, \quad T_x = 0 & \quad (\text{at } y = -0.5H) \\ T_x = T_y = 0 & \quad (\text{at } x = -0.5W) \\ u_y = U, \quad T_x = 0 & \quad (\text{at } y = 0.5H) \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (8.36)$$

ここで, U は強制変位の大きさである. また, y 方向の反力 T は次式で与えられる.

$$T = \frac{1}{W} \int_{-W/2}^{W/2} T_y(x, L) dx \dots\dots\dots (8.37)$$

端面の強制変形速度は $\dot{U}/\dot{\gamma}_0 L = 1$ となるように定め, 全ステップ数を 1,000,000 としている. また, 異方性弾性係数 C^e を仮想的な平面 2 重すべりモデルに適する形に変換するのは困難であるため, 弾性等方性を仮定し, ヤング率 E およびポアソン比 ν から求める. 材料定数および数値パラメータを以下のように定める.

$$\left. \begin{aligned} E = 60.84\text{GPa}, \quad \nu = 0.3, \quad \tau_0 = 1\text{MPa}, \\ \dot{\gamma}_0 = 0.001/\text{s}, \quad \tilde{b} = 0.256\text{nm}, \quad m = 0.005, \\ l = 3.125\text{nm}, \quad y_c = 1\text{nm}, \quad \rho_0^{(\alpha)} = 0.5/\mu\text{m}^2, \\ \theta^{am} = 1, \quad a = 0.2, \quad c = 1, \\ c^* = 30, \quad f = 12500, \quad p = 1 \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (8.38)$$

なお, 材料の不均一性を表現するために, 初期転位密度 $\rho_0^{(\alpha)}$ には $0.5/\mu\text{m}^2 (= 5 \times 10^{11}/\text{m}^2)$ を基準として上限 10% のゆらぎを与えている. 一方, $\Omega^{(\alpha\beta)}$ の非対角成分を 1 より大きくすると, 2 次すべり系の活動が抑制されやすくなり, 主すべり系のみが活動し続け, 結晶はある方向に回転し続ける傾向になる. 本解析では初期から 2 重すべり状態となる結晶方位を選んでおり, 2 つのすべり系を同様に活動させるために, 転位の相互作用行列の成分に関しては全て 1 としている. ただし, この場合, 式 (5.34) における分母の値が零になってしまうため, $\omega^{(\alpha\beta)}$ の成分に関しては対角成分を零とし, その他の成分を 1 としている.

8.3.2 GN 結晶欠陥の導入方法

本章における GN 転位-結晶塑性解析では, 変形誘起による加工硬化の影響を考慮するために, 硬化係数の転位密度には GN 転位密度を導入する. しかしながら, 本研究で扱う分解能の範囲では, 式 (5.33) で表される $L^{(\beta)}$ のオーダーは転位の運動距離のオーダーすなわち短範囲オーダーに属すると考えられるため, 式 (5.33) における転位密度には GN 転位密度を考慮しない. よって, 硬化係数および転位の平均飛行距離における $\rho^{(\beta)}$ は次のように表される.

$$\rho_h^{(\beta)} = \rho_0^{(\beta)} + \rho_\alpha^{(\beta)} + \rho_\eta^{(\beta)} - \rho_R^{(\beta)} \dots\dots\dots (8.39)$$

$$\rho_L^{(\beta)} = \rho_0^{(\beta)} + \rho_\eta^{(\beta)} - \rho_R^{(\beta)} \dots\dots\dots (8.40)$$

したがって、硬化係数および転位の平均飛行距離は、

$$h^{(\alpha\beta)} = \frac{1}{2}ac\mu \frac{\Omega^{(\alpha\beta)}}{L^{(\beta)} \sqrt{(\rho_0^{(\beta)} + \rho_\alpha^{(\beta)} + \rho_\eta^{(\beta)} - \rho_R^{(\beta)})}} \dots\dots\dots (8.41)$$

$$L^{(\alpha)} = \frac{c^*}{\sqrt{\sum_{\beta} \omega^{(\alpha\beta)} (\rho_0^{(\beta)} + \rho_\eta^{(\beta)} - \rho_R^{(\beta)})}} \dots\dots\dots (8.42)$$

と表され、以上より、硬化係数 $h^{(\alpha\beta)}$ は次のように表される。

$$h^{(\alpha\beta)} = \frac{ac\mu\Omega^{(\alpha\beta)}}{2c^*} \sqrt{\frac{\sum_{\gamma} \omega^{(\beta\gamma)} (\rho_0^{(\gamma)} + \rho_\eta^{(\gamma)} - \rho_R^{(\gamma)})}{(\rho_0^{(\beta)} + \rho_\alpha^{(\beta)} + \rho_\eta^{(\beta)} - \rho_R^{(\beta)})}} \dots\dots\dots (8.43)$$

8.3.3 解析結果および考察

図 8.2 は各量の分布を顕著に表すために、試験片が破断することなく伸び続けることを想定し、仮想的に 30% 伸ばした場合の各量の分布を示している。図 8.2(b), (c) および (d) において赤色および青色の記号はそれぞれ正および負の GN 結晶欠陥の堆積を示しており、結晶欠陥密度の値がそれぞれ $300/\mu\text{m}^2$, $300/\mu\text{m}^2$ および $10/\mu\text{m}^2$ 以上の場合のみ記号を表示している。図 8.2(a) は各すべり系の合計である全すべり量の分布であり、微視的なせん断帯であるマイクロシアバンドの形成が多数観察される。さらに、両すべり系の GN 転位の堆積を示す図 8.2(b) からは、正および負の GN 転位がマイクロシアバンドを上下に挟むように堆積しており、これらの転位が GN 粒界に類似するものを形成していることが予測される。図 8.2(c) および (d) はそれぞれ式 (2.110) における $\rho_R^{(\alpha)}$ を考慮しない場合および考慮した場合の GN 不適合度の分布を表している。図 8.2(d) を見ると、図 8.2(c) において $\rho_\eta^{(\alpha)}$ の値が高い領域では転位対の堆積はあまり見られない。これは、 $\rho_\eta^{(\alpha)}$ の高密度領域では異符号の転位が遭遇する確率が上昇するため、同領域で動的回復現象が頻繁に起こっていることに起因すると考えられる。一方、 $\rho_\eta^{(\alpha)}$ の値の低い領域では対消滅はあまり起こらないため転位対が残っているのがわかる。図 8.2(e) に結晶の初期状態からの回転角度の分布を示す。図 8.2(f) は結晶方位を模式的に表しており、線素は各要素のすべり面に相当する。図 8.2(e) および (f) から、マイクロシアバンドすなわち GN 転位壁に囲まれた菱形状の領域においては隣接する領域との方位差はいずれも約 5° ほどである。したがって、これらの領域の境界において小傾角粒界の形成が確認でき、マイクロシアバンドによって囲まれた領域はサブグレインとみなすことができる。また、本解析で GN 転位が形成した粒界は、大角化こそしていないものの、変形により誘起されたサブグレインの粒界に相当するため sub-GN 粒界と称する。本解析では 30% の強ひずみを付与しているにもかかわらず、大角粒界が形成されないのは、単結晶を想定しているため。結晶粒間の相互拘束が働かないためだと考えられる。また、座屈が生じないような圧縮変形においては各要素は同一方向へと回転し、不均一変形はほとんど見られない。

図 8.3 は本解析で得られた分解せん断応力-すべり曲線であり、各曲線 (i) から (iii) は図 8.3 に示す解析モデル中の各要素に対応する。本解析では、初期状態から 2 重すべりが始まる初期結晶方位を選んでいるため、硬化曲線にステージ I は見られない。図 8.3 を見ると、加工硬化はステージ II から始まっており、その後ステージ III へと遷移している。また、初期結晶方位の近い実験結果⁽⁹²⁾と比較するとよく一致していることがわかる。

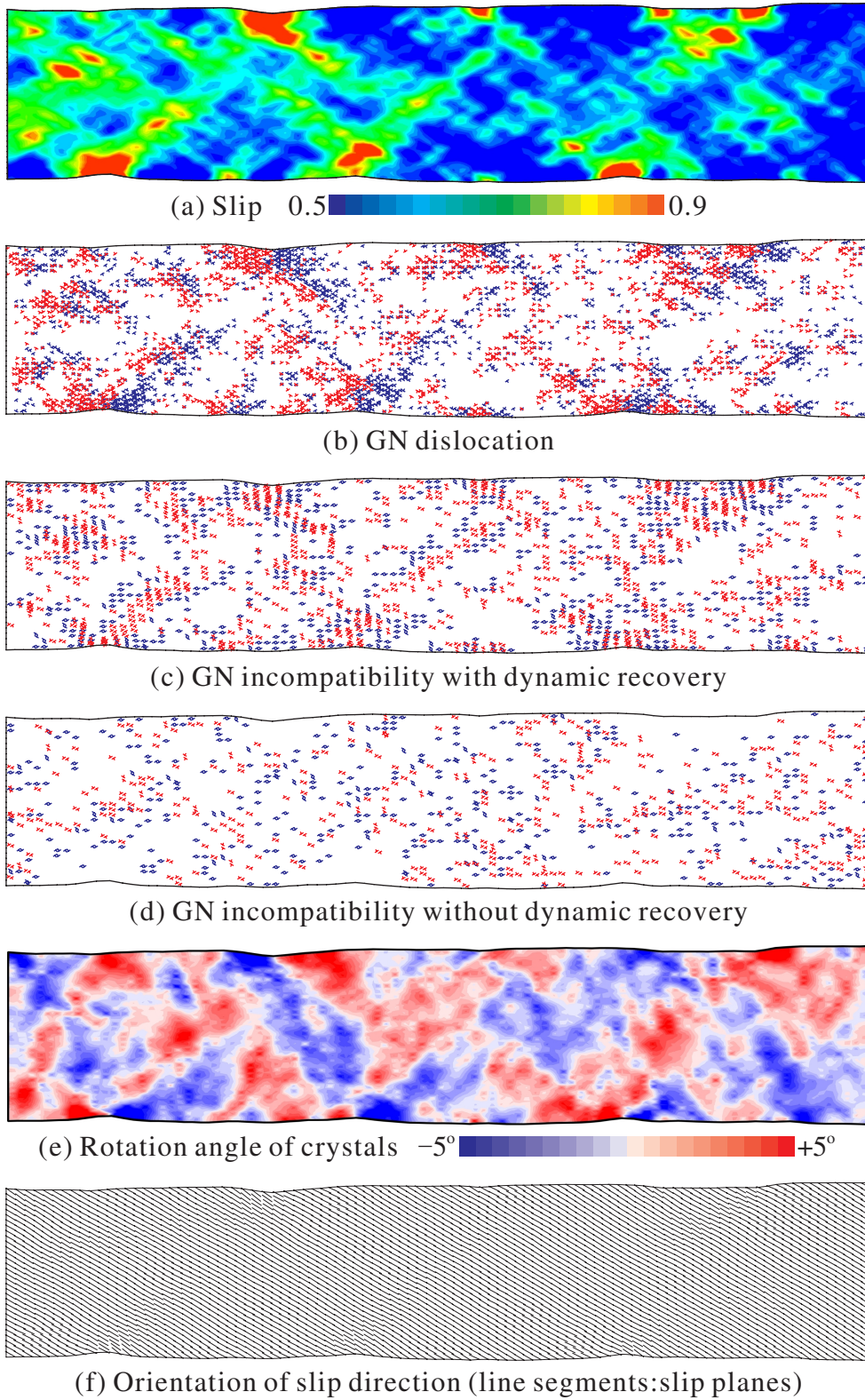


Fig. 8.2 Distributions of slip, GN crystal defects, crystal rotation and crystal orientation

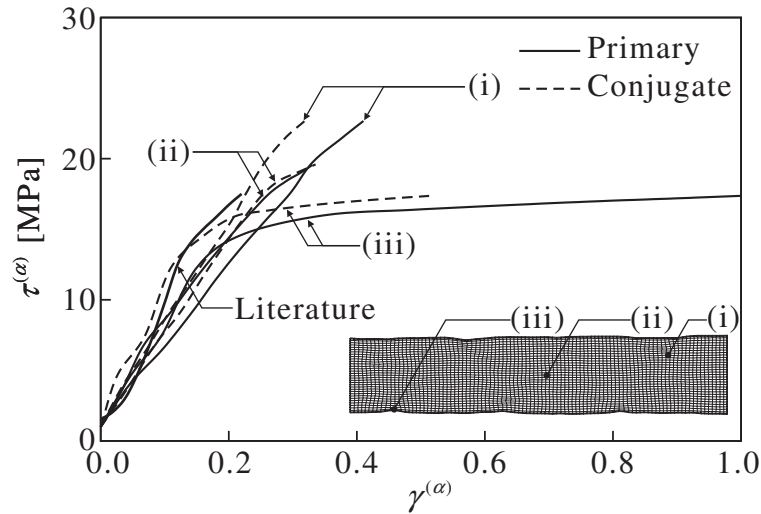


Fig. 8.3 Resolved shear stress versus slip curves

Table 8.1 Classification of examination item

	$h^{(\alpha\beta)} : Y$	$h^{(\alpha\beta)} : N$
$L^{(\alpha)} : Y$	Case (i)	Case (ii)
$L^{(\alpha)} : N$	Case (iii)	Case (iv)

8.3.4 本モデルの妥当性の検証

8.3.2 項において提案した GN 転位密度の導入方法の妥当性を検証するため、式 (5.35) における $\rho_h^{(\beta)}$ および $\rho_L^{(\gamma)}$ に GN 転位密度を考慮するかしないか、表 8.1 のように 4 つの場合について比較検討する。これらは (i) から (iv) の番号によって示されており、例えば、条件 (i) ならば硬化係数にも平均飛行距離にも GN 転位密度を考慮することになる。なお、本モデルは条件 (iii) に相当する。

図 8.4 は表 8.1 における各条件に対応した分解せん断応力-すべり曲線である。式 (5.35) から明らかなように、 $\rho_h^{(\beta)} = \rho_L^{(\gamma)}$ とすると $h^{(\alpha\beta)}$ の値がほぼ一定となってしまうため、図 8.4(iii) および (iv) の曲線のようにほぼ線形に増加し、ステージ III に遷移しない。

図 8.4 は図 8.4 と同様に $h^{(\alpha\beta)}$ あるいは $L^{(\alpha)}$ における転位密度に GN 転位密度を考慮した場合あるいは考慮しない場合の転位平均飛行距離-伸び率曲線である。本モデルの結果である図 8.4(iii) を見ると、ステージ III において転位の平均飛行距離が増加している。これは、動的回復により転位運動の強固な障害となるダイポールや Lomer-Cottrell 固着が崩壊し、ステージ II に比べ転位が運動しやすくなるためであると考えられる。本解析では転位が対消滅を起こす頻度を高めに設定しているため、動的回復の影響による転位の運動距離の増加が顕著に見られるが、同図 (ii), (iii) および (iv) の曲線の値は減少し続けている。本解析で得られた転位平均飛行距離曲線は図 8.6 に示すように、単結晶の 3 段階硬化へ対応できるよう拡張した式 (5.32) を用いても表現することが可能である。ただし、図 8.6 における解析結果は、伸び率をすべり値に変換している。式 (5.32) で表される転位の平均飛行距離のモデルはすべりの値のみで決まるため、転位密度

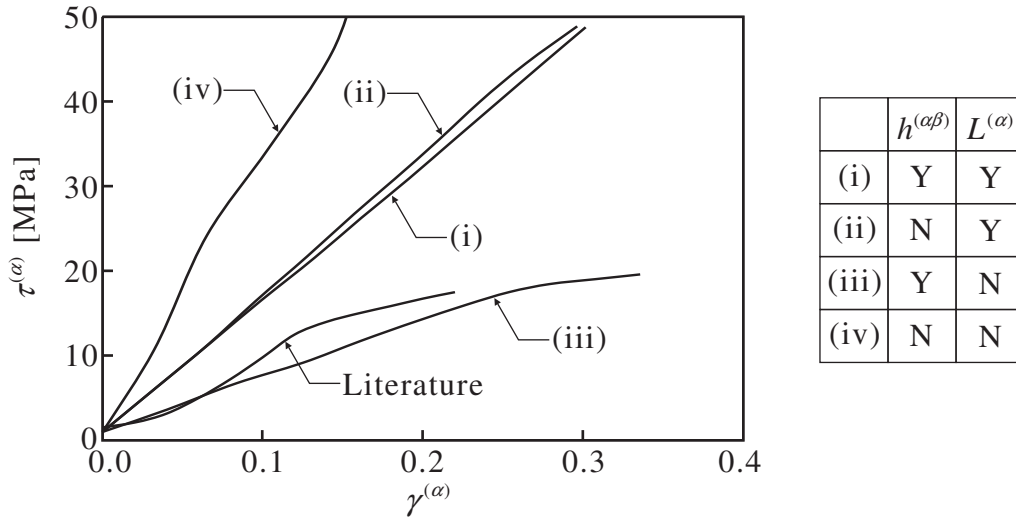


Fig. 8.4 Resolved shear stress versus slip curves

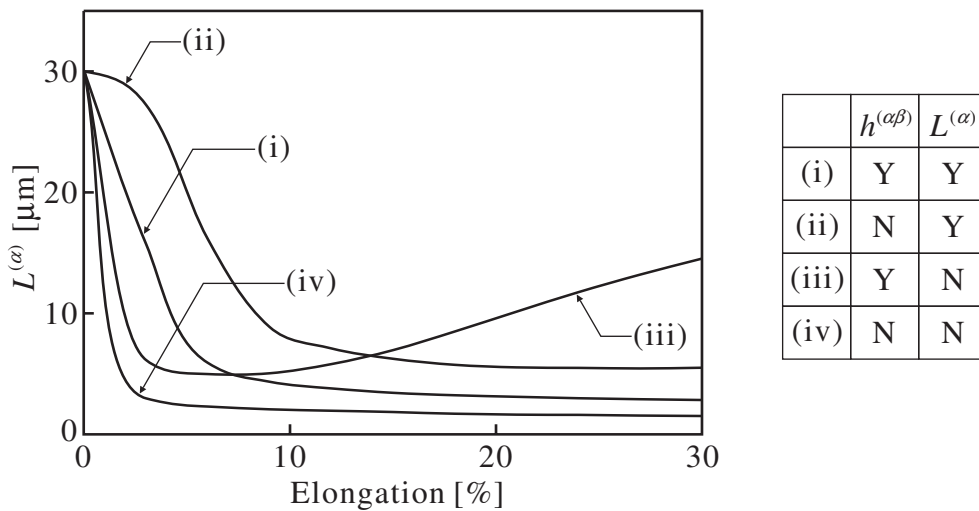


Fig. 8.5 Dislocation mean free path versus elongation curves

が安定的に得られない条件でも使用でき、モデルの単純化を図る際に有用であると考えられる。以上の結果からステージ III の特徴的な現象である転位の平均飛行距離の増加および加工硬化率の減少を表現するためには、転位の情報に動的回復の影響を考慮し、 $L^{(\alpha)}$ における $\rho^{(\beta)}$ には SS 転位密度の役割を成す GN 不適合度のみを考慮するのが妥当であるといえる。

8.4 結晶粒微細化に関する計算手法

本節では、結晶粒微細化シミュレーションの際に用いる、結晶粒の微細化を数値解析的に判定する計算手法を提案する。

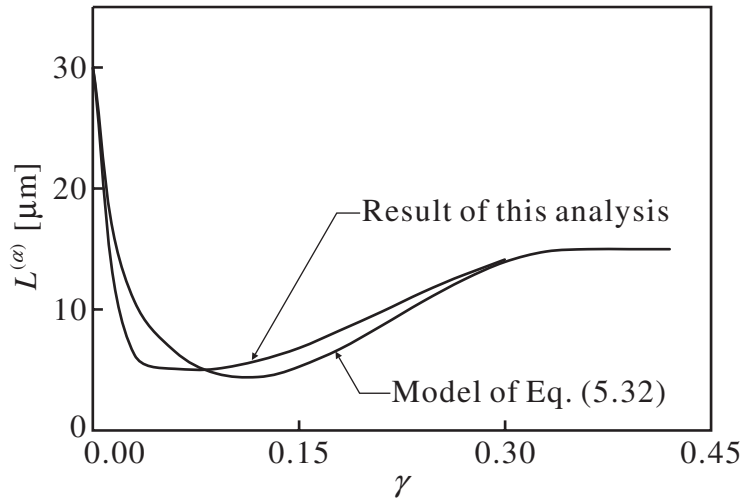


Fig. 8.6 Dislocation mean free path versus slip curves

8.4.1 結晶粒微細化の判定方法

転位-結晶塑性シミュレーションによって算出される結晶の方位角は、要素の分割方法にもよるが、連続的に変化することもあるため、変形によって誘起される新たな粒界を明確に定義することは難しい。一方、実験においては、EBSP法⁽⁹³⁾を用いた場合、隣接する測定点間の角度差が指定した角度以上である場所が粒界として表現される。すなわち、指定角度以内の方位差で連続する領域は1つの結晶粒として認識されるため、粒界のほとんどが大角粒界であるが、一部が小傾角粒界であるような結晶粒に関しては判別することはできない。また、EBSP法の場合、精度は測定点の分解能に依存するが、FEM解析の場合、分解能は要素サイズあるいは積分点間距離の程度となるため、高精度の判定は困難である。そこで本研究では、次に提案するような手法を用いて変形誘起粒界を判定する。

まず、EBSP法と同様に、隣接測定点(本解析では各有限要素の積分点)間で方位差が 5° 以上の領域を図8.7の破線で示す小傾角粒界とみなす。この小傾角粒界によって囲まれた領域は、隣接する領域とは少なくとも 5° 以上の方位差を有するため、サブグレインであるといえる。次に、各サブグレインに含まれる積分点における結晶方位を平均化し、平均化された方位をそのサブグレインの方位として割り当てる。このようにして決定された各サブグレインの方位に基づき、図8.7のように隣接サブグレイン間との方位差が 10° 以上の場合に、これら为大角粒界とみなす。得られた大角粒界および初期粒界によって囲まれた領域を変形によって誘起された新たな結晶粒とする。EPSP法をそのまま適用したのでは結晶粒として認識されないような、粒界の一部が小傾角粒界である粒に関しても、この手法を用いれば変形誘起結晶粒として判別することが可能となる。上記の粒界の判定をステップ毎に行えば、変形によって分割された結晶粒の粒径 d が、2次元解析においては、大角粒界によって囲まれた面積と同面積を有する等価円の直径として得られ、3次元解析においては等価球の直径として得られる。

8.4.2 粒径依存のひずみ速度感度

強ひずみ加工によって超微細粒が形成されると、ひずみ速度感度指数が上昇することが実験的に報告⁽¹¹⁾⁽⁵⁴⁾されているが、大変形に起因する粒径の変化および材料物性の変化を表現した結晶塑性解析の例は

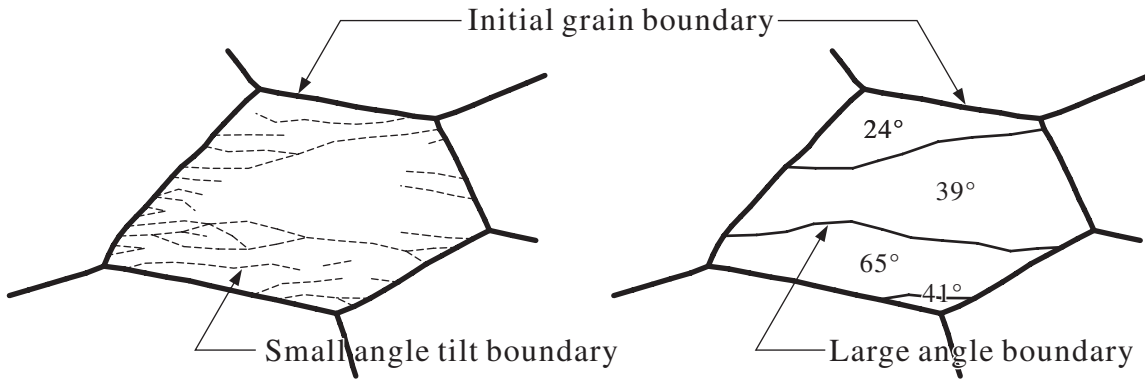


Fig. 8.7 Determination of separated grain

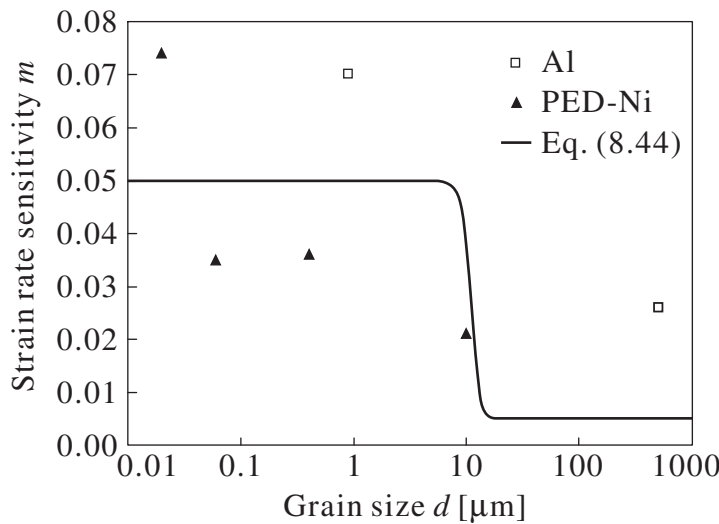


Fig. 8.8 Strain rate sensitivity model and experimental result⁽⁵⁴⁾

見られない。図 8.8 はひずみ速度感度指数 m と粒径 d の関係を示した実験結果⁽⁵⁴⁾ である。粒径の減少に起因するひずみ速度感度指数の増加が、結晶粒微細化プロセスに与える影響を表現するために、図 8.8 の実験的傾向を参考にして、 d を

$$m = \frac{1}{2} [m_0 + m^* + (m_0 - m^*) \tanh \{k(d - d^*)\}] \dots \dots \dots (8.44)$$

のようにモデル化する。ここで、 m_0 はひずみ速度感度指数の初期値、 m^* は微細粒形成後のひずみ速度感度指数の値、 k は m の変化率を決定する数値パラメータ、 d^* は m が急激に変化する際の粒径の代表値である。図 8.8 に $m_0 = 0.005$ 、 $m^* = 0.05$ 、 $k = 0.5/\mu\text{m}$ および $d^* = 11\mu\text{m}$ とした際の m と d の関係を示す。本解析では、一般的な金属材料におけるひずみ速度感度指数の値である 0.005 を初期値とし、ひずみ速度感度指数の変化が結晶粒微細化や材料特性に与える影響を顕著に表現するために、図 8.8 に示すように $d = 11\mu\text{m}$ を境に m の値を急激に変化させる (m を d の線形関数においてもよい)。8.4.1 節で述べた手法によって算出された粒径の情報を式 (8.44) に反映させることによって、結晶粒微細化によるひずみ速度感度指数の変化が表現可能となる。

8.4.3 粒界の発現と GN 転位

一方, Ohashi⁽²⁹⁾ は, 多結晶金属の解析モデルに初期粒界という内部構造を配置することは, 粒界に蓄積する GN 転位に基づく自己硬化を当初から考慮していることに相当するので, 式 (5.28) における転位密度 $\rho^{(B)}$ に GN 転位密度を陽に導入すると, GN 転位による自己硬化を 2 重にカウントすることになると述べている. 結晶粒微細化を想定した解析においては, 変形によって後から誘起される大角粒界は加工硬化に影響を及ぼすと考えられるが, 変形誘起粒界の発現位置を予測し, その影響を解析の初期から導入することは困難である. そのため, 本研究では変形誘起粒界に起因する加工硬化を表現するために, 式 (5.28) に GN 転位密度を考慮することにする.

通常, GN 結晶欠陥の値は各すべり系ごとのすべり値を用いて算出されるが, 粒界周辺においてすべりの空間こう配を求めると, 隣接する結晶粒のすべり系の情報が混入してしまうことがある. 隣接する粒と結晶方位が比較的近いすべり系では, 転位が粒界を通過できるため誤差は生じ難いが, 結晶方位が大きく異なると, GN 結晶欠陥の値は実際よりも大きくなってしまう. 粒径に依存した寸法効果の再現など, 転位密度の値が解析結果を大きく左右する場合には, 精度の高いシミュレーションを行うことはできない. この問題を回避するためには, すべりのこう配を 1 つの粒内のみで算出すればよいが, 変形誘起粒界の情報を考慮し, すべりこう配を計算する条件を逐次変更することは, 計算アルゴリズムの複雑化と計算時間の増加を招く. そこで本研究では, GN 結晶欠陥の計算に関して粒界の情報を特別に考慮せず, 隣接結晶粒のすべり値も用いて, すべりこう配を算出する. 隣接粒間の方位差を 90° 以内に設定すれば, 粒界においてすべりの符号が逆転することはほとんどないため, 誤差を最小限に抑えることができる. また, 転位密度の誤差は粒界周辺のみを生じるため, 結晶粒の分割に直接及ぼす影響は無視できる程度であると考えられる.

8.5 結晶粒微細化に関する FEM 解析の結果およびその考察

本節では, 強ひずみを付与した FCC 多結晶に対して GN 転位-結晶塑性 FEM 解析を行い, UFG 創製シミュレーションの準備段階として, 結晶粒微細化の過程を再現することを試みる.

8.5.1 材料定数および境界条件

数値解析のアウトラインは 8.3 節と同様であるが, 解析対象はアルミニウムに準ずる FCC 多結晶平板とし, 冷間加工を想定して圧縮方向に強制変位を与えた際の平面ひずみ問題を静的陽解法を用いて解析を行う. 本研究では粘塑性 FEM 解析を行うため, 比較的大きな時間増分でも数値計算が行えるように接線係数法を用いる. 解析モデルには平面ひずみ問題に適した Asaro の平面 2 重すべりモデルを用い, 変形前の試験片は長さ H および幅 W がともに $50\mu\text{m}$ の正方形とする [図 8.9(a) 参照]. 結晶粒形状の不均一性を表現するために, 解析領域は図 8.9(a) のように Voronoi 分割により 9 個の領域に分割されており, 各領域を 1 つの結晶粒とみなす. 初期結晶粒径は $30\mu\text{m}$ 程度としている. 本解析では特に結晶粒の細分化に注目するため, 解析時間の短縮を図り, 図 8.9(a) のように試験片の表面に接していない結晶粒は粒番号 1 の粒 1 つのみとしている. 初期結晶方位に関しては, 各粒番号における 2 つのすべり系のすべり面を図 8.9(a) のように定め, 太線および細線に対応するすべり面の水平面からの角度をそれぞれ ϕ_0 および ψ_0 とし, それらの値を表 8.2 のように定める. なお, 隣接粒間での方位差は最大で 80° であり, 方位差の平均値は 32.5° である. また, 図 8.9(a) のように斜めの粒界を有する結晶粒を Crossed triangles 要素などを用いて正方格子状に要素分割することは望ましくないため, 要素形状に関しては, 各要素の面積がほぼ一樣になるように

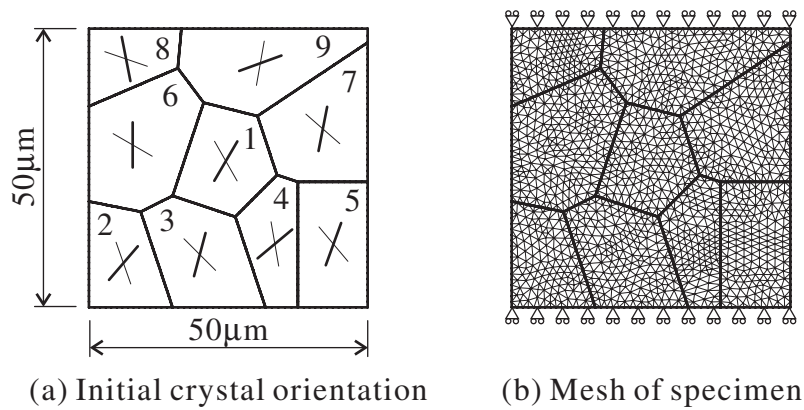


Fig. 8.9 Computational model

Table 8.2 Initial crystal orientations of grains

Grain No.	ϕ_0	ψ_0
1	60°	120°
2	50°	110°
3	75°	135°
4	40°	100°
5	70°	130°
6	90°	150°
7	80°	140°
8	100°	160°
9	20°	80°

Delaunay 三角形分割により決定する [図 8.9(b) 参照]。境界条件は図 8.9(b) のように端面でせん断自由であり，端面に強制圧縮変位 U を与える。強制変位速度は $\dot{U}/H = 0.01/s$ あるいは $\dot{U}/H = 0.001/s$ となるよう定め，FEM 解析における全ステップ数を 150,000 とする。一方，3次元の異方性弾性係数 C^e を仮想的な平面 2重すべりモデルに適する形に変換するのは困難であるため，ここでは弾性等方性を仮定する。すなわち，材料定数および数値パラメータを

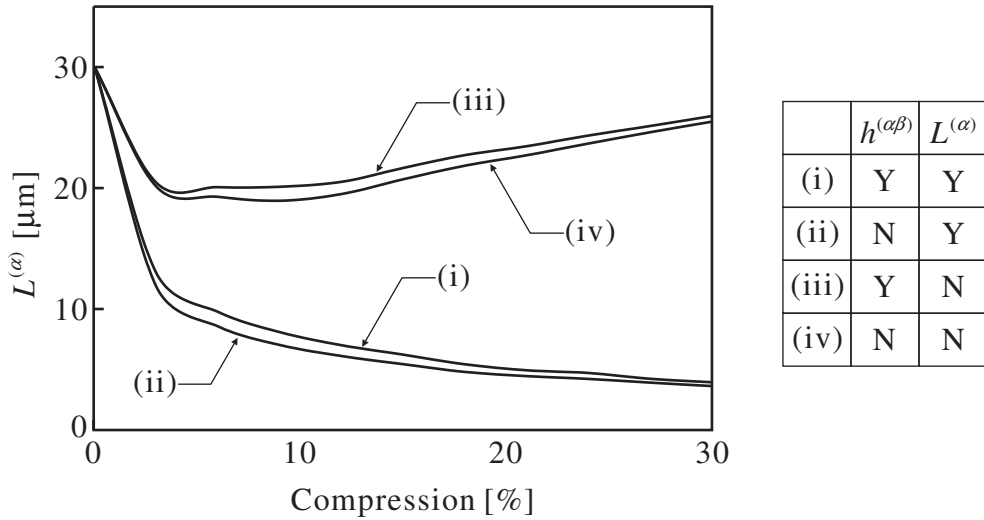


Fig. 8.10 Dislocation mean free path versus compression curves

$$\left. \begin{aligned}
 E &= 60.84\text{GPa}, & \nu &= 0.3, & \tau_0 &= 1\text{MPa}, \\
 \dot{\gamma}_0 &= 0.001/\text{s}, & \tilde{b} &= 0.256\text{nm}, \\
 l &= 1\text{nm}, & y_c &= 1\text{nm}, & \rho_0^{(\alpha)} &= 1/\mu\text{m}^2, \\
 \theta^{an} &= 1, & a &= 0.2, & c &= 1, \\
 c^* &= 30, & f &= 2000, & p &= 1
 \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (8.45)$$

とする．初期転位密度 $\rho_0^{(\alpha)}$ には粒内の材料不均一性を表現するために， $0.5/\mu\text{m}^2 (= 5 \times 10^{11}/\text{m}^2)$ を基準として上限 10% のゆらぎを与える．転位の相互作用行列 $\Omega^{(\alpha\beta)}$ の成分に関しては，簡単のため自己硬化と潜在硬化の影響を同程度とみなし，全て 1 とする．また， $\omega^{(\alpha\beta)}$ の成分に関しては対角成分を零とし，その他の成分を 1 とする．

8.5.2 解析結果および考察

図 8.10 および図 8.11 は 8.3 節と同様に，表 8.1 のように $\rho_h^{(\beta)}$ および $\rho_L^{(\gamma)}$ における転位密度に GN 転位密度を考慮した場合あるいは考慮しない場合の転位の平均飛行距離-圧縮率曲線および代表要素 (図 8.11 の印) における分解せん断応力-すべり曲線である．なお，これらの図においては式 (8.44) を用いず，ひずみ速度感度指数はいずれも $m = 0.005$ と一定にしている．図 8.10 を見ると，転位の平均飛行距離に GN 転位を考慮しない曲線 (iii) および (iv) は，ステージ III における転位の平均飛行距離の増加を表しているのがわかる．一方，図 8.10 からは曲線 (iii) のみが 3 段階硬化をよく再現しているのがわかる．8.3 節における単結晶の引張試験の結果と比較すると，多結晶構造の影響から分解せん断応力の値は大きいものの，ステージ II からステージ III への遷移の傾向などは酷似している．以上の結果から，単結晶の場合だけでなく，多結晶の大変形塑性解析においても本モデル (iii) を用いることは妥当であるといえる．

図 8.12 における曲線 (i) および (ii) は，ひずみ速度感度指数に式 (8.44) を用い，ひずみ速度を 0.01/s およ

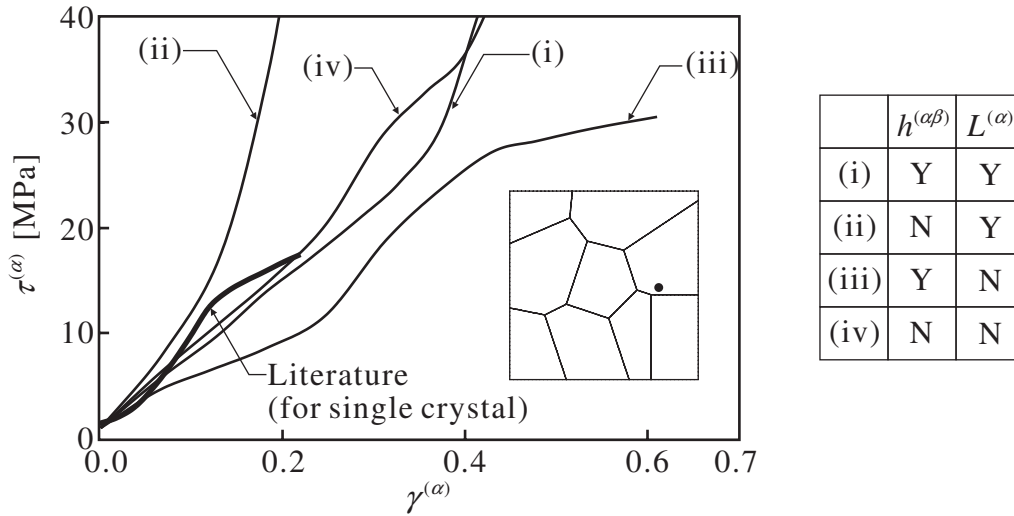


Fig. 8.11 Resolved shear stress versus slip curves

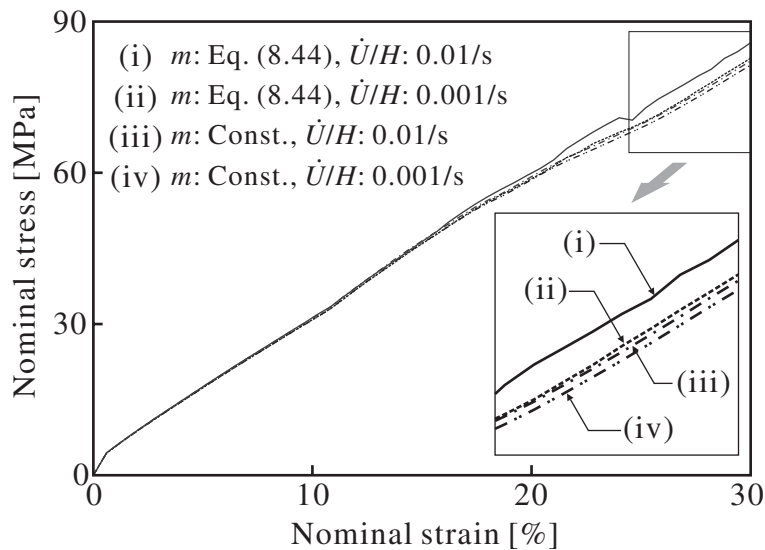


Fig. 8.12 Effect of strain rate sensitivity

び 0.001/s として得られた荷重-圧縮率曲線である。曲線 (i) および (ii) を見ると、端面変位速度が大きくなるほど公称応力が増加しており、微細粒の形成によるひずみ速度感度指数の上昇が再現されているのがわかる。式 (8.44) では m のオーダーが最大で 1 桁変化するため、さらに顕著なひずみ速度依存性の発現が期待されたが、本解析の結果では全ての結晶粒が微細化されるには至っておらず、公称応力の増加は図 8.12 に示す程度に留まっている。一方、同図でひずみ速度感度指数を $m = 0.005$ と一定にした場合の曲線 (iii) および (iv) には、予想されるとおりひずみ速度依存性はほとんど見られない。

図 8.13 から図 8.18 はひずみ速度感度指数に式 (8.44) を適用し、端面変位速度を 0.01/s としたときの圧縮率 12% および 30% における各量の分布図である。図 8.13 は各すべり系の総和である全すべりの分布を表しており、圧縮率 30% においては局所的にすべりの値は 2.0 以上に達している。すべりの集中領域は初

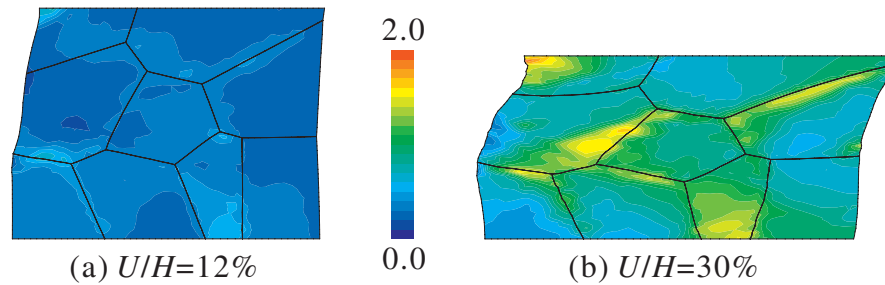


Fig. 8.13 Distributions of slip

期粒界付近に多く、粒界による変形の拘束がひずみの局所化に影響を与えていることがわかる。図 8.14 は結晶の回転角度の分布図であり、表 8.2 における ϕ_0 に相当するすべり方向と水平方向のなす角 ϕ を表示している。圧縮率 12% においては、各粒内で結晶方位のばらつきはほとんど見られないが、変形が進むにつれて、すべりの局所化が生じている領域と生じていない領域で結晶回転の傾向が異なってくるのがわかる。一方、8.4 節で述べた手法を用いて計算された変形誘起結晶粒の分布を表す図 8.15 を見ると、図 8.14 において結晶方位が 10° 以上変化している領域で、変形誘起粒界が発現しており、図 8.14 の結晶方位分布のみからは判断しきれない大角粒界の形成が明確に示されているのがわかる。圧縮率 12% においては新たな大角粒界はほとんど見られないが、圧縮率が 30% に達すると多くの粒内に大角粒界の形成が確認できる。また、誘起された粒の形状は圧縮変形の影響により扁平なものが多くなっており、粒径は小さいものでは数 μm 程度になっている。付与された局所ひずみの値が比較的小さいため、材料全体は十分に微細化してはいないものの、このようなひずみの増加に伴って結晶粒が微細化されるという傾向は実験結果⁽¹¹⁾と定性的に一致している。図 8.16、図 8.17 および図 8.18 は、それぞれ GN 転位 ρ_a 、動的回復を考慮した GN 不適合度 $\rho_\eta - \rho_R$ 、動的回復を考慮しない GN 不適合度 ρ_η の分布図である。赤色および青色の記号は、それぞれ正および負の GN 結晶欠陥の堆積を示しており、GN 転位密度、動的回復を考慮した GN 不適合度および動的回復を考慮しない GN 不適合度の値がそれぞれ $300/\mu\text{m}^2$ 、 $3/\mu\text{m}^2$ および $50/\mu\text{m}^2$ 以上の場合のみ記号を表示している。図 8.16(a) を見ると、初期の粒界に同符号の GN 転位が列をなして堆積しているのがわかる。これは、隣接粒との結晶方位が大きく異なっており、粒界を乗り越えて運動することができない GN 転位が粒界に堆積したためである。一方、GN 転位が堆積していない粒界も見られるが、これは粒界を挟む初期結晶粒の方位差が比較的少なく、変形後にほとんど同一方位になり、粒界に蓄積することなく GN 転位が通過したためであると考えられる。さらに、圧縮率 30% における図 8.16(b) を見ると、初期粒界のみならず、多くの粒の内部にも同符号の GN 転位が列をなして蓄積しているのがわかる。図 8.15(b) の粒界の分布と比較すると、変形によって誘起された大角粒界と GN 転位の堆積している領域はほぼ一致している。通常、変形によって方位差が生じて新たな粒界が形成される場合には、結晶格子のずれを補間するために、同符号の転位が誘起粒界に堆積することが知られており、このような粒界は GN 粒界と称される⁽⁵²⁾⁽⁵³⁾。図 8.16(b) における GN 転位群は、GN 粒界を形成しており、GN 粒界によって結晶粒が新たに 2 つ以上の粒に分割される過程が本解析によって定性的に再現されていることがわかる。一方、図 8.17 を見ると、圧縮率 12% において堆積した転位対は変形が進むにつれて、動的回復の影響を受けて減少しているのがわかる。動的回復を考慮しない GN 不適合度の分布である図 8.18 では、転位対の数は変形の進行とともに増加していることから、図 8.17 における転位対の減少は動的回復の影響によるものであることが確認できる。

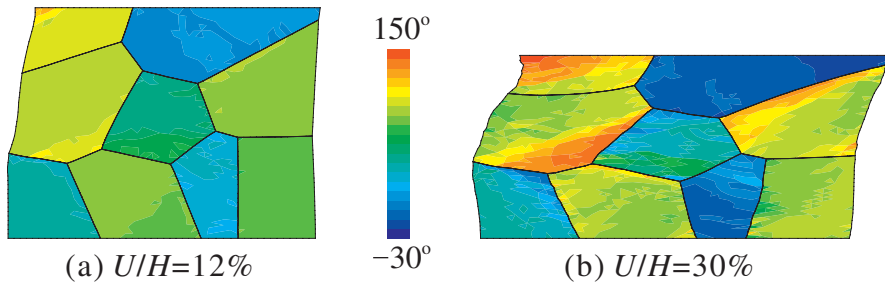


Fig. 8.14 Rotation angles of crystals

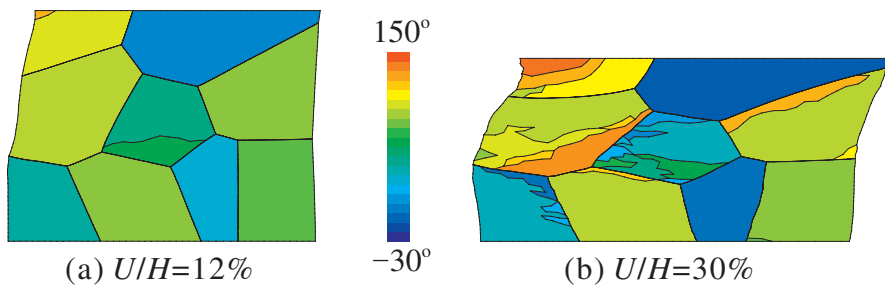


Fig. 8.15 Separation of grain

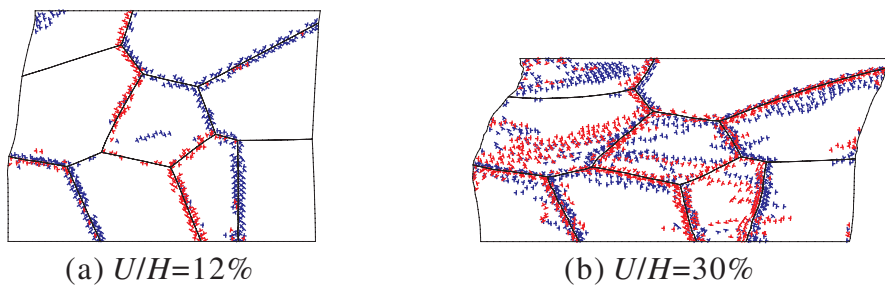


Fig. 8.16 Distributions of GN dislocations

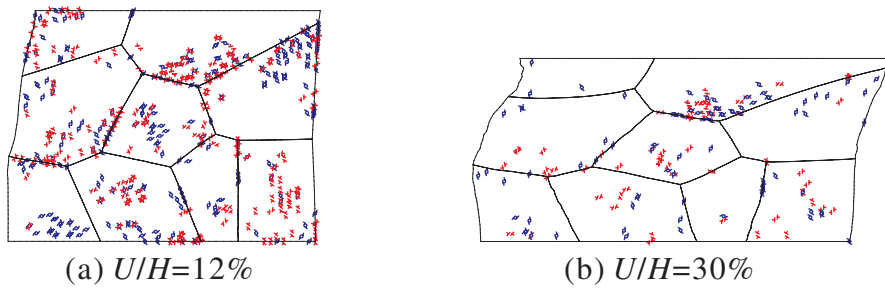


Fig. 8.17 Distributions of GN incompatibilities considering dynamic recovery

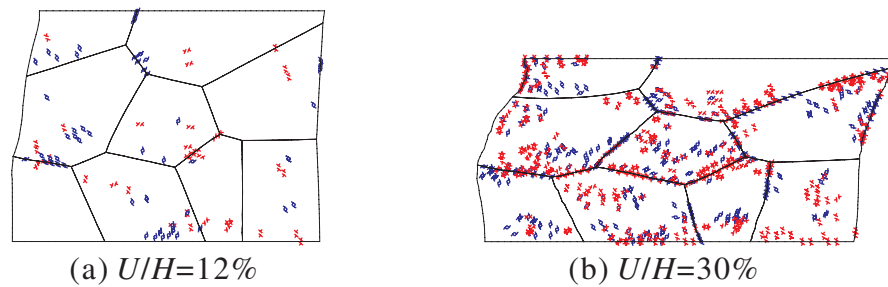


Fig. 8.18 Distributions of GN incompatibilities without dynamic recovery

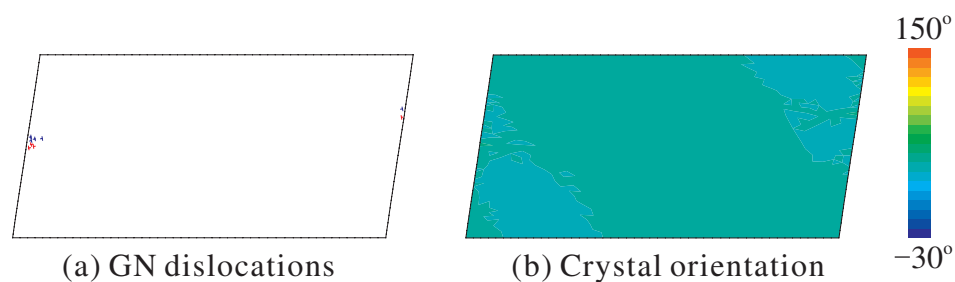


Fig. 8.19 Result of single crystal ($U/H = 30\%$)

図 8.19 は、全ての結晶粒の初期方位をおよびとし、単結晶を想定して同様の圧縮解析を行った結果であり、GN 粒界は形成されず結晶方位もほぼ一様である。したがって、結晶粒微細化は、隣接する結晶粒からの拘束に大きく影響を受けるといえる。

また、図 8.12 の各曲線に対応する条件における結晶粒微細化の様子を図 8.20 に示す。これを見ると、結晶方位分布および結晶粒の分割の様子には大きな違いは見られない。温間-熱間加工の場合はひずみ速度の増加に伴って微細化が促進されるという報告⁽⁹⁴⁾もあるが、本解析で想定している冷間加工においては、通常の金属材料と同様に、ひずみ速度依存性は低くなると考えられる。そのため、本解析条件程度のひずみ速度感度指数およびひずみ速度の変化では、結晶粒微細化への影響は小さいと考えられる。

本研究では UFG 創製シミュレーションの準備段階として、単軸圧縮による結晶粒の微細化を試みた。しかしながら、2 方向圧縮あるいは多段圧縮によるサブミクロンオーダーまでの結晶粒超微細化、セル組織およびサブグレイン形成などの転位パターンに基づく超微細粒形成、結晶粒超微細化が材料強度に及ぼす寸法効果などが、検討すべき課題として残されている。同時に、結晶粒微細化の実験結果と比較することによって本モデルの妥当性を定量的に検証するためには、解析モデルを 3 次元化する必要があるが、これについても今後の課題としたい。

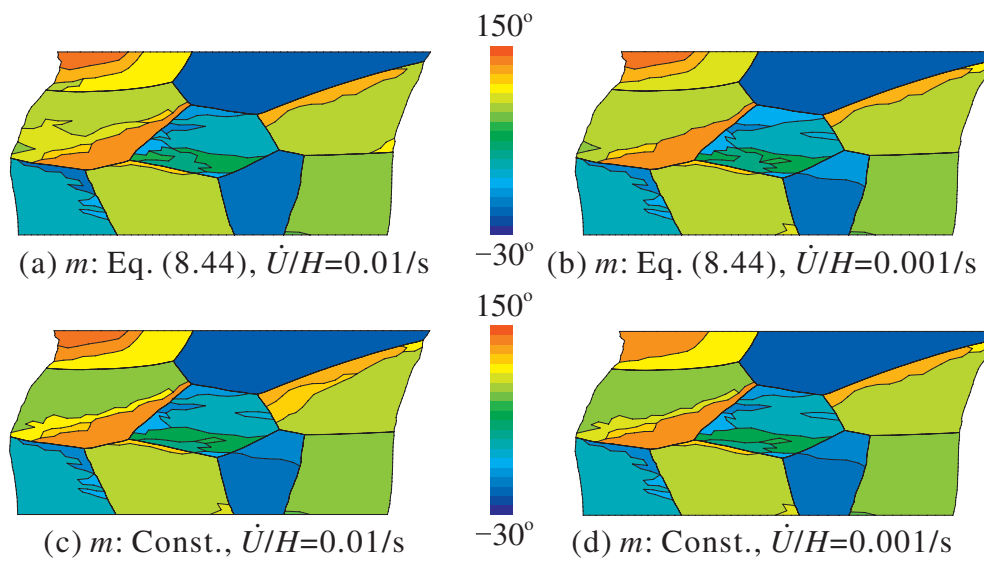


Fig. 8.20 Influence of strain rate on grain refinement ($U/H = 30\%$)

第9章

結 論

9.1 本論文の結論

本研究では、転位場と変形場といった異なるスケールの階層の橋渡しとなる転位-結晶塑性論における転位場の支配方程式として、結晶塑性論の体系に適合する GN 結晶欠陥モデルおよびセル再分割・サブグレイン遷移といった転位パターンニングを表現する反応-拡散モデルを提案した。以上のモデルを用いることによって転位場と変形場を連成させたマルチスケール結晶塑性シミュレーションを行い、強ひずみ条件下における結晶粒微細化のプロセスを数値解析的に再現することを試みた。

以上のマルチスケールモデリングおよびシミュレーションの結果から得られた結論を次に示す。

9.1.1 GN 結晶欠陥に関する結論

ほぼ全ての結晶欠陥を幾何学量で表現するために、SS 転位密度の代わりに不適合度テンソルを導入した。その際に、結晶塑性論の体系に則するように、結晶のすべりに基づいて GN 転位密度テンソルおよび GN 不適合度テンソル (総称: GN 結晶欠陥) を新たに定義した。また、幾何学的状態量である GN 結晶欠陥では表現することのできない動的回復現象の要因となる転位の対消滅率を幾何学的議論に基づいて新たに定義した。以上の GN 転位密度テンソル、GN 不適合度テンソルおよび幾何学的議論に基づく転位対の消滅モデルを用いて全転位密度を表現した。加えて、GN 不適合度テンソルが表す転位対の幾何学的描像について考察した。さらに、硬化係数および転位密度依存形の転位の平均飛行距離モデルにおける転位密度に GN 転位密度を導入した場合と導入しない場合の GN 転位-結晶塑性シミュレーションの結果を比較し、実現象との整合性を確かめた。

以上の検討から、以下の結論を得た。

- (1) 結晶塑性論の体系に適合した GN 転位密度テンソルは Burgers ベクトルの大きさおよびすべりの 1 次こう配によって、GN 不適合度テンソルは Burgers ベクトルの大きさ、最隣接転位間距離およびすべりの 2 次こう配によって表すことができる。
- (2) 幾何学的議論に基づく転位の対消滅モデルを用いることによって、変形の進行に伴う転位対の消滅が表現でき、ステージ III における硬化率の減少ならびに転位の平均飛行距離の回復を再現することができる。
- (3) GN 不適合度テンソルは、SS 転位密度に相当する転位対の堆積を表すことができ、同一すべり面上あるいは異なるすべり面上の刃状転位対およびらせん転位対の区別といった転位対の幾何学的描像を表

現できる．

- (4) 転位の平均飛行距離モデルには GN 転位密度を考慮せず，硬化係数にのみ GN 転位密度を導入した場合に，加工硬化曲線における 3 段階硬化およびステージ III における転位の平均飛行距離の回復が表現できる．

9.1.2 転位パターンニングに関する結論

反応-拡散方程式を熱力学的手法に基づいて導出し，ダイポールの対消滅率および不動転位の蓄積率の増減を考慮して反応速度係数をモデル化することによって，ステージ II 後半におけるセル構造の再分割を表現した．また，可動転位と不動転位の対消滅に基づく動的回復モデルを反応-拡散方程式に導入することによってステージ III におけるサブグレイン遷移を再現した．転位パターンニングに基づく転位-結晶塑性シミュレーションを行うに際して，反応-拡散方程式における各速度係数の応力に依存した自律的变化を表すために，応力効果係数を分解せん断応力の関数としてモデル化した．さらに，ステージ III における動的回復現象の影響を考え，転位の平均飛行距離をステージ III で回復させるようにモデル化し，従来の修正 Seeger モデルをステージ III まで拡張した．

以上の検討から，以下の結論を得た．

- (1) ダイポールの対消滅率および不動転位の蓄積率の増減を考慮した反応速度係数モデルを用いることによってステージ II 後半におけるセルパターンの再分割過程が再現でき，動的回復モデルを用いることによってステージ III におけるサブグレインパターンが再現できる．
- (2) 分解せん断応力の値に応じて自律的に変化する応力効果係数を用いることによって，単結晶の 3 段階硬化に対応する転位パターンニングが発現し，特に，ステージ II ではセルが形成されても結晶方位が一様であるのに対し，ステージ III では隣接サブグレインの方位差は数度となり，サブグレイン壁が小傾角粒界となる現象が数値解析的に表現できる．
- (3) ステージ III へ拡張した転位の平均飛行距離モデルを用いて転位パターンニングに基づく転位-結晶塑性シミュレーションを行うことによって実験事実に整合する形で 3 段階硬化が再現できる．

9.1.3 結晶粒微細化に関する結論

反応-拡散方程式を用いた転位パターンニングに基づく転位-結晶塑性解析を行い，セル再分割・サブグレイン遷移といった転位の自己組織化現象を再現した．また，GN 転位-結晶塑性モデルを用いたひずみ条件下での数値解析の結果から，材料内の転位および結晶方位分布を可視化し，材料の微細組織が変形に伴って変化する過程を再現した．一方，実験データを参考に，粒径を変数とする関数を用いてひずみ速度感度指数をモデル化し，数値解析の結果から，ひずみ速度感度指数の変化が結晶粒の微細化に与える影響を調査した．その際に，実験において利用される EBSP 法に基づいて数値解析的に小傾角および大角粒界を判定した．，サブグレイン領域を定めた．さらに，その領域のうち，周囲との方位差が一定の角度以上のものを大角粒界として取り出し，大角粒界に囲まれた変形誘起結晶粒の粒径情報をひずみ速度感度指数へと反映させた．

以上の検討から，以下の結論を得た．

- (1) 転位パターンニングに基づく転位-結晶塑性解析によって，材料の変形に伴って，セル構造が再分割さ

れ、小傾角粒界を有するサブグレインへと遷移する過程が再現できる。形成されたサブグレインの転位壁にはマイクロシアバンドが発現し、Sub-GN 粒界が誘起される。

- (2) 粒径依存形ひずみ速度感度指数モデルによって結晶粒微細化によるひずみ速度感度指数の変化が表現できる。ただし、冷間加工においては、ひずみ速度およびひずみ速度感度指数の変化は強ひずみによって誘起される微細粒のサイズにほとんど影響を与えない。
- (3) GN 転位-結晶塑性シミュレーションによって結晶粒が微細化される過程が数値解析的に再現でき、数値解析的な大角粒界の判定方法によって変形誘起結晶粒の粒径情報をひずみ速度感度指数へと反映させることができる。粒内において同符号の GN 転位が列を成して堆積する領域は大角粒界と一致する。

9.2 今後の課題と展開

9.2.1 転位パターンニング

本論文では巨視的な変形と転位パターンニングの相互作用を表現するため、転位パターンニングに関しては各々の転位の挙動を粗視化した反応-拡散方程式を用いたが、離散転位動力学法⁽³⁵⁾⁽³⁶⁾などを用いることによって、より詳細に離散的な転位の挙動を表現することが可能になると考えられる。ただし、集団転位の自己組織化現象を表現するためには膨大な数の転位線を不均一に配置する必要があり、現状の計算機能力では困難である。そこで、離散転位動力学法を用いた転位線の挙動に関するシミュレーションを手がかりに、反応-拡散方程式における各速度係数を決定することができれば、本モデルのさらなる精密化および修正が可能になると考えられる。

また、本論文で想定した変形速度は $0.001 \sim 0.01/s$ 程度であり、慣性力の効果を無視し、準静的変形として扱った。そのため、変形に要する時間は現象時間とは対応せず、反応-拡散方程式における時間とは対応しないが、本解析では変形場の結晶塑性 FEM 解析と転位場の反応-拡散 FDM 解析の連成解析における初めての試みとして、簡単化のため上記の条件を用いた。動的解析手法を導入し、両解析手法のより精密な連成を図れば、拡散係数および各速度係数に関して詳細な検討が可能となる。同時に、本論文ではセル径や結晶内の平均転位密度などを比較し、パターンニングの傾向を確かめたが、セル壁内の局所的な転位密度や領域に対して高転位密度領域が占める割合などを比較することによって詳細な定量的評価が可能になると考えられる。

一方、 $10\mu\text{m} \times 10\mu\text{m}$ の領域内に径が $1\mu\text{m}$ 程度のセル・サブグレインといった転位パターンニングを再現するためには、 100×100 程度の FDM メッシュが必要となり、同程度の解像度で FEM メッシュを作成すると要素数が 40000 程度になる。本解析では変形場の解析結果に影響を与えない程度に FEM メッシュを粗くすることによって解析時間の短縮を図っており、簡単化のため、FDM メッシュの変形は考慮せず、直交差分格子として扱った。さらなる数値解析の精密化を図るためには、FDM に関してはアダプティブメッシュを用いるか、転位パターンニングを FEM で解くといった方法が考えられる。

9.2.2 転位-結晶塑性モデル

本研究において定式化した転位-結晶塑性モデルは、ミクロ場の転位情報をマクロ場の変形情報に反映させるために、式 (5.26) に表される転位密度速度とすべり速度の関係を用いてる。式 (5.26) は通常の SS 転位密度の発展式であり、本研究で用いている転位密度の定義とは異なる。このことは、同じ論理体系の中で 1 つの物理量を 2 種類の表現方法で記述していることになり、矛盾が生じてしまう。ただし、式 (5.26)

は転位情報と変形情報の仲介を目的としているため、数値計算上は式(5.26)を直接用いているわけではない点に注意されたい。また、式(5.26)は可動転位の不動化といった最も簡単な転位の反応モデルに基づいた表現であり、本研究で提案した反応-拡散方程式を粗視化したものであるといえるが、転位の消滅といった現象は考慮されていない。本研究では式(5.32)を用いて転位の平均飛行距離を過剰に回復させることによって、動的回復現象を表現しているが、真に式(5.26)と反応-拡散方程式を対応させるためには、例えば Essmann-Mughrabi⁽⁵⁷⁾ によって提案された動的回復モデルなどを導入する必要がある。転位密度の定義、転位情報の導入方法および転位の平均飛行距離モデルなどに関しては様々なものが提案されている段階であり、工業的応用といった意味でも、これらに関して入念に議論する必要がある。

一方、本モデルにおいては、金属材料の冷間加工および静的問題を想定しているため、簡単化のため温度の影響を陽には導入していない。単結晶レベルでは温度が異なると3段階硬化における各ステージの長さが変化することが報告されており、温度の影響を考慮することによってこのような現象も表現可能になると考えられる。また、強ひずみ加工などによってステージ III にまで達すると塑性仕事の影響によって熱が発生するため、熱伝導方程式などを介して温度分布の情報を導入する必要があると考えられる。さらに、温間圧延などを想定したシミュレーションの際にも温度の影響が重要になってくる。通常の塑性論とは異なり、結晶塑性論においては結晶の硬化則のみで塑性挙動が表現されるため、臨界分解せん断応力の温度依存性などは比較的容易に導入することができる。また、本モデルは転位挙動に基づいて結晶の硬化特性を決定しているため、温度の影響による拡散係数および各速度係数の変化などを表現することによって、マクロレベルでの温度依存性が再現されると考えられる。さらに、転位の熱活性化運動の素過程に基づいて、温度およびひずみ速度の依存性を表現する次式のような有効応力モデルも提案されている⁽³⁾。

$$\tau^* = \tau_m \left\{ 1 - \left(\frac{mk\theta}{\Delta G} \right)^{\frac{1}{q}} \right\}^{\frac{1}{p}} \dots\dots\dots (9.1)$$

ここで、 τ^* は有効応力、 τ_m は絶対零度での臨界分解せん断応力、 m は比例定数、 k は Boltzmann 定数、 θ は温度、 ΔG は活性化エネルギーおよび p および q 数値パラメータである。式(9.1)を本モデルに適用することによって有効せん断応力に対する温度の影響を導入することができる。

9.2.3 UFG 創製シミュレーション

本研究では UFG 創製シミュレーションの準備段階として、UFG 創製の初期段階であるセル構造の形成・再分割およびサブグレイン遷移を転位パターンニングに基づく転位-結晶塑性シミュレーションによって再現した。また、GN 転位-結晶塑性モデルを用いて、UFG 創製の中期段階に起こる変形誘起大角粒界による結晶粒の細分化を試みた。しかしながら、実際には初期段階において形成されたサブグレイン構造が有する小傾角粒界の一部が大角化して結晶粒が微細化されるため、上記のような現象は一連の流れで解析する必要がある。また、2方向圧縮あるいは多段圧縮によるサブミクロンオーダーまでの結晶粒超微細化、結晶粒超微細化が材料強度に及ぼす寸法効果などが、検討すべき課題として残されている。同時に、結晶粒超微細化の実験結果と比較することによって本モデルの妥当性を定量的に検証するためには、解析モデルを3次元化する必要があるが、これについても今後の課題としたい。また、強ひずみ加工によって創製された UFG が有する粒サイズは均一ではないため、実際の構造材料として扱うためには粒サイズをある程度そろえる必要がある。その際に通常は熱処理によって再結晶化を促すが、本モデルを用いた数値解析によって得られる結晶粒の形状、サイズおよび方位などを手がかりに、再結晶の核生成サイトを予測することができれば、多結晶凝固の Phase-field モデル⁽⁹⁵⁾ などを用いることによって、UFG 創製の一連のプロセスを数

値解析的に再現可能になると考えられる．以上のような課題を解決することによって，数値実験を手がかりとして，材料特性を飛躍的に向上させた新材料の創製が簡便になる．

9.2.4 マルチスケールモデリング

本研究では主に金属結晶の変形場と転位場といった異なる階層（スケール）の情報を橋渡しすることによってマルチスケールモデリングを行った．ただし，本モデルを用いて通常の構造解析を想定したシミュレーションを行うためには，材料が有する結晶粒を実際に配置し，構成する結晶粒サイズよりも細かいFEMメッシュを作成する必要がある．そのため，現状の計算機の能力では計算時間がかかりすぎてしまう．さらにいえば，一般的な試験片サイズの多結晶体でさえ，粒数でいえば膨大に含まれるため，数値解析を行うのは困難である．このような問題を解決するためには，材料の微細構造から巨視的な性質を予測する均質化法⁽⁹⁶⁾⁽⁹⁷⁾などを用いることによって，結晶粒レベルの構造を粗視化する必要がある．一方，本モデルを用いて転位場よりもさらにミクロな階層に関する研究としては，転位線が形成する弾性場の情報から転位線にかかる力を計算し，転位線の動きを再現する離散転位動力学法⁽³⁵⁾⁽³⁶⁾，原子間ポテンシャルに基づいて原子の運動を計算する分子動力学法⁽⁹⁸⁾⁽⁹⁹⁾⁽¹⁰⁰⁾や構成式の代わりに原子間ポテンシャルを用いた純連続体力学法⁽¹⁰¹⁾⁽¹⁰²⁾などがある．以上のようなシミュレーションは，大規模計算を行ってもナノメートルオーダーのレベルに留まっているが，このような超ミクロ原子場の情報をも考慮した新たなマルチスケールモデルを構築することによって，より実践的なマルチスケールシミュレーションが可能となる．

謝 辞

本研究は、著者が慶應義塾大学大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻に在籍中に、本塾理工学部機械工学科 志澤一之教授のご指導のもとで行ったものであり、学部時代から現在に至るまで同教授から賜りました熱心なご指導、ご鞭撻に対し厚く御礼申し上げます。

本研究の遂行に当たって、学会や研究会などで熱心にご議論いただいた北見工業大学機械システム工学科 大橋鉄也教授、東京理科大学工学部第一部機械工学科 中曽根祐司教授および神戸大学工学部機械工学科 長谷部忠司助教授には、心から感謝いたします。

本論文の作成において、ご査読していただき、また有益なご討論ならびに貴重なご助言を賜った本塾理工学部機械工学科 山田邦博教授、本塾理工学部システムデザイン工学科 野口裕久教授および本塾理工学部機械工学科 鈴木哲也教授には、深謝いたします。

本論文の作成においてご助言いただいた本塾理工学部機械工学科 只野裕一助手および共に研究室生活を送り、有益なご意見をいただいた、当時本塾大学院理工学研究科機械工学専攻 柴田哲身氏および村上大介氏、当時本塾大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻 青山紘子氏、菊池完人氏、菅公彦氏、山木学氏、浅野久志氏、神野研一氏、高松敦氏、富井大介氏、松下将明氏、森田洋平氏、池田哲秀氏、田中俊介氏、藤本敦氏、安藤哲朗氏、中垣望氏、中田裕氏、阿部真之氏、伊藤嘉崇氏、海老原誠氏、大石真吾氏および志田雅之氏、当時本塾理工学部機械工学科 木性俊和氏、田中謙太郎氏、三澤省悟氏、清水祐子氏、國保尚子氏および山上裕基氏、本塾大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻 味岡秀恭氏、海宝寿実雄氏、杉田賢太郎氏、灘裕統氏、松本吉博氏、山木直氏、岡田敏氏、小倉正寛氏、佐藤駿次氏、堀部尚裕氏および水谷賢治氏ならびに本塾理工学部機械工学科 石川毅氏、黒澤瑛介氏、佐久間正寿氏、菅原英夫氏、武文智洋氏、村松眞由氏に感謝いたします。特に、本研究にご協力いただいた、菅公彦氏、池田哲秀氏、藤本敦氏、安藤哲朗氏、大石真吾氏、海宝寿実雄氏、山木直氏および堀部尚裕氏に対して言葉に尽くせぬ感謝の意を表します。

なお、本研究は、文部科学省平成 15 年度 21 世紀 COE プログラム「知能化から生命化へのシステムデザイン」によるものであることを記し、謝意を表します。

最後に、著者をここまで養い、本塾で学ばせてくれた両親に心から感謝いたします。

2006 年 8 月 矢上台の研究室にて

著者

青柳 三輝

参考文献

- (1) Swann, P. R., *Electron Microscopy and Strength of Crystals*, (1963), p. 158, Interscience.
- (2) Klesnil, M. and Lukáš, P., *Fatigue of Metallic Materials*, (1992), p. 73, Elsevier.
- (3) 加藤雅治, 入門転位論, (1999), 裳華房.
- (4) Hirth, J. P. and Lothe, J., *Theory of Dislocations*, (1982), John Wiley and Sons.
- (5) Nabarro, F. R. N., *Theory of Crystal Dislocations*, (1967), Oxford University Press.
- (6) 松下貢 [編] 三村昌泰 [監修], 生物にみられるパターンとその起源, (2005), 東京大学出版会.
- (7) Hoyle, R., *Pattern Formation: An Introduction to Methods*, (2006), Cambridge University Press.
- (8) Nicolis, G. and Prigogine, I. [著] 安孫子誠也, 北原和夫 [訳], 複雑性の探究, (1993), みすず書房.
- (9) Nicolis, G. and Prigogine, I. [著] 小島陽之助・相沢洋二 [訳], 散逸構造, (1980), 岩波書店.
- (10) Cho, J.-Y., Inoue, T., Yin, F. and Nagai, K., “Effect of Initial Grain Orientation on Evolution of Deformed Microstructure in Hot Compressed Ni-30Fe Alloy”, *Materials Transactions*, Vol. 45, No. 10(2004), pp. 2960–2965.
- (11) Kim, H.-W., Kang, S.-B., Tsuji, N. and Minamino, Y., “Elongation Increase in Ultra-Fine Grained Al-Fe-Si Alloy Sheets”, *Acta Materialia*, Vol. 53, No. 6(2005), pp. 1737–1749.
- (12) 辻伸泰, “構造用金属材料の強ひずみ加工による超微細結晶粒組織の形成”, 溶接学会誌, Vol. 74, No. 2(2005), pp. 92–96.
- (13) Saito, Y., Utsunomiya, H., Tsuji, N. and Sakai, T., “Novel Ultra-High Straining Process for Bulk Materials-Development of the Accumulative Roll-Bonding (ARB) Process”, *Acta Materialia*, Vol. 47, No. 2(1999), pp. 579–583.
- (14) 辻伸泰, “鉄鋼材料の結晶粒超微細化”, 鉄と鋼, Vol. 88, No. 7(2002), pp. 359–369.
- (15) Lowe, T. C. and Valiev, R. Z., “The Use of Severe Plastic Deformation Techniques in Grain Refinement”, *JOM Journal of the Minerals Metals and Materials Society*, Vol. 56, (2004), pp. 64–68.
- (16) 林透・鳥塚史郎・三井達郎・津崎兼彰・長井寿, “温間加工溝ロール圧延による微細フェライト粒低炭素鋼棒材の創製”, 材料とプロセス, Vol. 12, No. 3(1999), pp. 385–388.
- (17) Peirce, D., Asaro, R. J. and Needleman, A., “Material Rate Dependence and Localized Deformation in Crystalline Solids”, *Acta Metallurgica*, Vol. 31, No. 12(1983), pp. 1951–1976.
- (18) Zikry, M. A. and Kao, M., “Inelastic Microstructural Failure Mechanisms in Crystalline Materials with High Angle Grain Boundaries”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 44, No. 11(1996), pp. 1765–1798.
- (19) Kameda, T. and Zikry, M. A., “Three Dimensional Dislocation-Based Crystalline Constitutive Formulation for Ordered Intermetallics”, *Scripta Materialia*, Vol. 38, No. 4(1998), pp. 631–636.
- (20) Teodosiu, C., “Dislocation Modeling of Crystalline Plasticity”, *Large Plastic Deformation of Crystalline Aggregates*, (1997), pp. 21–80, Springer-Verlag.

- (21) Ashby, M. F., "The Deformation of Plastically Non-Homogeneous Materials", *Philosophical Magazine*, Vol. 21, (1970), pp. 399–424.
- (22) 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.
- (23) Ohashi, T., "Evaluation and Visualization of Geometrically Necessary Dislocations in Metal Microstructures by Means of Continuum Mechanics Analysis", *Journal de Physique IV France*, Vol. 9, (1999), pp. Pr9–279–284.
- (24) 大橋鉄也, "析出物の膨張による母相のすべり変形と幾何学的に必要な転位の形成", 日本機械学会講演論文集, No. 01-10(2001-11), pp. 73–74.
- (25) Busso, E. P., Meissonnier, F. T. and O'Dowd, N. P., "Gradient-Dependent Deformation of Two-Phase Single Crystals", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 48, No. 11(2000), pp. 2333–2361.
- (26) Busso, E. P. and Cheong, K.-S., "Length Scale Effects on the Macroscopic Behaviour of Single and Polycrystalline FCC Crystals", *Journal de Physique IV France*, Vol. 11, (2001), pp. Pr5–161–170.
- (27) Fleck, N. A., Muller, G. M., Ashby, M. F. and Hutchinson, J. W., "Strain Gradient Plasticity Theory and Experiment", *Acta Metallurgica et Materialia*, Vol. 42, No. 2(1994), pp. 475–487.
- (28) 比嘉吉一・澤田幸秀・富田佳宏, "多結晶金属材料の特徴長さ依存性挙動の数値シミュレーション", 日本機械学会論文集, Vol. 69, No. 679, A(2003), pp. 523–529.
- (29) Ohashi, T., "Crystal Plasticity Analysis of Dislocation Emission from Micro voids", *International Journal of Plasticity*, Vol. 21, No. 11(2005), pp. 2071–2088.
- (30) Teodosiu, C., "A Dynamic Theory of Dislocations and Its Applications to the Theory of the Elastic-Plastic Continuum", *Fundamental Aspects of Dislocation Theory*, No. 317-II(1970), pp. 837–876.
- (31) Delaire, R., Raphanel, J. L. and Rey, C., "Plastic Heterogeneities of a Copper Multicrystal Deformed in Uniaxial Tension: Experimental Study and Finite Element Simulations", *Acta Materialia*, Vol. 48, (2000), pp. 1075–1087.
- (32) 佐々木克彦・石川博將, "転位密度を考慮した構成モデルによる二軸ラチェット変形シミュレーション", 日本機械学会論文集, Vol. 68, No. 665, A(2002), pp. 169–174.
- (33) Estrin, Y., Braasch, H. and Brechet, Y., "A Dislocation Density Based Constitutive Model for Cyclic Deformation", *Transaction of the ASME, Journal of Engineering Materials and Technology*, Vol. 118, No. 4(1996), pp. 441–447.
- (34) Gurtin, M. E., "On the Plasticity of Single Crystals: Free Energy, Microforces, Plastic-Strain Gradients", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 48, (2000), pp. 989–1036.
- (35) Van der Giessen, E. and Needleman, A., "Discrete Dislocation Plasticity: A Simple Planar Model", *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol. 3, (1998), pp. 689–735.
- (36) Zbib, H. M. and Rubia, T. D. d. I., "A Multiscale Model of Plasticity", *International Journal of Plasticity*, Vol. 18, No. 9(2002), pp. 1133–1163.
- (37) Walgraef, D. and Aifantis, E. C., "On the Formation and Stability of Dislocation Patterns-I: One-dimensional considerations", *International Journal of Engineering Science*, Vol. 23, No. 12(1985), pp. 1351–1358.
- (38) Walgraef, D. and Aifantis, E. C., "On the Formation and Stability of Dislocation Patterns-II: Two-dimensional considerations", *International Journal of Engineering Science*, Vol. 23, No. 12(1985), pp. 1359–1364.

- (39) Walgraef, D. and Aifantis, E. C., “On the Formation and Stability of Dislocation Patterns-III: Three-dimensional considerations”, *International Journal of Engineering Science*, Vol. 23, No. 12(1985), pp. 1365–1372.
- (40) 北原和夫・吉川研一, 非平衡系の科学 I, (1994), p. 55, 講談社サイエンティフィック.
- (41) Glazov, M. V and Laird, C., “Size Effects of Dislocation Patterning in Fatigued Metals”, *Acta Metallurgica et Materialia*, Vol. 43, No. 7(1995), pp. 2849–2857.
- (42) Shibutani, Y., “Mesoscopic Dynamics on Dislocation Patterning in Fatigued Material by Cellular Automata”, *Mater. Sci. Res. Int.*, Vol. 5, No. 4(1999), pp. 258–263.
- (43) Morita, Y., Shizawa, K. and Zbib, H. M., “A Self-Organization Model and Simulation of Collective Dislocations Based on Interaction between, GN Dislocation and Dislocation Dipole”, *Material Science Research International*, Vol. 2, (2001), pp. 323–326.
- (44) 庄司哲也・毛利哲雄, “反応-拡散方程式を用いた塑性変形挙動の解析”, 日本機械学会講演論文集, No. 01-16(2001-08), pp. 573–574.
- (45) 長谷部忠司, “場の量子論に基づく転位セル組織形成機構に関する一考察”, 日本機械学会講演論文集, No. 01-10(2001-11), pp. 85–86.
- (46) Kondo, K., *RAAG Memoirs of the Unifying Study of Basic Problems in Engineering and Physical Sciences by Means of Geometry I*, (1955), Gakujutsubunken-Fukyukai.
- (47) Kondo, K., *RAAG Memoirs of the Unifying Study of Basic Problems in Engineering and Physical Sciences by Means of Geometry II*, (1958), Gakujutsubunken-Fukyukai.
- (48) Kondo, K., *RAAG Memoirs of the Unifying Study of Basic Problems in Engineering and Physical Sciences by Means of Geometry III*, (1962), Gakujutsubunken-Fukyukai.
- (49) Kondo, K., *RAAG Memoirs of the Unifying Study of Basic Problems in Engineering and Physical Sciences by Means of Geometry IV*, (1968), Gakujutsubunken-Fukyukai.
- (50) Kröner, E., *Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen*, (1958), Springer-Verlag.
- (51) Cheong, K.-S., Busso, E. P. and Arsenlis, A., “A Study of Microstructural Length Scale Effects on the Behaviour of FCC Polycrystals Using Strain Gradient Concepts”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 21, No. 9(2005), pp. 1797–1814.
- (52) Hansen N. and Jensen D. J., “Development of Microstructure in FCC Metals during Cold Work”, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London Series A*, Vol. 357, (1999), pp. 1447–1469.
- (53) Hughes, D. A., Liu, Q., Chrzan, D. C. and Hansen, N., “Scaling of Microstructural Parameters: Misorientations of Deformation Induced Boundaries”, *Acta Materialia*, Vol. 45, No. 1(1997), pp. 105–112.
- (54) Mueller, J., Durst, K. Amberger, D. and Göken, M., “Local Investigations of the Mechanical Properties of Ultrafine Grained Metals by Nanoindentations”, *Proceedings of the 3rd International Conference on Nanomaterials by Severe Plastic Deformation*, (2006-9), pp. 31–36.
- (55) Inoue, T., Torizuka, S. and Nagai, K., “Formation of Uniformly Fine Grained Ferrite Structure through Multidirectional Deformation”, *Materials Science and Technology*, Vol. 17, (2001), pp. 1329–1338.
- (56) Cho, J.-Y., Inoue, T., Yin, F. and Nagai, K., “Effect of Shear Deformation on Microstructural Evolution of Ni-30Fe Alloy during Hot Deformation”, *Materials Transactions*, Vol. 45, No. 10(2004), pp. 2966–2973.
- (57) Essmann, U. and Mughrabi, H., “Annihilation of Dislocations During Tensile and Cyclic Deformation and Limits of Dislocation Densities”, *Philosophical Magazine*, Vol. 40, No. 6(1979), pp. 731–756.
- (58) Ohashi, T., “Numerical Modeling of Plastic Multi Slip in Metal Crystals of Face Centered Cubic Type”,

- Philosophical Magazine*, Vol. 70, (1994), pp. 793–803.
- (59) Forest, S., Cailletaud, G. and Sievert, R., “A Cosserat Theory for Elastoviscoplastic Single Crystals at Finite Deformation”, *Archives of Mechanics*, Vol. 49, No. 4(1997), pp. 705–736.
- (60) Green, A. E. and Zerna, W., *Theoretical Elasticity*, (1968), Clarendon Press.
- (61) Shizawa, K. and Zbib, H. M., “A Thermodynamical Theory of Plasticity with Dislocation Density Tensor: I-Fundamentals”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 15, No. 9(1999), pp. 899–938.
- (62) Kratochvil, J., “Finite-Strain Theory of Crystalline Elastic-Inelastic Materials”, *Journal of Applied Physics*, Vol. 42, No. 3(1971), pp. 1104–1108.
- (63) Mandel, J., *CISM course No. 97*, (1971), Springer-Verlag.
- (64) Lee, E. H., “Elastic-Plastic Deformation at Finite Strains”, *Transaction of the ASME, Journal of Applied Mechanics*, Vol. 36, No. 1(1969), pp. 1–6.
- (65) Lee, E. H. and McMeeking, R. M., “Concerning Elastic and Plastic Components of Deformation”, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 16, No. 8(1980), pp. 715–721.
- (66) Shizawa, K. and Zbib, H. M., “A Thermodynamical Theory of Plastic Spin and Internal Stress with Dislocation Density Tensor”, *Transaction of the ASME, Journal of Applied Mechanics*, Vol. 121, (1999), pp. 247–253.
- (67) 大南正瑛・塩沢和章, 多結晶体の強度と破壊, (1976), 培風館.
- (68) 大南正瑛, マイクロメカニクス入門, (1980), オーム社.
- (69) Eringen, A.C., *Continuum Physics*, (1976), Academic Press.
- (70) Ziegler, H., *An Introduction to Thermomechanics*, (1983), Elsevier.
- (71) 藤本敦, “転位セル構造・サブグレインの自己組織化を伴う単結晶の3段階硬化に関する転位-結晶塑性モデルの構築とシミュレーション”, 修士論文, 慶應義塾大学, (2003).
- (72) Hutchinson, J. W., “Bounds and Self-Consistent Estimates for Creep of Polycrystalline Materials”, *Proceedings of the Royal Society of London, Series A*, Vol. 348, (1976), pp. 101–127.
- (73) Pan, J. and Rice, J. R., “Rate Sensitivity of Plastic Flow and Implications for Yield-Surface Vertices”, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 19, No. 11(1983), pp. 973–987.
- (74) Franciosi, P., Berveiller, M. and Zaoui, A., “Latent Hardening in Copper and Aluminium Single Crystals”, *Acta Metallurgica*, Vol. 28, (1980), pp. 273–283.
- (75) Franciosi, P. and Zaoui, A., “Multislip in f.c.c. Crystals a Theoretical Approach Compared with Experimental Data”, *Acta Metallurgica*, Vol. 30, (1982), pp. 1627–1637.
- (76) Franciosi, P., “The Concepts of Latent Hardening and Strain Hardening in Metallic Single Crystals”, *Acta Metallurgica*, Vol. 33, No. 9(1985), pp. 1601–1612.
- (77) Weertman, J., “Anomalous Work Hardening, Non-Redundant Screw Dislocations in a Circular Bar Deformed in Torsion, and Non-Redundant Edge Dislocations in a Bent Foil”, *Acta Materialia*, Vol. 50, (2002), pp. 673–689.
- (78) Thompson, N., “Dislocation Nodes in Face-Centred Cubic Lattices”, *Proceedings of the Royal Society of London, Series B*, Vol. 66, (1953), pp. 481–492.
- (79) 角野浩二, 結晶の塑性 (日本金属学会編), (1977), 丸善.
- (80) Seeger, A., Diehl, J., Mader, S., and Rebstock, H., “Work-Hardening and Work-Softening of Face-Centred Cubic Metal Crystals”, *Philosophical Magazine*, Vol. 2, No. 15(1957), pp. 323–350.
- (81) Staker, M. R. and Holt, D. L., “The Dislocation Cell Size and Dislocation Density in Copper Deformed at

- Temperatures between 25 and 700°C”, *Acta Materialia*, Vol. 20, No. 4(1972), pp. 569–579.
- (82) Peirce, D., Shih, C. F. and Needleman, A., “A Tangent Modulus Method for Rate Dependent Solids”, *Computers and Structures*, Vol. 18, No. 5(1984), pp. 875–887.
- (83) Asaro, R. J., “Geometrical Effects in the Inhomogeneous Deformation of Ductile Single Crystals”, *Acta Metallurgica*, Vol. 27, (1979), pp. 445–453.
- (84) Nemat-Nasser, S., “On Finite Plastic Flow of Crystalline Solids and Geomaterials”, *Transaction of the ASME, Journal of Applied Mechanics*, Vol. 50, (1983), pp. 1114–1126.
- (85) 久田俊明, 非線形有限要素法のためのテンソル解析の基礎, (1992), 丸善.
- (86) 黒田充紀・志澤一之, “結晶塑性の理論と応用 結晶の大変形から転位蓄積まで”, 塑性と加工, Vol. 43, No. 495(2002), pp. 299–309.
- (87) 久田俊明・野口裕久, 非線形有限要素法の基礎と応用, (1995), 丸善.
- (88) 桑原利彦他 6 名, 非線形有限要素法 (日本塑性加工学会編), (1994), コロナ社.
- (89) 後藤學, 実践有限要素法, (1995), コロナ社.
- (90) 山崎郭滋, 偏微分方程式の数値解法入門, (1995), 森北出版.
- (91) 木村宏, 材料強度の考え方, (1998), p. 234, アグネ技術センター.
- (92) 幸田成康, 改訂金属物理学序論, (1964), p. 164, コロナ社.
- (93) Adams, B. L., Wright, S. I. and Kunze, K., “Orientation Imaging: The Emergence of a New Microscopy”, *Metallurgical Transactions A*, Vol. 24, (1993), pp. 819–831.
- (94) 大森章夫・鳥塚史郎・長井寿・山田賢嗣・向後保雄, “低炭素鋼の高 Z 因子大歪加工における超微細粒組織の形成”, 鉄と鋼, Vol. 88, No. 12(2002), pp. 857–864.
- (95) Warren, J. A., Kobayashi, R., Lobkovsky, A. E. and Carter, W. C., “Extending Phase Field Models of Solidification to Polycrystalline Materials”, *Acta Materialia*, Vol. 51, No. 20(2003), pp. 6035–6058.
- (96) 仲町英治・飯星真治・陳貽平・上田整・上辻靖智・藤田宏平, “結晶均質化有限要素法によるマルチスケール塑性変形解析”, 日本機械学会論文集, Vol. 70, No. 690, A(2004), pp. 191–197.
- (97) 寺田賢二郎・菊池昇, 均質化法入門 (日本計算工学会), (2003), 丸善.
- (98) Alder, B. J. and Wainwright, T. E., “Phase Transition for a Hard Sphere System”, *Journal of Chemical Physics*, Vol. 27, No. 5(1957), pp. 1208–1209.
- (99) Rahman, A., “Correlations in the Motion of Atoms in Liquid Argon”, *Physical Review*, Vol. 136, No. A2(1964), pp. A405–A411.
- (100) Yashiro, K., Naito, M. and Tomita, Y., “Molecular Dynamics Simulation of Dislocation Nucleation and Motion at γ/γ' Interface in Ni-Based Superalloy”, *International Journal of Mechanical Sciences*, Vol. 44, No. 9(2002), pp. 1845–1860.
- (101) Shenoy, V. B., Miller, R., Tadmor, E. B., Rodney, D., Phillips, R. and Ortiz, M., “An Adaptive Finite Element Approach to Atomicscale Mechanics-the Quasicontinuum Method”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 47, No. 3(1999), pp. 611–642.
- (102) Shimokawa, T., Mortensen, J. J., Schiøtz, J and Jacobsen, K. W., “Matching Conditions in the Quasicontinuum Method: Removal of the Error Introduced at the Interface Between the Coarse-Grained and Fully Atomistic Region”, *Physical Review B*, Vol. 69, No. 21(2004), pp. 214104(1–10).
- (103) Dafalias, Y. F., “The Plastic Spin”, *Transaction of the ASME, Journal of Applied Mechanics*, Vol. 52, (1985), pp. 865–871.
- (104) 志澤一之・若林宏樹, “転位ドリフト速度理論における塑性スピンと背応力の構成式に対する熱・力

- 学的検討”, 日本機械学会論文集, Vol. 66, No. 647, A(2000), pp. 1290–1296.
- (105) Bilby, B. A., Bullough, R. and Smith, E., “Continuous Distributions of Dislocations: a New Application of the Methods of Non-Riemannian Geometry”, *Proceedings of the Royal Society of London, Series A*, Vol. 231, (1955), pp. 263–273.
- (106) Taylor, G. I., “Plastic Strain in Metals”, *Journal of the Institute of Metals*, Vol. 62, (1938), pp. 307–324.
- (107) Peirce, D., Asaro, R. J. and Needleman, A., “An analysis of Nonuniform and Localized Deformation in Ductile Single Crystals”, *Acta Metallurgica*, Vol. 30, No. 6(1982), pp. 1087–1119.
- (108) 松下将明, “転位セル構造およびサブグレインの自己組織化モデルと2次元空間パターンニング”, 修士論文, 慶應義塾大学, (2002).

主論文に関する原著論文および口頭発表論文

学術誌論文

- (1) Aoyagi, Y. and Shizawa, K., “A Crystal Plasticity Analysis for Accumulations of Geometrically Necessary Dislocations and Dipoles around Shear Band”, *Mesoscopic Dynamics on Fracture Process and Materials Strength*, Ed. Kitagawa, H. and Shibutani, Y., (2004), pp. 87-96, Kluwer Academic Publishers.
- (2) 青柳吉輝・志澤一之, “幾何学的に必要な転位密度および不適合度を考慮した転位-結晶塑性大変形シミュレーション (第1報, GN 結晶欠陥の定義およびマルチスケールモデリング)”, 日本機械学会論文集, Vol. 72, No. 719, A(2006), pp. 1009-1016.
- (3) 青柳吉輝・志澤一之, “幾何学的に必要な結晶欠陥を考慮した結晶粒超微細化に関する転位-結晶塑性大変形シミュレーション”, 日本機械学会論文集, Vol. 72, No. 720, A(2006), 掲載決定.
- (4) 青柳吉輝・志澤一之, “幾何学的に必要な転位密度および不適合度を考慮した転位-結晶塑性大変形シミュレーション (第2報, FCC 単結晶への適用)”, 日本機械学会論文集 A 編, 投稿中 (論文 No. 05-0891).
- (5) Aoyagi, Y. and Shizawa, K., “Multiscale Crystal Plasticity Modeling Based on Geometrically Necessary Crystal Defects and Simulation on Fine-Graining for Polycrystal”, *International Journal of Plasticity*, IJP 344-S, submitted.

国際会議論文

- (1) Oishi, S.*, Aoyagi, Y. and Shizawa, K., “Modeling and Simulation of Crystal Plasticity Based on GN Crystal Defects for Ultrafine-Grained Metals Induced by Severe Plastic Deformation”, *Proceedings of The 3rd International Conference on Nanomaterials by Severe Plastic Deformation (NanoSPD3)*, (2005-9), pp. 215-220.
- (2) Yamaki, N.*, Aoyagi, Y. and Shizawa, K., “Dislocation-Crystal Plasticity Simulation Based on Self-Organization for Repartition of Dislocation Cell Structures and Subgrains”, *Proceedings of The 3rd International Conference on Nanomaterials by Severe Plastic Deformation (NanoSPD3)*, (2005-9), pp. 989-994.
- (3) Yamaki, N.*, Aoyagi, Y. and Shizawa, K., “Dislocation Patterning for Cell Structures and Subgrains in Polycrystal”, *Proceedings of International Conference on Computational and Experimental Engineering and Sciences (ICCES ' 05)*, (2005-12), pp. 1476-1481.
- (4) Yamaki, N.*, Aoyagi, Y. and Shizawa, K., “Multiscale Modeling and Simulation of Crystal Plasticity Based on Dislocation Patterning in Polycrystal”, *Proceedings of AEPA 2006: the 8th Asia-Pacific Symposium on Engineering Plasticity and Its Applications*, (2006-9), submitted.

国際会議発表

- (1) Aoyagi, Y.* and Shizawa, K., “A Crystal Plasticity Analysis for Accumulations of Geometrically Necessary Dislocations and Dipoles around Shear Band”, *Abstracts of IUTAM Symposium on Mesoscopic Dynamics in Fracture Process and Strength of Materials*, (2003-7), p. 9.
- (2) Aoyagi, Y.* and Shizawa, K., “A Crystal Plasticity Analysis on Accumulation of Geometrically Necessary Dislocation and Dipole around an Inclusion”, *Proceedings of 5th International Conference for Mesomechanics*, (2003-8), pp. 124-131.
- (3) Aoyagi, Y.* and Shizawa, K., “Modeling and Simulation of Multi-Scale Crystal Plasticity Based on Self-Organization of Dislocation Cell and Subgrain for Production of Ultra-Fine Grained Metals”, *ASME/JSME 2004 Pressure Vessels and Piping Division Conference (PVP)*, (2004-7), p. 40.
- (4) Oishi, S.*, Aoyagi, Y. and Shizawa, K., “Multiscale Modeling and Simulation of Crystal Plasticity Based on GN Crystal Defects Considering Dynamic Recovery of Dislocation”, *Proceedings of International Conference on Computational Methods 2004 (ICCM)*, (2004-12), In press.
- (5) Aoyagi, Y.* and Shizawa, K., “Multiscale Modeling and Simulation of Crystal Plasticity Based on GN Crystal Defects for Production of Ultrafine-Grained Metals”, *Proceedings of Plasticity '05: the 11th International Symposium on Plasticity and Its Current Applications*, (2005-1), pp. 412-414.
- (6) Shizawa, K.* and Aoyagi, Y., “Multiscale Modeling and Simulation on Formation of Ultrafine-Grained Metals Based on Self-Organization of Cell Structures and Subgrains”, *Proceedings of Plasticity '05: the 11th International Symposium on Plasticity and Its Current Applications*, (2005-1), pp. 457-459.
- (7) Aoyagi, Y.* and Shizawa, K., “Multiscale Crystal Plasticity Model Based on Geometrically Necessary Crystal Defects and Simulation on Fine-Graining and Size Effect for Polycrystal”, *Proceedings of Plasticity '06: the 12th International Symposium on Plasticity and Its Current Applications*, (2006-7), pp. 421-423.
- (8) Shizawa, K.*, Yamaki, N. and Aoyagi, Y., “Multiscale Simulation on Dislocation Patterning and Crystal Plasticity for Heterogeneous Polycrystal”, *Proceedings of Plasticity '06: the 12th International Symposium on Plasticity and Its Current Applications*, (2006-7), pp. 460-462.

国内会議発表

- (1) 青柳吉輝*・志澤一之, “せん断帯まわりの GN 転位およびダイポール蓄積に関する結晶塑性解析”, 日本機械学会第 14 回計算力学講演会講演論文集, No.01-10(2001-11), pp. 75-76.
- (2) 菅公彦*・青柳吉輝・志澤一之, “GN 転位密度とダイポール密度を考慮したせん断帯形成に関する結晶塑性解析”, 第 51 回理論応用力学講演会講演論文集, (2002-1), pp. 447-448.
- (3) 青柳吉輝*・志澤一之, “転位ダイポール密度の幾何学的定義と介在物まわりのダイポール蓄積に関する結晶塑性解析”, 日本機械学会第 15 回計算力学講演会講演論文集, No.02-02(2002-11), pp.147-148.
- (4) 青柳吉輝*・池田哲秀・志澤一之, “せん断帯まわりの幾何学的に必要なダイポール蓄積に関する結晶塑性解析”, 第 52 回理論応用力学講演会講演論文集, (2003-1), pp. 223-224.
- (5) 青柳吉輝*・志澤一之, “単一・2重すべりにおけるせん断帯形成の相違に関する GN 結晶欠陥を考慮した 3 次元転位-結晶塑性シミュレーション”, 日本機械学会第 16 回計算力学講演会講演論文集, No.03-26(2003-11), pp. 413-414.
- (6) 池田哲秀*・青柳吉輝・志澤一之, “FCC 単結晶の強ひずみ変形による超微細粒化に関する GN 転位”, 日

本機械学会第 16 回計算力学講演会講演論文集, No.03-26(2003-11), pp. 469-470.

- (7) 安藤哲朗*・藤本敦・青柳吉輝・志澤一之, “転位セル構造・サブグレインの自己組織化を伴う FCC 結晶の 3 段階硬化に関する転位-結晶塑性シミュレーション”, 日本機械学会第 16 回計算力学講演会講演論文集, No.03-26(2003-11), pp. 475-476.
- (8) 志澤一之*・青柳吉輝・藤本敦, “超微細サブグレインの自己組織化に関する転位-結晶塑性シミュレーション”, 日本材料学会第 53 期学術講演会講演論文集, (2004-5), pp. 467-468.
- (9) 青柳吉輝*・池田哲秀・志澤一之, “GN 結晶欠陥および動的回復を考慮した超微細粒生成に関する転位-結晶塑性シミュレーション”, 日本材料学会第 53 期学術講演会講演論文集, (2004-5), pp. 469-470.
- (10) 青柳吉輝・大石真吾*・志澤一之, “転位飛行距離と硬化則に動的回復を導入した GN 転位-結晶塑性シミュレーション”, 第 48 回日本学術会議材料研究連合講演会講演論文集, (2004-10), pp. 241-242.
- (11) 青柳吉輝*・大石真吾・志澤一之, “結晶粒の超微細粒化に関する動的回復を考慮した GN 転位-結晶塑性シミュレーション”, 日本機械学会第 17 回計算力学講演会講演論文集, No.04-40(2004-11), pp. 271-272.
- (12) 安藤哲朗*・青柳吉輝・志澤一之, “転位セル構造の再分割に関する自己組織化モデルとシミュレーション”, 日本機械学会第 17 回計算力学講演会講演論文集, No.04-40(2004-11), pp. 273-274.
- (13) 山木直*・安藤哲朗・青柳吉輝・志澤一之, “転位セル構造の再分割に関する自己組織化を考慮した転位-結晶塑性シミュレーション”, 第 54 回理論応用力学講演会講演論文集, (2005-1), pp. 299-300.
- (14) 青柳吉輝*・大石真吾・志澤一之, “強ひずみ付与による結晶粒微細化に関する GN 転位-結晶塑性シミュレーション”, 日本材料学会第 54 期学術講演会講演論文集, (2005-5), pp.341-342.
- (15) 海宝寿実雄*・大石真吾・青柳吉輝・志澤一之, “結晶粒微細化および寸法効果に関する GN 転位-結晶塑性シミュレーション”, 日本機械学会第 18 回計算力学講演会講演論文集, No.05-2(2005-11), pp. 89-90.
- (16) 堀部尚裕*・山木直・青柳吉輝・志澤一之, “多結晶体における転位パターンニングを考慮した転位-結晶塑性シミュレーション”, 日本機械学会第 18 回計算力学講演会講演論文集, No.05-2(2005-11), pp. 493-494.
- (17) 海宝寿実雄*, 大石真吾, 青柳吉輝, 志澤一之, “多結晶体における結晶粒微細化および寸法効果に関する GN 転位-結晶塑性シミュレーション”, 日本材料学会第 55 期学術講演会講演論文集, (2006-5), pp. 399-400.

補足 A

第 1 章の補足

A.1 結晶塑性論

金属の変形は連続体力学あるいは連続分布転位論からそれぞれ異なった視点で論じられている。また、既に提案されている塑性スピンには、完全な現象論で Dafalias⁽¹⁰³⁾ によるものと、転位ドリフト速度理論に基づく志澤・若林⁽¹⁰⁴⁾ によるものの 2 つが提案されているが、塑性スピンの構成式を必要とするために構成式の未知係数決定が難しいという問題がある。これら塑性スピンは連続体力学の立場から金属をマクロなスケールでとらえ論じられているのに対し、転位密度は連続分布転位論⁽¹⁰⁵⁾ の立場から金属をミクロなスケールでとらえ論じている。そのため、両者の関係を明らかにするのは困難である。

結晶塑性論は、古くは Taylor⁽¹⁰⁶⁾ により提案された塑性変形をメゾ領域すなわち単結晶の塑性特性を基礎として解析する手法であり、Peirce ら⁽¹⁰⁷⁾ はすべり変形に基づいた結晶塑性有限要素法を提案し、金属結晶内の微細な変形機構を数値解析的に求める手法を開発している。

結晶塑性論では、金属をマクロ-ミクロの中間スケールで論じており、また金属の塑性変形の最小単位である素過程を結晶格子の「すべり」として定めている。「すべり」という量は均質ではなく、結晶はある面に沿ってその両側の部分が一体となって、その面に含まれる基本並進ベクトルの整数倍の距離だけ互いにずり変位するため連続性を持っていないとしている。このように結晶粒とその中におけるすべりで観察された結晶塑性論はマクロとミクロの中間的なスケールであるため連続体力学と連続分布転位論の両者を結びつけることができるという利点を持つ。

また、結晶塑性論自体では、構成式を用いることなく運動学的に塑性スピンを導出することが可能である。その体系は簡潔なものとなっており、結果として決定しなければならない材料係数も少なくともすむ。さらに、構成式が不要で硬化則のみを考慮すればよいので、計算機シミュレーションに適しているという利点もある。さらに転位運動に代表される連続分布転位論より現象論的で運動学を理解しやすいという利点があることも挙げられる。

A.2 結晶粒界

図 A.1 のように、隣接する領域の結晶格子が傾いていると、転位が運動できるすべり面の向きがその境界で異なってくるので、転位は運動することができない。このように、結晶格子の向きが異なるために転位が通過できないような境界面を結晶粒界と呼ぶ(単に粒界とも呼ぶ)。通常、このような粒界は 10° 以上傾いていることが多く、大角粒界とされている。一方、傾いている角度が比較的小さく数度ほどの場合は、負荷応力にもよるが、転位は通過することができることもあるので、大角粒界と区別するために小傾角粒

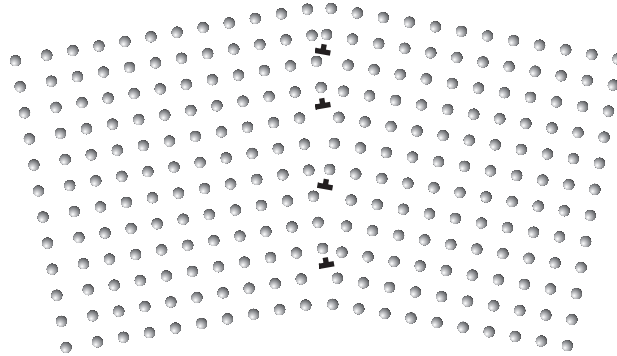


Fig. A.1 Grain boundary

界と呼ぶ。ただし，大角粒界と小傾角粒界の角度に関する明確な区別は特になされていないのが現状である。転位が運動できないということは塑性変形が生じにくいということを意味するので，材料内にしめる粒界の割合が増える，すなわち結晶粒が細かくなると降伏応力が上がるとされている。

A.3 UFG の特性

輸送，エネルギー，住宅や航空等の産業分野では，機器や装置の高性能化や使用環境の一層の過酷化にともない，より軽量で強度，耐食性やリサイクル性に優れた金属材料の要請が強まっている。鉄鋼材料を高強度化する方法には，固溶強化・分散析出強化などによる合金化，加工硬化，強ひずみ冷間加工による結晶粒微細化がある。しかしながら，合金化による方法では高温条件下で合金元素を多量に添加するため，温室ガス放出量が多く，再度分解・抽出することは困難であり，環境親和性・リサイクル性に優れない。また，加工硬化による方法においては延性-脆性遷移温度が高く，被加工性に優れないという問題点がある。そこで，環境親和性・リサイクル性に優れ，高強度かつ延性が高い強ひずみ（高速大変形）冷間加工による結晶粒微細化に注目が集まっている。

これは，現在使用されている大型構造用材料における平均結晶粒径が数 $10\mu\text{m}$ から数 $100\mu\text{m}$ 程度であるのに対し，平均結晶粒径を $1\mu\text{m}$ あるいはナノオーダーにまで超微細化して，様々な材料特性を向上させようというものである。このような試みは，研究の広がりとともに，すでに実験室レベルでは種々の手段によって平均粒径 $1\mu\text{m}$ 以下の超微細粒金属，すなわち Ultrafine-Grained Metal(UFG) が得られている。結晶粒径が小さくなるにつれ降伏応力，破壊靱性が増大することは，経験的にもよく知られている。このことは，多結晶金属の Hall-Petch の式，すなわち強度は結晶粒系の大きさの $1/2$ 乗に反比例することからもいえる。そこで，金属の結晶粒を極限にまで微細化すれば，理論的に予測される限界性能に近い水準の特性を有する UFG の創製が可能となる。また，従来の鉄鋼が温間 ($400 \sim 700$) もしくは熱間 (800 以上) 加工によるものであるのに対し，UFG は強ひずみによる冷間 (室温) 加工であるため，温室ガス放出量の問題も解決される。さらに，オーステナイト系ステンレス鋼の粒界腐食，孔食などが，UFG においては改善されるとの報告もある。UFG の創製が可能となれば，異種元素の添加を必要とせず単純な化学組成で高強度・高靱性材が得られる。これは，金属材料のリサイクル性を大幅に改善し，UFG 製造工程において二酸化炭素・窒素酸化物などの温室ガス放出量の低減により環境親和性にも大きく寄与できる。また，強度や耐食性を向上させることは，機器や装置の高性能化のみならず，材料の使用量を低減でき省資源・省エネ

ルギーを図ることができる．すなわち，自動車や鉄道車両等輸送分野に，その材料を使用することで軽量化が達成され，燃費向上による省エネルギーや二酸化炭素放出量の低減などに寄与する．

A.4 UFG の創製

結晶粒微細化の方法としては，強ひずみ冷間加工によって転位密度を極限まで上昇させた後に再結晶や変態を起こさせる方法が考えられ，大きな圧力を加えてねじり変形を加える高圧力押し (HPT) 法，L 字型の孔を有する金型内に棒状金属を押し通して強ひずみ加工を施すせん断押し (ECAP) 法，金属粉末に対しメカニカルミリング，固化，熱処理の各工程を施し，ブロックまたは板状の素材となすメカニカルミリング法などが提案されている．しかしながら，HPT 法，ECAP 法はともに実験室的な強ひずみ加工法としては優れたものであるが，大型構造材の連続生産には適さず，メカニカルミリング法では広幅の板の製造が難しいなどの問題がある．そこで，大型バルク材料にも適用可能な強ひずみ加工プロセスである繰り返し重ね接合圧延 (ARB) 法が辻ら⁽¹³⁾⁽¹⁴⁾⁽¹²⁾によって考案され，鉄鋼材料を始めとする様々な構造用金属材料の結晶粒微細化に成功している．

A.5 転位密度の定義

転位密度の定義は「単位体積中の転位線の長さ」であり， $m/m^3 = /m^2$ の次元を有する．通常の金属材料では，十分な焼鈍によって $0.001/\mu m^2 = 10^9/m^2$ 程度まで転位密度を下げるのが可能となっている．当然，転位を含まない，すなわち転位密度が $0/m^2$ である完全結晶も考えられるが，この場合は塑性変形の素過程である転位が結晶内に存在しなくなるため，塑性変形が非常に起こりにくい材料となる．一方，転位密度の上限としては， $10/nm^2 = 10^{19}/m^2$ 程度であり，原子間距離や結晶欠陥のサイズからして，これ以上の高転位密度になるということはない．

ただし，本論文において「転位密度の定義」という場合には，単に上記のような内容のみならず，「転位密度の表現方法の定義」という意味も含んでいる．

A.6 Frank-Read 源

塑性変形した結晶の表面を電子顕微鏡で観察すると，約 1000 原子距離程度のすべりの段が認められる．これは約 1000 個の転位が通過したことを意味する．1 つのすべり面上を別々の源を持つ 1000 個の転位が通過するということは，転位の密度ないし結晶内の転位の分布からみても考えにくい．これを解決するには転位の増殖が起こって，1 つの源から多数の転位が多重形成され，それらの通過によって実際に観察されるようなすべりの段が形成されると考えるほうが自然である．

このような転位の増殖機構は今までのいろいろ考えられたが，もっとも確からしいとされるのが Frank-Read 源である．

複数のすべり面上の転位は互いに反応して六角形の網目構造 (転位網) を形成していることが多い．図 A.2 において，六角形の一辺である転位線 AB 部分はすべり面上 P の上にあるとする．最も簡単な場合として，CA，AD，EB，BF の転位の Burgers ベクトルがすべり面 P の法線方向と平行だとする．このすべり面を紙面と重ねると，AB 部分は図 A.3(i) のようになる．転位線 AB は点 A と点 B において固定されており，この 2 点では不動化している．点 A および点 B からすべり面外部へ突き出てピンの役割を果たして

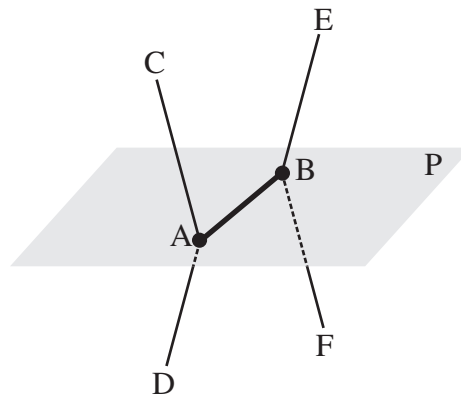


Fig. A.2 Dislocation net and pinned dislocation line

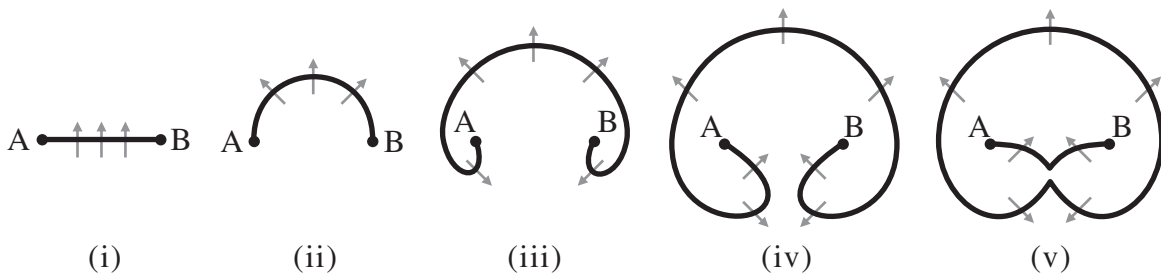


Fig. A.3 Release of dislocation loop from Frank-Read source

いる 2 本の転位線を支柱転位という．このような状態でせん断応力が働くと，転位線 AB は A および B で固定され，図 A.3(ii) のように弓なりになる．さらに外からせん断応力を加えると，転位に働く力は転位線に対して垂直であるから，転位は図 A.3 の (ii)，(iii) および (iv) のように張り出してゆく．図 A.3(iv) の状態になったとき，逆向きの転位線が接触する．逆符号の転位が接触するため，対消滅が生じて図 A.3(v) のようになる．内側にしぼんだループは直ちに外に膨れたループとなり，転位源付近の転位線 AB は直線になって，出発点である図 A.3(i) の状態に戻る．さらに継続して外からの応力が加えられれば，同様の過程をたどって繰り返しループが形成される．このようにして幾何学的には無限に多くの転位ループが増殖される．これが Frank-Read 源とよばれる転位の発生源である．ただし，転位は局所的な結晶格子の乱れであるので，存在する原子数を超えて転位が増殖することはありえない．そのため，転位密度の物理的な上限である $10^{19}/m^2$ 程度を上回るように転位が Frank-Read 源など転位源から発生することはない．

A.7 SS 転位密度

転位源から発生した転位線が介在物や結晶粒界，林立転位などの影響を受けて堆積したものを，単位体積あたりに蓄積される転位線の長さで表したものを統計的に蓄積する転位密度 (SS 転位密度) と称する．転位源から発生した転位を表しているため，短範囲に蓄積する転位対の密度に相当すると考えられており，GN 転位以外の転位の蓄積を表す．広義の意味では材料内に堆積する全転位の密度とも捉えられることもあるが，通常は式 (5.26) の発展式を用いて算出する転位密度を SS 転位密度と呼ぶ．ただし，式 (5.26) で

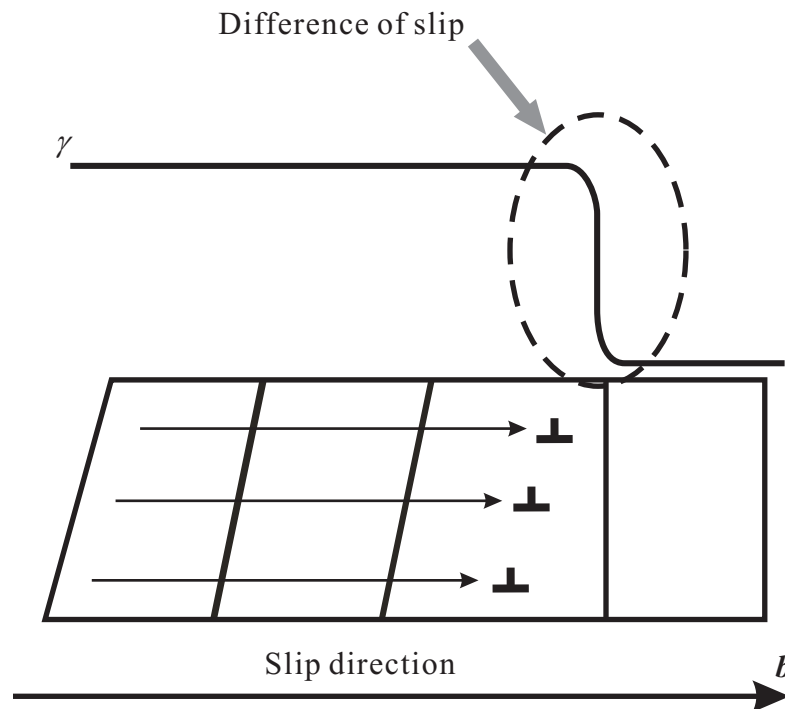


Fig. A.4 Concept of geometrically necessary dislocations

表される発展式は可動転位が平均寿命後に堆積して不動転位になるといった最も単純な転位のダイナミクスのみしか表現していないため、後に Essmann-Mughrabi⁽⁵⁷⁾ や Zikry-Kao⁽¹⁸⁾ によって、転位の対消滅や転位の反応などを考慮したさらに詳細な発展式が提案されている。本研究で提案している反応-拡散系の転位密度もこういったもの1つである。

A.8 GN 転位密度

GN 転位密度は、Ashby⁽²¹⁾ によって定義された量であり、SS 転位密度と同じ次元を有する。図 A.4 のように、転位が通過した箇所は塑性変形が起っているため、塑性変形が起っている箇所と起っていないところの境目には転位が存在することになる。その境目をすべりの差として定義したものが GN 転位密度であり、正負の刃状成分、らせん成分の区別ができるため、転位ループの形状など結晶欠陥の幾何学的描像を表現するのに適している。

A.9 ダイポール

ダイポールとは図 A.5 に表されるように、正、負の転位が結びついた1つの安定状態であり、大変形問題において材料の加工硬化へ与える影響は大きいと考えられる。結合する転位の数が3個、4個と増えていくと、トライポール、クアドロポールと呼ばれる多重極子となる。また、Burgers 回路内に存在するダイポールは、正負の転位の符号の打ち消しあいによって、GN 転位密度ではカウントすることはできない。

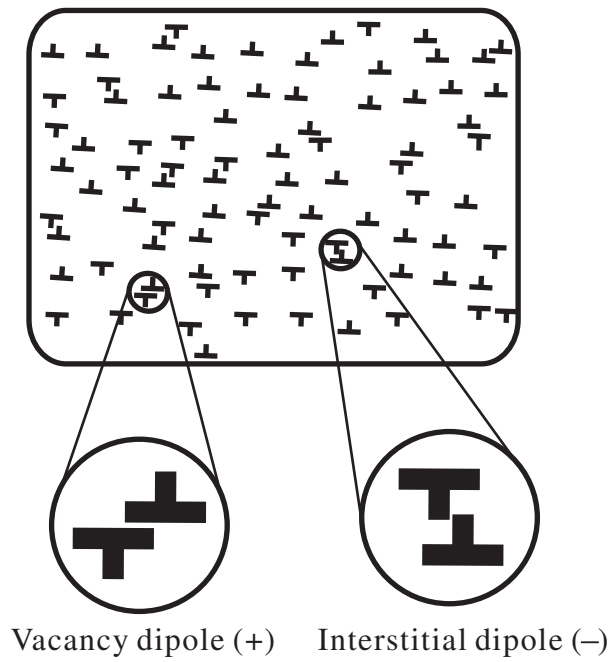


Fig. A.5 Dislocation dipole

補足B

第2章の補足

B.1 下部構造スピンの導出

下部構造スピン W^* の導出を以下に示す．

$$\begin{aligned}
 W^* &= W - W^p \\
 &= W^m + W^e \\
 &= \dot{R}^m R^{mT} + R^m \hat{R}^e (R^m \hat{R}^e)^T \\
 &= \dot{R}^m \hat{R}^e \hat{R}^{eT} R^{mT} + R^m \hat{R}^e \hat{R}^{eT} R^{mT} \\
 &= (\dot{R}^m \hat{R}^e + R^m \dot{\hat{R}}^e) \hat{R}^{eT} R^{mT} \\
 &= (R^m \dot{\hat{R}}^e) \hat{R}^{eT} R^{mT} \\
 &= \dot{R}^* R^{*T} \dots\dots\dots (B.1)
 \end{aligned}$$

ここで、 W 、 W^p 、 W^m および W^e はそれぞれ連続体スピン、塑性スピン、剛体スピンおよび弾性スピンである．また、 R^m は剛体回転を表す直交テンソル、 \hat{R}^e は次式により与えられる弾性回転を表す直交テンソルである．

$$(\dot{F}^e F^{e-1})_A \equiv \dot{\hat{R}}^e \hat{R}^{eT} \dots\dots\dots (B.2)$$

なお、 F^e は変形こう配の弾性部分である．式 (B.1) で表されるようにに下部構造スピンは1つの直交テンソルで書くことができる．

B.2 Mandel-Kratochvil 速度の導出

物理量 \underline{A} に関する $\underline{A}_{(m)} = R^{*T} \underline{A} R^*$ の変換から、第2中間配置 $\beta_{(m)}$ における物理量 $\underline{A}_{(m)}$ の共回転速度は次式のようになる．

$$\begin{aligned}
 \dot{\underline{A}}_{(m)} &= (R^{*T} \underline{A} R^*) \\
 &= \dot{R}^{*T} \underline{A} R^* + R^{*T} \dot{\underline{A}} R^* + R^{*T} \underline{A} \dot{R}^*
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \mathbf{R}^{*T} \mathbf{R}^* \dot{\mathbf{R}}^{*T} \underline{\mathbf{A}} \mathbf{R}^* + \mathbf{R}^{*T} \underline{\dot{\mathbf{A}}} \mathbf{R}^* + \mathbf{R}^{*T} \underline{\mathbf{A}} \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T} \mathbf{R}^* \\
 &= -\mathbf{R}^{*T} \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T} \underline{\mathbf{A}} \mathbf{R}^* + \mathbf{R}^{*T} \underline{\dot{\mathbf{A}}} \mathbf{R}^* + \mathbf{R}^{*T} \underline{\mathbf{A}} \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T} \mathbf{R}^* \\
 &= \mathbf{R}^{*T} (\underline{\dot{\mathbf{A}}} - \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T} \underline{\mathbf{A}} + \underline{\mathbf{A}} \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T}) \mathbf{R}^* \\
 &= \mathbf{R}^{*T} (\underline{\dot{\mathbf{A}}} - \mathbf{W}^* \underline{\mathbf{A}} + \underline{\mathbf{A}} \mathbf{W}^*) \mathbf{R}^* \\
 &= \mathbf{R}^{*T} \underline{\dot{\mathbf{A}}} \mathbf{R}^* \dots \dots \dots (B.3)
 \end{aligned}$$

式 (B.3) で表される $\underline{\mathbf{A}}$ の共回転速度を Mandel-Kratohvil 速度と呼ぶ。

B.3 Cotter-Rivlin 速度の導出

金属における微小弾性変形の仮定に基づいて，初期配置 $\beta_{(I)}$ を参照配置とする物理量 $\underline{\mathbf{A}}_{(I)}$ の物質時間導関数を求めると次式のようなになる。

$$\begin{aligned}
 \underline{\dot{\mathbf{A}}}_{(I)} &= (\mathbf{F}^{pT} \mathbf{R}^{*T} \underline{\mathbf{A}} \mathbf{R}^* \mathbf{F}^p) \\
 &= \dot{\mathbf{F}}^{pT} \mathbf{R}^{*T} \underline{\mathbf{A}} \mathbf{R}^* \mathbf{F}^p + \mathbf{F}^{pT} \dot{\mathbf{R}}^{*T} \underline{\mathbf{A}} \mathbf{R}^* \mathbf{F}^p + \mathbf{F}^{pT} \mathbf{R}^{*T} \underline{\dot{\mathbf{A}}} \mathbf{R}^* \mathbf{F}^p + \mathbf{F}^{pT} \mathbf{R}^{*T} \underline{\mathbf{A}} \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{F}^p + \mathbf{F}^{pT} \mathbf{R}^{*T} \underline{\mathbf{A}} \mathbf{R}^* \dot{\mathbf{F}}^p \\
 &= \mathbf{F}^{pT} \mathbf{R}^{*T} (\mathbf{R}^* \mathbf{F}^{p-T} \dot{\mathbf{F}}^{pT} \mathbf{R}^{*T} \underline{\mathbf{A}} + \mathbf{R}^* \dot{\mathbf{R}}^{*T} \underline{\mathbf{A}} + \underline{\dot{\mathbf{A}}} + \underline{\mathbf{A}} \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T} + \underline{\mathbf{A}} \mathbf{R}^* \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \mathbf{R}^{*T}) \mathbf{R}^* \mathbf{F}^p \\
 &= \mathbf{F}^{pT} \mathbf{R}^{*T} \left\{ \underline{\dot{\mathbf{A}}} + \mathbf{R}^* (\mathbf{F}^{p-T} \dot{\mathbf{F}}^{pT} \mathbf{R}^{*T} + \dot{\mathbf{R}}^{*T}) \underline{\mathbf{A}} + \underline{\mathbf{A}} (\dot{\mathbf{R}}^* + \mathbf{R}^* \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1}) \mathbf{R}^* \right\} \mathbf{R}^* \mathbf{F}^p \\
 &= \mathbf{F}^{pT} \mathbf{R}^{*T} \left\{ \underline{\dot{\mathbf{A}}} + \mathbf{L}^T \underline{\mathbf{A}} + \underline{\mathbf{A}} \mathbf{L} \right\} \mathbf{R}^* \mathbf{F}^p \\
 &= \mathbf{F}^{pT} \mathbf{R}^{*T} \underline{\dot{\mathbf{A}}} \mathbf{R}^* \mathbf{F}^p \dots \dots \dots (B.4)
 \end{aligned}$$

ここで， $\underline{\dot{\mathbf{A}}}$ は初期配置 $\beta_{(I)}$ を参照したときの Cotter-Rivlin 速度であり，式 (B.4) から次式のように定義される。

$$\underline{\dot{\mathbf{A}}} \equiv \underline{\dot{\mathbf{A}}} + \mathbf{L}^T \underline{\mathbf{A}} + \underline{\mathbf{A}} \mathbf{L} \dots \dots \dots (B.5)$$

なお，式 (B.4) では

$$(\dot{\mathbf{R}}^* + \mathbf{R}^* \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1}) \mathbf{R}^{*T} = (\dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{F}^p + \mathbf{R}^* \dot{\mathbf{F}}^p) \mathbf{F}^{p-1} \mathbf{R}^{*T} = (\mathbf{R}^* \mathbf{F}^p) (\mathbf{R}^* \mathbf{F}^p)^{-1} = \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1} = \mathbf{L} \dots \dots \dots (B.6)$$

という関係を用いて速度こう配 \mathbf{L} を導入している。

B.4 従来の転位密度テンソル

ある任意の Burgers 回路 L に沿って 1 周したときに生じる出発地点と到着地点のずれ (正味の Burgers ベクトル) \mathbf{B} は，その Burgers 回路を貫く転位線の存在に関係付けられる。通常， \mathbf{B} と転位密度テンソル α の関係は (2.71) のように表される。ここで，(2.71) を再度書いておく。

$$\mathbf{B} = \int_S \alpha \mathbf{n} dS \dots \dots \dots (B.7)$$

なお、転位密度テンソル α_{ij} の最初の添字 i は Burgers ベクトルの方向 (すべり方向) を、次の添字 j は転位線が横切る面の法線方向を表す。ただし、ここで定義した α は通常の転位密度の定義である単位体積当たりの転位線の長さ (単位面積を貫く転位線の本数) ではなく、単位面積あたりの正味の Burgers ベクトルを表していることに注意されたい。

B.4.1 塑性変位こう配に基づく転位密度テンソル

Kröner は B を転位の存在による結晶格子のずれと結びつけ、以下のように表現している⁽⁶⁸⁾。

$$B = \int_L dx' \dots\dots\dots (B.8)$$

ここで、 dx' は Burgers 回路 L に沿う微小線素 dx を完全結晶に写像したものであり、転位によって生じる塑性変位こう配テンソル β^p を用いて以下のように表される。

$$dx - dx' = \beta dx \dots\dots\dots (B.9)$$

式 (B.8) に式 (B.9) および Stokes の回転定理を用いることによって

$$B = \int_L (I - \beta^p) dx = - \int_S \text{curl} \beta^p ndS \dots\dots\dots (B.10)$$

式 (B.7) および式 (B.10) を比較し局所化することによって、Kröner による転位密度テンソルが

$$\alpha = -\text{curl} \beta^p \dots\dots\dots (B.11)$$

と得られる。

B.4.2 Teodosiu による転位密度テンソル

Teodosiu⁽³⁰⁾ は変形こう F を $F = APA_0^{-1}$ と分解し配置の概念を導入し転位密度テンソルについて論じている。この分解は、初期 (時刻 $t = 0$) に存在する転位が形成する弾性場を取り除くために A_0^{-1} によって完全結晶へと写像し、塑性変形を受け P によって写像され、転位が形成する弾性場による変形写像 A によって現配置へと至ることを表している。現配置および現配置から弾性変形を除いた配置における微小線素を dx および $d\xi$ とすると、これらの関係は

$$dx = Ad\xi \dots\dots\dots (B.12)$$

となる。ここで、式 (B.8) を次式のように書き直す。

$$\bar{B} = \int_L d\xi \dots\dots\dots (B.13)$$

ここで \bar{B} は弾性変形による格子間距離の影響を受けていない真の正味の Burgers ベクトルである。式 (B.11) に式 (B.10) および Stokes の回転定理を用いることによって、

$$\bar{B} = \int_L A^{-1} dx = - \int_S \text{curl} A^{-1} ndS \dots\dots\dots (B.14)$$

という関係が得られる。ここで、 $\bar{B} = \int_S \bar{\alpha} ndS$ と定義すると

$$\bar{\alpha} = -\text{curl} A^{-1} \dots\dots\dots (B.15)$$

となり, $d\mathbf{B} = A d\bar{\mathbf{B}}$ を考慮すれば, 現配置における α が

$$\alpha = -A \text{curl} A^{-1} \dots \dots \dots (B.16)$$

と定義される.

B.4.3 Busso らによる転位密度速度テンソル

Busso ら⁽²⁵⁾ は変形こう F を $F = F^e F^p$ と分解し, 中間配置における正味の Burgers ベクトルを

$$\mathbf{B} = - \int_L dx = - \int_L F^p dX \dots \dots \dots (B.17)$$

とし, 転位密度テンソルを

$$\alpha = \text{curl} F^p \dots \dots \dots (B.18)$$

と定義している. ここで, 式 (B.18) に時間微分を施すことによって

$$\dot{\alpha} = \text{curl} \dot{F}^p = \text{curl}(L^p F^p) = \text{curl} \left\{ \sum_{\alpha} (\dot{\gamma}^{(\alpha)} s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)}) F^p \right\} \dots \dots \dots (B.19)$$

となり, α すべり系の転位密度速度テンソルが

$$\dot{\alpha}^{(\alpha)} = \text{curl}(\dot{\gamma}^{(\alpha)} s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)} F^p) \dots \dots \dots (B.20)$$

と得られる. 一方, 任意の面積 S を貫く転位の密度は GN 転位ベクトル $\rho_G^{(\alpha)}$ を用いて

$$\int_S \rho_G^{(\alpha)} \cdot n dS \dots \dots \dots (B.21)$$

となるため, α すべり系の正味の Burgers ベクトルが

$$\mathbf{B}^{(\alpha)} = \int_S (\rho_G^{(\alpha)} \cdot n) \mathbf{b}^{(\alpha)} dS = \int_S (\mathbf{b}^{(\alpha)} \otimes \rho_G^{(\alpha)}) n dS \dots \dots \dots (B.22)$$

と得られる. ここで, $\rho_G^{(\alpha)}$ は結晶基底ベクトルおよび GN 転位の成分を用いて

$$\rho_G^{(\alpha)} = \rho_s^{(\alpha)} s^{(\alpha)} + \rho_{em}^{(\alpha)} m^{(\alpha)} + \rho_{et}^{(\alpha)} t^{(\alpha)} \dots \dots \dots (B.23)$$

で表される GN 転位ベクトルである. なお, $\rho_s^{(\alpha)}$ はらせん成分, $\rho_{em}^{(\alpha)}$ は刃状の $m^{(\alpha)}$ に平行な成分および $\rho_{et}^{(\alpha)}$ は刃状の $t^{(\alpha)}$ に平行な成分である. 式 (B.22) に時間微分を施すことによって,

$$\dot{\mathbf{B}}^{(\alpha)} = \int_S (\dot{\mathbf{b}}^{(\alpha)} \otimes \dot{\rho}_G^{(\alpha)}) n dS \dots \dots \dots (B.24)$$

となり, 式 (B.7) を時間微分した結果と式 (B.20) を用いることによって次の関係が得られる.

$$\mathbf{b}^{(\alpha)} \otimes \dot{\rho}_G^{(\alpha)} = \dot{\rho}_s^{(\alpha)} \mathbf{b}^{(\alpha)} \otimes s^{(\alpha)} + \dot{\rho}_{em}^{(\alpha)} \mathbf{b}^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)} + \dot{\rho}_{et}^{(\alpha)} \mathbf{b}^{(\alpha)} \otimes t^{(\alpha)} = \text{curl}(\dot{\gamma}^{(\alpha)} s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)} F^p) \dots \dots \dots (B.25)$$

ここで, 式 (B.25) に $\mathbf{b}^{(\alpha)} = \tilde{b}_s^{(\alpha)}$ を適応すれば, 最終的に

$$\tilde{b}(\dot{\rho}_s^{(\alpha)} s^{(\alpha)} + \dot{\rho}_{em}^{(\alpha)} m^{(\alpha)} + \dot{\rho}_{et}^{(\alpha)} t^{(\alpha)}) = \text{curl}(\dot{\gamma}^{(\alpha)} F^{pT} m^{(\alpha)}) \dots \dots \dots (B.26)$$

が得られる.

B.5 GN 不適合度テンソルの成分

式 (2.95) から , α すべり系に関する GN 不適合度 $\eta^{(\alpha)}$ を次式のように表す .

$$\eta^{(\alpha)} = \frac{l}{2\tilde{b}} \mathbf{P}_S^{(\alpha)\times} (\nabla \gamma^{(\alpha)} \otimes \nabla) \dots \dots \dots (B.27)$$

結晶基底を用いて式 (B.27) を書き直せば ,

$$\eta^{(\alpha)} = \frac{l}{2\tilde{b}} (s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)} + m^{(\alpha)} s^{(\alpha)}) \times (\nabla \gamma^{(\alpha)} \otimes \nabla) \dots \dots \dots (B.28)$$

が得られる . 式 (B.28) を指標表示し , $s^{(\alpha)} = m^{(\alpha)} \times t^{(\alpha)}$ および $m^{(\alpha)} = t^{(\alpha)} \times s^{(\alpha)}$ という関係を代入すれば ,

$$\begin{aligned} \eta_{ij}^{(\alpha)} &= \frac{l}{2\tilde{b}} (s_k^{(\alpha)} m_l^{(\alpha)} + m_k^{(\alpha)} s_l^{(\alpha)}) \gamma_{,mn}^{(\alpha)} e_{ikm} e_{jln} \\ &= \frac{l}{2\tilde{b}} (m_p^{(\alpha)} t_q^{(\alpha)} e_{kpq} t_s^{(\alpha)} s_t^{(\alpha)} e_{lst} + t_p^{(\alpha)} s_q^{(\alpha)} e_{kpq} m_s^{(\alpha)} t_t^{(\alpha)} e_{lst}) \gamma_{,mn}^{(\alpha)} e_{ikm} e_{jln} \\ &= \frac{l}{2\tilde{b}} (m_p^{(\alpha)} t_q^{(\alpha)} t_s^{(\alpha)} s_t^{(\alpha)} + t_p^{(\alpha)} s_q^{(\alpha)} m_s^{(\alpha)} t_t^{(\alpha)}) (\delta_{mp} \delta_{iq} - \delta_{mq} \delta_{ip}) (\delta_{ns} \delta_{jt} - \delta_{nt} \delta_{js}) \gamma_{,mn}^{(\alpha)} \\ &= \frac{l}{2\tilde{b}} \gamma_{,mn}^{(\alpha)} (m_m^{(\alpha)} t_n^{(\alpha)} t_i^{(\alpha)} s_j^{(\alpha)} - m_m^{(\alpha)} s_n^{(\alpha)} t_i^{(\alpha)} t_j^{(\alpha)} - t_m^{(\alpha)} t_n^{(\alpha)} m_i^{(\alpha)} s_j^{(\alpha)} + t_m^{(\alpha)} s_n^{(\alpha)} m_i^{(\alpha)} t_j^{(\alpha)} \\ &\quad + t_m^{(\alpha)} m_n^{(\alpha)} s_i^{(\alpha)} t_j^{(\alpha)} - t_m^{(\alpha)} t_n^{(\alpha)} s_i^{(\alpha)} m_j^{(\alpha)} - s_m^{(\alpha)} m_n^{(\alpha)} t_i^{(\alpha)} t_j^{(\alpha)} + s_m^{(\alpha)} t_n^{(\alpha)} t_i^{(\alpha)} m_j^{(\alpha)}) \dots \dots \dots (B.29) \end{aligned}$$

となる . ここで , 図 2.7(a) に示す局所座標系においては $\gamma_{,mn}^{(\alpha)} m_m^{(\alpha)} t_n^{(\alpha)} = \gamma_{,23}^{(\alpha)}$ という関係が成り立つ . 式 (B.29) における他の成分も同様の関係が成立するので , 式 (B.29) を直接表示に直せば ,

$$\eta^{(\alpha)} = \frac{l}{2\tilde{b}} \{-\gamma_{,33}^{(\alpha)} (s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)})_S + \gamma_{,23}^{(\alpha)} (s^{(\alpha)} \otimes t^{(\alpha)})_S + \gamma_{,31}^{(\alpha)} (m^{(\alpha)} \otimes t^{(\alpha)})_S - \gamma_{,12}^{(\alpha)} t^{(\alpha)} \otimes t^{(\alpha)}\} \dots \dots \dots (B.30)$$

という関係が得られる .

補足C

第3章の補足

C.1 転位密度の釣合い方程式 (3.21) の導出

式 (3.20) の左辺第 2 項について微小変形および材料の非圧縮を仮定すれば，次式の関係が成り立つ．

$$\begin{aligned}
 \operatorname{div}(\alpha^{[n]}v) &= \operatorname{grad}\alpha^{[n]} \cdot v + \alpha^{[n]}\operatorname{div}v \\
 &\simeq \alpha^{[n]}\operatorname{tr}L \\
 &= \alpha^{[n]}\operatorname{tr}D + \alpha^{[n]}\operatorname{tr}W \\
 &= \alpha^{[n]}\operatorname{tr}D \\
 &= \alpha^{[n]}\operatorname{tr}D^e + \alpha^{[n]}\operatorname{tr}D^p \\
 &\simeq 0 \dots\dots\dots (C.1)
 \end{aligned}$$

以上の関係を考慮して式 (3.20) を局所化すれば，転位密度の釣合い方程式が次式のように得られる．

$$\frac{\partial \alpha^{[n]}}{\partial t} = -\operatorname{div}m^{[n]} + G^{[n]} \dots\dots\dots (C.2)$$

補足D

第4章の補足

D.1 式(4.6)の導出

散逸関数 $\tilde{\Phi}$ は全自由エネルギー $\bar{\Psi}$ および自由エネルギーの保存部分 Ψ を用いて次式のように表される。

$$\tilde{\Phi} = \dot{\bar{\Psi}}_d = \dot{\bar{\Psi}} - \dot{\Psi} \dots \dots \dots (D.1)$$

式(D.1)に式(3.3)および式(4.5)を代入して $\dot{\bar{\Psi}}$ および $\tilde{\Phi}$ を消去すれば、 $\dot{\Psi}$ と $\dot{\bar{\Psi}}$ の関係が

$$\dot{\bar{\Psi}} = \dot{\Psi} + \tilde{A}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^p - \tilde{N}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p + \sum_n \tilde{G}_r^{[n]} \Pi^{[n]} \dots \dots \dots (D.2)$$

のように得られる。ただし、式(D.2)における右辺第4項に関しては、転位間の相互作用による反応を表現する項であり、仕事に寄与しない特殊な項と考えられるため、本研究では考慮しないものとする。

D.2 異方性弾性係数

式(4.27)に示されるように、異方性弾性係数テンソル C^e はその対称性から21成分に制限される。ここで、 C^e を一般的な有限要素法で用いられる 6×6 のマトリクス表示にすれば、

$$[C^e] = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1112} & C_{1123} & C_{1131} \\ & C_{2222} & C_{2233} & C_{2212} & C_{2223} & C_{2231} \\ & & C_{3333} & C_{3312} & C_{3323} & C_{3331} \\ & & & C_{1212} & C_{1223} & C_{1231} \\ & \text{Symmetric} & & & C_{2323} & C_{2331} \\ & & & & & C_{3131} \end{bmatrix} \dots \dots \dots (D.3)$$

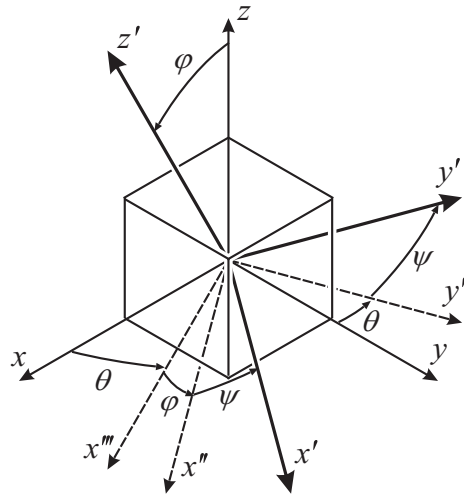


Fig. D.1 Transformation of local coordinate system

となる．さらに，立方対称材料の場合，材料の全体座標系と結晶格子の局所座標系が一致するときには，

$$[C^e] = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \dots\dots\dots (D.4)$$

のように，独立な 3 成分 $C_{11} = C_{1111}$ ， $C_{12} = C_{1122}$ および $C_{44} = C_{1212}$ のみで決定される．一方，全体座標系 (x', y', z') と局所座標系 (x, y, z) が図 D.1 に示すような関係にある場合，全体座標系における異方性弾性係数テンソル C^e は Euler 角 (θ, φ, ψ) を用いて次式のように表される．

$$C_{ijkl}^e = Q_{pi} Q_{qj} Q_{rk} Q_{sl} C_{pqrs}^e \dots\dots\dots (D.5)$$

ここで， Q_{ij} は局所座標系 (x, y, z) から全体座標系 (x', y', z') への座標変換を表す直交テンソルであり，その成分は次のようになる．

$$Q = \begin{pmatrix} \cos \varphi \cos \theta \cos \psi - \sin \theta \sin \psi & \cos \varphi \sin \theta \cos \psi + \cos \theta \sin \psi & -\sin \varphi \cos \psi \\ -\cos \varphi \cos \theta \sin \psi - \sin \theta \cos \psi & -\cos \varphi \sin \theta \sin \psi + \cos \theta \cos \psi & \sin \varphi \sin \psi \\ \sin \varphi \cos \theta & \sin \varphi \sin \theta & \cos \varphi \end{pmatrix} \dots\dots\dots (D.6)$$

D.3 式 (4.32) の相当量表示

D.3.1 第 1 項の相当量表示

式 (4.32) の第 1 項を各すべり系に対応した分解せん断応力およびすべりを用いた形に書き換える。まず、有効分解せん断応力は結晶基底 $s_{(m)}^{(\alpha)}$ および $m_{(m)}^{(\alpha)}$ を用いて次式のように表すことができる。

$$\tau^{(\alpha)} = s_{(m)}^{(\alpha)} \hat{T}_{(m)} m_{(m)}^{(\alpha)} = \hat{T}_{(m)} \cdot \mathbf{P}_{S(m)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (D.7)$$

ここで、 $\mathbf{P}_{(m)}^{(\alpha)}$ は次式で表される結晶基底テンソルであり、その対称部分 $\mathbf{P}_{S(m)}^{(\alpha)}$ は Schmid テンソルと称される。

$$\mathbf{P}_{(m)}^{(\alpha)} = s_{(m)}^{(\alpha)} \otimes m_{(m)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (D.8)$$

ここで、式 (D.7)、式 (2.36) および式 (2.53) を用いることによって次式が得られる。

$$\begin{aligned} \hat{T}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^p &= \hat{T}_{(m)} \cdot \mathbf{L}_{S(m)}^p = \hat{T}_{(m)} \cdot \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{S(m)}^{(\alpha)} \\ &= \sum_{\alpha} \tau^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (D.9) \end{aligned}$$

D.3.2 第 2 項の相当量表示

第 1 項と同様に、第 2 項を各すべり系に対する応力およびすべりを用いた形に書き換える。まず、塑性変形速度に共役な応力 ν は次のようになる。

$$\nu^{(\alpha)} = s_{(m)}^{(\alpha)} \mathbf{N}_{(m)} m_{(m)}^{(\alpha)} = \mathbf{N}_{(m)} \cdot \mathbf{P}_{S(m)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (D.10)$$

また、塑性変形加速度は次式のように表すことができる。

$$\dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p = \sum_{\alpha} \ddot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{S(m)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (D.11)$$

式 (D.10) および式 (D.11) から、散逸関数の第 2 項は次式のように相当量を用いて表現できる。

$$\mathbf{N}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p = \mathbf{N}_{(m)} \cdot \sum_{\alpha} \ddot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{S(m)}^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} \nu^{(\alpha)} \ddot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (D.12)$$

D.4 転位の反応

本研究における転位の反応とは、化学反応に順ずるものである。化学反応において、 n_A 個の A 分子および n_B 個の B 分子から n_C 個の C 分子が生成する過程を化学式で書けば



となる。このとき、式 (D.13) の反応における反応速度 v は

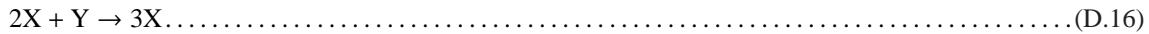
$$v = -\frac{1}{n_A} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{n_B} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{n_C} \frac{d[C]}{dt} = k[A]^{n_A} [B]^{n_B} \dots \dots \dots (D.14)$$

のように表される．なお，[A]，[B] および [C] はモル濃度を表し， k は反応速度係数である．式 (D.14) から各物質のモル濃度に関する時間発展が次式のように求まる．

$$\left. \begin{aligned} \frac{d[A]}{dt} &= -n_A k [A]^{n_A} [B]^{n_B} \\ \frac{d[B]}{dt} &= -n_B k [A]^{n_A} [B]^{n_B} \\ \frac{d[C]}{dt} &= n_C k [A]^{n_A} [B]^{n_B} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (D.15)$$

なお，速度式の右辺で反応項の和が常に零という化学量論の成立は，質量についてのみであるので，右辺における反応項の和を零にするには，両辺に分子量を乗じる必要がある．

ここで，次式のような自己触媒過程を考える．



このとき，質量保存則から物質 X および Y の時間変化は

$$\left. \begin{aligned} \frac{d[X]}{dt} &= -2k[X]^2[Y] + 3k[X]^2[Y] = k[X]^2[Y] \\ \frac{d[Y]}{dt} &= -k[X]^2[Y] \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (D.17)$$

となる．

上記に基づいて，転位密度 (単位面積あたりの転位数) をモル濃度 (単位体積あたりのアボガドロ数) に対応させ，図 4.1 および図 4.2 で示される各転位の反応および生成・消滅モデルにおける転位の反応速度式を求めれば，式 (4.62) における反応および生成・消滅項と同様の形として求まる．なお，転位の反応の場合には，化学反応とは違って転位数 (化学反応におけるモル数に対応) の合計が反応前後で変化するようなことはないので，いかなる重みを乗ずることなく，反応による転位数は常に保存される．ただし，生成・消滅項は除く．

D.5 特性方程式 (4.73) の導出

式 (4.72) をマトリクスで表示すれば，次式のようになる．

$$\begin{bmatrix} \omega & 0 \\ 0 & \omega \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \xi^m \\ \xi^i \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \zeta_1 & \zeta_2 \\ \zeta_3 & \zeta_4 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \xi^m \\ \xi^i \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (D.18)$$

ただし， $\zeta_1 \sim \zeta_4$ は次のように表される．

$$\left. \begin{aligned} \zeta_1 &\equiv -D^m \dot{q}^2 - K_0 - K_2 \alpha_0^i - K_3 \alpha_0^{i^2} - K_4 \alpha_0^{i^3} - L_1 \alpha_0^i \\ \zeta_2 &\equiv K_1 - K_2 \alpha_0^m - 2K_3 \alpha_0^m \alpha_0^i - 3K_4 \alpha_0^m \alpha_0^{i^2} - L_1 \alpha_0^m \\ \zeta_3 &\equiv K_0 + K_2 \alpha_0^i + K_3 \alpha_0^{i^2} + K_4 \alpha_0^{i^3} - L_1 \alpha_0^i \\ \zeta_4 &\equiv -D^i \dot{q}^2 - K_1 + K_2 \alpha_0^m + 2K_3 \alpha_0^m \alpha_0^i + 3K_4 \alpha_0^m \alpha_0^{i^2} - 2B_2 \alpha_0^i - L_1 \alpha_0^m \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (D.19)$$

ここで，式 (D.18) が $\{\xi\} \neq \{0\}$ に対して成立するための必要十分条件は ω が次式を満たすことである．

$$\det \begin{bmatrix} \omega - \zeta_1 & -\zeta_2 \\ -\zeta_3 & \omega - \zeta_4 \end{bmatrix} = 0 \dots\dots\dots (D.20)$$

式 (D.20) を展開して整理すれば，特性方程式として次式を得る．

$$\omega^2 - \kappa\omega + \Delta = 0 \dots\dots\dots (D.21)$$

ただし， κ および Δ は次式である．

$$\begin{aligned} \kappa = & -(D^m + D^i)\check{q}^2 - K_0 - K_2\alpha_0^i - K_3\alpha_0^{i^2} - K_4\alpha_0^{i^3} - 2B_2\alpha_0^i \\ & - K_1 + K_2\alpha_0^m + 2K_3\alpha_0^m\alpha_0^i + 3K_4\alpha_0^m\alpha_0^{i^2} - L_1\alpha_0^m - L_1\alpha_0^i \dots\dots\dots (D.22) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta = & D^m D^i \check{q}^4 - \left\{ -D^m \left(2B_2\alpha_0^i + K_1 - K_2\alpha_0^m - 2K_3\alpha_0^m\alpha_0^i \right. \right. \\ & \left. \left. - 3K_4\alpha_0^m\alpha_0^{i^2} + L_1\alpha_0^m \right) - D^i \left(K_0 + K_2\alpha_0^i + K_3\alpha_0^{i^2} + K_4\alpha_0^{i^3} + L_1\alpha_0^i \right) \right\} \check{q}^2 \\ & + 2 \left(B_2\alpha_0^i + L_1\alpha_0^m \right) \left(K_0 + K_2\alpha_0^i + K_3\alpha_0^{i^2} + K_4\alpha_0^{i^3} \right) \\ & + 2L_1\alpha_0^i \left(K_1 - K_2\alpha_0^m - 2K_3\alpha_0^m\alpha_0^i - 3K_4\alpha_0^m\alpha_0^{i^2} + B_2\alpha_0^i \right) \dots\dots\dots (D.23) \end{aligned}$$

D.6 Hopf 分岐の式 (4.85) の導出

基準状態の式 (4.71)₁ を α_0^m について解けば，

$$\alpha_0^m = \frac{K_1\alpha_0^i}{X} \dots\dots\dots (D.24)$$

となる．ただし， X は次式で定義される．

$$X \equiv K_0 + K_2\alpha_0^i + K_3\alpha_0^{i^2} + K_4\alpha_0^{i^3} + L_1\alpha_0^i \dots\dots\dots (D.25)$$

式 (D.24) および式 (D.25) を式 (4.75) に代入し整理すると次式が得られる．

$$\frac{K_1}{X} \left(-X + K_2\alpha_0^i + 2K_3\alpha_0^{i^2} + 3K_4\alpha_0^{i^3} - L_1\alpha_0^i \right) = X + 2B_2\alpha_0^i \dots\dots\dots (D.26)$$

ここで，左辺括弧内における第 1 項 X のみに式 (D.25) を代入し整理すると

$$\frac{K_1}{X} \left(-K_0 + K_3\alpha_0^{i^2} + 2K_4\alpha_0^{i^3} - 2L_1\alpha_0^i \right) = X + 2B_2\alpha_0^i \dots\dots\dots (D.27)$$

となる．式 (D.27) 両辺に $X/(-K_0 + K_3\alpha_0^{i^2} + 2K_4\alpha_0^{i^3} - 2L_1\alpha_0^i)$ を乗じ，Hopf 分岐を起こす振幅を $K_1 \equiv K_1^H$ とおけば，応力振幅 K_1^H の式が次のように得られる．

$$K_1^H = \frac{X(X + 2B_2\alpha_0^i)}{-K_0 + K_3\alpha_0^{i^2} + 2K_4\alpha_0^{i^3} - 2L_1\alpha_0^i} \dots\dots\dots (D.28)$$

D.7 Turing 分岐の式 (4.91) の導出

まず, 式 (4.90) の両辺に $4D^m D^i$ を乗ずると次式が得られる.

$$\{-D^m(2B_2\alpha_0^i + K_1^T - \alpha_0^m Y + L_1\alpha_0^m) - D^i X\}^2 = 4D^m D^i \{2B_2\alpha_0^i X + 2L_1\alpha_0^m(2X - Y - L_1\alpha_0^i)\} \dots \dots \dots (D.29)$$

次に両辺の平方をとり, D^m で除すると次式のようになる.

$$-(2B_2\alpha_0^i + K_1 - \alpha_0^m Y + L_1\alpha_0^m) - d^* X = \pm 2 \sqrt{d^* \{2B_2\alpha_0^i X + 2L_1\alpha_0^m(2X - \alpha_0^i Y - L_1\alpha_0^i)\}} \dots \dots \dots (D.30)$$

ただし, d^* は拡散係数比であり, 次式で表される.

$$d^* \equiv \frac{D^i}{D^m} \dots \dots \dots (D.31)$$

式 (D.30) における左辺の α_0^m に式 (D.24) を代入し K_1 について整理すれば,

$$\begin{aligned} & \frac{K_1}{X} \left(-K_0 + K_3\alpha_0^{i^2} + 2K_4\alpha_0^{i^3} - 2L_1\alpha_0^i \right) \\ & = \pm 2 \sqrt{d^* \{2B_2\alpha_0^i X + 2L_1\alpha_0^m(2X - \alpha_0^i Y - L_1\alpha_0^i)\}} + 2B_2\alpha_0^i + d^* X \dots \dots \dots (D.32) \end{aligned}$$

となる. 式 (D.32) の両辺に $X/(-K_0 + K_3\alpha_0^{i^2} + 2K_4\alpha_0^{i^3} - 2L_1\alpha_0^i)$ を乗じ, Turing 分岐を起こす振幅を $K_1 \equiv K_1^T$ とおけば, 応力振幅 K_1^T の条件が次式のように得られる.

$$K_1^T = \frac{X \left(2B_2\alpha_0^i \pm 2 \sqrt{2d^* \{B_2\alpha_0^i X + L_1\alpha_0^m(2X - \alpha_0^i Y - L_1\alpha_0^i)\}} + d^* X \right)}{-K_0 + K_3\alpha_0^{i^2} + 2K_4\alpha_0^{i^3} - 2L_1\alpha_0^i} \dots \dots \dots (D.33)$$

補足 E

第5章の補足

E.1 自己硬化

すべり面を貫く林立転位やすべり面上の介在物などに向かって転位線が移動する場合に、転位線の移動は林立転位や介在物によって妨げられる。転位が長距離移動するためには、これらの障害物を乗り越えて運動する必要がある。転位が林立転位を通り抜ける様子を図 E.1 に示す。転位が介在物を通り抜けると、図 E.1 のように障害物を囲むような転位線を残したまま通過する。ここで、障害物を囲む輪状の転位線は Orowan ループと呼ばれている。このような Orowan ループは内部応力場を形成するため、後続の転位はその影響を受けることになる。Orowan ループなどの同一すべり系の転位蓄積に起因する材料硬化を自己硬化という。また、このすべり面に Frank-Read 源と呼ばれる転位発生源が存在するとき、Orowan ループによる堆積転位群によって転位源に逆応力が及ぼされる。この逆応力が背応力である。背応力は転位源と転位群との距離が離れていても作用するものであり、長範囲応力場説として知られている。なお、障害物である介在物が母相より軟質の場合には、転位線は介在物中を切って進行するため、Orowan ループは形成されない。また、運動転位と林立転位の位置関係によっては、補足 E.3 のような転位の切り合い運動が発生する場合がある。

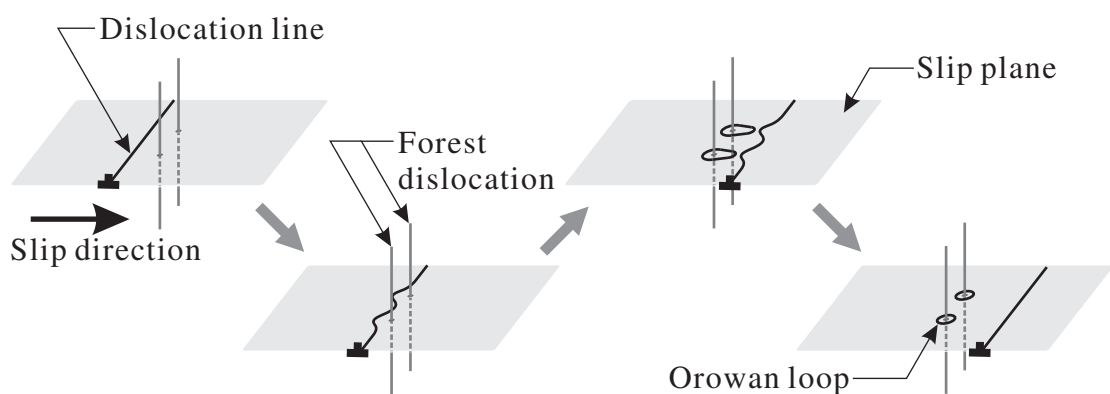


Fig. E.1 Formation of Orowan loops around forest dislocations

E.2 潜在硬化

潜在硬化とは他のすべり系からの転位線により生じる硬化である。このような硬化はすべり面が交差する部分で作用するものである。他のすべり系からの転位線が作用しあい、ジョグやキンクの形成が起こる場合があるが、ジョグやキンクが作られる際には、そのエネルギーの分だけ結晶のエネルギーが増加するので、余分の応力を加えないと切り合いが起きない。また、2つの平行でないすべり面上を運動する転位が互いに平行に近いとき、反応して出来た転位のなす Burgers ベクトルがすべり面の中に入らない場合、この転位は運動しにくい。その結果他の転位の運動も阻害し、結晶の変形の進行が妨げられることになる。なお FCC 結晶中の転位の相互作用については第 5.3 節において詳しく分類している。

E.3 転位の切り合い運動

平行でない2つのすべり面上を運動する転位線が互いに近づきあい、直角に近い角度をなして切りあう場合には、おのおのの持つ応力場を媒介とする力は切り合う点のすぐ近くの部分にしか作用しない。したがって、そのような力はあまり相手の運動を阻害することにはならない。また、それらの合体反応は、転位線の長さが増加するので、あまりエネルギー的には有利ではなく起きにくい。転位はすべり面上ですべりが起きた領域の前線であるので、すべりの前線どうしが切り合えば、一般にその上に段がつくられる。すなわち、転位線が切り合うと、一般にはそれらは \bar{b} の長さの段を持つ形状に変化する。この段が転位のすべり面の中に含まれない場合がジョグであり、それがすべり面の中に含まれるものをキंकと呼ぶ。

転位どうしの切り合いによってジョグやキंकがつくられるかは、切り合う転位線の性質に依存する。転位が特殊な方位にある場合には、ジョグとキंकのいずれもがつくられないことがある。切り合いによってジョグやキंकがつくられる際には、そのエネルギーの分だけ結晶のエネルギーが増加するので、余分の応力を加えないと切り合いが起きない。簡単な例として、すべり面が互いに垂直な場合について、刃状転位とらせん転位の種々の組み合わせによる切り合いの様子を図 E.2 に示す。

E.4 セル波長の式 (5.37) の導出

本研究では松下⁽¹⁰⁸⁾によって行われたステージ II における係数パラメータの研究から、ステージ II におけるセル構造の基本パターン再現のために次の条件を平衡点における支配式とする。

$$K_3 = \frac{15K_2}{\alpha_0^i}, \quad K_4 = \frac{5K_2}{\alpha_0^{i^2}} \dots \dots \dots (E.1)$$

次に、式 (E.1) を式 (4.86) に代入することによって、 X は

$$X \equiv K_0 + 21K_2\alpha_0^i + L_1\alpha_0^i \dots \dots \dots (E.2)$$

となる。また、式 (E.1) および式 (E.2) を式 (4.95) に代入することで、 Z は次式のように表される。

$$Z \equiv (K_0 + 21K_2\alpha_0^i + L_1\alpha_0^i)(B_2\alpha_0^i + L_1\alpha_0^m) + L_1\alpha_0^m(K_0 - 25K_2\alpha_0^i) \dots \dots \dots (E.3)$$

ここで、式 (4.96) に式 (E.3) を代入すれば、セル波長およびサブグレイン波長が次式のように得られる。

$$\lambda = 2\pi \left(\frac{D^m D^i}{2(K_0 + 21K_2\alpha_0^i + L_1\alpha_0^i)(B_2\alpha_0^i + L_1\alpha_0^m) + 2L_1\alpha_0^m(K_0 - 25K_2\alpha_0^i)} \right)^{1/4} \dots \dots \dots (E.4)$$

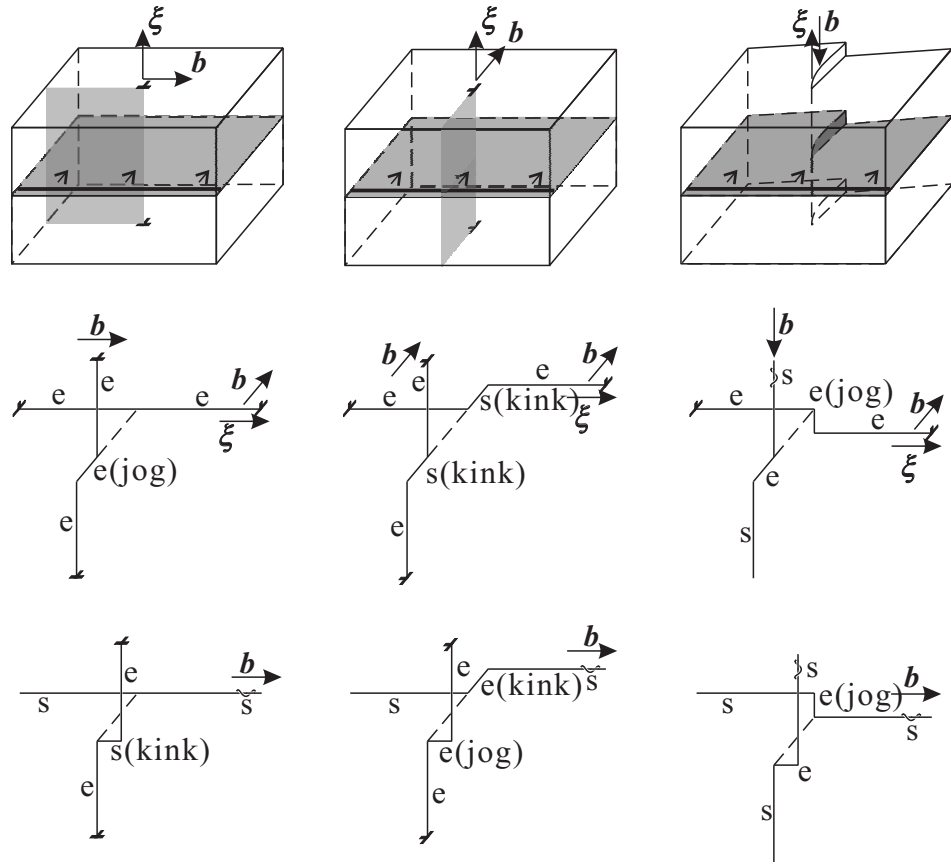


Fig. E.2 Kink and jog formations

E.5 Cauchy 応力に基づいた分解せん断応力速度の導出

分解せん断応力はスカラー量であることを考慮すれば，式 (5.13) の関係は第 2 中間配置における物理量を用いて次式のように書き直せる．

$$\tau^{(\alpha)} = \mathbf{P}_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{T}_{(m)} = s_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{T}_{(m)} \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (E.5)$$

式 (E.5) に物質時間微分を施せば

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = \dot{s}_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{T}_{(m)} \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)} + s_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \dot{\mathbf{T}}_{(m)} \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)} + s_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{T}_{(m)} \dot{\mathbf{m}}_{(m)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (E.6)$$

となる．ここで，結晶基底ベクトルの配置変換則は図 2.1 から

$$s^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* s_{(m)}^{(\alpha)} \simeq \mathbf{R}^* s_{(M)}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* s_{(I)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (E.7)$$

$$\mathbf{m}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)} \simeq \mathbf{R}^* \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (E.8)$$

のように表すことができる．初期配置における結晶基底ベクトルの速度が $\dot{s}_{(I)}^{(\alpha)} = \dot{\mathbf{m}}_{(I)}^{(\alpha)} = \mathbf{0}$ となることを考慮すれば，式 (E.8) から，第 2 中間配置における結晶基底ベクトルの速度も $\dot{s}_{(m)}^{(\alpha)} = \dot{\mathbf{m}}_{(m)}^{(\alpha)} = \mathbf{0}$ となり，式 (E.6) は

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = s_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \dot{\mathbf{T}}_{(m)} \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)} = \dot{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{P}_{(m)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (E.9)$$

となる．ここで，式 (E.9) に， $T_{(m)} = R^{*T} T R^*$ および (2.54) から導かれる結晶基底テンソルの配置変換則 $P_{(m)}^{(\alpha)} = R^{*T} P^{(\alpha)} R^*$ を適応し，各量を現配置の量として記述すれば，

$$\begin{aligned} \dot{\tau}^{(\alpha)} &= (R^{*T} T R^*) \cdot (R^{*T} P^{(\alpha)} R^*) \\ &= (\dot{R}^{*T} T R^* + R^{*T} \dot{T} R^* + R^{*T} T \dot{R}^*) \cdot (R^{*T} P^{(\alpha)} R^*) \dots \dots \dots (E.10) \end{aligned}$$

となる．ここで，式 (E.10) を指標表示して展開し，下部構造スピン $W^* = \dot{R}^* R^{*T}$ を用いて整理すれば，

$$\begin{aligned} \dot{\tau}^{(\alpha)} &= \dot{R}_{ki}^* T_{kl} R_{lj}^* R_{mi}^* P_{mn}^{(\alpha)} R_{nj} + R_{ki}^* \dot{T}_{kl} R_{lj}^* R_{mi}^* P_{mn}^{(\alpha)} R_{nj} + R_{ki}^* T_{kl} \dot{R}_{lj}^* R_{mi}^* P_{mn}^{(\alpha)} R_{nj} \\ &= W_{km}^* T_{kl} \delta_{ln} P_{mn}^{(\alpha)} + \dot{T}_{kl} \delta_{km} \delta_{ln} P_{mn}^{(\alpha)} + T_{kl} W_{ln}^* \delta_{km} P_{mn}^{(\alpha)} \\ &= W_{km}^* T_{kl} P_{ml}^{(\alpha)} + \dot{T}_{kl} P_{kl}^{(\alpha)} + T_{kl} W_{ln}^* P_{kn}^{(\alpha)} \\ &= -W_{mk}^* T_{kl} P_{ml}^{(\alpha)} + \dot{T}_{kl} P_{kl}^{(\alpha)} + T_{kl} W_{ln}^* P_{kn}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (E.11) \end{aligned}$$

となる．式 (E.11) を直接表示に直せば次式が得られる．

$$\begin{aligned} \dot{\tau}^{(\alpha)} &= -(W^* T) \cdot P^{(\alpha)} + \dot{T} \cdot P^{(\alpha)} + (T W^*) \cdot P^{(\alpha)} \\ &= (\dot{T} + T W^* - W^* T) \cdot P^{(\alpha)} \dots \dots \dots (E.12) \end{aligned}$$

式 (5.1) で表される Cauchy 応力の Mandel-Kratovich 速度 $\overset{\nabla}{T} = \dot{T} + T W^* - W^* T$ ，式 (4.25) で与えられる速度形弾性構成式 $\overset{\nabla}{T} = C^e : D^e$ および $\overset{\nabla}{T}$ の対称性を用いて式 (E.12) 整理すれば，次式のような関係が得られる．

$$\begin{aligned} \dot{\tau}^{(\alpha)} &= \overset{\nabla}{T} \cdot P^{(\alpha)} \\ &= (C^e : D^e) \cdot (P_S^{(\alpha)} + P_A^{(\alpha)}) \\ &= (C^e : D^e) \cdot P_S^{(\alpha)} \dots \dots \dots (E.13) \end{aligned}$$

式 (4.27) で表される異方性弾性係数テンソル C^e の対称性を考慮すれば，式 (E.13) は次式のように表される．

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = C_{ijkl}^e D_{kl}^e P_{Sij}^{(\alpha)} = C_{klij}^e P_{Sij}^{(\alpha)} D_{kl}^e \dots \dots \dots (E.14)$$

したがって，分解せん断応力速度 $\dot{\tau}^{(\alpha)}$ は 4 階の異方性弾性係数テンソル C^e ，Schmid テンソル $P_S^{(\alpha)}$ および弾性変形速度テンソル D^e を用いて次式のように表すことができる．

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = (C^e : P_S^{(\alpha)}) \cdot D^e \dots \dots \dots (E.15)$$

E.6 Kirchhoff 応力に基づいた分解せん断応力速度の導出

分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ と Kirchhoff 応力 \tilde{T} を関係付けるために，式 (5.13) における Cauchy 応力を T を \tilde{T} に置き換え，指標表示し物質時間微分を施せば次式ようになる．

$$\begin{aligned} \dot{\tau}^{(\alpha)} &= (s^{(\alpha)} \cdot \tilde{T} m^{(\alpha)}) \\ &= \dot{s}^{(\alpha)} \cdot \tilde{T} m^{(\alpha)} + s^{(\alpha)} \cdot \dot{\tilde{T}} m^{(\alpha)} + s^{(\alpha)} \cdot \tilde{T} \dot{m}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (E.16) \end{aligned}$$

Peirce ら⁽¹⁷⁾ は, 初期配置 $\beta_{(I)}$ から塑性変形こう配 F^p によって中間配置 $\beta_{(m)}$ へ, 次に中間配置 $\beta_{(m)}$ から弾性変形・剛体回転 $F^* = FF^{p-1}$ によって現配置 $\beta_{(c)}$ に写像されるという 3 配置構成をとっているため, 結晶基底ベクトルの変換則として次式を用いている.

$$s^{(\alpha)} = F^* s_{(m)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (E.17)$$

$$m^{(\alpha)} = F^{*-T} m_{(m)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (E.18)$$

ここで, $\dot{s}_{(m)}^{(\alpha)} = \dot{m}_{(m)}^{(\alpha)} = \mathbf{0}$ を考慮し, 式 (E.17) および式 (E.18) を物質時間微分すれば, 次式の関係が得られる.

$$\begin{aligned} \dot{s}^{(\alpha)} &= \dot{F}^* s_{(m)}^{(\alpha)} \\ &= \dot{F}^* F^{*-1} s^{(\alpha)} \\ &= (D^e + W^*) s^{(\alpha)} \dots\dots\dots (E.19) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \dot{m}^{(\alpha)} &= \dot{F}^{*-T} m_{(m)}^{(\alpha)} \\ &= \dot{F}^{*-T} F^{*T} m^{(\alpha)} \\ &= (F^* \dot{F}^{*-1})^T m^{(\alpha)} \\ &= (-\dot{F}^* F^{*-1})^T m^{(\alpha)} \\ &= -(D^e + W^*)^T m^{(\alpha)} \dots\dots\dots (E.20) \end{aligned}$$

式 (E.19) および式 (E.20) を式 (E.16) に代入し, 式 (5.1) および式 (4.25) における Cauchy 応力を Kirchhoff 応力に置き換えた関係を用いて整理すれば,

$$\begin{aligned} \dot{\tau}^{(\alpha)} &= (D^e + W^*) s^{(\alpha)} \cdot \tilde{T} m^{(\alpha)} + s^{(\alpha)} \cdot \dot{\tilde{T}} m^{(\alpha)} - s^{(\alpha)} \cdot \tilde{T} (D^e + W^*)^T m^{(\alpha)} \\ &= s^{(\alpha)} \cdot (\dot{\tilde{T}} + \tilde{T} W^* - W^* \tilde{T}) m^{(\alpha)} + s^{(\alpha)} \cdot D^e \tilde{T} m^{(\alpha)} - s^{(\alpha)} \cdot \tilde{T} D^e m^{(\alpha)} \\ &= s^{(\alpha)} \cdot \overset{\nabla}{\tilde{T}} m^{(\alpha)} + P^{(\alpha)} \cdot (D^e \tilde{T} - \tilde{T} D^e) \\ &= P^{(\alpha)} \cdot (C^e : D^e) + 2P^{(\alpha)} \cdot (D^e \tilde{T})_A \dots\dots\dots (E.21) \end{aligned}$$

となる. ここで, 式 (E.21) における右辺第 1 項を見ると, 2 階のテンソル $P^{(\alpha)}$ と 2 階の対称テンソル $(C^e : D^e)$ の内積であることから, $P^{(\alpha)}$ に関しては, その対称成分のみを考慮すればよい. 同様に, 右辺第 2 項を見ると, 2 階のテンソル $P^{(\alpha)}$ と 2 階の反対称テンソル $(D^e \tilde{T})_A$ の内積であることから, $P^{(\alpha)}$ に関しては, その反対称成分のみを考慮すればよい. すなわち,

$$\begin{aligned} \dot{\tau}^{(\alpha)} &= P_S^{(\alpha)} \cdot (C^e : D^e) + 2P_A^{(\alpha)} \cdot (D^e \tilde{T})_A \\ &= P_S^{(\alpha)} \cdot (C^e : D^e) + P_A^{(\alpha)} \cdot (D^e \tilde{T} - \tilde{T} D^e) \\ &= (P_S^{(\alpha)} : C^e + P_A^{(\alpha)} \tilde{T} - \tilde{T} P_A^{(\alpha)}) \cdot D^e \dots\dots\dots (E.22) \end{aligned}$$

となる. 式 (5.8) を用いると, 分解せん断応力速度は次式のようになる.

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = (P_S^{(\alpha)} : C^e + \beta^{(\alpha)}) \cdot D^e \dots\dots\dots (E.23)$$

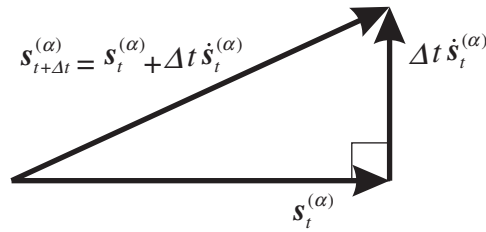


Fig. E.3 Update of crystal base vector

E.7 接線係数法を適応した弾性係数テンソルの非対称性

式 (4.27) に示すように, 4 階の異方性弾性係数テンソル C^e は前 2 つの指標の対称性および後 2 つの指標の対称性に加え, 前後 2 つずつの指標も入れ替えることが可能である. しかしながら, 式 (5.61) を見ると, $\varepsilon^{(\alpha)}$ および $\gamma^{(\alpha)}$ はそれぞれ対称テンソルであるが, $\varepsilon^{(\alpha)} \neq \gamma^{(\alpha)}$ であるため, 接線係数法を適応した C^{tan} は前後 2 つずつの指標の対称性を失う. すなわち,

$$C_{ijkl}^{tan} = C_{jilk}^{tan} \neq C_{klij}^{tan} \dots \dots \dots (E.24)$$

となる. そのため, 式 (5.69) における右辺第 1 項のマトリクスが非対称マトリクスになってしまう. したがって, 接線係数法を適応した FEM 解析を行う場合には非対称ソルバーを用いる必要がある.

E.8 結晶基底の更新における問題点

式 (5.62) から $s^{(\alpha)}$ の時間増分を求めて $s^{(\alpha)}$ を更新すると

$$s_{t+\Delta t}^{(\alpha)} = s_t^{(\alpha)} + \Delta s^{(\alpha)} = s_t^{(\alpha)} + \Delta t \dot{s}_t^{(\alpha)} = s_t^{(\alpha)} + \Delta t \mathbf{W}^* s_t^{(\alpha)} = (\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{W}^*) s_t^{(\alpha)} \dots \dots \dots (E.25)$$

となる. 時間増分 Δt が無限小であれば問題はないが, 数値解析上で Δt を無限小にすることはできないため, 図 E.3 のように, 必ず $s_{t+\Delta t}^{(\alpha)} \geq s_t^{(\alpha)}$ となってしまう. このことは, ステップ毎に結晶基底ベクトルが伸びることを意味しており, 結晶基底の単位性が保たれなくなる. また, $m^{(\alpha)}$ に関しても同様の更新方法をとるため, $s^{(\alpha)}$ と $m^{(\alpha)}$ が直交しなくなる恐れもある.

補足F

第6章の補足

F.1 差分方程式 (6.1) の導出

まず, x 方向および y 方向の格子間隔は一定であるので, 次式が成り立つ.

$$\left. \begin{array}{l} \Delta x = \Delta y = h \\ \Delta t = k \end{array} \right\} \dots\dots\dots (F.1)$$

式 (F.1)₂ を考慮して, 可動転位密度に対する反応-拡散方程式 (4.62)₁ の左辺に前進差分近似を施すと次式のようになる.

$$\frac{\partial \alpha^m}{\partial t} = \frac{\alpha^m_{x,y,t+\Delta t} - \alpha^m_{x,y,t}}{\Delta t} = \frac{\alpha^m_{x,y,t+\Delta t} - \alpha^m_{x,y,t}}{k} \dots\dots\dots (F.2)$$

また, 式 (F.1)₁ を考慮し, 拡散係数 D^m が解析領域内で一定であるという条件下で, 式 (4.62)₁ の右辺第 1 項に差分近似を施すと次式のようになる.

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (D^m \nabla \alpha^m) &= D^m \nabla^2 \alpha^m \\ &= D^m \left(\frac{\partial^2 \alpha^m}{\partial x \partial x} + \frac{\partial^2 \alpha^m}{\partial y \partial y} \right) \\ &= D^m \left\{ \frac{(\partial \alpha^m / \partial x)_{x+\Delta x, y, t} - (\partial \alpha^m / \partial x)_{x, y, t}}{\Delta x} + \frac{(\partial \alpha^m / \partial y)_{x, y, t+\Delta y} - (\partial \alpha^m / \partial y)_{x, y, t}}{\Delta y} \right\} \\ &= D^m \left[\frac{\frac{\alpha^m_{x+\Delta x, y, t} - \alpha^m_{x, y, t}}{\Delta x} - \frac{\alpha^m_{x, y, t} - \alpha^m_{x-\Delta x, y, t}}{\Delta x}}{\Delta x} + \frac{\frac{\alpha^m_{x, y, t+\Delta y} - \alpha^m_{x, y, t}}{\Delta y} - \frac{\alpha^m_{x, y, t} - \alpha^m_{x, y-\Delta y, t}}{\Delta y}}{\Delta y} \right] \\ &= \frac{D^m}{h^2} \left\{ (\alpha^m_{x+\Delta x, y, t} - 2\alpha^m_{x, y, t} + \alpha^m_{x-\Delta x, y, t}) + (\alpha^m_{x, y, t+\Delta y} - 2\alpha^m_{x, y, t} + \alpha^m_{x, y-\Delta y, t}) \right\} \\ &= \frac{D^m}{h^2} (\alpha^m_{x+\Delta x, y, t} + \alpha^m_{x-\Delta x, y, t} + \alpha^m_{x, y, t+\Delta y} + \alpha^m_{x, y-\Delta y, t} - 4\alpha^m_{x, y, t}) \dots\dots\dots (F.3) \end{aligned}$$

同様にして, 不動転位密度に対する反応-拡散方程式 (4.62)₂ の左辺および右辺第 1 項に差分近似を施すと,

$$\left. \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha^i}{\partial t} = \frac{\alpha^i_{x,y,t+\Delta t} - \alpha^i_{x,y,t}}{k} \\ \nabla \cdot (D^i \nabla \alpha^i) = \frac{D^i}{h^2} (\alpha^i_{x+\Delta x, y, t} + \alpha^i_{x-\Delta x, y, t} + \alpha^i_{x, y, t+\Delta y} + \alpha^i_{x, y-\Delta y, t} - 4\alpha^i_{x, y, t}) \end{array} \right\} \dots\dots\dots (F.4)$$

が得られる．式 (F.2)，式 (F.3) および式 (F.4) を式 (4.62) に代入すれば次式を得る．

$$\left. \begin{aligned} \frac{\alpha_{x,y,t+\Delta t}^m - \alpha_{x,y,t}^m}{k} &= \frac{D^m}{h^2} \left(\alpha_{x+\Delta x,y,t}^m + \alpha_{x-\Delta x,y,t}^m + \alpha_{x,y+\Delta y,t}^m + \alpha_{x,y-\Delta y,t}^m - 4\alpha_{x,y,t}^m \right) \\ &\quad - K_0 \alpha_{x,y,t}^m + K_1 \alpha_{x,y,t}^i - K_2 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^i - K_3 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^{i^2} \\ &\quad - K_4 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^{i^3} - L_1 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^i \\ \frac{\alpha_{x,y,t+\Delta t}^i - \alpha_{x,y,t}^i}{k} &= \frac{D^i}{h^2} \left(\alpha_{x+\Delta x,y,t}^i + \alpha_{x-\Delta x,y,t}^i + \alpha_{x,y+\Delta y,t}^i + \alpha_{x,y-\Delta y,t}^i - 4\alpha_{x,y,t}^i \right) \\ &\quad + K_0 \alpha_{x,y,t}^m - K_1 \alpha_{x,y,t}^i + K_2 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^i + K_3 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^{i^2} \\ &\quad + K_4 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^{i^3} - L_1 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^i + B_0 - B_2 \alpha_{x,y,t}^{i^2} \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (F.5)$$

式 (F.5) の両辺に k を乗じれば差分近似された反応-拡散方程式が次式のように得られる．

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{x,y,t+\Delta t}^m - \alpha_{x,y,t}^m &= \frac{kD^m}{h^2} \left(\alpha_{x+\Delta x,y,t}^m + \alpha_{x-\Delta x,y,t}^m + \alpha_{x,y+\Delta y,t}^m + \alpha_{x,y-\Delta y,t}^m - 4\alpha_{x,y,t}^m \right) \\ &\quad + k \left(-K_0 \alpha_{x,y,t}^m + K_1 \alpha_{x,y,t}^i - K_2 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^i - K_3 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^{i^2} \right. \\ &\quad \left. - K_4 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^{i^3} - L_1 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^i \right) \\ \alpha_{x,y,t+\Delta t}^i - \alpha_{x,y,t}^i &= \frac{kD^i}{h^2} \left(\alpha_{x+\Delta x,y,t}^i + \alpha_{x-\Delta x,y,t}^i + \alpha_{x,y+\Delta y,t}^i + \alpha_{x,y-\Delta y,t}^i - 4\alpha_{x,y,t}^i \right) \\ &\quad + k \left(K_0 \alpha_{x,y,t}^m - K_1 \alpha_{x,y,t}^i + K_2 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^i + K_3 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^{i^2} \right. \\ &\quad \left. + K_4 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^{i^3} - L_1 \alpha_{x,y,t}^m \alpha_{x,y,t}^i + B_0 - B_2 \alpha_{x,y,t}^{i^2} \right) \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (F.6)$$

F.2 Neumann の安定条件の式 (6.2) の導出

式 (6.1) を次式のように整理する．

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{x,y,t+\Delta t}^m &= \frac{kD^m}{h^2} \left(\alpha_{x-\Delta x,y,t}^m + \alpha_{x+\Delta x,y,t}^m + \alpha_{x,y-\Delta y,t}^m + \alpha_{x,y+\Delta y,t}^m \right) \\ &\quad + \left\{ 1 - k \left(\frac{4D^m}{h^2} + K_0 + K_2 \alpha_{x,y,t}^i + K_3 \alpha_{x,y,t}^{i^2} + K_4 \alpha_{x,y,t}^{i^3} + L_1 \alpha_{x,y,t}^i \right) \right\} \alpha_{x,y,t}^m \\ &\quad + kK_1 \alpha_{x,y,t}^i \\ \alpha_{x,y,t+\Delta t}^i &= \frac{kD^i}{h^2} \left(\alpha_{x-\Delta x,y,t}^i + \alpha_{x+\Delta x,y,t}^i + \alpha_{x,y-\Delta y,t}^i + \alpha_{x,y+\Delta y,t}^i \right) \\ &\quad + \left\{ 1 - k \left(\frac{4D^i}{h^2} + K_1 + L_1 \alpha_{x,y,t}^m + B_2 \alpha_{x,y,t}^i \right) \right\} \alpha_{x,y,t}^i \\ &\quad + k \left(K_0 + K_2 \alpha_{x,y,t}^i + K_3 \alpha_{x,y,t}^{i^2} + K_4 \alpha_{x,y,t}^{i^3} + B_0 \frac{1}{\alpha_{x,y,t}^m} \right) \alpha_{x,y,t}^m \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (F.7)$$

ここで，粒子描像転位密度 $\alpha_{x,y,t}^m$ および $\alpha_{x,y,t}^i$ は常に正値であるので，式 (F.7)₁ および式 (F.7)₂ の右辺第 1 項 および第 3 項は正値となる．したがって， $\alpha_{x,y,t+\Delta t}^{[n]}$ が正値であるための必要十分条件は，

$$\left. \begin{aligned} 1 - k \left(\frac{4D^m}{h^2} + K_0 + K_2 \alpha_{x,y,t}^i + K_3 \alpha_{x,y,t}^{i^2} + K_4 \alpha_{x,y,t}^{i^3} + L_1 \alpha_{x,y,t}^i \right) &\geq 0 \\ 1 - k \left(\frac{4D^i}{h^2} + K_1 + L_1 \alpha_{x,y,t}^m + B_2 \alpha_{x,y,t}^i \right) &\geq 0 \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (F.8)$$

となる．式 (F.8) を整理すれば，Neumann の安定条件として次式を得る．

$$\left. \begin{aligned} k^m &\leq \frac{1}{4D^m/h^2 + K_0 + K_2\alpha_{x,y,t}^i + K_3\alpha_{x,y,t}^{i^2} + K_4\alpha_{x,y,t}^{i^3} + L_1\alpha_{x,y,t}^i} \\ k^i &\leq \frac{1}{4D^i/h^2 + K_1 + L_1\alpha_{x,y,t}^i + B_2\alpha_{x,y,t}^i} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (F.9)$$

F.3 拡張転位

Burgers ベクトルが b の完全転位は，次の条件を満たす Burgers ベクトル b_1, b_2, \dots をもった複数個の転位に分解する方が安定である．式 F.10

$$b = \sum_i b_i \dots\dots\dots (F.10)$$

$$b^2 > \sum_i b_i^2 \dots\dots\dots (F.11)$$

いま b が基本並進ベクトルで b_i が非基本並進ベクトルである場合を考えると，このような分解によってきた複数個の部分転位の間には積層欠陥が作り出される．もし積層欠陥のエネルギーが十分小さければ，そのような積層欠陥がそれら部分転位の間につくり出されたとしても， b なる Burgers ベクトルをもった完全転位は分解して存在する方がエネルギー的に有利である．このように，完全転位が積層欠陥によって隔てられた複数個の部分転位に分解して存在している場合に，それを拡張転位という．

面心立方型結晶の中で，(11 $\bar{1}$) に平行な原子面上に存在する Burgers ベクトルが $b = (a/2)[110]$ の完全転位は，Burgers ベクトルがそれぞれ $b_1 = (a/6)[12\bar{1}]$ と $b_2 = (a/6)[211]$ の 2 本の Shockley の部分転位に分解することができる．図 F.1 に示すように， b_1 の Burgers ベクトルの転位が積層欠陥をつくり出し， b_2 の Burgers ベクトルの転位がそれを消す．それらの間にはさまれた帯状の領域にだけ積層欠陥が存在する．積層欠陥の両端にある部分転位の間距離を拡張転位の幅という．

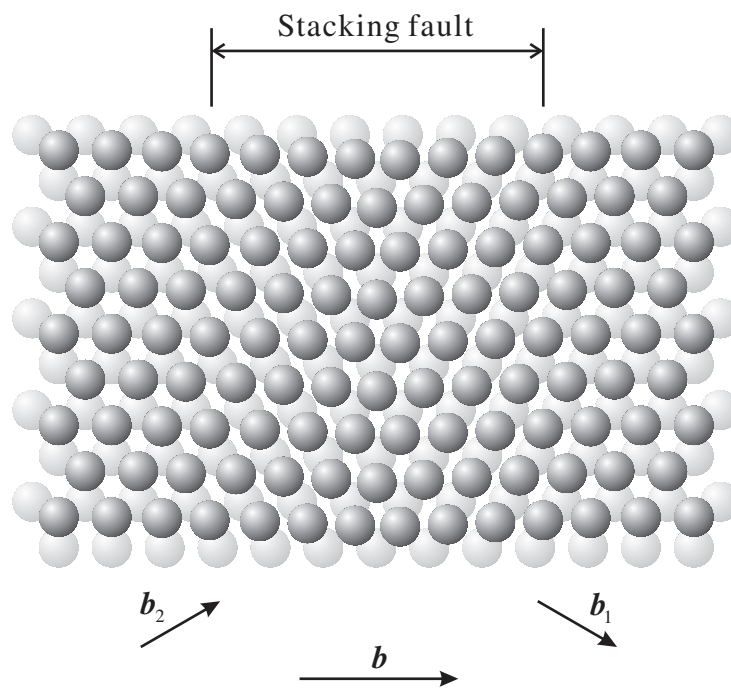


Fig. F.1 Stacking fault

補足 G

第 7 章の補足

G.1 連立一次方程式の解法

FEM の解析は最終的には大規模な連立一次方程式を解くことに帰着される．FEM における方程式の特徴は，非零成分が対角付近に集まる疎行列で記述されることである．解の精度を上げるためにより細かく多数の要素分割を用いるほどマトリクスのサイズが大きくなる．したがって，実際の解析ではある限られたコンピュータ性能のもとでいかに大規模疎行列を解くかということが重要な課題となる．従来から様々な連立一次方程式の解法が提案され使用されている．解法には大きく分けて，直接法と反復法がある．本数値解析では，直接法の 1 つであるスカイライン法を導入している．スカイライン法はガウスの消去法を改良したものであり，比較的記憶要領を消費しないというメリットがある．

補足H

第8章の補足

H.1 介在物周辺の転位描像

本研究では、主に平面ひずみ問題を想定しているため、GN 結晶欠陥において算出不可能な成分が生じる。そこで、母材中に立方体あるいは球状の介在物を含んだ材料を想定した 3 次元 GN 転位-結晶塑性解析を行い、介在物周辺における GN 結晶欠陥の各成分を可視化する。得られた結果に基づいて、GN 結晶欠陥における各成分の幾何学的意味について考察する。

H.1.1 材料定数および境界条件

解析モデルとして図 H.1(a) のような 1 辺 30 μm の立方体状の FCC 単結晶の中心部に図 H.1(c) のような 1 辺が 4 μm の立方体介在物、あるいは図 H.1(d) のような直径が 4 μm の球状介在物を含むものを考える。要素は 8 節点アイソパラメトリック要素を用い、要素は図 H.1(b) のように介在物周辺の要素が他の領域と比較して小さくなるように、各辺が 20 分割されている。境界条件としては、 z 軸方向に 0.3% の強制変位を与え、端面は自由端としている。変位 u と荷重 T を用いて表せば

$$\left. \begin{array}{l} T_x = T_y = T_z = 0 \quad \text{at } x = 0, x = L \\ T_x = T_y = T_z = 0 \quad \text{at } y = 0, y = L \\ u_z = 0, \quad T_x = 0, \quad T_y = 0 \quad \text{at } z = 0 \\ u_z = U, \quad T_x = 0, \quad T_y = 0 \quad \text{at } z = L \end{array} \right\} \dots\dots\dots (H.1)$$

となる。ここで、 U は強制変位、 $L = 30\mu\text{m}$ は 1 辺の長さである。また、 z 方向の反力 T は次式で与えられる。

$$T = \frac{1}{L^2} \int_0^L \int_0^L T_z(x, y, L) dx dy \dots\dots\dots (H.2)$$

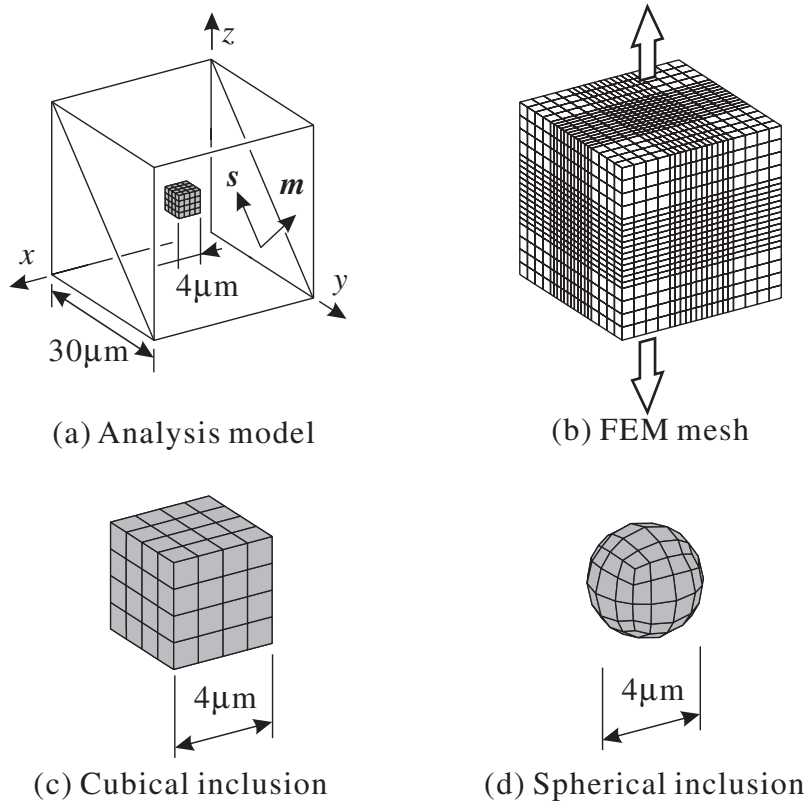


Fig. H.1 Inclusion in cubical crystal

端面の強制変形速度は $\dot{U} = \dot{\gamma}_0 L$ で与えられる．平面ひずみ問題と同様に弾性係数の等方性を仮定する．母材の材料定数および数値パラメータはニッケル単結晶のものを用いる．

$$\left. \begin{aligned}
 \tau_0 &= 50 \text{MPa}, & E &= 210 \text{GPa}, & \nu &= 0.3, \\
 \rho_0^{(a)} &= 0.001 / \mu\text{m}^2, & L_0^{(a)} &= 100 \mu\text{m}, & \tilde{b} &= 24.9 \text{nm}, \\
 m &= 0.005, & \dot{\gamma}_0 &= 0.001 / \text{s}, & \theta &= 1, \\
 a &= 0.6, & c &= 6
 \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots \text{(H.3)}$$

介在物に対しては母材と同様のものを用いるが，臨界分解せん断応力の値を母材の 10 倍，すなわち $\tau_0 = 500 \text{MPa}$ とし，塑性変形がほとんど起こらないと材料であることを想定している．また，単結晶の 3 段階硬化は考慮しておらず，転位平均飛行距離は一定と仮定してある．なお，主すべり系の結晶基底 s, m は図 H.1(a) のように定める．

H.1.2 解析結果および考察

一般化 GN 転位密度を可視化するために，Ohashi⁽²³⁾ と同様の手法を用いる．まず，混合転位の転位線方向 l を図 H.2(a) のように，一般化 GN 転位密度のらせん成分と刃状成分を用いて表す．さらに，転位線方向 l と結晶基底 t 方向の角度を φ とし， φ により図 H.2(b) のように色を指定することにより，混合転位を

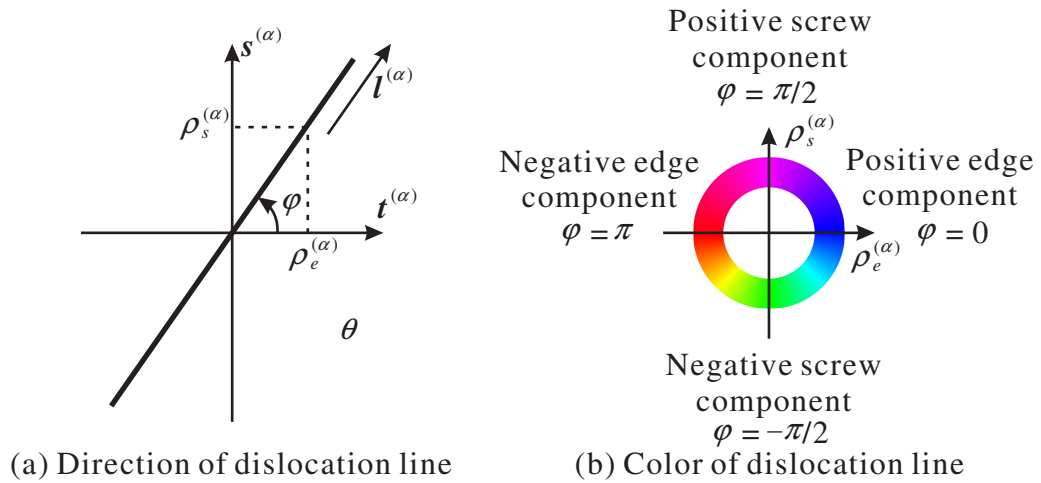


Fig. H.2 Angle and color of dislocation segment

描写する．すなわち，紫色のものは正のらせん転位，緑色のものは負のらせん転位，青色の線は正の刃状転位，赤色のものは負の刃状転位をそれぞれ表し，その中間色で混合転位が表される．さらに，転位密度の大きさは転位線の長さで表され，図 H.3(a) のように一般化 GN 転位密度のノルムが $\rho_\alpha \leq 0.8/\mu\text{m}^2$ のときは転位線を描かず， $0.8/\mu\text{m}^2 < \rho_\alpha < 4/\mu\text{m}^2$ のときは転位線の長さを $1\mu\text{m}$ まで線形に増加させ， $4/\mu\text{m}^2 \leq \rho_\alpha$ のときは転位線の長さを $1\mu\text{m}$ として転位線を描写する．

図 H.4 は伸び率 0.3% における介在物の形状が立方体のときの一般化 GN 転位密度の分布図とその拡大図である．らせん転位，刃状転位およびそれらの混合転位が介在物を囲むように堆積しているのがわかる．図 H.5 は伸び率 0.3% における介在物の形状が球形のときの一般化 GN 転位密度の分布図とその拡大図である．要素形状の違いから生じる分布の違いはあるものの，らせん転位，刃状転位およびそれらの混合転位が堆積している部位は図 H.4 の立方体介在物のときとよく似たものとなっている．次に，一般化 GN 転位密度の分布を図 H.6(a) の p1 ~ p4 に示すようなすべり面上にある要素の一般化 GN 転位密度の値のみに注目する．図 H.6(a) の矢視方向から，介在物中心付近の主すべり面 p1 ~ p4 上の一般化 GN 転位密度の分布を図示したものが図 H.7 および図 H.8 である．なお，図 H.6(b) ように混合転位の成分から転位線の向きを設定し，図 H.7 および図 H.8 においては転位線の向きを矢印で示す．図 H.7(b) および図 H.8(b) を見ると，どちらも介在物近傍 (i) において転位線が介在物を囲むようなループ状となっており，補足 E.1 で示した Orowan ループに似た転位ループが観察できる．また，介在物から少し離れた部位 (ii) においては刃状転位成分が逆符号となっており，転位線の方向も逆になっている．図 H.7(a) ~ (d) および図 H.8(a) ~ (d) は要素の形状による違いはあるが，p1 ~ p4 のどのすべり面においても堆積している転位の成分は酷似しており分布状況の傾向に大きな違いは見られない．

図 H.9 から図 H.12 は立方体介在物周辺の，図 H.13 ~ 図 H.16 は球形介在物周辺の GN 不適合度の各成分の分布状況およびその拡大図である．一般化 GN 転位密度と同様に GN 不適合度の値の大きさを線素の長さで表す．ただし，線素の長さは図 H.3(b) のように GN 不適合度の成分の値の絶対値が $\eta \leq 0.2/\mu\text{m}^2$ のときは転位線を描かず， $0.2/\mu\text{m}^2 < \eta < 0.5/\mu\text{m}^2$ のときは転位線の長さを $1\mu\text{m}$ まで比例させ， $0.5/\mu\text{m}^2 \leq \rho_G$ のときは転位線の長さを $1\mu\text{m}$ として転位線を描写する．また，正の GN 不適合度成分を赤色で表し，負の GN 不適合度成分を青色で表すことにより符号の区別をつけ，その濃淡により値の大きさを示す．線素の方向に関しては，らせん転位の対を表す η_{ds} 成分および η_{cs} 成分に関してはらせん転位と同方位で表し，刃

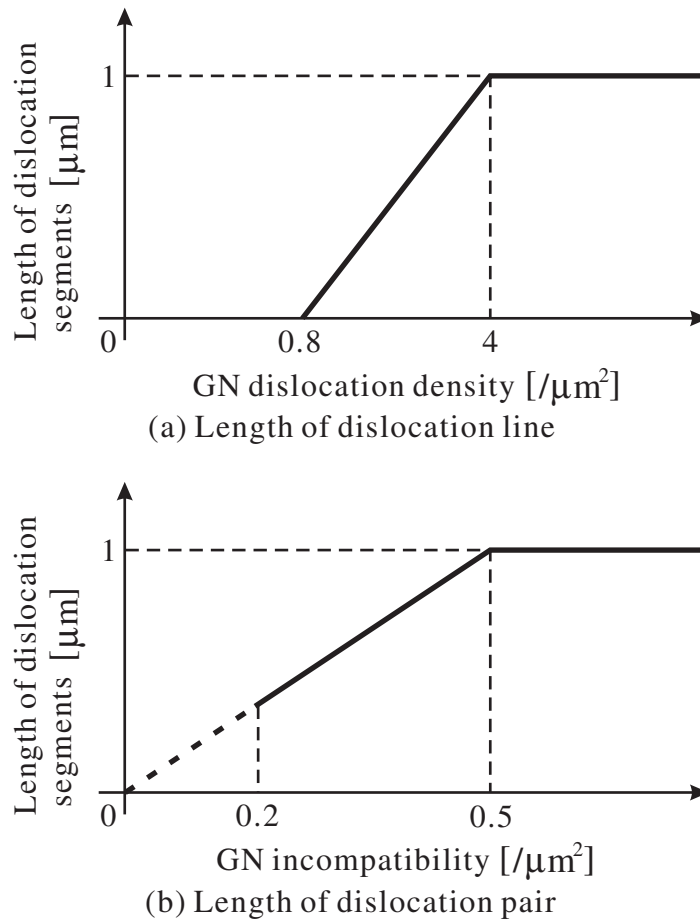


Fig. H.3 Length of dislocation segments

状転位の対を表す η_{de} 成分および η_{ce} 成分に関しては刃状転位と同方位で表現する．GN 不適合度の η_{ds} の分布を示す図 H.9 を見ると介在物周辺で GN 不適合度の値が高くなっているが、比較的値が高いのは介在物の x 方向の領域である．GN 不適合度の η_{ds} 成分の表すものは異なるすべり面上にあるらせん転位の対である．図 H.4 の一般化 GN 転位密度の分布を見ると η_{ds} 成分の値が大きくなっている領域に堆積しているのは主にらせん転位であることから、GN 転位密度ではカウントされていないらせん転位が転位対を形成していることがわかる．同様のことは GN 不適合度の η_{de} 成分の分布を示す図 H.11 からいえる．介在物周辺で GN 不適合度の値が高くなっているが、介在物の x 方向の領域では極端に値が低くなっている．GN 不適合度の η_{de} 成分の表すものは異なるすべり面上にある刃状転位の対、すなわちダイポールである．図 H.4 の一般化 GN 転位密度の分布を見ると刃状転位が多く堆積している部位で η_{ds} 成分の値が大きくなっている．このことから GN 転位密度ではダイポールを表現できず、このような結晶欠陥の情報を転位密度に反映させるためには GN 不適合度を考慮する必要があるといえる．一方、GN 不適合度の η_{ds} 成分および η_{de} 成分の分布を示す図 H.9 および図 H.11 が介在物からやや離れた領域で値が高くなっているのに対して、 η_{cs} 成分および η_{ce} 成分の分布を示す図 H.10 および図 H.12 では介在物近傍で値が高くなっている． η_{cs} 成分および η_{ce} 成分は同一すべり面上にある転位対を表すため、介在物にせき止められ次々にたまっていく短範囲における転位の対を表しており、 η_{ds} 成分および η_{de} 成分は異なるすべり面上にある長範囲におけ

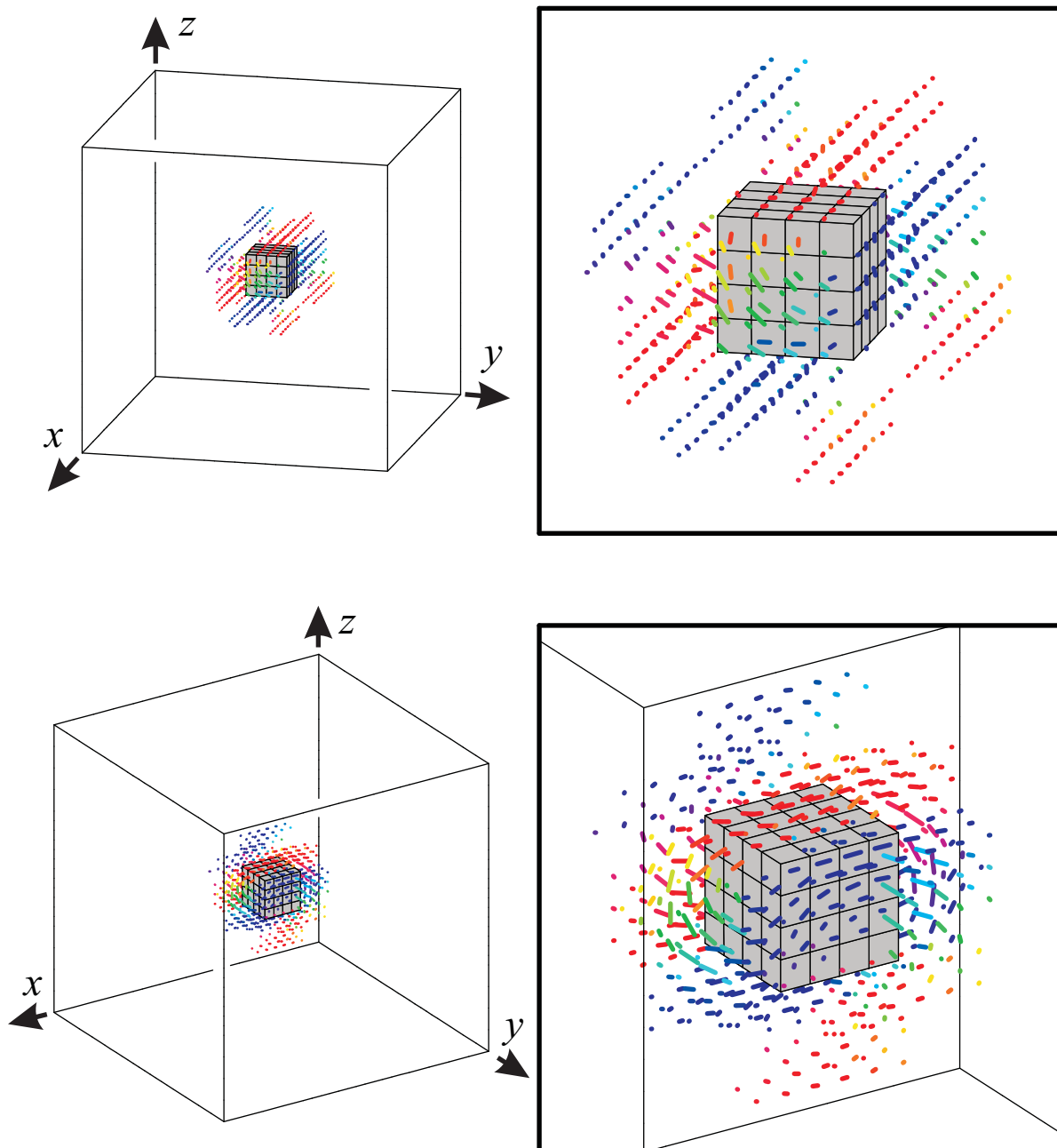


Fig. H.4 Distribution of GN dislocation around cubical inclusion

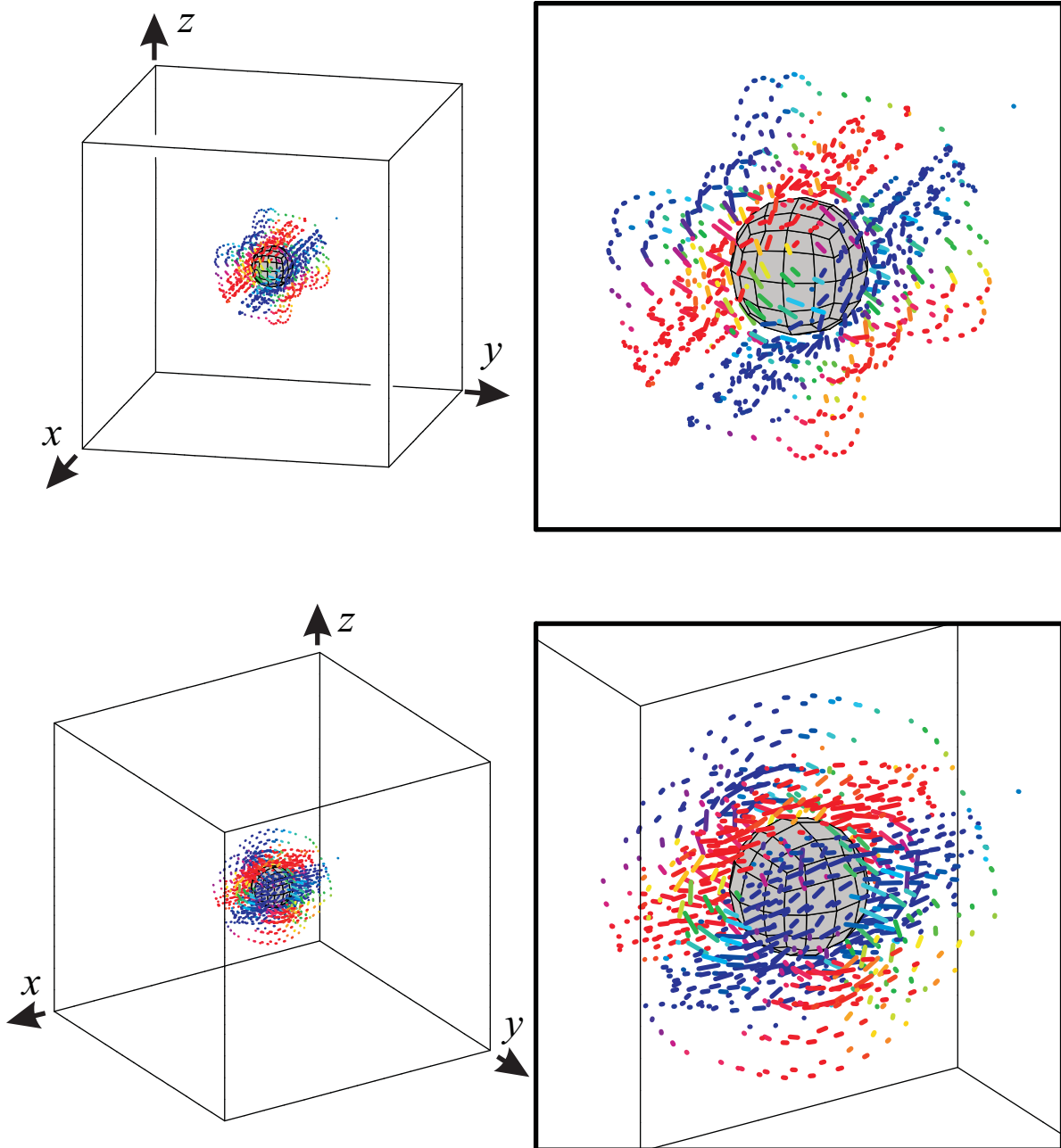


Fig. H.5 Distribution of GN dislocation around spherical inclusion

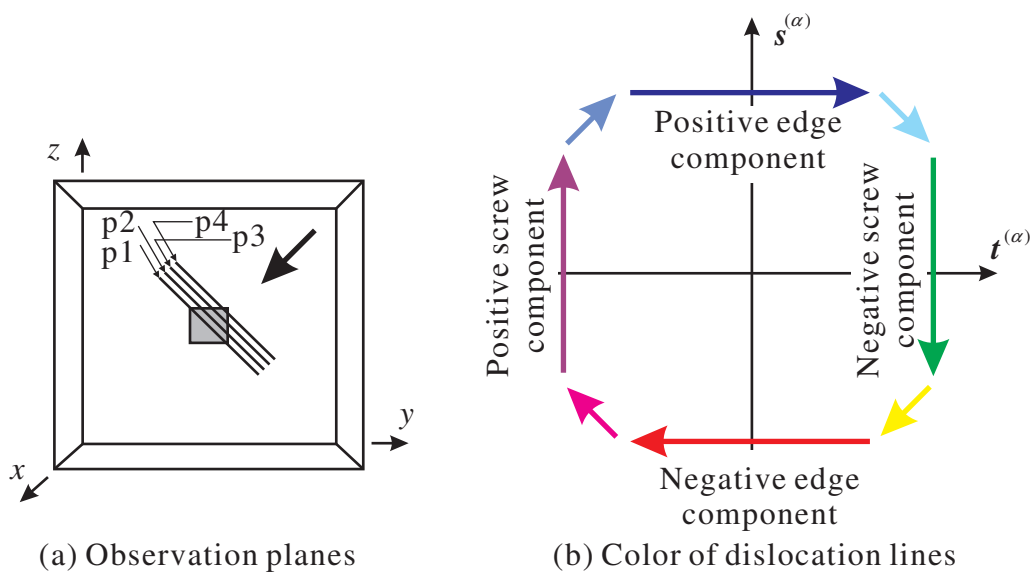


Fig. H.6 Observed slip planes and dislocation loop

る転位の対を表していると考えられる。したがって、GN 不適合度のどの成分も欠かすことなく転位密度に考慮する必要があるといえる。図 H.13～図 H.16 の介在物形状が球形のときにも同様のことがいえるが、介在物形状が立方体のときに比べてらせん転位、刃状転位の明確な区別が付きにくいいため、GN 不適合度の分布は広い領域に堆積している。しかしながら、GN 不適合度の希薄な領域、値の高い領域、さらには符号までが介在物の形状によらず、酷似したものとなっている。

図 H.17 は本解析で得られた荷重-伸び線図であり、介在物の形状によらず、転位の蓄積の影響により加工硬化が生じているのがわかる。

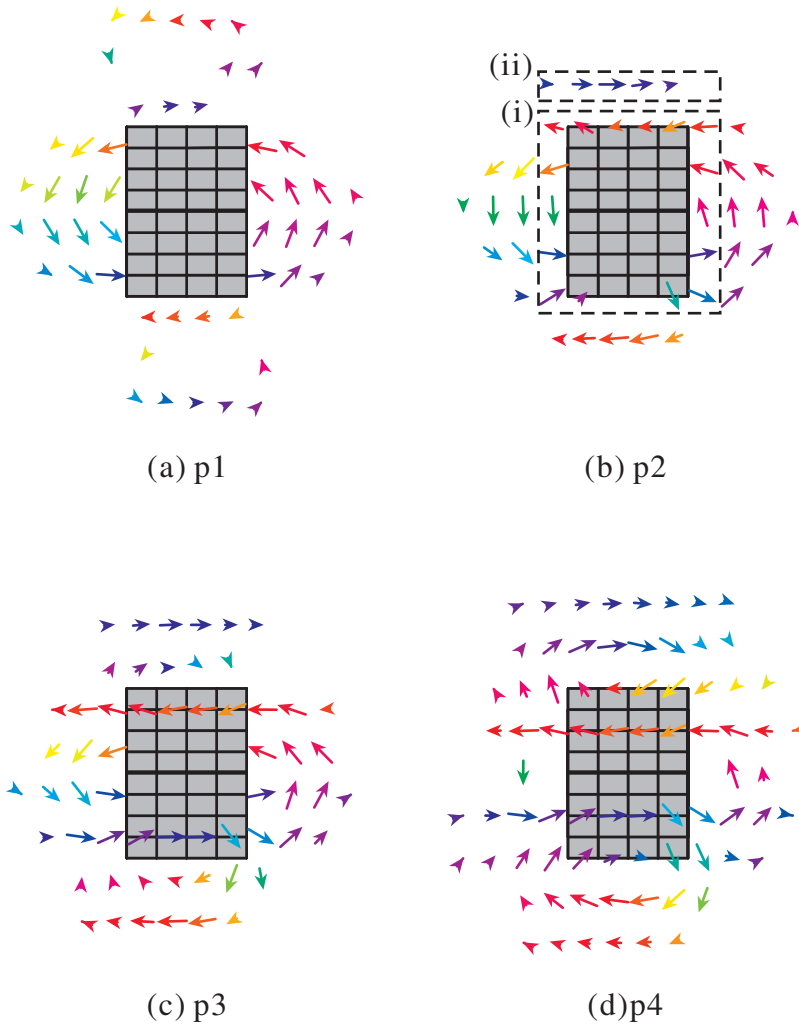


Fig. H.7 Distribution of GN dislocation around cubical inclusion

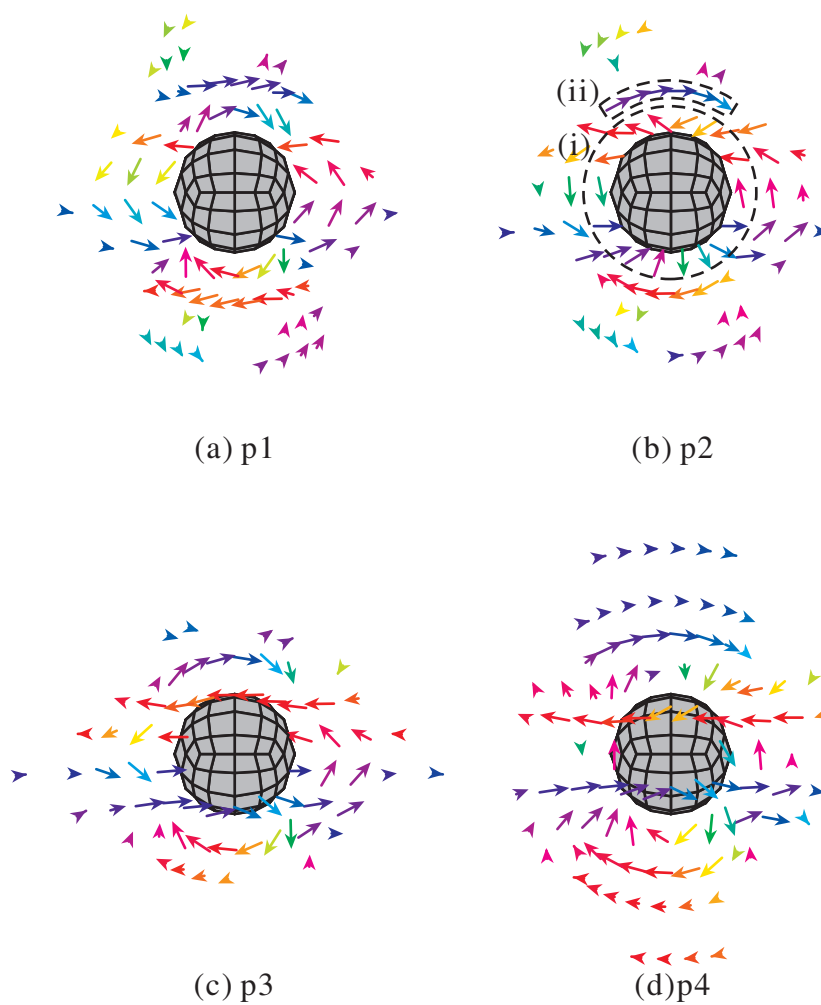


Fig. H.8 Distribution of GN dislocation around spherical inclusion

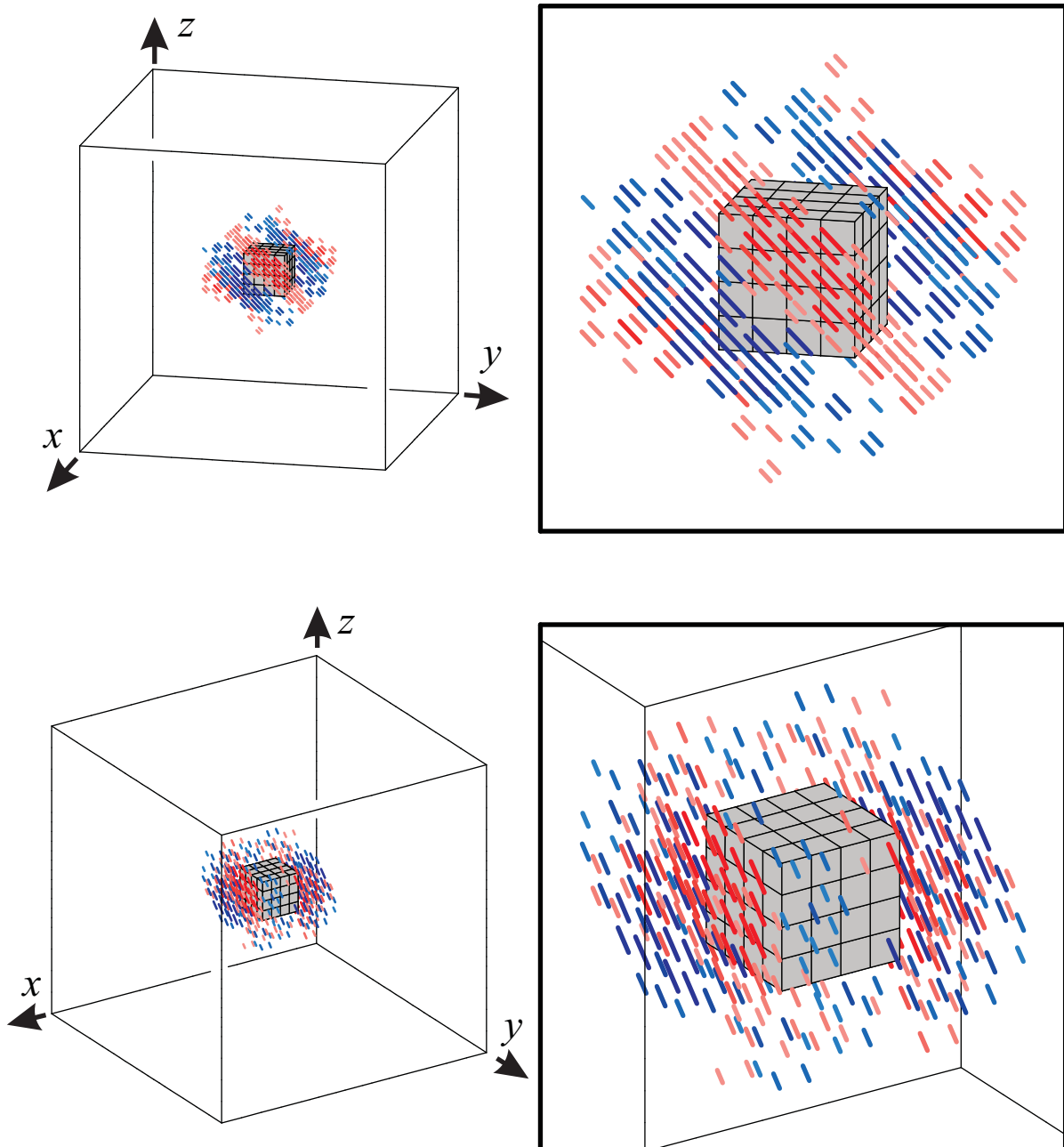


Fig. H.9 Distribution of η_{cs} component of GN incompatibility around cubical inclusion

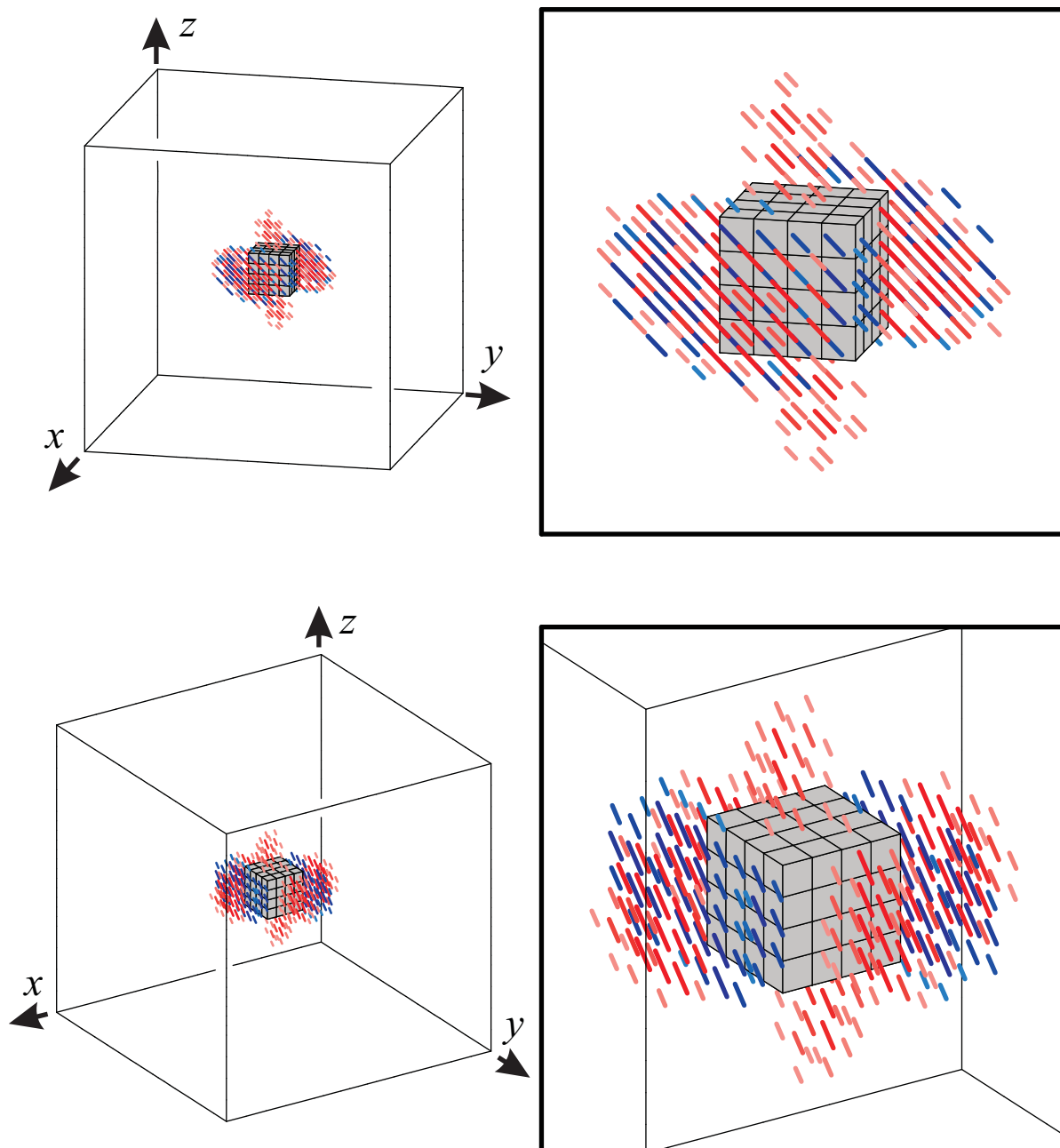


Fig. H.10 Distribution of η_{cs} component of GN incompatibility around cubical inclusion

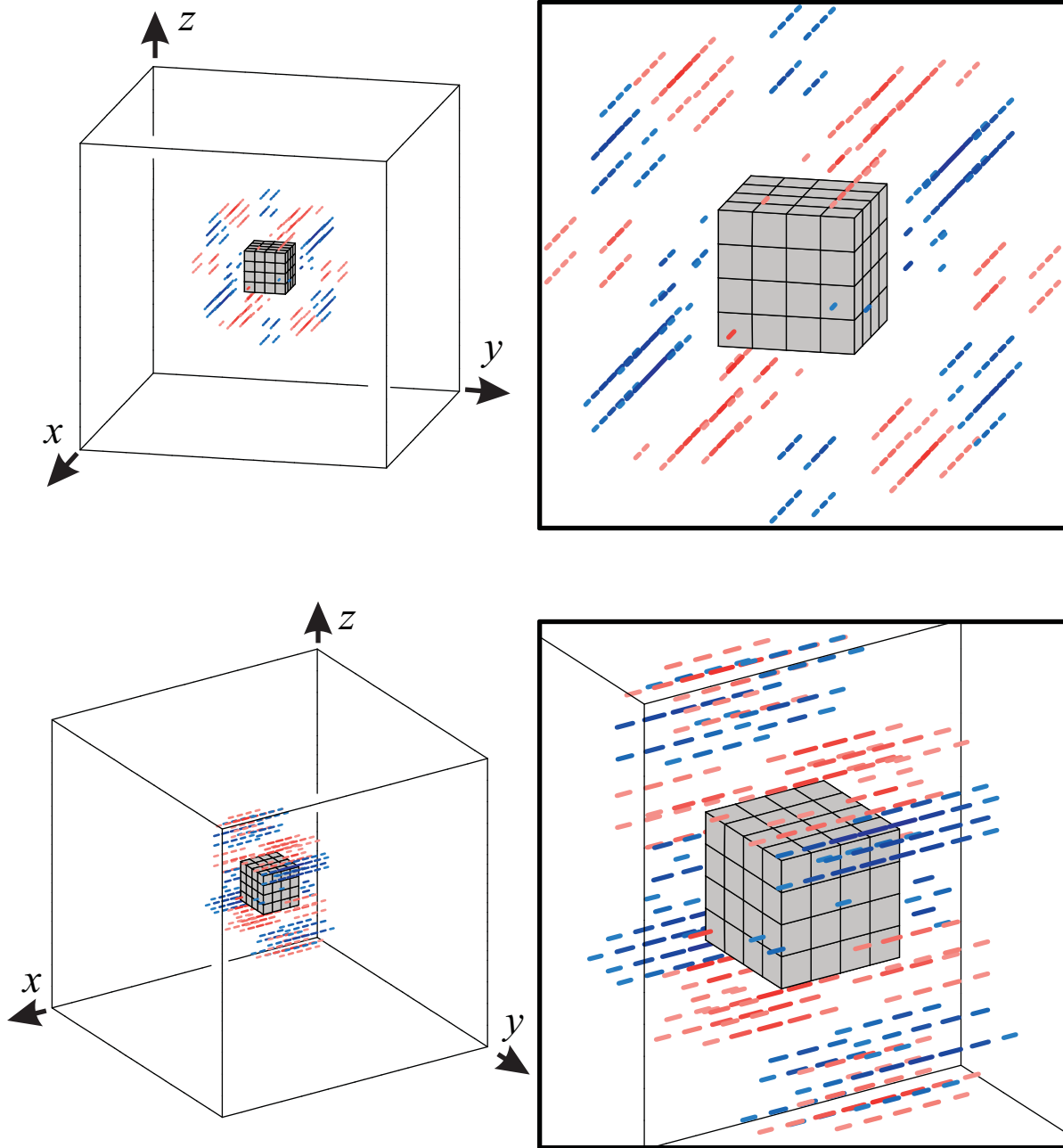


Fig. H.11 Distribution of η_{de} component of GN incompatibility around cubical inclusion

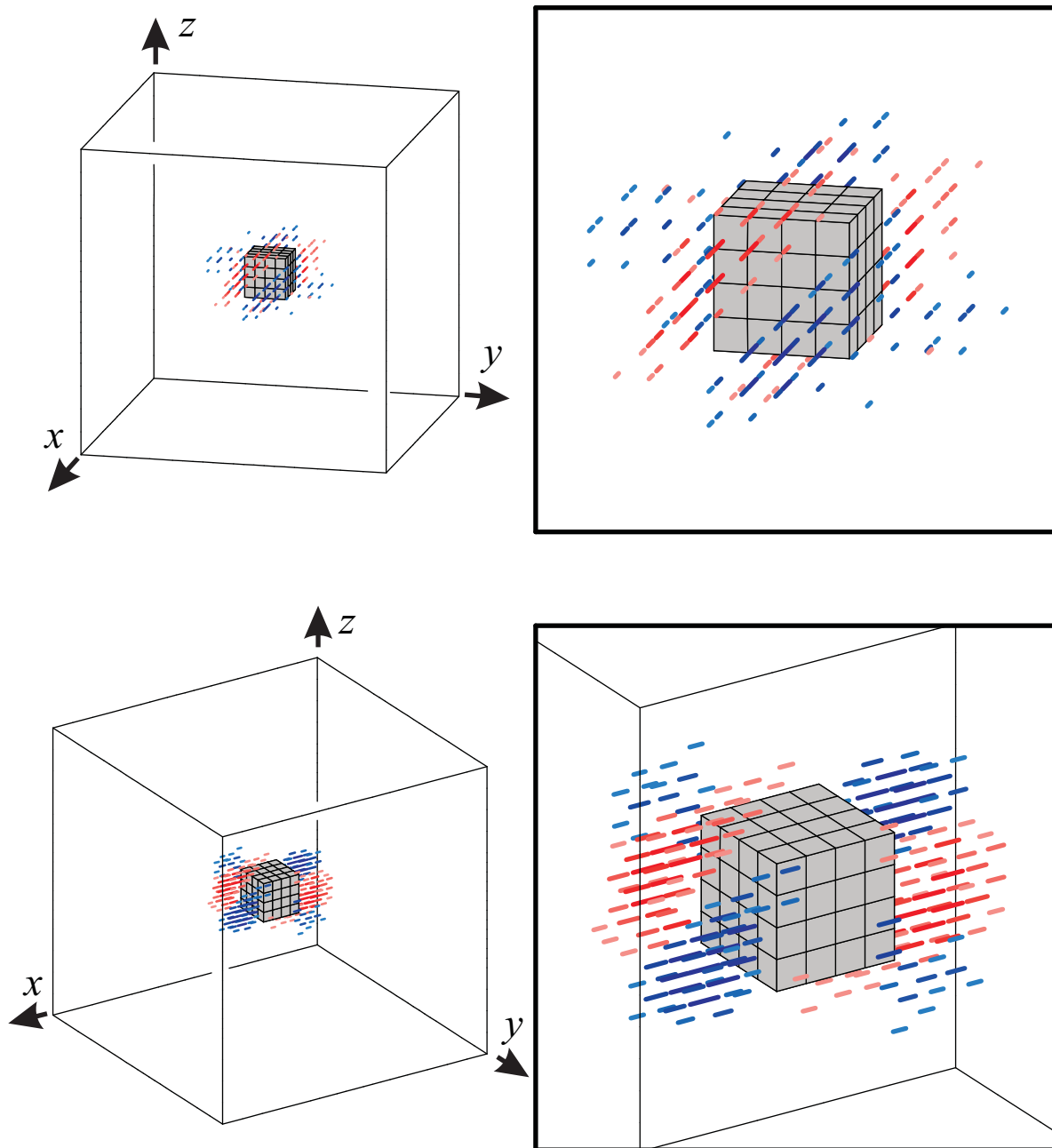


Fig. H.12 Distribution of η_{ce} component of GN incompatibility around cubical inclusion

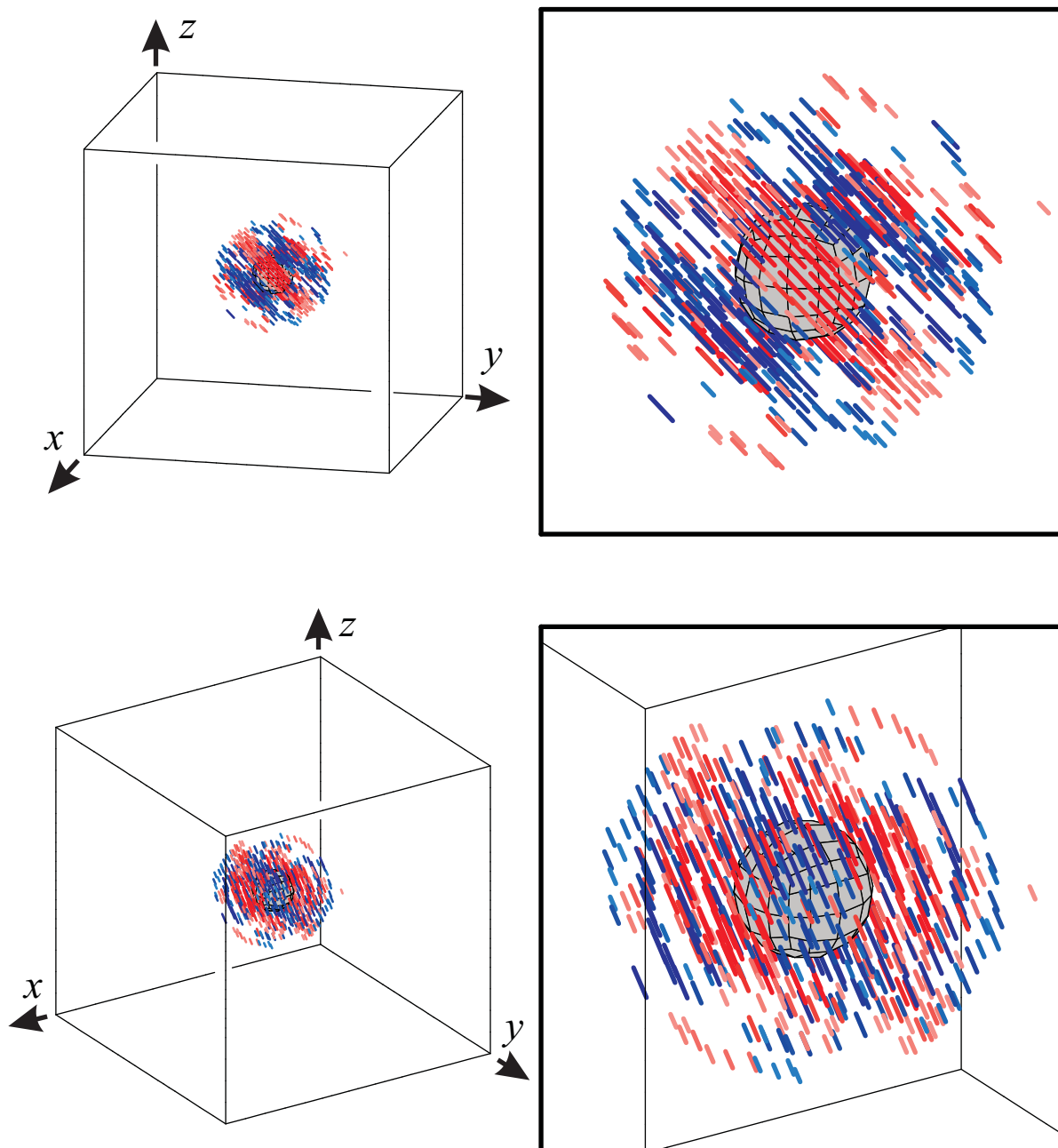


Fig. H.13 Distribution of η_{ds} component of GN incompatibility around spherical inclusion

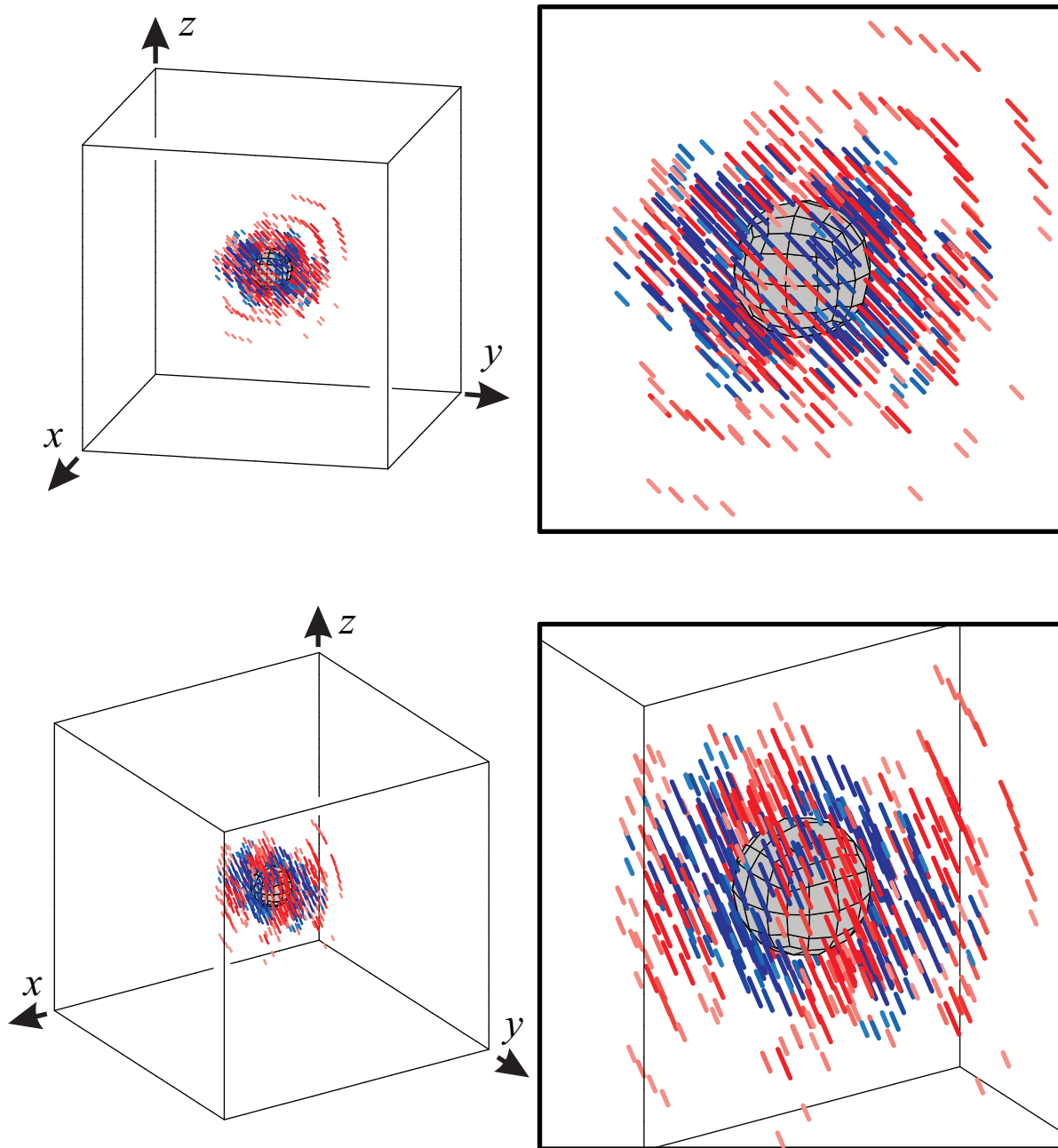


Fig. H.14 Distribution of η_{cs} component of GN incompatibility around spherical inclusion

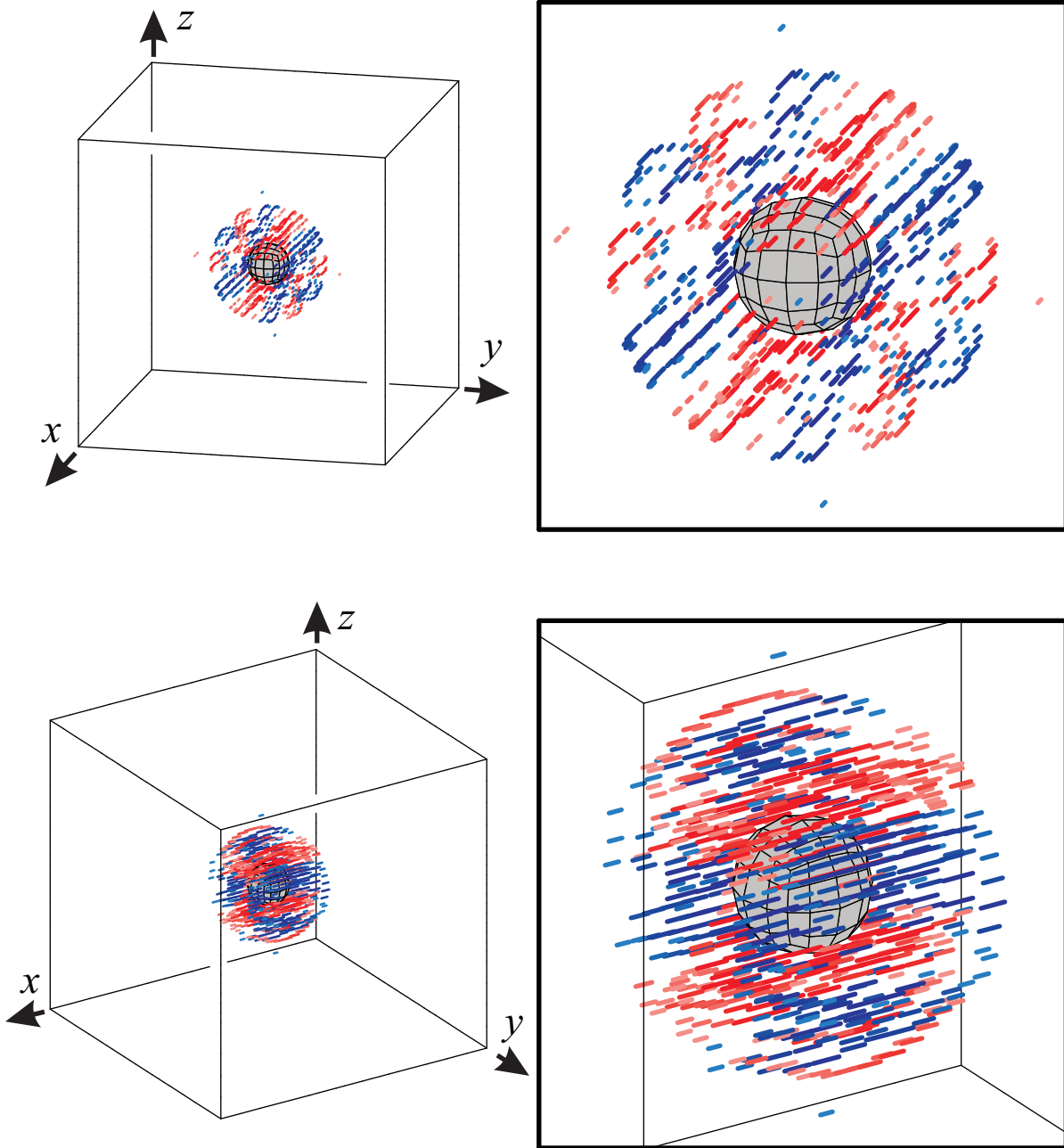


Fig. H.15 Distribution of η_{de} component of GN incompatibility around spherical inclusion

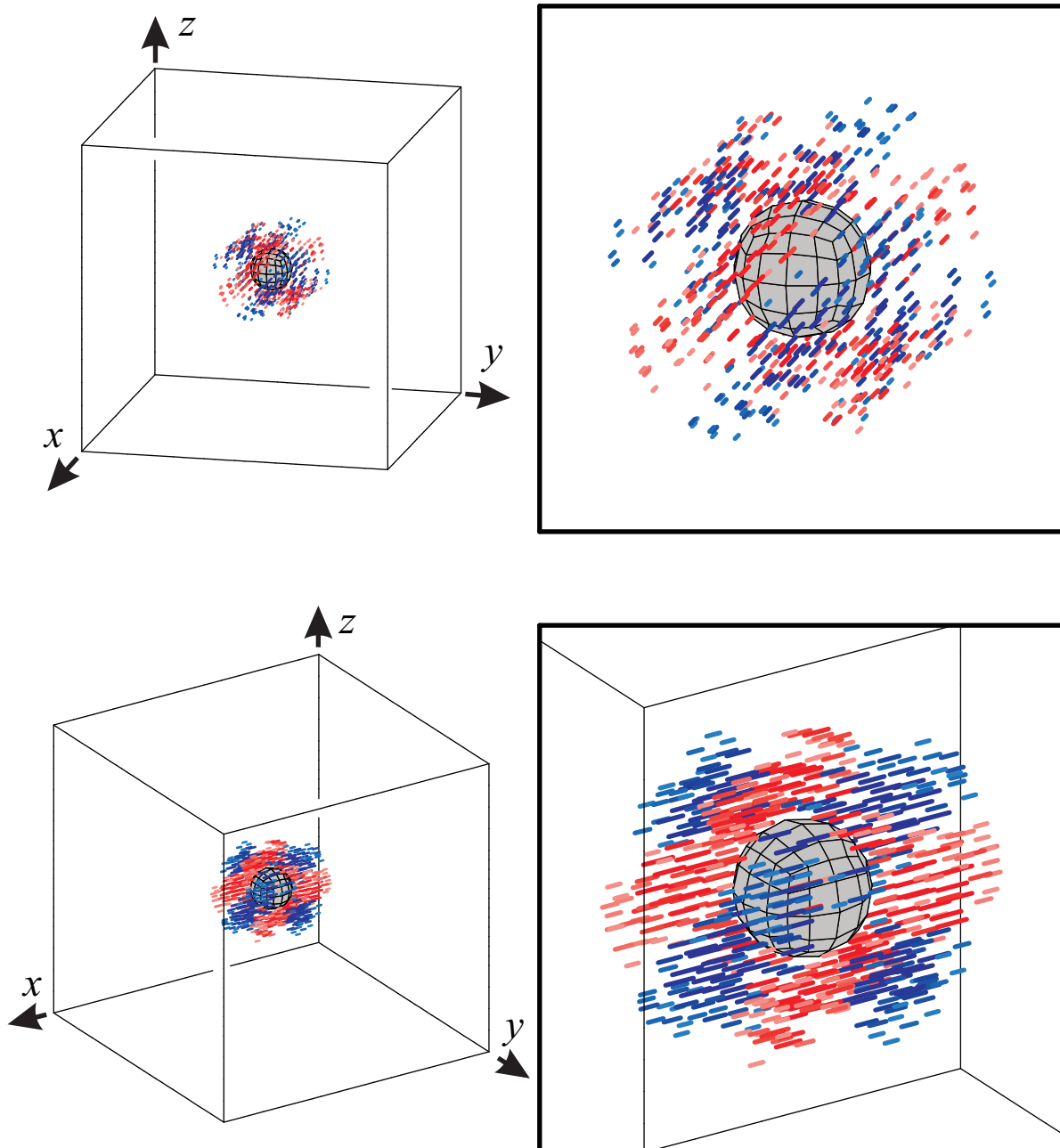


Fig. H.16 Distribution of η_{ce} component of GN incompatibility around spherical inclusion

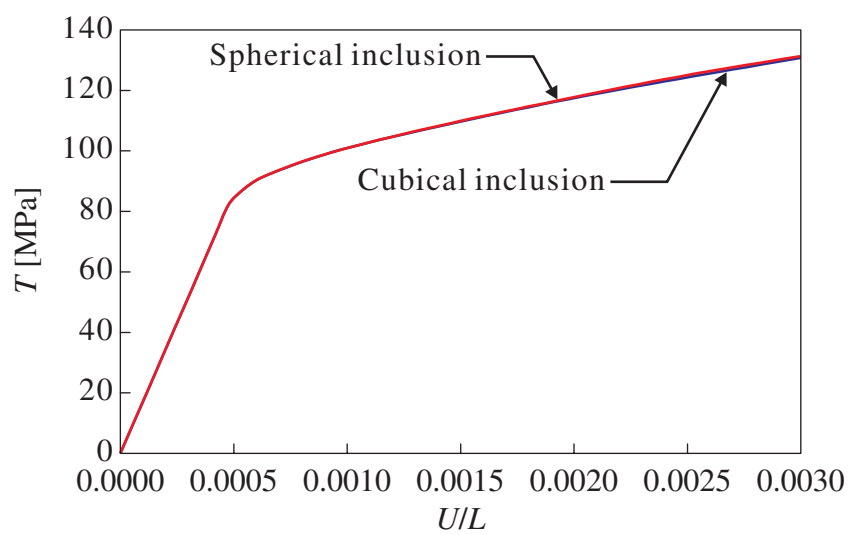


Fig. H.17 Nominal stress versus nominal strain curve