

学位論文 博士（工学）

FCC 超微細粒金属の力学特性に関する
トリプルスケール転位-結晶塑性モデリングおよび
大変形 FEM シミュレーション

2010 年度

慶應義塾大学大学院理工学研究科

黒澤 瑛介

目次

第1章 緒言	1
1.1 本研究の背景	1
1.1.1 多結晶金属の階層構造	1
1.1.2 超微細粒金属	3
1.1.3 マルチスケールモデリング・シミュレーション	5
1.1.4 結晶粒微細化に伴う金属の材料特性の変化に関する計算力学的研究	8
1.2 本研究の目的	9
1.3 本論文の構成	9
1.4 本論文で用いる記号	12
第2章 運動学	13
2.1 変形こう配の分解	13
2.2 ひずみの弾・塑性分解	15
2.2.1 ひずみの定義	15
2.2.2 弾・塑性ひずみの各配置への変換則	15
2.3 ひずみ速度の弾・塑性分解	16
2.3.1 微小弾性変形の仮定	16
2.3.2 各配置における弾・塑性のひずみ速度の導出	16
2.4 変形速度の弾・塑性分解	17
2.4.1 速度こう配の弾・塑性分解	17
2.4.2 各配置における変形速度	18
2.4.3 ひずみ速度と変形速度	18
2.4.4 ひずみ尺度と変形尺度	19
2.5 塑性変形速度および塑性スピンの導出	20
2.5.1 すべりテンソルの定義	20
2.5.2 塑性変形速度および塑性スピン	20
2.6 転位密度の幾何学的表現	21
2.6.1 GN転位密度テンソル	23
2.6.2 GN不適合度	26
2.6.3 GN結晶欠陥の成分	28
第3章 材料硬化に関する熱力学的検討	30
3.1 内力の定義	30
3.2 保存則	31

3.2.1	連続の式	31
3.2.2	力学的境界条件および釣合い方程式	32
3.2.3	エネルギー方程式	33
3.2.4	エントロピー不等式	33
3.3	弾性構成式の導出	34
3.3.1	Clausius-Duhemの不等式	34
3.3.2	保存部分の熱力学的制限	35
3.3.3	速度形弾性構成式	36
3.4	分解せん断応力の引数	36
第4章	転位-結晶塑性論	38
4.1	転位密度の定義	38
4.2	結晶塑性構成式の導出	40
4.3	結晶の変形場への転位密度の導入方法	41
4.3.1	すべり速度硬化則	41
4.3.2	Bailey-Hirschの式	42
4.3.3	転位密度を導入した硬化係数の導出	42
4.3.4	硬化係数への各種転位密度の導入方法	44
4.4	結晶粒内の転位の枯渇状態に対応した臨界分解せん断応力モデル	46
4.4.1	従来の初期粒径依存形臨界分解せん断応力モデル	46
4.4.2	転位源としての粒界の役割を考慮した臨界分解せん断応力モデル	49
4.5	接線係数法	52
4.6	結晶基底ベクトルの更新	54
第5章	結晶塑性均質化理論	55
5.1	結晶粒スケールにおけるミクロ関係式	56
5.2	マクロ変数の定義	57
5.3	均質化理論	57
5.3.1	周期材料に対する仮想仕事率の原理	57
5.3.2	ミクロ構造の支配方程式および均質化結晶塑性構成式	58
5.4	マクロ構造における Updated Lagrange形式の仮想仕事率の原理	59
5.5	局所化問題	60
第6章	有限要素法による離散定式化	62
6.1	2次元連続体要素の形状関数	62
6.2	平面ひずみ問題	65
6.3	剛性方程式の導出	67
6.3.1	ミクロ剛性方程式	67
6.3.2	マクロ剛性方程式	69
6.3.3	次数低減積分	71
6.4	GN結晶欠陥の数値計算	73
6.5	転位-結晶塑性解析における解析モデル	75

6.5.1	Asaroの平面2重すべりモデル	75
6.5.2	擬似3次元モデル	75
6.6	トリプルスケール転位-結晶塑性解析のアルゴリズム	76
第7章	トリプルスケール転位-結晶塑性FEM解析	79
7.1	ユニットセル内部の結晶粒数に関する検討	80
7.1.1	解析条件	80
7.1.2	解析結果および考察	82
7.2	結晶の硬化係数への転位密度の導入方法に関する検討	84
7.2.1	解析条件	85
7.2.2	解析結果および考察	87
7.3	FCC微細粒焼鈍材に対するトリプルスケール転位-結晶塑性解析	99
7.3.1	解析条件	99
7.3.2	解析結果および考察	102
7.4	マクロ構造における要素選択に関する検討	109
7.4.1	解析条件	109
7.4.2	解析結果および考察	111
7.5	FCC超微細粒金属に対する擬似3次元トリプルスケール転位-結晶塑性解析	117
7.5.1	解析条件	118
7.5.2	解析結果および考察	120
第8章	結言	138
8.1	本論文の結言	138
8.2	今後の課題と展開	139
8.2.1	ナノスケールシミュレーションによる検討	139
8.2.2	平面応力問題および3次元問題に関する検討	139
8.2.3	複雑な変形状態を扱う問題への応用	140
8.2.4	複雑な形状を有する構造物への応用	141
8.2.5	BCCおよびHCP金属への応用	141
8.2.6	Bimodal構造を有する金属への応用	141
	謝辞	143
	参考文献	144
	本研究に関する原著論文および口頭発表論文	150
補足A	第1章の補足	152
A.1	転位の分類	152
A.2	Frank-Read源	152
A.3	降伏点降下現象	154
A.4	Lüders帯の伝ば	154
A.5	ダイポール	155

A.6	らせん転位の二重交差すべり	156
補足 B	第2章の補足	157
B.1	FCC 結晶のすべり系	157
B.2	Ashby による GN 転位密度の幾何学的意味	158
補足 C	第3章の補足	159
C.1	異方性弾性係数	159
C.2	式 (3.48) の導出	160
C.2.1	第1項のスカラー量表示	160
C.2.2	第2項のスカラー量表示	161
C.2.3	第3項のスカラー量表示	161
C.2.4	第4項のスカラー量表示	161
C.2.5	スカラー量表示による Clausius-Duhem の不等式	162
補足 D	第4章の補足	163
D.1	転位運動の阻害と加工硬化	163
D.1.1	自己硬化	163
D.1.2	潜在硬化	164
D.2	従来の結晶塑性論における硬化係数モデル	164
D.3	転位運動の相互作用	165
D.3.1	転位の切り合い運動	165
D.3.2	転位運動の相互作用による影響	165
D.3.3	相互作用行列	169
D.4	分解せん断応力速度の導出	170
補足 E	第5章の補足	171
E.1	Updated Lagrange 形式の第1種 Piola-Kirchhoff 応力	171
E.2	マクロ応力速度の関係式	172
補足 F	第7章の補足	173
F.1	巨視的な局所変形のメッシュ依存性	173
F.1.1	マクロ構造における積分点の配置の不規則性による影響	173
F.1.2	マクロ構造におけるメッシュサイズの影響	175
F.2	巨視的な局所変形と Y-周期性	176

第1章

緒言

1.1 本研究の背景

1.1.1 多結晶金属の階層構造

多結晶金属は，図1.1のような多重階層構造を有している．肉眼で見ることのできる m-mm オーダーの巨視的スケールで観察すると，図1.1(a)のように一様均質な物体であるかのように感じる．少し解像度を上げて mm- μ m オーダーで観察すると，それが多くの結晶粒で構成されていることがわかる [図1.1(b)]．さらに nm オーダーにまで解像度を上げると，各結晶粒は原子によって構成されていることが確認できる [図1.1(c)]．また，結晶粒内では原子が完全に規則正しく配置されておらず，必ず何らかの結晶欠陥が存在する．特に，局所的な原子配列の乱れである転位 (図1.1(c) 中の記号「 \perp 」部) 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．金属結晶のすべり変形は，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で生じ，このような結晶のせん断変形のことを「すべり」と呼ぶ．図1.2のように，転位が結晶内を移動することによって，結果的にすべり面を境に結晶がせん断変形を受けた状態となる．したがって，転位が通過した領域にはすべりが発生することになり，転位は「すべり面上で，すでにすべった領域とまだすべっていない領域との境界線」と定義することもできる．なお，転位はその性質により，刃状転位，らせん転位および混合転位とに分類することができる [補足A.1]．また，通常の

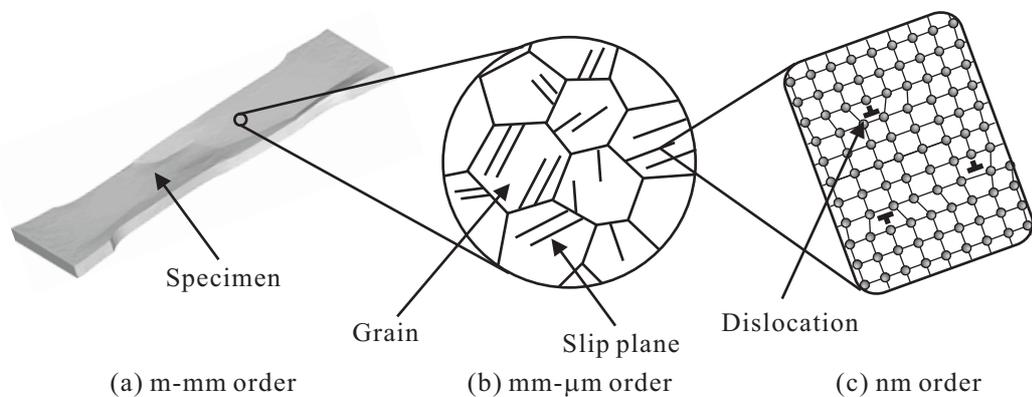


Fig. 1.1 Hierarchical structures of polycrystalline metal

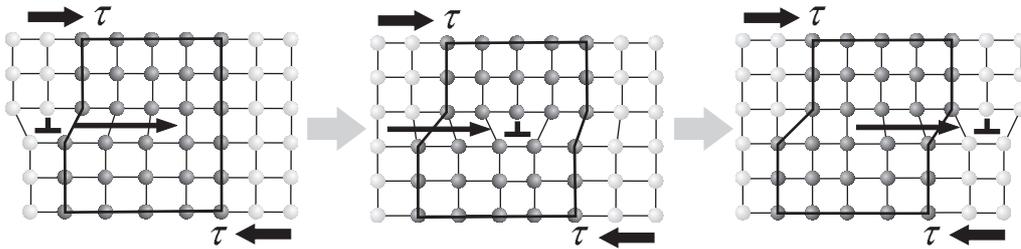


Fig. 1.2 Dislocation movement

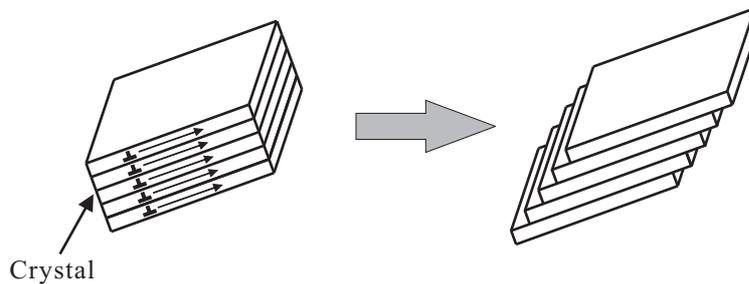


Fig. 1.3 Slip deformation of crystal

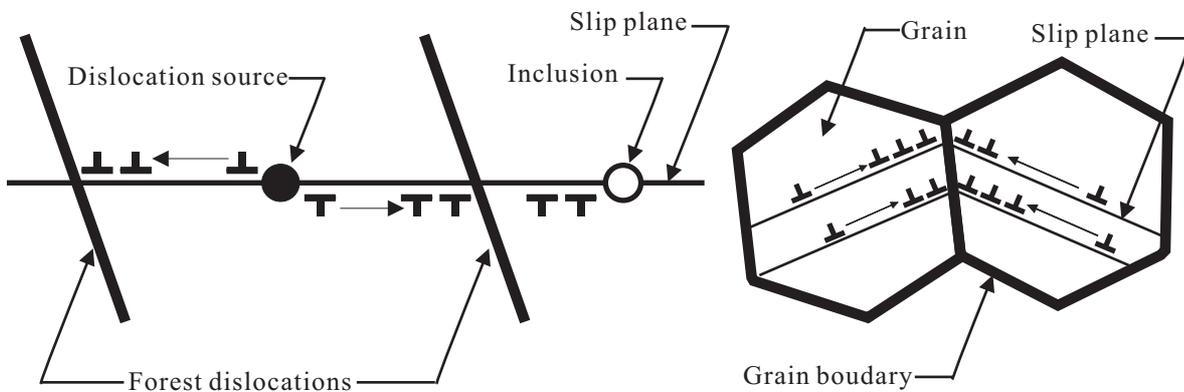


Fig. 1.4 Accumulation of dislocations

金属内の初期状態における転位密度は、少なくとも $10^9 \sim 10^{11} \text{m}^{-2}$ 程度であるといわれており⁽¹⁾、結晶粒内に存在する膨大な量の転位が運動することで、結晶のすべり変形が起こる [図 1.3 参照]。さらに、材料内の各結晶粒におけるすべり変形の集積が、目に見える巨視的な金属の塑性変形となっている。一方、図 1.4 のように Frank-Read 源 [補足 A.2] などの転位源から発生した転位は他すべり系に存在する林立転位、介在物および結晶粒界などの影響を受けることにより、その運動が阻害される。そして、それらの転位が堆積することで結晶は硬化し、金属材料の巨視的な加工硬化が起こる。つまり、金属結晶のすべり変形は転位運動を、また加工硬化は転位蓄積を素因としている。また、結晶のすべり変形が集積することで、金属は目に見える形で塑性変形し、各結晶粒の加工硬化挙動が材料の巨視的な

加工硬化特性を決定する。そのため、金属材料の強度、延性、破壊挙動などの力学的性質は材料の微視的構造である転位組織や結晶組織などに大きく依存する。今日工業的に使用されている金属材料のほとんどは、合金元素の制御・調整、熱処理、塑性加工、再結晶などによって微視的な金属組織を変化させることで、その機械的性質を向上させている。

1.1.2 超微細粒金属

機械・建築・自動車などの構造材料として優れた強度を有する金属の製造方法には、他元素を添加する方法、異種材料を複合化する方法ならびに結晶粒を微細化する方法などがある。その中でも結晶粒微細化の方法はリサイクル性や環境親和性に優れており、ますます重要度が高まっている。現在使用されている構造用金属材料における平均粒径が最小でも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(UFGM: Ultrafine-grained Metal)に関する研究が近年注目を集めている⁽²⁾⁽³⁾⁽⁴⁾⁽⁵⁾⁽⁶⁾⁽⁷⁾。UFGM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圧延あるいは冷間圧延において材料に付与することで誘起され、その強ひずみ加工法は多数提案されている⁽⁷⁾⁽⁸⁾⁽⁹⁾⁽¹⁰⁾。

実験的に知られているように、金属材料は粒径がmmからサブミクロンスケールの範囲においては、粒径の減少とともに初期降伏応力が増加するというHall-Petch効果が表れる⁽¹¹⁾⁽¹²⁾⁽¹³⁾。図1.5は、Tsujiら⁽¹¹⁾⁽¹⁴⁾の実験によって得られた、様々な粒径を有する工業用純Alの公称応力-公称ひずみ線図であり、この図からもわかるように、金属材料は粒径のサブミクロン化に伴って強度は飛躍的に増加する。しかしながら、粒径をナノスケールにまで微細化したナノ結晶材料においては、粒径の減少に伴って初期降伏応力が減少するという逆Hall-Petch効果が発現することが知られている⁽¹⁵⁾。したがって、材料強度を向上させるためには、微細粒径を最低でもサブミクロンオーダーにとどめる必要がある。その一方で、粒径のサブミクロン化に伴って延性が急激に低下することも明らかになっている⁽¹¹⁾⁽¹²⁾⁽¹³⁾。一般に、結晶粒微細化強化は材料の延性・靱性を損なわずに強度を向上させることのできる強化法とされている⁽¹⁶⁾が、粒径が数百 μm から1 μm 以下に至る広い範囲における強度と延性の関係は十分に解明されていないが現状である。

また、強ひずみ加工によって誘起されたUFGMに焼鈍処理を施すことで粒径は増加し、粒径がサブミクロンから数 μm 程度の金属材料を得ることができる。このようにして得られる金属材料の結晶粒組織は、従来の圧延・再結晶により得られる結晶粒組織に比べて微細であるため、本研究ではこのような材料を微細粒焼鈍材と呼ぶこととする。図1.5では、 $\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$ の場合が強ひずみ加工のみが施されたUFGMの応力-ひずみ曲線であり、 $\bar{d} \geq 0.40\mu\text{m}$ の場合が $\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$ の材料に焼鈍を施すことで得られた微細粒焼鈍材の曲線である。この図からもわかるように、純AlのようなFCC微細粒焼鈍材においては、通常は焼鈍された炭素鋼を代表とするBCC焼鈍材で観察される降伏点降下現象[補足A.3]が起こり、さらにLüders帯の伝ば[補足A.4]に酷似した現象が起こることも報告されている⁽¹¹⁾⁽¹²⁾⁽¹³⁾。BCC焼鈍材に発現する降伏点降下現象を転位論に基づいて説明した理論として、Cottrellの固着説⁽¹⁷⁾およびJohnston-Gilman理論⁽¹⁸⁾が挙げられる。Cottrellは、炭素鋼中の転位は固溶している炭素原子によって固着され、その転位が固着から抜け出すことで変形応力が低下し、降

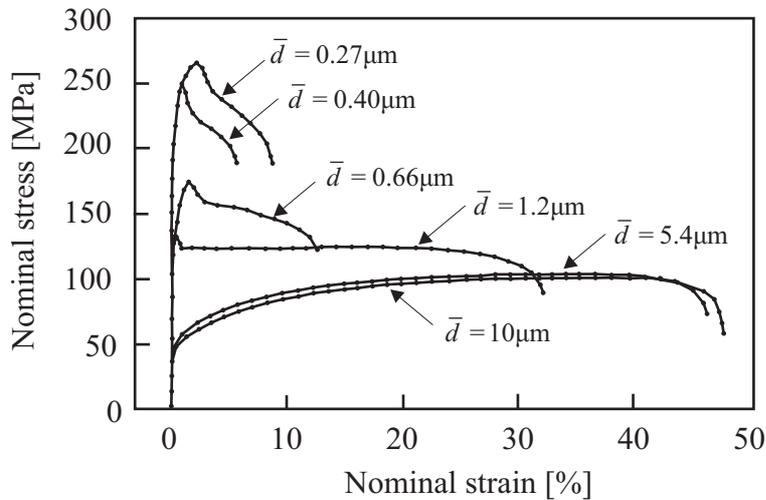


Fig. 1.5 Nominal stress-strain curves of pure Al with different mean grain sizes⁽¹¹⁾⁽¹⁴⁾

伏点降下が起こると考えている。また，Johnston-Gilman はらせん転位の二重交差すべり[補足A.6]が起こることで可動転位が急激に増殖し，その結果変形に必要な応力が低下することで降伏点降下が発現すると考えている。しかしながら，焼鈍された純Alや純CuなどのFCC微細粒内には固溶原子が含まれているとは考えにくく，二重交差すべりはらせん転位が変形の担い手となるBCC金属において顕著に発現する現象であると考えられている。そのため，FCC微細粒焼鈍材においては，別の機構によって降伏点降下が発現している可能性が考えられる。このように，BCC焼鈍材の場合とは異なり，FCC微細粒焼鈍材において降伏点降下現象やLüders帯の伝ばが発現する要因は依然として未解明である。

さらに，一般には金属材料に塑性加工を施した後に焼鈍処理を行うことで材料内部では再結晶現象が起こり，材料の延性・靱性は向上すると考えられている⁽¹⁹⁾のに対し，図1.5では強ひずみ加工のみを施したUFGM($\bar{d}=0.27\mu\text{m}$)に比べて，強ひずみ加工の後に焼鈍を施したUFGM($\bar{d}=0.40\mu\text{m}$)の方が延性が低下している⁽¹¹⁾。このような現象はその他の実験においても多く観察されており⁽¹²⁾⁽¹³⁾⁽²⁰⁾⁽²¹⁾，UFGMに特有な力学特性の一つであると考えられているが，その要因については十分に解明されていない。

以上のように，UFGMは様々な特異な力学挙動を示すことが知られているが，これらの現象が起こる微視的メカニズムについては未解明な点が多いのが現状である。そのため，材料科学と計算力学を援用してその力学的評価方法を開発するとともに，このような挙動が発現する微視的メカニズムを解明することが材料組織制御や圧延加工の分野で期待されている。計算機シミュレーションによる数値実験を手掛かりとして，UFGMが特異な材料特性を示す要因を解明することができれば，工業材料として実用に耐え得る理想的なUFGMの創製方法の開発を計算力学的に支援できると考えられる。

1.1.3 マルチスケールモデリング・シミュレーション

一般に、金属材料の大変形塑性挙動を表現する理論として、連続体力学に基づく古典的塑性論が用いられることが多いが、その理論体系には材料の微視組織に関する情報は導入されていない。従来の古典的塑性論に材料の微視的情報を取り込むためには、何らかの内部変数を導入し、その構成式あるいは発展式を導出して、それらを支配方程式系に組み込むことが必要となる。そのため、実現象をより精密に表現する方程式系を得るためには、内部変数の数を増加させることになり、それに伴って構成式の数も増大することになる。結果として、構成式に現れる材料定数の数も増え、それらを全て実験によって同定しなければならないという悪循環に陥ってしまう。このような状況の打開を目指し、固体力学に材料科学で得られた材料の微視的挙動に関する知見を導入することで、材料の異なる階層を橋渡しすることができる数理モデルを構築し、そのモデルに基づいた数値解析手法を開発することが期待されている。近年、このようなマルチスケールモデリング・シミュレーションに関する研究が世界レベルで盛んに行われており⁽²²⁾、その完成度をさらに高めていくことが重要となっている。現在のマルチスケールモデリングの手法としては、材料の微視的な挙動をある程度粗視化し、巨視的変形場、結晶場あるいは転位場といった異なる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で、各階層の情報の相互作用から材料の変形挙動および微視構造の挙動を同時に表現する「多階層橋渡し形」の手法が主流となっている。金属材料の場合、転位の微視構造、結晶粒構造および巨視構造の相互関係を解明し、それらの階層の間で情報のやり取りができれば、加工硬化曲線などの巨視的な実験データを必要とする現象論的手法に比べて、より微視的な材料の力学挙動に立脚した数値解析が可能となる。

(A) 結晶塑性論

金属材料の微視構造に一步踏み込んだ有力な理論体系として挙げられるのが結晶塑性論である。これは、結晶のすべりを塑性変形の素過程として捉えているため、塑性構成式を用いることなく運動学的に塑性変形速度および塑性スピンの導出が可能となる。また、結晶塑性論においては降伏条件が不要であり、必要となるのは結晶塑性構成式およびすべり面上の分解せん断応力とすべりの関係を表すスカラー硬化則のみとなる。そのため、その理論体系は非常に簡潔であり、決定すべき数値係数も極端に少なくなるという利点がある。古くは、Taylor⁽²³⁾によりミクロスケールにおける結晶のすべり変形がモデル化され、Peirceら⁽²⁴⁾⁽²⁵⁾が結晶塑性論に基づく数値解析手法を構築している。しかしながら、従来の結晶塑性論には結晶のすべり変形の素因となる転位運動の情報が導入されていない。

(B) 転位-結晶塑性論

近年、転位の運動や蓄積といった転位場の情報を結晶の硬化則に導入することにより、結晶の変形場と微視的転位場の橋渡しを可能とする転位-結晶塑性論に関する研究が注目を集めている。これまでに、結晶の変形場に導入する蓄積転位の密度の表現方法については様々提案されており、その代表的なものとして幾何学的に必要な(GN: Geometrically Necessary)転位密度、統計的に蓄積する(SS: Statistically Stored)転位密度およびGN不適合度が

挙げられる。GN転位密度は、Ashby⁽²⁶⁾によりすべりのこう配に基づいて定義された量である。そのため、GN転位密度を用いることにより転位の刃状成分およびらせん成分の区別が可能となり、蓄積転位の幾何学的描像を浮き彫りにすることが可能となる。さらに、すべりのこう配という幾何学的特性から、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、不動といった概念がないため、転位のダイナミクスを表現することができず、ダイポールやトライポール[補足A.5]などの短範囲応力場を形成する大域的結晶欠陥を表現できないという難点もある。一方、スカラー転位密度は可動転位の不動化、転位の反応および転位の対消滅といった転位のダイナミクスに基づいた発展式により表現される転位密度である⁽²⁷⁾⁽²⁸⁾⁽²⁹⁾⁽³⁰⁾。SS転位密度を用いる場合には、可動転位と不動転位の分類が可能となるため、転位のダイナミクスを表現するのに適している。また、SS転位密度はGN転位密度では表すことができない大域的結晶欠陥を表現することができる。その反面、転位の正負の符号という情報が含まれていないため、転位の幾何学的描像を表現することができない。

GN転位密度とSS転位密度のそれぞれの欠点を補うために、GN転位密度とSS転位密度の両方を組み合わせた手法を用いた転位-結晶塑性解析の例も多く報告されている⁽³¹⁾⁽³²⁾⁽³³⁾⁽³⁴⁾⁽³⁵⁾。しかしながら、GN転位密度はある時刻のすべり分布のこう配により決まる幾何学的状態量であるのに対し、SS転位密度は発展式を用いて計算を行うことにより得られる統計的非状態量である。したがって、これらの量を同時に考慮すれば、転位密度の表現に異なる種類の量が混在してしまうことになる。そこで、Aoyagi-Shizawa⁽³⁶⁾は結晶空間のRiemann-Christoffel曲率に対応する不適合度テンソル⁽³⁷⁾を結晶塑性論の体系に適合するように拡張したGN不適合度を定義し、SS転位密度で表現される転位密度を幾何学的状態量により表現している。また、Aoyagi-ShizawaはこのGN不適合度およびGN転位密度を同時に考慮した転位-結晶塑性モデルを提案している。なお、GN不適合度はGN転位密度と同様にある時刻の変形状態のみで決まる幾何学的状態量であるため、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を有しているが、Aoyagi-ShizawaはGN不適合度で表される転位のうち、対消滅した転位の密度を表現するモデルを幾何学的議論に基づいて導出している。

一方で、各種転位密度の結晶の硬化則への導入方法も様々提案されている。Fleckら⁽³¹⁾は、結晶の硬化則にSS転位密度のみならずGN転位密度も導入する手法を提案しており、Ohashi⁽³⁴⁾は結晶の硬化則には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に反映させた転位-結晶塑性モデルを構築している。Aoyagi-Shizawa⁽³⁶⁾は潜在硬化のみならず自己硬化の影響も反映させるためにGN転位密度とGN不適合度の両方を結晶の硬化則へ導入し、転位の平均飛行距離にはGN不適合度のみを考慮している。さらに、Eversら⁽³³⁾はGN転位密度とSS転位密度を結晶の硬化則および転位の平均飛行距離の両方に反映させている。このような結晶の硬化則への転位密度の導入方法についてはいずれも一長一短があり、モデルを統一するには至っていない。一方、このように結晶の硬化則へ転位密度を導入する理論の他に、すべりの1次こう配(GN転位密度)と仕事共役となる高次応力とそれに対応する高次表面力の存在を仮定し、それらを従来の仮想仕事の原理に導入した非局所塑性理論がGurtin⁽³⁸⁾⁽³⁹⁾によって構築されている。また、Eversら⁽³³⁾やKuroda-Tvergaard⁽⁴⁰⁾は、GN転位密度の空間こう配が背応力として転位の駆動力に影響を及ぼすことを指摘しており、GN転位密度の1次こう配が形成する背応力を導入した転位-結晶塑性モデルを提案している。しかしながら、これらの理論においては高次応力の釣合い

方程式に付随する境界条件が明確に定まらない，または高次応力や背応力の表現におけるひずみのこう配項に乗じる材料の特性長さの物理的意味が明確でないといった問題点が存在している．依然として上記のような問題点は残っているものの，このような転位-結晶塑性論に関する研究の発展により，転位場と結晶の変形場を連成した数値解析を比較的簡便に行うことが可能となっている．

(C) Taylor モデル

上記のように，転位-結晶塑性論に関する研究は進展しており，転位場の情報と結晶の変形場をリンクした数値解析を行うことが可能となっている．しかしながら，一般的な材料試験で用いられる試験片サイズの多結晶体には，膨大な数の結晶粒が含まれているのに対し，従来の転位-結晶塑性モデルに基づく数値解析においては，多くとも数十～数百結晶粒程度の微小な試験片を対象としているものがほとんどである．そのため，数値解析で得られた結果と実験結果を定量的に比較することは難しく，より多くの結晶粒を含む巨視的な材料の力学特性を再現することが望ましい．多数の結晶粒を考慮した多結晶解析手法の一つとして，Taylor モデル⁽²³⁾⁽⁴¹⁾⁽⁴²⁾が挙げられる．これは一物質点に多数の結晶方位が埋め込まれていると考え，同じ物質点に埋め込まれた各結晶のひずみが近似的に同じであることを想定したモデルである．そのため，多結晶体の挙動を比較的精度良くかつ簡便に解析することができる．一方で，粒形状，粒間相互作用および粒界の影響などの情報は考慮されておらず，多結晶体の挙動を十分に再現できていないといえない．このため，結晶粒レベルの情報を考慮した転位-結晶塑性解析を巨視的な試験片に対して行うことが望まれるが，実用的なマクロスケールの試験片に対してこのような解析を実施するには莫大な計算コストを要する．そのため，転位スケールおよび結晶粒スケールといった微視的スケールと実用的巨視スケールを結びつけることができる手法が必要となる．

(D) 均質化法

ミクロスケールとマクロスケールの橋渡しを可能とする解析手法の一つとして，均質化法⁽⁴³⁾⁽⁴⁴⁾⁽⁴⁵⁾が挙げられる．均質化法では，材料内の非均質性に関する情報を十分に含んだ微小な構造(ミクロ構造)が定義され，非一様に分布する応力・ひずみ状態は陽に記述される．一方で，これらのミクロ構造における体積平均量により，マクロ構造の挙動が表現される．均質化理論では，ミクロ構造の規則的な配置(周期性)を仮定しており，この条件の下でミクロ構造とマクロ構造の支配方程式が物理的・数学的整合性を満足している．また，ミクロ構造の周期性の仮定は，マクロな材料特性を定義する点の近傍でのみ成り立っていればよく，全体構造における局所的な領域ごとに異なるミクロ構造を定義することができる．すなわち，大域的な周期性を仮定せずとも，厳密な理論を展開できる⁽⁴³⁾．さらに，計算力学における代表的な解析手法である有限要素法(FEM: Finite Element Method)との親和性およびミクロ構造の任意の幾何形状に対応できる汎用性も有している．そのため，数値解析的観点からも，均質化法は複数の階層挙動を橋渡しする有効な手法であるといえ，均質化理論に基づいたマルチスケールシミュレーションも近年盛んに行われている⁽⁴⁶⁾⁽⁴⁷⁾⁽⁴⁸⁾⁽⁴⁹⁾⁽⁵⁰⁾．一方で，均質化法に基づくミクロ-マクロ連成解析を行う場合には，マクロ

構造の変形が一様でない限り，ミクロ構造における周期性は厳密には崩れてしまう．特に，巨視的な変形のこう配が強く存在する問題では，内部構造の周期性の満足度が減少するといった問題も有しているため，均質化法を適用できる問題には限界があるのも現状である．

Nakamachiら⁽⁵¹⁾⁽⁵²⁾は，不均質な微視結晶構造の特性に基づいて巨視的な変形特性を記述する結晶塑性均質化FEM解析手法を構築し，微視構造の結晶方位分布が巨視的塑性特性に及ぼす影響を考察している．また，結晶塑性均質化法によるHCP金属の巨視的塑性挙動解析⁽⁵³⁾および巨視的局所くびれ解析⁽⁵⁴⁾がTadanoによって報告されている．しかしながら，これらの解析では巨視スケールおよび結晶スケールという2階層を橋渡しするにとどまっており，転位スケールも含めた3階層を橋渡しした解析が行われた例はほとんど報告されていない．巨視場および結晶粒場の2階層の橋渡しにとどめてしまうと，結晶のすべり変形の根源である転位運動の情報が導入されていないため，モデルは依然として現象論的であり，解析を行うには加工硬化曲線などの巨視的な実験データが必要となる．一方で，転位場からモデリングを行うことで，結晶の加工硬化特性と転位蓄積の関係が自然に表現されるため，上記の実験データは不要となり，従来の現象論的手法に比べてより本質論に近い形で数値解析を行うことが可能となる．

1.1.4 結晶粒微細化に伴う金属の材料特性の変化に関する計算力学的研究

計算力学的にUFGMの有用性を明らかにするためには，結晶粒微細化に伴う材料挙動の変化，すなわち結晶粒径に依存した寸法効果を検討することが重要となる．Ohashiら⁽⁵⁵⁾は，結晶粒内の転位源から1つの転位ループを放出させるために必要なせん断応力を考慮することで，初期粒径の減少に伴う臨界分解せん断応力の増加を表現している．また，Ohno-Okumura⁽⁵⁶⁾はGN転位の自己エネルギーを考慮することで，この自由エネルギーが初期降伏応力の粒径依存性に寄与することを示している．さらに，Eversら⁽⁵⁷⁾は隣接する結晶の境界における格子ミスフィットに基づいて結晶粒界転位(GBD: Grain Boundary Dislocation)密度を転位-結晶塑性モデルに導入し，粒径に依存した初期降伏応力の違いを再現している．このような降伏応力の寸法依存性に関する研究の進展から，粒径の減少に伴う初期降伏応力の増加に関しては実験結果をほぼ再現できるようになってきた．一方，転位-結晶塑性論にGN転位密度の情報を導入することで，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が表現されることが指摘されており，結晶の加工硬化則にGN転位密度の情報を導入した解析を行うことで，結晶の加工硬化特性の粒径依存性について考察した研究⁽³¹⁾⁽⁵⁸⁾⁽³²⁾⁽³⁴⁾，GN転位密度の空間こう配が形成する背応力が結晶の加工硬化特性におよぼす影響について検討した研究⁽⁵⁷⁾⁽⁵⁹⁾なども報告されている．しかしながら，粒径のサブミクロン化に伴う急激な延性の低下に関する計算力学的研究はほとんど報告されておらず，UFGMの強度と延性の関係については十分に解明されていないのが現状である．

一方，微細粒焼鈍材には転位密度が極めて低い結晶粒の存在が確認されている⁽¹¹⁾⁽¹²⁾⁽¹³⁾．これは，焼鈍による転位密度の低下に加えて，結晶粒径が非常に小さいことに起因していると考えられる．このような結晶粒では，塑性変形の素因となる転位源の枯渇により，臨界分解せん断応力が変形の初期段階において一時的に増加することが予想される．しか

しながら、従来の転位-結晶塑性論において結晶の臨界分解せん断応力を表現するのによく用いられる Bailey-Hirsch の式⁽⁶⁰⁾では、粒内の転位密度の減少に伴って臨界分解せん断応力も減少してしまう。また、転位密度が極めて低い微細粒においては、通常粒の場合と同程度の転位源が粒内に存在しているとは考えにくい。このような微細粒の場合には、材料内に極めて大量に存在する粒界が転位源の役割を果たすようになることが実験⁽⁶¹⁾および分子動力学シミュレーション⁽⁶²⁾⁽⁶³⁾⁽⁶⁴⁾により明らかになってきている。しかしながら、UFGMの力学特性に関する従来の転位-結晶塑性解析においては、このような結晶粒内の転位枯渇状態や転位源としての粒界の役割を考慮した例は報告されていない。

1.2 本研究の目的

本研究では、FCC超微細粒金属におけるミクロからマクロにわたる力学挙動を統一的に再現することを目的とし、転位の微視構造、結晶粒構造および巨視構造という3階層を橋渡しするトリプルスケール転位-結晶塑性モデルを構築する。その際、Burgers回路内の孤立転位および転位対の密度の表現には、Aoyagi-Shizawa⁽³⁶⁾によって提案されたGN転位密度テンソルおよびGN不適合度テンソルを採用し、結晶の硬化則へのそれぞれの転位密度の導入方法について検討する。また、微細粒焼鈍材には転位密度が極めて低い結晶粒が存在することを考慮し、このような粒において流れ応力が変形の初期段階において一時的に増加することを表現するために、転位源としての粒界の役割を考慮した新たな臨界分解せん断応力モデルを提案する。なお、本モデルには粒径の情報が自然と導入されるため、これまでに提案されてきた初期粒径依存形臨界分解せん断応力モデル⁽⁵⁵⁾⁽⁵⁶⁾⁽⁵⁷⁾を用いることなく、臨界分解せん断応力の粒径依存性を表現することも可能となる。さらに、結晶粒構造と巨視構造の橋渡しを行うために、結晶塑性均質化法を導入する。

次に、本モデルに基づいて転位組織-結晶粒構造-巨視的試験片にまたがるマルチスケール転位-結晶塑性FEM解析を初期平均粒径および初期転位密度の異なるFCC多結晶体に対して実施する。その際、結晶の加工硬化モデルへのGN転位密度の導入方法について検討し、結晶の加工硬化特性の寸法依存性を表現するのに適した加工硬化モデルを決定する。また、微細粒焼鈍材を想定した試験片に対して、仮想的な平面2重すべりモデル⁽⁶⁵⁾を適用した解析を実行し、結晶粒微細化に伴う初期降伏応力の増加、急激な延性の低下、降伏点降下現象の発現およびLüders帯の伝ばといったFCC微細粒焼鈍材に特有の現象を定性的に再現する。さらに、FCC結晶の全12すべり系を考慮した擬似3次元マルチスケール解析を強ひずみ加工のみが施された超微細粒金属、微細粒焼鈍材および通常粒金属を想定した試験片に対して実行し、それぞれの金属材料に特有の力学特性を統一的に再現する。以上の解析から得られた結果に基づいて、FCC超微細粒金属に発現する特異な力学挙動の微視的メカニズムについて検討する。

1.3 本論文の構成

第1章の緒言に続き、第2章では本研究における運動学について論じる。まず、中間配置(Isoclinic配置⁽⁶⁶⁾)を定義し、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．これにより，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，Aoyagi-Shizawa⁽³⁶⁾によって結晶塑性論に適合するよう結晶のすべりに基づいて定義されたGN転位密度テンソルおよびGN不適合度テンソルについて述べる．

第3章ではまず，全自由エネルギーの引数にGN転位密度およびGN不適合度を内部変数として導入し，各内力を定義する．また，質量保存則から連続の式を，仮想仕事の原理から力学的境界条件および釣合い方程式を，熱力学第1法則からエネルギー方程式を，さらに熱力学第2法則からエントロピー不等式およびClausius-Duhemの不等式を導出する．次に，Clausius-Duhemの不等式をGreen-Zerna⁽⁶⁷⁾の手法を介して保存部分と散逸部分に分離し，その保存部分からは速度形弾性構成式を導出する．さらに，散逸部分を各すべり系に関する量を用いて表すことで，分解せん断応力の引数にGN転位密度およびGN不適合度のノルムが含まれることを示す．各転位密度が材料の硬化則に影響を及ぼすことを明らかにすることで，各転位密度を硬化則へ導入することの熱力学的整合性を示す．

第4章では，転位スケールと結晶粒スケールの情報の橋渡しを可能とする転位-結晶塑性論について論じる．まず，本研究で用いる転位-結晶塑性論における転位密度の定義を行い，GN結晶欠陥(GN転位密度およびGN不適合度)に整合する形でAoyagi-Shizawa⁽³⁶⁾によって幾何学的に導出された転位の対消滅モデルについて述べる．次に，第3章で導出した速度形弾性構成式に基づいて結晶粒スケールにおける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手法に関する一般論を展開する．さらに，転位密度が極めて低い結晶粒において流れ応力が変形の初期段階において一時的に増加することを表現するために，転位源としての粒界の役割を考慮した新たな臨界分解せん断応力モデルを提案し，本モデルを転位-結晶塑性論に導入する．その際，結晶の硬化係数への各種転位密度の導入方法についても検討する．なお，FEM解析の準備として，結晶塑性構成式の粘塑性がもつ強い非線形性を緩和するための接線係数法および結晶基底ベクトルの更新方法についても言及する．

第5章では，結晶粒スケールと実用的マクロスケールの橋渡しを可能とする結晶塑性均質化理論について述べる．本章では，定式化の際の両スケールにおける力学的な考察を明確にすることを目的とし，有限変形の枠組み内における均質化理論⁽⁶⁸⁾を結晶塑性論へ適用する．まず，結晶粒スケールにおける関係式およびマクロスケールにおけるマクロ変数の定義を示し，周期材料に対する仮想仕事の原理式を導出する．これらを用いて，結晶粒スケールの支配方程式およびマクロスケールにおける均質化結晶塑性構成式を導出する．さらに，FEM解析の準備としてマクロスケールにおけるUpdated Lagrange形式の仮想仕事率の原理式を導出するとともに，マクロ構造の変形情報を用いて結晶粒構造内の力学応答を評価する局所化問題について述べる．

第6章では，上述のモデルに基づくトリプルスケール転位-結晶塑性FEM解析を行うための有限要素定式化を行う．まず，結晶粒構造の支配方程式を離散化し，結晶粒構造における変形の不均一性を表す特性速度を決定するミクロ要素剛性方程式を導出する．次に，マクロ構造の支配方程式を離散化し，マクロ構造におけるマクロ要素剛性方程式を導出する．さらに，FEM解析におけるGN転位密度およびGN不適合度の算出手法およびトリプルスケール転位-結晶塑性FEM解析のアルゴリズムについても触れる．

第7章では、FCC超微細粒金属の力学特性に関するトリプルスケール転位-結晶塑性FEM解析を実行し、得られた結果についての考察・検討を行う。まず、結晶の加工硬化モデルへのGN転位密度の導入方法として、GN転位密度を結晶の硬化則へのみ導入する手法、転位の平均飛行距離へのみ導入する手法、結晶の硬化則および転位の平均飛行距離の双方へ導入する手法およびどちらにも反映させない手法を用いた場合の解析を行い、得られた結果と実現象を比較することで、金属材料の加工硬化特性における寸法依存性を表現できる結晶の加工硬化モデルを決定する。次に、微細粒焼鈍材を想定した試験片に対して、仮想的な平面2重すべりモデル⁽⁶⁵⁾を適用した解析を行うことで、本研究で新たに提案する臨界分解せん断応力モデルによりFCC微細粒焼鈍材に特有の現象を定性的に再現できることを示す。なお、本モデルを用いた塑性局所化解析を行う際に、試験片を分割する有限要素の選択が解析結果に及ぼす影響についても検討する。さらに、FCC結晶の全12すべり系を考慮した擬似3次元トリプルスケール転位-結晶塑性解析を強ひずみ加工のみが施されたFCC超微細粒金属、微細粒焼鈍材および通常粒金属を想定した試験片に対して実行する。本モデルによりそれぞれの金属材料に特有の力学特性を統一的に再現できることを示し、解析結果と実験結果の定量的な比較検討を行う。また、超微細粒金属における試験片レベルでの巨視的降伏および結晶粒レベルでの微視的降伏状況について考察するとともに、粒径のサブミクロン化に伴うFCC金属の急激な延性低下を引き起こす微視的メカニズムについて検討する。

第8章は結論であり、本研究で得られた知見を要約するとともに、本研究の今後の展望について述べる。

なお、本論文では第2章～第6章がモデリングに関する記述であり、その中では既出の概念も用いているため、本研究の独創的な点をそれらと区別すると以下のようなことを付記しておく。

- 第2章 運動学
 - 通常の結晶塑性論と同様の運動学⁽⁶⁹⁾
 - 転位密度の幾何学的表現⁽³⁶⁾の紹介
- 第3章 材料硬化に関する熱力学的検討
 - 従来転位ドリフト速度理論⁽⁷⁰⁾に基づいて理論を展開
 - 4節 分解せん断応力の引数に関する検討(GN結晶欠陥を結晶の変形場へ導入することの熱力学的整合性に関する検討) 独創的
- 第4章 転位-結晶塑性論
 - 従来転位-結晶塑性論⁽³⁶⁾に基づいて理論を展開
 - 3節4項 硬化係数への各種転位密度の導入方法に関する検討 独創的
 - 4節2項 転位源としての粒界の役割を考慮した臨界分解せん断応力モデルの提案 独創的
- 第5章 結晶塑性均質化理論
 - 従来速度形(粘塑性形)均質化理論⁽⁶⁸⁾⁽⁷¹⁾に基づいて理論を展開
 - 漸近展開法ではなく、力学的考察に基づいて均質化結晶塑性構成式を導出している点が従来結晶塑性均質化理論に関する研究⁽⁴⁸⁾⁽⁵²⁾とは異なる
- 第6章 有限要素法による離散定式化

- 通常の有限要素法による本モデルの離散定式化
- 4節 トリプルスケール転位-結晶塑性解析のアルゴリズム 独創的

1.4 本論文で用いる記号

本論文では、特に断りのない限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

また、ベクトルおよびテンソルの成分を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、線形変換および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。

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

さらに、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。

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

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。なお、本論文では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という、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。

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⁽⁶⁹⁾に代表される Isoclinic 配置⁽⁶⁶⁾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異なる。Isoclinic 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とで、この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、結晶欠陥場の微分幾何学的表現について言及し、Aoyagi-Shizawa⁽³⁶⁾によって結晶塑性論の体系に適合するよう定義されたGN転位密度テンソルおよびGN不適合度テンソルについて述べる。GN転位密度およびGN不適合度は、それぞれ Burgers 回路内の孤立転位密度および転位対密度に対応する。

2.1 変形こう配の分解

結晶塑性論では、下部構造スピン: $W^* \equiv W - W^p$ を共回転スピンとして用いるため、Shizawa-Zbib⁽⁶⁹⁾に代表される理論に基づいて、図2.1に示すような Isoclinic 配置を導入した4配置構成を考える。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 $\beta_{(l)}$ 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 $\beta_{(l)}$ 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 $\beta_{(m)}$ から弾・剛体回転 R^* により現配置 $\beta_{(c)}$ に写像されるという配置である。また、各配置での結晶基底[補足B.1]を図2.1のように定義する。このことは変形こう配 F を次式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^* 、 \hat{U}^e および F^p は、それぞれ弾・剛体回転を表す直交テンソル、弾性ストレッチおよび塑性変形こう配である[図2.1参照]。また、 $\bar{F} \equiv \hat{U}^e F^p$ 、 $F^* \equiv R^* \hat{U}^e$ である。初期配置から第1中間配置⁽⁷²⁾⁽⁷³⁾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弾・剛体回転を受けて写像されるため、結晶基底の向きが変化する。また、弾性除荷を考えた場合の変形の残りは $\hat{U}^{e-1} R^{*-1} F = F^p$ であるため、 F^p は永久変形に相当する。本研

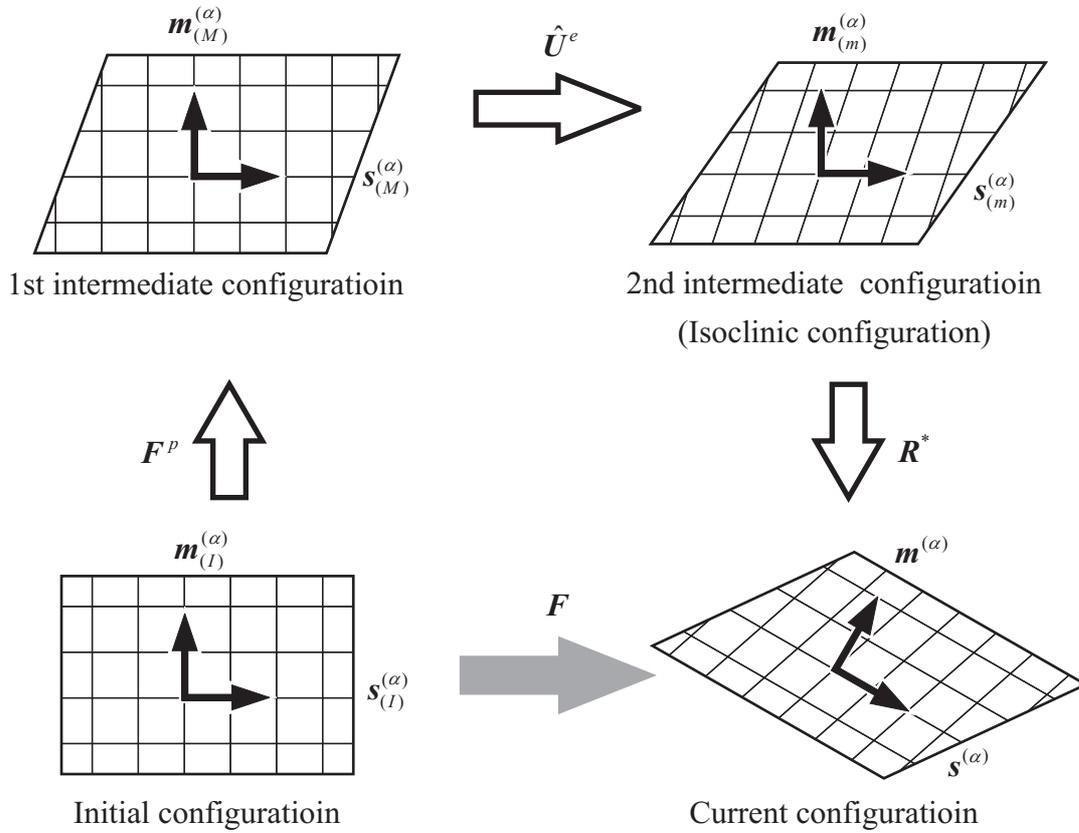


Fig. 2.1 Configuration of crystal grids

究では, $\beta_{(c)}$ における任意の2階のテンソルを A とすれば, $\beta_{(m)}$, $\beta_{(M)}$ および $\beta_{(I)}$ における A はそれぞれ $A_{(m)}$, $A_{(M)}$ および $A_{(I)}$ と表記する. ここで, A は

$$A = R^* A_{(m)} R^{*T} \dots\dots\dots (2.2)$$

のように変換され, $A_{(m)}$ の速度は

$$\dot{A}_{(m)} = R^{*T} \overset{\nabla}{A} R^* \dots\dots\dots (2.3)$$

$$\overset{\nabla}{A} = \dot{A} - W^* A + A W^* \dots\dots\dots (2.4)$$

で与えられる. 式(2.4)における共回転速度 $\overset{\nabla}{A}$ は A の Mandel-Kratochvil 速度⁽⁷⁴⁾⁽⁷⁵⁾ 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, 共回転スピンの $W^* \equiv \dot{R}^* R^{*T}$ となることがわかる.

2.2 ひずみの弾・塑性分解

2.2.1 ひずみの定義

まず各配置での微小線素は次式のように表現される．

$$d\mathbf{x} = \mathbf{R}^* d\mathbf{x}_{(m)} \dots\dots\dots (2.5)$$

$$d\mathbf{x}_{(m)} = \hat{\mathbf{U}}^e d\mathbf{x}_{(M)} \dots\dots\dots (2.6)$$

$$d\mathbf{x}_{(M)} = \mathbf{F}^p d\mathbf{x}_{(I)} \dots\dots\dots (2.7)$$

ここで，従来どおり微小線素の2乗の差を用いて弾性ひずみおよび塑性ひずみを定義する．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て，微小線素の2乗の差を変形すれば次式のようになる．

$$\begin{aligned} ds^2 - ds_{(I)}^2 &= ds^2 - ds_{(M)}^2 + ds_{(M)}^2 - ds_{(I)}^2 \\ &= (d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} - d\mathbf{x}_{(M)} \cdot d\mathbf{x}_{(M)}) + (d\mathbf{x}_{(M)} \cdot d\mathbf{x}_{(M)} - d\mathbf{x}_{(I)} \cdot d\mathbf{x}_{(I)}) \\ &= (\mathbf{F}^* d\mathbf{x}_{(M)} \cdot \mathbf{F}^* d\mathbf{x}_{(M)} - d\mathbf{x}_{(M)} \cdot d\mathbf{x}_{(M)}) + (\mathbf{F}^p d\mathbf{x}_{(I)} \cdot \mathbf{F}^p d\mathbf{x}_{(I)} - d\mathbf{x}_{(I)} \cdot d\mathbf{x}_{(I)}) \\ &= (\mathbf{F}^{*T} \mathbf{F}^* - \mathbf{I}) \cdot d\mathbf{x}_{(M)} \otimes d\mathbf{x}_{(M)} + (\mathbf{F}^{pT} \mathbf{F}^p - \mathbf{I}) \cdot d\mathbf{x}_{(I)} \otimes d\mathbf{x}_{(I)} \\ &= 2\mathbf{E}_{(M)}^e \cdot d\mathbf{x}_{(M)} \otimes d\mathbf{x}_{(M)} + 2\mathbf{E}_{(I)}^p \cdot d\mathbf{x}_{(I)} \otimes d\mathbf{x}_{(I)} \dots\dots\dots (2.8) \end{aligned}$$

ただし，式(2.8)におけるGreenひずみの弾性部分 $\mathbf{E}_{(M)}^e$ および塑性部分 $\mathbf{E}_{(I)}^p$ は次式のように定義される．

$$\mathbf{E}_{(M)}^e \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{F}^{*T} \mathbf{F}^* - \mathbf{I}) = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{U}}^{eT} \hat{\mathbf{U}}^e - \mathbf{I}) \dots\dots\dots (2.9)$$

$$\mathbf{E}_{(I)}^p \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{F}^{pT} \mathbf{F}^p - \mathbf{I}) \dots\dots\dots (2.10)$$

式(2.5)，式(2.6)および式(2.7)を式(2.8)に代入すれば，各配置における弾性ひずみはそれぞれ次式のように定義できる．

$$\mathbf{E}_{(I)}^e \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{F}^{pT} \mathbf{F}^p), \quad \mathbf{E}_{(m)}^e \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{I} - \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \hat{\mathbf{U}}^{e-1}), \quad \mathbf{E}^e \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{I} - \mathbf{F}^{*-T} \mathbf{F}^{*-1}) \dots\dots\dots (2.11)$$

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．

$$\mathbf{E}_{(M)}^p \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{I} - \mathbf{F}^{p-T} \mathbf{F}^{p-1}), \quad \mathbf{E}_{(m)}^p \equiv \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{U}}^{e-T} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} - \bar{\mathbf{F}}^{-T} \bar{\mathbf{F}}^{-1}), \quad \mathbf{E}^p \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{F}^{*-T} \mathbf{F}^{*-1} - \mathbf{F}^{-T} \mathbf{F}^{-1}) \dots\dots\dots (2.12)$$

2.2.2 弾・塑性ひずみの各配置への変換則

各配置における弾性ひずみの関係は次のように表現される．

$$\mathbf{E}_{(I)}^e \cdot d\mathbf{x}_{(I)} \otimes d\mathbf{x}_{(I)} = \mathbf{E}_{(M)}^e \cdot d\mathbf{x}_{(M)} \otimes d\mathbf{x}_{(M)} = \mathbf{E}_{(m)}^e \cdot d\mathbf{x}_{(m)} \otimes d\mathbf{x}_{(m)} = \mathbf{E}^e \cdot d\mathbf{x} \otimes d\mathbf{x} \dots\dots\dots (2.13)$$

同様にして，各配置における塑性ひずみの関係は次のように表現される．

$$\mathbf{E}_{(I)}^p \cdot d\mathbf{x}_{(I)} \otimes d\mathbf{x}_{(I)} = \mathbf{E}_{(M)}^p \cdot d\mathbf{x}_{(M)} \otimes d\mathbf{x}_{(M)} = \mathbf{E}_{(m)}^p \cdot d\mathbf{x}_{(m)} \otimes d\mathbf{x}_{(m)} = \mathbf{E}^p \cdot d\mathbf{x} \otimes d\mathbf{x} \dots\dots\dots (2.14)$$

式(2.5)および式(2.6)を式(2.13)に代入すれば,弾性ひずみの変換則が次式のように得られる.

$$E^e = R^* E_{(m)}^e R^{*T} = R^* (\hat{U}^{e-T} E_{(M)}^e \hat{U}^{e-1}) R^{*T} \dots \dots \dots (2.15)$$

同様にして,式(2.5),式(2.6)および式(2.7)を式(2.14)に代入すれば,塑性ひずみの変換則が次式のように得られる.

$$E^p = R^* E_{(m)}^p R^{*T} = R^* (\hat{U}^{e-T} E_{(M)}^p \hat{U}^{e-1}) R^{*T} = R^* \hat{U}^{e-T} (F^{p-T} E_{(I)}^p F^{p-1}) \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dots \dots \dots (2.16)$$

したがって,式(2.15)および式(2.16)よりひずみの変換則が次式のように得られる.

$$E = R^* E_{(m)} R^{*T} = R^* (\hat{U}^{e-T} E_{(M)} \hat{U}^{e-1}) R^{*T} = R^* \hat{U}^{e-T} (F^{p-T} E_{(I)} F^{p-1}) \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dots \dots \dots (2.17)$$

2.3 ひずみ速度の弾・塑性分解

2.3.1 微小弾性変形の仮定

金属材料に対する通常の大変形塑性理論と同様に,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{U}^e の2次に関する項においては $\hat{U}^e = I$ とみなす.これは,微小弾性変形の仮定と呼ばれる.一方, R^* には弾性回転が含まれているが,それを剛体回転と区別することができないため, R^* に関してはこの仮定を適用しない.この微小弾性変形の仮定を導入すれば,第1中間配置におけるひずみ $E_{(M)}$ と第2中間配置におけるひずみ $E_{(m)}$ は式(2.17)より次式のように近似できる.

$$E_{(m)} = \hat{U}^{e-T} E_{(M)} \hat{U}^{e-1} \approx E_{(M)} \dots \dots \dots (2.18)$$

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(2.15)を書き直すと,弾性ひずみの変換則は

$$E^e = R^* E_{(m)}^e R^{*T} = R^* E_{(M)}^e R^{*T} \dots \dots \dots (2.19)$$

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, $E_{(M)}^e$ の物質時間微分は次式のようになる.

$$\dot{E}_{(M)}^e = \dot{E}_{(m)}^e = (\mathbf{R}^{*T} \dot{E}^e \mathbf{R}^*) \dots \dots \dots (2.20)$$

Mandel-Kratochvil 速度⁽⁷⁴⁾⁽⁷⁵⁾を用いれば,弾性ひずみ速度の変換則は

$$\overset{\nabla}{E}^e = R^* \overset{\nabla}{E}_{(m)}^e R^{*T} = R^* \overset{\nabla}{E}_{(M)}^e R^{*T} \dots \dots \dots (2.21)$$

のように得られる.ここで, $\overset{\nabla}{E}^e$ は次式のように定義される.

$$\overset{\nabla}{E}^e \equiv \dot{E}^e - W^* E^e + E^e W^* \dots \dots \dots (2.22)$$

同様にして,微小弾性変形の仮定を考慮して式(2.16)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.

$$E^p = R^* E_{(m)}^p R^{*T} = R^* E_{(M)}^p R^{*T} = R^* (F^{p-T} E_{(I)}^p F^{p-1}) R^{*T} \dots \dots \dots (2.23)$$

塑性変形の参照配置が初期配置 $\beta_{(I)}$ であることを考慮すれば、 $E_{(I)}^p$ の物質時間微分は次式のようになる。

$$\dot{E}_{(I)}^p = (F^{pT} E_{(M)}^p F^p) = (F^{pT} E_{(m)}^p F^p) = (F^{pT} R^{*T} E^p R^* F^p) \dots \dots \dots (2.24)$$

ここで、 $\dot{E}_{(I)}^p = (F^{pT} E_{(M)}^p F^p)$ を計算すれば、

$$\dot{E}_{(I)}^p = \dot{F}^{pT} E_{(M)}^p F^p + F^{pT} \dot{E}_{(M)}^p F^p + F^{pT} E_{(M)}^p \dot{F}^p = F^{pT} (\dot{E}_{(M)}^p + L_{(M)}^{pT} E_{(M)}^p + E_{(M)}^p L_{(M)}^p) F^p \dots \dots \dots (2.25)$$

となる。同様にして、次式の関係も得られる。

$$\dot{E}_{(I)}^p = \bar{F}^T (\dot{E}_{(m)}^p + \bar{L}_{(m)}^T E_{(m)}^p + E_{(m)}^p \bar{L}_{(m)}) \bar{F} \dots \dots \dots (2.26)$$

$$\dot{E}_{(I)}^p = F^T (\dot{E}^p + L^T E^p + E^p L) F \dots \dots \dots (2.27)$$

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(2.25)、式(2.26)および式(2.27)より塑性ひずみ速度の変換則が次式のように得られる。

$$\hat{\Delta} E^p = R^* \hat{\Delta} E_{(m)}^p R^{*T} = R^* \hat{\Delta} E_{(M)}^p R^{*T} = R^* (F^{p-1} \dot{E}_{(I)}^p F^p) R^{*T} \dots \dots \dots (2.28)$$

ただし $\hat{\Delta}(\cdot)$ は初期配置 $\beta_{(I)}$ を参照配置としたときの Cotter-Rivlin 速度⁽⁷⁶⁾を表し、それぞれ次式のように定義できる。

$$\hat{\Delta} E_{(M)}^p \equiv \dot{E}_{(M)}^p + L_{(M)}^{pT} E_{(M)}^p + E_{(M)}^p L_{(M)}^p \dots \dots \dots (2.29)$$

$$\hat{\Delta} E_{(m)}^p \equiv \dot{E}_{(m)}^p + \bar{L}_{(m)}^T E_{(m)}^p + E_{(m)}^p \bar{L}_{(m)} \dots \dots \dots (2.30)$$

$$\hat{\Delta} E^p \equiv \dot{E}^p + L^T E^p + E^p L \dots \dots \dots (2.31)$$

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 $\beta_{(c)}$ 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。

$$L = \dot{F} F^{-1}, \quad L_{(I)} = F^{-1} L F = F^{-1} \dot{F} \dots \dots \dots (2.32)$$

また、速度こう配の変換則は式(2.32)より次式のように得られる⁽⁶⁹⁾。

$$L = R^* L_{(m)} R^{*T} = R^* (\hat{U}^e L_{(M)} \hat{U}^{e-1}) R^{*T} = R^* \hat{U}^e (F^p L_{(I)} F^{p-1}) \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dots \dots \dots (2.33)$$

また、式(2.1)を式(2.32)₁に代入すると次式のようになる。

$$\begin{aligned} L &= (R^* \hat{U}^e F^p) (R^* \hat{U}^e F^p)^{-1} \\ &= \dot{R}^* R^{*T} + R^* \dot{\hat{U}}^e \hat{U}^{e-1} R^{*T} + R^* \hat{U}^e \dot{F}^p F^{p-1} \hat{U}^{e-1} R^{*T} \\ &= L^e + L^p \dots \dots \dots (2.34) \end{aligned}$$

ただし、現配置における速度こう配の弾性部分 L^e および塑性部分 L^p は

$$L^e \equiv \dot{R}^* R^{*T} + R^* \dot{\hat{U}}^e \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dots \dots \dots (2.35)$$

$$\mathbf{L}^p \equiv \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} \dots \dots \dots (2.36)$$

のように定義される .

2.4.2 各配置における変形速度

式(2.35)より現配置 $\beta_{(c)}$ における変形速度の弾性部分 \mathbf{D}^e は次式のようになる .

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

ここで, $(\)_S$ は2階のテンソルの対称部分を表す . また, 式(2.33)および式(2.35)より, 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

$$\mathbf{D}_{(m)}^e = (\mathbf{L}_{(m)}^e)_S = (\dot{\hat{\mathbf{U}}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1})_S \dots \dots \dots (2.38)$$

となる . 一方, 式(2.36)および微小弾性変形の仮定より現配置 $\beta_{(c)}$ における変形速度の塑性部分 \mathbf{D}^p は

$$\mathbf{D}^p = (\mathbf{L}^p)_S = [\mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T}]_S = \mathbf{R}^* (\dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1})_S \mathbf{R}^{*T} \dots \dots \dots (2.39)$$

となる . また, 式(2.33)および式(2.36)より第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 $\mathbf{D}_{(m)}^p$ は次式のようになる .

$$\mathbf{D}_{(m)}^p = (\mathbf{L}_{(m)}^p)_S = (\dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1})_S = (\mathbf{L}_{(M)}^p)_S = \mathbf{D}_{(M)}^p \dots \dots \dots (2.40)$$

2.4.3 ひずみ速度と変形速度

まず, 式(2.9)の両辺を物質時間微分すると次式のようになる .

$$\dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e = \frac{1}{2} (\dot{\hat{\mathbf{U}}}^{eT} \hat{\mathbf{U}}^e + \hat{\mathbf{U}}^{eT} \dot{\hat{\mathbf{U}}}^e) \dots \dots \dots (2.41)$$

一方, 式(2.38)は次式のように分解できる .

$$\mathbf{D}_{(m)}^e = (\dot{\hat{\mathbf{U}}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1})_S = \frac{1}{2} [(\hat{\mathbf{U}}^{e-T} \dot{\hat{\mathbf{U}}}^{eT}) + (\dot{\hat{\mathbf{U}}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1})] \dots \dots \dots (2.42)$$

式(2.41)および式(2.42)より, 次式の関係が得られる .

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{(m)}^e &= \frac{1}{2} [(\hat{\mathbf{U}}^{e-T} \dot{\hat{\mathbf{U}}}^{eT} \hat{\mathbf{U}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1}) + (\hat{\mathbf{U}}^{e-T} \dot{\hat{\mathbf{U}}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1})] = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{U}}^{e-T} (\dot{\hat{\mathbf{U}}}^{eT} \hat{\mathbf{U}}^e + \hat{\mathbf{U}}^{eT} \dot{\hat{\mathbf{U}}}^e) \hat{\mathbf{U}}^{e-1} = \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \\ &= \dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e \dots \dots \dots (2.43) \end{aligned}$$

ただし, ここでは微小弾性変形の仮定を用いている . 次に, 式(2.10)の両辺を物質時間微分すると次式のようになる .

$$\dot{\mathbf{E}}_{(I)}^p \equiv \frac{1}{2} (\dot{\mathbf{F}}^{pT} \mathbf{F}^p + \mathbf{F}^{pT} \dot{\mathbf{F}}^p) \dots \dots \dots (2.44)$$

一方, 式(2.40)は次式のように分解できる .

$$\mathbf{D}_{(M)}^p = (\dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1})_S = \frac{1}{2} [(\mathbf{F}^{p-T} \dot{\mathbf{F}}^{pT}) + (\dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1})] \dots \dots \dots (2.45)$$

式(2.44)および式(2.45)より，次式の関係が得られる．

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{(M)}^p &= \frac{1}{2}[(\mathbf{F}^{p-T} \dot{\mathbf{F}}^{pT} \mathbf{F}^p \mathbf{F}^{p-1}) + (\mathbf{F}^{p-T} \mathbf{F}^{pT} \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1})] = \frac{1}{2} \mathbf{F}^{p-T} (\dot{\mathbf{F}}^{pT} \mathbf{F}^p + \mathbf{F}^{pT} \dot{\mathbf{F}}^p) \mathbf{F}^{p-1} \\ &= \mathbf{F}^{p-T} \dot{\mathbf{E}}_{(I)}^p \mathbf{F}^{p-1} \dots\dots\dots (2.46) \end{aligned}$$

式(2.37)，式(2.38)および式(2.43)より，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

$$\mathbf{D}^e = \mathbf{R}^* \mathbf{D}_{(m)}^e \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* \dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (2.47)$$

となり，式(2.39)，式(2.40)および式(2.46)より，各配置における塑性変形速度と塑性ひずみ速度の関係は次式のように得られる．

$$\mathbf{D}^p = \mathbf{R}^* \mathbf{D}_{(m)}^p \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* \mathbf{D}_{(M)}^p \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* \mathbf{F}^{p-T} \dot{\mathbf{E}}_{(I)}^p \mathbf{F}^{p-1} \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (2.48)$$

式(2.21)と式(2.47)および式(2.28)と式(2.48)を比べると，各配置での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のようになる．

$$\mathbf{D}^e = \overset{\vee}{\mathbf{E}}^e, \quad \mathbf{D}_{(m)}^e = \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e \dots\dots\dots (2.49)$$

$$\mathbf{D}^p = \overset{\Delta}{\mathbf{E}}^p, \quad \mathbf{D}_{(m)}^p = \overset{\Delta}{\dot{\mathbf{E}}}_{(m)}^p, \quad \mathbf{D}_{(M)}^p = \overset{\Delta}{\dot{\mathbf{E}}}_{(M)}^p \dots\dots\dots (2.50)$$

2.4.4 ひずみ尺度と変形尺度

式(2.49)および式(2.50)より第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．

$$\mathbf{D}_{(m)} = \mathbf{D}_{(m)}^e + \mathbf{D}_{(m)}^p = \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e + \overset{\Delta}{\dot{\mathbf{E}}}_{(m)}^p \dots\dots\dots (2.51)$$

式(2.51)を時間積分すれば，

$$\int \mathbf{D}_{(m)} dt = \int \mathbf{D}_{(m)}^e dt + \int \mathbf{D}_{(m)}^p dt = \mathbf{E}_{(m)}^e + \bar{\mathbf{E}}_{(m)}^p, \quad \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e + \overset{\Delta}{\dot{\mathbf{E}}}_{(m)}^p = \mathbf{D}_{(m)}^e + \mathbf{D}_{(m)}^p \dots\dots\dots (2.52)$$

すなわち，式(2.52)より

$$\bar{\mathbf{E}}_{(m)}^p \neq \mathbf{E}_{(m)}^p \dots\dots\dots (2.53)$$

であることがわかる．式(2.53)における塑性ひずみ $\bar{\mathbf{E}}_{(m)}^p$ 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．一方，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．以上より，現配置から弾・剛体回転を取り除いた第2中間配置 $\beta_{(m)}$ で定義される量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⁽⁶⁹⁾．

2.5 塑性変形速度および塑性スピンの導出

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。結晶塑性論では、初期配置 $\beta_{(I)}$ における速度こう配の塑性部分 $L_{(I)}^p$ は、全すべり系のすべり速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ の総和をとることで、次式のように定義される⁽⁴²⁾。

$$L_{(I)}^p = F^{p-1} \dot{F}^p \equiv \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} s_{(I)}^{(\alpha)} \otimes m_{(I)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.54)$$

ここで、 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ はすべり系 α におけるすべり速度である。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

$$L_{(M)}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes m_{(M)}^{(\alpha)}, \quad L_{(m)}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} s_{(m)}^{(\alpha)} \otimes m_{(m)}^{(\alpha)}, \quad L^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.55)$$

と表される。微小弾性変形の仮定の下で式(2.33)、式(2.54)および式(2.55)から、結晶基底の変換則が次式のように得られる。

$$s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)} = R^* (s_{(m)}^{(\alpha)} \otimes m_{(m)}^{(\alpha)}) R^{*T} = R^* (s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes m_{(M)}^{(\alpha)}) R^{*T} = R^* F^p (s_{(I)}^{(\alpha)} \otimes m_{(I)}^{(\alpha)}) F^{p-1} R^{*T} \dots \dots \dots (2.56)$$

$$s^{(\alpha)} = R^* s_{(m)}^{(\alpha)} = R^* s_{(M)}^{(\alpha)} = R^* F^p s_{(I)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.57)$$

$$m^{(\alpha)} = R^* m_{(m)}^{(\alpha)} = R^* m_{(M)}^{(\alpha)} = R^* F^{p-T} m_{(I)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.58)$$

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

$$\gamma_{(I)} \equiv \int_t L_{(I)}^p dt = \sum_{\alpha} \gamma^{(\alpha)} s_{(I)}^{(\alpha)} \otimes m_{(I)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.59)$$

と定義される。ただし、ここでは $\dot{s}_{(I)}^{(\alpha)} = \dot{m}_{(I)}^{(\alpha)} = \mathbf{0}$ を考慮している。さらに、式(2.56)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。

$$\gamma_{(M)} = \sum_{\alpha} \gamma^{(\alpha)} s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes m_{(M)}^{(\alpha)}, \quad \gamma_{(m)} = \sum_{\alpha} \gamma^{(\alpha)} s_{(m)}^{(\alpha)} \otimes m_{(m)}^{(\alpha)}, \quad \gamma = \sum_{\alpha} \gamma^{(\alpha)} s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.60)$$

2.5.2 塑性変形速度および塑性スピン

速度こう配 L を対称部分と反対称部分に分ければ

$$L = D + W \dots \dots \dots (2.61)$$

となる。ここで、 $D = L_S$ は変形速度および $W = L_A$ は連続体スピンである。なお、 $()_A$ は2階のテンソルの反対称部分を表す。また、 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。

$$D = D^e + D^p \dots \dots \dots (2.62)$$

$$W = W^* + W^p \dots \dots \dots (2.63)$$

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^* および W^p はそれぞれ下部構造スピン⁽⁷⁴⁾⁽⁷⁵⁾ および塑性スピンである。式(2.62)および式(2.63)と式(2.34)を比較すれば、

$$L^p = D^p + W^p = R^* \hat{U}^e \dot{F}^p F^{p-1} \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dots\dots\dots (2.64)$$

$$L^e = D^e = R^* \dot{\hat{U}}^e \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dots\dots\dots (2.65)$$

$$W^* = \dot{R}^* R^{*T} \dots\dots\dots (2.66)$$

が得られる。ここで、 L^p を第1中間配置に戻し、式(2.55)を考慮すれば以下の関係が得られる。

$$L_{(M)}^p = D_{(M)}^p + W_{(M)}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes m_{(M)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.67)$$

次に、式(2.67)の右边を対称部分と反対称部分に分解すれば

$$D_{(M)}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} P_{S(M)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.68)$$

$$W_{(M)}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} P_{A(M)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.69)$$

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 $P_{(M)}^{(\alpha)}$ の対称部分および反対称部分であり、 $P_{S(M)}^{(\alpha)}$ は Schmid テンソルである。また、第2中間配置における塑性変形速度 $D_{(m)}^p$ および塑性スピン $W_{(m)}^p$ も同様にして

$$D_{(m)}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} P_{S(m)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.70)$$

$$W_{(m)}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} P_{A(m)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.71)$$

のように得られる。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 $P_{(m)}^{(\alpha)}$ の対称部分および反対称部分である。さらに、式(2.2)、式(2.57)および式(2.58)にしたがって参照配置を現配置へと変換すれば、現配置における塑性変形速度 D^p および塑性スピン W^p は

$$D^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} P_S^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.72)$$

$$W^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} P_A^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.73)$$

のように得られる。ここで、 $P^{(\alpha)} = s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)}$ であり、 $P_S^{(\alpha)}$ および $P_A^{(\alpha)}$ はそれぞれ $P^{(\alpha)}$ の対称部分および反対称部分である。

2.6 転位密度の幾何学的表現

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中の赤い転位のように、他すべり系に存在する林立転位のような潜在的な障害物の影響によって比較的近距離に堆積する正負の転位対は短範囲応力場を形成

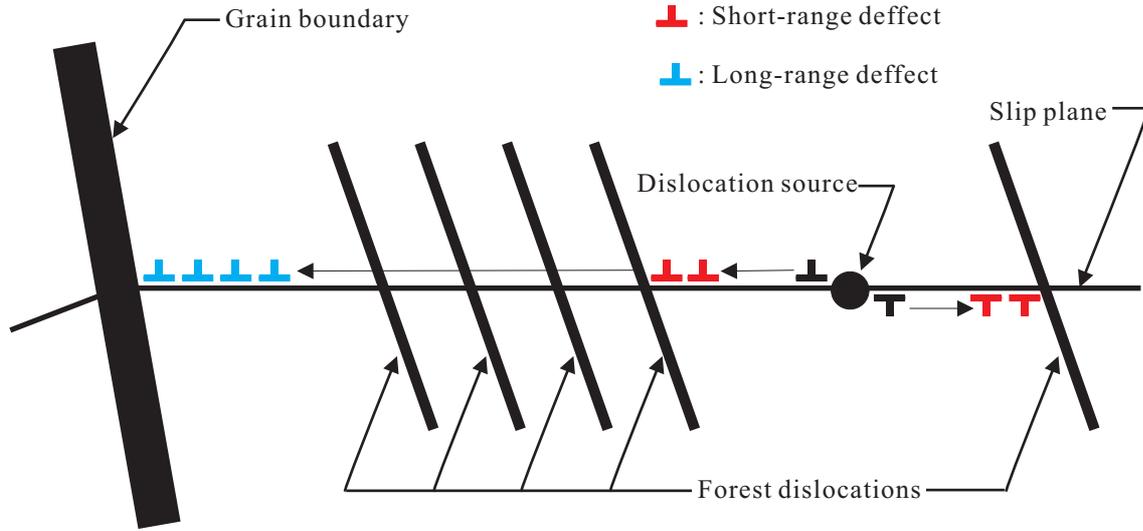


Fig. 2.2 Classification of crystal defects

する結晶欠陥に相当し、その密度はSS転位密度を用いて表現されることが多い⁽³³⁾⁽³⁴⁾⁽³⁵⁾。通常、SS転位密度は発展式を用いて積分計算を行うことにより算出されるため、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粒内を運動し続け、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転位(図2.2中の青い転位)は、対を成す異符号の転位が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の密度の表現には、すべりのこう配で表されるGN転位密度が有用である。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。したがって、図2.3のようなBurgers回路を考えた場合、Burgers回路内に単体で存在する孤立転位の密度はGN転位密度により表現され、転位対密度はSS転位密度を用いて表現される。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、全ての転位をGN転位密度により表現することができる。

Burgers回路内の全ての孤立転位および転位対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。

$$\rho(x_0 + \Delta x) = \rho(x_0) + \zeta_1 \frac{\partial \gamma}{\partial x_{i1}} + \zeta_2 \frac{\partial^2 \gamma}{\partial x_{i1} x_{i2}} + \dots + \zeta_n \frac{\partial^n \gamma}{\partial x_{i1} x_{i2} \dots x_{in}} \dots \dots \dots (2.74)$$

GN転位密度はすべりの1次こう配であるので、式(2.74)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。結晶欠陥場の微分幾何学⁽⁷⁷⁾⁽⁷⁸⁾によると、GN転位は非Riemann空間のねじれに相当し、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(ダイポールや原子空孔など)を表現することはでき

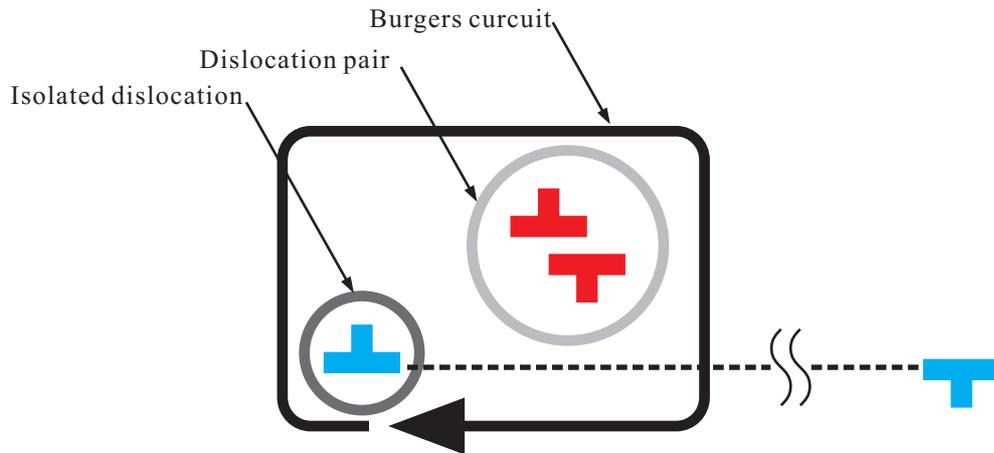


Fig. 2.3 Definition of dislocation density

ない。一方で，非Riemann空間の曲率テンソルを縮約した不適合度テンソル⁽³⁷⁾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。そこで次小節からは，Aoyagi-Shizawa⁽³⁶⁾によって結晶の塑性変形の素過程であるすべり $\gamma^{(\alpha)}$ に基づいて結晶塑性論に適合する形で定義されたGN転位密度テンソルおよびGN不適合度テンソルについて論じる。なお，GN不適合度は式(2.74)におけるすべりの2次こう配の項に相当するが，多重極などに相当する3次以上の高次こう配については，その存在確率および影響が小さいものとみなし，本研究では考慮しないこととする。

2.6.1 GN転位密度テンソル

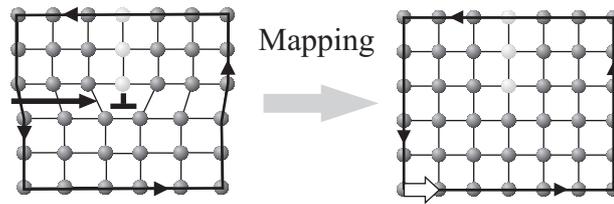
任意のBurgers回路内における正味のBurgersベクトルは，Kröner⁽³⁷⁾による転位密度テンソル α_K を用いて次式のように表される。

$$\mathbf{B} = \int_S \alpha_K n dS \dots\dots\dots (2.75)$$

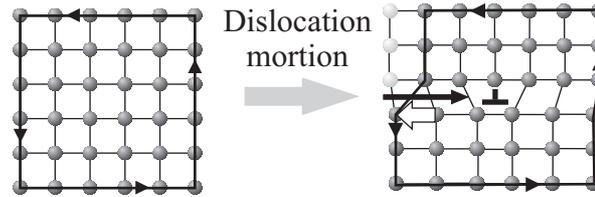
ここで， S ， dS および \mathbf{n} はそれぞれ Burgers 回路で囲まれた面，Burgers 回路内の微小面積要素および dS の単位法線ベクトルである。しかしながら，式(2.75)における α_K の次元は単位面積当たりの正味のBurgersベクトルであるため，通常の転位密度の定義である単位体積当たりの転位線の長さという次元を有するよう，初期配置において式(2.75)を次式のように書き改める。

$$\mathbf{B}_{(l)}^{(\alpha)} = \int_{S_{(l)}} \tilde{b} \alpha_{(l)}^{(\alpha)} dS_{(l)} \dots\dots\dots (2.76)$$

ここで， \tilde{b} は Burgers ベクトルの大きさ， $dS_{(l)}$ は $\mathbf{n}_{(l)} dS_{(l)}$ であり，式(2.76)はすべり系 α における転位の影響による正味のBurgersベクトルを示している。式(2.76)からわかるように， $\alpha_{(l)}^{(\alpha)} \mathbf{n}_{(l)}$ 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



(a) Burgers vector



(b) Slip of lattice

Fig. 2.4 Crystal structure around dislocation

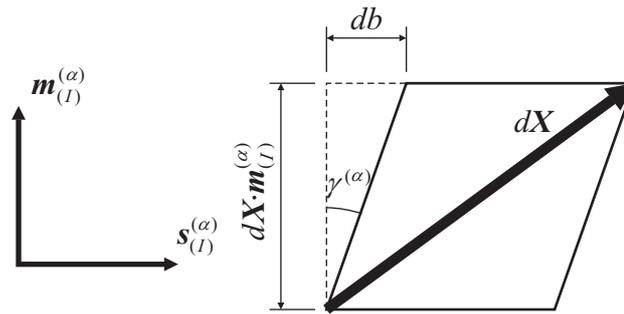


Fig. 2.5 Net burgers vector due to slip

Burgers ベクトルは微分量 $d\mathbf{B}_{(l)}^{(\alpha)}$ を用いて

$$\mathbf{B}_{(l)}^{(\alpha)} = - \oint_{L_{(l)}} d\mathbf{B}_{(l)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.77)$$

と表現できる . ここで $d\mathbf{B}_{(l)}^{(\alpha)}$ 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(2.77)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 2.4 参照) . また , $d\mathbf{B}_{(l)}^{(\alpha)}$ と微小線素ベクトル dX の関係は図 2.5 に示すように , 結晶のすべり方向 $s_{(l)}^{(\alpha)}$, すべり面の法線方向 $m_{(l)}^{(\alpha)}$ およびすべり $\gamma^{(\alpha)}$ を用いて次式のように表される .

$$d\mathbf{B}_{(l)}^{(\alpha)} = db s_{(l)}^{(\alpha)} = \gamma^{(\alpha)} (dX \cdot m_{(l)}^{(\alpha)}) s_{(l)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.78)$$

式 (2.78) を式 (2.77) に代入することにより ,

$$\mathbf{B}_{(l)}^{(\alpha)} = - \oint_{L_{(l)}} \gamma^{(\alpha)} (s_{(l)}^{(\alpha)} \otimes m_{(l)}^{(\alpha)}) dX \dots \dots \dots (2.79)$$

が得られる。式(2.76)および式(2.79)からすべり系の転位密度テンソルは、Stokesの回転定理を用いることにより

$$\tilde{b}\alpha_{(l)}^{(\alpha)} = -\text{curl}_{(l)}(\gamma^{(\alpha)}s_{(l)}^{(\alpha)} \otimes m_{(l)}^{(\alpha)}) \dots \dots \dots (2.80)$$

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 $\alpha_{(l)}$ が

$$\alpha_{(l)} = \sum_{\alpha} \alpha_{(l)}^{(\alpha)} = -\frac{1}{\tilde{b}} \text{curl}_{(l)}\gamma_{(l)} \dots \dots \dots (2.81)$$

と得られる。ここで、式(2.81)とKröner⁽³⁷⁾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 :

$$\alpha_K = -\text{curl}\beta \dots \dots \dots (2.82)$$

を比較すると、次元が異なるため式(2.81)は \tilde{b} で除されているが、結晶の塑性変形の指標となる $\gamma_{(l)}$ の回転により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 $\gamma_{(l)}$ が対応していることがわかる。また、初期配置において $s_{(l)}^{(\alpha)}$ および $m_{(l)}^{(\alpha)}$ は結晶粒内では一様であるから、式(2.81)は

$$\alpha_{(l)} = \frac{1}{\tilde{b}} \sum_{\alpha} s_{(l)}^{(\alpha)} \otimes m_{(l)}^{(\alpha)} \times \nabla_{(l)}\gamma^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.83)$$

と書ける。ここで、 $s_{(l)}^{(\alpha)} \otimes m_{(l)}^{(\alpha)}$ の変換式(2.56)を式(2.83)に適用することにより、現配置における α が

$$\alpha = \frac{1}{\tilde{b}} \sum_{\alpha} s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)} \times \nabla\gamma^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.84)$$

のように得られる。また、式(2.84)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(2.84)に代入すれば

$$\alpha = \frac{1}{\tilde{b}} \sum_{\alpha} s^{(\alpha)} \otimes (t^{(\alpha)} \times s^{(\alpha)}) \times \nabla\gamma^{(\alpha)} = \frac{1}{\tilde{b}} \sum_{\alpha} \{\nabla\gamma^{(\alpha)} \cdot t^{(\alpha)} (s^{(\alpha)} \otimes s^{(\alpha)}) - \nabla\gamma^{(\alpha)} \cdot s^{(\alpha)} (s^{(\alpha)} \otimes t^{(\alpha)})\} \dots \dots \dots (2.85)$$

を得る。また、図2.6(a)のように x_1x_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2.6(a)のようになる。Ashby⁽²⁶⁾は、すべり系に生じたすべりにこう配が存在するときに、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[補足B.2]。後にOhashi⁽⁷⁹⁾はこれを3次元に拡張して、刃状転位密度 $\rho_{edge}^{(\alpha)}$ およびらせん転位密度 $\rho_{screw}^{(\alpha)}$ を

$$\rho_{edge}^{(\alpha)} = -\frac{1}{\tilde{b}} \frac{\partial\gamma^{(\alpha)}}{\partial x_1} \dots \dots \dots (2.86)$$

$$\rho_{screw}^{(\alpha)} = \frac{1}{\tilde{b}} \frac{\partial\gamma^{(\alpha)}}{\partial x_3} \dots \dots \dots (2.87)$$

のように与えている。図2.6(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2.6(a)のように定まる。式(2.86)および式(2.87)から式(2.85)は

$$\alpha = \sum_{\alpha} (\rho_{screw}^{(\alpha)} s^{(\alpha)} \otimes s^{(\alpha)} + \rho_{edge}^{(\alpha)} s^{(\alpha)} \otimes t^{(\alpha)}) \dots \dots \dots (2.88)$$

と書ける。したがって、式(2.84)で表される α はAshbyが定義したGN転位密度を一般化したものであり、Aoyagi-Shizawa⁽³⁶⁾はこれをGN転位密度テンソルと定義している。

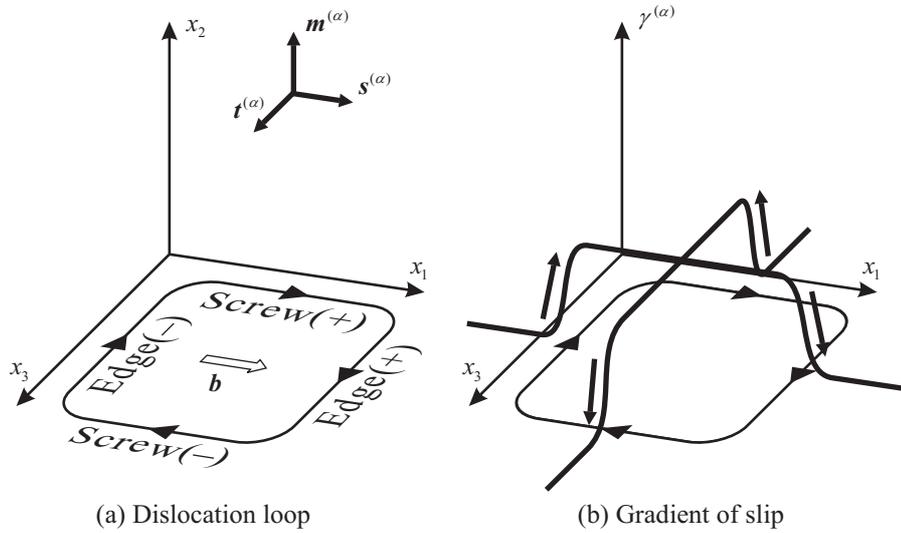


Fig. 2.6 A local coordinate system and crystal bases

2.6.2 GN不適合度

塑性ひずみの適合条件⁽⁷⁷⁾から, Kröner⁽³⁷⁾は現配置における不適合度テンソル η_K を

$$\eta_K = \text{curl}(\text{curl} \bar{E}^p)^T = \bar{E}^p \times (\nabla \otimes \nabla) \dots \dots \dots (2.89)$$

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(2.89)を指標表示すれば

$$\eta_{Kij} = \bar{E}^p_{kl, mn} e_{ikm} e_{jln} \dots \dots \dots (2.90)$$

となる. 式(2.89)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GN転位以外のほとんどの結晶欠陥(ダイポール, 原子空孔, 転傾, ...)を表現できるとされている⁽⁷⁷⁾. ここで, 式(2.89)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

$$\eta_K = \gamma \times (\nabla \otimes \nabla) \dots \dots \dots (2.91)$$

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(2.91)は

$$\eta_K = \sum_{\alpha} P_S^{(\alpha)} \times (\nabla \gamma^{(\alpha)} \otimes \nabla) \dots \dots \dots (2.92)$$

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(2.56)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(2.92)で得られた不適合度テンソルは, 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表してはいない. そこで, Aoyagi-Shizawa⁽³⁶⁾は転位対密度を直接表現できるよう, 図2.7(a)に示すような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,

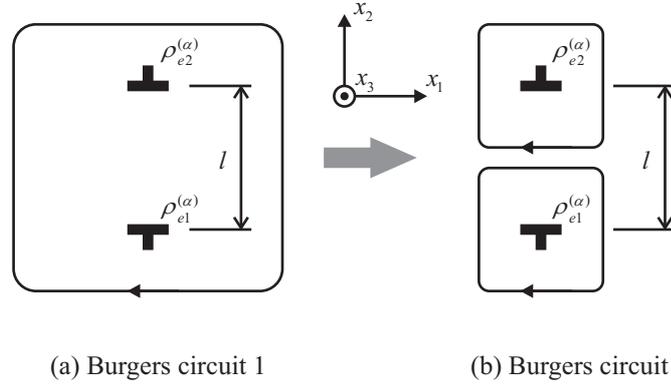


Fig. 2.7 Two adjacent dislocations in Burgers circuits

幾何学的議論に基づいて η_K を修正している．図 2.7(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．

$$\eta^{(\alpha)} = \rho_{e2}^{(\alpha)} - \rho_{e1}^{(\alpha)} = l \frac{\rho_{e2}^{(\alpha)} - \rho_{e1}^{(\alpha)}}{\Delta x_2} = l \frac{\Delta \rho_{edge}^{(\alpha)}}{\Delta x_2} \dots \dots \dots (2.93)$$

ここで， l は最隣接転位間距離であり，この例では $l = 1/\sqrt{\rho_{e2}^{(\alpha)}} = \Delta x_2$ にて与えられる．また，式 (2.93) の $\eta^{(\alpha)}$ は， $\rho_{e1}^{(\alpha)}$ および $\rho_{e2}^{(\alpha)}$ が異符号の場合，つまり転位対の場合のみ値を有し，同符号の場合には零となる．次に，式 (2.93) を連続分布転位モデルへ拡張すれば，

$$\eta^{(\alpha)} = l \frac{\partial \rho_{edge}^{(\alpha)}}{\partial x_2} \dots \dots \dots (2.94)$$

と書ける．ただし，この場合 l は GN 転位密度テンソルのノルム $\rho_G^{(\alpha)}$ を用いて $l = 1/\sqrt{\rho_G^{(\alpha)}} = 1/\sqrt{\|\alpha^{(\alpha)}\|}$ のように表されることになる．さらに，式 (2.86) を式 (2.94) に代入すると

$$\eta^{(\alpha)} = -\frac{l}{\bar{b}} \gamma_{,12}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.95)$$

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，式 (2.92) の不適合度テンソルをすべり系 α に対して書けば， $\eta_K^{(\alpha)} = P_S^{(\alpha) \times} (\nabla \gamma^{(\alpha)} \otimes \nabla)$ となる．図 2.6(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 (2.95) における $\eta^{(\alpha)}$ は $\eta_{K33}^{(\alpha)}$ に l/\bar{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，転位対密度は $\eta_K^{(\alpha)}$ の各成分に l/\bar{b} を乗じた量となることが確認できる．したがって，式 (2.92) 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

$$\eta = \frac{l}{\bar{b}} \eta_K = \frac{l}{\bar{b}} \sum_{\alpha} P_S^{(\alpha) \times} (\nabla \gamma^{(\alpha)} \otimes \nabla) \dots \dots \dots (2.96)$$

となる。式(2.96)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、Aoyagi-Shizawa⁽³⁶⁾は η を幾何学的に必要な不適合度(GN不適合度)テンソルと定義している。式(2.96)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、式(2.84)および式(2.96)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、Aoyagi-Shizawa⁽³⁶⁾は両者をあわせてGN結晶欠陥と称している。

2.6.3 GN結晶欠陥の成分

式(2.84)および式(2.96)の各密度をすべり系 α に対して書けば

$$\alpha^{(\alpha)} \equiv \alpha_{screw}^{(\alpha)} s^{(\alpha)} \otimes s^{(\alpha)} + \alpha_{edge}^{(\alpha)} s^{(\alpha)} \otimes t^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.97)$$

$$\eta^{(\alpha)} \equiv \eta_{cs}^{(\alpha)} (s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)})_s + \eta_{ds}^{(\alpha)} (s^{(\alpha)} \otimes t^{(\alpha)})_s + \eta_{ce}^{(\alpha)} (m^{(\alpha)} \otimes t^{(\alpha)})_s + \eta_{de}^{(\alpha)} (t^{(\alpha)} \otimes t^{(\alpha)})_s \dots \dots \dots (2.98)$$

となる。なお、式(2.98)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。式(2.97)において、 $\alpha_{screw}^{(\alpha)}$ および $\alpha_{edge}^{(\alpha)}$ 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2.6(a)に示すようにすべり $\gamma^{(\alpha)}$ を用いて次のように具体化される。

$$\alpha_{screw}^{(\alpha)} = \frac{1}{b} \gamma_{,3}^{(\alpha)}, \quad \alpha_{edge}^{(\alpha)} = -\frac{1}{b} \gamma_{,1}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.99)$$

式(2.98)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2.8(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2.8(b)参照], 同一すべり面上にある正負の刃状転位の対[図2.8(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2.8(d)参照]を表し、各成分の具体系は

$$\eta_{cs}^{(\alpha)} = -\frac{l}{b} \gamma_{,33}^{(\alpha)}, \quad \eta_{ds}^{(\alpha)} = \frac{l}{b} \gamma_{,32}^{(\alpha)}, \quad \eta_{ce}^{(\alpha)} = \frac{l}{b} \gamma_{,13}^{(\alpha)}, \quad \eta_{de}^{(\alpha)} = -\frac{l}{b} \gamma_{,12}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.100)$$

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

$$\rho_G^{(\alpha)} \equiv \|\alpha^{(\alpha)}\|, \quad \rho_\eta^{(\alpha)} \equiv \|\eta^{(\alpha)}\| \dots \dots \dots (2.101)$$

となる。 $\rho_G^{(\alpha)}$ 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孤立転位および転位対の堆積を意味している。

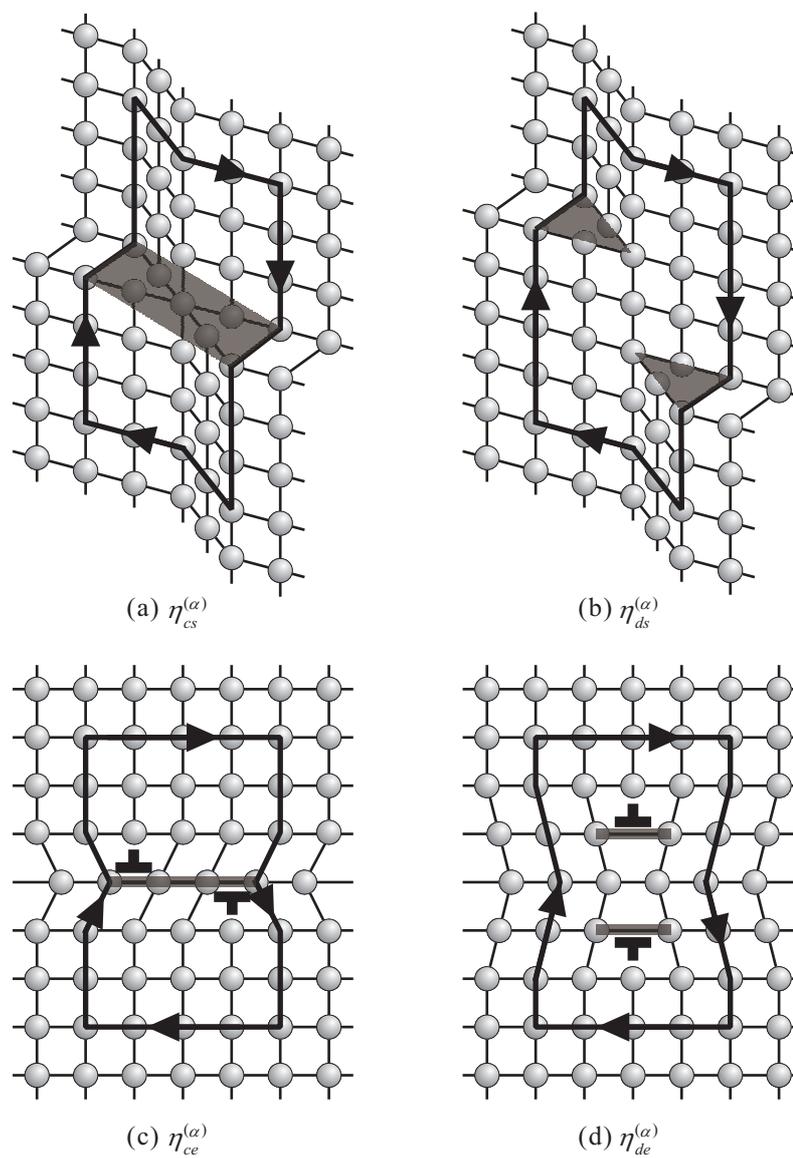


Fig. 2.8 Components of GN incompatibility

第3章

材料硬化に関する熱力学的検討

本章ではまず、志澤・若林⁽⁷⁰⁾による転位ドリフト速度理論に基づき、全自由エネルギーを用いて熱力学的内力を定義する。全自由エネルギーの引数に塑性ひずみ、保存量としての塑性ひずみ速度、さらに前章で言及したGN転位密度およびGN不適合度を内部変数として導入し、各内力を定義する。また、質量保存則から連続の式を、仮想仕事の原理から力学的境界条件および釣合い方程式を、熱力学第1法則からエネルギー方程式を、そして熱力学第2法則からエントロピー不等式およびClausius-Duhemの不等式を導出する。

本章の後半では、まずClausius-Duhemの不等式をGreen-Zerna⁽⁶⁷⁾の手法を介して保存部分と散逸部分に分離し、その保存部分から速度形弾性構成式を導出する。一方、材料硬化には転位蓄積が深く関わっており、転位-結晶塑性論では蓄積転位密度の情報を考慮した結晶の臨界分解せん断応力モデルとしてBailey-Hirschの式⁽⁶⁰⁾を用いるのが一般的である。そのため、結晶の硬化則の引数に転位密度のノルムが含まれることの熱力学的整合性について検討する必要がある。そこで、Clausius-Duhemの不等式の散逸部分を結晶の各すべり系に関する量を用いて表すことで、分解せん断応力の引数にGN転位密度およびGN不適合度のノルムが含まれることを示す。各転位密度が材料硬化に影響を及ぼすことを明らかにすることで、それらを結晶の硬化則へ導入することの熱力学的整合性を示す。

3.1 内力の定義

まず、全自由エネルギーの引数を考える。巨視的変数には、転位ドリフト速度理論⁽⁷⁰⁾における引数(温度および全ひずみ)を導入する。内部変数には、結晶の硬化則がひずみ速度依存性を有することを考慮して、非可逆量である塑性ひずみ速度を導入する。さらに、前章で定義したGN転位密度テンソルおよびGN不適合度テンソルを引数に導入する。すなわち、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ようになる。

$$\bar{\Psi} = \bar{\Psi}(\theta, \bar{E}_{(m)}; \bar{D}_{(m)}^p, \alpha_{(m)}, \eta_{(m)}) \dots \dots \dots (3.1)$$

ただし $\bar{\Psi} \equiv \rho_0 \bar{\psi}$ は全自由エネルギー、 $\bar{\psi}$ は単位質量あたりの全自由エネルギー、 ρ_0 は初期配置 $\beta_{(l)}$ における密度、 θ は温度および $\bar{E}_{(m)}$ は全ひずみである。また、セミコロン;は巨視的変数と内部変数を区別するために用いており、セミコロン;の左部は巨視的変数、右部は

内部変数を表している．さらに $\bar{D}_{(m)}^p$ は塑性ひずみ速度， $\alpha_{(m)}$ および $\eta_{(m)}$ はそれぞれ

$$\alpha_{(m)} \equiv \sum_{\alpha} \alpha_{(m)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (3.2)$$

$$\eta_{(m)} \equiv \sum_{\alpha} \eta_{(m)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (3.3)$$

で表される構造全体の GN 転位密度および GN 不適合度である．式 (3.1) の全自由エネルギー $\bar{\Psi}$ の物質時間微分は次式のようになる．

$$\begin{aligned} \dot{\bar{\Psi}} &= \dot{\bar{\Psi}}(\theta, \bar{E}_{(m)}; \bar{D}_{(m)}^p, \alpha_{(m)}, \eta_{(m)}) \\ &= -H\dot{\theta} + \tilde{T}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)} + \tilde{N}_{(m)} \cdot \dot{\bar{D}}_{(m)}^p + \tilde{H}_{\alpha(m)} \cdot \dot{\alpha}_{(m)} + \tilde{H}_{\eta(m)} \cdot \dot{\eta}_{(m)} \dots\dots\dots (3.4) \end{aligned}$$

式 (3.4) より各内力を熱力学的力として次式のように定義する．

$$-H = -\rho_0 \eta \equiv \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \theta}, \quad \tilde{T}_{(m)} \equiv \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \bar{E}_{(m)}}, \quad \tilde{N}_{(m)} \equiv \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \bar{D}_{(m)}^p}, \quad \tilde{H}_{\alpha(m)} \equiv \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \alpha_{(m)}}, \quad \tilde{H}_{\eta(m)} \equiv \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \eta_{(m)}} \dots\dots\dots (3.5)$$

ここで， \tilde{A} は Jacobian : $J \equiv \det F$ を用いて $\tilde{A} = JA$ と定義され， H はエントロピー， η はエントロピー密度， $\tilde{T}_{(m)}$ は Kirchhoff 応力， $\tilde{N}_{(m)}$ は塑性変形速度に共役な内力， $\tilde{H}_{\alpha(m)}$ および $\tilde{H}_{\eta(m)}$ は GN 転位および GN 転位ではカウントできない転位対 (ダイポールなど) のまわりに発生する偶力に似た内力である．また，式 (3.4) の両辺に J^{-1} をかけて現配置に戻せば，

$$\rho \dot{\bar{\psi}} = -\rho \eta \dot{\theta} + \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{N} \cdot \dot{\mathbf{D}}^p + \mathbf{H}_{\alpha} \cdot \dot{\alpha} + \mathbf{H}_{\eta} \cdot \dot{\eta} \dots\dots\dots (3.6)$$

を得る．ここで， \mathbf{T} は Cauchy 応力である．

3.2 保存則

本節では，質量保存則から連続の式を，仮想仕事の原理から力学的境界条件および釣合い方程式を，熱力学第 1 法則からエネルギー方程式を，そして熱力学第 2 法則からエントロピー不等式を導出する．

3.2.1 連続の式

質量保存則は次式のように書ける．

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho dv = 0 \dots\dots\dots (3.7)$$

ここで， ρ は現配置における密度であり $\frac{D}{Dt}$ は物質時間微分を表す演算子である．式 (3.7) に Reynolds の輸送定理を適用し，局所化すれば次式を得る．

$$\dot{\rho} + \rho \operatorname{div} \mathbf{v} = 0 \dots\dots\dots (3.8)$$

ここで， \mathbf{v} は物質速度である．式 (3.8) は通常 of 連続の式である．

3.2.2 力学的境界条件および釣合い方程式

内部変数の導入は、状態の自由度の増加を意味する。この自由度すなわち変数の増加に伴い、力学的釣合い方程式系について検討する必要がある。このため式(3.5)で定義した内力に対する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。この原理は一般に「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、次式のように定式化される。

$$\oint_a \dot{P}_s da + \int_v \dot{P}_B dv = \int_v \dot{P} dv \dots \dots \dots (3.9)$$

ここで、 $(\dot{})$ は仮想量を表し、 \dot{P}_s, \dot{P}_B および \dot{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、 dv は微小体積要素である。さらに、 \dot{P}_s, \dot{P}_B および \dot{P} は次式のように表現できる。

$$\dot{P}_s = \overset{(n)}{t} \cdot \dot{v} \dots \dots \dots (3.10)$$

$$\dot{P}_B = \dot{P}_b - \dot{P}_l = \rho f \cdot \dot{v} - \rho \dot{v} \cdot \dot{v} = \rho(f - \dot{v}) \cdot \dot{v} \dots \dots \dots (3.11)$$

$$\dot{P} = \rho \left. \frac{\dot{\Psi}}{\theta, \mathbf{D}^p, \alpha, \eta} \right|_{\theta, \mathbf{D}^p, \alpha, \eta} = \mathbf{T} \cdot \dot{\mathbf{D}} \dots \dots \dots (3.12)$$

ここで、 $\overset{(n)}{t}$ は表面力、 \dot{P}_b は純粋な物体力 ρf のなす仮想仕事率および \dot{P}_l は慣性力 $\rho \dot{v}$ のなす仮想仕事率である。また、 \dot{P} に関しては等温過程における全自由エネルギーの速度に等しいことが知られている。したがって、温度は一定としている。また、内部変数理論によると、内部変数は巨視的な力学的仕事率には陽に現れないので、内部変数も一定とすることで次式を得る。

$$\begin{aligned} \dot{P} &= \mathbf{T} \cdot \dot{\mathbf{D}} = \mathbf{T} \cdot (\dot{\mathbf{L}} - \dot{\mathbf{W}}) = \mathbf{T} \cdot (\text{grad} \dot{v} - \mathbf{I} \times \dot{w}) \\ &= \text{div}(\mathbf{T}^T \dot{v}) - (\text{div} \mathbf{T}) \cdot \dot{v} - (\mathbf{e} \cdot \mathbf{T}) \cdot \dot{w} \dots \dots \dots (3.13) \end{aligned}$$

ここで、 \mathbf{I} は恒等テンソルおよび \dot{w} は反対称テンソル $\dot{\mathbf{W}}$ に双対な軸性ベクトルである。式(3.10)、式(3.11)および式(3.13)を式(3.9)に代入し、Gaussの発散定理を用いて整理すれば次式が得られる。

$$\oint_a \overset{(n)}{t} \cdot \mathbf{T} \mathbf{n} \cdot \dot{v} da + \int_v \left[\left\{ \text{div} \mathbf{T} + \rho(f - \dot{v}) \right\} \cdot \dot{v} + (\mathbf{e} \cdot \mathbf{T}) \cdot \dot{w} \right] dv = 0 \dots \dots \dots (3.14)$$

ここで、 \mathbf{n} は微小面積要素の単位法線ベクトルである。式(3.14)において仮想量の任意性を考慮すれば、力学的境界条件となるCauchyの基本定理、力学的釣合い方程式である運動方程式および角運動量方程式がそれぞれ次式のように得られる。

$$\overset{(n)}{t} = \mathbf{T} \mathbf{n} \dots \dots \dots (3.15)$$

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

$$\mathbf{e} \cdot \mathbf{T} = \mathbf{0} \text{ または } \mathbf{T} = \mathbf{T}^T \dots \dots \dots (3.17)$$

3.2.3 エネルギー方程式

熱力学第1法則(エネルギー保存則)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, 次式のように定式化される.

$$\frac{D}{Dt} \int_v \rho(\hat{\varepsilon} + K)dv = \oint_a (P_s + Q_s)da + \int_v (P_b + Q_b)dv \dots \dots \dots (3.18)$$

ここで, $\hat{\varepsilon}$ は単位体積に供給される単位時間当たりの内部エネルギー密度であり, 内部変数を含む. また, Q_s および Q_b はそれぞれ単位面積および単位体積に供給される単位時間あたりの熱量であり, K は単位質量に供給される単位時間あたりの運動エネルギーである. これらの量は, それぞれ次式のように定義される.

$$Q_s \equiv -\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}, \quad Q_b \equiv \rho r, \quad K \equiv \frac{1}{2} v^2 \dots \dots \dots (3.19)$$

ここで, \mathbf{q} および r はそれぞれ熱流束ベクトルおよび放射熱密度である. 一方, 前述の仮想仕事率の原理式(3.9)から仮想量を現実量に置きかえることにより力学的エネルギーの釣り合い方程式が次式のように得られる.

$$\oint_a P_s da + \int_v P_b dv - \frac{D}{Dt} \int_v \rho K dv - \int_v P dv = 0 \dots \dots \dots (3.20)$$

式(3.18)と式(3.20)の差をとり, 得られた結果を局所化することで, エネルギー方程式が次式のように得られる.

$$\mathbf{T} \cdot \mathbf{D} - \text{div} \mathbf{q} + \rho(r - \dot{\hat{\varepsilon}}) = 0 \dots \dots \dots (3.21)$$

これは通常のエネルギー方程式と形式は類似しているが, 内部エネルギー速度 $\dot{\hat{\varepsilon}}$ が内部変数を含んだ $\dot{\hat{\varepsilon}}$ となっているところが従来のものと異なる.

3.2.4 エントロピー不等式

熱力学第2法則(エントロピー増大則)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, 次式のように定式化される.

$$\int_v \rho \overset{(i)}{\gamma} dv = \frac{D}{Dt} \int_v \rho \eta dv - \left\{ \oint_a \frac{\mathbf{q}}{\theta} \cdot (-\mathbf{n}) da + \int_v \frac{\rho r}{\theta} dv \right\} \geq 0 \dots \dots \dots (3.22)$$

ここで, $\overset{(i)}{\gamma}$ は内部エントロピー生成密度および η はエントロピー密度である. $\theta \geq 0$ を式(3.22)の両辺に乗じて局所化すれば, エントロピー不等式が次式のように得られる.

$$\rho \overset{(i)}{\theta \gamma} = \rho \theta \dot{\eta} - \mathbf{q} \cdot \mathbf{g} + \text{div} \mathbf{q} - \rho r \geq 0 \dots \dots \dots (3.23)$$

ここで, \mathbf{g} は温度こう配ベクトルであり, $\mathbf{g} \equiv (\text{grad} \theta) / \theta$ と定義される.

3.3 弾性構成式の導出

3.3.1 Clausius-Duhem の不等式

均一温度場の仮定 ($g = 0$) の下で, エネルギー方程式 (3.21) を用いてエントロピー不等式 (3.23) における供給熱の項 $\text{div}q - \rho r$ を消去すれば次式の Clausius-Duhem の不等式が得られる.

$$\Phi = \rho\theta\dot{\eta} - \rho\dot{\hat{\varepsilon}} + \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} \geq 0 \dots\dots\dots (3.24)$$

ここで, $\Phi \equiv \rho\theta\dot{\gamma}^{[i]}$ は散逸関数である. 式 (3.24) を J 倍して第2中間配置 $\beta_{(m)}$ に戻せば, 次式が得られる.

$$\tilde{\Phi} = \theta\dot{H} - \dot{\tilde{U}} + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)} \geq 0 \dots\dots\dots (3.25)$$

ただし, $H \equiv \rho_0\eta$ および $\tilde{U} \equiv \rho_0\hat{\varepsilon}$ である. 次に, 温度とエントロピーの独立従属関係を逆にするために, 次式で与えられる Helmholtz の自由エネルギー $\hat{\Psi}$ を導入する.

$$\hat{\Psi} = \tilde{U} - \theta H \dots\dots\dots (3.26)$$

式 (3.26) を用いて, 式 (3.25) に対して Legendre 変換を行えば,

$$\tilde{\Phi} = -(\dot{\hat{\Psi}} + H\dot{\theta}) + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)} \geq 0 \dots\dots\dots (3.27)$$

が得られる. ここで, 散逸関数 $\tilde{\Phi}$ を擬似的に状態量とみなせば, $\tilde{\Phi}$ は全自由エネルギーの散逸部分の速度として $\tilde{\Phi} = \tilde{\Psi}^{(d)}$ のように書け, $\tilde{\Psi}^{(d)} = \dot{\tilde{\Psi}} - \dot{\Psi}$ を考慮すれば式 (3.4) および式 (3.27) より次式が得られる.

$$\dot{\tilde{\Psi}} = \dot{\Psi} - \tilde{\mathbf{N}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p - \tilde{\mathbf{H}}_{\alpha(m)} \cdot \dot{\alpha}_{(m)} - \tilde{\mathbf{H}}_{\eta(m)} \cdot \dot{\eta}_{(m)} \dots\dots\dots (3.28)$$

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, ここではじめて内部変数のする仕事を陽に表示する. すなわち, 式 (3.28) および式 (2.51) を式 (3.27) に代入し, 式 (2.51) および式 (2.49) を用いて変形すれば,

$$\tilde{\Phi} = -(\dot{\Psi} + H\dot{\theta}) + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^e + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^p + \tilde{\mathbf{N}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p + \tilde{\mathbf{H}}_{\alpha(m)} \cdot \dot{\alpha}_{(m)} + \tilde{\mathbf{H}}_{\eta(m)} \cdot \dot{\eta}_{(m)} \geq 0 \dots\dots\dots (3.29)$$

が得られる. 弾塑性体あるいは粘塑性体等の塑性体は, 摩擦板とダッシュポットを並列結合し, それをばねと直列結合した Maxwell モデルによりモデル化される. したがって, ひずみやひずみ速度が構成量に, 応力や応力速度がその引数にならなければならない. そこで, 状態量として次式で与えられる Gibbs 関数 G を導入する.

$$G = \Psi - \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{E}_{(m)}^e \dots\dots\dots (3.30)$$

式 (3.30) を用いて, 式 (3.29) に対して Legendre 変換を行えば, 散逸関数は次式のようなになる.

$$\tilde{\Phi} = -(\dot{G} + H\dot{\theta} + \mathbf{E}_{(m)}^e \cdot \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}) + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^p + \tilde{\mathbf{N}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p + \tilde{\mathbf{H}}_{\alpha(m)} \cdot \dot{\alpha}_{(m)} + \tilde{\mathbf{H}}_{\eta(m)} \cdot \dot{\eta}_{(m)} \geq 0 \dots\dots\dots (3.31)$$

3.3.2 保存部分の熱力学的制限

式(3.31)では，可逆部分において力と速度の関係を逆転させたため，非可逆部分においても同様に力と速度の関係を逆転させれば，式(3.31)より G の引数となり得るものを次のように選ぶことができる．

$$G = G(\theta, \tilde{T}_{(m)}, \dot{\theta}, \dot{\tilde{T}}_{(m)}, \tilde{N}_{(m)}, \dot{\tilde{N}}_{(m)}, \tilde{H}_{\alpha(m)}, \dot{\tilde{H}}_{\alpha(m)}, \tilde{H}_{\eta(m)}, \dot{\tilde{H}}_{\eta(m)}) \dots \dots \dots (3.32)$$

また，等存在の公理⁽⁸⁰⁾より，各構成量の引数も熱力学的ポテンシャル G と同様に選ぶ．式(3.32)に物質時間微分を施せば，次式が得られる．

$$\begin{aligned} \dot{G} = & \frac{\partial G}{\partial \theta} \cdot \dot{\theta} + \frac{\partial G}{\partial \tilde{T}_{(m)}} \cdot \dot{\tilde{T}}_{(m)} + \frac{\partial G}{\partial \dot{\theta}} \cdot \ddot{\theta} + \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{T}}_{(m)}} \cdot \ddot{\tilde{T}}_{(m)} \\ & + \frac{\partial G}{\partial \tilde{N}_{(m)}} \cdot \dot{\tilde{N}}_{(m)} + \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{N}}_{(m)}} \cdot \ddot{\tilde{N}}_{(m)} + \frac{\partial G}{\partial \tilde{H}_{\alpha(m)}} \cdot \dot{\tilde{H}}_{\alpha(m)} + \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{H}}_{\alpha(m)}} \cdot \ddot{\tilde{H}}_{\alpha(m)} + \dots \dots \dots (3.33) \end{aligned}$$

式(3.33)を式(3.31)に代入すると次式のようになる．

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi} = & - \left(\frac{\partial G}{\partial \theta} + H \right) \cdot \dot{\theta} - \left(\frac{\partial G}{\partial \tilde{T}_{(m)}} + E_{(m)}^e \right) \cdot \dot{\tilde{T}}_{(m)} \\ & - \left(\frac{\partial G}{\partial \dot{\theta}} \cdot \ddot{\theta} + \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{T}}_{(m)}} \cdot \ddot{\tilde{T}}_{(m)} + \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{N}}_{(m)}} \cdot \ddot{\tilde{N}}_{(m)} + \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{H}}_{\alpha(m)}} \cdot \ddot{\tilde{H}}_{\alpha(m)} + \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{H}}_{\eta(m)}} \cdot \ddot{\tilde{H}}_{\eta(m)} \right) \\ & + \tilde{T}_{(m)} \cdot D_{(m)}^p + \tilde{N}_{(m)} \cdot \dot{D}_{(m)}^p + \tilde{H}_{\alpha(m)} \cdot \dot{\alpha}_{(m)} + \tilde{H}_{\eta(m)} \cdot \dot{\eta}_{(m)} \geq 0 \dots \dots \dots (3.34) \end{aligned}$$

式(3.32)を考慮すれば，式(3.34)の中辺第3項内の各項は各速度について線形であるため，不等式(3.34)が常に成立するためには，

$$\frac{\partial G}{\partial \dot{\theta}} = 0, \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{T}}_{(m)}} = 0, \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{N}}_{(m)}} = 0, \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{H}}_{\alpha(m)}} = 0, \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{H}}_{\eta(m)}} = 0 \dots \dots \dots (3.35)$$

でなければならない．したがって， G の引数は次式のように制限される．

$$G = G(\theta, \tilde{T}_{(m)}) \dots \dots \dots (3.36)$$

この結果，式(3.34)の中辺第1項および第2項も各速度について線形となるため，次式のような可逆部分に関する熱力学的関係式が得られる．

$$H = -\frac{\partial G}{\partial \theta}, E_{(m)}^e = -\frac{\partial G}{\partial \tilde{T}_{(m)}} \dots \dots \dots (3.37)$$

一方， $\tilde{T}_{(m)}$ ， $\tilde{N}_{(m)}$ ， $\tilde{H}_{\alpha(m)}$ ， $\tilde{H}_{\eta(m)}$ はそれぞれ $D_{(m)}^p$ ， $\dot{D}_{(m)}^p$ ， $\dot{\alpha}_{(m)}$ ， $\dot{\eta}_{(m)}$ に依存するため，これらに関連する項は正值をとる可能性がある．また，式(3.36)および式(3.37)より，各構成量の引数も次のように制限される．

$$H = H(\theta, \tilde{T}_{(m)}) \quad E_{(m)}^e = E_{(m)}^e(\theta, \tilde{T}_{(m)}) \dots \dots \dots (3.38)$$

3.3.3 速度形弾性構成式

式(3.37)₂より弾性構成式を具体化する。本研究では、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、Gibbs関数をその引数が作る係数テンソルの不変量で展開する。 $\tilde{T}_{(m)}$ が作るスカラー不変量は次のように書ける。

$$I_1 = C^{(1)} \cdot \tilde{T}_{(m)}, \quad I_2 = \tilde{T}_{(m)} : C^{(2)} : \tilde{T}_{(m)} \dots \dots \dots (3.39)$$

ここでは、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の不変量を選んでいく。また、 $C^{(1)}$ および $C^{(2)}$ は不変量をつくる係数テンソルである。この結果、 G の関数形は

$$G = G(\theta, I_1, I_2) \dots \dots \dots (3.40)$$

となる。式(3.39)を式(3.37)₂に代入して展開すれば、次式が得られる。

$$E_{(m)}^e = -\frac{\partial G}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial \tilde{T}_{(m)}} - \frac{\partial G}{\partial I_1} \frac{\partial I_1}{\partial \tilde{T}_{(m)}} - \frac{\partial G}{\partial I_2} \frac{\partial I_2}{\partial \tilde{T}_{(m)}} = -\frac{\partial G}{\partial I_1} C^{(1)} - 2 \frac{\partial G}{\partial I_2} C^{(2)} : \tilde{T}_{(m)} \dots \dots \dots (3.41)$$

なお、ここでは温度 θ に関する項は無視している。 $\tilde{T}_{(m)} = \mathbf{0}$ のとき $E_{(m)}^e = \mathbf{0}$ とすれば、式(3.41)は

$$E_{(m)}^e = C^{(2)} : \tilde{T}_{(m)} \dots \dots \dots (3.42)$$

となる。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(3.42)は

$$E_{(m)}^e = C^{(2)} : T_{(m)} \dots \dots \dots (3.43)$$

となる。式(3.43)の両辺に物質時間微分を施せば、第2中間配置 $\beta_{(m)}$ における速度形弾性構成式が次式のように得られる。

$$\dot{T}_{(m)} = C_{(m)}^e : \dot{E}_{(m)}^e \dots \dots \dots (3.44)$$

ここで、 $C_{(m)}^e$ は次式により定義される4階の異方性弾性定数テンソルである[補足C.1参照]。

$$C_{(m)}^e \equiv C^{(2)-1} \dots \dots \dots (3.45)$$

また、 $C_{(m)}^e$ は次式のような対称性を有するため、その成分は21成分に制限される。

$$C_{(m)ijkl}^e = C_{(m)jilk}^e = C_{(m)klij}^e \dots \dots \dots (3.46)$$

3.4 分解せん断応力の引数

古典的な塑性論では、最大散逸速度の原理⁽⁸¹⁾を用いて塑性構成式を導出する。しかしながら、本研究で用いる結晶塑性論では、塑性変形速度が式(2.68)のように運動学的関係式から決まるため、塑性構成式は不要であり、すべり速度を決定する硬化則のみが必要となる。そのため、本節では塑性構成式の導出は行わず、分解せん断応力の引数の検討のみを行う。

式(3.31), 式(3.35)および式(3.37)より, 散逸関数には次式のように純粹散逸項のみが残る.

$$\Phi = \mathbf{T}'_{(m)} \cdot \mathbf{D}^p_{(m)} + \mathbf{N}'_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}^p_{(m)} + \mathbf{\Pi}_{\alpha(m)} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)} + \mathbf{\Pi}_{\eta(m)} \cdot \dot{\boldsymbol{\eta}}_{(m)} \geq 0 \dots\dots\dots (3.47)$$

ここで(′)は偏差部分を表す. なお, ここでは J^{-1} が乗じられており, 塑性変形には偏差部分のみが寄与することを考慮している. 式(3.47)を各すべり系に関する量として表示すれば, 次式が得られる [補足C.2 参照].

$$\Phi = \sum_{\alpha} \tau^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \nu^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \pi_{\alpha}^{(\alpha)} \dot{\rho}_G^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \pi_{\eta}^{(\alpha)} \dot{\rho}_{\eta}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (3.48)$$

ここで, $\tau^{(\alpha)}$, $\nu^{(\alpha)}$, $\pi_{\alpha}^{(\alpha)}$ および $\pi_{\eta}^{(\alpha)}$ はそれぞれ $\mathbf{T}'_{(m)}$, $\mathbf{N}'_{(m)}$, $\mathbf{\Pi}_{\alpha(m)}$ および $\mathbf{\Pi}_{\eta(m)}$ の α すべり系に関する有効成分であり, $\rho_G^{(\alpha)}$ および $\rho_{\eta}^{(\alpha)}$ は $\alpha^{(\alpha)}$ および $\eta^{(\alpha)}$ のノルムである [式(2.101) 参照]. $\Phi = \dot{\bar{\Psi}}^{(d)}$ であるため, 式(3.48)は

$$\dot{\bar{\Psi}}^{(d)} = \sum_{\alpha} \tau^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \nu^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \pi_{\alpha}^{(\alpha)} \dot{\rho}_G^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \pi_{\eta}^{(\alpha)} \dot{\rho}_{\eta}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (3.49)$$

となり, この全自由エネルギーの散逸部分を全微分形に書き直せば,

$$d\bar{\Psi}^{(d)} = \sum_{\alpha} \tau^{(\alpha)} d\gamma^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \nu^{(\alpha)} d\dot{\gamma}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \pi_{\alpha}^{(\alpha)} d\rho_G^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \pi_{\eta}^{(\alpha)} d\rho_{\eta}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (3.50)$$

となる. したがって, 全自由エネルギーの散逸部分の関数形は次のようになる.

$$\bar{\Psi}^{(d)} = \bar{\Psi}^{(d)}(\gamma^{(\alpha)}, \dot{\gamma}^{(\alpha)}, \rho_G^{(\alpha)}, \rho_{\eta}^{(\alpha)}) \dots\dots\dots (3.51)$$

また, 式(3.50)から分解せん断応力は

$$\tau^{(\alpha)} = \bar{\nu} \frac{\partial \bar{\Psi}^{(d)}}{\partial \gamma^{(\alpha)}} \dots\dots\dots (3.52)$$

となる. ここで, $\bar{\nu}$ は未定定数である. そのため, 分解せん断応力の関数形は次のようになる.

$$\tau^{(\alpha)} = \tau^{(\alpha)}(\gamma^{(\alpha)}, \dot{\gamma}^{(\alpha)}, \rho_G^{(\alpha)}, \rho_{\eta}^{(\alpha)}) \dots\dots\dots (3.53)$$

式(3.53)から, 分解せん断応力はGN転位密度テンソルおよびGN不適合度テンソルのノルムを引数に持つため, 各転位密度が材料の加工硬化に影響を及ぼしていることがわかる. そのため, 結晶の硬化則に各転位密度を導入することは熱力学的体系にも整合しているといえる.

第4章

転位-結晶塑性論

本章では、転位スケールと結晶粒スケールの情報の橋渡しを可能とする転位-結晶塑性論について論じる。まず、本研究で用いる転位密度の定義を行うとともに、Aoyagi-Shizawa⁽³⁶⁾によってGN結晶欠陥に整合する形で導出された転位の対消滅モデルについて述べる。次に、第3章で導出した速度形弾性構成式に基づいて、結晶粒スケールにおける結晶塑性構成式(弾粘塑性構成式)を導出する。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手法に関する一般論を展開する。さらに、転位密度が極めて低い結晶粒において、転位の枯渇に起因した流れ応力の増加を表現できる新たな臨界分解せん断応力モデルを提案し、本モデルを転位-結晶塑性論に導入する。なお、本章ではFEM解析の準備として、結晶塑性構成式の粘塑性がもつ強い非線形性を緩和するための接線係数法および結晶基底ベクトルの更新方法についても述べる。

4.1 転位密度の定義

本節では、第2章において定義したGN結晶欠陥(GN転位密度テンソルおよびGN不適合度テンソル)をすべり系 α に関する量として定義し、これらの量に整合する転位の対消滅による動的回復モデル⁽³⁶⁾を導出する。

式(2.84)より、すべり系 α に蓄積するGN転位密度テンソル $\alpha^{(\alpha)}$ は、

$$\alpha^{(\alpha)} = \frac{1}{b} \mathbf{P}^{(\alpha)} \times \nabla \gamma^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.1)$$

と与えられる。ここで、 $\mathbf{P}^{(\alpha)} \equiv \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)}$ である。一方、式(2.96)からすべり系 α に蓄積するGN不適合度テンソル $\eta^{(\alpha)}$ は、

$$\eta^{(\alpha)} = \frac{l^{(\alpha)}}{b} \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \times (\nabla \gamma^{(\alpha)} \otimes \nabla) \dots \dots \dots (4.2)$$

のように表される。ここで、 $l^{(\alpha)}$ はすべり系 α における最隣接転位間距離であり、 $\alpha^{(\alpha)}$ のノルム $\rho_G^{(\alpha)} \equiv \sqrt{\alpha^{(\alpha)} \cdot \alpha^{(\alpha)}}$ を用いて $l^{(\alpha)} = 1/\sqrt{\rho_G^{(\alpha)}}$ のように与えられる。第2章において言及したように、GN転位密度はBurgers回路内の孤立転位密度を、またGN不適合度は転位対密度を表し、 $\eta^{(\alpha)}$ はSS転位密度の役割を果たしている。したがって、GN転位密度およびGN不適合度は、それぞれ長範囲オーダーおよび短範囲オーダーに属する結晶欠陥であることがわ

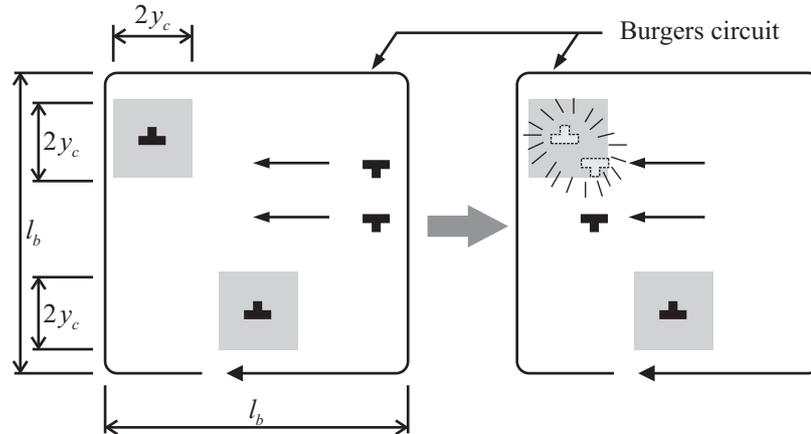


Fig. 4.1 Annihilation of dislocation pairs

かる。なお、本研究ではトライポール以上の多重極に相当する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みなして無視する。

$\eta^{(\alpha)}$ のノルムを $\rho_{\eta}^{(\alpha)} \equiv \sqrt{\eta^{(\alpha)} \cdot \eta^{(\alpha)}}$ と書くとき、 $\rho_{\eta}^{(\alpha)}$ はすべり系 α に蓄積した転位対の密度を表す。しかしながら、 $\rho_{\eta}^{(\alpha)}$ はある時刻の変形状態のみで決まる幾何学的状態量であるため、転位のダイナミクス(転位の反応、生成および消滅など)を表現することができない。特に、転位の消滅に起因する動的回復現象は結晶の加工硬化特性に大きく影響を与えると考えられており、その要因として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、Lommer-Cottrell 固着 [補足 D.3] 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⁽¹⁾⁽⁸²⁾ が、Aoyagi-Shizawa⁽³⁶⁾ は特に転位の対消滅に着目し、幾何学的な観点から転位の対消滅に起因する動的回復現象を以下のようにモデル化している。図 4.1 に示すような代表寸法が 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。

$$P_{\eta} = f \frac{4y_c^2}{l_b^2} l_b^2\rho_{\eta}^{(\alpha)} = 4fy_c^2\rho_{\eta}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.3)$$

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)であり、数原子間距離程度の値となる⁽²⁹⁾。また、 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、すべり系 α において対消滅を起こした転位対密度 $\rho_R^{(\alpha)}$ は

$$\rho_R^{(\alpha)} = P_{\eta}\rho_{\eta}^{(\alpha)} = 4fy_c^2\rho_{\eta}^{(\alpha)2} \dots \dots \dots (4.4)$$

のように得られる。ただし、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 $\rho_R^{(\alpha)} \leq \rho_{\eta}^{(\alpha)}$ となる。以上より、転位の対消滅に起因する動的回復を考慮したすべり系 α における全転位密度は、すべり系 α における初期転位密度 $\rho_0^{(\alpha)}$ および上述の $\rho_G^{(\alpha)}$ 、 $\rho_{\eta}^{(\alpha)}$ および $\rho_R^{(\alpha)}$ を用いて次式のように書ける。

$$\rho^{(\alpha)} = \rho_0^{(\alpha)} + \rho_G^{(\alpha)} + \rho_{\eta}^{(\alpha)} - \rho_R^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.5)$$

式(4.5)は、結晶基底および結晶のすべりに基づいて表現された量であるため、これらの量を用いれば結晶粒スケールの情報から結晶粒内に蓄積した転位密度を表現することが可能となる。

4.2 結晶塑性構成式の導出

式(2.49)を第2中間配置 $\beta_{(m)}$ における速度形弾性構成式(3.44)に代入すれば、次式が得られる。

$$\dot{T}_{(m)} = C_{(m)}^e : D_{(m)}^e \dots \dots \dots (4.6)$$

また、式(2.51)および式(2.70)を式(4.6)に代入すれば、第2中間配置における弾粘塑性構成式が次式のように得られる。

$$\begin{aligned} \dot{T}_{(m)} &= C_{(m)}^e : (D_{(m)} - D_{(m)}^p) \\ &= C_{(m)}^e : D_{(m)} - C_{(m)}^e : \sum_{\alpha} P_{S(m)}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.7) \end{aligned}$$

さらに、式(2.2)、式(2.3)にしたがって参照配置を現配置へと変換すれば、現配置における弾粘塑性構成式が次式のように得られる。

$$\overset{\nabla}{T} = C^e : D - C^e : \sum_{\alpha} P_S^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.8)$$

ここで、 $\overset{\nabla}{T}$ はCauchy応力のMandel-Kratochvil速度および C^e は4階の異方性弾性係数である。なお、 $\overset{\nabla}{T}$ は下部構造スピン $W^* = W - W^p$ を用いて、

$$\overset{\nabla}{T} = \dot{T} - W^* T + T W^* \dots \dots \dots (4.9)$$

のように具体化される。式(4.8)は、結晶粒スケールにおける結晶塑性構成式(弾粘塑性構成式)となる。

一方、 $\overset{\nabla}{T}$ とCauchy応力のJaumann速度 $\overset{\circ}{T} = \dot{T} - W T + T W$ との間には、次式が成立する。

$$\overset{\nabla}{T} = \overset{\circ}{T} + W^p T - T W^p \dots \dots \dots (4.10)$$

ここで、塑性スピン W^p は式(2.73)のようにすべり速度と結晶基底を用いて表されることを考慮すれば、式(4.10)における右辺の第2項および第3項は

$$W^p T - T W^p = \sum_{\alpha} \beta^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.11)$$

のように書き換えられる。ただし、 $\beta^{(\alpha)}$ は次式によって定義される。

$$\beta^{(\alpha)} \equiv P_A^{(\alpha)} T - T P_A^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.12)$$

式(4.10)、式(4.11)および式(4.12)を式(4.8)に代入して整理すれば、次式が得られる。

$$\overset{\circ}{T} = C^e : D - \sum_{\alpha} \Xi^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.13)$$

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

$$\Xi^{(\alpha)} \equiv C^e : P_S^{(\alpha)} + \beta^{(\alpha)} \dots\dots\dots (4.14)$$

式(4.13)は一見Jaumann速度を共回転速度に選んだ構成式のように見えるが，単にすべり速度に関する項を右辺にまとめるために，左辺がJaumann速度の形式をとったに過ぎず，式(4.13)はMandel-Kratovich速度を共回転速度に選んだ式(4.8)とまったく等価である．

以上のように，結晶塑性論では古典的な塑性論において必要となる塑性構成式および塑性スピンの発展式を用いることなく構成式を導出することが可能となる．そのため，結晶塑性論に必要なのは式(4.8)の弾粘塑性構成式と次節以降で示すすべり速度硬化則のみとなり，理論体系が非常に簡潔である．

4.3 結晶の変形場への転位密度の導入方法

4.3.1 すべり速度硬化則

すべり系 α におけるすべり速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ は，すべり面上の分解せん断応力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．通常，粘塑性形の結晶塑性論⁽²⁵⁾においては， $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ に対するすべり速度硬化則として次式のようなHutchinson⁽⁸³⁾やPan-Rice⁽⁸⁴⁾による指数則が用いられる．

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0^{(\alpha)} \text{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{1/m} \dots\dots\dots (4.15)$$

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． $\tau^{(\alpha)}$ はすべり系 α におけるすべり面上のすべり方向に作用するせん断応力であり，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 $m^{(\alpha)}$ を用いて，

$$\tau^{(\alpha)} = s^{(\alpha)} \cdot T m^{(\alpha)} = P^{(\alpha)} \cdot T \dots\dots\dots (4.16)$$

のように与えられる．一方，流れ応力 $g^{(\alpha)}$ は結晶のすべり変形に対する抵抗を示す関数であり，次式のように全すべり量 γ に依存する形で表現される．

$$g^{(\alpha)} = g^{(\alpha)}(\gamma) \dots\dots\dots (4.17)$$

$$\gamma = \sum_{\alpha} |\gamma^{(\alpha)}| \dots\dots\dots (4.18)$$

また，通常の結晶塑性論における $g^{(\alpha)}$ の発展方程式は次式で与えられる⁽²⁵⁾．

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h^{(\alpha\beta)} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \dots\dots\dots (4.19)$$

ここで， $h^{(\alpha\beta)}$ はすべり系間の相互作用を考慮した結晶の硬化係数であり， $\alpha = \beta$ のときは自己硬化を， $\alpha \neq \beta$ のときは潜在硬化[補足D.1]を表す． $h^{(\alpha\beta)}$ は結晶の加工硬化特性をほぼ支配しており，硬化係数のモデルをいかに決定するかが非常に重要となる．従来の結晶塑性論では，硬化係数に関しては引張試験などの実験から得られた硬化曲線から同定された

関数形を与えるといった現象論的モデルが用いられている[補足D.2]。このような硬化係数モデルにより、金属の巨視的な加工硬化挙動を比較的簡便に表現することが可能となる。しかしながら、金属結晶の加工硬化は転位蓄積を素因としていることから、より微視的な材料挙動に立脚した結晶の加工硬化特性を表現するためには、蓄積転位密度といった転位場の情報を結晶の硬化係数 $h^{(\alpha\beta)}$ に導入する必要がある。

4.3.2 Bailey-Hirsch の式

金属結晶の加工硬化は、転位密度の上昇によって転位同士が互いの運動を妨げ合うことで引き起こされる。材料科学の分野では一般に単結晶、多結晶を問わず、流れ応力 g と蓄積転位密度 ρ の間には、次の Bailey-Hirsch の式⁽⁶⁰⁾ がよく成り立つことが知られている。

$$g = \tau_r + a\mu\tilde{b}\sqrt{\rho} \dots\dots\dots (4.20)$$

ここで、 τ_r は参照せん断応力、 a は 0.1 オーダーの数値係数、 μ は横弾性係数および \tilde{b} は Burgers ベクトルの大きさである。この式は、流れ応力が蓄積転位密度の平方根と線形関係にあるという実験結果に基づいている。また、Ohashi⁽⁸⁵⁾ は次式のように、式(4.20)を FCC 結晶の多重すべり系に対応できる形に拡張している。

$$g^{(\alpha)} = \tau_r^{(\alpha)} + \sum_{\beta} \Omega^{(\alpha\beta)} a\mu\tilde{b}\sqrt{\rho^{(\beta)}} \dots\dots\dots (4.21)$$

ここで、 $\Omega^{(\alpha\beta)}$ はすべり系 α - β 間における転位運動の相互作用を表す行列であり、各成分は各すべり系の自己硬化、同すべり面、同すべり方向、Hirth 固着、可動ジョグ形成および Lommer-Cottrell 固着などに関するすべり系間の転位相互作用を表している。詳細については補足D.3を参照されたい。なお、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 に蓄積した転位密度である。 $\rho^{(\beta)} = \rho_0^{(\beta)}$ の場合、式(4.21)の $g^{(\alpha)}$ は臨界分解せん断応力になる。臨界分解せん断応力とは、初期から結晶粒内に既にある転位が運動を開始するために必要な分解せん断応力、すなわち結晶のすべり変形を開始させるために必要な分解せん断応力である。

4.3.3 転位密度を導入した硬化係数の導出

流れ応力 $g^{(\alpha)}$ の発展式(4.19)と式(4.21)を比較することで、転位密度の情報を導入した結晶の硬化係数 $h^{(\alpha\beta)}(\rho)$ を導出する⁽⁸⁵⁾。まず、式(4.21)を時間微分すれば、

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} \Omega^{(\alpha\beta)} a\mu\tilde{b} \frac{\dot{\rho}_h^{(\beta)}}{2\sqrt{\rho_h^{(\beta)}}} \dots\dots\dots (4.22)$$

となる。ここで、 $\rho_h^{(\beta)}$ は結晶の加工硬化に寄与する転位密度であり、式(4.21)の右辺第2項にある $\rho^{(\beta)}$ と同じものである。次に、可動転位の平均速度 $V^{(\alpha)}$ とすべり速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ の間には、次式のような Orowan の式が成立することが知られている⁽¹⁹⁾。

$$|\dot{\gamma}^{(\alpha)}| = \tilde{b}\rho_m^{(\alpha)}V^{(\alpha)} \dots\dots\dots (4.23)$$

ここで、 $\rho_m^{(\alpha)}$ は可動転位密度である。また、可動転位が平均寿命 $T^{(\alpha)}$ 後に不動化し、結晶中に堆積すると考えれば、加工硬化に寄与する蓄積転位密度の発展式は

$$\dot{\rho}_h^{(\alpha)} = c \frac{\rho_m^{(\alpha)}}{T^{(\alpha)}} \dots\dots\dots (4.24)$$

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、可動転位の平均速度 $V^{(\alpha)}$ および平均寿命 $T^{(\alpha)}$ から、可動転位の平均飛行距離 $L^{(\alpha)}$ が

$$L^{(\alpha)} = V^{(\alpha)} T^{(\alpha)} \dots\dots\dots (4.25)$$

と求まる。式(4.24)および式(4.25)を式(4.23)に代入して整理すれば、加工硬化に寄与する蓄積転位密度の発展とすべり速度の関係式が

$$\dot{\rho}_h^{(\alpha)} = \frac{c}{bL^{(\alpha)}} |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| \dots\dots\dots (4.26)$$

のように得られる。さらに、式(4.26)を式(4.22)に代入すれば、蓄積転位密度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。

$$\dot{\sigma}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} \frac{1}{2} ac\mu \frac{Q^{(\alpha\beta)}}{L^{(\beta)} \sqrt{\rho_h^{(\beta)}}} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \dots\dots\dots (4.27)$$

したがって、式(4.27)と式(4.19)を比較することで、転位密度の情報を導入した結晶の硬化係数 $h^{(\alpha\beta)}$ は

$$h^{(\alpha\beta)} = \frac{1}{2} ac\mu \frac{Q^{(\alpha\beta)}}{L^{(\beta)} \sqrt{\rho_h^{(\beta)}}} \dots\dots\dots (4.28)$$

のように得られる。式(4.28)を硬化係数として式(4.19)に用いることで、転位蓄積に基づいた結晶の加工硬化挙動を表現することが可能となる。

一方、転位の平均飛行距離 $L^{(\alpha)}$ に関しては、様々なモデルが提案されている⁽⁷⁹⁾⁽⁸⁶⁾⁽⁸⁷⁾。本研究では動的回復に起因する転位対の減少、すなわち転位運動に対する障害物の減少による平均飛行距離の増加を自律的に表現するため、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た Ohashi⁽⁸⁵⁾ による次式の転位密度依存形の平均飛行距離モデルを採用する。

$$L^{(\alpha)} = \frac{c^*}{\sqrt{\sum_{\beta} \omega^{(\alpha\beta)} \rho_L^{(\beta)}}} \dots\dots\dots (4.29)$$

$$\omega^{(\alpha\beta)} = \frac{|\Omega^{(\alpha\beta)} - \Omega^{(\alpha\alpha)}|^p}{\sum_{\gamma} |\Omega^{(1\gamma)} - \Omega^{(11)}|^p} \dots\dots\dots (4.30)$$

ここで、 c^* は可動転位が不動化するまでに切る林立転位の本数、 $\omega^{\alpha\beta}$ は自己硬化を除く転位の相互作用重み行列、 $\rho_L^{(\beta)}$ は可動転位の運動の障害に寄与する転位密度および p は数値

パラメータである．式(4.29)を式(4.28)に代入すれば，硬化係数 $h^{(\alpha\beta)}$ の最終的な形は次式のようになる．

$$h^{(\alpha\beta)} = \frac{ac\mu\Omega^{(\alpha\beta)}}{2c^*} \sqrt{\frac{\sum_{\gamma} \omega^{(\beta\gamma)} \rho_L^{(\gamma)}}{\rho_h^{(\beta)}}} \dots\dots\dots (4.31)$$

4.3.4 硬化係数への各種転位密度の導入方法

これまで議論してきたとおり，図2.2のように転位源から発生した転位のうち，林立転位のような潜在的な障害物などの影響により比較的近距离に堆積する転位対の密度は，幾何学量であるGN不適合度または統計量であるSS転位密度を用いて表現することができる．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長距離飛行した後に，粒界など同一すべり系に存在する障害物に堆積する孤立転位の密度は，GN転位密度を用いて表現される．したがって，GN不適合度またはSS転位密度により表現される転位対密度およびGN転位密度で表現される孤立転位密度は，それぞれ結晶の潜在硬化および自己硬化に寄与すると考えることができる．なお，GN転位密度の空間こう配が形成する背応力⁽³³⁾⁽⁴⁰⁾も，すべり系に作用する分解せん断応力と逆方向に働くため，転位運動の障害に影響を及ぼすと考えられているが，本研究ではGN転位密度を結晶の硬化則に導入することで，背応力の効果が陰に含まれる考え，そのような背応力を直接表現するモデルは導入しないこととする．

これまでに，結晶の加工硬化に寄与する転位密度 $\rho_h^{(\alpha)}$ または可動転位の運動の障害に寄与する転位密度 $\rho_L^{(\alpha)}$ への各種転位密度の導入方法については，以下のような手法が提案されている．Fleckら⁽³¹⁾は潜在硬化に寄与する転位対密度(SS転位密度)と自己硬化に寄与するGN転位密度を足し合わせて $\rho_h^{(\alpha)}$ へ反映させており，Ohashi⁽³⁴⁾はWeertman⁽⁸⁸⁾の見解に基づき，自己硬化に寄与するGN転位密度は $\rho_h^{(\alpha)}$ には用いず潜在硬化に寄与する転位対密度(SS転位密度)のみを $\rho_h^{(\alpha)}$ へ反映させ，GN転位密度の情報は $\rho_L^{(\alpha)}$ のみに導入している．一方，Aoyagi-Shizawa⁽³⁶⁾は潜在硬化のみならず自己硬化の影響も考慮するために，Fleckら⁽³¹⁾と同様に転位対密度(GN不適合度)およびGN転位密度の両方を $\rho_h^{(\alpha)}$ へ反映させている．しかしながら，Aoyagi-ShizawaはKuhlmann-Wilsdorf⁽⁸⁹⁾の議論に基づいて転位の平均飛行距離 $L^{(\alpha)}$ は，扱う分解能の範囲では短範囲オーダーに属すると考え， $\rho_L^{(\alpha)}$ については長範囲オーダーに属するGN転位密度は考慮せずに転位対密度(GN不適合度)のみを反映させている．また，Eversら⁽³³⁾は転位対密度(SS転位密度)およびGN転位密度を足し合わせて， $\rho_h^{(\alpha)}$ および $\rho_L^{(\alpha)}$ の双方へ導入している．さらに，転位対密度(SS転位密度)のみを考慮した転位-結晶塑性論⁽⁸⁵⁾における結晶の加工硬化モデルは， $\rho_h^{(\alpha)}$ および $\rho_L^{(\alpha)}$ のどちらにもGN転位密度を考慮せず，転位対密度(SS転位密度)のみを考慮したものに相当している．

以上より，結晶の加工硬化に寄与する転位密度 $\rho_h^{(\alpha)}$ または可動転位の運動の障害に寄与する転位密度 $\rho_L^{(\alpha)}$ へのGN結晶欠陥の導入方法としては，次に示す4通りの方法が考えられる．

$$\left. \begin{aligned} \rho_h^{(\alpha)} &= \rho_0^{(\alpha)} + \rho_{\eta}^{(\alpha)} - \rho_R^{(\alpha)} + \rho_G^{(\alpha)} \\ \rho_L^{(\alpha)} &= \rho_0^{(\alpha)} + \rho_{\eta}^{(\alpha)} - \rho_R^{(\alpha)} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (4.32)$$

$$\left. \begin{aligned} \rho_h^{(\alpha)} &= \rho_0^{(\alpha)} + \rho_\eta^{(\alpha)} - \rho_R^{(\alpha)} \\ \rho_L^{(\alpha)} &= \rho_0^{(\alpha)} + \rho_\eta^{(\alpha)} - \rho_R^{(\alpha)} + \rho_G^{(\alpha)} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (4.33)$$

$$\left. \begin{aligned} \rho_h^{(\alpha)} &= \rho_0^{(\alpha)} + \rho_\eta^{(\alpha)} - \rho_R^{(\alpha)} + \rho_G^{(\alpha)} \\ \rho_L^{(\alpha)} &= \rho_0^{(\alpha)} + \rho_\eta^{(\alpha)} - \rho_R^{(\alpha)} + \rho_G^{(\alpha)} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (4.34)$$

$$\left. \begin{aligned} \rho_h^{(\alpha)} &= \rho_0^{(\alpha)} + \rho_\eta^{(\alpha)} - \rho_R^{(\alpha)} \\ \rho_L^{(\alpha)} &= \rho_0^{(\alpha)} + \rho_\eta^{(\alpha)} - \rho_R^{(\alpha)} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (4.35)$$

本研究では、これまでに提案されている転位密度依存形の結晶の加工硬化モデルについて比較検討を行うために、転位対密度をGN不適合度の代わりにSS転位密度 $\rho_S^{(\alpha)}$ により表現する場合についても考える。通常、 $\rho_S^{(\alpha)}$ は発展式(4.26)により算出される。しかしながら、式(4.26)には動的回復による影響が考慮されていない。そこで、次式のような転位の対消滅も考慮したSS転位密度の発展式⁽²⁷⁾⁽²⁸⁾を採用する。

$$\dot{\rho}_S^{(\alpha)} = \left(\frac{c}{bL^{(\alpha)}} - \frac{y_c}{b} \rho_S^{(\alpha)} \right) |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| \dots\dots\dots (4.36)$$

ここで、 y_c は転位対の消滅距離である。 $\rho_S^{(\alpha)} = \rho_h^{(\alpha)}$ を仮定して式(4.36)を式(4.22)に代入し、得られた式を式(4.19)と比較すれば、転位の動的回復を考慮した結晶の硬化係数は

$$h^{(\alpha\beta)} = \frac{1}{2} a \mu \frac{\Omega^{(\alpha\beta)}}{\sqrt{\rho_h^{(\beta)}}} \left(\frac{c}{L^{(\beta)}} - y_c \rho_h^{(\beta)} \right) \dots\dots\dots (4.37)$$

となる。さらに、式(4.29)を式(4.37)に代入すれば、次式が得られる。

$$h^{(\alpha\beta)} = \frac{a \mu \Omega^{(\alpha\beta)}}{2 \sqrt{\rho_h^{(\alpha)}}} \left(\frac{c}{c^*} \sqrt{\sum_\gamma \omega^{(\beta\gamma)} \rho_L^{(\gamma)}} - y_c \rho_h^{(\beta)} \right) \dots\dots\dots (4.38)$$

式(4.31)と式(4.38)を比較すると、式(4.31)の右辺第2項が転位の対消滅による効果を表していることがわかる。式(4.32)~(4.35)のようにGN結晶欠陥を用いて蓄積転位密度を表現する場合には、対消滅を起こした転位密度 $\rho_R^{(\alpha)}$ をすでに考慮しているため、動的回復に関する情報が二重に含まれることを回避するよう、結晶の硬化係数には式(4.31)を用いる。一方、発展式(4.36)により表現されるSS転位密度を用いて、蓄積した転位対密度を表現する場合には、導出される硬化係数は式(4.38)となる。そのため、モデルの整合性を満足するよう、結晶の硬化係数には動的回復を考慮した式(4.38)を用いる。この場合、結晶の加工硬化に寄与する転位密度 $\rho_h^{(\alpha)}$ または可動転位の運動の障害に寄与する転位密度 $\rho_L^{(\alpha)}$ への各種転位密度の導入方法については、式(4.32)~(4.35)と同様に以下の4通りが考えられる。

$$\left. \begin{aligned} \rho_h^{(\alpha)} &= \rho_0^{(\alpha)} + \rho_S^{(\alpha)} + \rho_G^{(\alpha)} \\ \rho_L^{(\alpha)} &= \rho_0^{(\alpha)} + \rho_S^{(\alpha)} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (4.39)$$

$$\left. \begin{aligned} \rho_h^{(\alpha)} &= \rho_0^{(\alpha)} + \rho_S^{(\alpha)} \\ \rho_L^{(\alpha)} &= \rho_0^{(\alpha)} + \rho_S^{(\alpha)} + \rho_G^{(\alpha)} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (4.40)$$

$$\left. \begin{aligned} \rho_h^{(\alpha)} &= \rho_0^{(\alpha)} + \rho_S^{(\alpha)} + \rho_G^{(\alpha)} \\ \rho_L^{(\alpha)} &= \rho_0^{(\alpha)} + \rho_S^{(\alpha)} + \rho_G^{(\alpha)} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (4.41)$$

$$\left. \begin{aligned} \rho_h^{(\alpha)} &= \rho_0^{(\alpha)} + \rho_S^{(\alpha)} \\ \rho_L^{(\alpha)} &= \rho_0^{(\alpha)} + \rho_S^{(\alpha)} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (4.42)$$

式(4.32)~(4.35)および式(4.39)~(4.42)のいずれのモデルが妥当であるかについては、7.2節で各々のモデルを用いた数値解析から得られる応力-ひずみ線図の傾向を比較・検討することによって判定する。

4.4 結晶粒内の転位の枯渇状態に対応した臨界分解せん断応力モデル

4.4.1 従来の初期粒径依存形臨界分解せん断応力モデル

多結晶金属の降伏応力は結晶粒径の減少とともに増加し、降伏応力 σ_y と結晶粒径 d の間には、Hall-Petchの式と呼ばれる次式の関係が成り立つことがよく知られている⁽¹⁹⁾⁽⁹⁰⁾。

$$\sigma_y = \sigma_0 + k_y d^n \dots\dots\dots (4.43)$$

ここで、 σ_0 は摩擦応力、 k_y はHall-Petch係数および d は結晶粒径である。一般に、粒径にかかる指数 n の値は $-1/2$ であると考えられているが、最近では粒径が $1\mu\text{m}$ 以下の超微細粒に至るまでの広い範囲においては、必ずしも n の値が $-1/2$ とはならないことが報告されている⁽¹²⁾⁽¹³⁾⁽¹⁹⁾⁽⁹¹⁾。特に、 n の値を $-1/2$ とした上でUFGMの場合に限定した降伏応力の実験結果をプロットすると σ_0 の値が負となってしまう、式(4.43)の各項の物理的意味を考えた場合に不合理であることが指摘されている⁽¹³⁾⁽¹⁹⁾。一方、結晶粒径の減少に伴う金属材料の初期降伏応力の増加は、結晶粒サイズの減少に伴う転位運動のしにくさに原因付けられると考えられている。そのため、すべりのこう配という幾何学的特性から寸法効果が自然に含まれるGN転位密度を考慮し、転位-結晶塑性モデルに材料の特性長さを導入することで、多結晶塑性挙動の寸法依存性を再現しようとする研究が近年盛んに行われている⁽³¹⁾⁽³²⁾⁽³³⁾⁽³⁴⁾⁽³⁵⁾⁽⁴⁰⁾。これらの理論により、多結晶金属の粒径に依存した降伏後の流れ応力の変化の違いといった寸法依存性の表現が可能となっている。しかしながら、GN転位は材料が降伏した後に塑性変形が進行するとともに蓄積するため、従来の理論では「初期」降伏応力の粒径依存性を表現できない。そこで、Ohashiら⁽⁵⁵⁾は結晶粒内の転位源から1つの転位ループを放出させるために必要なせん断応力を考慮することで、初期粒径の減少に伴う臨界分解せん断応力の増加を表現できるモデルを以下のように導出している。

Ohashiらは、転位源からの転位の放出を結晶のすべり変形の第一段階であると考え、放出された転位と粒界の相互作用に着目することで、粒内に転位ループを放出させるために必要なせん断応力をモデル化している。まず、無限体中に長さ l_{FR} のFrank-Read源が存在するとき、その転位源から1個の転位ループを放出させるために必要な最小せん断応力 τ_{FR}

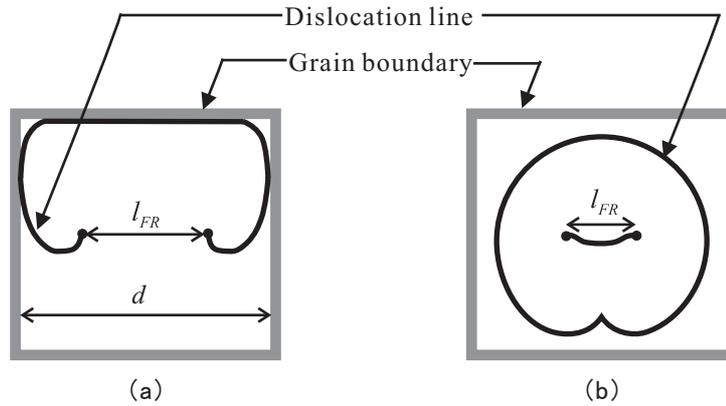


Fig. 4.2 Growth of dislocation loop generated from Frank-Read source

は、よく知られているように次式で与えられる⁽¹⁾。

$$\tau_{FR} = \frac{\mu\tilde{b}}{l_{FR}} \dots\dots\dots (4.44)$$

また、Ohashiらは離散転位動力学シミュレーションにより、図4.2のように剛体壁を仮定した粒界に囲まれた粒径 d の結晶粒中において、長さ l_{FR} の転位源から1個の転位ループを放出させるために必要なせん断応力を算出している。その結果によれば、 $l_{FR} > d/3$ の場合には、図4.2(a)のように転位ループの成長が粒界によって妨げられてしまうため、閉じた転位ループを形成させるためには、式(4.44)で与えられるせん断応力よりもはるかに大きな応力が必要となる。一方 $l_{FR} \leq d/3$ の場合には、図4.2(b)のように転位ループを形成させるのに必要なせん断応力はほぼ式(4.44)で与えられる。なお、式(4.44)からわかるように、転位源の長さが短いほど転位ループの形成に必要なせん断応力は大きくなる。以上より、結晶粒内に異なる長さの転位源が存在する場合には、長さが $l_{FR} = d/3$ の転位源が最初の転位ループを放出し、それに必要な最小せん断応力 τ_{loop} は

$$\tau_{loop} = B \frac{\mu\tilde{b}}{d/3} = 3B \frac{\mu\tilde{b}}{d} \dots\dots\dots (4.45)$$

となる。ここで B は数値パラメータであり、格子摩擦応力、ひずみ速度、Frank-Read源の特性および転位源から放出される転位の性質に依存する無次元量である。式(4.45)は、転位源から放出される転位の運動に対する障害物が粒界のみに限られる場合の臨界分解せん断応力に相当する。Ohashiらは、あらかじめ粒内に存在する転位やその他の介在物も転位運動の抵抗となることを考慮し、式(4.20)と式(4.45)の和をとることで、多結晶金属の初期平均粒径 \bar{d} に依存した流れ応力を次式のように表している。

$$g^{(\alpha)} = \tau_r^{(\alpha)} + \sum_{\beta} \Omega^{(\alpha\beta)} a \mu \tilde{b} \sqrt{\rho^{(\beta)}} + 3B \frac{\mu\tilde{b}}{d} \dots\dots\dots (4.46)$$

式(4.46)において $\rho^{(\beta)} = \rho_0^{(\beta)}$ の場合、 $g^{(\alpha)}$ は臨界分解せん断応力に相当するため、式(4.46)を用いることで初期粒径に依存した初期降伏応力の違いが表現される。

一方, Ohno-Okumura⁽⁵⁶⁾ はGN転位の自己エネルギーに基づくひずみこう配理論を用いて, この自由エネルギーが初期降伏応力の粒径依存性に寄与することを以下のように示している. まず, すべり系 α におけるGN転位による弾性ひずみエネルギー密度 $\psi_G^{(\alpha)}$ は,

$$\psi_G^{(\alpha)} = \alpha' \mu \tilde{b}^2 \rho_G^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.47)$$

となる. ここで, α' は0.5~1の定数である. 次に, すべり系 α に作用する分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ がなす塑性仕事は, このすべり系におけるすべり抵抗応力 $k^{(\alpha)}$ がなす散逸仕事とGN転位の生成に伴う弾性ひずみエネルギーの変化に費やされると考え, 次式に示す仮想仕事の原理式が任意のすべり変分 $\delta\gamma^{(\alpha)}$ に対して成り立つと仮定している.

$$\int_V \tau^{(\alpha)} \delta\gamma^{(\alpha)} dv = \int_V k^{(\alpha)} \delta\gamma^{(\alpha)} dv + \int_V \delta\psi_G^{(\alpha)} dv \dots \dots \dots (4.48)$$

ここで, $\delta\psi_G^{(\alpha)} = \xi^{(\alpha)} \cdot \nabla \delta\gamma^{(\alpha)}$ となり, $\xi^{(\alpha)}$ はすべりこう配に共役な高次応力である. これらの式はGurtinのひずみこう配理論⁽³⁹⁾の枠内にあるため, この理論と同様にして式(4.48)を局所化すれば, 高次応力の釣合い方程式が次式のように得られる.

$$\tau^{(\alpha)} - k^{(\alpha)} - \text{div} \xi^{(\alpha)} = 0 \dots \dots \dots (4.49)$$

すべりが結晶粒内に生じると, GN転位が粒界に堆積するため, 粒界から粒中心に向いたすべりこう配が粒界近傍に生じる. この結果, 次式のように表されるすべりこう配の共役力(高次応力) $\xi^{(\alpha)}$ が粒界近傍に発生すると考える.

$$\xi^{(\alpha)} = -\alpha' \mu \tilde{b} n_r \dots \dots \dots (4.50)$$

ここで, n_r は粒中心からの半径方向を表す単位ベクトルである. 式(4.50)を式(4.49)に代入し, 得られる式を粒全体にわたって積分すれば, すべり系 α にかかる分解せん断応力の粒内平均 $\langle \tau^{(\alpha)} \rangle$ が

$$\langle \tau^{(\alpha)} \rangle = k^{(\alpha)} + \theta \alpha' \frac{\mu \tilde{b}}{d} \dots \dots \dots (4.51)$$

のように得られる. ここで, 式(4.51)の左辺の $\langle \tau^{(\alpha)} \rangle$ は臨界分解せん断応力に相当し, θ は粒形状および結晶方位に依存した数値係数である. Ohno-Okumura⁽⁵⁶⁾の議論によれば, θ の値は $\theta \approx 5$ と見積もられている. 式(4.46)および式(4.51)において粒径依存性を表す項[式(4.46)の右辺第3項および式(4.51)の右辺第2項]は, とともに臨界分解せん断応力が粒径に反比例して変化するという同様の形をしていることが確認できる. これらのモデルを用いることで, 多結晶金属の初期平均粒径に依存した初期降伏応力の違いを表現することが可能となる.

ところで, 強ひずみ加工によって創製されたUFGMに焼鈍処理を施すことで得られる微細粒焼鈍材の中には, 転位密度が極めて低い結晶粒の存在が確認されている⁽¹¹⁾⁽¹²⁾⁽¹³⁾. これは, 粒径が非常に小さいことに加えて焼鈍により転位密度が低下することに起因していると考えられる. これを模式的に示すと, 図4.3のようになる. 図4.3(a)のように粒内に数本の転位線が存在している場合を考え, 転位密度を一定としたままで粒径のみを小さくすると図4.3(b)のようになる. さらに, 焼鈍処理を施すと転位密度が減少し, 図4.3(c)のようになる. 図4.3(c)中に灰色で示した粒の中には転位線がほとんど存在せず, このような

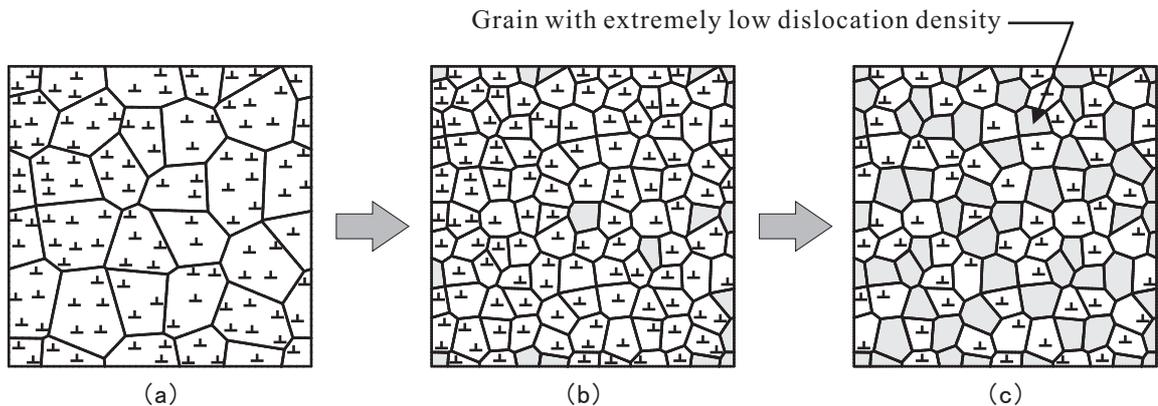


Fig. 4.3 Grains with extremely low dislocation density

粒においては塑性変形の素因となる転位の枯渇により，臨界分解せん断応力が変形の初期段階において一時的に増加することが予想される．しかしながら，従来の Bailey-Hirsch の式 (4.21) や式 (4.46) を用いた場合には，粒内の転位密度の減少とともに臨界分解せん断応力も減少してしまう．そこで，従来の Bailey-Hirsch の式 (4.21) を以下のように拡張する．

4.4.2 転位源としての粒界の役割を考慮した臨界分解せん断応力モデル

通常粒金属の場合，粒内に存在する転位源が活動し始めることで塑性変形が開始するが，転位密度が極めて低い微細粒においては，通常粒の場合と同程度の転位源が粒内に存在しているとは考えにくい．このような微細粒の場合は，材料内において大きな割合を占める粒界が転位源の役割を果たすと考えられている⁽⁶¹⁾⁽⁶²⁾⁽⁶³⁾⁽⁶⁴⁾．このように考えるには，材料は固溶原子などを含まない純金属であり，さらに材料内の粒界はポリゴン化されておらず，長範囲応力場を残す GN 転位をシンクとしてすでに吸収している必要がある．そこで，上記の条件の下で，図 4.4 に示すような機構を考える．粒界転位源を図 4.4(a)~(c) のように活動させるためには，通常の粒内転位源を活動させるのに比べて高い応力が必要であることが予想され，臨界分解せん断応力も高い値をとることになる．その後，粒界転位源からは 2 つ以上の異なるすべり系が活動して転位が放出され，それらの転位同士の相互作用により粒内で転位のピンギが生じることで，図 4.4(d) のように粒界転位源より優先的に活動できる転位源が粒内に形成される．そのため，通常粒金属と同様に，粒内転位源から放出された転位による塑性変形の進行が可能となり，流れ応力が低下すると考えられる [図 4.4(d)~(f)]．粒界転位源よりも優先的に活動できる粒内転位源の最小長さを l_k とすると，粒内に長さ l_k の転位線が存在するときの転位密度は，粒径 d を用いて l_k/d^3 のように表される．さらに，通常粒金属と同様に塑性変形が進行するためには，粒内転位源が複数個必要であると考えられる．そのため，転位源の位置が粒界から粒内に遷移する際の粒内転位密度 ρ_k は次式のように表現することができる．

$$\rho_k = \kappa \frac{l_k}{d^3} \dots \dots \dots (4.52)$$

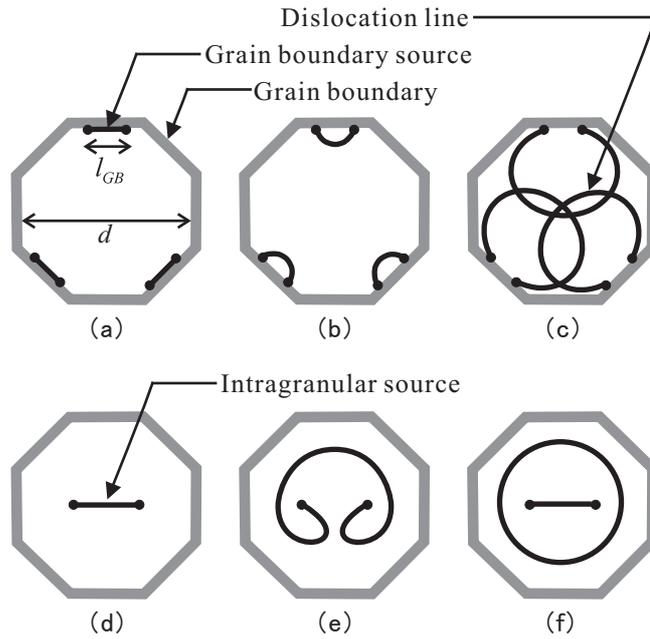


Fig. 4.4 Transition from grain boundary sources to intragranular sources

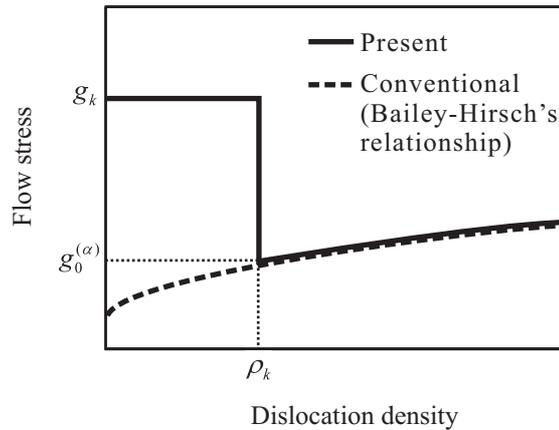


Fig. 4.5 Flow stress versus dislocation density

ここで、 κ は粒界転位源よりも優先的に活動できる粒内転位源の数を表す数値係数である。なお、本研究では式(4.52)で表される転位密度 ρ_k を臨界転位密度と称することにする。転位密度が極めて低い微細粒においては、臨界転位密度を境に塑性変形の進行の仕方が変化すると考え、従来のBailey-Hirschの式(4.21)を次式のように拡張する。

$$g^{(\alpha)} = \left\{ \begin{array}{ll} g_k & ; (\rho^{(\alpha)} < \rho_k) \\ \tau_r^{(\alpha)} + \sum_{\beta} \Omega^{(\alpha\beta)} a \mu \tilde{b} \sqrt{\rho^{(\beta)}} & ; (\rho_k \leq \rho^{(\alpha)}) \end{array} \right\} \dots\dots\dots (4.53)$$

ここで、 g_k は粒界転位源を活動させるために必要な最小せん断応力である。

ところで，前小節で述べた Ohashi ら⁽⁵⁵⁾ の議論によれば，Frank-Read 源が粒内に存在し，その長さが $l_{FR} \leq d/3$ の場合にはこの転位源の活動に必要なせん断応力はほぼ式(4.44)で与えられ，転位の放出に必要な最小せん断応力は $3\mu\tilde{b}/d$ となる．したがって，優先的に活動できる粒内転位源の最小長さは $l_k = d/3$ であると考えることができ，式(4.52)は次式のように書き換えることができる．

$$\rho_k = \frac{\kappa}{3d^2} \dots\dots\dots (4.54)$$

一方，転位源が粒界にある場合には，粒内にある場合に比べて，放出される転位と障壁となる粒界との間の距離が近くなるため，粒界転位源の活動には $3\mu\tilde{b}/d$ より大きなせん断応力が必要であることが予想される．そこで，図4.4(a)に示す粒界転位源の長さを $l_{GB} = \lambda d$ とし， $\lambda < 1/3$ とすることで粒界転位源の活動に必要な最小せん断応力 g_k を次式のように表す．

$$g_k = k_0 + \frac{\mu\tilde{b}}{l_{GB}} = k_0 + \frac{\mu\tilde{b}}{\lambda d} \quad \left(\lambda < \frac{1}{3}\right) \dots\dots\dots (4.55)$$

ここで， k_0 は粒径非依存のすべり抵抗および λ は粒界転位源の長さとの比を表す数値係数である．なお，粒径が十分に大きい場合を想定した際も， g_k は零とならずにある程度値をもつと考えられるため，式(4.55)の右辺第1項は常に必要となる．式(4.53)において $\rho^{(\alpha)} = \rho_k$ のときの流れ応力を $g_0^{(\alpha)}$ とし， $g_k > g_0^{(\alpha)}$ となるように λ を決定すれば，流れ応力と転位密度の関係は図4.5のようになる．図4.5において実線および破線はそれぞれ式(4.53)および従来の Bailey-Hirsch の式(4.21)を示している．図4.5に示すように，式(4.53)を用いることで粒内の転位の枯渇に起因した変形初期における臨界分解せん断応力の増加を表現することができる．また，式(4.54)および式(4.55)から ρ_k および g_k の値は粒径に依存して変化するため，式(4.53)より降伏応力の粒径依存性が表現される．なお， $\rho^{(\alpha)} = \rho_k$ のときの流れ応力 $g_0^{(\alpha)}$ は，式(4.54)を式(4.53)₂に代入することで次式のように得られる．

$$\begin{aligned} g_0^{(\alpha)} &= \tau_r^{(\alpha)} + a\mu\tilde{b} \sqrt{\rho^{(\alpha)}} + \sum_{\beta(\beta \neq \alpha)} \Omega^{(\alpha\beta)} a\mu\tilde{b} \sqrt{\rho^{(\beta)}} \\ &= \tau_r^{(\alpha)} + a\mu\tilde{b} \sqrt{\rho_k} + \sum_{\beta(\beta \neq \alpha)} \Omega^{(\alpha\beta)} a\mu\tilde{b} \sqrt{\rho^{(\beta)}} \\ &= \tau_r^{(\alpha)} + a \sqrt{\frac{\kappa}{3}} \frac{\mu\tilde{b}}{d} + \sum_{\beta(\beta \neq \alpha)} \Omega^{(\alpha\beta)} a\mu\tilde{b} \sqrt{\rho^{(\beta)}} \dots\dots\dots (4.56) \end{aligned}$$

式(4.56)の右辺第2項は，式(4.46)の右辺第3項または式(4.51)の右辺第2項と同様に，粒径に反比例して変化することが確認できる．そのため，式(4.54)で表される ρ_k を導入することで，式(4.46)の右辺第3項または式(4.51)の右辺第2項と同様の効果が式(4.53)₂の右辺第2項に含まれていることがわかる．したがって，このような粒径依存性が二重に含まれることを回避するよう，本研究では臨界分解せん断応力モデルとして式(4.53)を用いる際には，4.4.1節で紹介した Ohashi ら⁽⁵⁵⁾ または Ohno-Okumura⁽⁵⁶⁾ による初期粒径依存形の臨界分解せん断応力モデルについては考慮しないこととする．

GN 結晶欠陥を用いて結晶粒内の転位密度を表現し，臨界分解せん断応力の表現に式(4.53)を用いる場合には，転位密度の情報を考慮した硬化係数 $h^{(\alpha\beta)}$ は式(4.31)を求める手順

と同様にして，次式のように得られる．

$$h^{(\alpha\beta)} = \left\{ \begin{array}{ll} 0 & ; (\rho_h^{(\alpha)} < \rho_k) \\ \frac{ac\mu\Omega^{(\alpha\beta)}}{2c^*} \sqrt{\frac{\sum_{\gamma} \omega^{(\beta\gamma)} \rho_L^{(\gamma)}}{\rho_h^{(\beta)}}} & ; (\rho_k \leq \rho_h^{(\alpha)}) \end{array} \right\} \dots\dots\dots (4.57)$$

この場合，結晶の加工硬化に寄与する転位密度 $\rho_h^{(\alpha)}$ または可動転位の運動の障害に寄与する転位密度 $\rho_L^{(\alpha)}$ への各種転位密度の導入方法については，式(4.32)~(4.35)が考えられる．一方，SS転位密度の発展式(4.36)により転位対密度を表現し，臨界分解せん断応力の表現に式(4.53)を用いる場合には， $h^{(\alpha\beta)}$ は式(4.38)を求める手順と同様にして，次式のように得られる．

$$h^{(\alpha\beta)} = \left\{ \begin{array}{ll} 0 & ; (\rho_h^{(\alpha)} < \rho_k) \\ \frac{a\mu\Omega^{(\alpha\beta)}}{2\sqrt{\rho_h^{(\alpha)}}} \left(\frac{c}{c^*} \sqrt{\sum_{\gamma} \omega^{(\beta\gamma)} \rho_L^{(\gamma)}} - \gamma_c \rho_h^{(\beta)} \right) & ; (\rho_k \leq \rho_h^{(\alpha)}) \end{array} \right\} \dots\dots\dots (4.58)$$

この場合， $\rho_h^{(\alpha)}$ または $\rho_L^{(\alpha)}$ への各種転位密度の導入方法については，式(4.39)~(4.42)が考えられる．

4.5 接線係数法

金属材料の場合には通常，式(4.15)におけるひずみ速度感度指数 m の値は常温で 10^{-3} オーダーの値となるため， $1/m$ は 10^3 程度の大きさとなってしまふ．そのため，弾粘塑性構成式(4.13)を適用したFEM解析を行う場合には，極めて小さな時間増分を用いて解析しなければならない．そこで本研究では，Peirceら⁽²⁵⁾によって提案された接線係数法により，すべりのもつ強い非線形性を軽減することで，式(4.13)を数値解析に適した形に変形する．

時刻 t におけるすべり増分を次式のように定める．

$$\Delta\gamma^{(\alpha)} = \gamma_{t+\Delta t}^{(\alpha)} - \gamma_t^{(\alpha)} \dots\dots\dots (4.59)$$

ここで， Δt は時間増分である． $\Delta\gamma^{(\alpha)}$ について時刻 t および $t + \Delta t$ における $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ の値を用いて線形補間近似を行えば，

$$\Delta\gamma^{(\alpha)} = [(1 - \theta^{tan})\dot{\gamma}_t^{(\alpha)} + \theta^{tan}\dot{\gamma}_{t+\Delta t}^{(\alpha)}]\Delta t \dots\dots\dots (4.60)$$

となる．ここで， θ^{tan} は $0 \leq \theta^{tan} \leq 1$ の係数であり， $\theta^{tan} = 0$ のときはEuler法， $\theta^{tan} = 1/2$ のときはCrank-Nickolson法および $\theta^{tan} = 1$ のときは完全に陰的な積分法に対応する．次に，式(4.15)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

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}_{t+\Delta t}^{(\alpha)} &= \dot{\gamma}_t^{(\alpha)} + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \right)_t \Delta\tau^{(\alpha)} + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial g^{(\alpha)}} \right)_t \Delta g^{(\alpha)} \\ &= \dot{\gamma}_t^{(\alpha)} + \text{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \dot{\gamma}_0^{(\alpha)} \left(\left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right| \right)^{\frac{1}{m}} \left[\frac{\Delta t}{m} \left(\frac{\dot{\tau}^{(\alpha)}}{\tau^{(\alpha)}} - \frac{\dot{g}^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right) \right] \dots\dots\dots (4.61) \end{aligned}$$

のように近似する．ここで， $\dot{\tau}^{(\alpha)} = \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \cdot \dot{\mathbf{T}} = (\mathbf{C}^e : \mathbf{P}_S^{(\alpha)}) \cdot \mathbf{D}^e$ [補足D.4参照] および式(4.15)を用いて式(4.61)を書き直した結果を，式(4.60)に代入すれば，

$$\begin{aligned} \Delta\gamma^{(\alpha)} = & \dot{\gamma}_t^{(\alpha)} \Delta t + \frac{\theta^{tan} \Delta t \dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{m\tau^{(\alpha)}} \{(\mathbf{C}^e : \mathbf{P}_S^{(\alpha)}) \cdot \mathbf{D}\} \Delta t - \frac{\theta^{tan} \Delta t \dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{m\tau^{(\alpha)}} \sum_{\beta} (\mathbf{C}^e : \mathbf{P}_S^{(\alpha)}) \cdot \mathbf{P}_S^{(\beta)} \dot{\gamma}^{(\beta)} \Delta t \\ & - \frac{\theta^{tan} \Delta t \dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{mg^{(\alpha)}} \sum_{\beta} h^{(\alpha\beta)} \text{sgn}(\dot{\gamma}^{(\beta)}) \dot{\gamma}^{(\beta)} \Delta t \dots\dots\dots (4.62) \end{aligned}$$

が得られる．なお，Peirceら⁽²⁵⁾はKirchhoff応力を用いて分解せん断応力の速度を表現しているが，分解せん断応力の物理的意味を考えれば，Cauchy応力を用いて表現するのが妥当である．式(4.62)を整理すれば，次式のようになる．

$$\sum_{\beta} N^{(\alpha\beta)} \Delta\gamma^{(\beta)} = (\dot{\gamma}_t^{(\alpha)} + \Lambda^{(\alpha)} \cdot \mathbf{D}) \Delta t \dots\dots\dots (4.63)$$

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

$$\dot{\gamma}_t^{(\alpha)} \equiv \dot{\gamma}_0^{(\alpha)} \text{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{\frac{1}{m}} \dots\dots\dots (4.64)$$

$$\Lambda^{(\alpha)} \equiv \left(\frac{\theta^{tan} \Delta t \dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{m\tau^{(\alpha)}} \right) (\mathbf{C}^e : \mathbf{P}_S^{(\alpha)}) \dots\dots\dots (4.65)$$

$$N^{(\alpha\beta)} \equiv \delta^{(\alpha\beta)} + \left(\frac{\theta^{tan} \Delta t \dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{m} \right) \left[\frac{(\mathbf{C}^e : \mathbf{P}_S^{(\alpha)}) \cdot \mathbf{P}_S^{(\beta)}}{\tau^{(\alpha)}} + \text{sgn}(\tau^{(\beta)}) \frac{h^{(\alpha\beta)}}{g^{(\alpha)}} \right] \dots\dots\dots (4.66)$$

次に，式(4.63)を $\Delta\gamma^{(\alpha)}$ について解くために， $N^{(\alpha\beta)}$ の逆行列を $M^{(\alpha\beta)}$ とし，

$$\dot{\nu}^{(\alpha)} \equiv \sum_{\beta} M^{(\alpha\beta)} \dot{\gamma}_t^{(\beta)} \dots\dots\dots (4.67)$$

$$\boldsymbol{\Upsilon}^{(\alpha)} \equiv \sum_{\beta} M^{(\alpha\beta)} \Lambda^{(\beta)} \dots\dots\dots (4.68)$$

を定義すれば，式(4.63)は

$$\Delta\gamma^{(\alpha)} = (\dot{\nu}^{(\alpha)} + \boldsymbol{\Upsilon}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{D}) \Delta t \dots\dots\dots (4.69)$$

となる．式(4.69)の両辺を Δt で除し，得られた式を式(4.13)に代入すれば，接線係数法を適用した結晶塑性構成式が次式のように得られる．

$$\dot{\mathbf{T}} = \mathbf{C}^{tan} : \mathbf{D} - \sum_{\alpha} \boldsymbol{\Xi}^{(\alpha)} \dot{\nu}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (4.70)$$

ここで，係数 \mathbf{C}^{tan} は次式で表される．

$$\mathbf{C}^{tan} = \mathbf{C}^e - \sum_{\alpha} \boldsymbol{\Xi}^{(\alpha)} \otimes \boldsymbol{\Upsilon}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (4.71)$$

式(4.70)を適用することで，比較的大きな時間増分を用いても安定した数値解析を行うことができる．なお， $\boldsymbol{\Xi}^{(\alpha)}$ および $\boldsymbol{\Upsilon}^{(\alpha)}$ はそれぞれ対称テンソルであるが， $\boldsymbol{\Xi}^{(\alpha)} \neq \boldsymbol{\Upsilon}^{(\alpha)}$ であることから，接線係数法を適用した \mathbf{C}^{tan} は対称性を失う．すなわち，

$$\mathbf{C}_{ijkl}^{tan} = \mathbf{C}_{jilk}^{tan} \neq \mathbf{C}_{klij}^{tan} \dots\dots\dots (4.72)$$

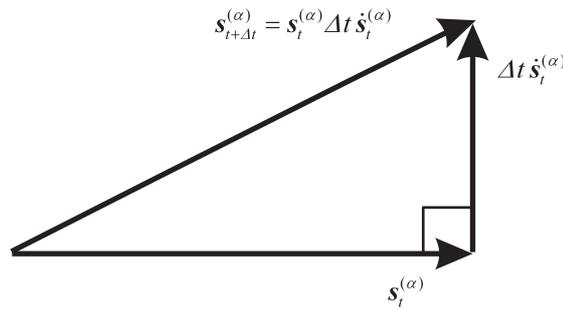


Fig. 4.6 Update of crystal base vector

となる。したがって、式(4.70)を有限要素法に適用する場合には、剛性マトリックスが非対称となるため、非対称ソルバーを用いる必要がある。

4.6 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 W^* を用いて

$$\dot{s}^{(\alpha)} = W^* s^{(\alpha)} \dots\dots\dots (4.73)$$

$$\dot{m}^{(\alpha)} = W^* m^{(\alpha)} \dots\dots\dots (4.74)$$

のように与えられる⁽⁶⁵⁾⁽⁹²⁾。式(4.73)から $s^{(\alpha)}$ の時間増分を求めて $s^{(\alpha)}$ を更新すると、

$$s_{t+\Delta t}^{(\alpha)} = s_t^{(\alpha)} + \Delta s^{(\alpha)} = s_t^{(\alpha)} + \dot{s}_t^{(\alpha)} \Delta t = s_t^{(\alpha)} + W^* s_t^{(\alpha)} \Delta t = (I + W^* \Delta t) s_t^{(\alpha)} \dots\dots\dots (4.75)$$

のようになる。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4.6のように必ず $\|s_{t+\Delta t}^{(\alpha)}\| \geq \|s_t^{(\alpha)}\|$ になってしまう。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、式(4.74)から $m^{(\alpha)}$ に関しても同様の更新方法をとるため、 $s^{(\alpha)}$ と $m^{(\alpha)}$ が直行しなくなる恐れもある。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⁽⁴²⁾。

$$s_{t+\Delta t}^{(\alpha)} = \Delta R^* s_t^{(\alpha)} \dots\dots\dots (4.76)$$

$$m_{t+\Delta t}^{(\alpha)} = \Delta R^* m_t^{(\alpha)} \dots\dots\dots (4.77)$$

$$\Delta R^* = I + \frac{\sin \omega}{\omega} W^* \Delta t + \frac{1 - \cos \omega}{\omega^2} W^{*2} (\Delta t)^2 \dots\dots\dots (4.78)$$

$$\omega^2 = -\frac{\text{tr}\{W^* \Delta t\}^2}{2} \dots\dots\dots (4.79)$$

以上の方法を用いることにより、大変形解析を行っても結晶基底ベクトル $s^{(\alpha)}$ および $m^{(\alpha)}$ の単位性および直行性は十分に保たれる。

第5章

結晶塑性均質化理論

本章では、結晶粒スケールと実用的マクロスケールの橋渡しを可能とする結晶塑性均質化理論について述べる。図5.1のように周期的なミクロ構造(結晶粒構造)を有するマクロ構造 V を考え、その表面を A とする。また、この周期的なミクロ構造単位はユニットセル Y と呼ばれ、その表面を Γ とする。なお、マクロ構造 V には物体力は作用しておらず、 V は巨視的に一様変形すると仮定する。さらに、 V に対して直交座標系 x_i を、 Y に対して直交座標系 y_i を設ける。マクロ構造およびミクロ構造の代表長さをそれぞれ x および y とするとき、均質化法ではスケール比を表すパラメータ $\epsilon = y/x$ は $\epsilon \ll 1$ となる。Nakamachiら⁽⁵²⁾は、2つの空間スケールを用いた漸近展開法により、ミクロ構造(結晶粒構造)を考慮したマクロ構造の均質化結晶塑性構成式を導出している。この方法を用いる場合には、ミクロおよびマクロスケールの支配方程式を数理的考察のみに基づいて導出することが可能である。本章では、定式化の際の両スケールにおける力学的な考察を明確にすることを目的とし、Ohnoら⁽⁶⁸⁾による有限変形の枠組み内における均質化理論を結晶塑性論へ適用する。まず、ミクロスケール(結晶粒スケール)における関係式およびマクロスケールにおけるマクロ変数の定義を示し、周期材料に対する仮想仕事の原理式を導出する。以上を用いて、ミクロ構造(結晶粒構造)の支配方程式およびマクロ構造における均質化結晶塑性構成式を導出する。さらに、FEM解析の準備としてマクロ構造における Updated Lagrange 形式の

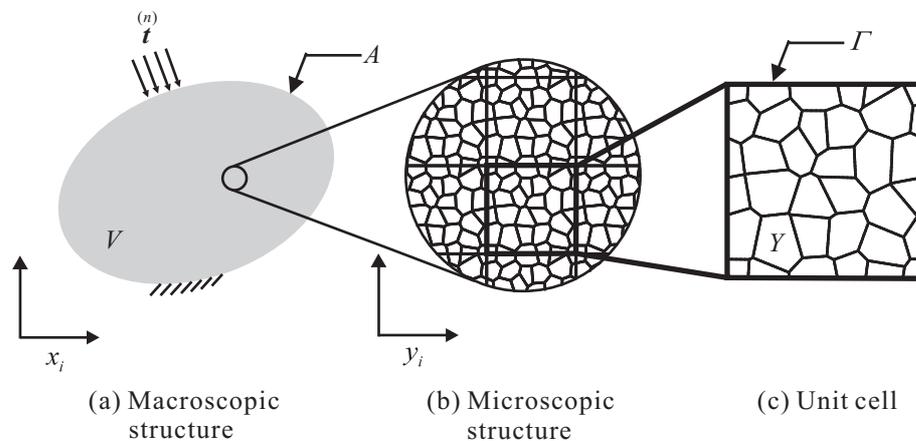


Fig. 5.1 Macroscopic structure with periodical microscopic structure

仮想仕事率の原理式および支配方程式を導出するとともに，マクロ構造の変形情報を用いて結晶粒構造における力学応答を評価するための局所化問題について述べる．

5.1 結晶粒スケールにおけるミクロ関係式

ある物質点における速度ベクトル v が以下のように加算分解できるものとする．

$$v = v^0 + v^\dagger \dots\dots\dots (5.1)$$

ここで $(\)^0$ および $(\)^\dagger$ は，それぞれ均一なマクロ成分およびそれからのじょう乱成分を表す．マクロ成分は，ミクロ構造に対して一様に作用するものとし，じょう乱成分はミクロ構造の不均一性に起因する量である．じょう乱成分はユニットセル Y 内に分布しており，その Y がマクロ構造内において周期的に配置されていると考える．このような周期性は Y -周期性と呼ばれ， v^\dagger が周期的に変化する関数であれば，得られるマクロな応答は各種の力学的整合性を満たすことが一般的に知られている⁽⁴³⁾⁽⁴⁴⁾⁽⁴⁵⁾．また，この周期性はマクロな物理量を定義する点の近傍のみにおいて成立していればよく，マクロ構造における局所的な領域ごとに異なるミクロ構造が定義されていてもよい．すなわち，大域的な周期性を仮定せずとも，局所的な周期性があるとみなすことができれば，数学的にも厳密な理論を展開できる⁽⁴³⁾．同様にして，速度こう配，変形速度および連続体スピンもマクロ成分とじょう乱成分に分解し，次式のように表す．

$$L = L^0 + L^\dagger \dots\dots\dots (5.2)$$

$$D = D^0 + D^\dagger \dots\dots\dots (5.3)$$

$$W = W^0 + W^\dagger \dots\dots\dots (5.4)$$

式(3.16)より，静的に可容なユニットセル Y における運動方程式は物体力を無視するとき，次式のように書ける．

$$\operatorname{div} T = 0 \dots\dots\dots (5.5)$$

ユニットセル Y における Updated Lagrange 形式の第1種 Piola-Kirchhoff 応力 [補足 E.1 参照] を π とすると，速度形の運動方程式は次式のように書ける．

$$\operatorname{div} \pi = 0 \dots\dots\dots (5.6)$$

なお， π は完全に現配置を参照配置とした場合の量であり，通常第1種 Piola-Kirchhoff 応力とは異なることに注意されたい．一方，ユニットセル Y における Jaumann 速度形式の結晶塑性構成式は式(4.13)であり，以下に再度示す．

$$\overset{\circ}{T} = C^e : D - \sum_{\alpha} \Xi^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (5.7)$$

さらに， π は $\overset{\circ}{T}$ を用いて，

$$\pi = \overset{\circ}{T} + T \operatorname{tr} L - T L^T \dots\dots\dots (5.8)$$

のように表わされ，非圧縮性 ($\text{tr}L = 0$) を仮定すれば \dot{T} を用いて，

$$\dot{\pi} = \dot{T} - DT - TD + LT \dots \dots \dots (5.9)$$

のように表現される [補足 E.1 参照] .

5.2 マクロ変数の定義

マクロ変数を導入するために，ある物理量 A のユニットセル Y に関する体積平均を以下のように定義する .

$$\langle A \rangle = |Y|^{-1} \int_Y A dY \dots \dots \dots (5.10)$$

ここで， $|Y|$ はユニットセルの体積である . この式 (5.10) を結晶粒スケールにおけるミクロ応力速度の関係式 (5.8) に適用すれば，マクロ応力速度の関係式が次式のように得られる [補足 E.2 参照] .

$$\dot{I}^H = \dot{T}^H + T^H \text{tr} L^0 - T^H L^{0T} \dots \dots \dots (5.11)$$

ここで，マクロ応力速度 \dot{I}^H およびマクロ Cauchy 応力 T^H は次式で定義される .

$$\dot{I}^H \equiv \langle \dot{\pi} \rangle, \quad T^H \equiv \langle T \rangle \dots \dots \dots (5.12)$$

さらに，マクロ Cauchy 応力の Jaumann 速度は次式により定義される .

$$\dot{\hat{T}}^H \equiv \dot{T}^H - W^0 T^H + T^H W^0 \dots \dots \dots (5.13)$$

なお，式 (5.11) および式 (5.13) において， $\dot{T}^H \neq \langle \dot{T} \rangle$ であることに注意されたい [補足 E.2 参照] .

5.3 均質化理論

5.3.1 周期材料に対する仮想仕事率の原理

微小変形における周期材料に対する仮想仕事率の原理は Hill⁽⁹³⁾ の示唆に基づいて Sequet⁽⁹⁴⁾ が示しており，Ohno ら⁽⁶⁸⁾ はこの原理を有限変形理論に拡張している . じょう乱仮想速度ベクトル \check{v}^\dagger をユニットセル Y における運動方程式 (5.6) の両辺に内積し， Y の全領域にわたって積分すれば，式 (5.6) は次式のような弱形式になる .

$$\int_Y (\text{div} \dot{\pi}) \cdot \check{v}^\dagger dY = 0 \dots \dots \dots (5.14)$$

式 (5.14) は，部分積分および発散定理を適用することで，次式のように書き換えられる .

$$\oint_\Gamma (\dot{\pi} n) \cdot \check{v}^\dagger d\Gamma - \int_Y \dot{\pi} \cdot \check{L}^\dagger dY = 0 \dots \dots \dots (5.15)$$

ここで， $\check{L}^\dagger \equiv \text{grad} \check{v}^\dagger$ であり，上式左辺第 1 項は \check{v}^\dagger の Y -周期性および $\dot{\pi} n$ の反 Y -周期性から零となる . したがって，次式が得られる .

$$\int_Y \dot{\pi} \cdot \check{L}^\dagger dY = 0 \dots \dots \dots (5.16)$$

次に，ユニットセル Y に対する仮想仕事率の体積平均をとり，式(5.2)および式(5.16)を用いて整理すれば，以下の関係式が得られる．

$$|Y|^{-1} \int_Y \dot{\pi} \cdot \check{L} dY = \dot{H}^H \cdot \check{L}^0 \dots \dots \dots (5.17)$$

ここで，マクロ仮想速度 \check{v}^0 は

$$\check{v}^0 = \langle \check{v} \rangle \dots \dots \dots (5.18)$$

を満足し， $\check{L}^0 \equiv \text{grad} \check{v}^0$ である．式(5.6)および式(5.12)₁を満たす応力速度場 $\dot{\pi}$ に対して，式(5.18)を満足する仮想速度場 \check{v} を考えると，式(5.17)よりユニットセル Y における仮想仕事率の体積平均はマクロ構造の仮想仕事率に等しいことがわかる．

5.3.2 ミクロ構造の支配方程式および均質化結晶塑性構成式

式(5.7)および式(5.9)を式(5.17)に代入し，式(5.17)左辺の \check{L} をマクロ成分とじょう乱成分に分解して整理すれば，

$$\begin{aligned} & [\dot{H}^H - |Y|^{-1} \int_Y \{(\mathbf{C}^e - \mathbf{P}) : \mathbf{D} + \mathbf{L}T - \sum_{\alpha} \mathbf{\Xi}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}\} dY] \cdot \check{L}^0 \\ & - |Y|^{-1} \int_Y \{(\mathbf{C}^e - \mathbf{P}) : \mathbf{D} + \mathbf{L}T - \sum_{\alpha} \mathbf{\Xi}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}\} \cdot \check{L}^{\dagger} dY = 0 \dots \dots \dots (5.19) \end{aligned}$$

となる．ただし， $P_{ijkl} \equiv \delta_{il} T_{kj} + \delta_{jl} T_{ik}$ である．いま，式(5.19)における \check{L}^0 が任意の量であることを考慮すれば，次式が得られる．

$$\dot{H}^H = |Y|^{-1} \int_Y \{(\mathbf{C}^e - \mathbf{P}) : \mathbf{D} + \mathbf{L}T - \sum_{\alpha} \mathbf{\Xi}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}\} dY \dots \dots \dots (5.20)$$

$$\int_Y \{(\mathbf{C}^e - \mathbf{P}) : \mathbf{D} + \mathbf{L}T - \sum_{\alpha} \mathbf{\Xi}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}\} \cdot \check{L}^{\dagger} dY = 0 \dots \dots \dots (5.21)$$

ここで式(5.21)は，左辺にある \mathbf{D} および \mathbf{L} を式(5.3)および式(5.2)のようにマクロ成分とじょう乱成分に分解して整理し， Y -周期性および応力の釣合い方程式(5.5)を考慮すれば，

$$\int_Y [\{(\mathbf{C}^e - \mathbf{P}) : \mathbf{D}^{\dagger}\} \cdot \check{\mathbf{D}}^{\dagger} + \mathbf{L}^{\dagger} T \cdot \check{\mathbf{L}}^{\dagger}] dY = - \{ \int_Y \check{\mathbf{D}}^{\dagger} : (\mathbf{C}^e - \mathbf{P}) dY \} : \mathbf{D}^0 + \int_Y \mathbf{\Xi}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \cdot \check{\mathbf{D}}^{\dagger} dY \dots \dots \dots (5.22)$$

となる．式(5.22)はユニットセル Y 内のじょう乱速度場 \check{v}^{\dagger} を決定するための積分方程式である．したがって，式(5.22)はミクロ構造(結晶粒構造)の支配方程式である．

一方，式(5.20)は構成式(5.7)のユニットセル Y に関する体積平均である．式(5.22)から，じょう乱速度 \check{v}^{\dagger} の成分は次式のように表せることがわかる⁽⁷¹⁾．

$$\check{v}_i^{\dagger} = -\chi_i^{<kl>} D_{kl}^0 + \phi_i \dots \dots \dots (5.23)$$

ここで， $\chi_i^{<kl>}$ および ϕ_i は特性速度ベクトルと呼ばれ，単位マクロ変形速度に対するユニットセル Y の Y -周期的なミクロ応答速度である．特性速度 $\chi_i^{<kl>}$ に付した上付きの $<kl>$ は変形のモードを表すものであり，指標ではないことに注意されたい．なお，計算を行う際には， D_{kl}^0 の指標 k および l とセットでダミーになり，総和の規約が適用される．また，式(5.23)

に構成式の粘塑性項に起因する特性速度 ϕ_i が現れることに注意する必要がある。式 (5.23) よりじょう乱変形速度の成分 D_{ij}^\dagger が

$$D_{ij}^\dagger = -\chi_{(i,j)}^{<kl>} D_{kl}^0 + \phi_{(i,j)} \dots \dots \dots (5.24)$$

のように表される。ここで指標に付した $()$ は2階のテンソルの対称部分を表す記号である。さらに、式 (5.20) の右辺にある D および L を式 (5.3) および式 (5.2) のようにマクロ成分とじょう乱成分に分解し、式 (5.24) を代入して整理するとともに、 Y -周期性および応力の釣り合い方程式 (5.5) を考慮すれば、最終的に得られるマクロ構造の均質化結晶塑性構成式は次式のようになる。

$$\dot{T}^H = C^{eH} : D^0 - R^H \dots \dots \dots (5.25)$$

ここで、 C^{eH} は均質化された弾性係数および R^H は均質化された粘塑性項であり、これらの具体形は以下のようになる。

$$C_{ijkl}^{eH} \equiv \langle C_{ijkl}^e - (C_{ijmn}^e - P'_{ijmn}) \chi_{m,n}^{<kl>} \rangle \dots \dots \dots (5.26)$$

$$R_{ij}^H \equiv \langle \sum_{\alpha} \Xi_{ij}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} - (C_{ijkl}^e - P'_{ijkl}) \phi_{k,l} \rangle \dots \dots \dots (5.27)$$

ただし、 $P'_{ijkl} \equiv \frac{1}{2}(\delta_{il}T_{kj} + \delta_{jl}T_{ik} + \delta_{ik}T_{lj} + \delta_{jk}T_{il})$ である。マクロスケールにおける変形挙動や応力情報は、上記の均質化(平均化)操作によって材料内に含まれる無数の結晶粒の集合体としての挙動によって決定される。

5.4 マクロ構造における Updated Lagrange 形式の仮想仕事率の原理

参照配置を現配置とすれば、静的に可容なマクロ構造における仮想仕事率の原理式は、物体力を無視するとき次式のようになる。

$$\int_V T^H \cdot \dot{D}^0 dV = \oint_A \overset{(0)}{t} \cdot \dot{v}^0 dA \dots \dots \dots (5.28)$$

式 (5.28) の形では、応力速度で与えられた構成式 (5.25) をそのまま適用することはできない。そこで、応力仕事率の項を速度形に変更することを考える。まず、式 (5.28) を初期配置表示に戻せば次のようになる。

$$\int_{V_0} \Pi_0^H \cdot \text{Grad} \dot{v}^0 dV_0 = \oint_{A_0} \overset{(0)}{t} \cdot \dot{v}^0 dA_0 \dots \dots \dots (5.29)$$

ここでは、以下のような変換法則が用いられている。

$$ndA = J^0 F^{0-T} n_0 dA_0, \quad dV = J^0 dV_0, \quad T^H = J^{0-1} \Pi_0^H F^{0T}, \quad \overset{(0)}{t}^H = T^H n, \quad \overset{(0)}{t}^H = \Pi_0^H n_0$$

ただし、 $(\cdot)_0$ は初期配置における量であり、 Π_0^H はマクロ構造における通常の第1種 Piola-Kirchhoff 応力(公称応力)、 J^0 はマクロ変形こう配 F^0 の行列式 (Jacobian) である。ここで、 $\dot{v}^0 = \mathbf{0}$ の条件の下で式 (5.29) の両辺を物質時間微分すれば次式を得る。

$$\int_{V_0} \dot{\Pi}_0^H \cdot \text{Grad} \dot{v}^0 dV_0 = \oint_{A_0} \overset{(0)}{\dot{t}}^H \cdot \dot{v}^0 dA_0 \dots \dots \dots (5.30)$$

この式は仮想仕事率の原理の Total Lagrange 形式である。次に、式 (5.30) の左辺にある \dot{I}^H_0 をマクロ Cauchy 応力 T^H の共回転速度に変換する。

$$\begin{aligned} \dot{I}^H_0 F^{0T} &= J^0(\overset{\circ}{T}^H + L^0 T^H) = J^0\{\overset{\circ}{T}^H - P^H : D^0 + (\text{tr} L^0) T^H + L^0 T^H\} \\ &= J^0\{J^{0-1}(\overset{\circ}{T}^H - \check{P}^H : D^0) + L^0 T^H\} \dots \dots \dots (5.31) \end{aligned}$$

ここで、 $\overset{\circ}{T}^H$ および \check{T}^H はそれぞれマクロ Cauchy 応力の Truesdell 速度および Jaumann 速度、 \bar{T}^H はマクロ Kirchhoff 応力であり、 $\check{T}^H \equiv J^0 T^H$ となる。また、 $\overset{\circ}{T}^H$ 、 P^0 および \check{P}^H は次式により定義される。

$$\overset{\circ}{T}^H \equiv \check{T}^H - L^0 T^H - T^H L^{0T} + (\text{tr} L^0) T^H \dots \dots \dots (5.32)$$

$$P^H_{ijkl} \equiv \delta_{il} T^H_{kj} + T^H_{ik} \delta_{jl}, \quad \check{P}^H_{ijkl} \equiv J^0 P^H_{ijkl} \dots \dots \dots (5.33)$$

式 (5.31) を式 (5.30) に代入し、参照配置を現配置へ進めれば次式を得る。

$$\int_V \{J^{0-1}(\overset{\circ}{T}^H - \check{P}^H : D^0) \cdot \check{D}^0 + (L^0 T^H) \cdot \check{L}^0\} dV = \oint_A \overset{\circ}{t}^H \cdot \check{\nu}^0 dA \dots \dots \dots (5.34)$$

ここで、 $\overset{\circ}{t}^H dA \equiv \overset{\circ}{t}^H dA_0$ であり、非圧縮性 ($\text{tr} L^0 = 0$) を仮定している。Updated Lagrange 形式においては、現配置が参照配置となるため $\overset{\circ}{t}^H \rightarrow \overset{(0)}{t}^H$ および $J^0 \rightarrow 1$ となり、表面力速度に関しては $\overset{\circ}{t}^H = \overset{(0)}{t}^H = \overset{(n)}{t}^H$ となる。したがって、Updated Lagrange 形式の仮想仕事率の原理式が以下のように得られる。

$$\int_V \{(\overset{\circ}{T}^H - P^H : D^0) \cdot \check{D}^0 + (L^0 T^H) \cdot \check{L}^0\} dV = \oint_A \overset{(n)}{t}^H \cdot \check{\nu}^0 dA \dots \dots \dots (5.35)$$

さらに、マクロ構造における構成式 (5.25) を式 (5.35) に代入すれば、マクロ構造の支配方程式が次式のように得られる。

$$\int_V [\{ (C^{eH} - P^H) : D^0 \} \cdot \check{D}^0 + (L^0 T^H) \cdot \check{L}^0] dV = \oint_A \overset{(n)}{t}^H \cdot \check{\nu}^0 dA - \int_V R^H \cdot \check{D}^0 dV \dots \dots \dots (5.36)$$

この支配方程式から得られるマクロな変形情報をミクロ構造の境界値問題に対するデータとして与えることで、ミクロ-マクロの両スケールにおける整合性を満たしつつ解を得ることが可能となる⁽⁴³⁾⁽⁴⁴⁾⁽⁴⁵⁾。

5.5 局所化問題

均質化理論では、マクロ構造のある点におけるマクロ変形情報を用いて、その点に対応するミクロ構造内部の変形応答を評価することを局所化問題という。また、ここで述べている局所化とは、ひずみの局所化や固体力学における積分形の保存則から微分形の釣合い方程式を導出する局所化過程とは異なる。単位マクロ変形速度を仮定して、ミクロ構造(結晶粒構造)の支配方程式 (5.22) を周期境界条件下で解けば、特性速度 $\chi_i^{<kl>}$ および ϕ_i が得られる。これにより、単位マクロ変形速度に対応する局所化操作はすでに行っていることになる。また、式 (5.23) からじょう乱速度とマクロ変形速度は線形関係にあることが分かる。さらに、マクロ構造の支配方程式 (5.36) から得られるマクロ変形速度に対応するユニット

セル内の実際の応答速度は，一様変形を表すマクロ速度と式(5.23)から得られるじょう乱速度の和となる．したがって，再度ミクロスケールの境界値問題を解くことなく，以下のようにユニットセル内のミクロ速度を得ることができる．

$$v_i = v_i^0 + v_i^\dagger = D_{ij}^0 y_j - \chi_i^{<kl>} D_{kl}^0 + \phi_i \dots \dots \dots (5.37)$$

ここで， y_i はユニットセルにおける座標を表している．さらに，対象としているマクロ構造内のある点の近傍が回転を伴って変形する場合には，その点に対応するミクロ構造(結晶粒構造)も回転することになる．しかしながら，式(5.37)にはマクロ構造の回転に関する情報が反映させられていない．そこで，マクロ構造の回転に伴うユニットセルの回転を4.6節と同様の方法により，マクロ構造における連続体スピン W^0 を用いて次式のように表現する．

$$y_{t+\Delta t} = \Delta R^0 (y_t + v \Delta t) \dots \dots \dots (5.38)$$

$$\Delta R^0 = I + \frac{\sin \omega^0}{\omega^0} W^0 \Delta t + \frac{1 - \cos \omega^0}{\omega^{02}} W^{02} (\Delta t)^2 \dots \dots \dots (5.39)$$

$$\omega^{02} = -\frac{\text{tr}\{(W^0 \Delta t)^2\}}{2} \dots \dots \dots (5.40)$$

第6章

有限要素法による離散定式化

本章では、第4章および第5章において構築した転位-結晶塑性論および結晶塑性均質化理論に基づくトリプルスケール転位-結晶塑性FEM解析を行うための有限要素定式化を行う。有限要素法とは、積分方程式で記述された場の境界値問題を解くための解析手法の1つであり、連続体を有限の大きさの要素に分割して扱うのが特徴である。分割された要素は、その辺上に位置する有限個の節点において連結されており、固体の変形解析においてはこれらの節点の変位または変位増分が解くべき未知数となる。また、要素内の任意の位置における物理量は、形状関数を用いて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。本章以降は、ある物理量 A のマトリクス表示を $[A]$ 、列ベクトル表示を $\{A\}$ により表す。まず、ミクロスケール(結晶粒スケール)の支配方程式を離散化し、ユニットセル内の特性速度を決定するミクロ要素剛性方程式を導出する。次に、マクロスケールの支配方程式を離散化することで、マクロ要素剛性方程式を導出する。また、マクロ構造の解析によって得られたマクロ変形情報を用いて、ユニットセル内部の力学応答を評価する局所化問題についても離散定式化を行う。さらに、FEM解析におけるGN転位密度およびGN不適合度の算出手法についても触れる。最後に、本研究で行うトリプルスケール転位-結晶塑性FEM解析のアルゴリズムについて述べる。

6.1 2次元連続体要素の形状関数

第5章と同様に、マクロ構造 V に対して直行座標系 x_i 、ミクロ構造におけるユニットセル Y に対して直行座標系 y_i を設ける。 V および Y を有限の大きさに分割し、分割された要素内の任意の点における速度は、要素を構成する各節点の速度から内挿することで得られる。すなわち、要素内の任意の点におけるマクロ速度 v^0 、じょう乱速度 v^\dagger およびミクロ速度 v は次式のように表される。

$$v^0 = \sum_n N^{0n} v^{0n}, \quad v^\dagger = \sum_n N^n v^{\dagger n}, \quad v = \sum_n N^n v^n \dots\dots\dots (6.1)$$

ここで、 $(\)^n$ は離散化された量であり、 n は要素節点番号を表している。また、 N^{0n} および N^n は、それぞれマクロ構造 V およびユニットセル Y における要素の形状関数である。本研

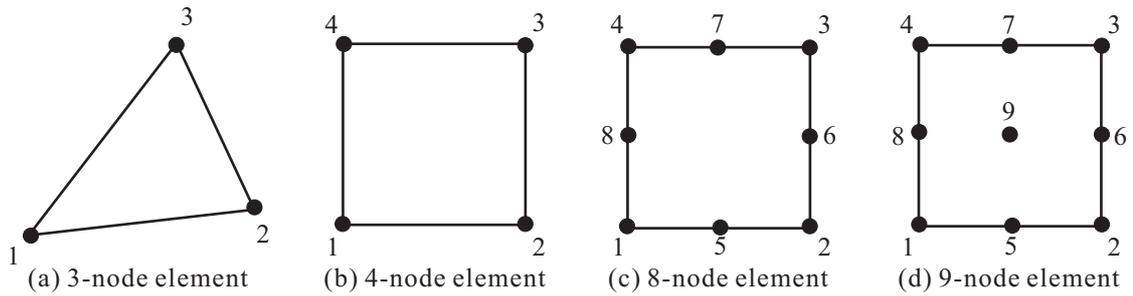


Fig. 6.1 Two-dimensional continuum elements

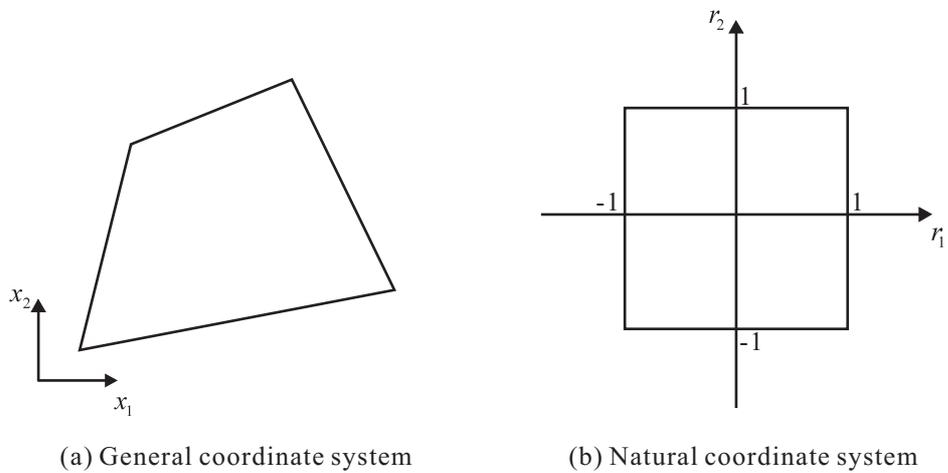


Fig. 6.2 General and natural coordinate systems

究では、マクロ構造 V には図 6.1 に示すような三角形定ひずみ要素，四辺形 4 節点要素，四辺形 8 節点要素および四辺形 9 節点要素を用いる．三角形定ひずみ要素の場合， N^{0n} は次式のようになる．

$$\left. \begin{aligned} N^{01} &= \frac{1}{2S^{0E}} \left\{ (x_1^2 x_2^3 - x_1^3 x_2^2) + (x_2^2 - x_2^3)x_1 + (x_1^3 - x_1^2)x_2 \right\} \\ N^{02} &= \frac{1}{2S^{0E}} \left\{ (x_1^3 x_2^1 - x_1^1 x_2^3) + (x_2^3 - x_2^1)x_1 + (x_1^1 - x_1^3)x_2 \right\} \\ N^{03} &= \frac{1}{2S^{0E}} \left\{ (x_1^1 x_2^2 - x_1^2 x_2^1) + (x_2^1 - x_2^2)x_1 + (x_1^2 - x_1^1)x_2 \right\} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (6.2)$$

ここで， S^{0E} は三角形要素の面積であり，次式で表される．

$$2S^{0E} = x_1^1 x_2^2 + x_1^2 x_2^3 + x_1^3 x_2^1 - x_1^1 x_2^3 - x_1^2 x_2^1 - x_1^3 x_2^2 \dots\dots\dots (6.3)$$

四辺形要素の場合，要素内の点を一般座標系 (x_1, x_2) から自然座標系 (r_1, r_2) ($-1 \leq r_1 \leq 1, -1 \leq r_2 \leq 1$) へと写像することになる [図 6.2]． (r_1, r_2) から (x_1, x_2) へは常に一対一かつ上への写像であることが必要であり⁽⁹⁵⁾，4 節点要素，8 節点要素および 9 節点要素の形状関数 N^{0n} はそれぞれ以下のようになる．

$$\left. \begin{aligned} N^{01} &= \frac{1}{4}(1-r_1)(1-r_2) & N^{02} &= \frac{1}{4}(1+r_1)(1-r_2) \\ N^{03} &= \frac{1}{4}(1+r_1)(1+r_2) & N^{04} &= \frac{1}{4}(1-r_1)(1+r_2) \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (6.4)$$

$$\left. \begin{aligned} N^{01} &= \frac{1}{4}(1-r_1)(1-r_2)(-1-r_1-r_2) & N^{02} &= \frac{1}{4}(1+r_1)(1-r_2)(-1+r_1-r_2) \\ N^{03} &= \frac{1}{4}(1+r_1)(1+r_2)(-1+r_1+r_2) & N^{04} &= \frac{1}{4}(1-r_1)(1+r_2)(-1-r_1+r_2) \\ N^{05} &= \frac{1}{2}(1-r_1^2)(1-r_2) & N^{06} &= \frac{1}{2}(1+r_1)(1-r_2^2) \\ N^{07} &= \frac{1}{2}(1-r_1^2)(1+r_2) & N^{08} &= \frac{1}{2}(1-r_1)(1-r_2^2) \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (6.5)$$

$$\left. \begin{aligned} N^{01} &= \frac{1}{4}r_1(1-r_1)r_2(1-r_2) & N^{02} &= -\frac{1}{4}r_1(1+r_1)r_2(1-r_2) \\ N^{03} &= \frac{1}{4}r_1(1+r_1)r_2(1+r_2) & N^{04} &= -\frac{1}{4}r_1(1-r_1)r_2(1+r_2) \\ N^{05} &= -\frac{1}{2}(1-r_1^2)r_2(1-r_2) & N^{06} &= \frac{1}{2}r_1(1+r_1)(1-r_2^2) \\ N^{07} &= \frac{1}{2}(1-r_1^2)r_2(1+r_2) & N^{08} &= -\frac{1}{2}r_1(1-r_1)(1-r_2^2) \\ N^{09} &= (1-r_1^2)(1-r_2^2) \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (6.6)$$

一方，ミクロ構造におけるユニットセル Y には三角形定ひずみ要素のみを用いることとし， N^n は次式のように与えられる．

$$\left. \begin{aligned} N^1 &= \frac{1}{2S^e} \{ (y_1^2 y_2^3 - y_1^3 y_2^2) + (y_2^2 - y_2^3) y_1 + (y_1^3 - y_1^2) y_2 \} \\ N^2 &= \frac{1}{2S^e} \{ (y_1^3 y_2^1 - y_1^1 y_2^3) + (y_2^3 - y_2^1) y_1 + (y_1^1 - y_1^3) y_2 \} \\ N^3 &= \frac{1}{2S^e} \{ (y_1^1 y_2^2 - y_1^2 y_2^1) + (y_2^1 - y_2^2) y_1 + (y_1^2 - y_1^1) y_2 \} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (6.7)$$

ここで， S^e は三角形要素の面積であり，次式で表される．

$$2S^e = y_1^1 y_2^2 + y_1^2 y_2^3 + y_1^3 y_2^1 - y_1^1 y_2^3 - y_1^2 y_2^1 - y_1^3 y_2^2 \dots\dots\dots (6.8)$$

また，形状関数 N^{0n} および N^n を用いて形状関数マトリクス $[N^0]$ ， $[N]$ を以下のように定義する．

$$[N^0] \equiv [N^{01} \ \dots \ N^{0M}] \quad (N^{0n} \equiv N^{0n} \mathbf{I}, \quad n = 1, 2, \dots, M) \dots\dots\dots (6.9)$$

$$[N] \equiv [N^1 \ \dots \ N^m] \quad (N^n \equiv N^n \mathbf{I}, \quad n = 1, 2, \dots, m) \dots\dots\dots (6.10)$$

ここで， N^{0n} および N^n は 2×2 の行列であり， \mathbf{I} は 2×2 の単位行列である．また M および m は，それぞれマクロ構造 V 内およびユニットセル Y 内の要素を構成する節点数である．

6.2 平面ひずみ問題

本研究では，2次元FEM解析を平面ひずみ条件下で行う．この場合，マクロ速度こう配 L^0 の成分は $L_{11}^0, L_{22}^0, L_{12}^0$ および L_{21}^0 の4成分のみが非零かつ独立となり，それぞれの成分は式(6.1)₁を用いて次のように表すことができる．

$$\left. \begin{aligned} L_{11}^0 &= \frac{\partial v_1^0}{\partial x_1} = \sum_n \frac{\partial N^{0n}}{\partial x_1} v_1^{0n} \\ L_{22}^0 &= \frac{\partial v_2^0}{\partial x_2} = \sum_n \frac{\partial N^{0n}}{\partial x_2} v_2^{0n} \\ L_{12}^0 &= \frac{\partial v_1^0}{\partial x_2} = \sum_n \frac{\partial N^{0n}}{\partial x_2} v_1^{0n} \\ L_{21}^0 &= \frac{\partial v_2^0}{\partial x_1} = \sum_n \frac{\partial N^{0n}}{\partial x_1} v_2^{0n} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (6.11)$$

ここで四辺形要素の場合には，自然座標系 (r_1, r_2) で定義された形状関数 N^{0n} の一般座標系 (x_1, x_2) に関する微分は次式のように計算される．

$$\left\{ \begin{array}{c} \frac{\partial N^{0n}}{\partial x_1} \\ \frac{\partial N^{0n}}{\partial x_2} \end{array} \right\} = \left[\begin{array}{cc} \frac{\partial r_1}{\partial x_1} & \frac{\partial r_2}{\partial x_1} \\ \frac{\partial r_1}{\partial x_2} & \frac{\partial r_2}{\partial x_2} \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{c} \frac{\partial N^{0n}}{\partial r_1} \\ \frac{\partial N^{0n}}{\partial r_2} \end{array} \right\} = \left[\begin{array}{cc} \frac{\partial x_1}{\partial r_1} & \frac{\partial x_2}{\partial r_1} \\ \frac{\partial x_1}{\partial r_2} & \frac{\partial x_2}{\partial r_2} \end{array} \right]^{-1} \left\{ \begin{array}{c} \frac{\partial N^{0n}}{\partial r_1} \\ \frac{\partial N^{0n}}{\partial r_2} \end{array} \right\} \dots\dots\dots (6.12)$$

じょう乱速度こう配 L^\dagger およびミクロ速度こう配 L に関しても同様であり，式(6.1)₂ および (6.1)₃ を用いて次のように表すことができる．

$$\left. \begin{aligned} L_{11}^\dagger &= \frac{\partial v_1^\dagger}{\partial y_1} = \sum_n \frac{\partial N^n}{\partial y_1} v_1^{\dagger n} \\ L_{22}^\dagger &= \frac{\partial v_2^\dagger}{\partial y_2} = \sum_n \frac{\partial N^n}{\partial y_2} v_2^{\dagger n} \\ L_{12}^\dagger &= \frac{\partial v_1^\dagger}{\partial y_2} = \sum_n \frac{\partial N^n}{\partial y_2} v_1^{\dagger n} \\ L_{21}^\dagger &= \frac{\partial v_2^\dagger}{\partial y_1} = \sum_n \frac{\partial N^n}{\partial y_1} v_2^{\dagger n} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (6.13)$$

$$\left. \begin{aligned} L_{11} &= \frac{\partial v_1}{\partial y_1} = \sum_n \frac{\partial N^n}{\partial y_1} v_1^n \\ L_{22} &= \frac{\partial v_2}{\partial y_2} = \sum_n \frac{\partial N^n}{\partial y_2} v_2^n \\ L_{12} &= \frac{\partial v_1}{\partial y_2} = \sum_n \frac{\partial N^n}{\partial y_2} v_1^n \\ L_{21} &= \frac{\partial v_2}{\partial y_1} = \sum_n \frac{\partial N^n}{\partial y_1} v_2^n \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (6.14)$$

式(6.11)，式(6.13)および式(6.14)をマトリックス形式で表示すれば，

$$\{L^0\} = [B_L^0]\{v^0\}, \quad \{L^\dagger\} = [B_L]\{v^\dagger\}, \quad \{L\} = [B_L]\{v\} \dots\dots\dots (6.15)$$

$$\left. \begin{aligned} \{\mathbf{L}^0\} &\equiv \{L_{11}^0 \quad L_{22}^0 \quad L_{12}^0 \quad L_{21}^0\}^T \\ \{\mathbf{L}^\dagger\} &\equiv \{L_{11}^\dagger \quad L_{22}^\dagger \quad L_{12}^\dagger \quad L_{21}^\dagger\}^T \\ \{\mathbf{L}\} &\equiv \{L_{11} \quad L_{22} \quad L_{12} \quad L_{21}\}^T \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (6.16)$$

$$[\mathbf{B}_L^0] \equiv [\mathbf{B}_L^{0^1} \quad \dots \quad \mathbf{B}_L^{0^M}], \quad [\mathbf{B}_L^{0^n}] \equiv \begin{bmatrix} \frac{\partial N^{0^n}}{\partial x_1} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^{0^n}}{\partial x_2} \\ \frac{\partial N^{0^n}}{\partial x_2} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^{0^n}}{\partial x_1} \end{bmatrix} \quad (n = 1, 2, \dots, M) \dots\dots\dots (6.17)$$

$$[\mathbf{B}_L] \equiv [\mathbf{B}_L^1 \quad \dots \quad \mathbf{B}_L^m], \quad [\mathbf{B}_L^n] \equiv \begin{bmatrix} \frac{\partial N^n}{\partial y_1} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^n}{\partial y_2} \\ \frac{\partial N^n}{\partial y_2} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^n}{\partial y_1} \end{bmatrix} \quad (n = 1, 2, \dots, m) \dots\dots\dots (6.18)$$

$$\left. \begin{aligned} \{\mathbf{v}^0\} &\equiv \{v_1^{0^1} \quad v_2^{0^1} \quad v_1^{0^2} \quad v_2^{0^2} \quad \dots \quad v_1^{0^M} \quad v_2^{0^M}\}^T \\ \{\mathbf{v}^\dagger\} &\equiv \{v_1^{\dagger^1} \quad v_2^{\dagger^1} \quad v_1^{\dagger^2} \quad v_2^{\dagger^2} \quad \dots \quad v_1^{\dagger^m} \quad v_2^{\dagger^m}\}^T \\ \{\mathbf{v}\} &\equiv \{v_1^1 \quad v_2^1 \quad v_1^2 \quad v_2^2 \quad \dots \quad v_1^m \quad v_2^m\}^T \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (6.19)$$

となる。ここで $[\mathbf{B}_L^0]$ および $[\mathbf{B}_L]$ は、節点変位速度と要素内速度こう配の関係を表すマトリックスである。一方、マクロ変形速度 \mathbf{D}^0 に関しては D_{11}^0, D_{22}^0 および D_{12}^0 の3成分が非零かつ独立となり、それぞれの成分は $D_{11}^0 = L_{11}^0, D_{22}^0 = L_{22}^0, 2D_{12}^0 = L_{12}^0 + L_{21}^0$ である。じょう乱変形速度 \mathbf{D}^\dagger およびミクロ変形速度 \mathbf{D} についても同様のことがいえる。したがって、変形速度も以下のようにマトリックス形式を用いて表すことができる。

$$\{\mathbf{D}^0\} = [\mathbf{B}_D^0]\{\mathbf{v}^0\}, \quad \{\mathbf{D}^\dagger\} = [\mathbf{B}_D]\{\mathbf{v}^\dagger\}, \quad \{\mathbf{D}\} = [\mathbf{B}_D]\{\mathbf{v}\} \dots\dots\dots (6.20)$$

$$\left. \begin{aligned} \{\mathbf{D}^0\} &\equiv \{D_{11}^0 \quad D_{22}^0 \quad 2D_{12}^0\}^T \\ \{\mathbf{D}^\dagger\} &\equiv \{D_{11}^\dagger \quad D_{22}^\dagger \quad 2D_{12}^\dagger\}^T \\ \{\mathbf{D}\} &\equiv \{D_{11} \quad D_{22} \quad 2D_{12}\}^T \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (6.21)$$

$$[\mathbf{B}_D^0] \equiv [\mathbf{B}_D^{0^1} \quad \dots \quad \mathbf{B}_D^{0^M}], \quad [\mathbf{B}_D^{0^n}] \equiv \begin{bmatrix} \frac{\partial N^{0^n}}{\partial x_1} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^{0^n}}{\partial x_2} \\ \frac{\partial N^{0^n}}{\partial x_2} & \frac{\partial N^{0^n}}{\partial x_1} \end{bmatrix} \quad (n = 1, 2, \dots, M) \dots\dots\dots (6.22)$$

$$[B_D] \equiv [B_D^1 \ \cdots \ B_D^m], \quad [B_D^n] \equiv \begin{bmatrix} \frac{\partial N^n}{\partial y_1} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^n}{\partial y_2} \\ \frac{\partial N^n}{\partial y_2} & \frac{\partial N^n}{\partial y_1} \end{bmatrix} \quad (n = 1, 2, \dots, m) \quad \dots\dots\dots(6.23)$$

ここで $[B_D^0]$ および $[B_D]$ は、節点変位速度と要素内変形速度の関係を表すマトリックスである。

平面ひずみ問題の場合、Cauchy 応力の成分については $T_{11}, T_{22}, T_{12}(= T_{21})$ および T_{33} のみが非零となり、接線係数表示したユニットセル Y の弾粘塑性構成式(4.70)をマトリックス表示すれば、

$$\{\dot{T}\} = [C^{tan}]\{D\} - \sum_{\alpha} \{\Xi^{(\alpha)}\} \dot{v}^{(\alpha)} \quad \dots\dots\dots(6.24)$$

$$\{\dot{T}\} \equiv \left\{ \dot{T}_{11} \quad \dot{T}_{22} \quad \dot{T}_{12} \right\}^T \quad \dots\dots\dots(6.25)$$

$$[C^{tan}] \equiv \begin{bmatrix} C_{1111}^{tan} & C_{1122}^{tan} & C_{1112}^{tan} \\ C_{2211}^{tan} & C_{2222}^{tan} & C_{2212}^{tan} \\ C_{1211}^{tan} & C_{1222}^{tan} & C_{1212}^{tan} \end{bmatrix} \quad \dots\dots\dots(6.26)$$

$$\{\Xi^{(\alpha)}\} \equiv \left\{ \Xi_{11}^{(\alpha)} \quad \Xi_{22}^{(\alpha)} \quad \Xi_{12}^{(\alpha)} \right\}^T \quad \dots\dots\dots(6.27)$$

となる。また、 \dot{T}_{33} については次式から求めることができる。

$$\dot{T}_{33} = C_{3311}^{tan} D_{11} + C_{3322}^{tan} D_{22} + 2C_{3312}^{tan} D_{12} - \Xi_{33}^{(\alpha)} \dot{v}^{(\alpha)} \quad \dots\dots\dots(6.28)$$

なお、Asaro の平面2重すべりモデル⁽⁶⁵⁾[6.5節参照]を用いた転位-結晶塑性解析を行う場合には、結晶基底の y_3 方向の成分が零となるため、式(6.28)の右辺第4項も零となる。しかしながら、FCC結晶の12すべり系を全て考慮した擬似3次元転位-結晶塑性解析[6.5節参照]を行う場合には、結晶基底は3次元の情報をもっているため、結晶基底の y_3 方向の成分は非零となる。この場合、式(6.28)の右辺第4項も非零となる。

6.3 剛性方程式の導出

6.3.1 ミクロ剛性方程式

接線係数法を適用するとき、ミクロ構造(結晶粒構造)の支配方程式(5.22)は次式のように書き換えられる。

$$\int_Y [\{ (C^{tan} - P) : D^\dagger \} \cdot \dot{D}^\dagger + L^\dagger T \cdot \dot{L}^\dagger] dY = - \left\{ \int_Y \dot{D}^\dagger : (C^{tan} - P) dY \right\} : D^0 + \int_Y \Xi^{(\alpha)} \dot{v}^{(\alpha)} \cdot \dot{D}^\dagger dY \dots\dots(6.29)$$

式(6.15)および式(6.20)を用いて式(6.29)を離散化すれば、

$$\int_{Y^e} \{ [B_D]^T [(C^{tan}) - [T_D]] [B_D] + [B_L]^T [T_L] [B_L] \} dY^e \{ v^\dagger \}$$

$$= - \left[\int_{Y^e} [\mathbf{B}_D]^T ([\mathbf{C}^{tan}] - [\mathbf{T}_D]) dY^e \right] \{\mathbf{D}^0\} + \int_{Y^e} [\mathbf{B}_D]^T \sum_{\alpha} \{\boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)}\} \dot{v}^{(\alpha)} dY^e \dots\dots\dots (6.30)$$

が得られる。ここで、 Y^e は現時刻におけるユニットセル Y 内の要素の体積である。また、 $[\mathbf{T}_D]$ および $[\mathbf{T}_L]$ は幾何学的非線形性に起因する応力マトリックスであり、次式のように表される⁽⁹⁵⁾⁽⁹⁶⁾。

$$[\mathbf{T}_D] = \begin{bmatrix} 2T_{11} & 0 & T_{12} \\ & 2T_{22} & T_{12} \\ \text{Symmetric} & & \frac{1}{2}(T_{11} + T_{22}) \end{bmatrix}, \quad [\mathbf{T}_L] = \begin{bmatrix} T_{11} & 0 & T_{12} & 0 \\ & T_{22} & 0 & T_{12} \\ & & T_{22} & 0 \\ \text{Symmetric} & & & T_{11} \end{bmatrix} \dots\dots (6.31)$$

また、式(6.30)は次式のようにまとめることができる。

$$[\mathbf{k}_Y^e] \{v^\dagger\} = -[p] \{\mathbf{D}^0\} + \{q\} \dots\dots\dots (6.32)$$

$[\mathbf{k}_Y^e]$ はユニットセル Y における要素接線剛性マトリックスを、 $[p]$ および $\{q\}$ はユニットセル Y 内の節点力速度を表しており、それぞれ以下のように定義される。

$$[\mathbf{k}_Y^e] = \int_{Y^e} \{[\mathbf{B}_D]^T ([\mathbf{C}^{tan}] - [\mathbf{T}_D]) [\mathbf{B}_D] + [\mathbf{B}_L]^T [\mathbf{T}_L] [\mathbf{B}_L]\} dY^e \dots\dots\dots (6.33)$$

$$[p] = \int_{Y^e} [\mathbf{B}_D]^T ([\mathbf{C}^{tan}] - [\mathbf{T}_D]) dY^e \dots\dots\dots (6.34)$$

$$\{q\} = \int_{Y^e} [\mathbf{B}_D]^T \sum_{\alpha} \{\boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)}\} \dot{v}^{(\alpha)} dY^e \dots\dots\dots (6.35)$$

一方、式(5.23)より $\{v^\dagger\}$ は次式のように表すことができる。

$$\{v^\dagger\} = -[\chi] \{\mathbf{D}^0\} + \{\phi\} \dots\dots\dots (6.36)$$

$$[\chi] \equiv \left[\begin{array}{ccc} \chi^{<11>} & \chi^{<22>} & 2\chi^{<12>} \\ \left. \begin{array}{l} \{\chi^{<11>}\} \equiv \left\{ \chi_1^{<11>1} \quad \chi_2^{<11>1} \quad \chi_1^{<11>2} \quad \chi_2^{<11>2} \quad \dots \quad \chi_1^{<11>m} \quad \chi_2^{<11>m} \right\}^T \\ \{\chi^{<22>}\} \equiv \left\{ \chi_1^{<22>1} \quad \chi_2^{<22>1} \quad \chi_1^{<22>2} \quad \chi_2^{<22>2} \quad \dots \quad \chi_1^{<22>m} \quad \chi_2^{<22>m} \right\}^T \\ \{\chi^{<12>}\} \equiv \left\{ \chi_1^{<12>1} \quad \chi_2^{<12>1} \quad \chi_1^{<12>2} \quad \chi_2^{<12>2} \quad \dots \quad \chi_1^{<12>m} \quad \chi_2^{<12>m} \right\}^T \end{array} \right\} \dots\dots\dots (6.37)$$

$$\{\phi\} \equiv \{\phi_1^1 \quad \phi_2^1 \quad \phi_1^2 \quad \phi_2^2 \quad \dots \quad \phi_1^m \quad \phi_2^m\}^T \dots\dots\dots (6.38)$$

式(6.36)を式(6.32)に代入すれば、次式が得られる。

$$-[\mathbf{k}_Y^e][\chi] \{\mathbf{D}^0\} + [\mathbf{k}_Y^e] \{\phi\} = -[p] \{\mathbf{D}^0\} + \{q\} \dots\dots\dots (6.39)$$

式(6.39)から、以下の関係式が得られる。

$$[\mathbf{k}_Y^e][\chi] = [p], \quad [\mathbf{k}_Y^e] \{\phi\} = \{q\} \dots\dots\dots (6.40)$$

さらに、式(6.40)₂を増分形に書き換えることで、静的陽解法におけるユニットセルYのミクロ要素剛性方程式が次式のように得られる。

$$[k_Y^e][\chi] = [p], \quad [k_Y^e]\{\phi \Delta t\} = \{q \Delta t\} \dots \dots \dots (6.41)$$

ここで、 Δt は時間増分である。ユニットセルY内の全ての要素に関して式(6.41)の重ね合わせを行えば、ユニットセルYのミクロ全体剛性方程式が得られる。この式を周期境界条件下で解けば、ユニットセルYにおける特性速度 $\chi_i^{<kl>}$ および結晶塑性構成式の粘塑性項に起因する特性変位増分 $\phi_i \Delta t$ が求まる。

6.3.2 マクロ剛性方程式

接線係数法を適用するとき、マクロ構造の支配方程式(5.36)は次式のように書き換えられる。

$$\int_V [(C^{tanH} - P^H) : D^0] \cdot \dot{D}^0 + (L^0 T^H) \cdot \dot{L}^0] dV = \oint_A \dot{t}^{(n)H} \cdot \dot{v}^0 dA - \int_V R^{tanH} \cdot \dot{D}^0 dV \dots \dots \dots (6.42)$$

ここで、 C^{tanH} および R^{tanH} は次式により定義される。

$$C_{ijkl}^{tanH} \equiv \langle C_{ijkl}^{tan} - (C_{ijmn}^{tan} - P'_{ijmn}) \chi_{m,n}^{<kl>} \rangle \dots \dots \dots (6.43)$$

$$R_{ij}^{tanH} \equiv \langle \sum_{\alpha} \varepsilon_{ij}^{(\alpha)} \dot{v}^{(\alpha)} - (C_{ijmn}^{tan} - P'_{ijmn}) \phi_{m,n} \rangle \dots \dots \dots (6.44)$$

式(6.1)、式(6.15)および式(6.20)を用いて式(6.42)を離散化し、得られた結果を増分形に書き換えれば、

$$\begin{aligned} \int_{V^E} \{ [B_D^0]^T ([C^{tanH}] - [T_D^H]) [B_D^0] + [B_L^0]^T [T_L^H] [B_L^0] \} dV^E \{ \Delta u^0 \} \\ = \oint_{A^E} [N^0]^T \{ \Delta t^{(n)H} \} dA^E + \int_{V^E} [B_D^0]^T \{ R^{tanH} \Delta t \} dV^E \dots \dots \dots (6.45) \end{aligned}$$

が得られる。ここで V^E および A^E は、それぞれ現時刻におけるマクロ構造V内の要素の体積および表面積であり、 $\{ \Delta u^0 \} \equiv \{ v^0 \Delta t \}$ および $\{ \Delta t^{(n)H} \} \equiv \{ t^{(n)H} \Delta t \}$ である。また、幾何学的非線形性に起因する応力マトリックス $[T_D^H]$ および $[T_L^H]$ は、式(6.31)と同様に次式のように表される。

$$[T_D^H] = \begin{bmatrix} 2T_{11}^H & 0 & T_{12}^H \\ & 2T_{22}^H & T_{12}^H \\ \text{Symmetric} & & \frac{1}{2}(T_{11}^H + T_{22}^H) \end{bmatrix}, \quad [T_L^H] = \begin{bmatrix} T_{11}^H & 0 & T_{12}^H & 0 \\ & T_{22}^H & 0 & T_{12}^H \\ & & T_{22}^H & 0 \\ \text{Symmetric} & & & T_{11}^H \end{bmatrix} \dots (6.46)$$

なお、マクロなCauchy応力は式(5.12)₂のように、ミクロCauchy応力のユニットセルYに関する体積平均をとることで、次式のように得られる。

$$\{ T^H \} = \langle \{ T \} \rangle, \quad \{ T^H \} \equiv \{ T_{11}^H \quad T_{22}^H \quad T_{12}^H \}^T \dots \dots \dots (6.47)$$

さらに、式(6.43)および式(6.44)を離散化すれば、 $[C^{tanH}]$ および $\{ R^{tanH} \Delta t \}$ は次式のようになる。

$$[C^{tanH}] = \langle [C^{tan}] - ([C^{tan}] - [T_D]) [B_D] [\chi] \rangle \dots \dots \dots (6.48)$$

$$\{\mathbf{R}^{tanH} \Delta t\} = \left\langle \sum_{\alpha} \{\boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)}\} \Delta \bar{v}^{(\alpha)} - ([\mathbf{C}^{tan}] - [\mathbf{T}_D]) [\mathbf{B}_D] \{\boldsymbol{\phi} \Delta t\} \right\rangle \dots \dots \dots (6.49)$$

したがって、式(6.45)をまとめれば、静的陽解法におけるマクロ構造 V のマクロ要素剛性方程式が次式のように得られる。

$$[\mathbf{k}_V^E] \{\Delta \mathbf{u}^0\} = \{\Delta \bar{\mathbf{f}}\} + \{\Delta \bar{\mathbf{f}}^{vp}\} \dots \dots \dots (6.50)$$

ここで、 $[\mathbf{k}_V^E]$ はマクロ構造 V における要素接線剛性マトリックス、 $\{\Delta \bar{\mathbf{f}}\}$ は外力増分ベクトルおよび $\{\Delta \bar{\mathbf{f}}^{vp}\}$ は均質化結晶塑性構成式の粘塑性項に起因する見かけの外力増分ベクトルである。 $[\mathbf{k}_V^E]$ 、 $\{\Delta \bar{\mathbf{f}}\}$ および $\{\Delta \bar{\mathbf{f}}^{vp}\}$ の具体形は以下ようになる。

$$[\mathbf{k}_V^E] = \int_{V^E} \left\{ [\mathbf{B}_D^0]^T ([\mathbf{C}^{tanH}] - [\mathbf{T}_D^H]) [\mathbf{B}_D^0] + [\mathbf{B}_L^0]^T [\mathbf{T}_L^H] [\mathbf{B}_L^0] \right\} dV^E \dots \dots \dots (6.51)$$

$$\{\Delta \bar{\mathbf{f}}\} = \oint_{A^E} [\mathbf{N}^0]^T \{\Delta \bar{\mathbf{t}}^H\} dA^E \dots \dots \dots (6.52)$$

$$\{\Delta \bar{\mathbf{f}}^{vp}\} = \int_{V^E} [\mathbf{B}_D^0]^T \{\mathbf{R}^{tanH} \Delta t\} dV^E \dots \dots \dots (6.53)$$

なお、四辺形要素を用いる場合には、Gauss積分⁽⁹⁵⁾により $[\mathbf{k}_V^E]$ 、 $\{\Delta \bar{\mathbf{f}}\}$ および $\{\Delta \bar{\mathbf{f}}^{vp}\}$ を算出する。マクロ構造 V 内の全ての要素に関して式(6.50)の重ね合わせを行えば、マクロ構造 V に関するマクロ全体剛性方程式が得られる。与えられた境界条件の下でこの式を解けば、マクロ構造 V における節点変位増分が求まり、マクロ変形速度を算出できる。5.5節で述べたように、得られたマクロ変形速度をミクロ境界値問題に対するデータとして与えれば、再度ミクロスケールの境界値問題を解くことなく、対応するユニットセル Y 内の応答変位増分を求めることができる。例えば、マクロ構造 V における igp 番目の積分点におけるマクロ変形速度が $\{\mathbf{D}^{0igp}\}$ であるとすれば、その積分点に配置されたユニットセル内の節点変位増分は式(5.37)から次式のように得られる。

$$\{\Delta \mathbf{U}\} = \{\mathbf{D}^{0igp} \Delta t\} [\mathbf{Y}] - [\mathbf{X}] \{\mathbf{D}^{0igp} \Delta t\} + \{\boldsymbol{\Phi} \Delta t\} \dots \dots \dots (6.54)$$

$$\{\Delta \mathbf{U}\} \equiv \{\Delta u_1^1 \quad \Delta u_2^1 \quad \Delta u_1^2 \quad \Delta u_2^2 \quad \dots \quad \Delta u_1^{mp} \quad \Delta u_2^{mp}\}^T \dots \dots \dots (6.55)$$

$$\{\mathbf{D}^{0igp} \Delta t\} \equiv \{D_{11}^{0igp} \Delta t \quad D_{22}^{0igp} \Delta t \quad 2D_{12}^{0igp} \Delta t\}^T \dots \dots \dots (6.56)$$

$$[\mathbf{Y}] \equiv \begin{bmatrix} y_1^1 & 0 & y_1^2 & 0 & \dots & y_1^{mp} & 0 \\ 0 & y_2^1 & 0 & y_2^2 & \dots & 0 & y_2^{mp} \\ y_2^1 & y_1^1 & y_2^2 & y_1^2 & \dots & y_2^{mp} & y_1^{mp} \end{bmatrix}^T \dots \dots \dots (6.57)$$

$$[\mathbf{X}] \equiv \left[\begin{array}{l} \mathbf{X}^{<11>} \quad \mathbf{X}^{<22>} \quad 2\mathbf{X}^{<12>} \\ \left. \begin{array}{l} \{\mathbf{X}^{<11>}\} \equiv \left\{ \chi_1^{<11>1} \quad \chi_2^{<11>1} \quad \chi_1^{<11>2} \quad \chi_2^{<11>2} \quad \dots \quad \chi_1^{<11>mp} \quad \chi_2^{<11>mp} \right\}^T \\ \{\mathbf{X}^{<22>}\} \equiv \left\{ \chi_1^{<22>1} \quad \chi_2^{<22>1} \quad \chi_1^{<22>2} \quad \chi_2^{<22>2} \quad \dots \quad \chi_1^{<22>mp} \quad \chi_2^{<22>mp} \right\}^T \\ \{\mathbf{X}^{<12>}\} \equiv \left\{ \chi_1^{<12>1} \quad \chi_2^{<12>1} \quad \chi_1^{<12>2} \quad \chi_2^{<12>2} \quad \dots \quad \chi_1^{<12>mp} \quad \chi_2^{<12>mp} \right\}^T \end{array} \right\} \dots \dots \dots (6.58)$$

$$\{\Phi \Delta t\} \equiv \{\phi_1^1 \Delta t \quad \phi_2^1 \Delta t \quad \phi_1^2 \Delta t \quad \phi_2^2 \Delta t \quad \cdots \quad \phi_1^{mp} \Delta t \quad \phi_2^{mp} \Delta t\}^T \quad \dots \quad (6.59)$$

ここで、 mp は対象となっているユニットセル内の総節点数である。さらに、(5.39)から得られる回転行列 $[\Delta R^0]$ を式(6.54)により更新したユニットセル内の節点座標ベクトルに乘じれば、マクロ構造の回転に伴うユニットセルの回転も考慮したユニットセル内の節点座標が得られる。

6.3.3 次数低減積分

本研究で扱う大変形塑性解析では、使用する有限要素の種類および数値積分の方法は解に大きく影響を及ぼすことが知られており、場合によっては実際の解に比べて極端に硬い解が得られるロッキングと呼ばれる現象が起こる。その代表的な回避方法として、次数低減積分⁽⁹⁵⁾が挙げられる。

FEM解析を行う場合、要素剛性、節点力あるいは外力を算出する際に、体積積分または表面積分を実施する必要がある。しかしながら、要素が単純な形状をしていない限り被積分関数の形が非常に複雑になり、解析的に積分を行うことはほぼ不可能である。そのため、有限要素法では数値積分を用いて近似的に領域積分が行われることが多い。特に、2次元四辺形要素の場合には、通常 Gauss 積分が用いられる。この場合、理想形状の要素に対して内挿関数の積分を正しく表現できるよう積分次数を決定した積分は、完全積分と呼ばれる。要素剛性などを算出する際に Gauss 積分を適用する場合、一次要素(4節点四辺形要素)であれば 2×2 、二次要素(8節点、9節点四辺形要素)であれば 3×3 の積分点を用いれば完全積分となる⁽⁹⁵⁾。

完全積分により剛性が過大に評価され、得られる解が異常に固くなるロッキングと呼ばれる現象が起こることがある。特に、四辺形一次要素を用いた大変形塑性解析を行う場合には、体積ロッキングと呼ばれる現象が起こることが知られている。ここで、体積弾性係数 K は Young 率 E と Poisson 比 ν を用いて次式のように表せる。

$$K = \frac{E}{3(1-2\nu)} \quad \dots \quad (6.60)$$

大変形塑性解析では、体積変化は非常に小さいことを想定しており、これはポアソン比が0.5近くになることを意味している。そのため、上式から得られる体積弾性係数が非常に大きな値となり、体積弾性係数に関連した剛性が過大に評価されることで体積ロッキングが起こると考えられている⁽⁹⁷⁾。このようなロッキング現象を回避する方法として、数値積分を完全積分より低い次数で行う次数低減積分と呼ばれる手法がよく用いられ、この手法により解が劇的に改善されることが知られている⁽⁹⁵⁾。次数低減積分を適用する場合には、積分点の数は一次要素(4節点四辺形要素)であれば 1×1 、二次要素(8節点、9節点四辺形要素)であれば 2×2 となる。なお、二次要素の場合には、一般に表現できる場の自由度が高くなるため、完全積分を適用しても多くの場合ロッキング現象のような問題は生じない。一方で、次数低減積分によって剛体変形モード以外にエネルギーが零と評価される擬似モードが剛性マトリックスに含まれ、境界条件によっては明らかに虚偽解が得られることがある⁽⁹⁵⁾。2次元解析において、剛体変形モードの数は3であるため、ゼロエネルギーモードの数が3であれば擬似モードは発生しない。しかしながら、4節点、8節点およ

$$[B_{Dv}^0] \equiv \begin{bmatrix} \frac{\partial N^{01}}{\partial x_1} & \frac{\partial N^{01}}{\partial x_2} & \frac{\partial N^{02}}{\partial x_1} & \frac{\partial N^{02}}{\partial x_2} & \frac{\partial N^{03}}{\partial x_1} & \frac{\partial N^{03}}{\partial x_2} & \frac{\partial N^{04}}{\partial x_1} & \frac{\partial N^{04}}{\partial x_2} \\ \frac{\partial N^{01}}{\partial x_1} & \frac{\partial N^{01}}{\partial x_2} & \frac{\partial N^{02}}{\partial x_1} & \frac{\partial N^{02}}{\partial x_2} & \frac{\partial N^{03}}{\partial x_1} & \frac{\partial N^{03}}{\partial x_2} & \frac{\partial N^{04}}{\partial x_1} & \frac{\partial N^{04}}{\partial x_2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \dots\dots\dots (6.67)$$

したがって、4 節点四辺形要素の場合には、式 (6.51) における $[B_D^0]$ および $[B_L^0]$ を $[\bar{B}_D^0]$ および $[\bar{B}_L^0]$ に置き換えるだけで、選択形次数低減積分による要素剛性の評価が可能となる。なお、2 次要素 (8 節点、9 節点四辺形要素) の場合には、速度こう配の体積成分は要素内において一定とはならないため、上記の方法を適用することができないことに注意されたい。そのため、本研究では 2 次要素を用いる場合には、選択形次数低減積分を行わず、完全積分および次数低減積分の場合についてのみ検討することとする。

6.4 GN 結晶欠陥の数値計算

まず、ミクロ構造に設定された局所座標系 ξ_i を考えると、式 (2.99) から GN 転位密度の各成分 $\alpha_{screw}^{(\alpha)}$ (らせん成分) および $\alpha_{edge}^{(\alpha)}$ (刃状成分) は次式のように表される。

$$\alpha_{screw}^{(\alpha)} = \frac{1}{\bar{b}} \frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial \xi_3}, \quad \alpha_{edge}^{(\alpha)} = -\frac{1}{\bar{b}} \frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial \xi_1} \dots\dots\dots (6.68)$$

全体座標系 y_i における結晶基底ベクトルは、基底ベクトル e_i を用いて

$$s^{(\alpha)} = s_1^{(\alpha)} e_1 + s_2^{(\alpha)} e_2 + s_3^{(\alpha)} e_3 \dots\dots\dots (6.69)$$

$$m^{(\alpha)} = m_1^{(\alpha)} e_1 + m_2^{(\alpha)} e_2 + m_3^{(\alpha)} e_3 \dots\dots\dots (6.70)$$

$$t^{(\alpha)} = t_1^{(\alpha)} e_1 + t_2^{(\alpha)} e_2 + t_3^{(\alpha)} e_3 \dots\dots\dots (6.71)$$

と表すことができるため、式 (6.68) は次のように書き換えることができる。

$$\alpha_{screw}^{(\alpha)} = \frac{1}{\bar{b}} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_1} t_1^{(\alpha)} + \frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_2} t_2^{(\alpha)} + \frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_3} t_3^{(\alpha)} \right) \dots\dots\dots (6.72)$$

$$\alpha_{edge}^{(\alpha)} = -\frac{1}{\bar{b}} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_1} s_1^{(\alpha)} + \frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_2} s_2^{(\alpha)} + \frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_3} s_3^{(\alpha)} \right) \dots\dots\dots (6.73)$$

同様にして、式 (2.100) から 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。

$$\eta_{cs}^{(\alpha)} = -\frac{l}{\bar{b}} \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial \xi_3 \partial \xi_3}, \quad \eta_{ds}^{(\alpha)} = \frac{l}{\bar{b}} \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial \xi_3 \partial \xi_2}, \quad \eta_{ce}^{(\alpha)} = \frac{l}{\bar{b}} \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial \xi_1 \partial \xi_3}, \quad \eta_{de}^{(\alpha)} = -\frac{l}{\bar{b}} \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial \xi_1 \partial \xi_2} \dots\dots\dots (6.74)$$

GN 転位密度の成分の場合と同様にして、全体座標系における GN 不適合度の各成分は以下のように表すことができる。

$$\eta_{cs}^{(\alpha)} = -\frac{l}{\bar{b}} \left(\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_1 \partial y_1} t_1^{(\alpha)} t_1^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_2 \partial y_1} t_2^{(\alpha)} t_1^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_3 \partial y_1} t_3^{(\alpha)} t_1^{(\alpha)} \right. \\ \left. + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_1 \partial y_2} t_1^{(\alpha)} t_2^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_2 \partial y_2} t_2^{(\alpha)} t_2^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_3 \partial y_2} t_3^{(\alpha)} t_2^{(\alpha)} \right)$$

$$+ \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_1 \partial y_3} t_1^{(\alpha)} t_3^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_2 \partial y_3} t_2^{(\alpha)} t_3^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_3 \partial y_3} t_3^{(\alpha)} t_3^{(\alpha)} \Big) \dots \dots \dots (6.75)$$

$$\begin{aligned} \eta_{ds}^{(\alpha)} = & \frac{l}{\bar{b}} \left(\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_1 \partial y_1} t_1^{(\alpha)} m_1^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_2 \partial y_1} t_2^{(\alpha)} m_1^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_3 \partial y_1} t_3^{(\alpha)} m_1^{(\alpha)} \right. \\ & + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_1 \partial y_2} t_1^{(\alpha)} m_2^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_2 \partial y_2} t_2^{(\alpha)} m_2^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_3 \partial y_2} t_3^{(\alpha)} m_2^{(\alpha)} \\ & \left. + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_1 \partial y_3} t_1^{(\alpha)} m_3^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_2 \partial y_3} t_2^{(\alpha)} m_3^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_3 \partial y_3} t_3^{(\alpha)} m_3^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (6.76) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \eta_{ce}^{(\alpha)} = & \frac{l}{\bar{b}} \left(\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_1 \partial y_1} s_1^{(\alpha)} t_1^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_2 \partial y_1} s_2^{(\alpha)} t_1^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_3 \partial y_1} s_3^{(\alpha)} t_1^{(\alpha)} \right. \\ & + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_1 \partial y_2} s_1^{(\alpha)} t_2^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_2 \partial y_2} s_2^{(\alpha)} t_2^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_3 \partial y_2} s_3^{(\alpha)} t_2^{(\alpha)} \\ & \left. + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_1 \partial y_3} s_1^{(\alpha)} t_3^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_2 \partial y_3} s_2^{(\alpha)} t_3^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_3 \partial y_3} s_3^{(\alpha)} t_3^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (6.77) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \eta_{de}^{(\alpha)} = & -\frac{l}{\bar{b}} \left(\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_1 \partial y_1} s_1^{(\alpha)} m_1^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_2 \partial y_1} s_2^{(\alpha)} m_1^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_3 \partial y_1} s_3^{(\alpha)} m_1^{(\alpha)} \right. \\ & + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_1 \partial y_2} s_1^{(\alpha)} m_2^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_2 \partial y_2} s_2^{(\alpha)} m_2^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_3 \partial y_2} s_3^{(\alpha)} m_2^{(\alpha)} \\ & \left. + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_1 \partial y_3} s_1^{(\alpha)} m_3^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_2 \partial y_3} s_2^{(\alpha)} m_3^{(\alpha)} + \frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_3 \partial y_3} s_3^{(\alpha)} m_3^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (6.78) \end{aligned}$$

本研究では、式(6.72)および式(6.73)におけるすべりこう配 $\partial \gamma^{(\alpha)} / \partial y_1$ 、 $\partial \gamma^{(\alpha)} / \partial y_2$ および $\partial \gamma^{(\alpha)} / \partial y_3$ を算出する方法として、青柳・志澤⁽⁸⁷⁾による手法を採用する。青柳・志澤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 $\gamma_{node}^{(\alpha) n}$ を求め、形状関数 N^n のこう配を用いることで、すべりのこう配を以下のように算出している。

$$\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_1} = \sum_n \frac{\partial N^n}{\partial y_1} \gamma_{node}^{(\alpha) n} \dots \dots \dots (6.79)$$

$$\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_2} = \sum_n \frac{\partial N^n}{\partial y_2} \gamma_{node}^{(\alpha) n} \dots \dots \dots (6.80)$$

$$\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_3} = \sum_n \frac{\partial N^n}{\partial y_3} \gamma_{node}^{(\alpha) n} \dots \dots \dots (6.81)$$

すべりこう配をいかに精度よく計算するかは $\gamma_{node}^{(\alpha) n}$ の求め方により大きく左右されるが、青柳・志澤は隣接する要素の積分点の値を平均化することで各節点の値を求めている。この方法は要素形状および積分点の数によらないため、3次元解析にも同様に適用できる。一方、本研究で用いる三角形定ひずみ要素のような1次要素の場合、式(6.75)、式(6.76)、式(6.77)および式(6.78)におけるすべりの2次こう配は零になってしまう。そこで、青柳・志澤は式(6.79)、式(6.80)および式(6.81)で求めたすべりの1次こう配を同様に節点に振り分け、2次こう配を次式のように求めている。

$$\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_1 \partial y_1} = \sum_n \frac{\partial N^n}{\partial y_1} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_1} \right)_{node} \dots \dots \dots (6.82)$$

$$\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_1 \partial y_2} = \sum_n \frac{\partial N^n}{\partial y_1} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_2} \right)_{node} \dots \dots \dots (6.83)$$

$$\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_1 \partial y_3} = \sum_n \frac{\partial N^n}{\partial y_1} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_3} \right)_{node} \dots \dots \dots (6.84)$$

$$\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_2 \partial y_1} = \sum_n \frac{\partial N^n}{\partial y_2} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_1} \right)_{node} \dots \dots \dots (6.85)$$

$$\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_2 \partial y_2} = \sum_n \frac{\partial N^n}{\partial y_2} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_2} \right)_{node} \dots \dots \dots (6.86)$$

$$\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_2 \partial y_3} = \sum_n \frac{\partial N^n}{\partial y_2} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_3} \right)_{node} \dots \dots \dots (6.87)$$

$$\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_3 \partial y_1} = \sum_n \frac{\partial N^n}{\partial y_3} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_1} \right)_{node} \dots \dots \dots (6.88)$$

$$\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_3 \partial y_2} = \sum_n \frac{\partial N^n}{\partial y_3} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_2} \right)_{node} \dots \dots \dots (6.89)$$

$$\frac{\partial^2 \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_3 \partial y_3} = \sum_n \frac{\partial N^n}{\partial y_3} \left(\frac{\partial \gamma^{(\alpha)}}{\partial y_3} \right)_{node} \dots \dots \dots (6.90)$$

6.5 転位-結晶塑性解析における解析モデル

6.5.1 Asaro の平面2重すべりモデル

結晶塑性論を用いた2次元平面ひずみ問題に対する解析を行う場合には、解析面である $y_1 y_2$ 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。しかしながら、図6.3(a)のように同時に2つのすべり系を $y_1 y_2$ 平面上に乗せることはできない。そこで図6.3(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 y_3 方向に一様であるとしたAsaro⁽⁶⁵⁾による平面2重すべりモデルがよく用いられる。このとき2つのすべり系はB4, C1[補足D.3参照]に相当し、すべり系の相互作用は表D.2からLomer-Cottrell固着の関係にあることがわかる。このモデルでは、その他のすべり系は活動しないと仮定しているため、他の相互作用については考慮する必要がない。また、活動する2つのすべり系の結晶基底に関しては、図6.3(c)のように設定することができる。なお、Asaroの平面2重すべりモデルを用いる場合には、結晶基底は2次元の情報のみを有している ($s_3^{(\alpha)} = m_3^{(\alpha)} = 0$) ため、 $t^{(\alpha)}$ は常に対象としている面に対して垂直となる ($t_3^{(\alpha)}$ のみ非零)。その結果、GN転位密度およびGN不適合度の成分については、 $\alpha_{edge}^{(\alpha)}$ および $\eta_{de}^{(\alpha)}$ のみが非零となる。したがって、転位密度に関してはこれら2つの成分のみを考慮すればよい。

6.5.2 擬似3次元モデル

Asaroの平面2重すべりモデルを用いた場合、活動すべり系や転位の蓄積挙動が材料の力学特性に及ぼす3次元的影响を考慮することができない。また、活動すべり系は2つまでし

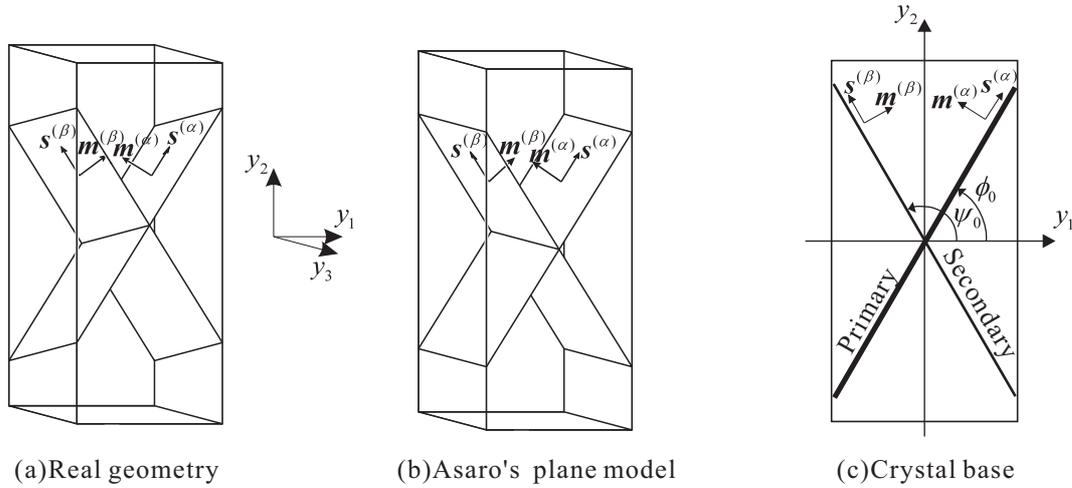


Fig. 6.3 Asaro's 2 slip model

か同時に考慮できないため、粒内に蓄積する全転位密度やすべり系間の相互作用の影響が過小評価される危険性がある。そのため、数値解析で得られた結果と実験結果を定量的に比較することが難しい。そこで本研究では、FEM解析に関しては平面ひずみ条件を仮定する一方で、FCC結晶の12すべり系を全て考慮することで結晶基底に3次元の情報を与え、転位-結晶塑性論に関する計算については3次元的に行うという擬似3次元解析⁽¹⁰⁰⁾⁽¹⁰¹⁾を行う。この場合、結晶のすべり系の活動による3次元的な変形については解析面に関する成分のみを考慮することになり、速度こう配に関しては $L_{33} = L_{23} = L_{32} = L_{13} = L_{31} = 0$ とする。また、Cauchy応力の成分に対しても平面ひずみ問題に対応する形で、面外せん断成分 T_{23} および T_{31} を零として解析を行う。さらに、結晶基底は3次元の情報を持つため、分解せん断応力 $\tau^{(a)} = s^{(a)} \cdot T m^{(a)}$ 、塑性スピンの W^p 、GN転位密度 $\alpha^{(a)}$ およびGN不適合度 $\eta^{(a)}$ の計算については3次元的に行う。なお、GN転位密度およびGN不適合度の各成分に関しては、 $\partial \gamma^{(a)} / \partial y_3$ に関する項のみが零となるため、全ての成分を考慮する必要があることに注意されたい。

6.6 トリプルスケール転位-結晶塑性解析のアルゴリズム

本研究におけるトリプルスケール解析とは、微視的転位スケール、結晶粒スケールおよび巨視的試験片スケールにまたがる解析を意味する。転位場と結晶場の橋渡しをする転位-結晶塑性FEM解析をマイクロ解析、巨視的試験片スケールにおける均質化結晶塑性構成式を用いたFEM解析をマクロ解析とし、マイクロ-マクロ連成FEM解析を行う⁽⁴³⁾⁽⁴⁵⁾。なお、本研究で行う解析は全て自作のFEMソースコードによるものであり、実際に解析を行う際の手順を以下に簡単に示す。

- (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を行う。
- (2) 式(6.50)からマクロ要素剛性方程式を求め、マクロ構造内の全要素に関する重ね合わせを行うことで、マクロ全体剛性方程式を求める。この式を解くことで、マクロ構造

における節点変位増分を算出する。

- (3) 式(6.20)₁からマクロ構造内の各積分点におけるマクロ変形速度を算出し、式(6.54)から各積分点に配置されたユニットセル内の節点変位増分を求める。また、式(6.20)₃から各ユニットセル内のミクロ変形速度を求める。
- (4) 式(4.16)から分解せん断応力を、式(4.15)からすべり速度を算出し、これらと(3)で求めたミクロ変形速度を用いて式(6.24)および式(6.28)からミクロ応力速度を算出する。
- (5) (4)で求めたすべり速度およびミクロ応力速度を用いて、ユニットセル内のすべりおよびミクロ応力を更新する。また、式(4.76)および式(4.77)から結晶基底を更新する。
- (6) (5)で得たすべりの値を用いて、式(4.1)および式(4.2)からGN転位密度およびGN不適合度を算出する。また、式(4.4)から対消滅を起こした転位密度を求める。
- (7) (6)で求めた転位密度を用いて、式(4.57)から結晶の硬化係数を算出する。
- (8) 結晶の硬化係数および(4)で求めたすべり速度を用いて、式(4.19)から流れ応力速度を求め、流れ応力を更新する。
- (9) 式(6.41)からミクロ要素剛性方程式を求め、各ユニットセル内の全要素に関する重ね合わせを行うことで、各ユニットセルにおけるミクロ全体剛性方程式を求める。この式を解くことで、各ユニットセル内の特性速度を算出する。
- (10) 式(6.47)、式(6.48)および(6.49)からマクロ構造の各積分点におけるマクロ応力、均質化された弾性係数および均質化された粘塑性項を求める。
- (11) (2)で求めたマクロ節点変位増分を用いて、マクロ構造内の節点座標を更新する。また(3)で求めたミクロ節点変位増分を用いて、各ユニットセル内の節点座標を更新する。
- (12) 指定の変形率に達していなければ(2)に戻る。
- (13) 解析終了。

また、解析の流れおよび各スケール間における変数の受け渡しについての模式図を図6.4に示す。

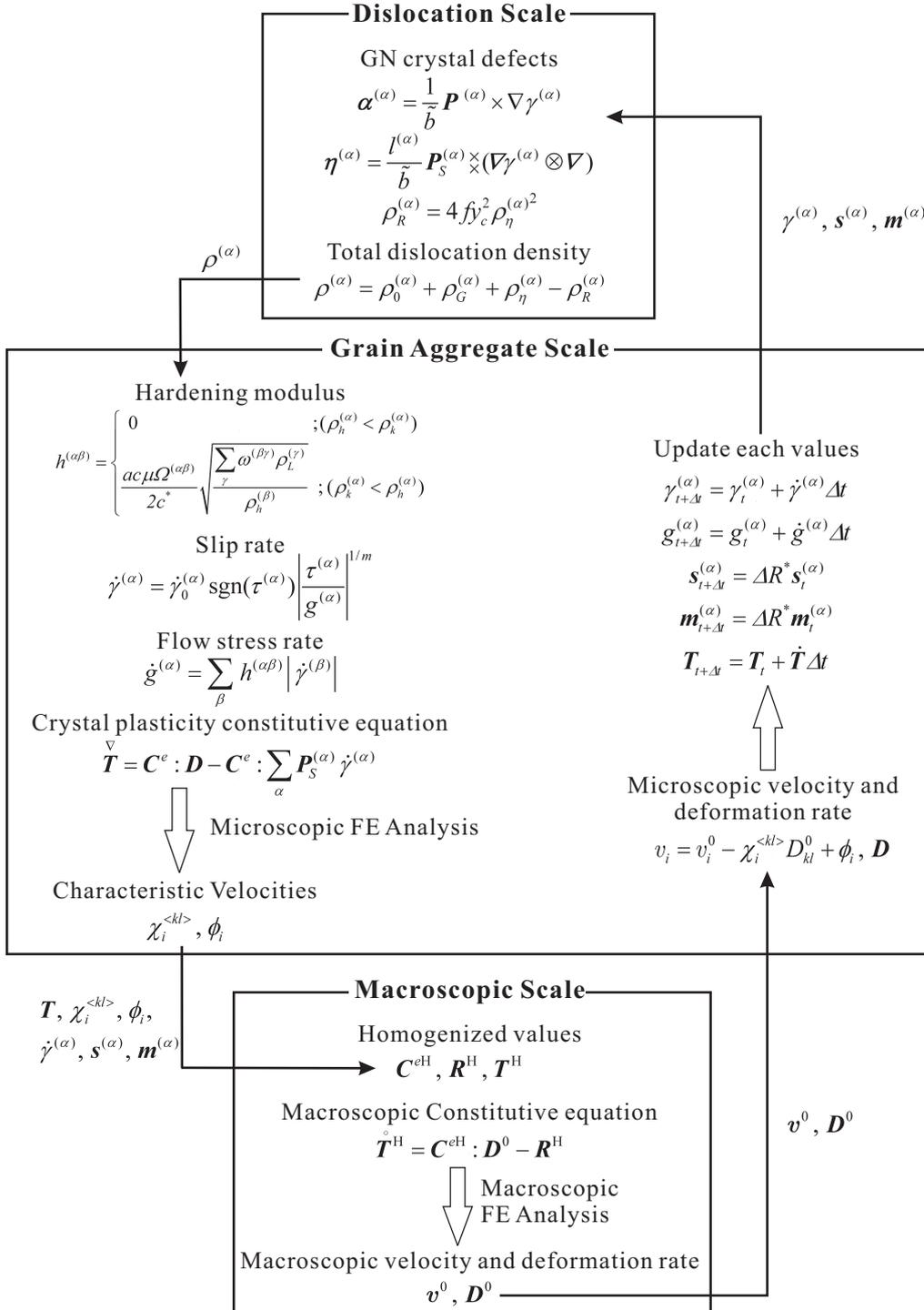


Fig. 6.4 Flow chart of numerical analysis

第7章

トリプルスケール転位-結晶塑性FEM 解析

本章では、UFGMにおけるミクロからマクロにわたる力学挙動を統一的に再現することを目的とし、微視的転位組織-結晶粒構造-巨視的試験片にまたがるトリプルスケール転位-結晶塑性FEM解析を初期平均粒径および初期転位密度の異なるFCC多結晶体に対して実施する。本研究では、等方材料を対象とするため、まず初期方位の違いによらずほぼ同一の力学応答を得るためにユニットセル内部に含めるべき結晶粒数に関する検討を行う。次に、これまでに提案されている結晶の加工硬化モデルへの各種転位密度の導入方法をそれぞれ用いた場合の解析を行い、得られた結果と実現象を比較することで、結晶粒の加工硬化特性における粒径依存性を表現するのに最も適した導入方法を決定する。

以上から得られた結晶の加工硬化モデルを用いて、FCC微細粒焼鈍材を想定した試験片に対するトリプルスケール転位-結晶塑性解析を実施する。まず、Asaroの平面2重すべりモデルを用いた解析を行い、本研究において新しく提案する臨界分解せん断応力モデルを用いることで、降伏点降下現象やLüders帯の伝ばといったFCC微細粒焼鈍材に特有の現象を定性的に再現できることを示す。また、本研究では結晶粒の微細化に伴う延性の低下に関する検討を行うことも目的としているため、試験片の破断の前駆現象である塑性変形の局所化、すなわちせん断帯の発現を再現する必要がある。そこで、本モデルを用いた塑性局所化解析を行う際に、試験片を分割する有限要素の選択が解析結果に及ぼす影響についても検討する。

最後に、FCC結晶の全12すべり系を考慮した擬似3次元トリプルスケール転位-結晶塑性解析を強ひずみ加工のみが施されたUFGM、微細粒焼鈍材および通常粒金属を想定した試験片に対して実行し、本モデルによりそれぞれの金属材料に特有の力学特性を統一的に再現する。また、得られた結果と実験結果との定量的な比較検討を行う。さらに、FCC-UFGMにおける試験片レベルでの巨視的降伏および結晶粒レベルでの微視的降伏状況について考察するとともに、粒径のサブミクロン化に伴う金属材料の急激な延性低下のメカニズムについて検討する。

7.1 ユニットセル内部の結晶粒数に関する検討

実際の多結晶金属は完全に周期的な結晶粒構造を有するわけではないため、結晶塑性均質化理論においては厳密なユニットセルを定義することはできない。しかしながら、結晶方位や結晶粒数によらずほぼ同一の力学応答が得られる周期的なミクロ構造単位を見出すことができれば、この構造単位を近似的にユニットセルとみなすことができる。そこで本節では、異なる結晶粒数から構成されるユニットセルに異なる初期結晶方位の組を複数通り与えた際の解析を行い、それぞれの解析における解の収束性を考察することで、得られる巨視的応答が等方的となるために必要なユニットセル内部の結晶粒数について検討する。

7.1.1 解析条件

まず、マクロ構造は一様変形するAl平板であると仮定し、平面ひずみ条件における単軸引張を与える[図7.1(a)]。ここでは、 x_2 軸方向への単軸引張を想定しているため L_{22}^0 を強制的に与え、巨視的境界条件は次式のようになる。

$$L_{12}^0 = L_{21}^0 = L_{23}^0 = L_{32}^0 = L_{31}^0 = L_{13}^0 = L_{33}^0 = 0 \dots\dots\dots (7.1)$$

なお、1%引張りに対する時間ステップ数を1000とする。

一方、ユニットセルは複数の結晶粒からなる正方形多結晶平板とし、Asaroの平面2重すべりモデルを適用する。ユニットセルに関しても平面ひずみ問題を考え、境界条件として変位に関する周期境界条件を与える[図7.1(b)]。ユニットセル内の結晶粒に関しては、図7.1(c)のようにVoronoi分割法によって分割された領域を1つの結晶粒とする。また、斜めの粒界を有する結晶粒をCT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、各結晶粒内をDelaunay三角形分割法により面積がほぼ一様である三角形で分割し、それぞれを三角形定ひずみ要素とする。結晶粒数については、図7.1(c)に示す11通りを考え、いずれの場合においても各結晶粒内の要素数を約100とする。さらに、それぞれの場合に対して10通りの異なる結晶方位の組を与えて解析を行う。なお、結晶方位については、図6.3(c)のように各粒における2つのすべり面の y_1 軸からの角度を ϕ_0 および ψ_0 とし、 ϕ_0 については $0^\circ \sim 90^\circ$ の範囲で一様に分布する擬似乱数をランダムに与える。また、この場合に考慮する2つのすべり系B4およびC1におけるすべり方向ベクトルのなす角は 60° となるため、 ψ_0 については $\psi_0 = \phi_0 + 60^\circ$ とする。

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、簡単化のため弾性等方性を仮定し、 C^e を多結晶AlのYoung率 E およびPoisson比 ν から求める。また、転位密度の表現にはGN結晶欠陥を採用し、臨界分解せん断応力モデルには従来のBailey-Hirschの式(4.21)を用いる。さらに、結晶の硬化係数への転位密度の導入方法については式(4.32)のようにする。材料定数および数値パラメータについては、以

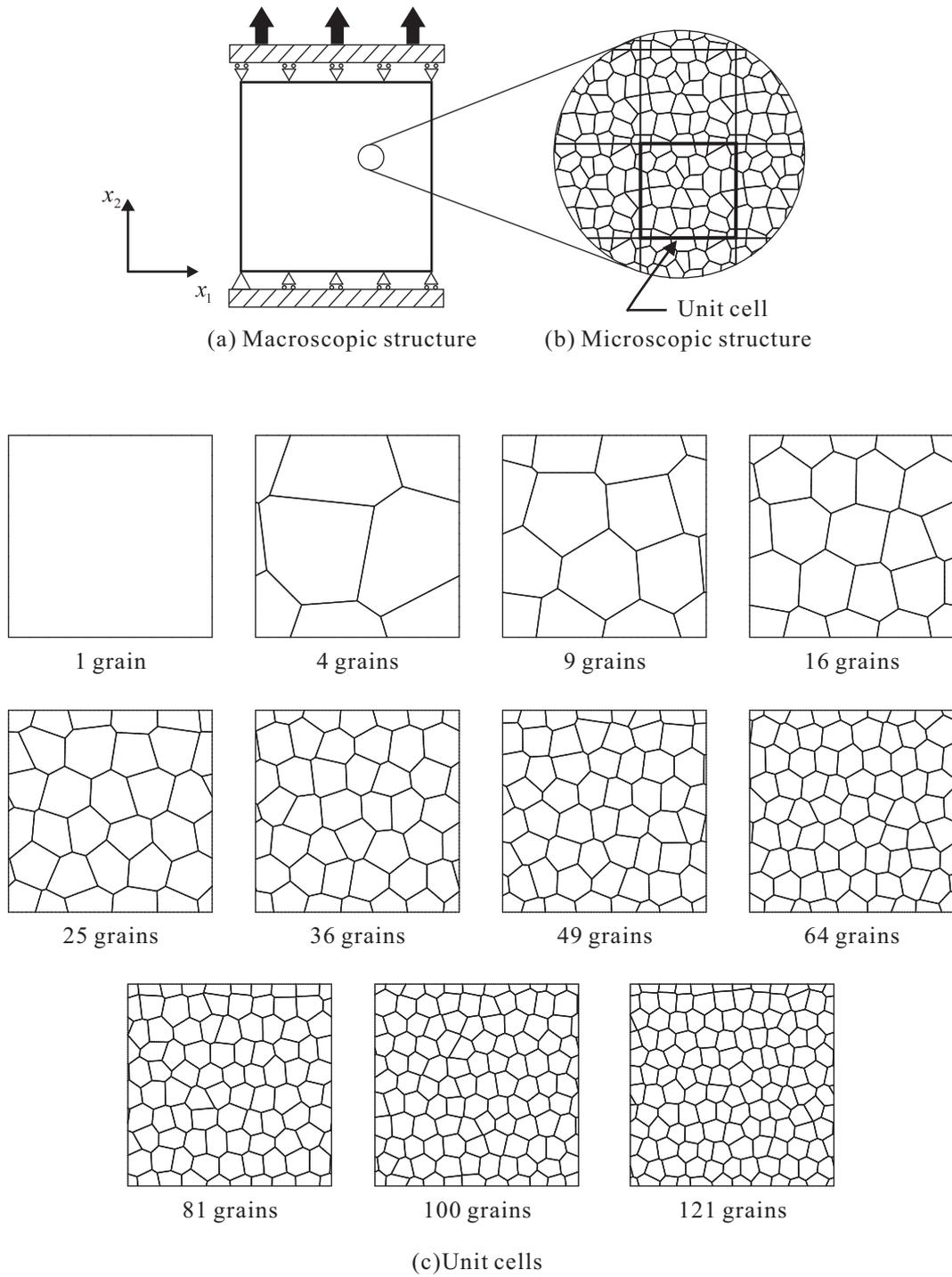


Fig. 7.1 Computational model for unit cell with different numbers of grains

下の値を用いる .

$$\left. \begin{array}{llll} E = 60\text{GPa}, & \nu = 0.30, & \tilde{b} = 0.26\text{nm}, & y_c = 1.0\text{nm}, \\ f = 1.0 \times 10^2, & \dot{\gamma}_0^{(\alpha)} = 1.0 \times 10^{-3}\text{s}^{-1}, & m = 5.0 \times 10^{-3}, & \tau_r^{(\alpha)} = 15\text{MPa}, \\ a = 0.20, & c = 1.0, & c^* = 30, & \theta^{an} = 1 \end{array} \right\} \dots\dots\dots (7.2)$$

転位の相互作用行列 $Q^{(\alpha\beta)}$ 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 . ただし, この場合は式(4.30)右辺の分母の値が零となってしまうため, $\omega^{(\alpha\beta)}$ の成分に関しては対角成分を零とし, その他の成分を1とする . 初期平均粒径については, 通常粒金属を想定して $\bar{d} = 30\mu\text{m}$ とし, 初期転位密度は $\rho_0^{(\alpha)} = 1.0\mu\text{m}^{-2}$ としている .

7.1.2 解析結果および考察

図7.2は, 異なる結晶粒数を有するユニットセルにそれぞれ10通りの異なる初期結晶方位の組を与えて行った解析から得られた, 各結晶粒数に対応するマクロ構造の公称応力-公称ひずみ線図である . 本解析ではマクロ構造の一樣単軸引張を仮定しているため, ここでは解析から得られたマクロ真応力 T^H およびマクロ真ひずみ E^0 の引張方向成分 T_{22}^H および E_{22}^0 に対して真変換の逆変換を行うことで, 公称応力および公称ひずみを求めている . この図を見ると, ユニットセル内部の結晶粒数の増加に伴って応力のばらつきは小さくなり, 材料は初期等方の状態に近づくことがわかる . また, 25以上の結晶粒を含んだユニットセルを用いることで, 初期結晶方位の違いによらずほぼ同一の傾向を示す公称応力-公称ひずみ線図が得られていることが確認できる . さらに, ユニットセル内部の結晶粒数が64以上のときにマクロな材料応答がほぼ完全に収束していることが確認できる .

図7.2において, 各結晶粒数に対応した公称応力-公称ひずみ線図における0.2%耐力および伸び率10%における公称応力の標準偏差を調べると, 図7.3のようになる . この図を見ると, 0.2%耐力および伸び率10%における公称応力のどちらの場合においても, 結晶粒数の増加に伴って標準偏差が減少し, 結晶粒数が約20のときにほぼ一定の値に漸近していることがわかる . さらに, 64以上の結晶粒で構成されたユニットセルを用いた場合に, 解がほぼ完全に収束していることが確認できる . また, 各結晶粒数の場合における0.2%耐力および伸び率10%における公称応力の平均値は, 図7.4のようになる . この図を見ると, 各応力の平均値については少ない結晶粒数の場合においてもほぼ同じ値が得られていることが確認できる .

以上の結果から, 本モデルを用いた解析を行う場合には, ユニットセルにおける結晶粒数を64以上とすれば, 得られる解はほぼ完全に収束すると考えられる . しかしながら, 64結晶粒で構成されたユニットセルを用いてミクロ-マクロ連成解析を行うには, 大きな計算コストを要することが予想される . ユニットセル内部の結晶粒数が49, 36および25においては, 応力値に多少のばらつきはあるものの, 標準偏差は平均値に対して1~2%程度であるため, 本モデルを用いた解析では25以上の結晶粒をユニットセル内に考慮すれば, 初期結晶方位に依存しない初期等方多結晶体の挙動を十分に再現できると考えられる . そこで, 次節以降の解析では, 25の結晶粒からなる正方形多結晶平板をユニットセルとし

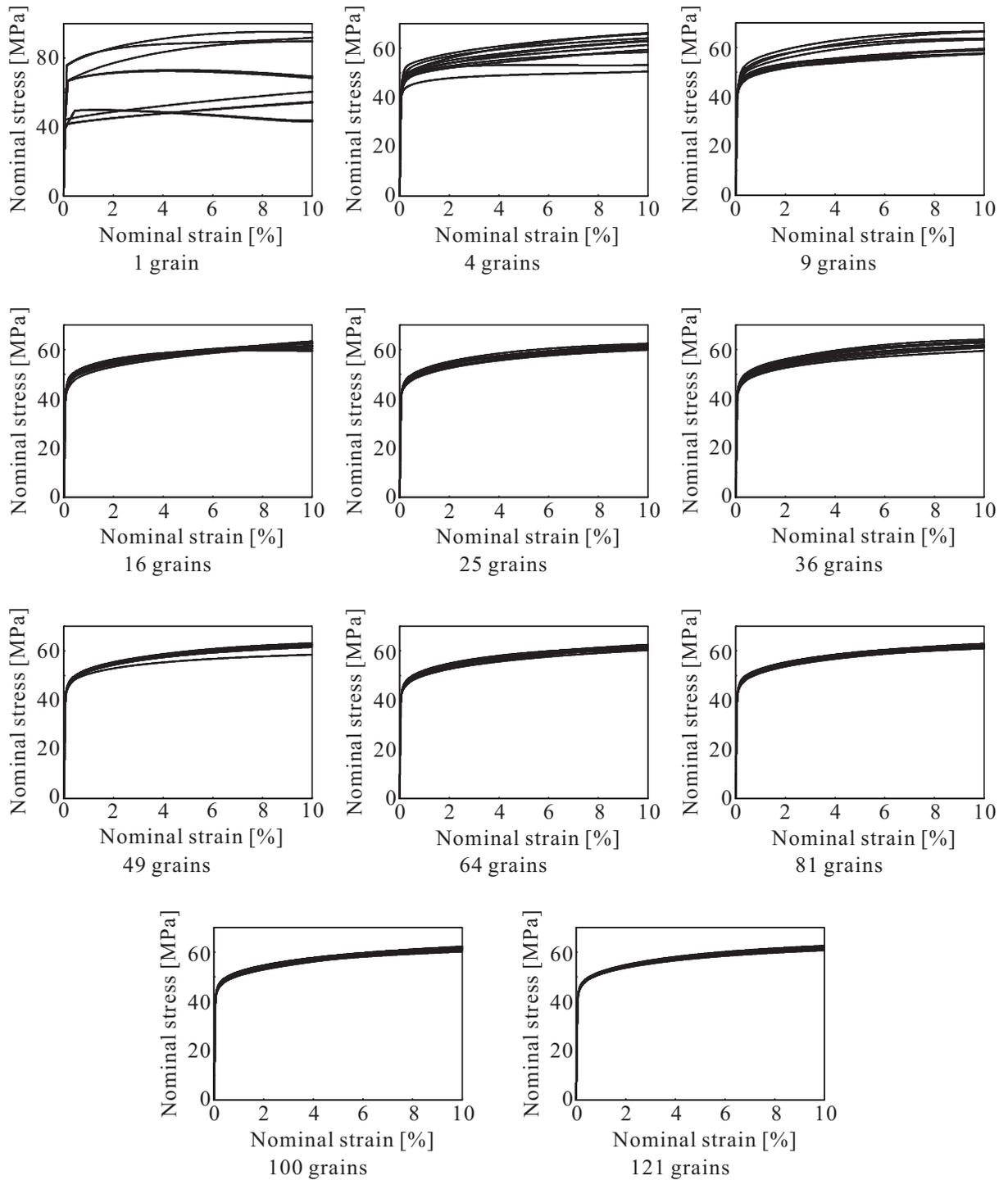


Fig. 7.2 Nominal stress versus nominal strain curves with different numbers of grains

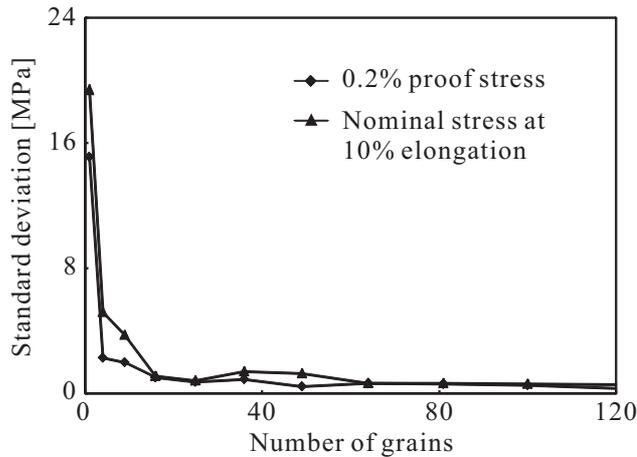


Fig. 7.3 Standard deviation with respect to number of grains

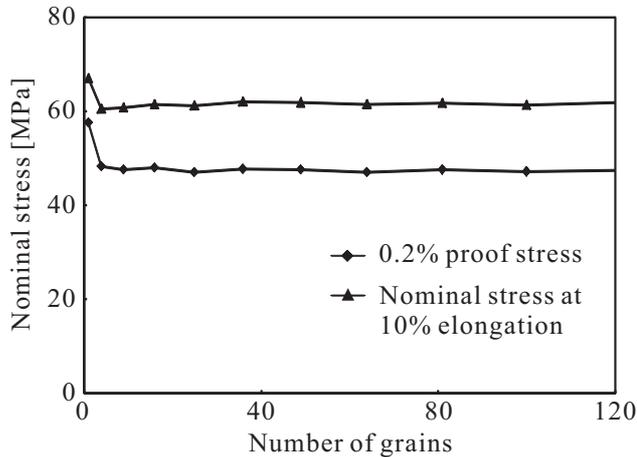


Fig. 7.4 Average of 0.2% proof stress and nominal stress at 10% elongation with respect to number of grains

て用いることとする。

7.2 結晶の硬化係数への転位密度の導入方法に関する検討

一般に，FCC金属材料の加工硬化特性は粒径依存性を示すことが知られている．図1.5からもわかるように，AlのようなFCC金属の異なる粒径に対応する公称応力-公称ひずみ曲線を見ると，結晶粒のサブミクロン化に伴って変形の早い段階で公称応力が減少するようになるが，通常粒金属の場合には比較的大きな伸び率に達しても公称応力は増加し続けることがわかる．一方で，粒径が小さいほど転位運動の障害物となる粒界の材料内を占める割合が大きくなるため，真応力-真ひずみ曲線を用いて評価した場合には，粒径の減少に伴って材料の加工硬化率は増加することが実験的に知られている．超微細粒金属の

力学特性を数値解析的に予測するためには，このような粒径に依存した加工硬化特性の違いを表現することが重要となる．しかしながら4.3.4節で述べたように，結晶の硬化則への各種転位密度の導入方法はこれまでに様々提案されており，それぞれ一長一短があることが指摘されている．そのため，転位密度の情報を考慮した結晶の加工硬化モデルを統一するには至っていないが現状である．そこで，本節では本研究で新しく提案する臨界分解せん断応力モデル[式(4.53)]を用いて，これまでに提案されている結晶の加工硬化モデルへの各種転位密度の導入方法を考慮した場合の解析を行い，それぞれの解析から得られた結果と実現象を比較する．特に，マクロ構造における巨視的な公称応力-公称ひずみ関係，巨視的な相当応力-相当塑性ひずみ関係(真応力-真ひずみ関係)および微視的な結晶粒スケールにおける流れ応力-すべり関係についての比較を行い，本研究で構築したモデルを用いる際に結晶粒の加工硬化特性の粒径依存性を表現するのに最も妥当であると考えられる硬化係数への転位密度の導入方法を決定する．

7.2.1 解析条件

7.1節における解析と同様に，マクロ構造は一様変形するAl平板であると仮定し，平面ひずみ条件における単軸引張を与える[図7.5(a)]．そのため，巨視的境界条件については同様に式(7.1)のように与える．なお，1%引張りに対する時間ステップ数を1000とする．

一方，ミクロ構造におけるユニットセルは，Voronoi分割法によって生成された25個の結晶粒からなる1辺の長さが w の正方形多結晶平板とし，面積がほぼ一様である三角形ひずみ要素を用いて各結晶粒内をDelaunay三角形分割法により要素分割を行う[図7.5(c)，(d)参照]．また，ユニットセルに関しても平面ひずみ問題を考え，境界条件として変位に関する周期境界条件を与える．なお，本解析ではAsaroの平面2重すべりモデルを採用し，各結晶粒の初期方位は図7.5(e)に示すとおりである．ここでは，隣接する結晶粒の方位差が 15° 以上という条件の下で， ϕ_0 [図6.3(c)参照]については $0^\circ \sim 90^\circ$ の範囲において一様に分布する擬似乱数を発生させ， ψ_0 については $\psi_0 = \phi_0 + 60^\circ$ としている．なお， ϕ_0 と ψ_0 の実際の値は，表7.1のようになっている．

7.1節における解析と同様に，簡単のため弾性等方性を仮定する．また，本解析では初期粒径に依存した初期降伏応力の違いも再現した上で，加工硬化特性における粒径依存性を表現できる転位密度依存形の加工硬化モデルに関する検討を行うため，臨界分解せん断応力モデルには本研究で新しく提案する式(4.53)を用いる．さらに，Burgers回路内の転位対密度の表現としてGN不適合度[式(4.2)]を用いる場合およびSS転位密度[式(4.36)]を用いる場合の両方についての解析を行う．GN不適合度により転位対密度を表現する場合には，結晶の硬化係数は式(4.57)のようになり，結晶の硬化係数への転位密度の導入方法については式(4.32)，式(4.33)，式(4.34)および式(4.35)の4通りを考え，それぞれCase 1，Case 2，Case 3およびCase 4とする．一方，SS転位密度により転位対密度を表現する場合には，結晶の硬化係数は式(4.58)のようになり，結晶の硬化係数への転位密度の導入方法については式(4.39)，式(4.40)，式(4.41)および式(4.42)の4通りを考え，それぞれCase 5，Case 6，Case 7およびCase 8とする．

いずれのCaseにおいても，初期平均粒径については $\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$ ， $0.40\mu\text{m}$ ， $0.66\mu\text{m}$ ， $1.2\mu\text{m}$ お

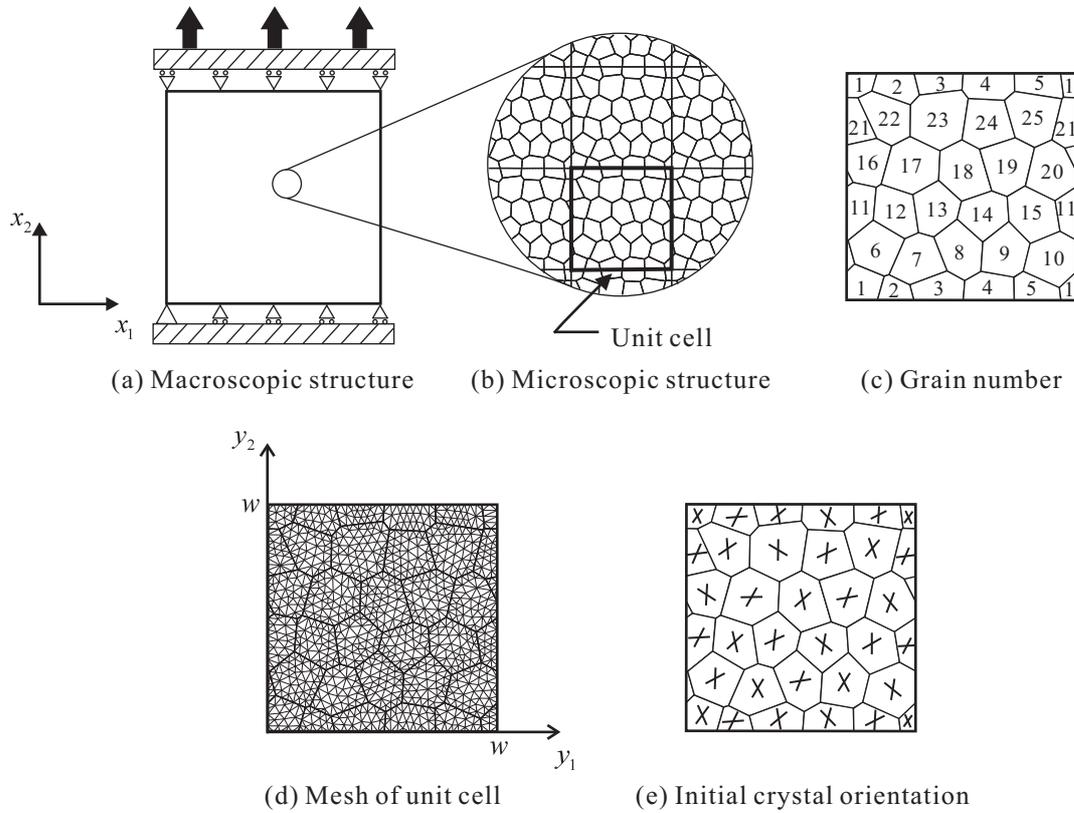


Fig. 7.5 Computational model assuming uniform macroscopic uniaxial tension

Table 7.1 Initial crystal orientations of grains

Grain No.	ϕ_0 [deg.]	ψ_0 [deg.]	Grain No.	ϕ_0 [deg.]	ψ_0 [deg.]	Grain No.	ϕ_0 [deg.]	ψ_0 [deg.]
1	55	114	10	81	141	18	42	102
2	4	64	11	3	63	19	10	70
3	40	100	12	43	103	20	70	130
4	74	134	13	24	84	21	7	67
5	27	87	14	80	140	22	34	94
6	28	88	15	30	90	23	89	149
7	59	119	16	87	147	24	25	85
8	9	69	17	1	61	25	50	110
9	57	117						

Table 7.2 Size of unit cell

$\bar{d}[\mu\text{m}]$	$w[\mu\text{m}]$
0.27	1.2
0.40	1.8
0.66	2.9
1.2	5.3
10	44

よび $10\mu\text{m}$ の 5 通りを考える。ここで、初期平均粒径の違いはユニットセルの 1 辺の長さ w を変化させることで表現する。すなわち、直径が初期平均粒径 \bar{d} である円の面積が 1 つの結晶粒の面積であるとし、 w を次式により算出する。

$$w = \sqrt{n_{gr} \frac{\pi \bar{d}^2}{4}} \quad (n_{gr} = 25) \dots \dots \dots (7.3)$$

ここで、 n_{gr} はユニットセルに含まれる結晶粒数である。そのため、各粒径に対応するユニットセルの 1 辺の長さ w は表 7.2 のようになる。また、本解析では初期平均粒径の違いが材料の加工硬化特性へ及ぼす影響のみを調べるため、転位の枯渇状態は考慮せずに初期状態において結晶粒内には十分転位が含まれていることを想定する。そのため、いずれの粒径の場合においても初期転位密度 $\rho_0^{(\alpha)}$ には臨界転位密度 ρ_k を与え、各粒径に対応する ρ_k の値は式 (4.54) より算出する。したがって、臨界分解せん断応力モデルとしては式 (4.53)₂ のみを考慮することになる。なお、材料定数および数値パラメータについては、以下の値を用いる。

$$\left. \begin{aligned} E &= 60\text{GPa}, & \nu &= 0.30, & \tilde{b} &= 0.26\text{nm}, & y_c &= 1.0\text{nm}, & f &= 1.0 \times 10^2, \\ \dot{\gamma}_0^{(\alpha)} &= 1.0 \times 10^{-3}\text{s}^{-1}, & m &= 5.0 \times 10^{-3}, & \tau_r^{(\alpha)} &= 15\text{MPa}, & a &= 0.20, & l_k &= \bar{d}/3, \\ \kappa &= 3.0 \times 10^2, & c &= 1.0, & c^* &= 50, & \theta^{tan} &= 1 \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (7.4)$$

転位の相互作用行列 $\Omega^{(\alpha\beta)}$ の成分に関しては、7.1 節における解析と同様に全て 1 とし、 $\omega^{(\alpha\beta)}$ については対角成分を零、その他の成分を 1 とする。

7.2.2 解析結果および考察

(A) GN 不適合度により転位対密度を表現する場合の解析結果および考察

図 7.6 は、転位対密度の表現として GN 不適合度を用いた場合の解析から得られた各粒径に対応するマクロ構造の公称応力-公称ひずみ線図であり、図 7.6(a), (b), (c) および (d) はそれぞれ Case 1 [GN 転位密度を $\rho_h^{(\alpha)}$ へのみ導入]、Case 2 [GN 転位密度を $\rho_L^{(\alpha)}$ へのみ導入]、Case 3 [GN 転位密度を $\rho_h^{(\alpha)}$ および $\rho_L^{(\alpha)}$ の両方へ導入] および Case 4 [GN 転位密度を $\rho_h^{(\alpha)}$ および $\rho_L^{(\alpha)}$ のどちらにも反映させない] の結果である。いずれの Case においても、粒径の減少とともに初期

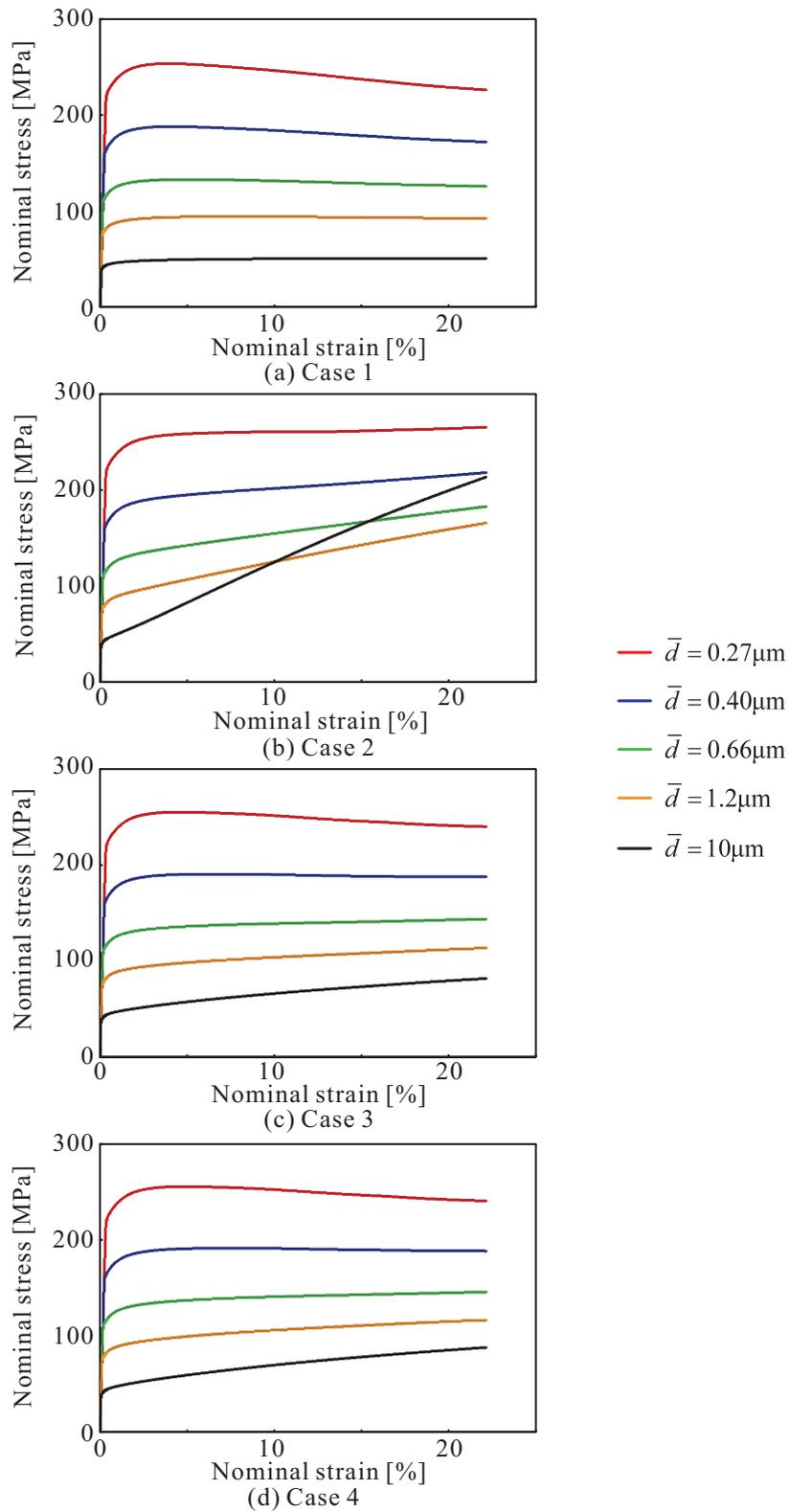


Fig. 7.6 Nominal stress versus nominal strain curves (with $\rho_{\eta}^{(a)}$)

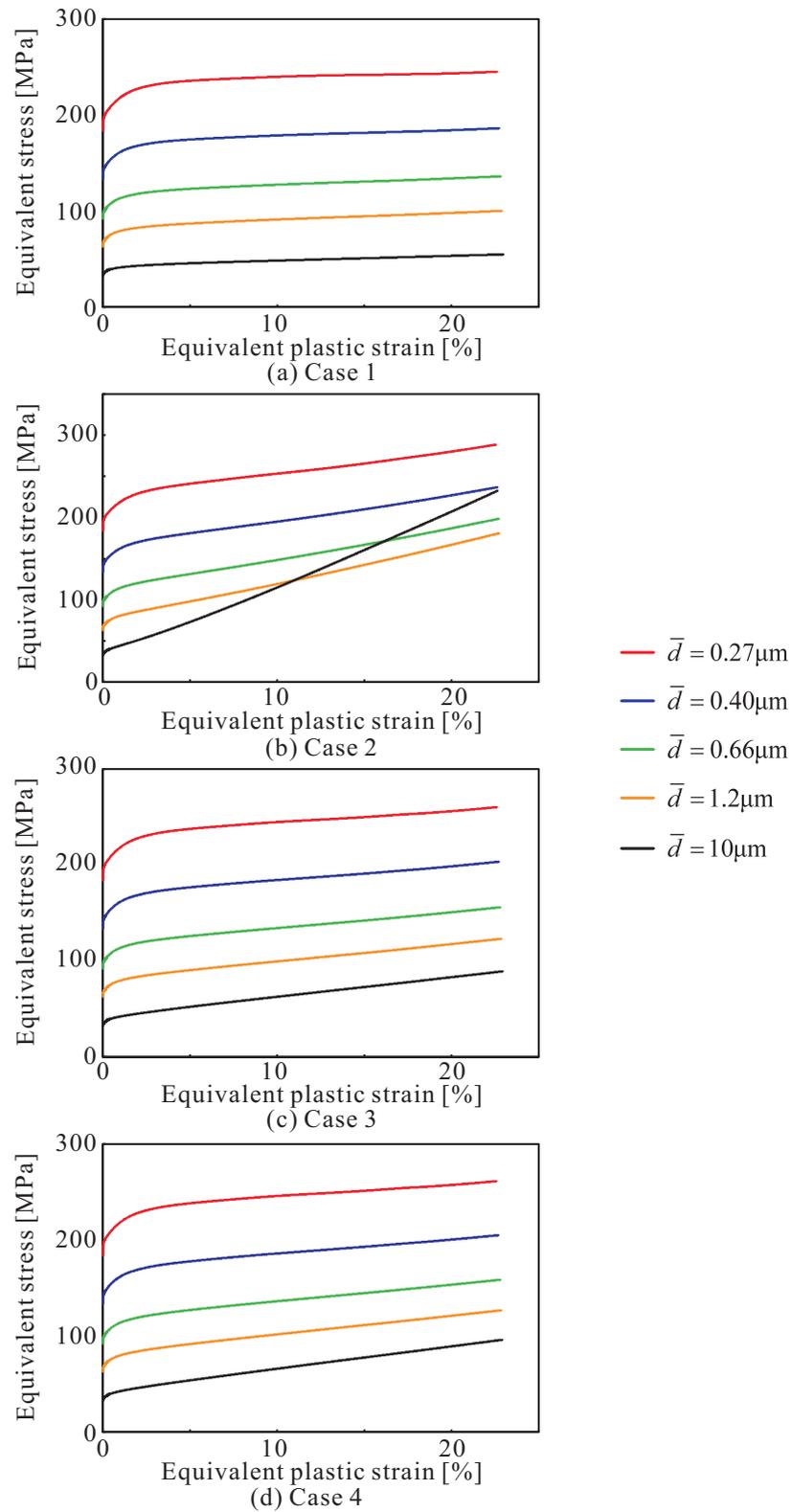


Fig. 7.7 Equivalent stress versus equivalent plastic strain curves (with $\rho_{\eta}^{(\alpha)}$)

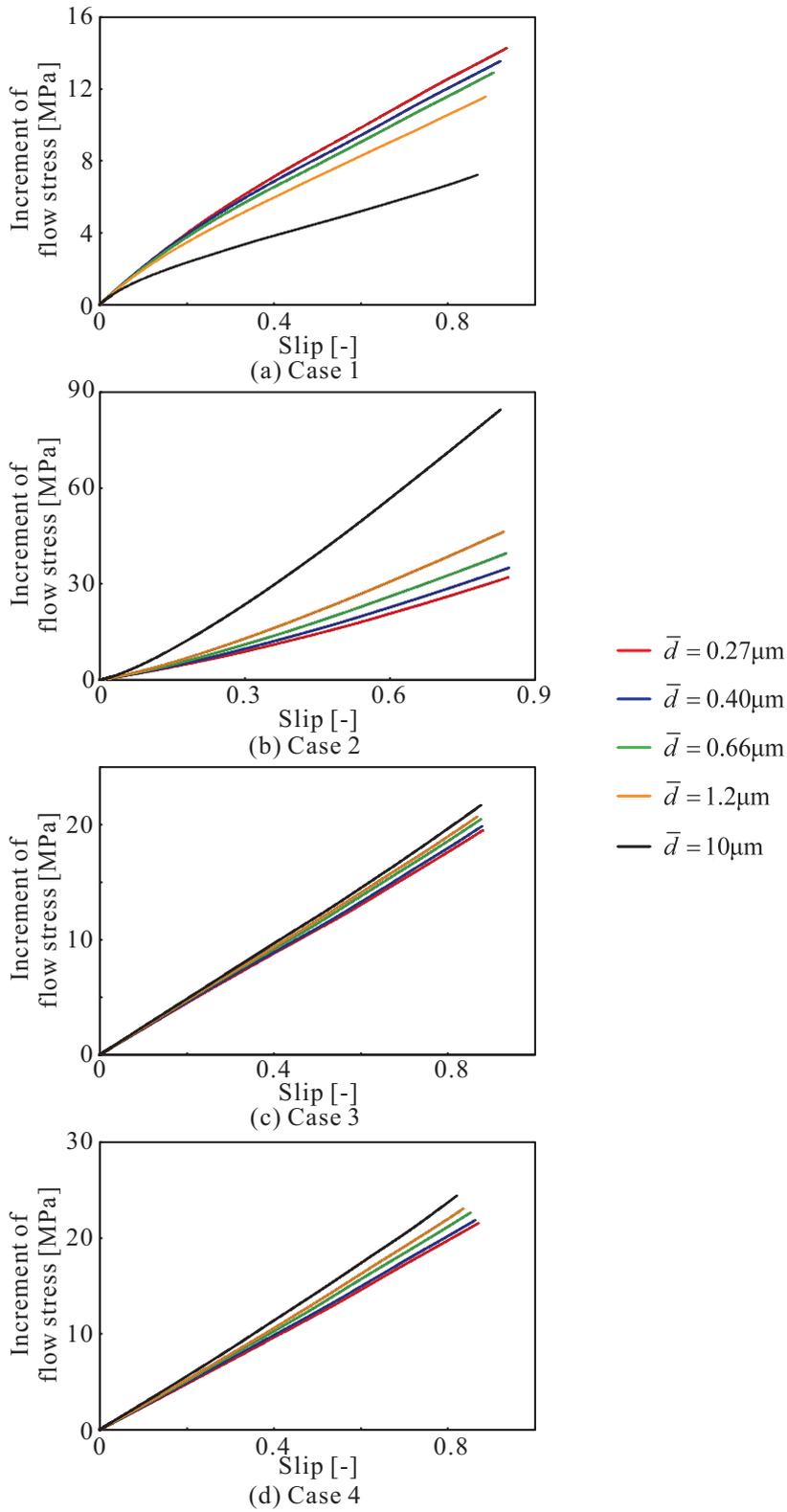


Fig. 7.8 Increment of flow stress versus slip curves (with $\rho_{\eta}^{(a)}$)

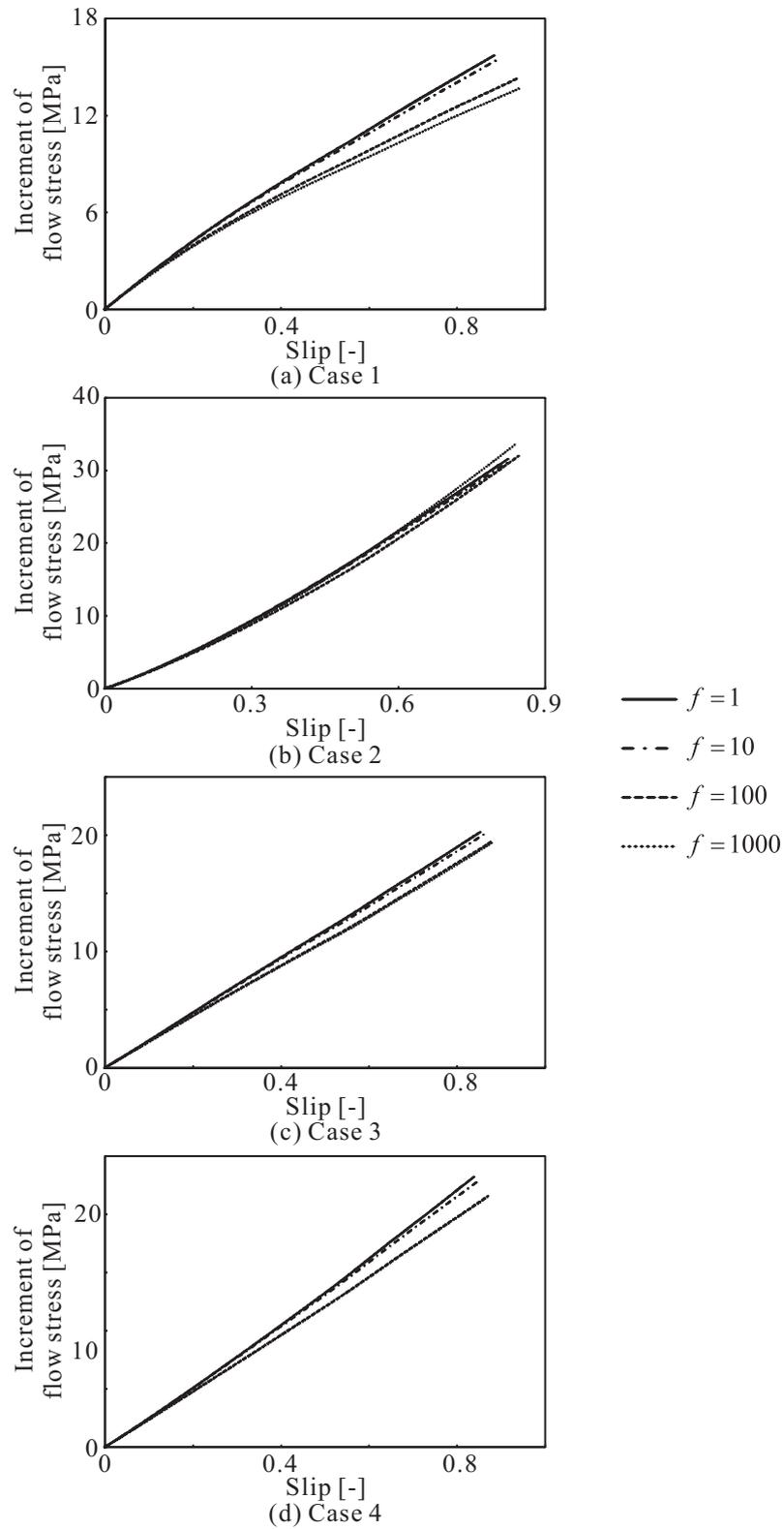


Fig. 7.9 Influence of dynamic recovery on hardening ratio of crystal ($\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$)

降伏応力が増加していることが確認できる。これは、式(4.54)から粒径の減少に伴って ρ_k の値が増加し、式(4.53)₂に起因して各結晶粒の臨界分解せん断応力が高くなるためと考えられる。また、Case 1[図7.6(a)]の場合には、UFGMの曲線において小さいひずみの段階で公称応力が引張強さに達した後に減少しているのに対し、通常粒金属の曲線では公称応力が減少することなく増加し続けており、実現象と同様の傾向を示していることが確認できる。一方、Case 2[図7.6(b)]の場合には、UFGMの場合においても公称応力が増加し続けており、実現象とは異なる傾向を示している。さらに、Case 3[図7.6(c)]およびCase 4[図7.6(d)]の場合には、Case 1の場合と同様の傾向を示していることがわかる。以上の結果から、転位対密度をGN不適合度により表現する場合には、Case 1、Case 3およびCase 4のようにGN転位密度を結晶の硬化係数へ導入することで、変形の早い段階でUFGMに発現する塑性不安定性を再現できることが予想される。

図7.7は、Case 1~4のそれぞれの場合におけるマクロ構造の巨視的な相当応力-相当塑性ひずみ線図であり、これらは巨視的な真応力-真ひずみ関係に対応している。ここで、巨視的な相当応力および相当塑性ひずみは、ミクロ構造におけるそれぞれの値のユニットセルに関する平均をとることで算出している。一般に、金属材料は変形の進行とともに軟化することなく加工硬化し、真応力-真ひずみ曲線によりその特性を評価した場合には、真応力は増加し続けることが知られている。解析結果を見ると、Case 2[図7.7(b)]の場合には通常粒金属の曲線において真応力が異常に増加しているものの、いずれのCaseにおいてもUFGMの曲線では相当応力(真応力)が増加し、材料は加工硬化し続けていることがわかる。これらの結果から、図7.6においてCase 1、Case 3およびCase 4の結果に見られるUFGMの曲線における公称応力の減少は、材料の軟化によるものではないことが確認できる。

図7.8は、図7.5(c)に示すユニットセル内の粒番号18の粒における流れ応力の平均値の増分と全すべりの平均値の関係を表している。粒径の減少とともに転位運動の障害物となる粒界の材料内を占める割合が大きくなるため、結晶の加工硬化率は高くなることが一般的に知られている。Case 1の結果[図7.8(a)]においては、粒径の減少とともに結晶の加工硬化率が増加しているのに対し、Case 2、Case 3およびCase 4の場合[図7.8(b)、(c)および(d)]には実現象と逆の傾向が表れていることが確認できる。図7.9は、式(4.4)における対消滅の空間頻度を表す数値係数 f を1.0、10、 1.0×10^2 および 1.0×10^3 と増加させた場合の、同結晶粒内の流れ応力の平均値の増分と全すべりの平均値の関係の変化を表している。ここでは、いずれのCaseにおいても初期平均粒径が $\bar{d} = 0.27 \mu\text{m}$ の場合の結果のみを表示している。一般に、転位の対消滅に起因する動的回復現象が活発になれば、転位運動の障害物となる転位対が減少するため、塑性変形の素因となる転位運動が起こりやすくなり、結晶の加工硬化率は減少することが知られている。図7.9を見ると、Case 1[図7.9(a)]、Case 3[図7.9(c)]およびCase 4[図7.9(d)]の場合に、実現象と同様の傾向が再現されていることがわかる。

以上の結果から、転位対密度の表現にGN不適合度を用いる場合には、Case 1[式(4.32)]のように結晶の加工硬化に寄与する転位密度 $\rho_h^{(a)}$ にはGN不適合度およびGN転位密度の両方を考慮し、可動転位の運動の障害に寄与する転位密度 $\rho_L^{(a)}$ にはGN不適合度のみを反映させることで、変形の早い段階でUFGMの巨視的な公称応力-公称ひずみ曲線に発現する公称応力の減少、巨視的な真応力-真ひずみ曲線における真応力の増加および粒径の減少に伴う微視的結晶粒の加工硬化率の増加といった実現象と同様の傾向を再現できることがわかる。一方、Case 2[式(4.33)]のように $\rho_h^{(a)}$ にはGN不適合度のみを考慮し、 $\rho_L^{(a)}$ にはGN不適

合度のみならずGN転位密度も反映させる場合には、巨視的な真応力-真ひずみ曲線における真応力の増加は再現できるものの、変形の早い段階でUFGMの巨視的な公称応力-公称ひずみ曲線に発現する公称応力の減少および粒径の減少に伴う微視的結晶粒の加工硬化率の増加を表現することができない。また、Case 3[式(4.34)]およびCase 4[式(4.35)]のように各種転位密度を $\rho_h^{(\alpha)}$ および $\rho_L^{(\alpha)}$ へ導入する場合には、変形の早い段階でUFGMの巨視的な公称応力-公称ひずみ曲線に発現する公称応力の減少および巨視的な真応力-真ひずみ曲線における真応力の増加は再現できるものの、粒径の減少に伴う微視的結晶粒の加工硬化率の増加を表現することができない。

(B) SS転位密度により転位対密度を表現する場合の解析結果および考察

図7.10は、転位対密度の表現としてSS転位密度を用いた場合の解析から得られた各粒径に対応するマクロ構造の公称応力-公称ひずみ線図であり、図7.10(a), (b), (c)および(d)はそれぞれCase 5[GN転位密度を $\rho_h^{(\alpha)}$ へのみ導入]、Case 6[GN転位密度を $\rho_L^{(\alpha)}$ へのみ導入]、Case 7[GN転位密度を $\rho_h^{(\alpha)}$ および $\rho_L^{(\alpha)}$ の両方へ導入]およびCase 8[GN転位密度を $\rho_h^{(\alpha)}$ および $\rho_L^{(\alpha)}$ のどちらにも反映させない]の結果である。いずれのCaseにおいても、UFGMの曲線において小さいひずみの段階で公称応力が引張強さに達した後に減少していることが確認できる。そのため、転位対密度をSS転位密度により表現する場合には、いずれのCaseのようにGN転位密度を結晶の硬化係数へ導入しても、変形の早い段階でUFGMに発現する塑性不安定性を再現できることが予想される。

一方で、Case 5~8のそれぞれの場合におけるマクロ構造の巨視的な相当応力-相当塑性ひずみ(真応力-真ひずみ)線図は図7.11のようになる。この図を見ると、いずれのCaseにおいても粒径が最も小さいUFGMの場合には、相当応力(真応力)は増加し続けることなく減少傾向へと転じ、実現象とは異なる傾向が現われることがわかる。

図7.12は、図7.5(c)に示すユニットセル内の粒番号18の粒における流れ応力の平均値の増分と全すべりの平均値の関係を表している。いずれのCaseにおいても、粒径の減少とともに結晶の加工硬化率も減少してしまうという、実現象とは全く逆の傾向を示していることが確認できる。特に、Case 5[図7.12(a)]およびCase 8[図7.12(d)]の結果においては、 $\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$ および $\bar{d} = 0.40\mu\text{m}$ の場合に結晶の加工硬化がほとんど起こっていないことがわかる。これは、転位の対消滅の効果を表す式(4.58)₂の右辺第2項の影響が大きいため、結晶の硬化係数 $h^{(\alpha\beta)}$ がほぼ零となってしまうことに起因していると考えられる。

以上の結果から、転位対密度の表現にSS転位密度を用いる場合には、変形の早い段階でUFGMの巨視的な公称応力-公称ひずみ曲線に発現する公称応力の減少は再現できるが、巨視的な真応力-真ひずみ曲線における真応力の増加および粒径の減少に伴う微視的結晶粒の加工硬化率の増加については表現できないことがわかる。

(C) 転位密度の情報を考慮した硬化係数モデルの妥当性に関する検討

以上の解析結果から、本研究で新しく提案する臨界分解せん断応力モデル[式(4.53)]を用いる場合には、転位対密度をGN不適合度により表現し、結晶粒内における孤立転位および転位対の密度を全て幾何学量であるGN結晶欠陥により表現する必要がある。また、結

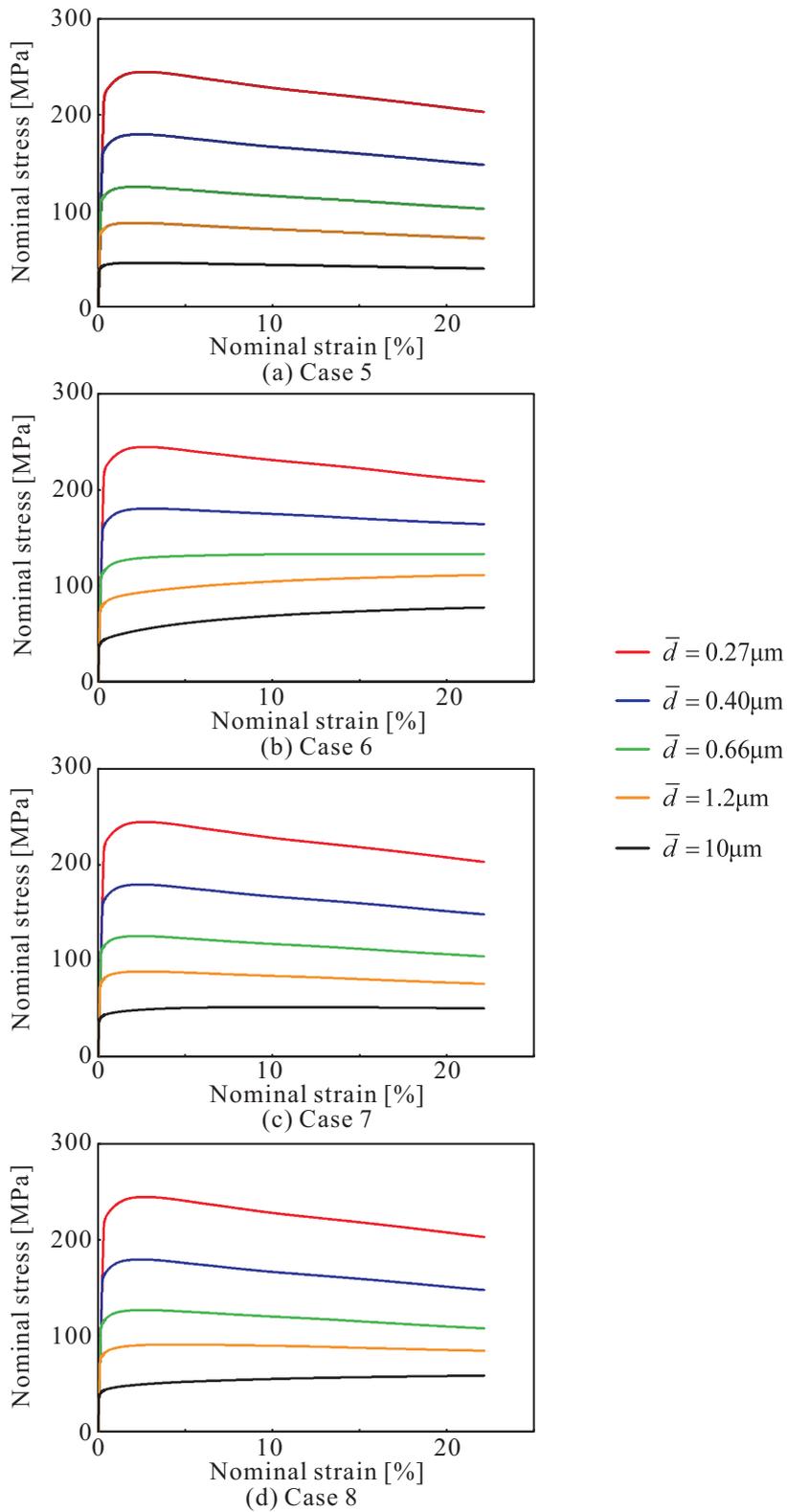


Fig. 7.10 Nominal stress versus nominal strain curves (with $\rho_S^{(a)}$)

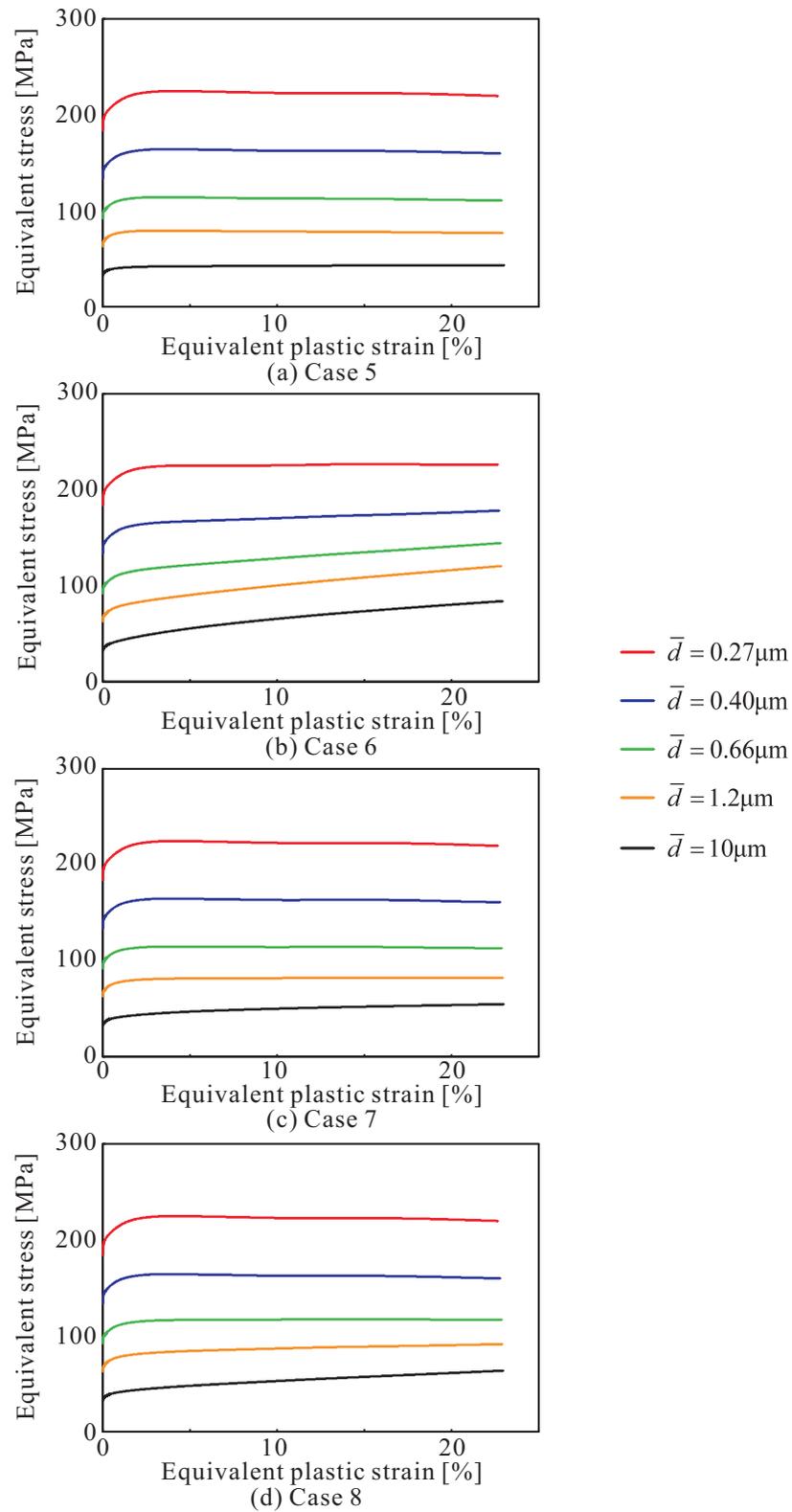


Fig. 7.11 Equivalent stress versus equivalent plastic strain curves (with $\rho_S^{(a)}$)

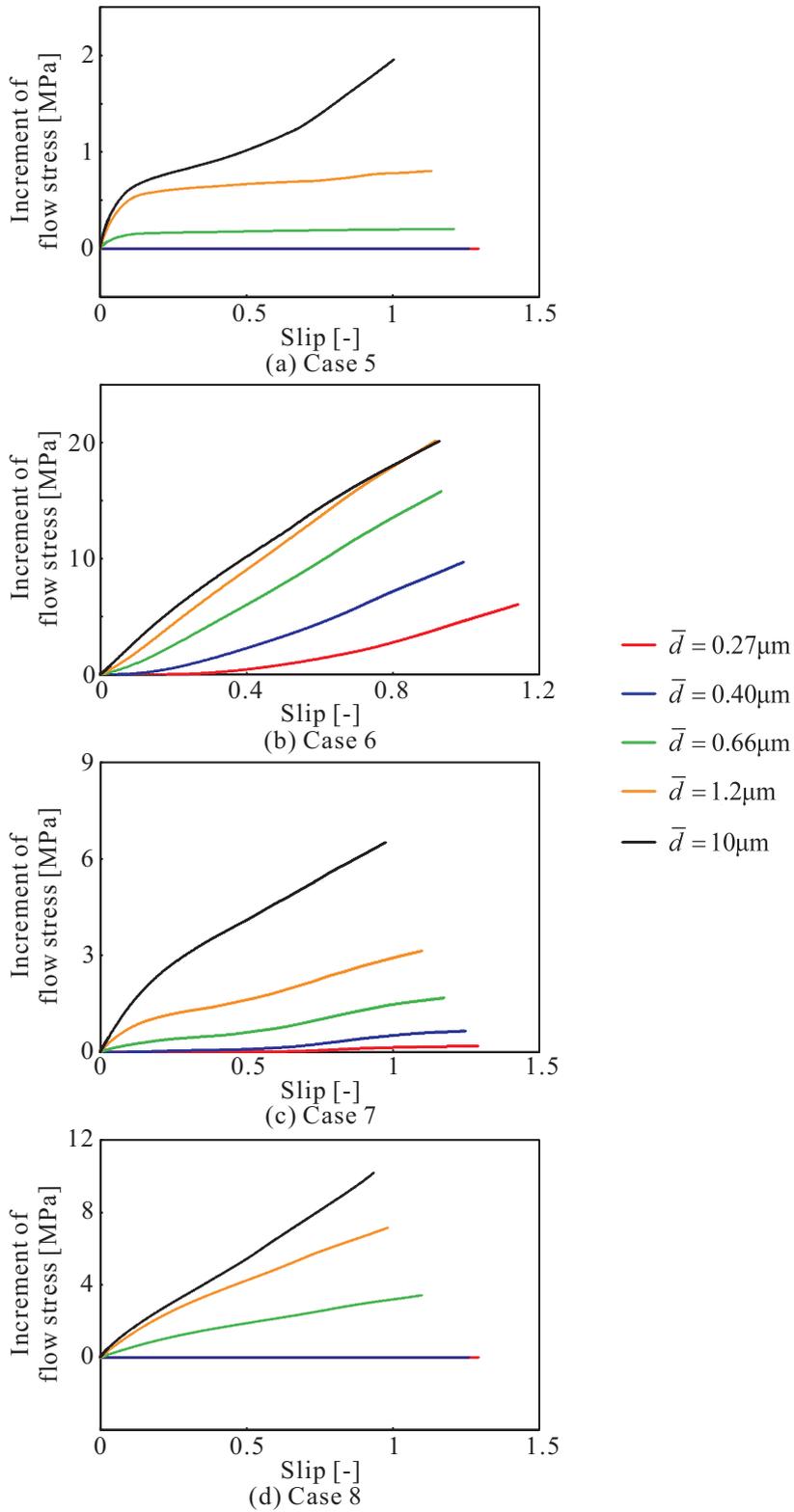


Fig. 7.12 Increment of flow stress versus slip curves (with $\rho_S^{(\alpha)}$)

晶の硬化係数への各種転位密度の導入方法については、式(4.32)(Case 1)のように加工硬化に寄与する転位密度 $\rho_h^{(\alpha)}$ にはGN不適合度およびGN転位密度の両方を考慮し、可動転位の運動の障害に寄与する転位密度 $\rho_L^{(\alpha)}$ にはGN不適合度のみを反映させることで、結晶の加工硬化特性における粒径依存性について実現象と同様の傾向を再現することができる。この場合、粒径の減少とともに増加する傾向にあるGN転位密度が硬化係数[式(4.57)₂]の分母に導入されるため、式上では粒径が小さいほど結晶の加工硬化率は減少することが予想される。しかしながら、幾何学量であるGN不適合度を用いることで、粒径の違いに起因する転位対密度の変化も表現されるため、可動転位の運動の障害に寄与する転位密度 $\rho_L^{(\alpha)}$ の値も粒径に依存し、結果として $\rho_L^{(\alpha)}$ と結晶の加工硬化に寄与する転位密度 $\rho_h^{(\alpha)}$ の比で決まる結晶の硬化係数 $h^{(\alpha\beta)}$ の値が粒径の減少に伴って増加する。

GN不適合度は潜在硬化に、GN転位密度は自己硬化に寄与する転位密度であると考えることができる[4.3.4節参照]。そのため、結晶の加工硬化に寄与する転位密度 $\rho_h^{(\alpha)}$ へGN不適合度およびGN転位密度の両方を導入することは、潜在硬化のみならず自己硬化の影響も考慮することに対応する。一方、式(4.29)で表現される転位の平均飛行距離 $L^{(\alpha)}$ は、可動転位が2次すべり系に存在する林立転位を数十本切った後に不動化するという現象に基づいたモデルとなっている。すなわち、ここで考えている $L^{(\alpha)}$ のオーダーは、短範囲障害物に起因する短距離オーダーであると考えられ、可動転位の運動の障害に寄与する転位密度 $\rho_L^{(\alpha)}$ も短範囲オーダーに属する転位密度であるといえる。しかしながら、GN転位密度は短範囲障害物を乗り越えて比較的長距離飛行した後に、粒界など自己すべり系に存在する障害物に堆積する転位の密度を表しているため、長範囲オーダーに属する転位密度となる。そのため、GN転位が可動転位の運動を障害する林立転位の役割を果たすとは考えにくく、 $\rho_L^{(\alpha)}$ については短範囲オーダーに属するGN不適合度のみを考慮することは物理的にも妥当であると考えられる。そのため、次節以降の解析では転位対密度をGN不適合度を用いて表現するとともに、式(4.32)のように加工硬化に寄与する転位密度 $\rho_h^{(\alpha)}$ にはGN不適合度およびGN転位密度の両方を考慮し、可動転位の運動の障害に寄与する転位密度 $\rho_L^{(\alpha)}$ にはGN不適合度のみを反映させることとする。

図7.13は、図7.6(a)における $\bar{d} = 10\mu\text{m}$ (通常粒金属)および $\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$ (UFGM)の曲線の低ひず

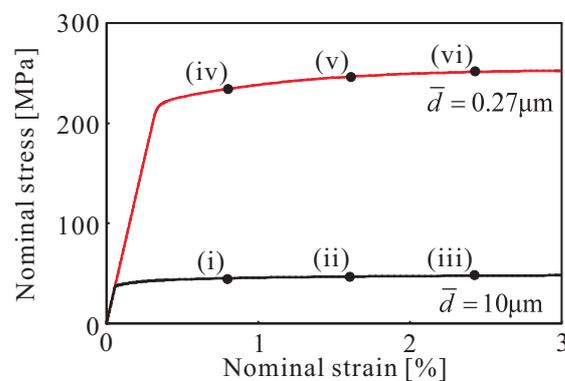


Fig. 7.13 Enlarged view of nominal stress versus nominal strain curves of Fig. 7.6(a) in low strain range (Case 1)

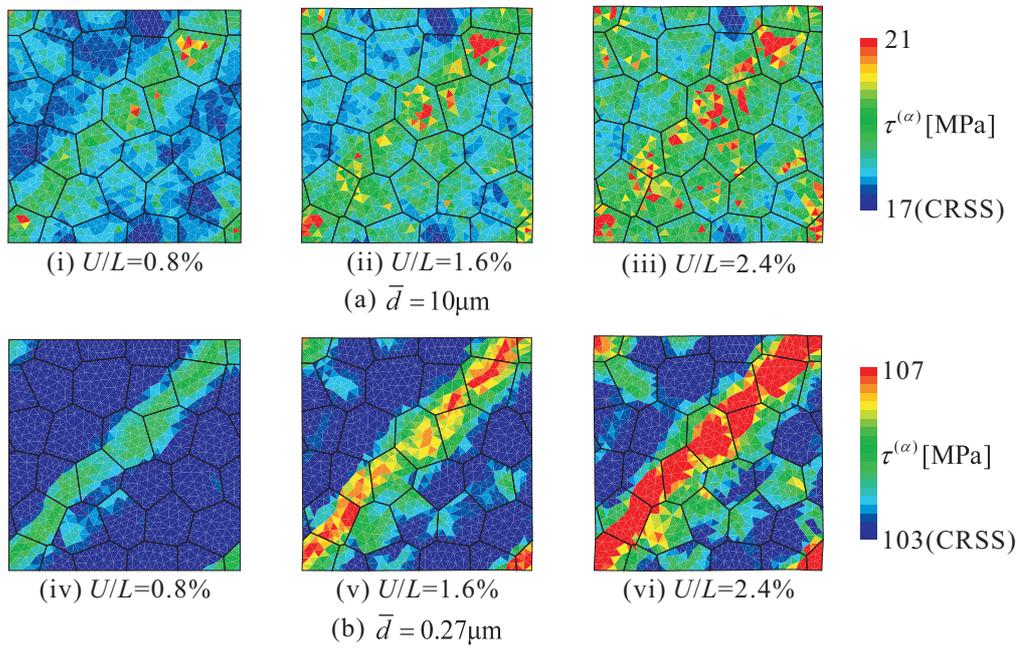


Fig. 7.14 Distributions of resolved shear stress acting on primary slip system (Case 1)

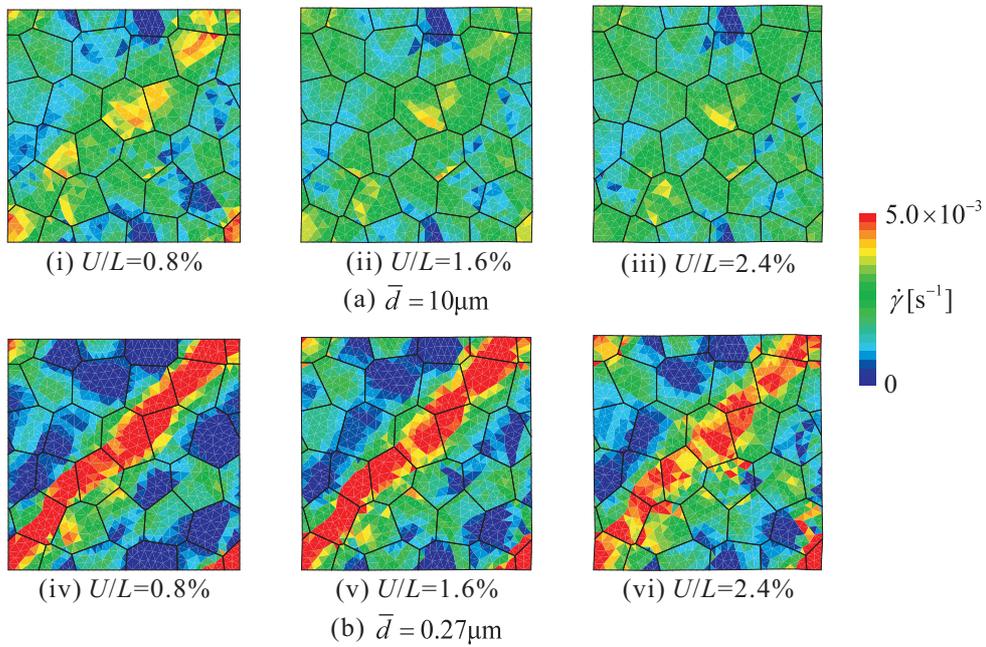


Fig. 7.15 Distributions of total slip rate in unit cells (Case 1)

み域を拡大したものであり，図 7.14 および図 7.15 はそれぞれ図 7.13 における点 (i) ~ (vi) に対応するユニットセルにおける主すべり系に作用する分解せん断応力分布および全すべり速度分布である．なお，図 7.14 においてはレンジの最小値を結晶の臨界分解せん断応力 (Critical Resolved Shear Stress : CRSS) の値としている．通常粒金属である $\bar{d} = 10\mu\text{m}$ の場合には，各結晶の CRSS が低いために図 7.14(a) のようにユニットセルにおけるほぼ全ての粒が塑性状態となっており，分解せん断応力はほぼ一様に分布している．そのため，図 7.15(a) のようにいずれの粒においても微視的なすべり変形が同程度起こっており，材料は一様変形しやすく高い延性を有すると考えられる．一方，UFGM である $\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$ の場合の結果を見ると，各結晶の CRSS が非常に高いために，図 7.14(b) のように塑性域に達せずに弾性挙動を示す粒が複数存在している．そのため，図 7.15(b) のようにすべり変形も塑性域にある粒に集中していることがわかる．また，大きなすべり変形が起こっている粒に分解せん断応力が集中していることも確認できる．したがって，UFGM の場合には構造上せん断応力が作用しやすい領域ですべり変形が集中的に発生する一方で，せん断応力が作用しにくい粒では，分解せん断応力値が CRSS に到達しにくくなり，結晶粒の微視的降伏が進行しにくくなると考えられる．これに起因して，材料は一様変形しにくくなるために，図 7.6(a) のように変形の早い段階で公称応力が減少するようになると考えられる．このような現象が，結果として粒径のサブミクロン化に伴う急激な延性の低下へとつながることが予想される．

7.3 FCC 微細粒焼鈍材に対するトリプルスケール転位-結晶塑性解析

本節では，FCC 微細粒焼鈍材を想定した試験片に対するトリプルスケール転位-結晶塑性解析を実施する．ここでは，マクロ場の変形の不均一性および結晶粒内における転位の枯渇状態も考慮し，本研究において新しく提案する臨界分解せん断応力モデルを用いることで，結晶粒微細化に伴う初期降伏応力の増加，急激な延性の低下，降伏点降下現象の発現および Lüders 帯の伝ぱといった FCC 微細粒焼鈍材に特有の現象を定性的に再現することを試みる．

7.3.1 解析条件

マクロな解析対象となる試験片は，図 7.16(a) に示すような長さ $2L$ ，幅 $2(W + \Delta W)$ ，アスペクト比 $L/W = 3$ の長方形 Al 平板とし，平面ひずみ問題を考える．なお，試験片の寸法は $L = 3.0\text{m}$ および $W = 1.0\text{m}$ とする．ここで， $2W$ は初期平均幅および $2\Delta W$ は材料の幾何学的不均一性を表す形状初期不整である． ΔW には，Tvergaard ら⁽¹⁰²⁾ による次式を採用する．

$$\Delta W = W \left\{ -W_1 \cos\left(\frac{\pi x_2}{L}\right) + W_2 \cos\left(\frac{m_w \pi x_2}{L}\right) \right\} \dots \dots \dots (7.5)$$

ここで， x_2 は試験片の長手方向座標， W_1 および W_2 は不整振率であり， m_w は波数である．結晶塑性論を用いた多結晶解析を行う場合には，式 (7.5) の右辺第 2 項 (高周波成分) の有無は試験片に発現するせん断帯のモードに影響を与えないことが Kuroda-Tvergaard⁽¹⁰⁰⁾ によって示されている．そこで，本解析では簡単化のため $W_1 = 5.0 \times 10^{-3}$ および $W_2 = 0$ とする．マ

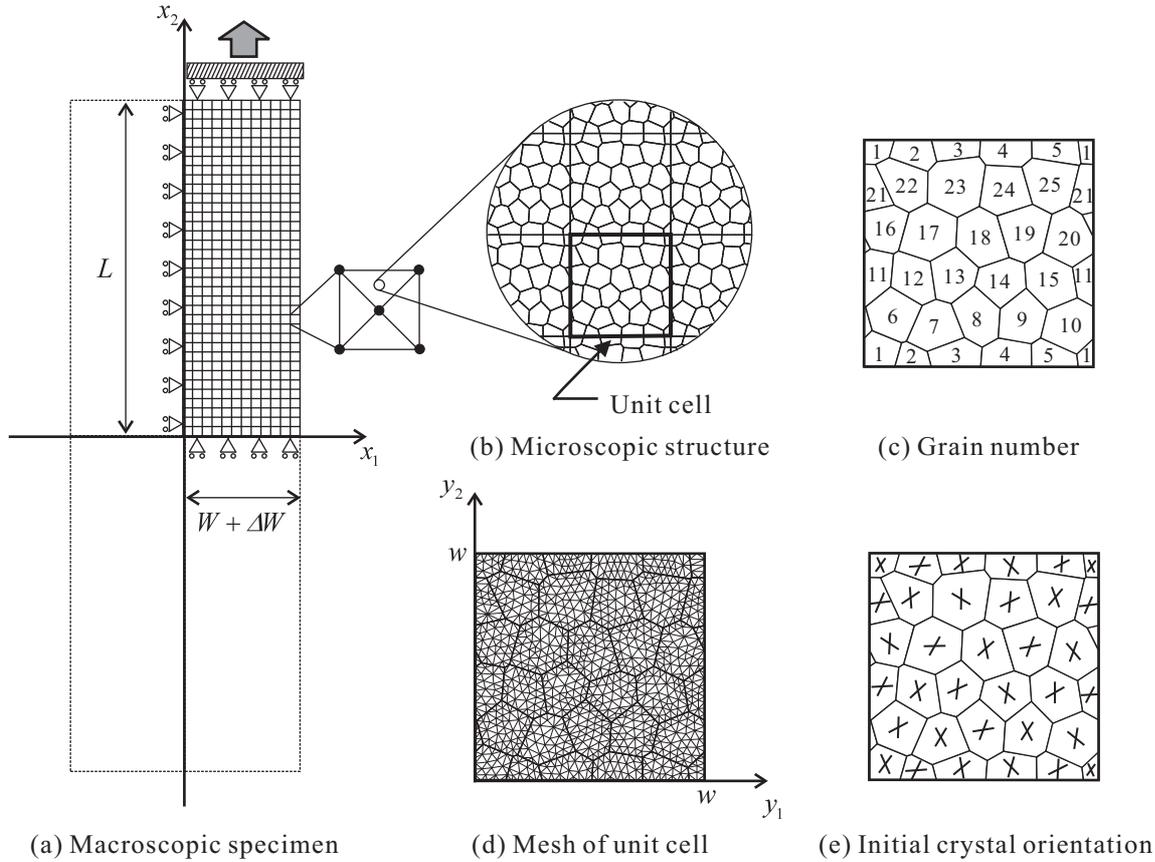


Fig. 7.16 Computational model for triple-scale dislocation-crystal plasticity analysis (Asaro's 2 slip model)

ク口構造の変形の対称性を仮定して，モデルの1/4のみを解析することとし，端面に x_2 軸方向の強制引張変位 U を一定速度 $\dot{U}/L = 1.0 \times 10^{-3} s^{-1}$ で与える．なお，本解析では簡単化のため，接線係数法を適用した静的陽解法を採用する．この場合，局所的な力の釣合いが崩れる恐れがあるが，本解析では1%引張りに対する時間ステップ数を1000と十分に細かくとっている．6.3.3節で述べたとおり，CT要素を用いることでロッキング現象や擬似モードの発生を抑えることができるため，ここで用いる要素は図7.16(a)のようにマクロな解析対象を幅方向12分割，長手方向36分割して得られる正方形要素をさらにその対角線で分割してできる1728個のCT要素とする．また，本解析では単軸引張試験を想定し，巨視的境界条件についてはマクロ変位 u^0 および荷重 T^l を用いて以下のように規定する．

$$\left. \begin{aligned}
 u_1^0 = u_2^0 = 0 & \quad \text{at } x_1 = x_2 = 0 \\
 u_2^0 = 0, \quad T_1^l = 0 & \quad \text{at } x_1 \neq 0, \quad x_2 = 0 \\
 u_1^0 = 0, \quad T_2^l = 0 & \quad \text{at } x_1 = 0, \quad 0 < x_2 < L \\
 T_1^l = T_2^l = 0 & \quad \text{at } x_1 = W + \Delta W, \quad 0 < x_2 < L \\
 u_2^0 = U, \quad T_1^l = 0 & \quad \text{at } x_2 = L
 \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (7.6)$$

Table 7.3 Initial mean grain size, initial dislocation density and size of unit cell

$\bar{d}[\mu\text{m}]$	$\rho_0^{(\alpha)}[\mu\text{m}^{-2}]$	$w[\mu\text{m}]$
0.40	5.0	1.8
0.66	3.0	2.9
1.2	1.0	5.3
5.4	0.50	24

ここで, x_2 方向の反力 T_r は次式により算出する.

$$T_r = \frac{1}{W + \Delta W} \int_0^{W + \Delta W} T_2^l(x_1, L) dx_1 \quad (7.7)$$

一方, ミクロ構造におけるユニットセルについては, 7.2 節における解析と同様のものを用いる. また, ユニットセルに関しても平面ひずみ問題を考え, 境界条件として変位に関する周期境界条件を与える. ここでも Asaro の平面 2 重すべりモデルを採用し, 各結晶粒の初期方位についても同様に表 7.1 にある値を用いる. このユニットセルをマクロ構造の各積分点に割り当て, ミクロ-マクロ連成解析を行う. なお, 簡単のため弾性等方性を仮定し, 結晶粒内の転位の枯渇状態に対応できるように, 臨界分解せん断応力モデルには式 (4.53) を用いる. 材料定数および数値パラメータについては, 以下の値を用いる.

$$\left. \begin{array}{llll} E = 60\text{GPa}, & \nu = 0.30, & \bar{b} = 0.26\text{nm}, & y_c = 1.0\text{nm}, \\ f = 1.0 \times 10^2, & \dot{\gamma}_0^{(\alpha)} = 1.0 \times 10^{-3}\text{s}^{-1}, & m = 5.0 \times 10^{-3}, & \tau_r^{(\alpha)} = 1\text{MPa}, \\ a = 0.20, & c = 1.0, & c^* = 50, & \theta^{an} = 1 \end{array} \right\} \dots\dots\dots (7.8)$$

転位の相互作用行列 $\Omega^{(\alpha\beta)}$ の成分に関しては, 7.2 節における解析と同様に全て 1 とし, $\omega^{(\alpha\beta)}$ については対角成分を零, その他の成分を 1 とする. 初期平均粒径および初期転位密度に関しては, 微細粒焼鈍材を想定して表 7.3 にある値を用いる. 初期平均粒径に関しては Tsuji ら⁽¹¹⁾ の実験で得られた微細粒焼鈍材の値を用い, 初期転位密度については焼鈍による粒径の増加に伴って減少するように値を決定している. なお, 各粒径に対応するユニットセルの 1 辺の長さ w は表 7.3 に示す値となる. また, 本解析では簡単化のため, 優先的に活動できる粒内転位源の最小長さ l_k を定数として扱い, 粒径が最も小さい粒内にも存在できるように $l_k = 0.10\mu\text{m}$ とする. そのため, 各粒径に対応する臨界転位密度 ρ_k および粒界転位源の活動に必要なせん断応力 g_k の値は式 (4.52) および式 (4.55) を用いて算出している. その際に必要となるその他の数値係数 κ , k_0 および λ については, Tsuji ら⁽¹¹⁾ の実験結果 [図 1.5] の傾向を定性的に再現するために, それぞれ $\kappa = 4.0 \times 10^2$, $k_0 = 1.0\text{MPa}$ および $\lambda = 0.13 (= 1/7.5)$ と決定している.

7.3.2 解析結果および考察

本解析では Xeon 3.2GHz の CPU が 8 コア 搭載されたワークステーションを使用し，マクロ構造の各積分点におけるユニットセル計算を行う際に OpenMP による並列化処理 (スレッド数は 8) を実施する．上記の計算環境において，試験片の 1% 引張り (増分ステップ数は 1000) に要する計算時間は 18660 秒 (約 5.2 時間) となる．図 7.17 は，単軸引張試験を想定した本解析から得られた，各粒径に対応するマクロな試験片の公称応力-公称ひずみ線図である．この図を見ると，粒径の減少に伴う初期降伏の増加および粒径のサブミクロン化に伴う急激な延性の低下が再現されていることがわかる．降伏応力の増加は，式 (4.52) および式 (4.55) から粒径の減少に伴って ρ_k および g_k の値が増加し，式 (4.53) に起因して各結晶粒の臨界分解せん断応力が高くなるためと考えられる．さらに $\bar{d}=0.40, 0.66, 1.2\mu\text{m}$ の曲線に注目すると，降伏点降下現象が再現されていることが確認できる．これは，式 (4.53) を用いることで，図 7.18(a) のように変形の初期では転位の枯渇に起因して臨界分解せん断応力が高くなり，その後粒内の転位密度が臨界転位密度 ρ_k に達することで流れ応力が減少するためである．一方， $\bar{d}=5.4\mu\text{m}$ の場合には降伏点降下現象が発現しておらず，通常粒金属の場合と同様の曲線を描いている．この場合，粒内の初期転位密度が臨界転位密度 ρ_k を超えており，図 7.18(b) のように初期状態においても通常の応力値ですべり変形が進行できるためと考えられる．焼鈍を施すことで転位密度を十分に低下させたとしても，粒径がある程度大きい場合には結晶粒内に通常の塑性変形に必要な転位が含まれていると考えられるために，降伏点降下現象は発生しないことが予想される．また，本解析から得られた各粒径における初期降伏応力の値は，実験結果⁽¹¹⁾[図 1.5 参照]と比較すると全体的に低くなっている．これは，FCC 結晶の全 12 すべり系を考慮せずに，2 つの活動すべり系のみを考慮した Asaro の平面 2 重すべりモデルを用いているために，粒内に蓄積する全転位密度の値やすべり系間の相互作用が過小評価されていることに起因していると考えられる．なお，

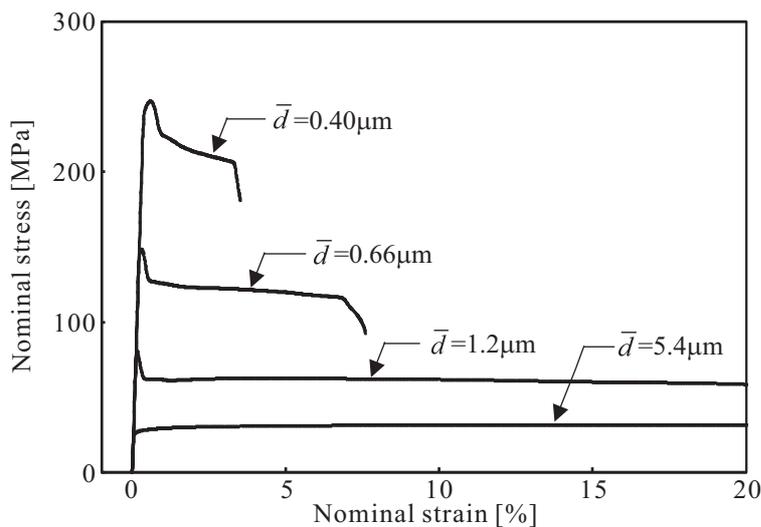


Fig. 7.17 Nominal stress versus nominal strain curves of annealed fine-grained metals with different initial grain sizes

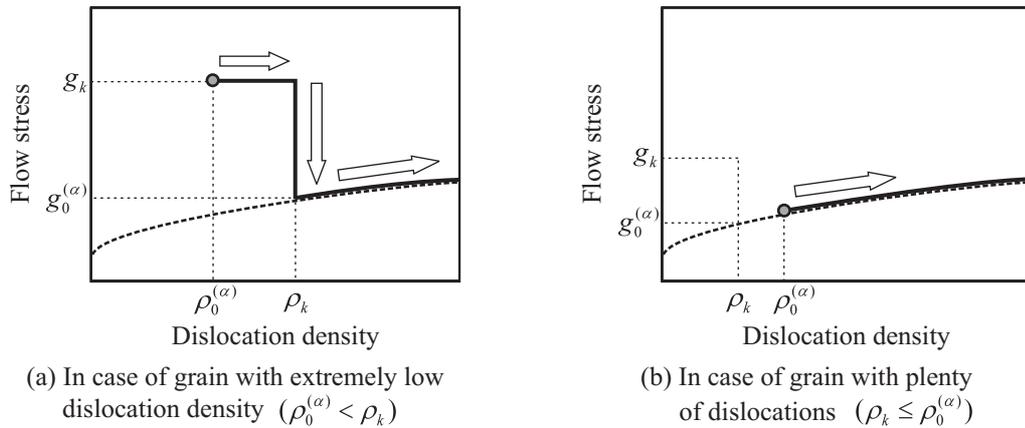


Fig. 7.18 Flow stress versus dislocation density

FCC 結晶の 12 すべり系を全て考慮した場合の擬似 3 次元解析の結果および考察・検討については後述する。

図 7.19 は、図 7.17 における $\bar{d} = 1.2\mu\text{m}$ の曲線の伸び率 3% までを拡大した図であり、図 7.20 は図 7.19 における点 (i) ~ (iv) に対応する試験片内の相当塑性ひずみ速度分布である。図 7.20(i) ~ (iii) を見ると、降伏点降下が起きた後に塑性変形の局所化領域が引張方向へ伝ばしていることが確認できる。この領域が試験片全体を伝ばし終わると、図 7.20(iv) のように相当塑性ひずみ速度は試験片内においてほぼ一様となり、その後通常粒金属の場合と同様にほぼ均一に塑性変形が進行するようになる。この現象は、焼鈍された炭素鋼のような BCC 焼鈍材において観察される Lüders 帯の伝ばと酷似した現象である。

図 7.21 は、図 7.17 における $\bar{d} = 0.66\mu\text{m}$ の曲線を拡大した図であり、図 7.22 および図 7.23 は図 7.21 における点 (i) ~ (vi) に対応する試験片内の相当塑性ひずみ速度分布である。図 7.22 を見ると、 $\bar{d} = 1.2\mu\text{m}$ の場合と同様に降伏点降下が起きた後に塑性変形の局所化領域が引張方向へ伝ばしていることが確認できる。しかしながら $\bar{d} = 1.2\mu\text{m}$ の場合とは異なり、この領域は試験片全域には至らず、途中で止まってしまう。このように、粒径の減少に伴って試

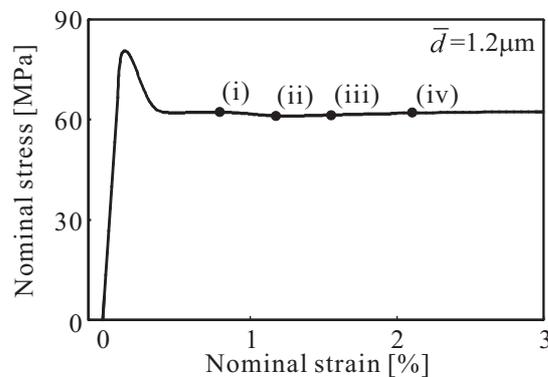


Fig. 7.19 Enlarged view of nominal stress versus nominal strain curve of $\bar{d} = 1.2\mu\text{m}$ in Fig. 7.17 when elongation percentage is below 3%

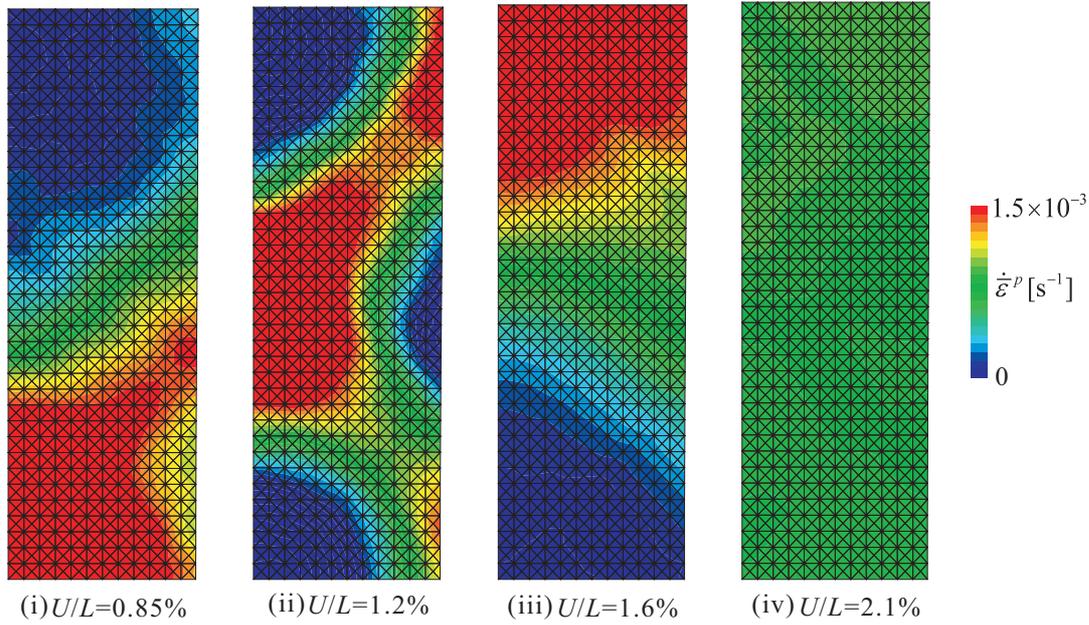


Fig. 7.20 Distributions of equivalent plastic strain rate in macroscopic specimen (Propagation of Lüders band, $\bar{d} = 1.2\mu\text{m}$)

試験片内を Lüders 帯が伝ばする領域が狭くなるという傾向は実験的にも観察されている⁽¹³⁾。その後、図7.23のように不均一変形が進行し、材料の一部において弾性除荷が発生した後に塑性変形の局所化が起こっていることがわかる。なお、本研究で用いる弾粘塑性形の構成式には、厳密な意味での弾性除荷は存在しないが、対象とする現象のひずみ速度に対して相当塑性ひずみ速度が十分に小さい時、これを近似的に弾性除荷とみなすことができる。また、図7.24は図7.21における点(vi)に対応する試験片内の相当塑性ひずみ分布であり、同図より試験片を横断するせん断帯が形成されていることが確認できる。このせん断帯の発現により、試験片は同領域より破断に至ることが予想される。

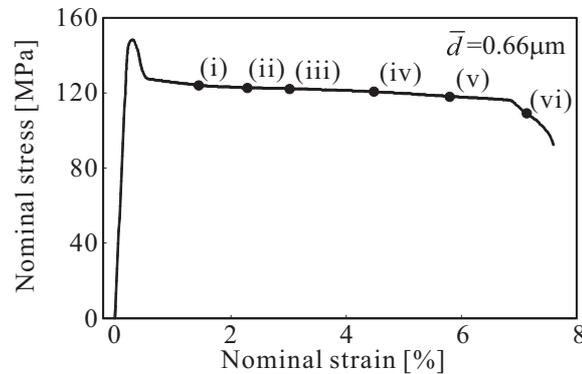


Fig. 7.21 Enlarged view of nominal stress versus nominal strain curve of $\bar{d} = 0.66\mu\text{m}$ in Fig. 7.17

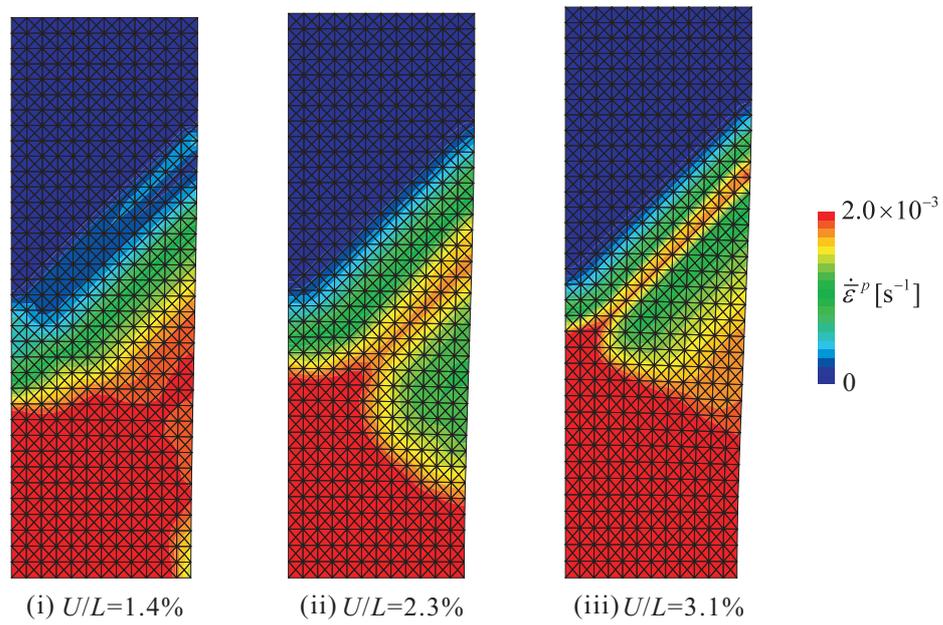


Fig. 7.22 Distributions of equivalent plastic strain rate in macroscopic specimen (Propagation of Lüders band, $\bar{d} = 0.66\mu\text{m}$)

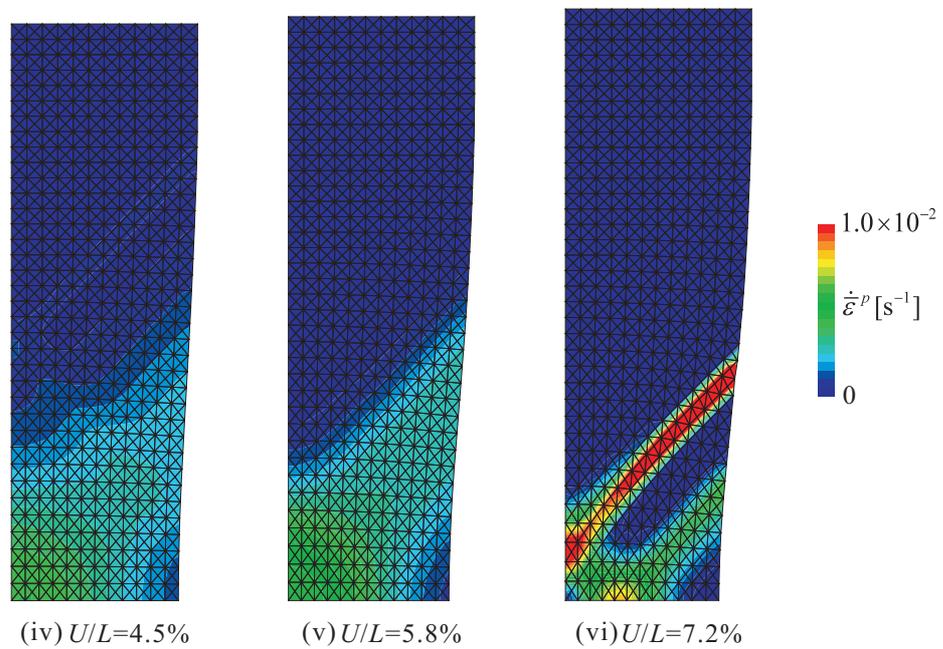


Fig. 7.23 Distributions of equivalent plastic strain rate in macroscopic specimen (Plastic localization, $\bar{d} = 0.66\mu\text{m}$)

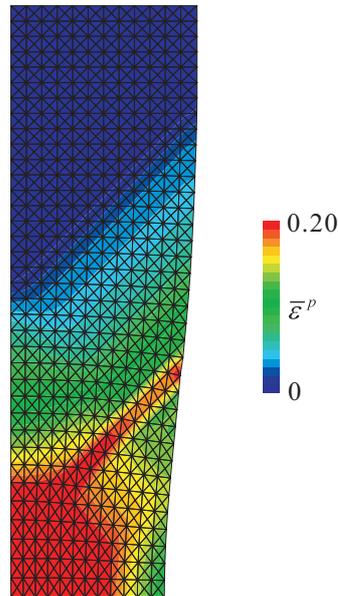


Fig. 7.24 Distribution of equivalent plastic strain in macroscopic specimen ($\bar{d} = 0.66\mu\text{m}$, $U/L = 7.2\%$)

図 7.25 は、図 7.17 における $\bar{d} = 0.40\mu\text{m}$ の曲線を拡大した図であり、図 7.26 は図 7.25 における点 (i)~(iv) に対応する試験片内の相当塑性ひずみ速度分布である。図 7.26 を見ると、 $\bar{d} = 0.40\mu\text{m}$ の場合には Lüders 帯の伝ばは見られず、降伏点降下が発現した直後に材料は塑性不安定状態に陥り、塑性変形が局所化していることがわかる。また、図 7.27 は図 7.25 における点 (iv) に対応する試験片内の相当塑性ひずみ分布であり、同図より試験片を横断するせん断帯が形成されていることが確認できるため、試験片は同領域より破断に至ることが予想される。

以上の結果から、初期平均粒径が $\bar{d}=0.40, 0.66, 1.2\mu\text{m}$ である FCC 微細粒焼鈍材の場合に

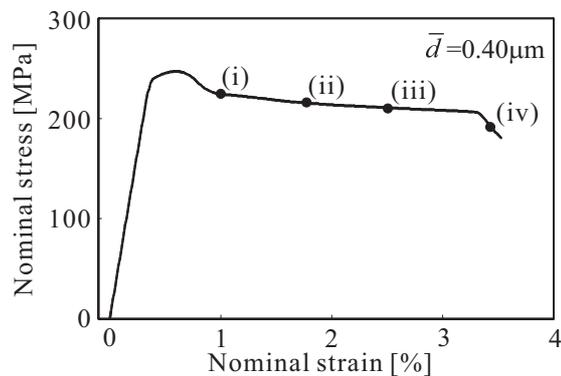


Fig. 7.25 Enlarged view of nominal stress versus nominal strain curve of $\bar{d} = 0.40\mu\text{m}$ in Fig. 7.17

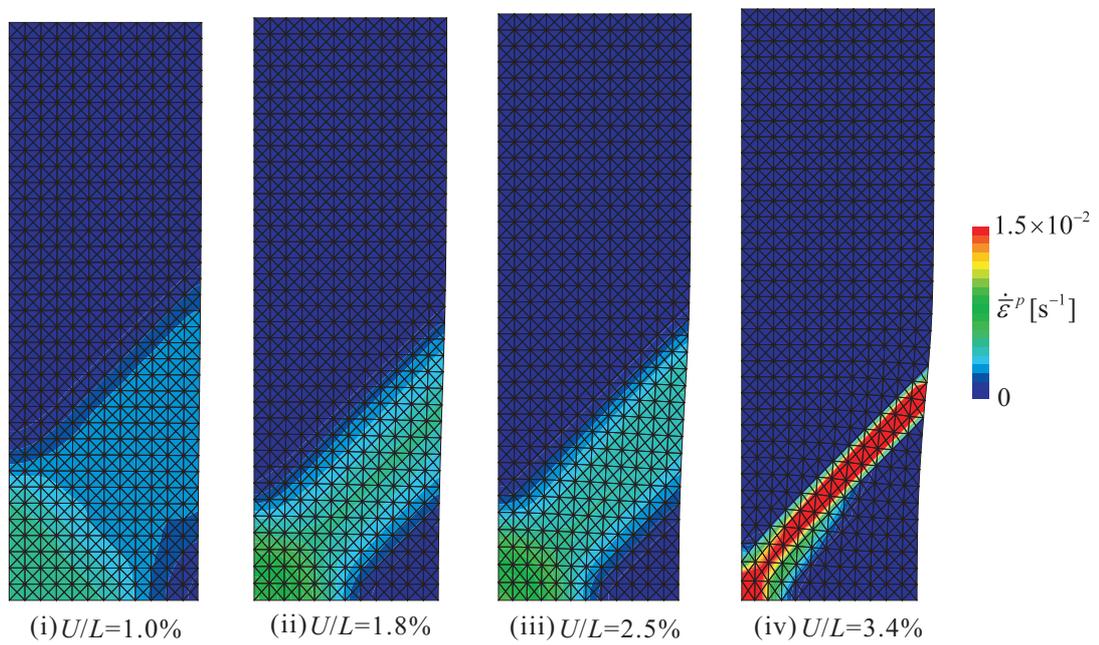


Fig. 7.26 Distributions of equivalent plastic strain rate in macroscopic specimen (Plastic localization, $\bar{d} = 0.40\mu\text{m}$)

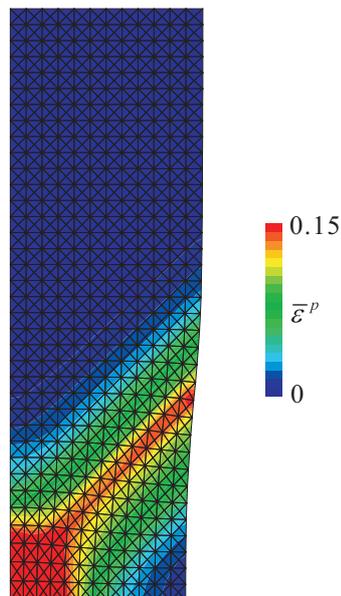


Fig. 7.27 Distribution of equivalent plastic strain in macroscopic specimen (Generation of shear band, $\bar{d} = 0.40\mu\text{m}$, $U/L = 3.4\%$)

は、材料が降伏した直後に降伏点降下現象が発現するが、粒径の減少に伴って降伏点降下が起きた後の試験片の変形挙動は変化することがわかる。また、粒径のサブミクロン化に伴って材料は塑性不安定状態に陥りやすくなるため、通常粒金属に比べて均一変形可能な塑性ひずみ限界が低下する。その後、不均一変形さらには塑性変形の局所化が進行するため、UFGMの延性は急激に低下すると考えられる。

図7.28は、図7.17における $\bar{d} = 5.4\mu\text{m}$ の曲線を伸び率40%まで拡大した図である。この図を見ると、塑性変形の進行とともに公称応力が引張強さに達し、その後減少に転じるという塑性不安定現象については再現されていることが確認できる。しかしながら、 $\bar{d} = 0.40, 0.66\mu\text{m}$ の場合のように、局所くびれの発生に伴う応力の急激な減少までは再現できていない。図7.29は、図7.28における伸び率40%時の試験片内の相当塑性ひずみ速度分布および相当塑性ひずみ分布である。この図を見ると、塑性不安定性の発現に伴う拡散くびれの発生は再現されているが、依然として塑性変形が試験片の大部分において進行しており、弾性除荷は発生していないことが確認できる[図7.29(a)]。そのため、塑性変形の局所化が起こらず、図7.29(b)からもわかるように、せん断帯も発現していない。従来多くの塑性局所化解析に関する研究によれば、CT要素を用いると発現するせん断帯の方向が要素数に対して非常に敏感であり、せん断帯は4つのCT要素で構成された四角形の対角方向へのみ形成されることが明らかとなっている⁽²⁵⁾⁽¹⁰²⁾⁽¹⁰³⁾。図7.29(b)を見ると、試験片中央付近の要素が試験片長手方向に大きく伸びており、このような状態ではせん断帯のような変形モードを表現できないことが予想される。そのため、 $\bar{d} = 5.4\mu\text{m}$ の場合にCT要素を用いて局所くびれによる変形モードを再現するためには、さらに細かい要素を用いて試験片を要素分割する必要があると考えられる。しかしながら、要素数の増加は計算コストの増大につながるだけでなく、解析対象における結晶粒径の違いによって試験片を分割するCT要素の数や形状を変化させる必要があるといった問題が生じてしまう。一般に、本研究で扱う問題のように、塑性局所化が発現する時期や試験片に形成されるせん断帯の形状を予め推測できないような問題に対しては、CT要素より高性能である4節点四辺形双1次要素、さらには8節点および9節点四辺形2次要素のような高次要素が適していると考えられている⁽¹⁰⁰⁾⁽¹⁰⁴⁾⁽¹⁰⁵⁾。このような要素を用いる場合には、6.3.3節で述べたようにロッ

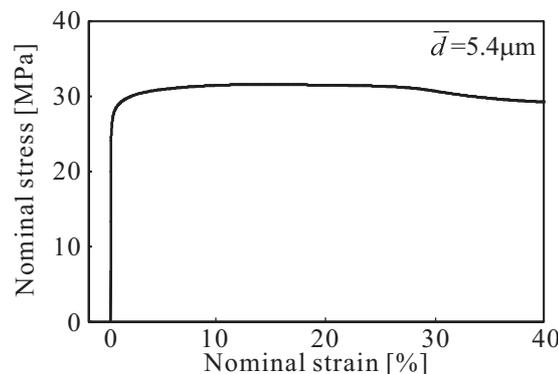


Fig. 7.28 Enlarged view of nominal stress versus nominal strain curve of $\bar{d} = 5.4\mu\text{m}$ in Fig. 7.17

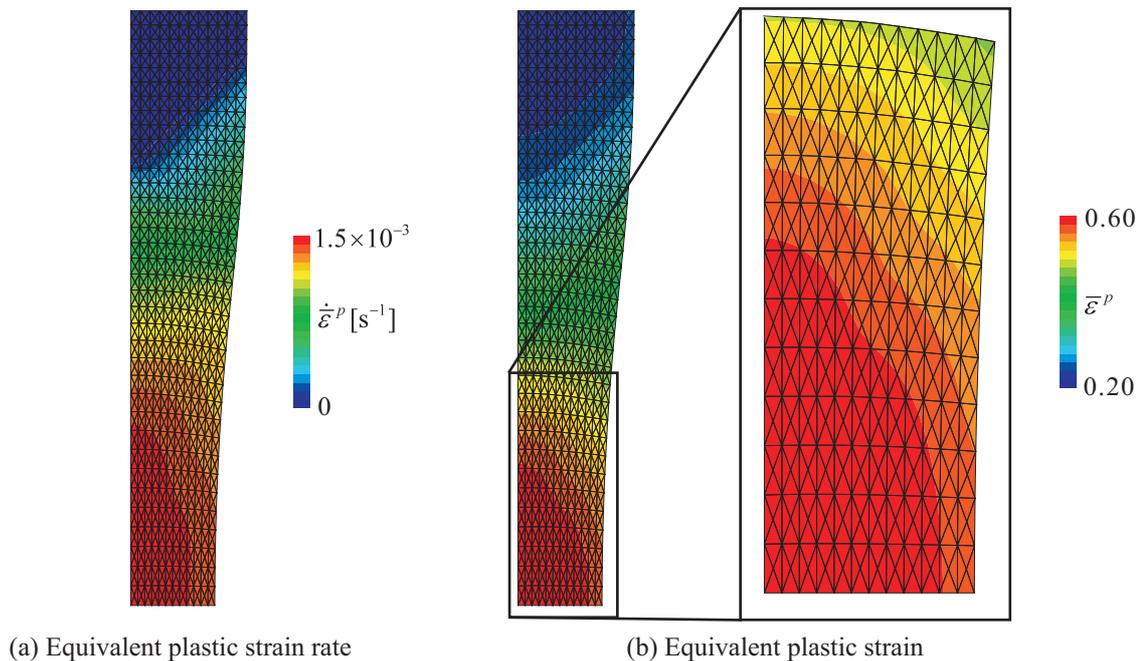


Fig. 7.29 Distributions of equivalent plastic strain rate and equivalent plastic strain in macroscopic specimen ($\bar{d} = 0.40\mu\text{m}$, $U/L = 40\%$)

キング現象や次数低減積分に伴う擬似モードの発生といった問題が生じる可能性がある。そこで次節では、本研究で構築したトリプルスケール転位-結晶塑性モデルに基づく塑性局所化解析を行う際に、マクロな解析対象を分割する各種有限要素の選択が解析結果に及ぼす影響について検討するとともに、本研究で対象とする問題に対して最適であると考えられる要素の種類を決定する。

7.4 マクロ構造における要素選択に関する検討

本節では、マクロな試験に対して各種有限要素を用いて、本研究で構築したトリプルスケール転位-結晶塑性モデルに基づく塑性局所化解析を行い、要素の選択が解析結果に及ぼす影響について検討する。その際、次数低減積分および選択形次数低減積分[6.3.3節参照]を考慮した要素についても検討する。

7.4.1 解析条件

マクロな解析対象となる試験片は7.3節における解析と同様に、図7.30(a)に示すような長さ $2L$ 、幅 $2(W+\Delta W)$ 、アスペクト比 $L/W=3$ の長方形AI平板とし、マクロ構造の変形の対称性を仮定してモデルの1/4のみを平面ひずみ条件下で解析する。形状初期不整についても式(7.5)のように表し、 $W_1 = 1.0 \times 10^{-2}$ および $W_2 = 0$ とする。端面に x_2 軸方向の強制引張変位 U を一定速度 $\dot{U}/L = 1.0 \times 10^{-3}\text{s}^{-1}$ で与え、静的陽解法によるFEM解析を行う。巨視的境界条件

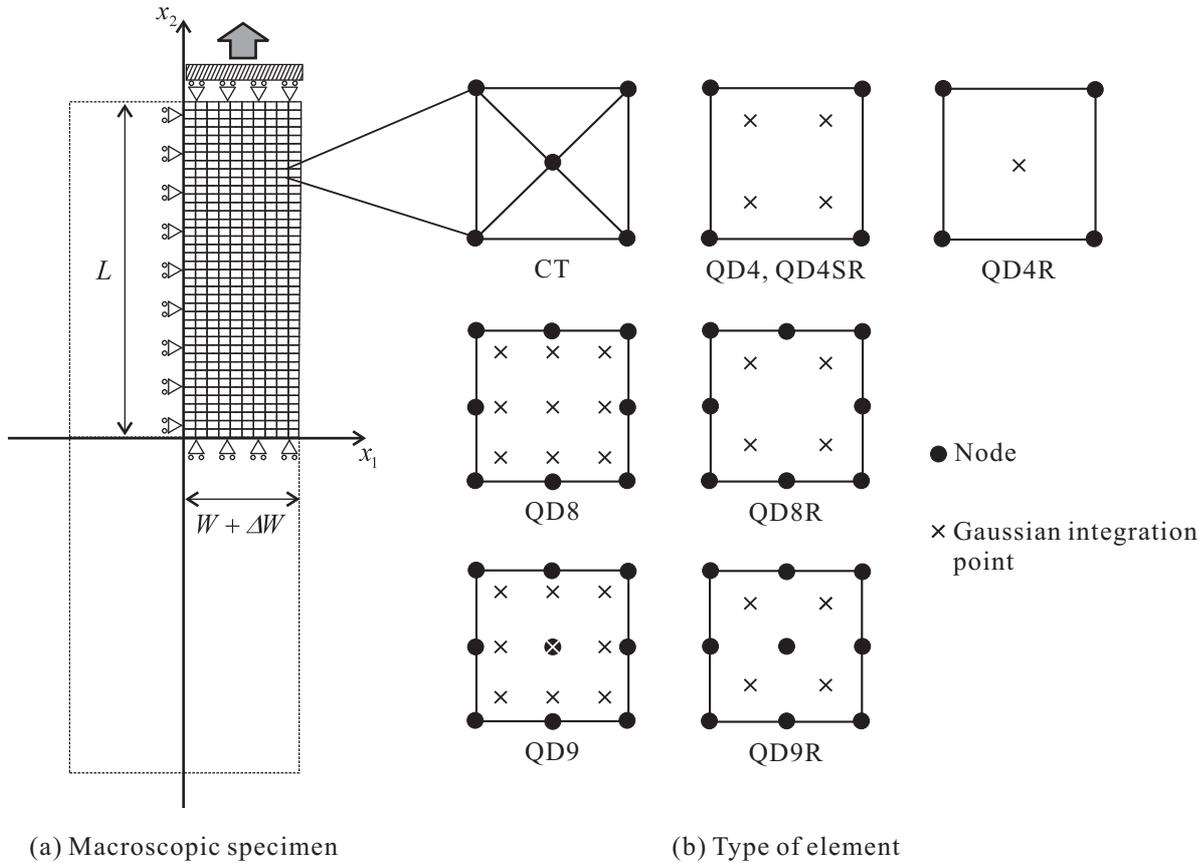


Fig. 7.30 Computational model for macroscopic specimen

は式(7.6)のように規定し, 1%引張りに対する時間ステップ数を1000としている. 本解析では, マクロな解析対象を幅方向10分割, 長手方向40分割して得られる400個の四辺形要素およびその長方形をさらにその対角線で分割してできる1600個のCT要素を用いることとする. 四辺形要素に関しては4節点要素(QD4), 8節点要素(QD8)および9節点要素(QD9)を用いる. また, QD4要素に対して次数低減積分(QD4R)および選択形次数低減積分(QD4SR)を行う場合, さらにQD8要素およびQD9要素に対して次数低減積分(QD8RおよびQD9R)を実行する場合についても検討する. なお, 6.3.3節で述べたとおり, 本研究における構成式を用いてマクロ構造の要素剛性マトリックスを求める場合には, その剛性マトリックスを厳密に体積成分と偏差成分に分解することができないため, 4節点四辺形要素に対して選択形次数低減積分を実施する場合にはB-bar法を適用して数値積分を行う[6.3.3節参照].

一方, ミクロ構造におけるユニットセルについては, 7.3節における解析と同様のものを用いる. また, ユニットセルに関しても平面ひずみ問題を考え, 境界条件として変位に関する周期境界条件を与える. ここでもAsaroの平面2重すべりモデルを採用し, 各結晶粒の初期方位についても同様に, 表7.1にある値を用いる. このユニットセルをマクロ構造の各積分点に割り当て, ミクロ-マクロ連成解析を行う. ここで, 図7.6(a)からもわかるように, 本モデルを用いる場合には粒径が小さいほど変形の早い段階で公称応力が減少する傾向にあり, 早期に塑性局所化が起こることが予想される. そこで, 本解析では計算時

間の短縮のため初期平均粒径は $\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$ とする。また、転位の枯渇状態は考慮せずに初期状態において結晶粒内には十分転位が含まれていると仮定し、初期転位密度 $\rho_0^{(a)}$ には臨界転位密度 ρ_k を与える。さらに、 ρ_k および結晶の臨界分解せん断応力 $g_0^{(a)}$ を式 (4.54) および式 (4.53)₂ より算出する。なお、弾性等方性を仮定し、材料定数および数値パラメータについては以下の値を用いる。

$$\left. \begin{aligned} E = 60\text{GPa}, & \quad \nu = 0.30, & \quad \bar{b} = 0.26\text{nm}, & \quad y_c = 1.0\text{nm}, & \quad f = 1.0 \times 10^2, \\ \dot{\gamma}_0^{(a)} = 1.0 \times 10^{-3}\text{s}^{-1}, & \quad m = 5.0 \times 10^{-3}, & \quad \tau_r^{(a)} = 15\text{MPa}, & \quad a = 0.20, & \quad l_k = \bar{d}/3, \\ \kappa = 3.0 \times 10^2, & \quad c = 1.0, & \quad c^* = 50, & \quad \theta^{an} = 1 \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (7.9)$$

転位の相互作用行列 $\Omega^{(\alpha\beta)}$ の成分に関しては全て1とし、 $\omega^{(\alpha\beta)}$ については対角成分を零およびその他の成分を1とする。

7.4.2 解析結果および考察

図 7.31 は、各種有限要素を用いた解析によって得られた荷重-伸び曲線である。ここで、縦軸は端面荷重 F を初期臨界分解せん断応力 $g_0^{(a)}$ と初期試験片断面積 A の積、横軸は端面変位 U を初期試験片長さ L により正規化している。この図を見ると、引張強さに達するまでの荷重履歴は要素の種類によらず一致していることがわかる。その後、CT要素、QD8要素、QD8R要素、QD9要素およびQD9R要素を用いた場合には、荷重の急激な減少が再現されていることが確認できる。この中でも、CT要素、QD8要素、QD8R要素およびQD9要素の結果はほぼ一致しており、QD9R要素の場合には荷重の急落時期が多少遅れている。一方、QD4要素、QD4R要素およびQD4SR要素のような4節点四辺形要素を用いた解析では、いずれの場合においても荷重の急激な減少は再現されていないことがわかる。なお、ここには示していないが、QD4R要素の場合には $U/L = 0.15$ の直後に荷重が急落するという結果

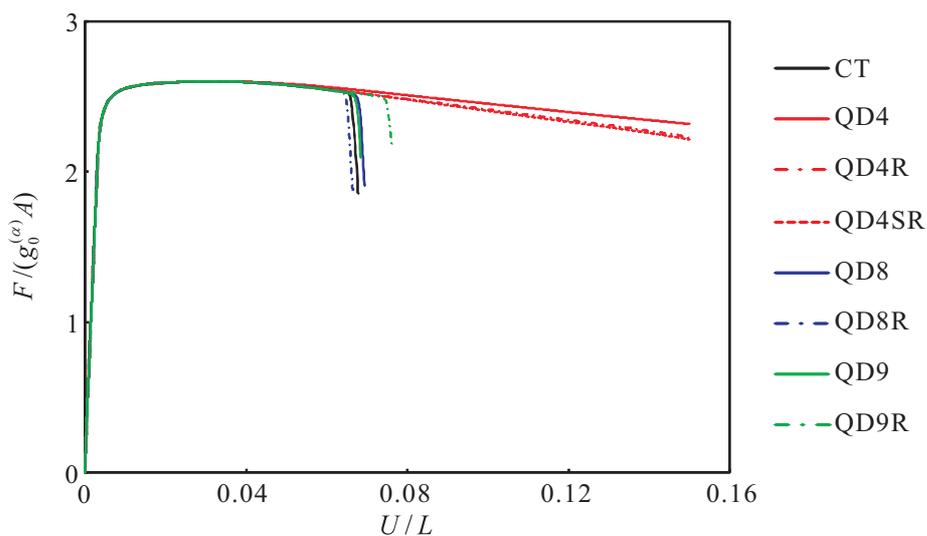


Fig. 7.31 Load versus elongation curves with different types of elements

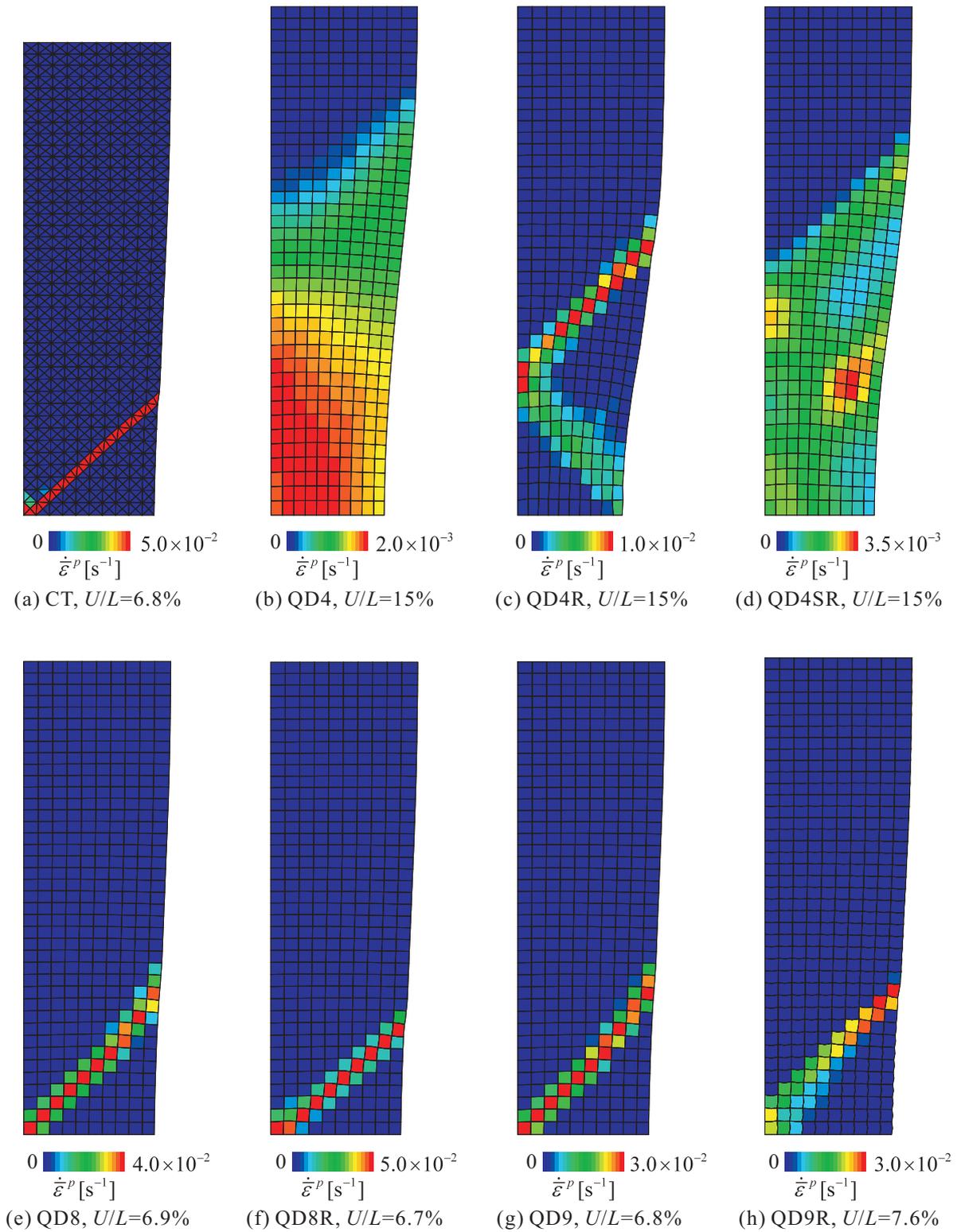


Fig. 7.32 Distributions of equivalent plastic strain rate for each type of element

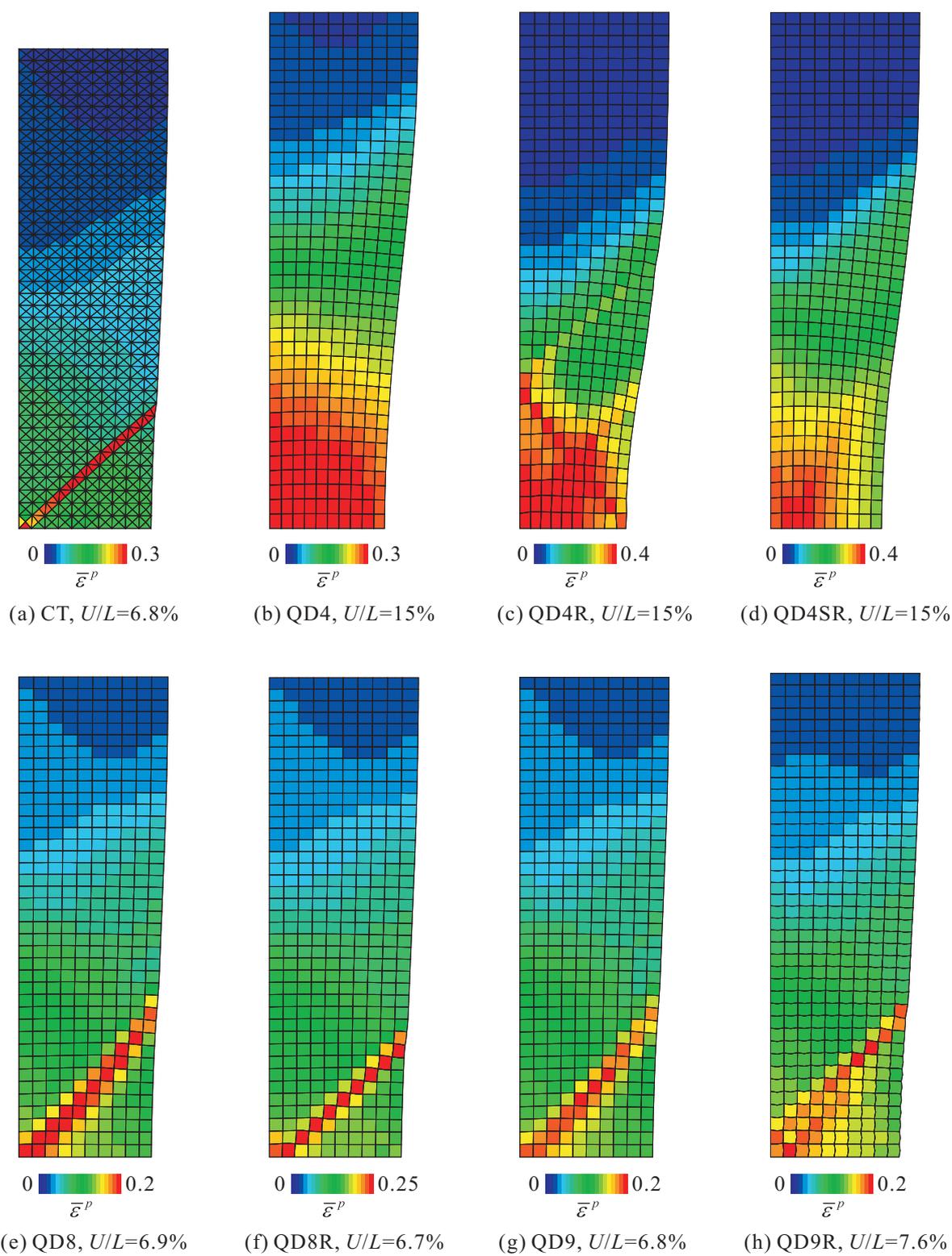


Fig. 7.33 Distributions of equivalent plastic strain for each type of element

が得られた。また、特にQD4要素(完全積分)を用いた場合には、その他の解析に比べて固い解が得られていることが確認できる。この要素は、体積ロッキングが生じることが確認されている要素であり[6.3.3節参照]、本解析においても体積ロッキングが発生していると考えられる。そのため、QD4要素は本研究においては不適切であると考えられる。

図7.32は、各種有限要素を用いた解析によって得られた試験片内の相当塑性ひずみ速度分布である。なお、積分点を複数含む要素を用いる場合には、それらの積分点における値の平均値を要素の値として、要素に色付けを施している。この図を見ると、CT要素、QD4R要素、QD8要素、QD8R要素、QD9要素およびQD9R要素の場合には弾性除荷が発生し、塑性変形の局所化に伴うくびれの発生が確認できる。また、図7.33は、各種有限要素を用いた場合の試験片内の相当塑性ひずみ分布であり、局所くびれが発生した試験片においては、試験片を横断するせん断帯が形成されている。

QD4R要素およびQD9R要素は擬似モードを発生する可能性がある要素であり、これらの場合の相当塑性ひずみ分布図の試験片中央部を拡大すると図7.34のようになる。この図を見ると、要素が台形に変形し、これが連結することでアワーグラスモードと呼ばれる物理的に不適切な変形モードが表れていることが確認できる。そのため、これらの要素は本研究で行う解析においては不適切であると考えられる。一方、QD8R要素も同様に擬似モードを発生する可能性のある要素であるが、この擬似モードは要素間において非適合であるため、いくつかの要素を結合したときに発生が抑制されることが知られている⁽⁹⁸⁾。本

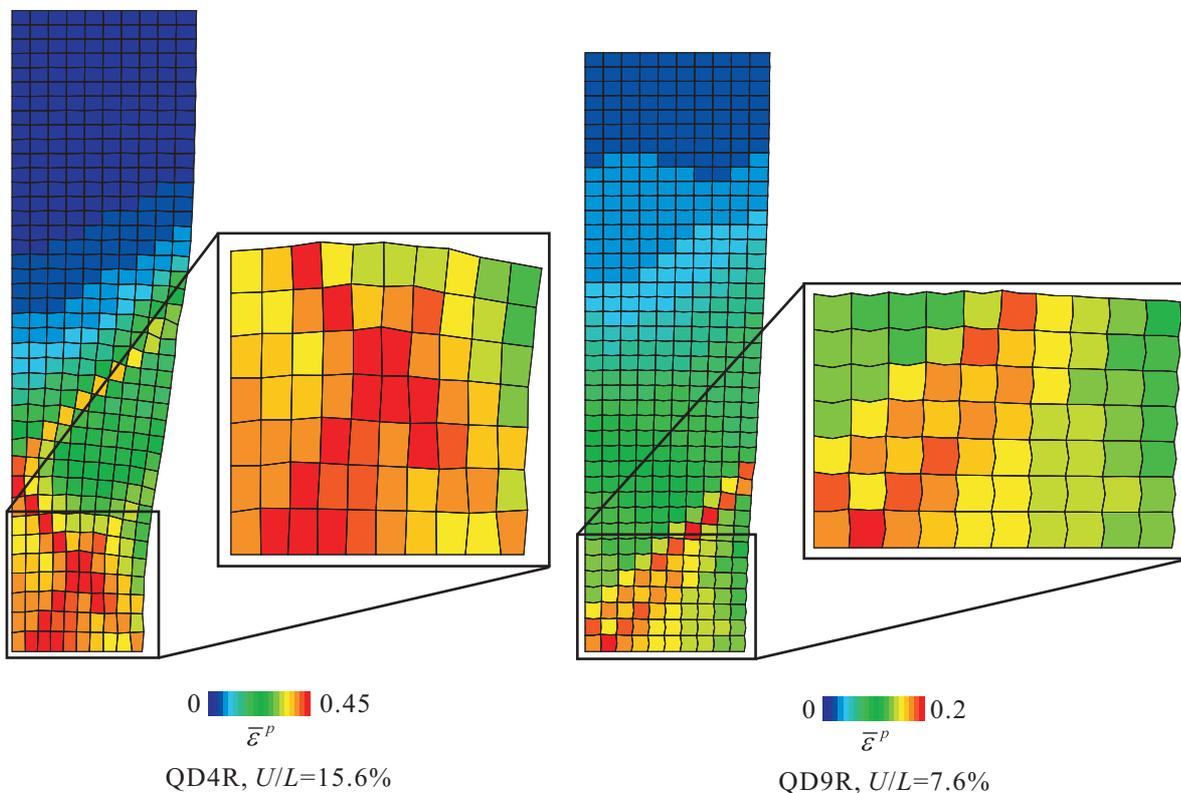


Fig. 7.34 Spurious mode (QD4R, QD9R)

解析においても，QD8R要素を用いた場合には擬似モードは発生していないことが確認できる[図7.33(f)]．

また，QD4SR要素を用いた場合には，体積ロッキングおよび擬似モードは発生しないとされており，本解析においてもこれらの現象は抑制されていることが確認できるが，塑性局所化現象に伴うせん断帯の発生までは再現されていない[図7.33(d)参照]．そこで，試験片の幅方向および長手方向の要素分割数を倍にして解析を行うと，荷重-伸び曲線が図7.35のように得られる．この場合，図7.31におけるCT要素，QD8要素，QD8R要素，QD9要素およびQD9R要素に対応する曲線と比較すると多少緩やかではあるが，荷重の急激な減

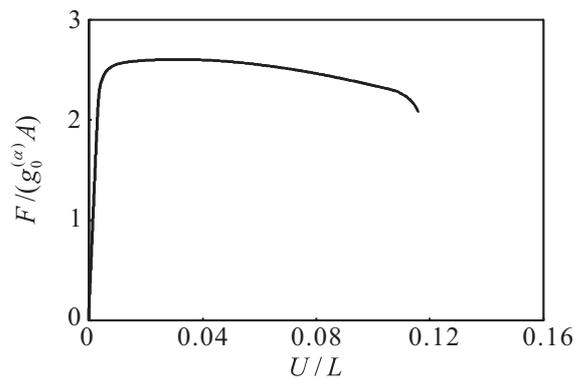


Fig. 7.35 Load versus elongation curves with fine mesh (QD4SR)

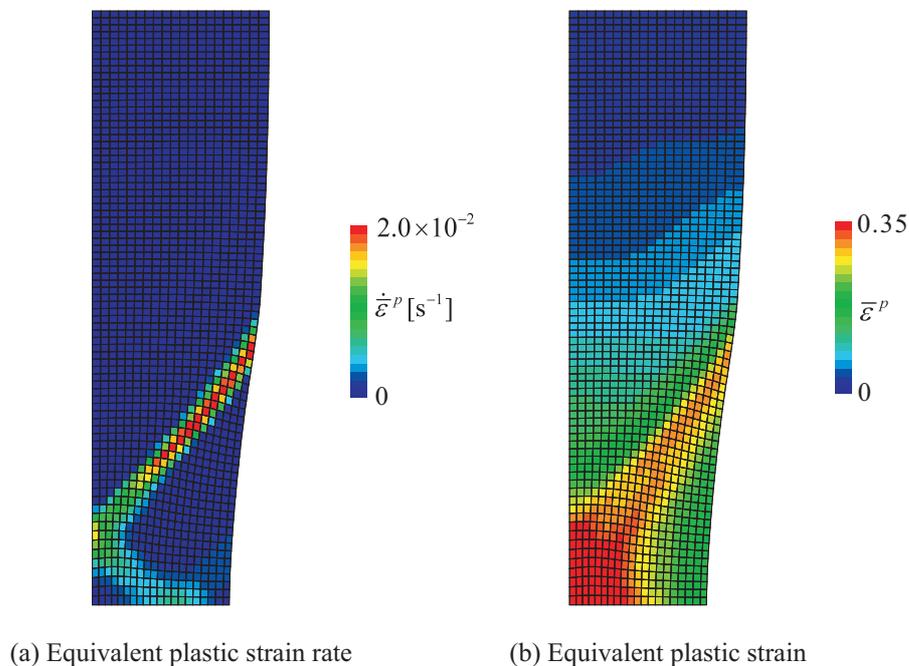


Fig. 7.36 Distributions of equivalent plastic strain rate and equivalent plastic strain in macroscopic specimen with fine mesh (QD4SR)

少が再現されていることがわかる。しかしながら，依然として荷重の急落時期が遅れている。また，図7.36は本解析から得られた試験片内の相当塑性ひずみ速度分布および相当塑性ひずみ分布である。この図を見ると，試験内における弾性除荷，塑性局所化現象に伴う局所くびれおよびせん断帯の発生が再現されていることが確認できる。そのため，本研究における解析においてQD4SR要素を適用する場合には，要素の大きさを細かくする必要があるが，要素の増加による計算コストの増大が問題となる。

以上の結果から，本研究で構築したトリプルスケール転位-結晶塑性モデルによる塑性局所化解析を行う場合には，マクロな解析対象に対してCT要素，QD8要素，QD8R要素およびQD9要素のいずれかを用いることで，妥当性のある解が得られると考えられる。しかしながら，7.3節において述べたように，高い延性を有する材料を想定した解析対象に対してCT要素を用いた解析を行う場合には，分割する要素数を細かくする必要があり，解析対象によって要素の数および形状を変化させる必要性が生じる。そのため，事前に解の予測が困難である問題には適さないといえる。また，QD8要素およびQD9要素の場合には，得られる解は妥当であるが，完全積分により要素剛性を求める際に必要となる積分点の数が多く，積分点に関する情報の記憶および解析時間において大きな計算コストを要するため，本研究で扱う問題に対してはQD8R要素が最適であると考えられる。詳しい解析結果については次節に示すが，通常粒Al材のような高い延性を有する材料を想定した解析対象に対してQD8R要素を用いた解析を行う場合には，特に要素数を変えることなく，超微細粒金属を想定した解析対象と同様の解析モデルを用いて塑性変形の局所化を再現することが可能となる。なお，非共軸構成式のような現象論的塑性構成式や結晶塑性構成式を用いた塑性局所化解析に関するこれまでの研究においても，QD8R要素のような次数低減積分を適用した高次要素は非常に汎用性が高い要素であることが示されている⁽¹⁰⁰⁾⁽¹⁰⁴⁾⁽¹⁰⁵⁾⁽¹⁰⁶⁾。そこで，次節で行う解析においては，マクロな解析対象に対してQD8R要素を用いることとする。また，図7.37はQD8R要素を用いて要素分割をさらに細かくした場合の解析から得られた荷重-伸び曲線である。同図の黒線は図7.31におけるQD8R要素の場合の曲線と同じであり，赤線が要素を細かくした場合の結果である。要素を細かくすることで荷重の落ち込みが急になるが，荷重の急落が開始する時期はほとんど同じであり，それまでの荷重履歴もほとんど一致していることがわかる。また，図7.38は試験片内の相当塑性ひずみ分

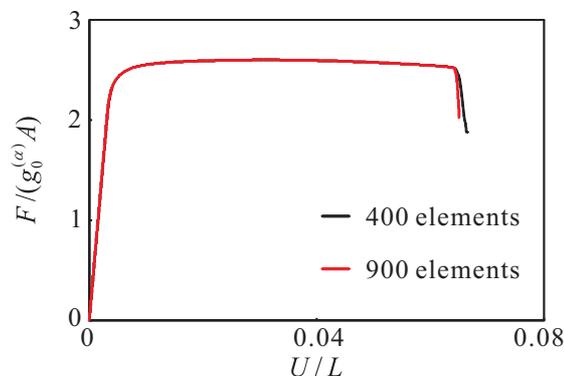


Fig. 7.37 Load versus elongation curves with fine mesh (QD8R)

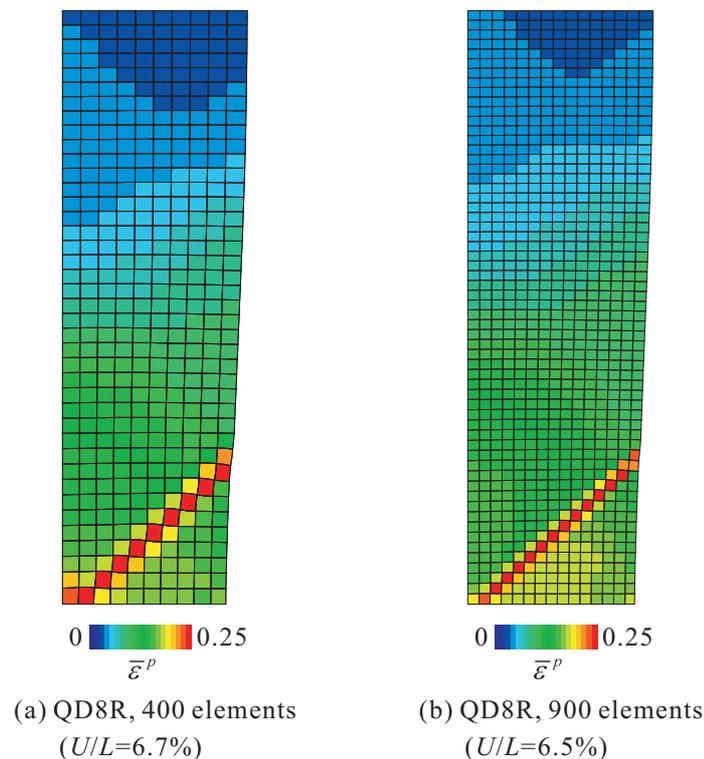


Fig. 7.38 Distributions of equivalent plastic strain in macroscopic specimen with fine mesh (QD8R)

布である。この図を見ると、要素が細かいほど試験片に形成されるせん断帯はシャープになるが、得られるせん断帯の位置および形状は類似していることが確認できる。そのため、計算コストを削減するためにマクロな解析対象を分割する要素数は400とする。

7.5 FCC超微細粒金属に対する擬似3次元トリプルスケール転位-結晶塑性解析

本節では、FCC結晶の12すべり系を全て考慮した擬似3次元トリプルスケール転位-結晶塑性解析を強ひずみ加工のみが施された超微細粒金属、微細粒焼鈍材および通常粒金属を想定した試験片に対して実行し、それぞれの金属材料に特有の力学特性を統一的に再現することを試みる。また、得られた結果と実験結果との定量的な比較検討を行う。さらに、超微細粒金属における試験片レベルでの巨視的降伏および結晶粒レベルでの微視的降伏状況について考察するとともに、粒径のサブミクロン化に伴う金属材料の急激な延性低下のメカニズムについて検討する。

7.5.1 解析条件

マクロな解析対象となる試験片は7.4節における解析と同様に，図7.39(a)に示すような長さ $2L$ ，幅 $2(W+\Delta W)$ ，アスペクト比 $L/W=3$ の長方形Al平板とし，マクロ構造の変形の対称性を仮定してモデルの1/4のみを平面ひずみ条件下で解析する．なお，試験片の寸法は $L=3.0\text{m}$ および $W=1.0\text{m}$ とする．形状初期不整についても式(7.5)のように表し， $W_1=1.0\times 10^{-2}$ および $W_2=0$ とする．端面に x_2 軸方向の強制引張変位 U を一定速度 $\dot{U}/L=1.0\times 10^{-3}\text{s}^{-1}$ で与え，静的陽解法によるFEM解析を行う．巨視的境界条件は式(7.6)のように規定し，1%引張りに対する時間ステップ数を1000としている．本解析では，マクロな解析対象を幅方向10分割，長手方向40分割して得られる400個の四辺形要素をそれぞれ8節点四辺形2次要素とし，要素あたりの積分点数を 2×2 として次数低減積分を行う(QD8R)．

一方，ミクロ構造におけるユニットセルは，Voronoi分割法によって生成された25個の結晶粒からなる1辺の長さが w の正方形多結晶平板とし，面積がほぼ一様である三角形定ひずみ要素を用いて各結晶粒内をDelaunay三角形分割法により要素分割を行う[図7.39(c)，(d)参照]．また，ユニットセルに関しても平面ひずみ問題を考え，境界条件として変位に関する周期境界条件を与える．さらに，本解析ではFCC結晶の全12すべり系を考慮する．すな

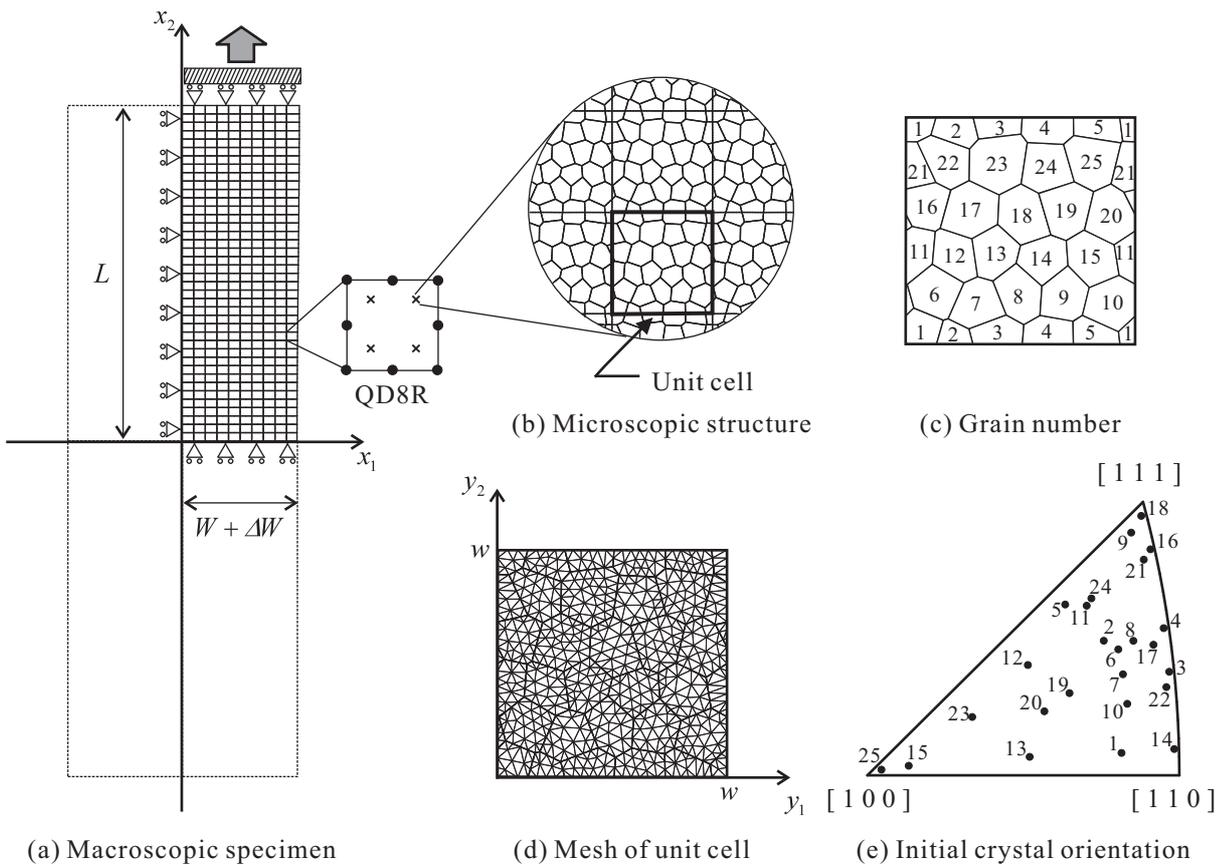


Fig. 7.39 Computational model for triple-scale dislocation-crystal plasticity analysis (Pseudo three-dimensional model)

Table 7.4 Initial mean grain size and initial dislocation density

Type of material	Initial mean grain size [μm]	Initial dislocation density [μm^{-2}]
As-severly deformed UFGM	0.27	1.8×10^3
Annealed fine-grained metal	0.40	60
	0.66	36
	1.2	12
Usual grain size metal	10	6.0

Table 7.5 Size of unit cell

$\bar{d}[\mu\text{m}]$	$w[\mu\text{m}]$
0.27	1.2
0.40	1.8
0.66	2.9
1.2	5.3
10	44

わち，ユニットセルの幾何形状は2次元とするが，転位-結晶塑性に関する計算においては3次元情報を有するFCC結晶のすべり系を考慮するという擬似3次元解析を実行する[6.5.2節参照]．等方材料を仮定して，各結晶粒の初期方位は擬似乱数によりランダムに与え，それぞれの方位は図7.39(e)に示すとおりである．ここで，図7.39(e)におけるプロットは，結晶座標系から見た試験片の引張方向(x_2 軸方向)を表している(逆極点図)．簡単のため弾性等方性を仮定し，結晶粒内の転位の枯渇状態に対応できるように，臨界分解せん断応力モデルには式(4.53)を用いる．材料定数および数値パラメータについては，以下の値を用いる．

$$\left. \begin{aligned} E &= 60\text{GPa}, & \nu &= 0.30, & \bar{b} &= 0.26\text{nm}, & y_c &= 1.0\text{nm}, \\ f &= 5.0 \times 10^2, & \dot{\gamma}_0^{(\alpha)} &= 1.0 \times 10^{-3}\text{s}^{-1}, & m &= 5.0 \times 10^{-3}, & \tau_r^{(\alpha)} &= 15\text{MPa}, \\ a &= 0.10, & c &= 1.0, & c^* &= 20, & \theta^{tan} &= 1 \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (7.10)$$

転位の相互作用行列 $\Omega^{(\alpha\beta)}$ の成分に関しては，これまでの解析と同様に全て1とする．この場合，式(4.30)の分母は零となってしまうため， $\omega^{(\alpha\beta)}$ については対角成分を零とし，その他の成分を $1/(n_{\text{slip}} - 1)$ とする．ここで， $n_{\text{slip}} (= 12)$ はすべり系の数である．また，本解析ではTsujiら⁽¹¹⁾の実験結果を参考にするため，初期平均粒径および初期転位密度に関しては表7.4にある値を用いる． $\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$ の場合には，材料は強ひずみ加工のみが施されたUFGMであることを想定しているため，初期転位密度には十分高い値を与える．一方，初期平均粒径が $0.40\mu\text{m}$ 以上の場合には，強ひずみ加工の後に焼鈍処理も施されていることを想定

して、初期転位密度については焼鈍による粒径の増加に伴って減少するように値を決定している。また、初期転位は各すべり系に均等に分布されていることとする。なお、各粒径に対応するユニットセルの1辺の長さ w は表7.5のようになる。優先的に活動できる粒内転位源の最小長さ l_k については、Ohashiら⁽⁵⁵⁾の議論に基づいて $l_k = \bar{d}/3$ とし、各粒径に対応する臨界転位密度 ρ_k および粒界転位源の活動に必要なせん断応力 g_k の値は式(4.54)および式(4.55)から算出する。その際に必要となる数値係数 κ 、 k_0 および λ の値は、それぞれ $\kappa = 3.0 \times 10^2$ 、 $k_0 = 20\text{MPa}$ および $\lambda = 0.18 (= 1/5.5)$ であり、これらの値はTsujiら⁽¹¹⁾の実験結果を参考に現象論的に決定している。

7.5.2 解析結果および考察

本解析においても、7.3節の解析と同様にXeon 3.2GHzのCPUが8コア搭載されたワークステーションを使用し、マクロ構造の各積分点におけるユニットセル計算を行う際にOpenMPによる並列化処理(スレッド数は8)を実施する。上記の計算環境において、試験片の1%引張り(増分ステップ数は1000)に要する計算時間は26855秒(約7.5時間)となる。図7.40は、単軸引張試験を想定した本解析から得られた、各粒径に対応するマクロな試験片の公称応力-公称ひずみ線図である。この図を見ると、7.3節における解析結果と同様に、粒径の減少に伴う初期降伏の増加および粒径のサブミクロン化に伴う急激な延性の低下といった寸法効果が再現されていることがわかる。さらに、微細粒焼鈍材を想定した $\bar{d}=0.40, 0.66, 1.2\mu\text{m}$ の場合の曲線に注目すると、降伏点降下現象が再現されていることが確認できる。一方、 $\bar{d} = 0.27, 10\mu\text{m}$ の場合には降伏点降下現象が発現していない。 $\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$ の場合には、材料は強ひずみ加工のみが施されたUFGMであることを想定しているため、結晶粒内には十分に転位が含まれていることが予測される。 $\bar{d} = 10\mu\text{m}$ の場合には、焼鈍されたことによ

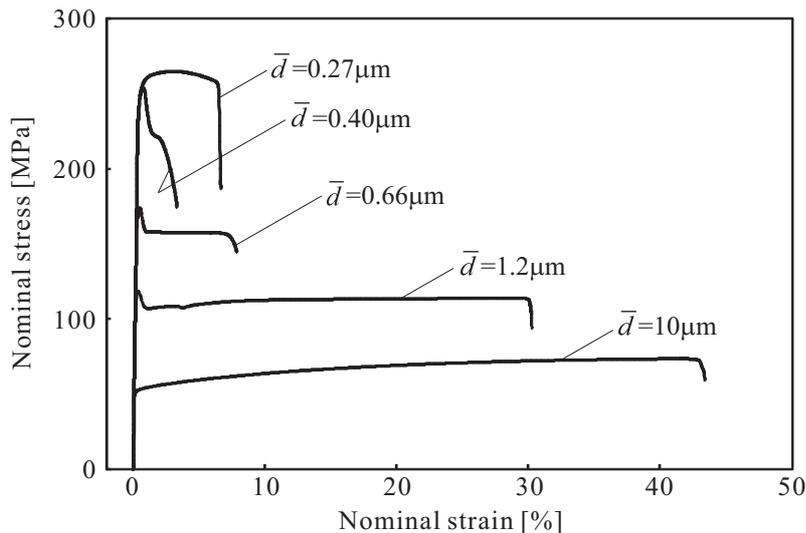


Fig. 7.40 Nominal stress versus nominal strain curves of UFGM, annealed fine-grained metal and usual grain size metal

り初期転位密度は低い値となっているが、結晶粒のサイズが十分に大きいため通常の塑性変形が進行するために必要な転位が粒内に存在していると考えられる。したがって、これらの場合には初期転位密度が臨界転位密度 ρ_k の値を超えており、変形の初期段階において流れ応力が増加することなく、公称応力-公称ひずみ線図においては通常のFCC金属の同様の曲線が得られると考えられる。また、各粒径に対応する初期降伏応力、上降伏応力、下降伏応力および塑性局所化に伴って公称応力が急落するときの公称ひずみ値などについては、実験結果[図1.5]とほぼ同程度の値となっており、本モデルを用いてFCC結晶の12すべり系を全て考慮した擬似3次元解析を行うことで、実験結果と定量的にほぼ一致した結果が得られることがわかる。

一方、 $\bar{d}=0.27\mu\text{m}$ (強ひずみ加工のみが施されたUFGM)の場合に比べて $\bar{d}=0.40\mu\text{m}$ (強ひずみ加工の後に焼鈍処理が施されたUFGM)の場合の方が延性が低下していることが確認できる。一般に、塑性加工により創製された金属材料に焼鈍処理を施せば、材料内部で再結晶現象が起こり、材料の延性は向上することが知られている⁽¹⁹⁾。しかしながら、UFGMの場合には全く逆の傾向を示し、このように焼鈍処理によりUFGMの延性が低下するという実験結果が多数報告されている⁽¹¹⁾⁽¹²⁾⁽¹³⁾⁽²⁰⁾⁽²¹⁾。この現象に関する検討については後述する。

図7.41は、図7.40の曲線の低ひずみ域を拡大したものである。この図を見ると、応力が0.2%耐力に達する以前に塑性流れ状態にあることが確認できる。そこで、弾性限付近[図7.41-(i)~(v)]におけるマクロな試験片内の相当塑性ひずみ分布を調べると、図7.42のようになる。図7.42を見ると、塑性流れが開始する付近ではいずれの粒径においても、実験的に報告されている 10^{-6} オーダーの降伏前マイクロひずみ(Pre-yield micro strain)⁽¹⁰⁷⁾がすでにマクロな試験片全域にわたって発生していることがわかる。一方図7.43は、図7.42において×印で示した積分点に配置されたユニットセル内の結晶粒の降伏状況を示したものであり、図7.43(a)および(b)はそれぞれ弾性限付近[図7.41-(i)~(v)]および応力が0.2%耐力に達する付

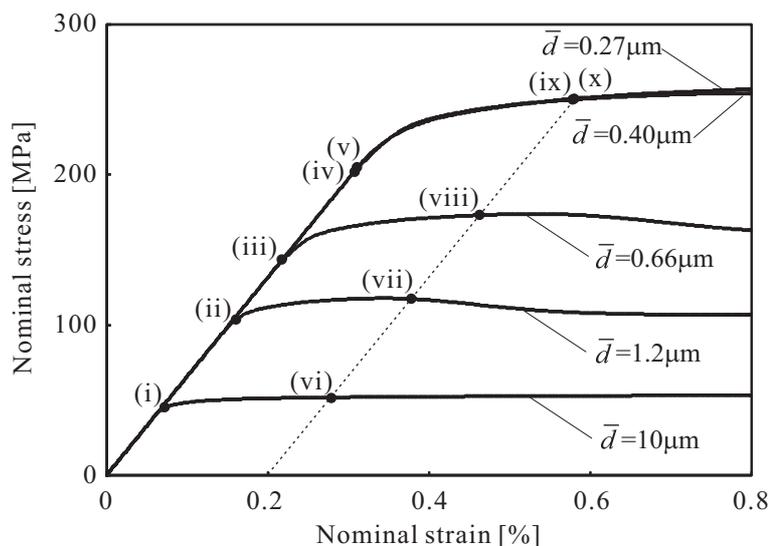


Fig. 7.41 Enlarged view of nominal stress versus nominal strain curves in Fig. 7.40 in low strain range

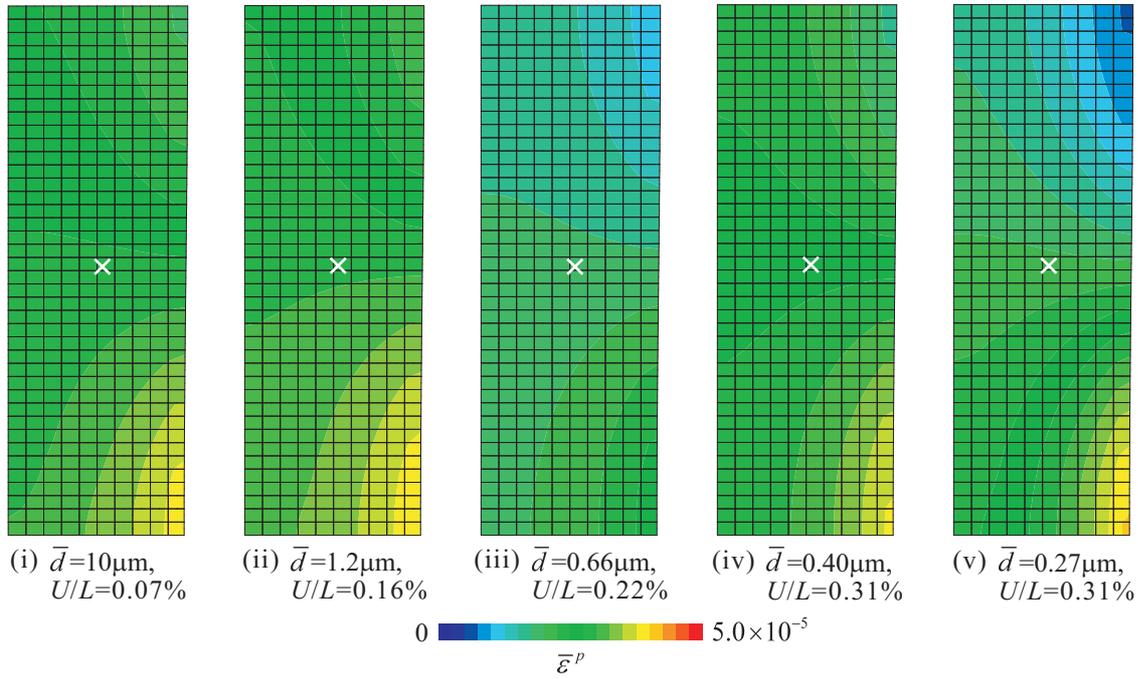


Fig. 7.42 Distributions of equivalent plastic strain in macroscopic specimens near elastic limit (Pre-yield micro strain)

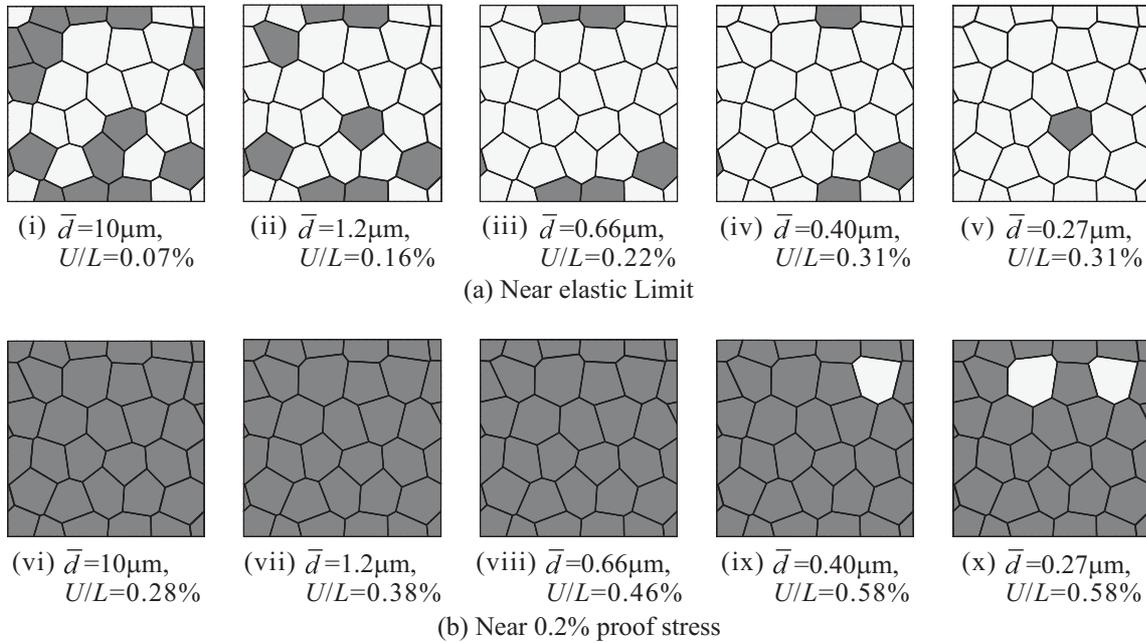


Fig. 7.43 Yielding grains in unit cells

近[図7.41-(vi)~(x)]に対応している。なお、図7.43では粒内の5割以上の要素においてすべりが発生した粒を降伏した粒とみなし、それらを灰色で表示している。弾性限付近では、図7.43(a)のようにいずれの粒径においても降伏していない結晶粒が多く存在しており、微視的に全粒降伏には至っていない。また、粒径が減少するほど降伏している結晶粒の数が少ないことも確認できる。そのため、粒径のサブミクロン化に伴って微視的な粒降伏は起こりにくくなると考えられる。さらに変形が進行し、応力が0.2%耐力に達すると図7.43(b)のようになる。 $\bar{d}=10, 1.2, 0.66\mu\text{m}$ の場合には、ユニットセル内の全ての結晶粒が降伏している。また、 $\bar{d}=0.40, 0.27\mu\text{m}$ の場合には降伏していない結晶粒が依然として1,2個存在しているが、ほぼ全粒降伏に近い状態であるとみなすことができる。そのため、全ての結晶粒が降伏する時点を材料の巨視的降伏とすると、FCC-UFGMの場合においても、一般的に用いられている0.2%耐力を巨視的な初期降伏点とみなすのは妥当であると考えられる。以上のような微視的な結晶粒の降伏挙動は、実際の引張試験の最中に観察することが非常に困難である。そのため、本研究のように金属材料の初期降伏挙動を詳細に調査するためには、数値解析を行うことが有効であるといえる。

図7.44は、図7.40における $\bar{d}=10\mu\text{m}$ の曲線を拡大した図であり、図7.45は図7.44における点(i)-(v)に対応する試験片内の相当塑性ひずみ速度分布である。図7.45を見ると、通常粒金属である $\bar{d}=10\mu\text{m}$ の場合には伸び率40%近くまで巨視的塑性変形は試験片内においてほぼ均一に進行していることがわかる。その後、応力が引張強度に達するとくびれが発生し、それに伴って塑性変形が局所化していることが確認できる。なお、マクロな試験片に対してCT要素を用いた解析(7.3節)では、通常粒金属と同様の傾向を示す $\bar{d}=5.4\mu\text{m}$ の場合に塑性局所化現象を再現できなかったが、本解析のように次数低減積分を適用した8節点四辺形要素(QD8R)を用いれば、特別に要素数や要素形状を変えることなく、延性の高い材料を想定した解析対象における塑性変形の局所化を再現できる。

図7.46は、図7.45において×印で示した積分点I, IIおよびIIIに配置されたユニットセル内の全すべり速度分布である。巨視的な塑性変形が試験片内においてほぼ均一に進行している間は、いずれのユニットセルにおいても微視的なすべり変形もユニットセル全域にわたってほぼ一様に起こっている。その後、試験片内において塑性変形が局所化する領

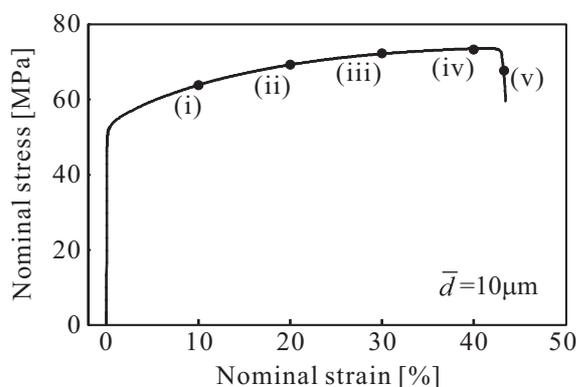


Fig. 7.44 Enlarged view of nominal stress versus nominal strain curve of $\bar{d} = 10\mu\text{m}$ in Fig. 7.40

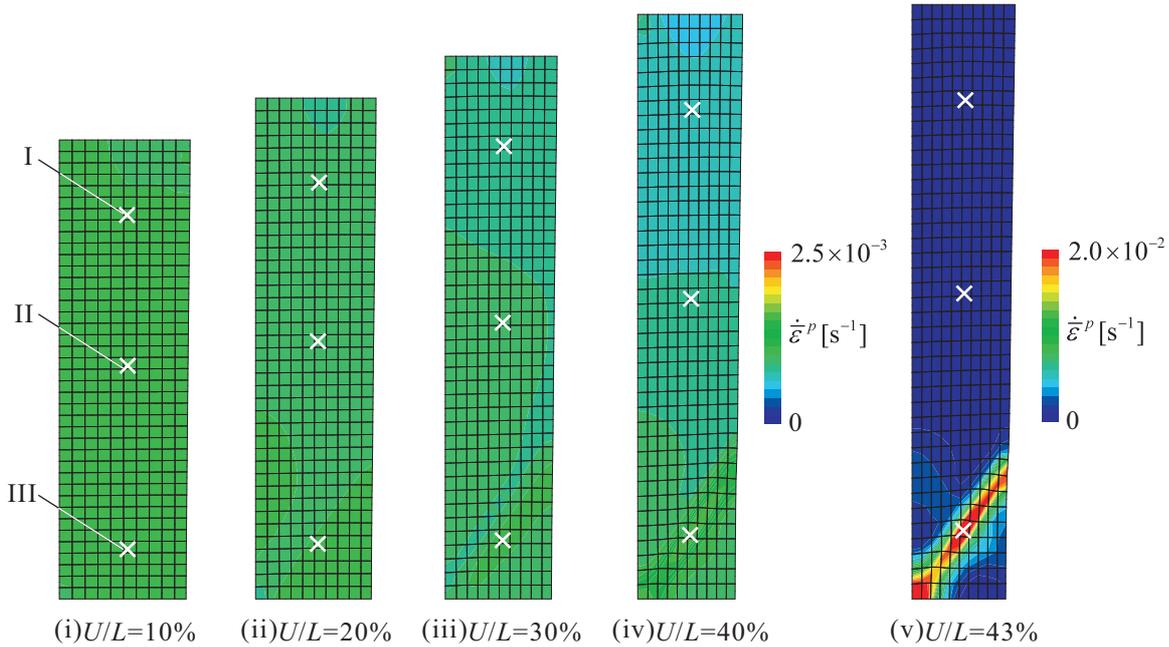


Fig. 7.45 Distributions of equivalent plastic strain rate in specimen corresponding to (i)-(v) in Fig. 7.44 ($\bar{d} = 10\mu\text{m}$)

域付近のユニットセルにすべり変形が集中している。さらに、巨視的な塑性局所化領域にあるユニットセルにおいても、すべり変形がいくつかの粒に集中しており、微視的結晶粒スケールにおいてもすべり変形の局所化が発生していることが確認できる。図 7.47(a) は図 7.44 における点 (v) に対応する試験片内の相当塑性ひずみ分布であり、図 7.47(b) および (c) はそれぞれ同図 (a) において × 印で示した積分点 I, II および III に配置されたユニットセル内の全すべり分布および全 GN 転位密度分布である。同図 (a) を見るとせん断帯が形成されており、試験片は同領域より破断に至ることが予測される。また、試験片内において塑性変形が均一に進行する期間が長いため、いずれのユニットセルにおいてもある程度大きなすべりが発生しており、GN 転位も粒界付近に多く蓄積していることが確認できる [同図 (b)-I, II および同図 (c)-I, II]。また、特に試験片における塑性ひずみの局所化領域付近のユニットセルにおいては、さらに大きなすべり変形が起こっており、粒界に蓄積する GN 転位の密度も高いことがわかる [同図 (b)-III および同図 (c)-III]。さらに同図 (b)-III を見ると、いくつかの粒において微視的なせん断帯 (Micro-shear band) が発生していることも確認できる。

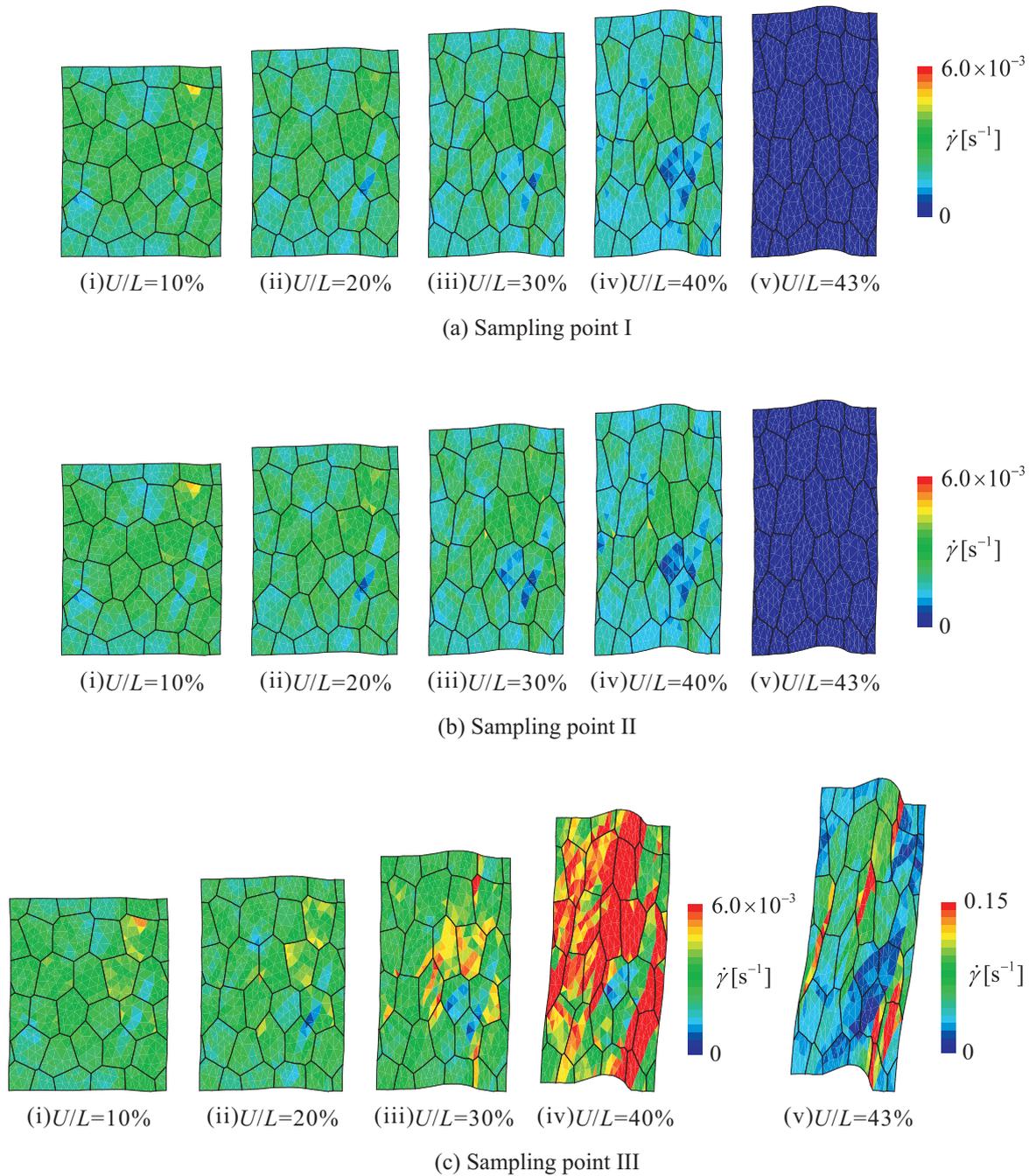


Fig. 7.46 Distributions of total slip rate in unit cells located at sampling points I, II and III in Fig. 7.45 ($\bar{d} = 10\mu\text{m}$)

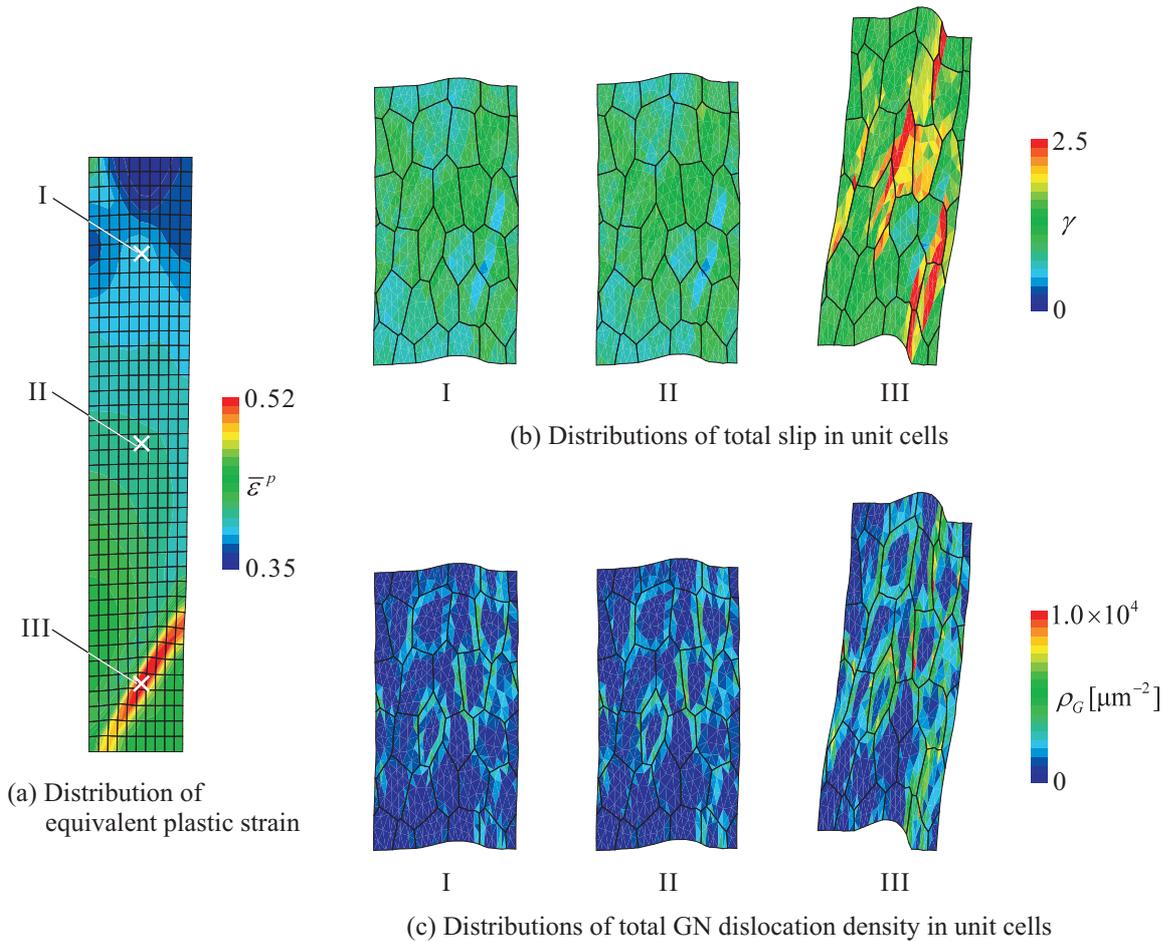


Fig. 7.47 Distribution of equivalent plastic strain in specimen and distributions of total slip and total GN dislocation density in unit cells located at sampling points I, II and III in Fig. 7.47(a) ($\bar{d} = 10\mu\text{m}$, $U/L = 43\%$)

図 7.48 は、図 7.40 における $\bar{d} = 1.2\mu\text{m}$ の曲線の伸び率 10% までを拡大した図であり、図 7.49 は図 7.48 における点 (i) ~ (iv) に対応する試験片内の相当塑性ひずみ速度分布である。図 7.49(i) ~ (iii) を見ると、7.3 節で行った解析と同様に、降伏点降下が起こった後に塑性変形の局所化領域が引張方向へ伝ばするという Lüders 帯の伝ば現象が起こっていることが確認できる。また、図 7.49 と図 7.20 を比較すると、FCC 結晶の全 12 すべり系を考慮して上降伏点および下降伏点を実験結果に近づけることで、試験片内を伝ばするバンド状の塑性ひずみ速度の局所化領域がよりシャープになっていることもわかる。さらに、図 7.48 では伸び率が 4% 付近において、公称応力のわずかな減少を観察することができる。この点はちょうど Lüders 帯が試験片全体を伝ばしきる時点に対応する。このように、Lüders 帯が伝ばし終わる時点で現れる応力の減少は、焼鈍された炭素鋼のような BCC 焼鈍材に対する引張試験においても実験的に観察されている⁽¹⁰⁸⁾。その後 Lüders 帯が試験片全体を伝ばし終わると、図 7.49(iv) のように相当塑性ひずみ速度は試験片内においてほぼ一様となり、その後通常粒金属の場合と同様にほぼ均一に塑性変形が進行するようになる。図 7.50 は、図 7.49 にお

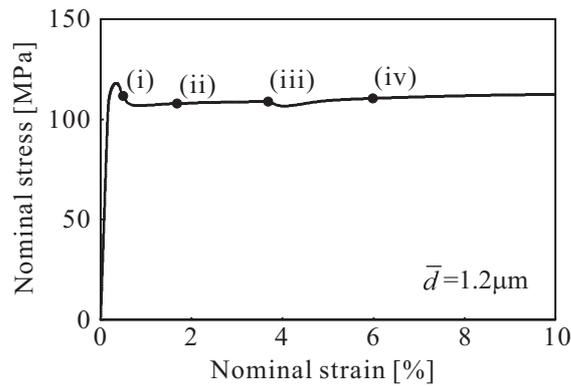


Fig. 7.48 Enlarged view of nominal stress versus nominal strain curve of $\bar{d} = 1.2\mu\text{m}$ in Fig. 7.40 when elongation percentage is below 10%

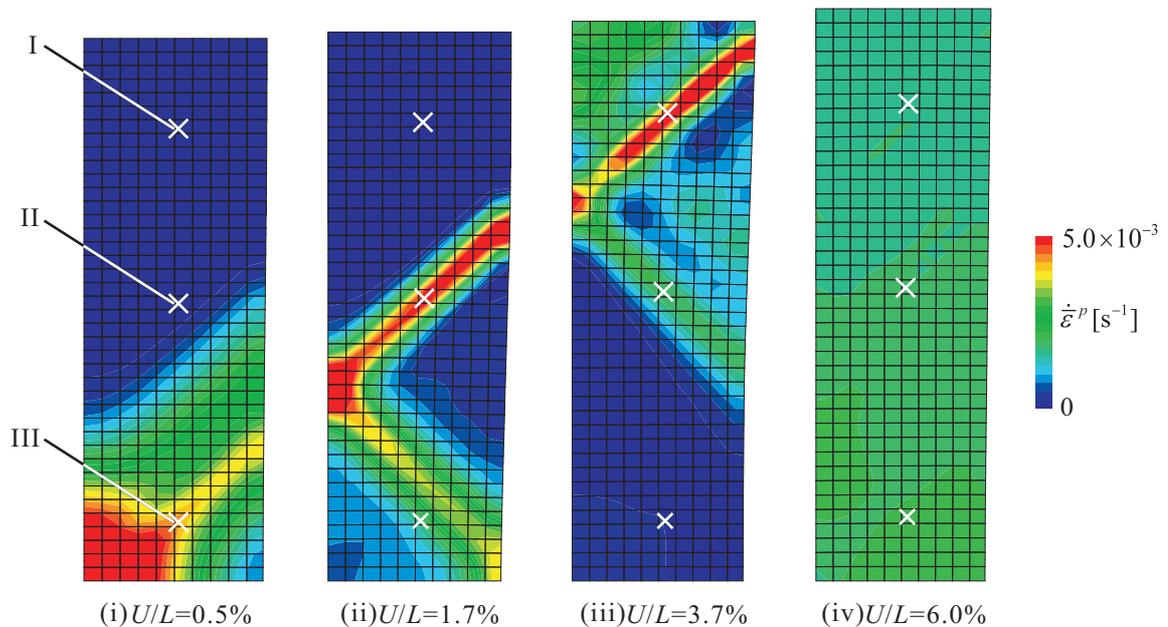


Fig. 7.49 Distributions of equivalent plastic strain rate in specimen corresponding to (i)-(iv) in Fig. 7.48 (Propagation of Lüders band, $\bar{d} = 1.2\mu\text{m}$)

いて×印で示した積分点I, IIおよびIIIに配置されたユニットセル内の全すべり速度分布である。試験片において塑性変形が顕著に起こっている領域では, ユニットセル内においても大きなすべり変形が起こっている。また, 巨視的な塑性変形が試験片においてほぼ一様になると, いずれのユニットセルにおいてもすべり速度の値は同程度となっている。

図7.51は, 図7.40における $\bar{d} = 1.2\mu\text{m}$ の曲線を拡大した図であり, 図7.52(a)は図7.51における点(i)~(iv)に対応する試験片内の相当塑性ひずみ速度分布である。 $\bar{d} = 1.2\mu\text{m}$ の場合には, 通常粒金属と同様にしばらくの間塑性変形が試験片内においてほぼ一様に進行する。その後, 応力が引張強度に達するとくびれが発生し, それに伴って塑性変形が局所化してい

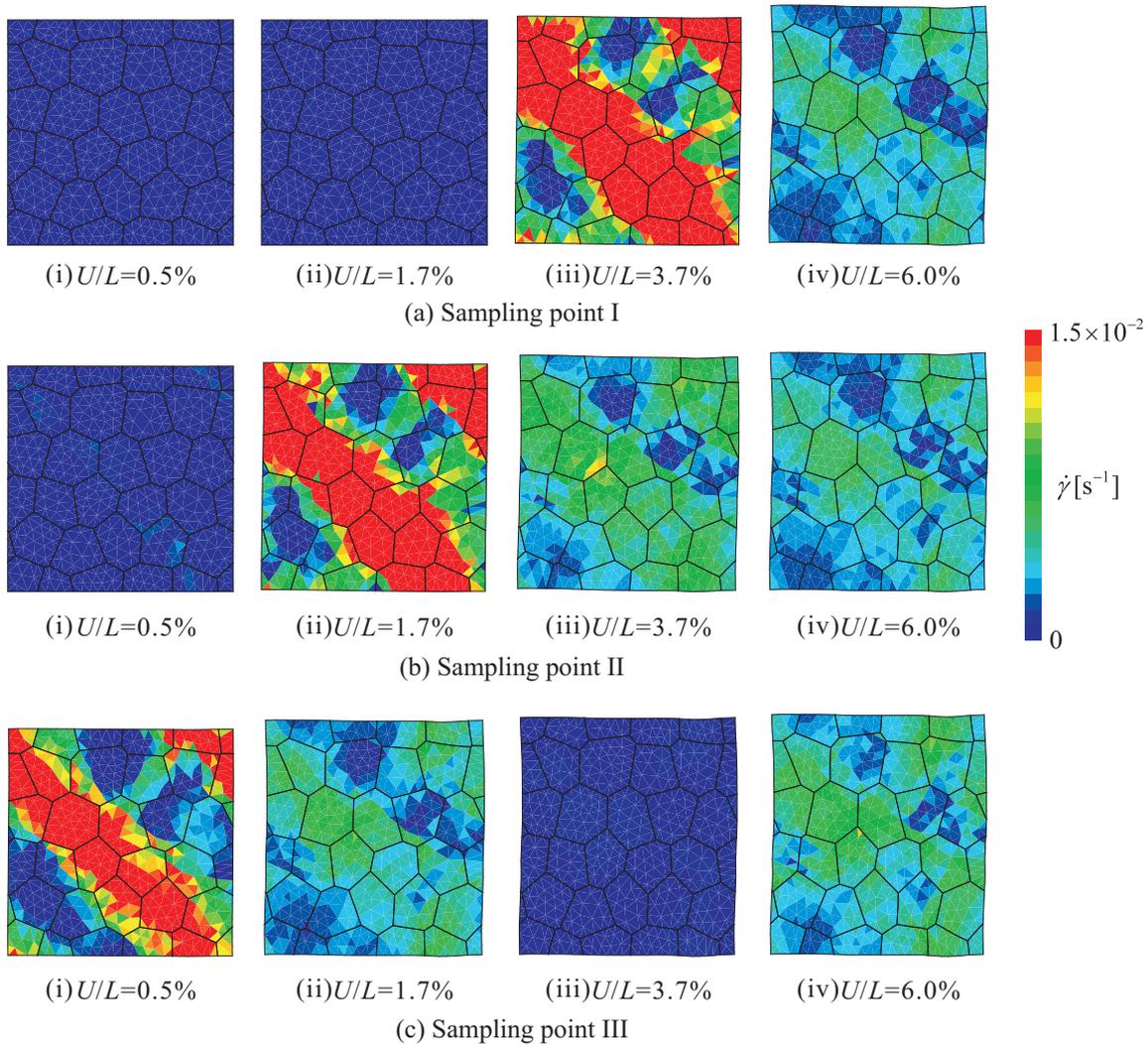


Fig. 7.50 Distributions of total slip rate in unit cells located at sampling points I, II and III in Fig. 7.49 ($\bar{d} = 1.2\mu\text{m}$)

ることが確認できる．また，図7.52(b)は図7.51における点(iv)に対応する試験片内の相当塑性ひずみ分布であり，試験片を横断するせん断帯が形成されていることが確認できる．そのため，試験片は同領域より破断に至ることが予測される．以上のように，粒径が比較的大きいFCC微細粒焼鈍材の場合には，降伏点降下の発現およびLüders帯の伝ば現象が起こることを除けば，通常のFCC金属と同様の变形挙動を示すことがわかる．

図7.53は，図7.40における $\bar{d} = 0.66\mu\text{m}$ の曲線を拡大した図であり，図7.54(a)は図7.53における点(i)~(iv)に対応する試験片内の相当塑性ひずみ速度分布である．図7.54(a)を見ると， $\bar{d} = 1.2\mu\text{m}$ の場合と同様に降伏点降下が起こった後に塑性変形の局所化領域が引張方向へ伝ば(Lüders帯の伝ば)していることが確認できる．しかしながら $\bar{d} = 1.2\mu\text{m}$ の場合とは異なり，Lüders帯の伝ばは試験片全域には至ることなく塑性変形の局所化が起こってしまう．また，図7.54(b)は図7.53における点(iv)に対応する試験片内の相当塑性ひずみ分布であり，試

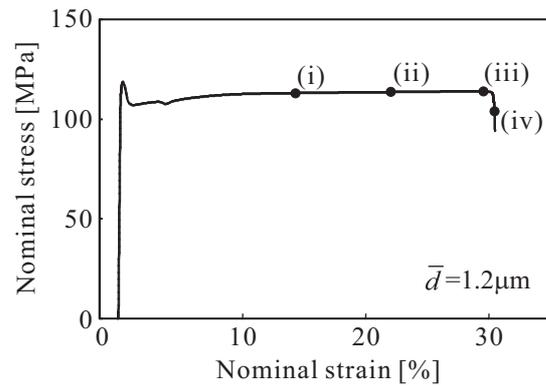


Fig. 7.51 Enlarged view of nominal stress versus nominal strain curve of $\bar{d} = 1.2\mu\text{m}$ in Fig. 7.40

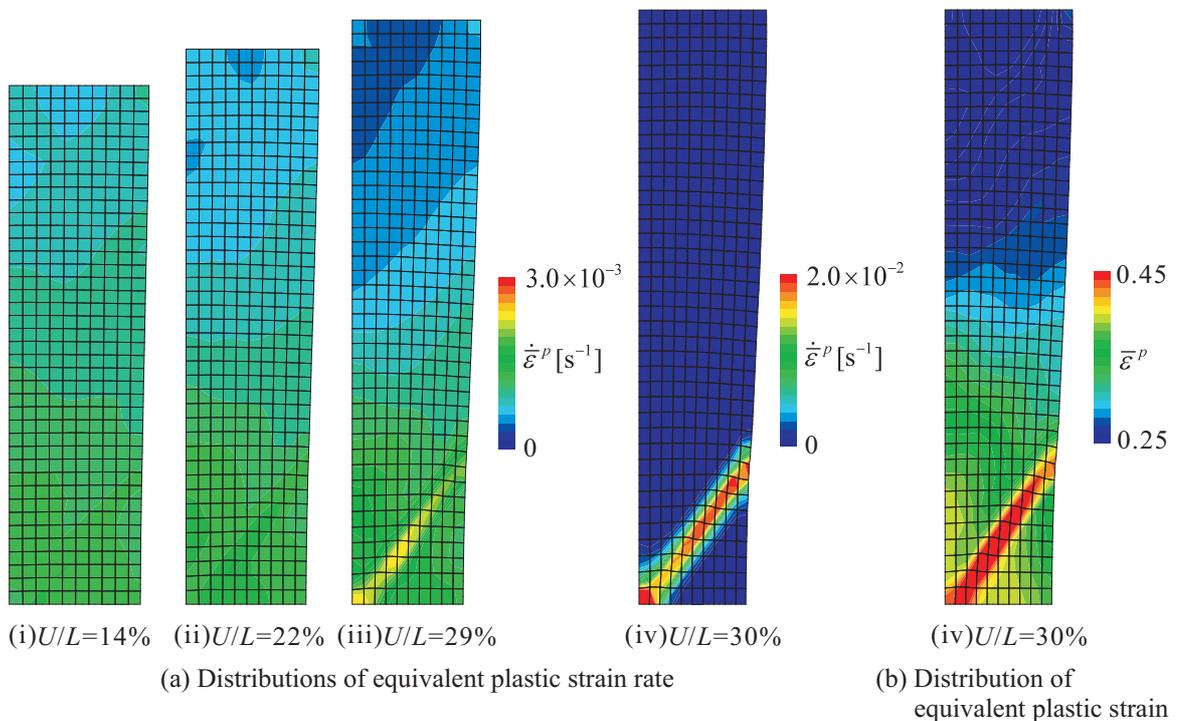


Fig. 7.52 Distributions of equivalent plastic strain rate and equivalent plastic strain in specimen (Plastic localization and generation of shear band, $\bar{d} = 1.2\mu\text{m}$)

試験片内にせん断帯が形成されていることが確認できるため、試験片は同領域より破断に至ることが予測される。

図 7.55 は、図 7.40 における $\bar{d} = 0.40\mu\text{m}$ の曲線を拡大した図であり、図 7.56(a) は図 7.55 における点 (i) ~ (iii) に対応する試験片内の相当塑性ひずみ速度分布である。図 7.56(a) を見ると、 $\bar{d} = 0.40\mu\text{m}$ の場合には Lüders 帯の伝ばが起こることなく、降伏点降下が発現した直後に材料は塑性不安定状態に陥り、すぐに塑性変形が局所化していることがわかる。また、図

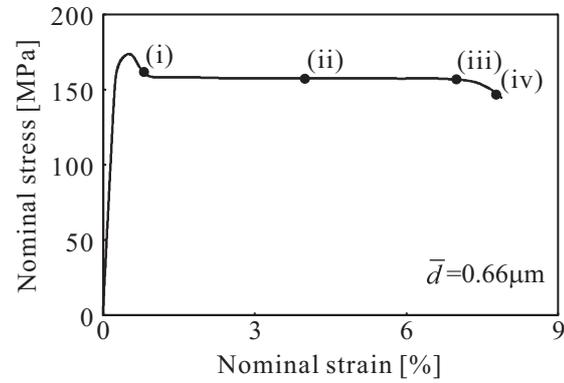


Fig. 7.53 Enlarged view of nominal stress versus nominal strain curve of $\bar{d} = 0.66 \mu\text{m}$ in Fig. 7.40

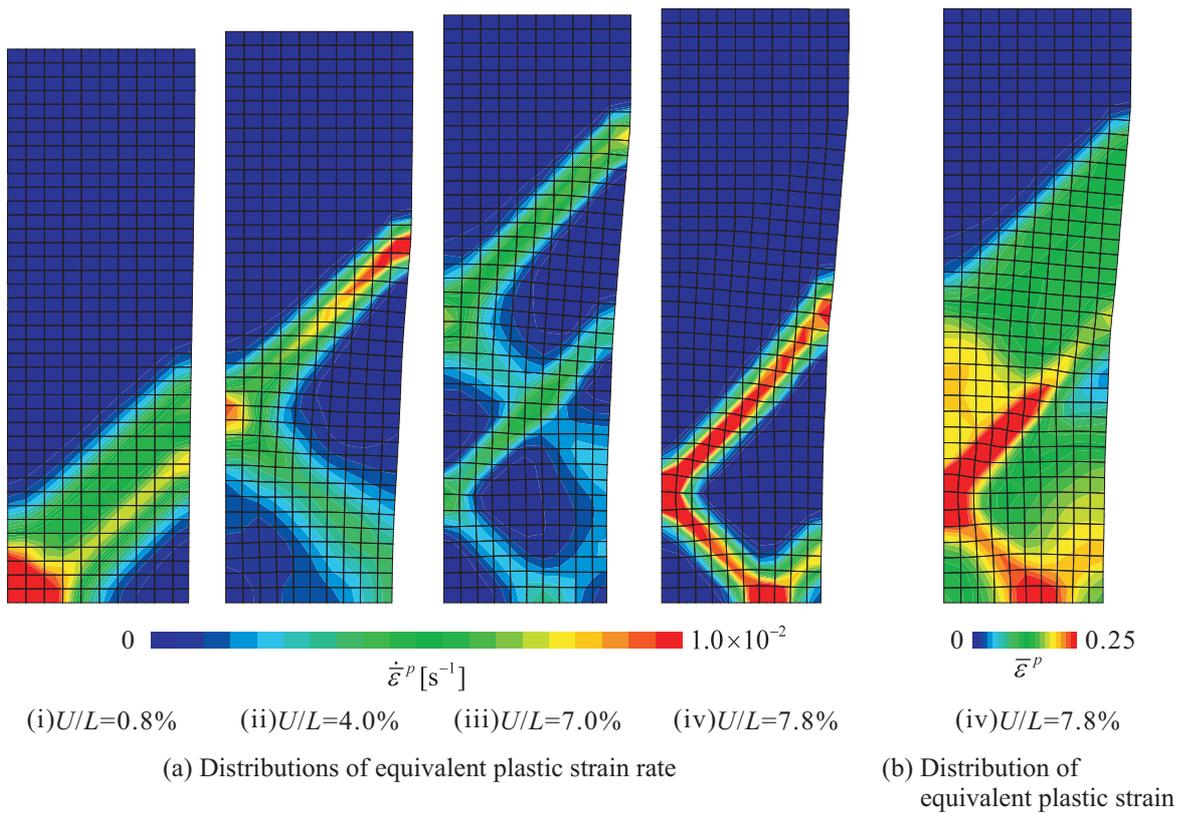


Fig. 7.54 Distributions of equivalent plastic strain rate and equivalent plastic strain in specimen (Propagation of Lüders band and plastic localization, $\bar{d} = 0.66 \mu\text{m}$)

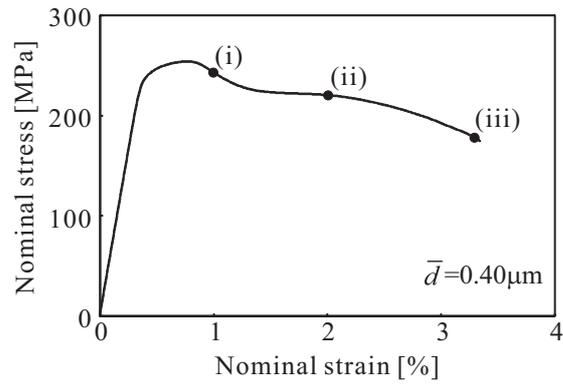


Fig. 7.55 Enlarged view of nominal stress versus nominal strain curve of $\bar{d} = 0.40\mu\text{m}$ in Fig. 7.40

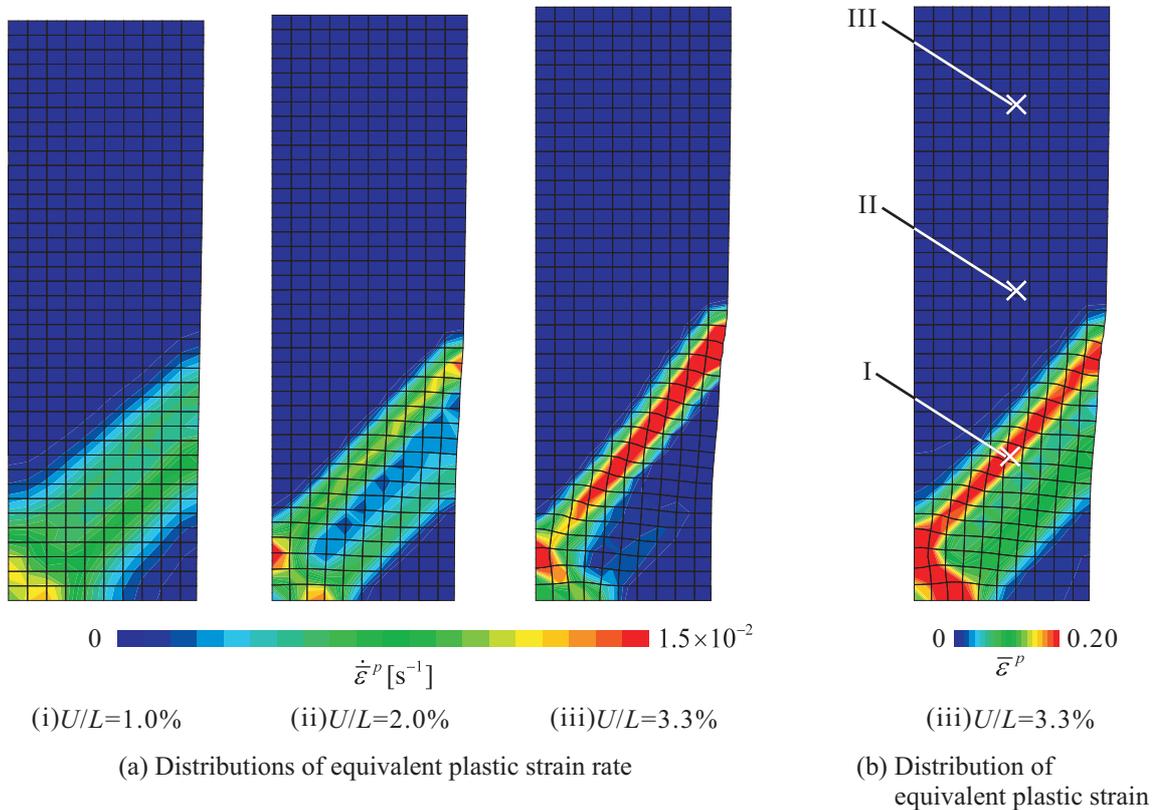


Fig. 7.56 Distributions of equivalent plastic strain rate and equivalent plastic strain in specimen (Plastic localization, $\bar{d} = 0.40\mu\text{m}$)

7.56(b)は図7.55における点(iii)に対応する試験片内の相当塑性ひずみ分布であり、この場合にも試験片内を横断するせん断帯が形成されていることが確認できるため、試験片は同領域より破断に至ることが予測される。図7.57は、図7.56(b)において×印で示した積分点I, IIおよびIIIに配置されたユニットセルにおける各量の分布であり、図7.57(a), (b)およ

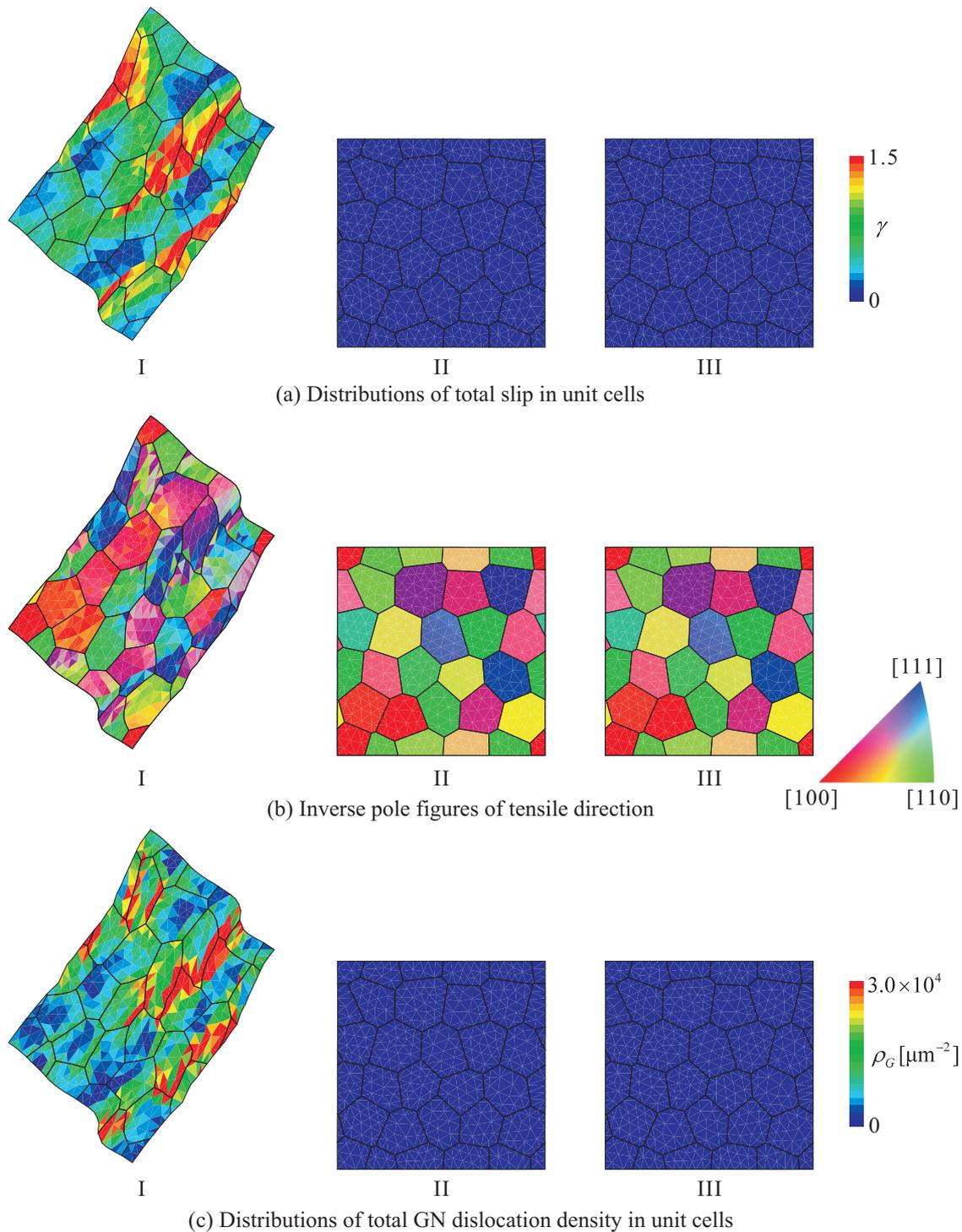


Fig. 7.57 Distributions of total slip, crystal orientation and total GN dislocation density in unit cells located at sampling points I, II and III in Fig. 7.56(b) ($\bar{d} = 0.40\mu\text{m}$, $U/L = 3.3\%$)

び(c)はそれぞれ全すべり分布, 結晶方位分布および全GN転位密度分布である. なお, 図7.57(b)は結晶座標系から見た試験片の引張方向(x_2 軸方向)を表す逆極点図である. 試験片における塑性ひずみの局所化領域[図7.56(b)における積分点I]では, ユニットセル全域において非常に大きなすべり変形が起こっている. さらに, 通常粒金属の場合[図7.47(b)参照]と同様に, いくつかの粒においてすべり変形が局所化しており, Micro-shear bandが発生していることがわかる. また図7.57(b)をみると, すべり変形が局所化している粒においては, その大きなすべり変形に起因して結晶方位が大きく変化しており, 結晶粒内においても大きな方位差が現われていることが確認できる. そのため, 図7.57(c)のように非常に多くのGN転位が粒界やMicro-shear band付近に堆積していることがわかる. 一方, 巨視的な塑性ひずみが小さい領域[図7.56(b)における積分点IIおよびIII]では, ユニットセルにおいてもすべり変形はほとんど生じておらず, GN転位もほとんど蓄積していない. 以上のように, 粒径の減少とともに転位も局所的に蓄積するようになり, 粒界やMicro-shear band付近の高転位密度領域はき裂の起点となる可能性がある. これらの結果から, 粒径のサブミクロン化に伴って, 結晶粒における微視的なすべり変形および転位蓄積も局所的に起こるようになるために材料の延性が急激に低下すると考えられる.

図7.58は, 図7.40における $\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$ の曲線を拡大した図であり, 図7.59(a)は図7.58における点(i)~(iv)に対応する試験片内の相当塑性ひずみ速度分布である. また, 図7.59(b)は図7.58における点(iv)に対応する試験片内の相当塑性ひずみ分布である. 強ひずみ加工のみが施されたUFGMを想定した $\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$ の場合には, 結晶粒内には十分に転位が含まれているために降伏点降下は発現せず, 巨視的な塑性変形は応力が引張強度に達するまで試験片内においてほぼ一様に進行している. その後, 試験片にくびれが発生し, 塑性変形の局所化に伴うせん断帯が試験片内に形成されていることが確認できる. また, 図7.59(b)と図7.56(b)を比較すると, $\bar{d} = 0.40\mu\text{m}$ の場合に比べて $\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$ の場合の方が試験片内において塑性変形が均一に進行する期間が長いこと, 塑性ひずみが発生している領域も広いことが確認できる. 図7.60は, 図7.59(b)において×印で示した積分点I, IIおよびIIIに配置されたユニットセルにおける各量の分布であり, 図7.60(a), (b)および(c)はそれぞれ全すべり分布, 結晶方位分布および全GN転位密度分布である. 試験片における塑性ひずみの局所

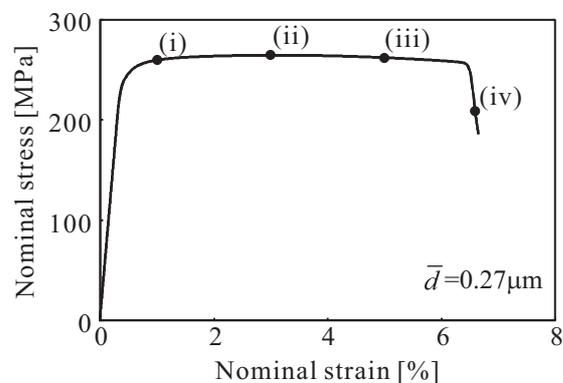


Fig. 7.58 Enlarged view of nominal stress versus nominal strain curve of $\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$ in Fig. 7.40

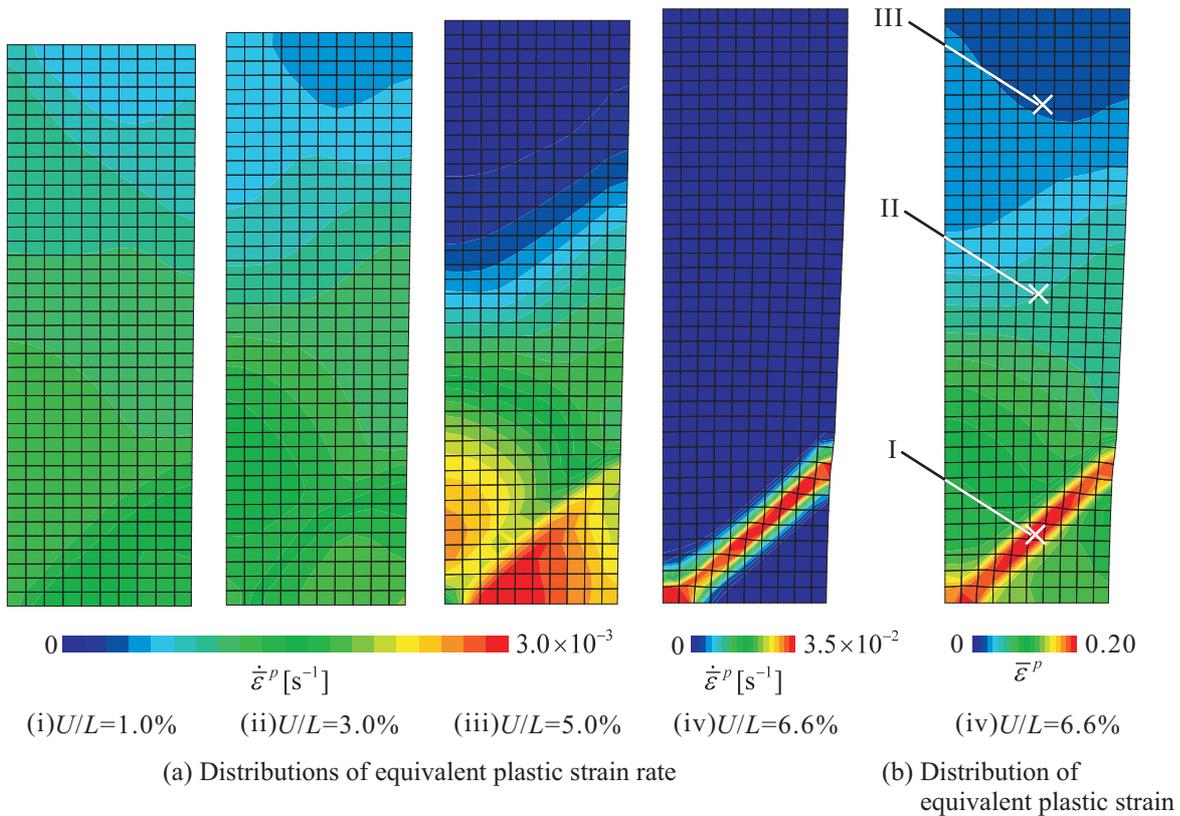


Fig. 7.59 Distributions of equivalent plastic strain rate and equivalent plastic strain in specimen ($\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$)

化領域 [図 7.59(b) における積分点 I] では, $\bar{d} = 0.40\mu\text{m}$ の場合と同様にユニットセル全域において非常に大きなすべり変形が起こっており, Micro-shear band の発生も確認できる. また図 7.60(b) をみると, すべり変形が局所化している粒において結晶方位が大きく変化しており, 結晶粒内においても大きな方位差が現われている. その結果, 図 7.60(c) のように非常に多くの GN 転位が粒界や Micro-shear band 付近に堆積していることがわかる. しかしながら, $\bar{d} = 0.40\mu\text{m}$ の場合とは異なり, 試験片内のせん断帯上以外の領域 [図 7.59(b) における積分点 II および III] においても結晶粒のすべり変形や粒界付近における GN 転位の蓄積が起こっていることが確認できる. このように, $\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$ の場合にはせん断帯上以外の領域においても変形を稼ぐことができるため, 結果として $\bar{d} = 0.40\mu\text{m}$ の場合に比べて延性が向上している. なお, Tsuji ら⁽¹¹⁾ による実験では, 図 1.5 のように $\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$ の場合においても降伏点降下に似た現象が起こっている. しかしながら, FCC-UFGM に関するその他の実験においては, 強ひずみ加工のみが施された UFGM は降伏点降下を示さずに, 強ひずみ加工後に焼鈍が施された UFGM に比べて延性が向上するという結果が多数得られている⁽¹²⁾⁽¹³⁾⁽²⁰⁾⁽²¹⁾. そのため, 本解析は Tsuji ら⁽¹¹⁾ の実験結果を完全には再現していないものの, 通常粒金属, 微細粒焼鈍材および強ひずみ加工のみが施された UFGM のそれぞれに特有の力学特性を十分に再現できているといえる. ここで, Tsuji ら⁽¹¹⁾ の実験において強ひずみ加工のみが施された $\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$ の場合にも降伏点降下に似た現象が起きていることから,

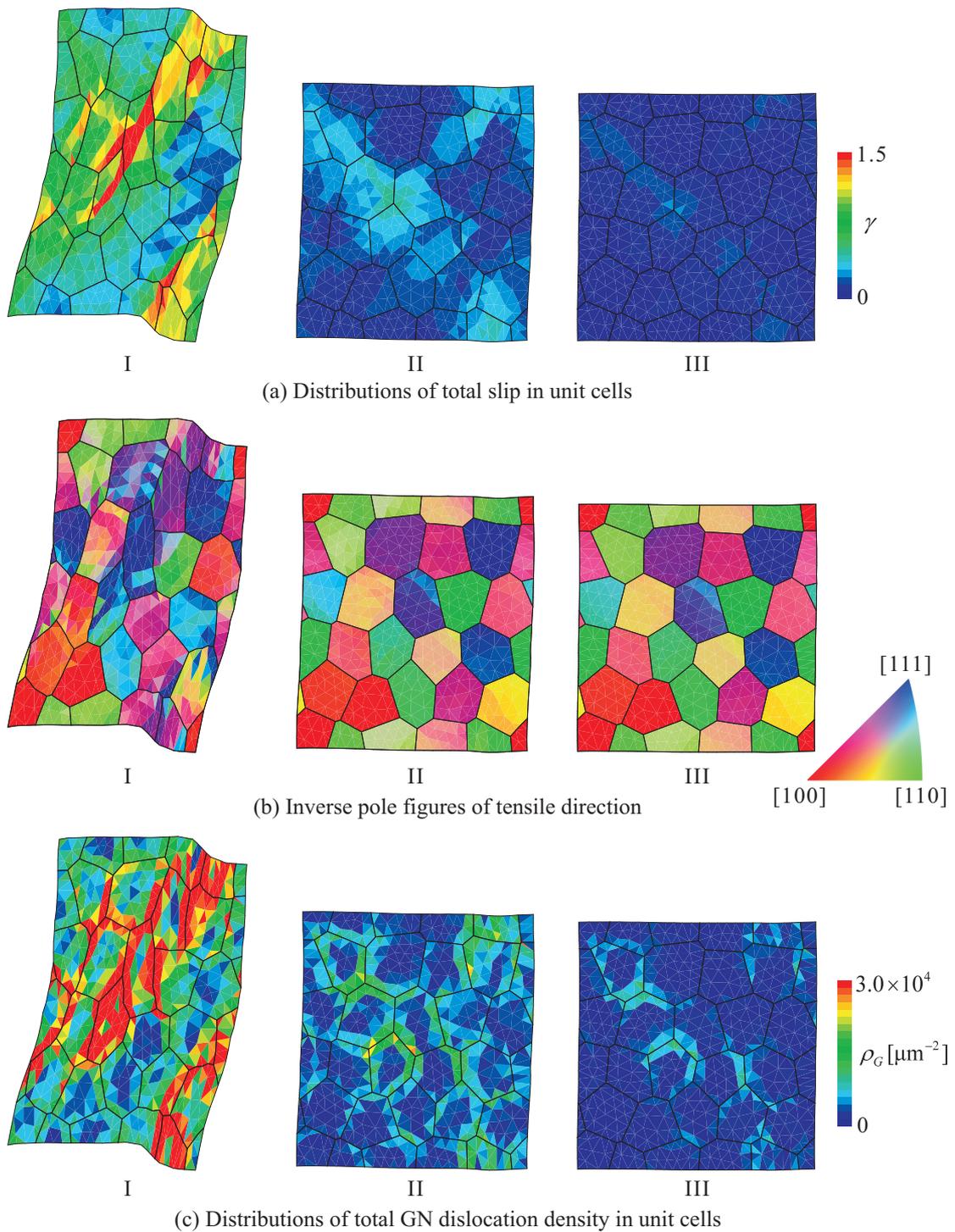


Fig. 7.60 Distributions of total slip, crystal orientation and total GN dislocation density in unit cells located at sampling points I, II and III in Fig. 7.59(b) ($\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$, $U/L = 6.6\%$)

この実験では焼鈍しなくても材料内に転位密度が極めて低い結晶粒が存在している可能性がある。このように転位が枯渇している粒が材料内に含まれている要因としては、以下のようなことが考えられる。一つは、強ひずみ加工により微細粒焼鈍材に比べて初期転位密度は非常に高い値となっているものの、結晶粒径が $\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$ と非常に小さいことに起因して、転位が枯渇している粒がいくらか材料内に含まれている可能性が挙げられる。また、その他の要因としては、強ひずみ加工中に塑性仕事による熱が発生し、その発熱に起因して結晶粒内で動的再結晶が起こるために転位密度が低下し、UFGMが創製された時点で材料内には転位密度が極めて低い結晶粒がすでに存在していることも考えられる。

本研究で比較対象としている Tsuji ら⁽¹¹⁾の実験では、薄板の試験片を用いているため、平面ひずみ問題ではなく平面応力問題を解く方が望ましい。しかしながら、平面応力条件による解析では、 J_2 流れ則のように本来はせん断帯を再現できない材料モデルを用いた場合にも、薄板という構造に依存したせん断帯が試験片に発生することがある⁽¹⁰⁶⁾。一方で、端面をせん断自由 (shear free) にした平面ひずみ問題の場合にはこのようなことが起こることはなく、再現されるせん断帯は材料モデルのみに起因するものであることを確認できる。本研究では、従来とは異なる新たな材料モデルを構築しているため、試験片内に発生するせん断帯が本モデルのみに依存するものであることを確認するために、平面ひずみ問題を採用している。また、Tsuji ら⁽¹¹⁾の実験では、薄板の試験片を用いているのに対し、Yu ら⁽¹²⁾の実験では丸棒試験片を使用している。これらの実験結果を比較すると、粒径のサブミクロン化に伴う初期降伏応力の増加および延性の急激な低下、微細粒焼鈍材における降伏点降下現象および Lüders 帯の伝ば、さらには強ひずみ加工を施した後の焼鈍処理による材料の延性の低下などが同様に観察されている。そのため、上記の UFGM に特有な材料特性は巨視的な試験片の形状に依存するものではなく、微視的な結晶粒場や転位場の挙動に起因すると考えられる。そのため、平面ひずみ問題においても同様の現象が発現することが予想される。

以上の結果から、本研究で構築したトリプルスケール転位-結晶塑性モデルにより、単軸引張試験において結晶粒径が通常粒から超微細粒サイズの範囲にある FCC 金属に発現する力学挙動を統一的に表現できることがわかる。また、初期平均粒径が $\bar{d} = 0.40, 0.66, 1.2\mu\text{m}$ である FCC 微細粒焼鈍材の場合には、材料が降伏した直後に降伏点降下現象が発現するが、降伏点降下が起きた後の試験片の変形挙動は初期平均粒径によって異なるわかる。また、粒径のサブミクロン化に伴って材料は塑性不安定状態に陥りやすくなるため、通常粒金属に比べて均一変形可能な塑性ひずみ限界が低下する。その後、不均一変形さらには塑性変形の局所化が進行するため、粒径がサブミクロンオーダーである FCC 微細粒焼鈍材の延性は急激に低下すると考えられる。さらに、強ひずみ加工のみが施された FCC-UFGM を想定した $\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$ の場合の解析結果と焼鈍処理も施された FCC-UFGM を想定した $\bar{d} = 0.40\mu\text{m}$ の場合の解析結果を比較すると、試験片内において塑性変形が均一に進行できる期間は $\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$ の場合の方が長く、結果として延性が向上することがわかる。これは、結晶粒内に含まれる転位の量に起因していることが考えられる。 $\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$ (強ひずみ加工のみが施された UFGM)の場合には、初期状態において材料内の結晶粒には十分転位が含まれており、これに起因して材料全域における均一変形の進行が可能となる。一方、 $\bar{d} = 0.40\mu\text{m}$ (強ひずみ加工後に焼鈍処理が施された UFGM)の場合には、結晶粒内において転位が枯渇しているために結晶の臨界分解せん断応力は非常に高い値となっている。それらの結晶粒

の中で構造上せん断応力が作用しやすい粒において塑性変形が開始し、変形の進行とともに粒内転位密度が臨界転位密度に達することで結晶の流れ応力が減少する。これらの粒では、その後の変形の進行に伴う転位蓄積に起因して加工硬化が起こるが、その他の領域にある結晶粒の臨界分解せん断応力は依然として非常に高いため、塑性変形が生じている結晶粒の方が変形しやすい状態にあることが予想される。結果として、構造上塑性変形が起こりやすい領域において塑性変形が集中的に進行し、塑性変形の局所化が起こりやすくなるために材料の延性が低下すると考えられる。上述したように、焼鈍処理によってUFGMの延性が低下するという傾向を示す実験結果が多数報告されている。特にHuangら⁽²¹⁾の実験結果によれば、強ひずみ加工後に焼鈍処理が施されたFCC-UFGMに、結晶粒内の転位密度を増加させるために再度冷間圧延を実施することで、UFGMの延性が向上することが明らかとなっている。このような実験結果からも、本解析によって得られた結果および考察は物理的に妥当であるといえる。

本モデルには、破断のクライテリオンが導入されていないため、本解析では厳密な意味での破断予測を行うことはできない。しかしながら、塑性加工の分野では材料内にせん断帯が発生した時点を塑性加工限界としており、その直後に材料は塑性変形が局所化した領域より破断に至ることが知られている。そのため、本解析のように塑性不安定現象に伴う巨視的な公称応力の急激な減少およびせん断帯の発生を再現できれば、金属材料が破断する時期および破断に至る可能性が高い部位を予測することが可能となる。さらに、本解析の場合には、実際の材料引張試験の最中に観察することが非常に困難である微視的な結晶粒スケールおよび転位スケールにおける材料挙動も追跡できるため、巨視的な塑性変形の局所化領域付近における結晶粒構造の変形挙動や転位の蓄積状況も同時に調べることが可能となる。そのため、本研究を今後応用し、転位挙動をさらに詳細に検討することで、金属破壊の起点となる微視的な現象を解明することが期待できる。さらに、他の計算力学的研究と同様に、本研究は新たな現象を解明するためのコストの低減にもつながるといえる。

第8章

結 言

8.1 本論文の結言

本研究では、FCC超微細粒金属におけるミクロからマクロにわたる力学挙動を統一的に表現することを目的とし、金属材料の微視的な転位構造、結晶粒構造および巨視構造という3階層を橋渡しするトリプルスケール転位-結晶塑性モデルを構築した。その際、Burgers回路内の孤立転位および転位対の密度の表現には、結晶塑性論の体系に適合するように定義されたGN転位密度およびGN不適合度を採用し、結晶の硬化則へのそれぞれの転位密度の導入方法について検討した。また、微細粒焼鈍材には転位密度が極めて低い結晶粒が存在することを考慮し、このような粒において流れ応力が変形の初期段階において一時的に増加することを表現するために、転位源としての粒界の役割を考慮した新たな臨界分解せん断応力モデルを提案した。さらに、結晶塑性均質化理論により結晶粒構造と巨視構造の橋渡しを行った。

以上のモデルを用いて、転位組織-結晶粒構造-巨視的試験にまたがるマルチスケール転位-結晶塑性FEM解析を強ひずみ加工のみが施された超微細粒金属、微細粒焼鈍材および通常粒金属を想定したFCC多結晶体に対して実施し、単軸引張試験においてそれぞれの金属材料に特有の力学特性を数値解析的に再現した。また解析結果に基づいて、超微細粒金属における試験片レベルでの巨視的降伏および結晶粒レベルでの微視的降伏状況について考察するとともに、粒径のサブミクロン化に伴うFCC金属材料の急激な延性低下のメカニズムについて検討した。

以上の検討から以下の結言を得た。

- (1) 本研究で構築したトリプルスケール転位-結晶塑性モデルにより、結晶粒径が通常粒から超微細粒サイズに至る広い範囲にあるFCC金属に発現する力学特性を統一的に表現できる。また、GN結晶欠陥を用いる場合には、転位対密度をGN不適合度で表現するとともに、結晶の加工硬化に寄与する転位密度にはGN不適合度とGN転位密度の両方を考慮し、可動転位の運動の障害に寄与する転位密度にはGN不適合度のみを反映させるのが妥当である。
- (2) 転位源としての粒界の役割を考慮した新たな臨界分解せん断応力モデルを用いることで、結晶粒の微細化に伴う初期降伏応力の増加および延性の急激な低下といった超微細粒からなるマクロな試験片に現れる寸法効果のみならず、FCC微細粒焼鈍材に発

現する降伏点降下現象および Lüders 帯の伝ばを数値解析的に再現できる。

- (3) FCC 超微細粒金属の場合，塑性流れが開始すると巨視的には材料全体に降伏前マイクロひずみ (Pre-yield micro strain) が発生するが，微視的には降伏していない結晶粒が存在する。また，粒径のサブミクロン化に伴って微視的な粒降伏は起こりにくくなるが，応力が 0.2% 耐力に達すると材料内のほぼ全ての粒が降伏するため，超微細粒金属においても 0.2% 耐力を巨視的な初期降伏点とみなすのは妥当である。
- (4) FCC 微細粒焼鈍材は，粒径のサブミクロン化に伴って塑性不安定状態に陥りやすくなるため，均一変形可能な塑性ひずみ限界が低下し，塑性変形が局所化することで延性が低下する。一方，強ひずみ加工のみが施された超微細粒金属は，初期状態において結晶粒内に十分転位を含んでいるため，強ひずみ加工後に焼鈍が施された超微細粒金属に比べて均一変形しやすく，材料の延性が向上する。また，粒径のサブミクロン化に伴って微視的な結晶のすべり変形や転位蓄積も局所的に起こるようになる。

8.2 今後の課題と展開

最後に，本研究に残された課題および今後の展開について述べる。

8.2.1 ナノスケールシミュレーションによる検討

本研究では，結晶粒内の転位枯渇状態や転位源としての粒界の役割といった微視的な材料挙動に基づいて転位および結晶粒スケールにおけるモデリングを行ったが，転位場の表現に連続量である転位密度を用いているため，離散的な転位の挙動を表現するまでには至っていない。そのため，臨界転位密度 [式 (4.54)] や粒界転位源の活動に必要なせん断応力 [式 (4.55)] を求める際に必要となる数値パラメータのように，現段階では依然として現象論的に決定しなければならない数値係数が存在している。近年では，離散転位動力学法⁽¹⁰⁹⁾⁽¹¹⁰⁾ や分子動力学法⁽⁶²⁾⁽⁶³⁾⁽⁶⁴⁾ などを用いた計算力学的研究が盛んに行われており，本研究で扱う転位スケールよりさらに微視的なスケールにおける転位の挙動に関するシミュレーションを行うことが可能となっている。このようなシミュレーションを手掛かりに，粒界からの転位の発生メカニズム，粒界から放出された転位同士の相互作用，さらには粒界転位源と粒内転位源の活動の関連性を解明することで，現在現象論的に決めているパラメータの値を物理的に決定できることが期待され，本モデルの精密化にもつながると考えられる。

8.2.2 平面応力問題および3次元問題に関する検討

平面解析では，本研究で採用した平面ひずみ条件が最も拘束が強い条件であり，平面応力条件が最も拘束が弱い条件となる。さらに，実際の3次元問題はこれら2つの条件の間に位置づけされる。本研究により，巨視的な試験片に発生するせん断帯は本モデルのみに起因するものであることを確認できたため，今後は実際の実験条件に近い平面応力解析，さらには3次元解析を行い，実験結果との比較検討を行う必要がある。

8.2.3 複雑な変形状態を扱う問題への応用

粒界は、転位運動の障壁や転位の発生源の他に、転位を吸い込むシンクとしての役割も果たすことが明らかとなっている⁽¹¹¹⁾。特にUFGMの場合には、粒界が材料内を占める割合が非常に大きいため、これらの現象が材料内で起こる可能性が極端に上昇する。また、粒界に蓄積するGN転位は内部応力場(背応力)を形成することが知られており⁽³³⁾、この内部応力場を考慮することで繰り返し負荷問題において重要となるBauschinger効果を表現できることが明らかとなっている⁽⁴⁰⁾。本研究では、UFGMの挙動をモデル化する上で、転位を吸い込むシンクとしての粒界の効果やGN転位のこう配が形成する背応力の情報などは考慮していないが、本研究で扱っているような試験片の単軸引張試験を想定した単純な変形問題においては、本モデルのみで超微細粒金属の示す巨視的な力学応答を数値解析的によく再現することは可能となる。しかしながら、繰り返し負荷問題や多軸負荷問題など、さらに複雑な変形状態を扱う際には、上記現象の影響を無視できない可能性があり、このような検討は課題として残されている。本研究を工業的に応用するためには、UFGMが様々な場面で使用されることを念頭に置く必要があり、このような複雑な変形状態を扱う問題に関する検討は今後必要不可欠であると考えられる。

ここで、GN転位密度の一次こう配を用いて表される背応力モデル⁽⁴⁰⁾は、単結晶や少数の結晶で構成される材料のように、材料内に粒界をほとんど含まない場合におけるBauschinger効果を再現する際には必要であると考えられる。しかしながら、本研究で扱うような多結晶問題の場合には、解析モデル内に多くの粒界が存在しており、本モデルではその粒界に蓄積するGN転位密度の情報を結晶の硬化則へ導入している。そのため、GN転位のこう配が形成する背応力と同様の効果が、本モデルには陰に含まれていると考えられる。そこで、本モデルのみを用いて、繰返し負荷および単軸圧縮を想定した解析を行った場合に得られる巨視構造の真応力-真ひずみ線図を図8.1に示す。ここでは、マクロ構造は一様変形すると仮定し、通常粒金属を想定して初期平均粒径は $\bar{d} = 10\mu\text{m}$ としている。ユニットセルの形状、初期結晶方位、材料定数および数値パラメータに関しては、7.5節の解析と同様のものを用いている。図8.1を見ると、引張りおよび圧縮における初期降伏応力 σ_y および σ'_y

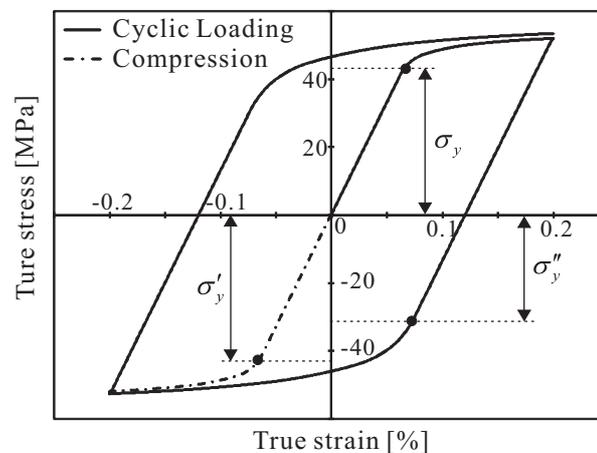


Fig. 8.1 Bauschinger effect

の値はほぼ等しくなっており，0.2%の引張りを与えた後に圧縮することで得られる後続降伏点における応力値 σ_y'' は σ_y および σ_y' に比べて低下していることがわかる．以上の結果から，多結晶解析の場合には本モデルのみを用いることで繰返し負荷を与えた際に現れるBauschinger効果を表現できることが確認できる．そのため，Bauschinger効果が表れるような多結晶金属の低サイクル疲労問題に関しては，本モデルにより計算力学的な検討を行うことができると考えられる．一方で，弾性変形域の範囲にある応力レベルで疲労破壊が生じるような高サイクル疲労問題に関しては，今後さらに検討を行う必要がある．なお，7.5節(図7.42)で検討したように，金属材料は弾性限付近では降伏前マイクロひずみ(Pre-yield micro strain)がすでに発生しているため，非常に微小ではあるが，材料は塑性変形していることがわかる．そのため，負荷の振幅が非常に小さい高サイクル疲労問題の場合においても，結晶粒内では転位運動が起こっていると考えられる．

8.2.4 複雑な形状を有する構造物への応用

本研究で行ったトリプルスケール転位-結晶塑性解析では，マクロな解析対象の形状は試験片を想定しているために非常に単純であるが，実際に使用される機械製品や構造物は複雑な形状をしているものがほとんどである．本モデルを実際の機械や構造物と同様の形状を有する解析モデルに適用して構造解析を行うことができれば，従来の解析で得られる巨視的な応力分布やひずみ分布のみならず，微視的な結晶粒内の応力分布やすべり分布，さらには結晶粒内の転位の蓄積状況を調べることができると考えられる．そのため，機械製品や構造物の設計に本研究を応用することで，従来に比べてより精密な安全性の評価を行うことが期待できる．

8.2.5 BCCおよびHCP金属への応用

本研究では，超微細粒金属の中でも特に純AlのようなFCC超微細粒金属を対象として材料モデリングを行っているが，今日ではフェライトや鉄鋼材料を代表とするBCC金属およびMgやTiを代表とするHCP金属も工業的に幅広く使用されている．BCC金属やHCP金属はFCC金属とは異なり，すべり系の数が多く，変形機構が非常に複雑であり，さらにそれぞれの結晶構造に起因して異方性が非常に強いといった特徴を有しているために，数値解析的に扱うことが困難となる．そのため，これらの金属に関する計算力学的研究は少ないのが現状である．そこで，本モデルをこれらの結晶構造に対応する形に拡張し，今後も工業材料として幅広く使用されていくBCC金属やHCP金属の材料特性に関する研究へ応用することも期待される．

8.2.6 Bimodal構造を有する金属への応用

通常のFCC金属の場合，結晶粒を超微細化することで非常に高い強度が得られるが，一方で本来持っている延性が失われてしまう．近年，FCC-UFGMの強度を損なうことなく延性を高める方法に関する研究が盛んに行われており，超微細粒と比較的粒径の大きい微

細粒が混在する Bimodal 構造を金属材料に導入する研究が注目を集めている⁽¹¹²⁾⁽¹¹³⁾⁽¹¹⁴⁾。しかしながら、Bimodal 金属は混在させる粒径の比率および体積比によって、その力学特性は大きく異なることが知られており、現段階では望まれる材料特性を得るために実験による試行錯誤を繰り返しているのが現状である。そのため、数値解析により Bimodal 構造の特徴と得られる材料応答の関係を予測することができれば、工業材料として実用に耐え得る UFGM の創製方法の開発を計算力学的に支援できるようになると考えられる。

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、本塾大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻マルチディプリナリ・デザイン科学専修志澤一之教授の御指導の下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より賜りました熱心な御指導および御鞭撻に対し心より厚く御礼申し上げます。

本論文の作成に当たり、御査読いただき、また有益な御討論ならびに貴重な御助言を賜りました本塾理工学部機械工学科 小茂鳥潤教授、高野直樹教授および大宮正毅准教授に深謝いたします。

本研究の遂行にあたって、多大なる御協力、熱心に御議論いただいただけでなく、公私両面において御助言いただきました佐賀大学理工学部機械システム工学科 只野裕一准教授および日本原子力研究開発機構原子力基礎工学研究部門 青柳吉輝博士に深く御礼申し上げます。

同期としてこれまでの5年間の研究生生活において苦楽を共にし、御支援いただきました本塾大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻 村松眞由氏に対して、心から感謝の意を表します。また、これまでに共に研究室生活を過ごしました当時本塾大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻 灘裕統氏、味岡秀恭氏、海宝寿実雄氏、杉田賢太郎氏、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、水谷賢治氏、石川毅氏、佐久間正寿氏、菅原英夫氏、武文智洋氏、大森崇裕氏、小林遼太郎氏、秦真浩氏および宮越亮丞氏、本塾大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻 鈴木航氏、中重斉氏、水澤文彦氏、Stephan Maël氏、小野貴裕氏、近藤瑠歩氏、佐藤慎一氏および三根啓吾氏、当時本塾理工学部機械工学科 岡野陽祐氏、杉町太郎氏、麻生登喜子氏、小藤真樹子氏、塚野拓朗氏、森一真氏、佐藤麻奈氏および望月慎太郎氏ならびに本塾理工学部機械工学科 石樽達也氏、上田亮氏、長津輝氏、能條和成氏、林英輝氏および原英之氏からの御支援は、著者の研究室生活を実り多きものにしてくれました。この場を借りて心から感謝申し上げます。特に、本研究に御協力いただきました海宝寿実雄氏、佐藤駿次氏、岡野陽祐氏、森一真氏、小野貴裕氏に心より感謝いたします。

末筆ながら、著者をここまで養い、常に一番身近で支えてくれた両親、家族に深く感謝いたします。

2011年2月 矢上台の研究室にて

著者

黒澤瑛介

参考文献

- (1) Hull, D. and Bacon, D.J., *Introduction to Dislocations: Fourth Edition*, (2001), Butterworth Heinemann.
- (2) Valiev, R.Z., Krasilnikov, N.A. and Tsenev, N.K., “Plastic Deformation of Alloys with Submicron-grained Structure”, *Materials Science and Engineering A*, Vol. 197, (1991), pp. 35–40.
- (3) 辻伸泰, “鉄鋼材料の結晶粒超微細化”, *鉄と鋼*, Vol. 88, (2002), pp. 359–369.
- (4) 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, (2004), pp. 2960–2965.
- (5) 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, (2004), pp. 2966–2973.
- (6) 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, (2005), pp. 1737–1749.
- (7) Azushima, A., Kopp, R., Korhonen, A., Yang, D.Y., Micari, F., Lahoti, G.D., Groche, P., Yanagimoto, J., Tsuji, N., Rosochowski, A. and Yanagida, A., “Severe Plastic Deformation (SPD) Processes for Metals”, *CIRP Annals - Manufacturing Technology*, Vol. 57, (2008), pp. 716–735.
- (8) 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, (1999), pp. 579–583.
- (9) 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.
- (10) Hayashi, T., Torizuka, S., Mitsui, T., Tsuzaki, K. and Nagai, K., “Creation of Low Carbon Steel Bars with Fully Fine Ferrite Grain Structure through Warm Grooved Rolling”, *Current Advances in Materials and Processes*, Vol. 12, (1999), pp. 385–388.
- (11) Tsuji, N., Ito, Y., Saito, Y. and Minamino, Y., “Strength and Ductility of Ultrafine Grained Aluminum and Iron Produced by ARB and Annealing”, *Scripta Materialia*, Vol. 47, (2002), pp. 893–899.
- (12) Yu, C. Y., Kao, P. W. and Chang, C. P., “Transition of Tensile Deformation Behaviors in Ultrafine-Grained Aluminum”, *Acta Materialia*, Vol. 53, (2005), pp. 4019–4028.
- (13) Kamikawa, N., Huang, X., Tsuji, N. and Hansen, N., “Strengthening Mechanisms in Nanostructured High-purity Aluminum Deformed to High Strain and Annealed”, *Acta Materialia*, Vol. 57, (2009), pp. 4198–4208.
- (14) 伊藤良規・辻伸泰・齊藤好弘・宇都宮裕・左海哲夫, “超微細粒アルミニウムの焼鈍に伴う組織と機械的性質の変化”, *日本金属学会誌*, Vol. 64-6, (2000), pp. 429–437.
- (15) Chokshi, A.H., Rosen, A., Karch, J. and Gleiter, H., “On the Validity of the Hall-Petch Relationship in Nanocrystalline Materials”, *Scripta Metallurgica*, Vol. 23, (1989), pp. 1679–1684.
- (16) 黒木剛司郎・大森宮次郎・友田陽, *金属の強度と破壊* 第2版, (1986), 森北出版.

- (17) Cottrell, A.H., “Theory of Dislocations”, *Progress in Metal Physics*, Vol. 4, (1953), pp. 205–264.
- (18) Johnston, W.G. and Gilman, J.J., “Dislocation Velocities, Dislocation Densities, and Plastic Flow in Lithium Fluoride Crystals”, *Journal of Applied Physics*, Vol. 30, (1959), pp. 129–144.
- (19) 木村宏, 材料強度の考え方, (1998), アグネ技術センター.
- (20) Huang, X., Hansen, N. and Tsuji, N., “Hardening by Annealing and Softening by Deformation in Nanostructured Metals”, *Science*, Vol. 312, (2006), pp. 249–251.
- (21) Huang, X., Kamikawa, N. and Hansen, N., “Increasing the Ductility of Nanostructured Al and Fe by Deformation”, *Materials Science and Engineering A*, Vol. 493, (2008), pp. 184–189.
- (22) Roters, F., Eisenlohr, P., Hantcherli, L., Tjahjanto, D.D., Bieler T.R. and Raabe, D., “Overview of Constitutive Laws, Kinematics, Homogenization and Multiscale Methods in Crystal Plasticity Finite-element Modeling: Theory, Experiments, Applications”, *Acta Materialia*, Vol. 58, (2010), pp. 1152–1211.
- (23) Taylor, G.I., “Plastic Strain in Metals”, *Journal of the Institute of Metals*, Vol. 62, (1938), pp. 307–324.
- (24) Peirce, D., Asaro, R.J. and Needleman, A., “An Analysis of Nonuniform and Localized Deformation in Ductile Single Crystals”, *Acta Metallurgica*, Vol. 30, (1982), pp. 1087–1119.
- (25) Peirce, D., Asaro, R.J. and Needleman, A., “Material Rate Dependence and Localized Deformation in Crystalline Solids”, *Acta Metallurgica*, Vol. 31, (1983), pp. 1951–1976.
- (26) Ashby, M.F., “The Deformation of Plastically Non-homogeneous Materials”, *Philosophical Magazine*, Vol. 21, (1970), pp. 399–424.
- (27) Kocks, U.F., “Laws for Work-hardening and Low-temperature Creep”, *Transactions of the ASME, Journal of Engineering Materials and Technology*, Vol. 98, (1976), pp. 76–85.
- (28) Teodosiu, C., “A Dynamic Theory of Dislocations and Its Applications to the Theory of the Elastic-plastic Continuum”, *Fundamental Aspects of Dislocation Theory*, Vol. 317-II, (1970), pp. 837–876.
- (29) Essmann, U. and Mughrabi, H., “Annihilation of Dislocations During Tensile and Cyclic Deformation and Limits of Dislocation Densities”, *Philosophical Magazine*, Vol. 40, (1979), pp. 731–756.
- (30) 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, (1996), pp. 1765–1798.
- (31) 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, (1994), pp. 475–487.
- (32) 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, A編, Vol. 69, No. 679(2003), pp. 523–529.
- (33) Evers, L.P., Brekelmans, W.A.M. and Geers, M.G.D., “Non-local Crystal Plasticity Model with Intrinsic SSD and GND Effects”, *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 52, (2004), pp. 2379–2401.
- (34) Ohashi, T., “Crystal Plasticity Analysis of Dislocation Emission from Micro voids”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 21, (2005), pp. 2071–2088.
- (35) 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, (2005), pp. 1797–1814.
- (36) 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*, Vol. 23, (2007), pp. 1022–1040.
- (37) Kröner, E., *Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen*, (1958), Springer-Verlag.

- (38) 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.
- (39) Gurtin, M.E., “A Gradient Theory of Single-crystal Viscoplasticity that Accounts for Geometrically Necessary Dislocations”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 50, (2002), pp. 5–32.
- (40) Kuroda, M. and Tvergaard, V., “Studies of Scale Dependent Crystal Viscoplasticity Models”, *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 54, (2006), pp. 1789–1810.
- (41) 高橋寛, 多結晶塑性論, (1999), コロナ社.
- (42) 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. 43-495, (2002), pp. 299–309.
- (43) 寺田賢二郎・菊池昇, 均質化入門, (2003), 丸善.
- (44) Guedes, J.M. and Kikuchi, N., “Preprocessing and Postprocessing for Materials Based on the Homogenization Method with Adapted Finite Methods”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 83, (1990), pp. 143–198.
- (45) Terada, K. and Kikuchi, N., “A Class of General Algorithms for Multi-scale Analyses of Heterogeneous Media”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 190, (2001), pp. 5427–5464.
- (46) Terada, K., Hori, M., Kyoya, T. and Kikuchi, N., “Simulation of the Multi-scale Convergence in Computational Homogenization Approaches”, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 37, (2000), pp. 2285–2311.
- (47) Takano, N., Ohnishi, Y., Zako, M. and Nishiyabu, K., “The Formulation of Homogenization Method Applied to Large Deformation Problem for Composite Materials”, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 37, (2000), pp. 6517–6535.
- (48) Tomita, Y. and Uchida, M., “Computational Characterization of Micro- to Mesoscopic Deformation Behavior of Semicrystalline Polymers”, *International Journal of Mechanical Sciences*, Vol. 47, (2005), pp. 687–700.
- (49) Sundararaghavan, V. and Zabarav, N., “Design of Microstructure-sensitive Properties in Elasto-viscoplastic Polycrystals Using Multi-scale Homogenization”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 22, (2006), pp. 1799–1824.
- (50) Matsuda, T., Okumura, D., Ohno, N. and Kawai, M., “Three-dimensional Microscopic Interlaminar Analysis of Cross-ply Laminates Based on a Homogenization Theory”, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 44, (2007), pp. 8274–8284.
- (51) 仲町英治・飯星真治・陳胎平・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, A編, Vol. 70, No. 690(2004), pp. 191–197.
- (52) Nakamachi, E., Tam, N.N. and Morimoto, H., “Multi-scale Finite Element Analysis of Sheet Metals by Using SEM-EBSD Measured Crystallographic RVE Models”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 23, (2007), pp. 450–489.
- (53) Tadano, Y., “Polycrystalline Behavior Analysis of Pure Magnesium by the Homogenization Method”, *International Journal of Mechanical Sciences*, Vol. 52, (2009), pp. 257–265.
- (54) 只野裕一, “結晶塑性均質化法によるHCP金属の巨視的くびれ解析”, 計算工学講演会講演論文集, Vol. 13, No. 1(2008), pp. 343–346.
- (55) Ohashi, T., Kawamukai, M. and Zbib, H., “A Multiscale Approach for Modeling Scale-dependent Yield

- Stress in Polycrystalline Metals”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 23, (2007), pp. 897–914.
- (56) Ohno, N. and Okumura, D., “Higher-order Stress and Grain Size Effects due to Self-energy of Geometrically Necessary Dislocations”, *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 55, (2007), pp. 1879–1898.
- (57) Evers, L.P., Brekelmans, W.A.M. and Geers, M.G.D., “Scale Dependent Crystal Plasticity Framework with Dislocation Density and Grain Boundary Effects”, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 40, (2004), pp. 5209–5230.
- (58) 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.
- (59) Kuroda, M. and Tvergaard, V., “An Alternative Treatment of Phenomenological Higher-order Strain-gradient Plasticity Theory”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 26, (2010), pp. 507–515.
- (60) Bailey, J.E. and Hirsch, P.B., “The Dislocation Distribution, Flow Stress, and Stored Energy in Cold-worked Polycrystalline Silver”, *Philosophical Magazine*, Vol. 5, (1960), pp. 485–497.
- (61) Liao, X.Z., Zhou, F., Srinivasan, S.G., Baskes, M.I., He, D.W. and Zhu, Y.T., “Deformation Mechanism in Nanocrystalline Al: Partial Dislocation Slip”, *Applied Physics Letters*, Vol. 83, (2003), pp. 632–634.
- (62) Yamakov, V., Wolf, D., Salazar, M., Phillpot, S.R., and Gleiter, H., “Length-Scale Effects in the Nucleation of Extended Dislocations in Nanocrystalline Al by Molecular-Dynamics Simulation”, *Acta Materialia*, Vol. 49, (2001), pp. 2713–2722.
- (63) Schiotz, J., “Atomic-scale Modeling of Plastic Deformation of Nanocrystalline Copper”, *Scripta Materialia*, Vol. 51, (2004), pp. 837–841.
- (64) 下川智嗣・平本知之・喜成年泰・新宅救徳, “原子シミュレーションによる Al および Cu ナノ結晶中の欠陥構造に関するエネルギー論的研究”, *材料*, Vol. 56, No. 11(2007), pp. 1068–1075.
- (65) Asaro, R.J., “Geometrical Effects in the Inhomogeneous Deformation of Ductile Single Crystals”, *Acta Metallurgica*, Vol. 27, (1979), pp. 445–453.
- (66) Forest, S., Cailletaud, G. and Sievert, R., “A Cosserat Theory for Elastoviscoplastic Single Crystals at Finite Deformation”, *Archives of Mechanics*, Vol. 49, (1997), pp. 705–736.
- (67) Green, A. E. and Zerna, W., *Theoretical Elasticity*, (1968), Clarendon Press.
- (68) Ohno, N., Okumura, D. and Noguchi, H., “Microscopic Symmetric Bifurcation Condition of Cellular Solids Based on a Homogenized Theory of Finite Deformation”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 50, (2002), pp. 1125–1153.
- (69) Shizawa, K. and Zbib, H. M., “A Thermodynamical Theory of Plasticity with Dislocation Density Tensor: I-Fundamentals”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 15, (1999), pp. 899–938.
- (70) 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, A 編*, Vol. 66, No. 647(2000), pp. 1290–1296.
- (71) Wu, X. and Ohno, N., “A Homogenization Theory for Time-dependent Nonlinear Composites with Periodic Internal Structures”, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 36, (1999), pp. 4991–5012.
- (72) Lee, E.H., “Elastic-Plastic Deformation at Finite Strains”, *Transaction of the ASME, Journal of Applied Mechanics*, Vol. 36, (1969), pp. 1–6.
- (73) Lee, E. H. and McMeeking, R.M., “Concerning Elastic and Plastic Components of Deformation”, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 16, (1980), pp. 715–721.
- (74) Mandel, J., *CISM course No. 97*, (1971), Springer-Verlag.

- (75) Kratochvil, J., "Finite-Strain Theory of Crystalline Elastic-Inelastic Materials", *Journal of Applied Physics*, Vol. 42, (1971), pp. 1104–1108.
- (76) Cotter, J.G. and Rivlin, R.S., "Tensors associated with time-dependent stress", *Quarterly of Applied Mathematics*, Vol. 13, (1955), pp. 177–182.
- (77) 大南正瑛, マイクロメカニクス入門, (1980), オーム社.
- (78) Mura, T., *Micromechanics of Defects in Solids*, (1982), Kluwer Academic Publishers.
- (79) Ohashi, T., "Finite-Element Analysis of Plastic Slip and Evolution of Geometrically Necessary Dislocations in fcc Crystals", *Philosophical Magazine Letters*, Vol. 75, (1997), pp. 51–57.
- (80) Eringen, A.C., *Continuum Physics*, (1976), Academic Press.
- (81) Ziegler, H., *An Introduction to Thermomechanics*, (1976), Elsevier.
- (82) Hirth, J.P. and Lothe, J., *Theories of Dislocations*, (1968), McGraw-Hill.
- (83) 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.
- (84) 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, (1983), pp. 973–987.
- (85) Ohashi, T., "Numerical Modeling of Plastic Multi Slip in Metal Crystals of Face Centered Cubic Type", *Philosophical Magazine*, Vol. 70, (1994), pp. 793–803.
- (86) Seeger, A., Diehl, J., Mader, S., and Rebstock, H., "Work-Hardening and Work-Softening of Face-Centred Cubic Metal Crystals", *Philosophical Magazine*, Vol. 2, (1957), pp. 323–350.
- (87) 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, Vol. 72, No. 723(2006), pp. 1646–1653.
- (88) 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.
- (89) Kuhlmann-Wilsdorf, D., "Theory of Plastic Deformation:- Properties of Low Energy Dislocation Structures", *Materials Science and Engineering A*, Vol. 113, (1989), pp. 1–41.
- (90) 加藤雅治, 入門転位論, (1999), 裳華房.
- (91) 美浦康宏, "結晶格子欠陥入門III—結晶転位その2—", *Materia Japan*, Vol. 45-6, (2006), pp. 473–482.
- (92) 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.
- (93) Hill, R., "A Self Consistent Mechanics of Composite Materials", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 13, (1965), pp. 213–222.
- (94) Sequet, P.M., "Elements of Homogenization Theory for Inelastic Solid Mechanics", *Homogenization Techniques for Composite Media, Lecture Note in Physics*, Vol. 272, (1987), pp. 193–287.
- (95) 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.
- (96) 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.
- (97) 山田貴博, 高性能有限要素法, (2007), 丸善.
- (98) 富田佳宏, 数値弾塑性力学, (1998), 養賢堂.
- (99) 岡澤重信, "弾塑性分岐解析による固体のくびれ・せん断帯挙動に関する研究", 博士論

- 文, 名古屋大学, (1998).
- (100) Kuroda, M. and Tvergaard, V., “Shear Band Development Predicted by a Non-normality Theory of Plasticity and Comparison to Crystal Plasticity Predictions”, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 38, (2001), pp. 8945–8960.
- (101) Kuroda, M., “A Phenomenological Plasticity Model Accounting for Hydrostatic Stress-sensitivity and Vertex-type of Effect”, *Mechanics of Materials*, Vol. 36, (2004), pp. 285–297.
- (102) Tvergaard, V., Needleman, A. and Lo, K.K., “Flow Localization in the Plane Strain Tensile Test”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 29, (1981), pp. 115–142.
- (103) Becker, R., “An Analysis of Shear Localization During Bending of a Polycrystalline Sheet”, *ASME Journal of Applied Mechanics*, Vol. 59, (1992), pp. 491–496.
- (104) Mathur, K.K., Needleman, A. and Tvergaard, V., “Ductile Failure Analysis on Massively Parallel Computers”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 119, (1994), pp. 283–309.
- (105) Kuroda, M. and Tvergaard, V., “Effects of Texture on Shear Band Formation in Plane Strain Tension/Compression and Bending”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 23, (2007), pp. 244–272.
- (106) 只野裕一, “有限要素法による板材および管材の塑性局所化解析に関する研究”, 博士論文, 慶應義塾大学, (2004).
- (107) Vreeland, T.Jr., Wood, D.S. and Clark, D.S., “Preyield Plastic and Anelastic Microstrain in Low-carbon Steel”, *Acta Metallurgica*, Vol. 1, (1953), pp. 414–421.
- (108) Sun, H.B., Yoshida, F., Ma, X., Kamei, T. and Ohmori, M., “Finite Element Simulation on the Propagation of Lüders Band and Effect of Stress Concentration”, *Materials Letters*, Vol. 57, (2003), pp. 3206–3210.
- (109) Van der Giessen, E. and Needleman, A., “Discrete Dislocation Plasticity: A Simple Planer Model”, *Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol. 3, (1998), pp. 689–735.
- (110) Zbib, H.M. and Rubia, T.D., “A Multiscale Model of Plasticity”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 18, (2002), pp. 1133–1163.
- (111) Swiatcicki, W.A. and Grabski, M.W., “Effect of Distributions of Grain Boundary Diffusivity on Plastic Flow of Austenitic Steel II: The Role of Dislocation Annihilation in the Plastic Flow of Polycrystalline Materials”, *Materials Science and Engineering*, Vol. 100, (1988), pp. 93–100.
- (112) Wang, Y., Chen, M., Zhou, F. and Ma, E., “High Tensile Ductility in a Nanostructured Metal”, *Nature*, Vol. 419, (2002), pp. 912–915.
- (113) Lee, Z., Witkin, D.B., Radmilovic, V., Lavernia, E.J. and Nutt, S.R., “Bimodal Microstructure and Deformation of Cryomilled Bulk Nanocrystalline Al-7.5Mg Alloy”, *Materials Science and Engineering A*, Vol. 410-411, (2005), pp. 462–467.
- (114) Fan, G.J., Choo, H., Liaw, P.K. and Lavernia, E.J., “Plastic Deformation and Fracture of Ultrafine-grained Al-Mg Alloys with a Bimodal Grain Size Distribution”, *Acta Materialia*, Vol. 54, (2006), pp. 1759–1766.
- (115) 荒木透編, 鉄鋼材料(鉄鋼高価講座7), (1975), 朝倉書店.
- (116) Thompson, N., “Dislocation Nodes in Face-Centred Cubic Lattices”, *Proceedings of the Royal Society of London, Series B*, Vol. 66, (1953), pp. 481–492.
- (117) Fransiosi, 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.

本研究に関する原著論文および口頭発表論文

定期刊行誌掲載論文(本論文に関連する原著論文)

- (1) Kurosawa, E., Aoyagi, Y., Tadano, Y. and Shizawa, K., “A Triple-scale Crystal Plasticity Simulation on Yield Behavior of Annealed FCC Fine-grained Metals”, Materials Science Forum, Vols. 584-586, pp. 1027-1032, (2008).
- (2) 黒澤瑛介・青柳吉輝・只野裕一・志澤一之, “トリプルスケール結晶塑性モデリングおよび結晶粒微細化に伴う寸法効果に関するシミュレーション”, 日本機械学会論文集, Vol. 76, No. 764, A 編, (2010), pp. 483-492.
- (3) 黒澤瑛介・青柳吉輝・志澤一之, “FCC超微細粒焼鈍材の降伏点降下現象に関するトリプルスケール転位-結晶塑性シミュレーション”, 日本機械学会論文集, Vol. 76, No. 772, A 編, (2010), pp. 1547-1556.

国際会議発表

- (1) Kurosawa, E.*, Aoyagi, Y., Tadano, Y. and Shizawa, K., “A Triple Scale Crystal Plasticity Modeling Based on Geometrically Necessary Crystal Defects and Homogenization Method and Simulation on Size Effect for Polycrystal”, Proceedings of the Third Asian-pacific Congress on Computational Mechanics in conjunction with Eleventh International Conference on Enhancement and Promotion of Computational Methods in Engineering and Science, (APCOM'07-EPMESC XI, Kyoto, Japan), CD-ROM, MS28-4-2, (2007).
- (2) Kurosawa, E.*, Aoyagi, Y., Tadano, Y. and Shizawa, K., “A Triple-scale Crystal Plasticity Simulation on Yield Behavior of Annealed FCC Fine-grained Metals”, Conference Programm of the 4th International Conference on Nanomaterials by Severe Plastic Deformation, (NanoSPD4, Goslar, Germany), p. 5, (2008).
- (3) Shizawa, K.*, Kurosawa, E. and Aoyagi, Y., “A Triple Scale Simulation on Size-effects of Ultrafine-grained Metal Based on Geometrically Necessary Crystal Defects”, Proceedings of the 15th International Symposium on Plasticity and Its Current Applications, (Plasticity2009, St. Thomas, USA), pp. 349-351, (2009).
- (4) Kurosawa, E.*, Aoyagi, Y. and Shizawa, K., “A Triple-scale GN Dislocation-crystal Plasticity Simulation on Mechanical Properties of Ultrafine-grained Metal”, Proceedings of the 16th International Symposium on Plasticity and Its Current Applications, (Plasticity2010, Frigate Bay, St. Kitts & Nevis), pp. 4-6, (2010).

国内学会発表

- (1) 黒澤瑛介*・佐藤駿次・海宝寿実雄・青柳吉輝・只野裕一・志澤一之, “均質化法を用いたGN転位-結晶塑性シミュレーションおよび結晶粒微細化に伴う寸法効果に関する検討”, 日本学術会議第56回理論応用力学講演会講演論文集, (東京, 2007), pp. 485-486.
- (2) 只野裕一*・黒澤瑛介・志澤一之, “GN転位-結晶塑性論および均質化理論に基づくトリプルスケール解析手法の構築”, 日本材料学会第56期学術講演会講演論文集, (名古屋, 2007), pp. 233-234.
- (3) 黒澤瑛介*・青柳吉輝・只野裕一・志澤一之, “トリプルスケール結晶塑性シミュレーションおよび結晶粒微細化に伴う寸法効果の検討”, 日本機械学会第20回計算力学講演会講演論文集, No. 07-36, (京都, 2007), pp. 701-702.
- (4) 黒澤瑛介*・青柳吉輝・只野裕一・志澤一之, “超微細粒金属材料の降伏挙動に関するトリプルスケール結晶塑性シミュレーション”, 日本計算工学会第13回計算工学講演会論文集, Vol. 13, No. 1, (仙台, 2008), pp. 339-342.
- (5) 森一真*・黒澤瑛介・青柳吉輝・志澤一之, “FCC微細粒焼鈍材の降伏点降下に関するトリプルスケールGN転位-結晶塑性シミュレーション”, 日本機械学会第21回計算力学講演会CD-ROM論文集, No. 08-33, (沖縄, 2008), pp. 654-655.
- (6) 黒澤瑛介*・青柳吉輝・志澤一之, “FCC超微細粒焼鈍材の微視的降伏挙動に関するトリプルスケール結晶塑性シミュレーション”, 日本学術会議第58回理論応用力学講演会講演論文集, (東京, 2009), pp. 319-320.
- (7) 黒澤瑛介*・青柳吉輝・志澤一之, “超微細粒金属の加工硬化特性に関するトリプルスケールGN転位-結晶塑性シミュレーション”, 日本機械学会第22回計算力学講演会CD-ROM論文集, No. 09-21, (金沢, 2009), pp. 338-339.
- (8) 中重齊*・黒澤瑛介・中山英介・高須賀幹・岡村一男・志澤一之, “フェライト単結晶の引張破壊における方位依存性に関するGN転位-結晶塑性シミュレーション”, 日本材料学会第59期学術講演会講演論文集, (北海道, 2010), pp. 265-266.
- (9) 黒澤瑛介*・小野貴裕・志澤一之, “FCC超微細粒金属の加工硬化特性に関するトリプルスケール転位-結晶塑性解析”, 日本計算工学会第15回計算工学講演会論文集, Vol. 15, No. 2, (福岡, 2011), pp. 977-980.
- (10) 小野貴裕*・黒澤瑛介・青柳吉輝・志澤一之, “超微細粒金属の力学特性に関する擬似3次元トリプルスケール転位-結晶塑性解析”, 日本機械学会第23回計算力学講演会CD-ROM論文集, No. 10-2, (北海道, 2010), pp. 121-122.

補足A

第1章の補足

A.1 転位の分類

実際の転位は図A.1に示すような線欠陥であり，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 b というベクトルで表したものを Burgers ベクトルと呼ぶ．図A.1(a)のように Burgers ベクトルの向きと転位線の方法が垂直である転位を刃状転位と呼び，図A.1(b)のように Burgers ベクトルの向きと転位線の方法が平行である転位をらせん転位と呼ぶ．また，垂直でも並行でもない場合，この転位を混合転位と呼ぶ⁽⁸²⁾．

A.2 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本の転位線が結晶を通過したことを意味する．1つのすべり面の上を別々の転位源を持つ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，1つの源から多数の転位が多重形成されることで転位の増殖が起こり，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．

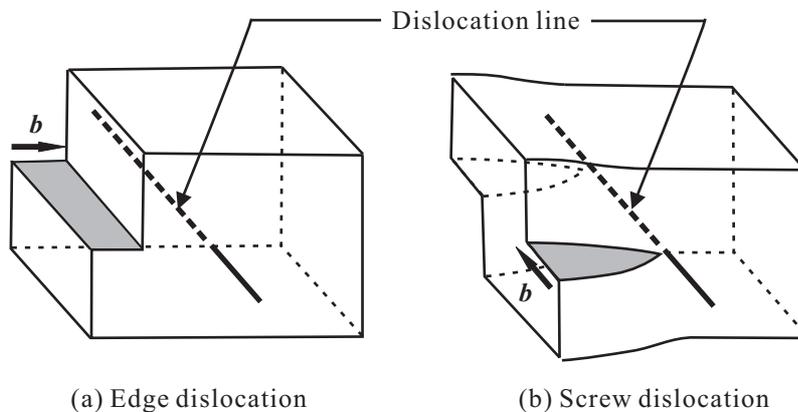


Fig. A.1 Components of dislocation

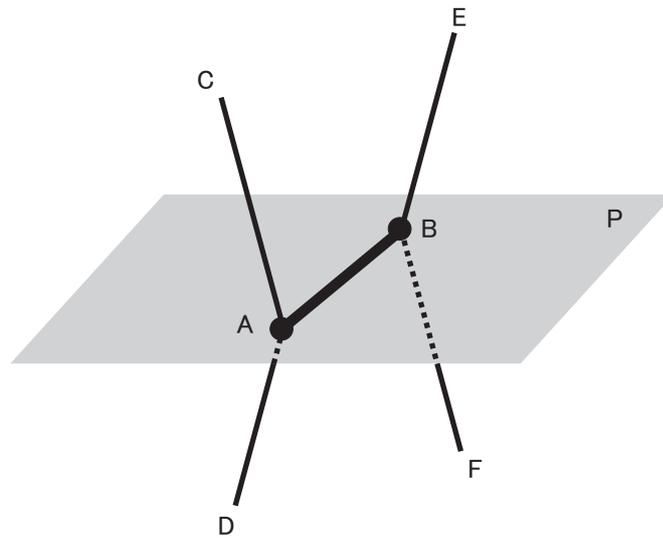


Fig. A.2 Dislocation net and pinned dislocation line

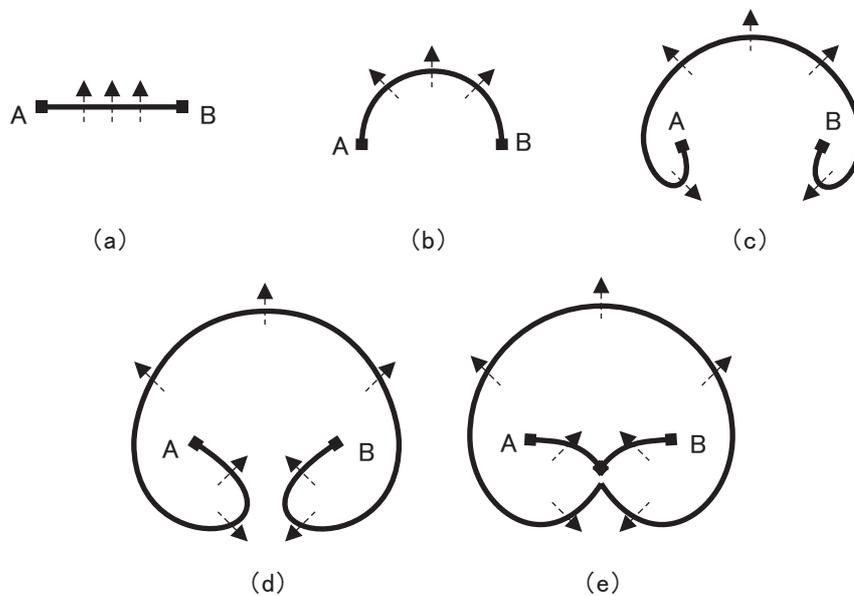


Fig. A.3 Release of dislocation loop from Frank-Read source

このような転位の増殖機構はこれまでにいろいろ考えられてきたが、もっとも確からしいとされるのが Frank-Read 源⁽⁸²⁾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。もっとも簡単な場合として、CA, AD, EB, BF の転位の Burgers ベクトルが P に平行であるとする。このすべり面が紙面であると考えると、AB 部分は図 A.3 (a) のようになる。転位線 AB は点 A と点 B においてピン止めされており、この 2 点では不動化している。点 A, B からすべり面外部へ突き出てピンの役割を果

たしている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き、転位線ABはAとBで固定され、図A.3(b)のように弓なりになる。さらに外からせん断応力を加わると、転位に働く力は転位線に対して垂直となるため、転位は図A.3の(b)(c)(d)のように張り出す。図A.3(d)の状態になったとき、逆符号の転位線が接触する。逆符号の転位が接触するために対消滅が起こり、図A.3(e)のようになる。このようにして、ハート形の中に凹んだループは直ちに外に膨れたループとなり、中央の山形のABは直線になって、最初の出発点図A.3(a)のときのABと同様の状態となる。その結果、継続してせん断応力が加わることで、同様の過程により繰り返ループが形成される。これがFrank-Read源とよばれる転位の発生源である。

A.3 降伏点降下現象

図A.4は、焼鈍された炭素鋼(BCC金属)と通常のアリミニウム(FCC金属)の公称応力-公称ひずみ線図を模式的に示したものである。図A.4(a)の炭素鋼の場合には、比例限を超えて間もなくA-Bのように応力が急に低下し、その後B-Cのようにしばらくほぼ一定の応力で変形が進行した後に加工硬化する⁽¹¹⁵⁾。始めに応力が低下する直前の極大点Aに達した応力を上降伏点といい、その後の一定になったところの応力を下降伏点と呼ぶ。このように上降伏点と下降伏点が発現する現象のことを降伏点降下現象または不連続降伏という。

一方、図A.4(b)のアリミニウムの場合には、弾性変形から塑性変形への遷移がなめらかであり、これを連続降伏という。このような場合には降伏点は曖昧であり、ある一定の塑性変形が残る応力をもって、その応力値を降伏点とする。一般的には、0.2%の永久変形が残る点Dを降伏点とし、このときの応力値を0.2%耐力と呼ぶ⁽¹⁹⁾。

A.4 Lüders 帯の伝ば

焼鈍された炭素鋼のように降伏点降下を示す試験片の表面をよく観察すると、上降伏点に達したときに図A.5のように試験片の引張軸にほぼ45°の角度をなして、縞のようなも

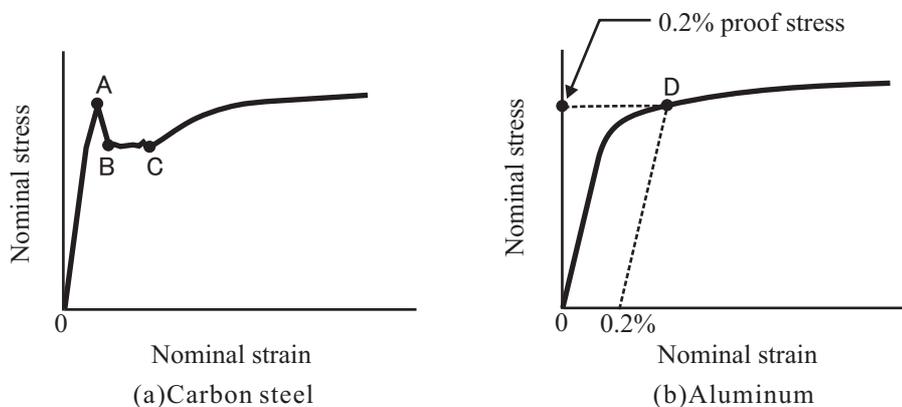


Fig. A.4 Nominal stress versus nominal strain curves

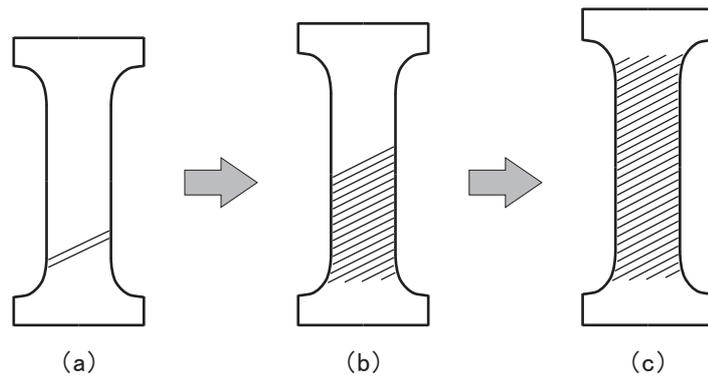


Fig. A.5 Propagation of Lüders bands

のが走っていくのが見える⁽¹¹⁵⁾。その後、下降伏点に達した後にその縞が広がっていく。これは、塑性変形した領域が広がっていくということであり、すでに塑性変形している部分をLüders帯という。変形が起こった領域では加工硬化が起こり、それ以上その領域において変形が進行するよりも隣にある軟らかい領域において変形が起こる方が容易であるため、Lüders帯は伝ばする。このように次々と新たな領域において塑性変形が進行するために、Lüders帯が伝ばしている間は図A.4(b)B-Cのように、変形応力がほぼ一定に保たれる。Lüders帯が試験片全体を伝ばし終わると、その後は試験全体が加工硬化しつつ一様に変形するようになる。

A.5 ダイポール

ダイポールとは図A.6に表わされるように、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特性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合いにより、GN転位密度ではカウントすることができない。

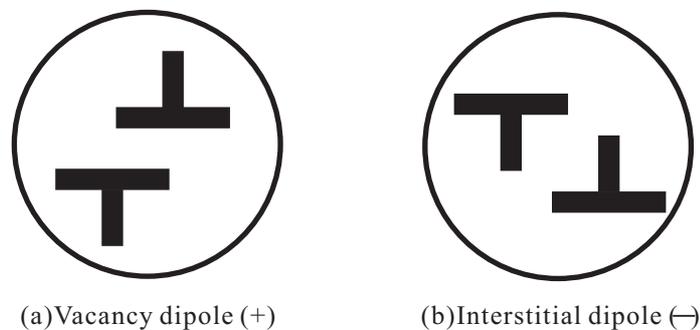


Fig. A.6 Dislocation dipole

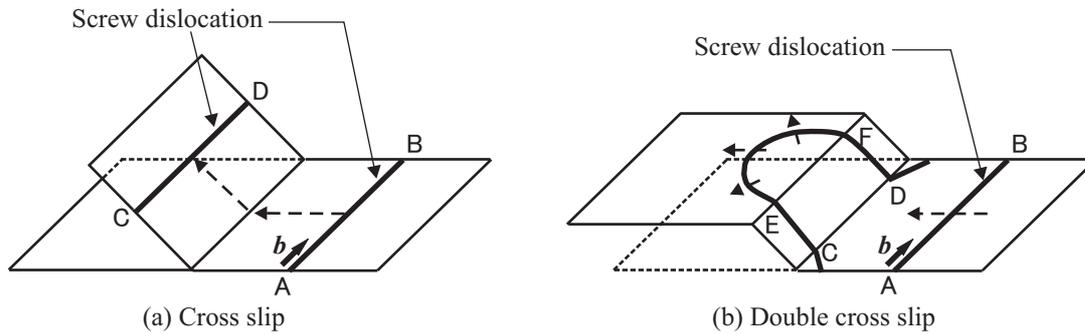


Fig. A.7 Cross slip of screw dislocation

A.6 らせん転位の二重交差すべり

幾何学的に，らせん転位の場合にはBurgersベクトルの向きと転位線の方が平行であるため，転位線を含む面は全てすべり面となれる．そのため，図A.7(a)のように，らせん転位はすべり面を変えて移動することがある．これを交差すべりといい，この現象は純粋ならせん転位のみ起こる．

図A.7(b)は，らせん転位ABの一部がCDの位置で交差すべりを起こして斜めのすべり面に移り，さらにもう一度EFの位置で交差すべりを起こすことで，もとのすべり面と平行なすべり面に移動する様子を表している．ここで，転位CEおよびDFが互いに離れていくような運動が妨げられているとすると，これらの転位は支柱転位の役割を果たし，上のすべり面に移動した部分EFはFrank-Read源として活動することができる．このようにして新しく作られた転位がまた同じことを繰り返すことで，Frank-Read源は次々と作られ，転位の増殖が効率よく行われる．この機構を二重交差すべり機構と呼び，Johnston-Gilman⁽¹⁸⁾により明らかとなった現象である．二重交差すべり機構は，BCC金属の変形を論ずるときに重要となる．

補足B

第2章の補足

B.1 FCC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、そのおのおのが面内に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の四面体⁽¹¹⁶⁾とよばれるものを用いて、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B.1参照]。その中で、あるすべり系 α に注目したとき、そのすべり系においてすべり方向を表す単位ベクトルを $s^{(\alpha)}$ 、すべり面の法線方向を表す単位ベクトルを $m^{(\alpha)}$ と書き、これらを結晶基底ベクトルと呼ぶ。

外部応力を結晶に作用させた場合、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

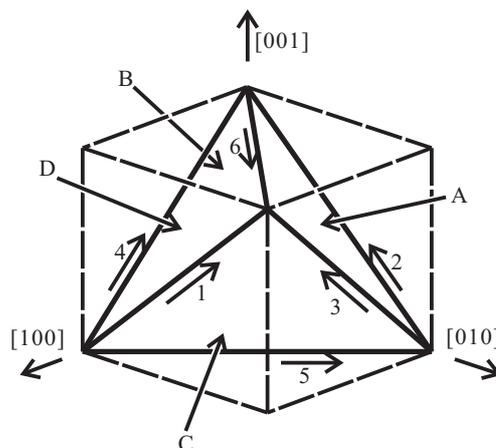


Fig. B.1 Thompson's tetrahedron

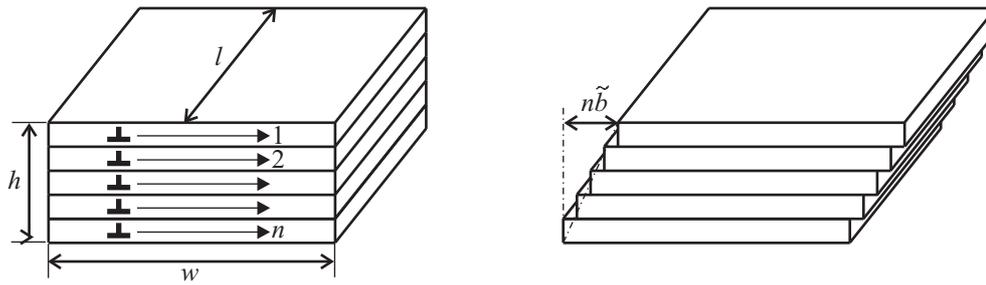


Fig. B.2 Relationship between GN dislocation and slip

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るとき、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くことになる。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。

B.2 AshbyによるGN転位密度の幾何学的意味

1本の転位線の運動によって、すべり面の上下にBurgersベクトル**b**だけのずれが生じることを念頭において図B.2のように高さh、幅w、厚さlの結晶を考える。この結晶において長さlの転位n本が左から右へと距離wの全体を動いたとすると、それによって生じる結晶のすべりは、

$$\gamma = \frac{n\bar{b}}{h} \dots\dots\dots (B.1)$$

となる。ただし、 \bar{b} はBurgersベクトル**b**のノルムである。もしこれらの転位が距離wではなく、平均的にdxだけ動いたとすれば、そのときに生じる巨視的なすべり増分は次式のように得られる。

$$d\gamma = \frac{n\bar{b}}{h} \frac{dx}{w} \dots\dots\dots (B.2)$$

ここで、転位密度の定義は次式のようになる。

$$\alpha_{edge} = \frac{nl}{hw} \dots\dots\dots (B.3)$$

式(B.2)を式(B.3)に代入すれば、GN転位密度が次式のように得られる。

$$\alpha_{edge} = \frac{1}{\bar{b}} \frac{d\gamma}{dx} \dots\dots\dots (B.4)$$

以上がAshbyによって提案されたGN転位の幾何学的意味である。

補足C

第3章の補足

C.1 異方性弾性係数

式(3.46)に示されるように，異方性弾性係数はその対称性から21成分に制限される．ここで， C^e をマトリックス表示すれば，

$$[C^e] = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1112} & C_{1123} & C_{1131} \\ & C_{2222} & C_{2233} & C_{2212} & C_{2223} & C_{2231} \\ & & C_{3333} & C_{3312} & C_{3323} & C_{3331} \\ & & & C_{1212} & C_{1223} & C_{1231} \\ & \text{Symmetric} & & & C_{2323} & C_{2331} \\ & & & & & C_{3131} \end{bmatrix} \dots\dots\dots (C.1)$$

となる．立方対称材料の場合，材料の全体座標系および結晶格子の局所座標系が一致するとき，

$$[C^e] = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \dots\dots\dots (C.2)$$

のように， $C_{11} = C_{1111}$ ， $C_{12} = C_{1122}$ ， $C_{44} = C_{1212}$ のみで決定される．一方，図C.1に示すような結晶方位 (θ, φ, ψ) による格子回転を与えた場合，異方性弾性係数は次式で表される．

$$C'_{ijkl} = Q_{pi}Q_{qj}Q_{rk}Q_{sl}C_{pqrs} \dots\dots\dots (C.3)$$

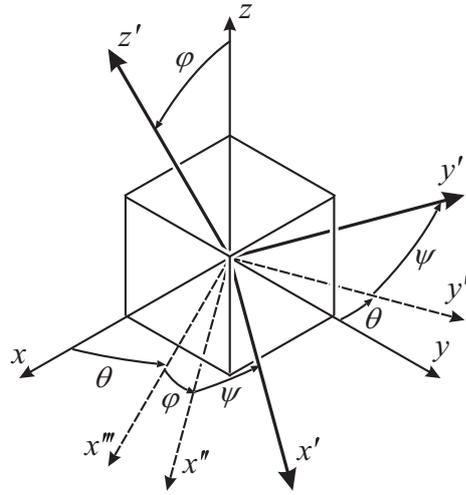


Fig. C.1 Transformation of local coordinate system

ただし， 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テンソルであり，マトリックス表示すれば

$$[Q] = \begin{bmatrix} \cos \varphi \cos \theta \cos \psi - \sin \theta \sin \psi & \cos \varphi \sin \theta \cos \psi + \cos \theta \sin \psi & -\sin \varphi \cos \psi \\ -\cos \varphi \cos \theta \sin \psi - \sin \theta \cos \psi & -\cos \varphi \sin \theta \sin \psi + \cos \theta \cos \psi & \sin \varphi \sin \psi \\ \sin \varphi \cos \theta & \sin \varphi \sin \theta & \cos \varphi \end{bmatrix} \dots\dots\dots (C.4)$$

となる。

C.2 式(3.48)の導出

C.2.1 第1項のスカラー量表示

まず結晶塑性論の立場から，式(3.47)の第1項を各すべり面上の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， α すべり系における分解せん断応力は，結晶基底を用いて次式のように表現できる。

$$\tau^{(\alpha)} = s_{(m)}^{(\alpha)} \cdot T'_{(m)} m_{(m)}^{(\alpha)} = P_{S(m)}^{(\alpha)} \cdot T'_{(m)} \dots\dots\dots (C.5)$$

ここで， $P_{S(m)}^{(\alpha)}$ は次式で表される Schmid テンソルである。

$$P_{S(m)}^{(\alpha)} = \frac{1}{2} (s_{(m)}^{(\alpha)} \otimes m_{(m)}^{(\alpha)} + m_{(m)}^{(\alpha)} \otimes s_{(m)}^{(\alpha)}) \dots\dots\dots (C.6)$$

式(C.5)および(2.68)を用いれば，次式が得られる。

$$T'_{(m)} \cdot D_{(m)}^p = T'_{(m)} \cdot \sum_{\alpha} P_{S(m)}^{(\alpha)} \dot{\gamma}_{(m)}^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} T'_{(m)} \cdot P_{S(m)}^{(\alpha)} \dot{\gamma}_{(m)}^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} \tau^{(\alpha)} \dot{\gamma}_{(m)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (C.7)$$

C.2.2 第2項のスカラー量表示

第1項と同様に，第2項を各すべり面上の応力およびすべりを用いた形に書き換える． α すべり系における応力 $\nu^{(\alpha)}$ は，

$$\nu^{(\alpha)} = s^{(\alpha)} N'_{(m)} m^{(\alpha)} = P_{S(m)}^{(\alpha)} \cdot N'_{(m)} \dots \dots \dots (C.8)$$

となる．また，塑性変形加速度は

$$\dot{D}_{(m)}^p = \dot{\gamma}_{S(m)}^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} P_{S(m)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (C.9)$$

となる．式 (C.8) および式 (C.9) から，散逸関数の第2項は次式のようにスカラー量を用いて表現できる．

$$N'_m \cdot \dot{D}_{(m)}^p = N'_{(m)} \cdot \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} P_{S(m)}^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} N'_{(m)} \cdot P_{S(m)}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} \nu^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (C.10)$$

C.2.3 第3項のスカラー量表示

第3項は次式のように書き換えられる．

$$\mathbf{H}_{\alpha(m)} \cdot \dot{\alpha}_{(m)} = \sum_{\alpha} \mathbf{H}_{\alpha(m)} \cdot \dot{\alpha}_{(m)}^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} \mathbf{H}_{\alpha(m)} \cdot \|\dot{\alpha}_{(m)}^{(\alpha)}\| \frac{\dot{\alpha}_{(m)}^{(\alpha)}}{\|\dot{\alpha}_{(m)}^{(\alpha)}\|} = \sum_{\alpha} \mathbf{H}_{(m)} \cdot \frac{\dot{\alpha}_{(m)}^{(\alpha)}}{\|\dot{\alpha}_{(m)}^{(\alpha)}\|} \|\dot{\alpha}_{(m)}^{(\alpha)}\| \dots \dots \dots (C.11)$$

ここで，下線部 (1) は $\mathbf{H}_{\alpha(m)}$ の $\dot{\alpha}_{(m)}^{(\alpha)}$ 方向への有効成分であり， $\pi_{\alpha}^{(\alpha)}$ で表す．また， $\|\dot{\alpha}_{(m)}^{(\alpha)}\|$ は，

$$\|\dot{\alpha}_{(m)}^{(\alpha)}\| = \sqrt{\dot{\alpha}_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \dot{\alpha}_{(m)}^{(\alpha)}} \dots \dots \dots (C.12)$$

のように書け，次式のように定義する．

$$\int \|\dot{\alpha}_{(m)}^{(\alpha)}\| dt \equiv \rho_{\alpha}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (C.13)$$

式 (C.13) は，次式のようにも書ける．

$$\dot{\rho}_{\alpha}^{(\alpha)} = \|\dot{\alpha}_{(m)}^{(\alpha)}\| \dots \dots \dots (C.14)$$

したがって，式 (C.11) は次式のようにスカラー量を用いて表現できる．

$$\mathbf{H}_{\alpha(m)} \cdot \dot{\alpha}_{(m)} = \sum_{\alpha} \pi_{\alpha}^{(\alpha)} \dot{\rho}_{\alpha}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (C.15)$$

C.2.4 第4項のスカラー量表示

第4項は次式のように書き換えられる．

$$\mathbf{H}_{\eta(m)} \cdot \dot{\eta}_{(m)} = \sum_{\alpha} \mathbf{H}_{\eta(m)} \cdot \dot{\eta}_{(m)}^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} \mathbf{H}_{\eta(m)} \cdot \|\dot{\eta}_{(m)}^{(\alpha)}\| \frac{\dot{\eta}_{(m)}^{(\alpha)}}{\|\dot{\eta}_{(m)}^{(\alpha)}\|} = \sum_{\alpha} \mathbf{H}_{(m)} \cdot \frac{\dot{\eta}_{(m)}^{(\alpha)}}{\|\dot{\eta}_{(m)}^{(\alpha)}\|} \|\dot{\eta}_{(m)}^{(\alpha)}\| \dots \dots \dots (C.16)$$

ここで，下線部 (1) は $\mathbf{H}_{\eta(m)}$ の $\dot{\eta}_{(m)}^{(\alpha)}$ 方向への有効成分であり， $\pi_{\eta}^{(\alpha)}$ で表す．また， $\|\dot{\eta}_{(m)}^{(\alpha)}\|$ は

$$\|\dot{\eta}_{(m)}^{(\alpha)}\| = \sqrt{\dot{\eta}_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \dot{\eta}_{(m)}^{(\alpha)}} \dots \dots \dots (C.17)$$

のように書け，次式のように定義する．

$$\int \|\dot{\mathbf{h}}_{(m)}^{(\alpha)}\| dt \equiv \rho_{\eta}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (C.18)$$

式(C.18)は，次式のようにも書ける．

$$\dot{\rho}_{\eta}^{(\alpha)} = \|\dot{\mathbf{h}}_{(m)}^{(\alpha)}\| \dots\dots\dots (C.19)$$

よって，式(C.16)は次式のようにスカラ量を用いて表現させる．

$$\mathbf{H}_{\eta(m)} \cdot \dot{\mathbf{h}}_{(m)} = \sum_{\alpha} \pi_{\eta}^{(\alpha)} \dot{\rho}_{\eta}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (C.20)$$

C.2.5 スカラ量表示による Clausius-Duhem の不等式

式(C.7)，式(C.10)，式(C.13)および式(C.20)を式(3.35)に代入することにより，Clausius-Duhemの不等式は次のようにスカラ量を用いて表現することができる．

$$\begin{aligned} \Phi &= \mathbf{T}'_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^p + \mathbf{N}'_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^p + \mathbf{H}_{\alpha(m)} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}}_{(m)} + \mathbf{H}_{\eta(m)} \cdot \dot{\mathbf{h}}_{(m)} \\ &= \sum_{\alpha} \tau^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \nu^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \pi_{\alpha}^{(\alpha)} \dot{\rho}_{\alpha}^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \pi_{\eta}^{(\alpha)} \dot{\rho}_{\eta}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (C.21) \end{aligned}$$

補足D

第4章の補足

D.1 転位運動の障害と加工硬化

金属結晶の加工硬化は、転位運動が様々な要因によって障害され、転位が動くことができなくなることで発生する。また、その加工硬化挙動は転位運動を妨げる障害物の違いによって、自己硬化と潜在硬化の2種類に大別することができる。

D.1.1 自己硬化

自己硬化とは、同一すべり系(主すべり系)に存在する障害物の影響を受けて転位が堆積することで引き起こされる硬化をいう。同一すべり系に存在する障害物の例としては、介在物、結晶粒界、あるいは同一すべり系に蓄積した転位による転位間の弾性相互作用などが挙げられる。このような障害物は、長範囲にまたがって転位運動に影響を及ぼすため、長範囲障害物とも呼ばれる。図D.1は主すべり面上に存在する介在物が転位線の運動を障害している例であり、自己硬化の原因の一つとなる。大きな外力が作用することで転位が障害物を通り抜けると、図D.1のようにFrank-Read機構と類似したメカニズムにより障害物を囲む転位線を残したまま転位線が通過する。このループはOrowanループと呼ばれている⁽⁸²⁾。さらに、このように主すべり系に転位が蓄積すると、転位源に向かう逆向きの内

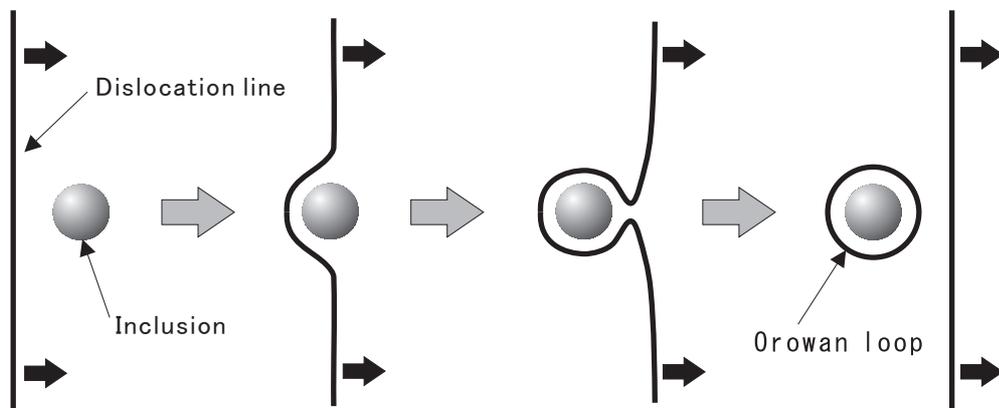


Fig. D.1 Formation of Orowan loop around an inclusion

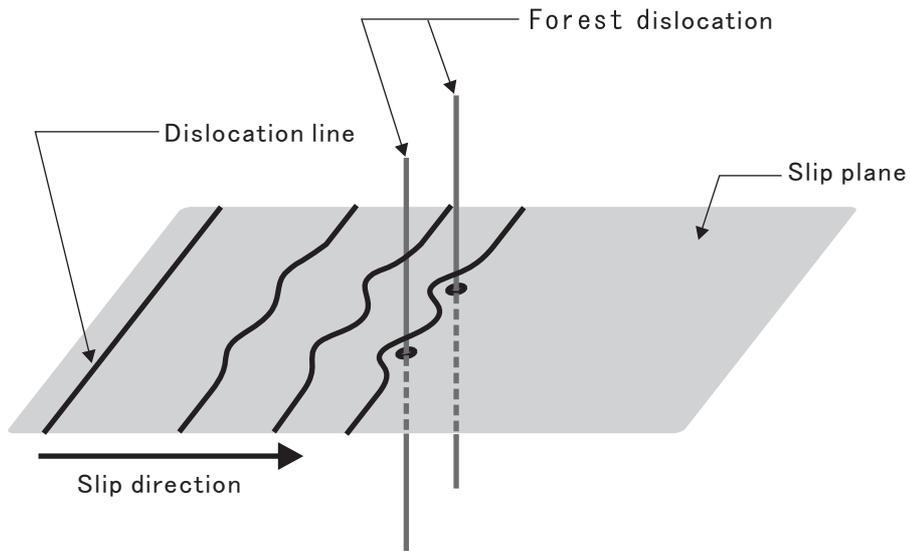


Fig. D.2 Latent hardening due to forest dislocations

部応力(背応力)場が形成され, 後続の転位はその影響を受けて運動しにくくなる⁽¹⁾. これは, 粒界に転位が蓄積する場合においても同様のことがいえる. このような内部応力場の形成も, 自己硬化の要因の一つである.

D.1.2 潜在硬化

潜在硬化とは, 2次すべり系が活動すべり系の転位運動を阻害するために生じる結晶の硬化である. このような硬化はそれぞれのすべり面が交差する部分で作用し, 図D.2に示すように, 2次すべり系の転位は主すべり面から林のように突き立っている. そのため, このような2次すべり系の転位は林立転位と呼ばれる. 林立転位も主すべり系の転位運動を阻害し, これが潜在硬化の要因となる. また, 主すべり系の転位と林立転位の相互作用も潜在硬化の一因となるが, これについてはD.3節において詳しく述べる.

D.2 従来の結晶塑性論における硬化係数モデル

Peirceら⁽²⁵⁾は, 硬化係数 $h^{(\alpha\beta)}$ を次式のように与えている.

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

$\alpha = \beta$ のときは自己硬化を表し $h^{(\alpha\beta)} = h_p$, $\alpha \neq \beta$ のときは潜在硬化を表し $h^{(\alpha\beta)} = qh_p$ となり, h_p は硬化率関数である. 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, h_p には次式のような関数形を与えている. は

$$h(\gamma) = h_0 \operatorname{sech}^2(\gamma/\gamma_0) \dots\dots\dots (D.2)$$

で表される。ここで、 h_0 は初期硬化率、また γ_0 は次式によって定義される量である。

$$\gamma_0 \equiv (\tau_s - \tau_0)/h_0 \dots\dots\dots (D.3)$$

ただし、 τ_s は τ - γ 曲線における飽和せん断応力であり、 τ_0 は臨界分解せん断応力である。式(D.1)で表される硬化係数は実験によって得られた硬化曲線から同定されたものである。

D.3 転位運動の相互作用

D.3.1 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、おのおののも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、それらの転位の合体反応は、転位線の長さの増加につながり、エネルギー的には不利であるために起こりにくい。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、一般にその上に段差が形成される。すなわち、転位線が切り合うことで、一般にはそれらは \bar{b} の長さの段をもつ形状に変化する。これらの段のうち、転位のすべり面乗っていないものおよび乗っているものは、それぞれジョグおよびキンクと呼ばれる。

転位同士の切り合いによってジョグまたはキンクが形成されるかは、切り合う転位線の性質に依存している。転位が特殊な方位にある場合には、ジョグとキンクのいずれもが形成されないことがある。切り合いによってジョグやキンクが形成される際には、そのエネルギーの分だけ結晶のエネルギーが増加するため、余分な応力を加えないかぎり切り合いが起こらない。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D.3に示す。

D.3.2 転位運動の相互作用による影響

表D.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および相互作用を表している。なお、係数 a_0, a_1, a_2 および a_3 はその相互作用行列⁽⁸⁵⁾⁽¹¹⁷⁾の成分である。FCC結晶の転位運動の相互作用を考える時、12のすべり系はそれぞれすべて等価であるため、ある1つのすべり系に注目すればよい。表D.2は、主すべり面をB4とした場合の他のすべり系、つまり2次すべり系に存在する転位による影響を表わしている。

自己硬化 (Self hardening) 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、主すべり系と同じであることから自己硬化となっているのが確認できる。

同一すべり面 (Coplanar system) は同じすべり面からの、同一すべり方向 (Colinear system) は同じすべり方向をもつすべり系からの相互作用である。B2およびB5は同一すべり面であるため同一すべり面、D4はすべり方向が同じなので同一すべり方向となっている。

可動ジョグ形成 (Glissile jog formation) は、主すべり系と2次すべり系が図D.4(a)(b)のような位置関係にあるときの相互作用である。このような場合、図D.4(a)のように転位の切り合

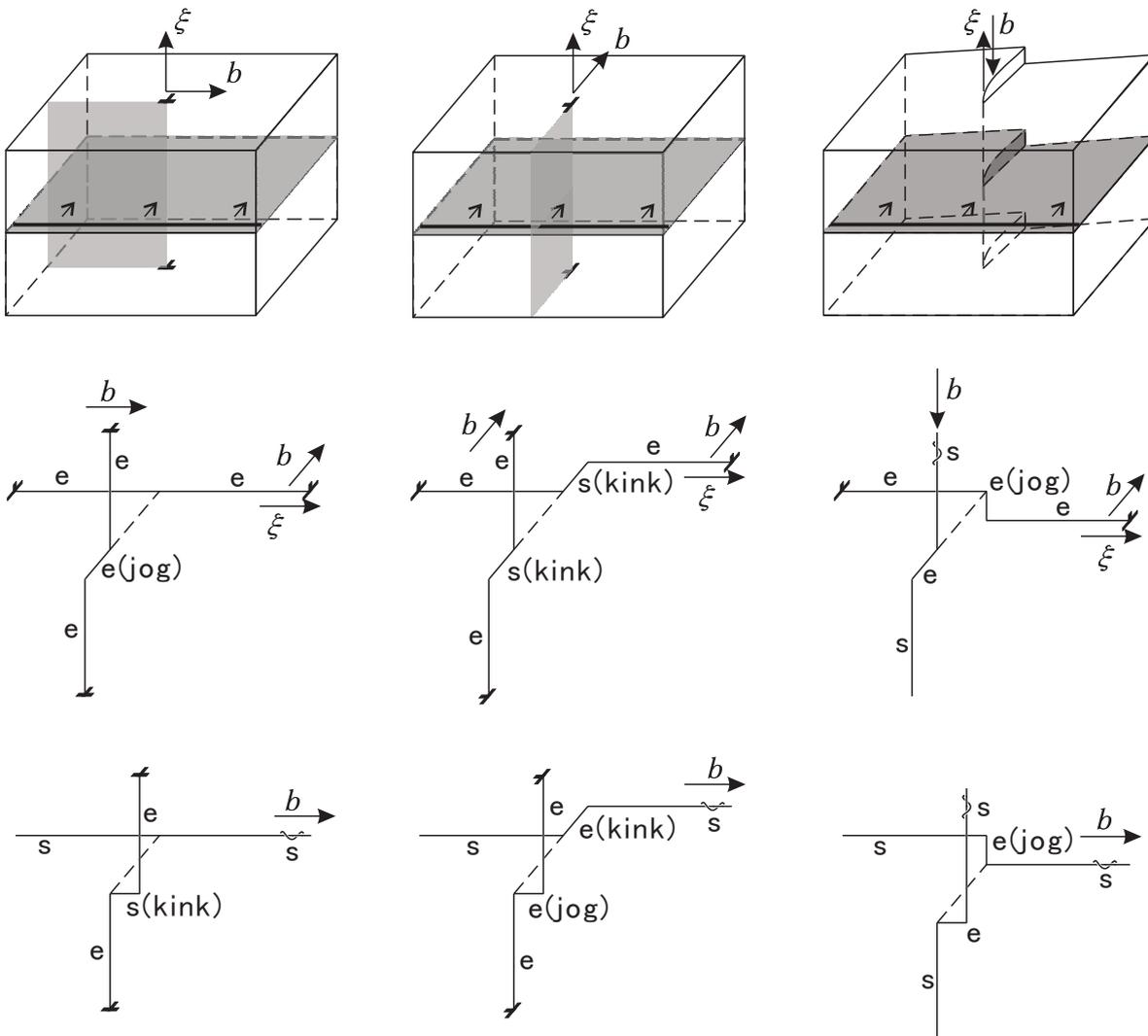


Fig. D.3 Kink and jog formation

い運動が起こることで、ジョグを形成される。

Hirth固着(Hirth Lock system)は、主すべり系と2次すべり系が図D.4(c)および(d)のような位置関係にあるとき相互作用である。この場合、らせん転位の上にはジョグが形成され、その運動は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。このような非保存運動には、非常に大きな抵抗を伴うため、結晶が十分に高温にある場合を除けば、ジョグの部分はほとんど動くことができない。さらに、らせん転位の残りの部分のみが運動することで、図D.5に示すように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⁽¹⁾。このように、転位が運動した跡に残された動くことのできない部分はトレールと呼ばれ、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ばれている。

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D.4(e)のようにキックを形成される。この場合、キックの部分のすべり方向が同一で

Table D.1 The interaction matrix $\Omega_{\alpha\beta}$ 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 D.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

あるため、転位は比較的運動しやすいと考えられている。

Lomer-Cottrell 固着 (Lomer-Cottrell lock formation) とは主すべり系と2次すべり系が図D.4(f)のような位置関係にあるときに、それぞれのすべり系における可動転位同士の反応により不動転位が発生することをいう⁽⁸²⁾。(111)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 $(\bar{1}11)$ 上を運動する不完全転位 $(a/6)[\bar{1}\bar{2}1] + (a/6)[2\bar{1}\bar{1}]$ が図D.6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)や $(\bar{1}11)$ 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。

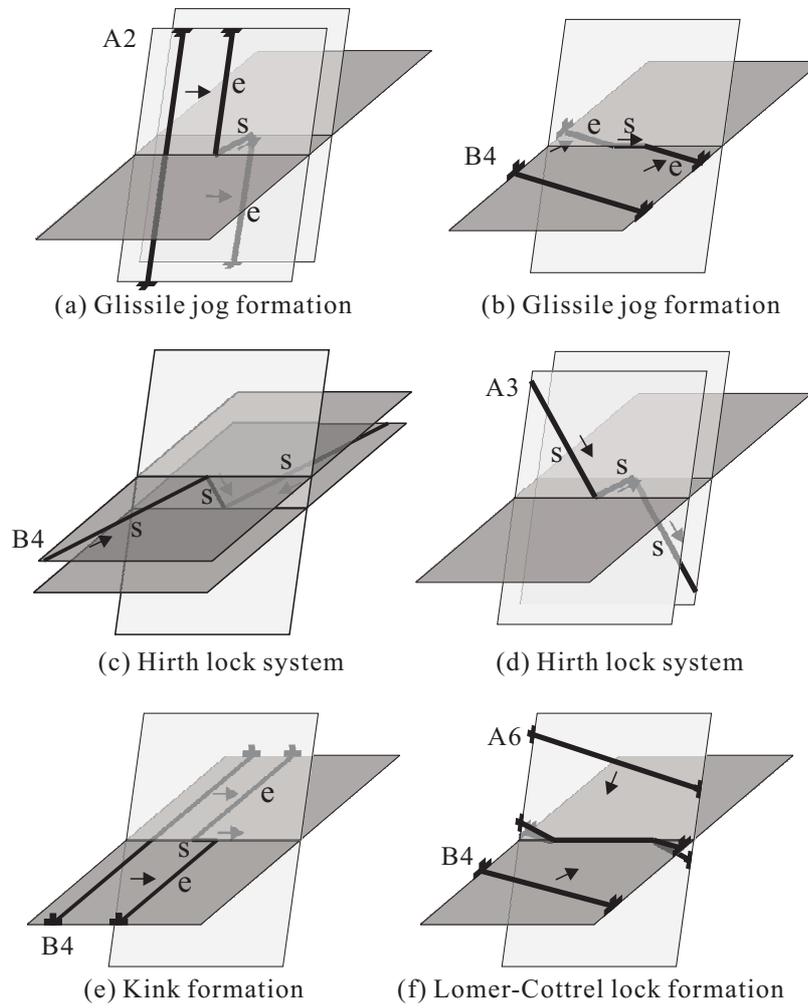


Fig. D.4 Dislocation interactions

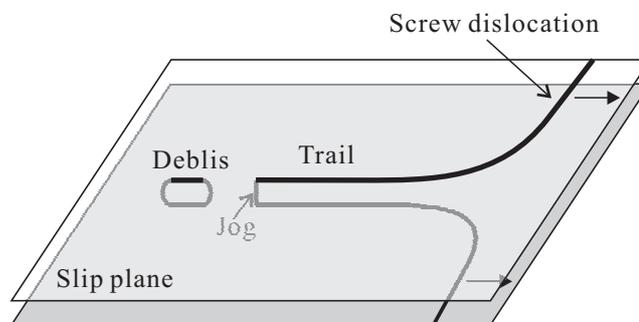


Fig. D.5 Debris and trail from jog

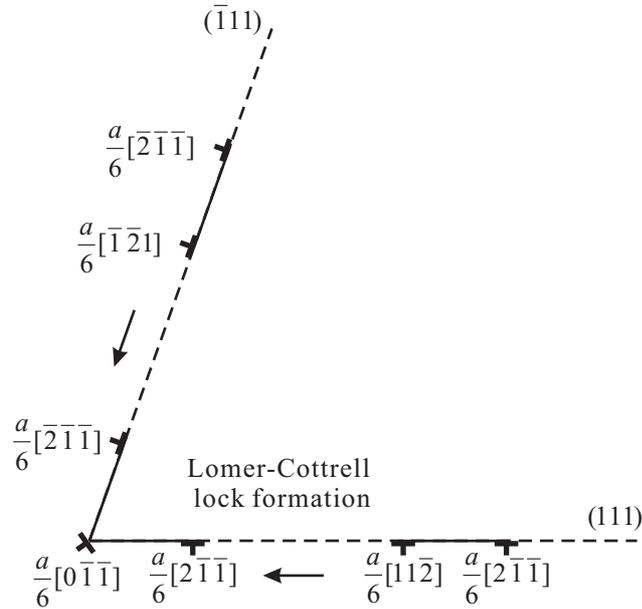


Fig. D.6 Lomer-Cottrell lock formation

D.3.3 相互作用行列

表(D.1), 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.

$$[\Omega_{\alpha\beta}] = \begin{bmatrix} L_0 & L_1 & L_2 & L_3 \\ & L_0 & L_3 & L_2 \\ & & L_0 & L_1 \\ \text{Symmetric} & & & L_0 \end{bmatrix} \dots \dots \dots (D.4)$$

さらに, この行列内の成分 L_0, L_1, L_2 および L_3 はそれぞれ以下のような 3×3 の行列を表している.

$$[L_0] = \begin{bmatrix} a_0 & a_1 & a_1 \\ & a_0 & a_1 \\ \text{Symmetric} & & a_0 \end{bmatrix}, \quad [L_1] = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ & a_1 & a_2 \\ \text{Symmetric} & & a_1 \end{bmatrix} \dots \dots \dots (D.5)$$

$$[L_2] = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_2 \\ & a_1 & a_3 \\ \text{Symmetric} & & a_1 \end{bmatrix}, \quad [L_3] = \begin{bmatrix} a_1 & a_3 & a_2 \\ & a_1 & a_2 \\ \text{Symmetric} & & a_1 \end{bmatrix}$$

式(D.5)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それぞれ表すパラメータである. また, すべり系間の相互作用による影響を考慮すれば, それぞれの係数は $a_0 \leq a_1 \leq a_2 \leq a_3$ という関係にあり, それぞれの値は 1.0~2.0 となっている⁽⁸⁵⁾.

D.4 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から，式(4.16)は第2中間配置における物理量を用いて，

$$\tau^{(\alpha)} = \mathbf{T}_{(m)} \cdot \mathbf{P}_{(m)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (D.6)$$

と書きなおすことができる．式(D.6)に物質時間微分を施せば，

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = \dot{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{P}_{(m)}^{(\alpha)} + \mathbf{T}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{P}}_{(m)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (D.7)$$

となる．まず，式(D.7)の右辺第2項は次に示すように零となる．

$$\begin{aligned} T_{(m)ij} \dot{P}_{(m)ij}^{(\alpha)} &= T_{(m)ij} (\dot{s}_{(m)l}^{(\alpha)} m_{(m)j}^{(\alpha)} + s_{(m)l}^{(\alpha)} \dot{m}_{(m)j}^{(\alpha)}) \\ &= R_{ki}^* T_{kl} R_{lj}^* ((R_{mi}^* \dot{s}_m^{(\alpha)} m_n^{(\alpha)} R_{nj}^* + R_{mi}^* s_m^{(\alpha)} (\dot{m}_n^{(\alpha)} R_{nj}^*)) \\ &= R_{ki}^* T_{kl} R_{lj}^* (\dot{R}_{mi}^* s_m^{(\alpha)} m_n^{(\alpha)} R_{nj}^* + R_{mi}^* \dot{s}_m^{(\alpha)} m_n^{(\alpha)} R_{nj}^* + R_{mi}^* s_m^{(\alpha)} \dot{m}_n^{(\alpha)} R_{nj}^* + R_{mi}^* s_m^{(\alpha)} m_n^{(\alpha)} \dot{R}_{nj}^*) \\ &= R_{ki}^* T_{kl} R_{lj}^* \dot{R}_{mi}^* s_m^{(\alpha)} m_n^{(\alpha)} R_{nj}^* + R_{ki}^* T_{kl} R_{lj}^* R_{mi}^* \dot{s}_m^{(\alpha)} m_n^{(\alpha)} R_{nj}^* \\ &\quad + R_{ki}^* T_{kl} R_{lj}^* R_{mi}^* s_m^{(\alpha)} \dot{m}_n^{(\alpha)} R_{nj}^* + R_{ki}^* T_{kl} R_{lj}^* R_{mi}^* s_m^{(\alpha)} m_n^{(\alpha)} \dot{R}_{nj}^* \\ &= W_{mk}^* T_{kl} s_m^{(\alpha)} m_l^{(\alpha)} + T_{kl} \dot{s}_k^{(\alpha)} m_l^{(\alpha)} + T_{kl} s_k^{(\alpha)} \dot{m}_l^{(\alpha)} + W_{nl}^* T_{kl} s_k^{(\alpha)} m_n^{(\alpha)} \\ &= -T_{kl} W_{km}^* s_m^{(\alpha)} m_l^{(\alpha)} + T_{kl} \dot{s}_k^{(\alpha)} m_l^{(\alpha)} + T_{kl} s_k^{(\alpha)} \dot{m}_l^{(\alpha)} - T_{kl} s_k^{(\alpha)} W_{ln}^* m_n^{(\alpha)} \\ &= -T_{kl} s_k^{(\alpha)} m_l^{(\alpha)} + T_{kl} \dot{s}_k^{(\alpha)} m_l^{(\alpha)} + T_{kl} s_k^{(\alpha)} \dot{m}_l^{(\alpha)} - T_{kl} s_k^{(\alpha)} \dot{m}_l^{(\alpha)} = 0 \dots \dots \dots (D.8) \end{aligned}$$

したがって，分解せん断応力速度は次式のように導出される．

$$\begin{aligned} \dot{\tau}^{(\alpha)} &= \dot{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{P}_{(m)}^{(\alpha)} = (\mathbf{R}^{*T} \mathbf{T} \mathbf{R}^*) \cdot (\mathbf{R}^{*T} \mathbf{P}^{(\alpha)} \mathbf{R}^*) \\ &= (\dot{\mathbf{R}}^{*T} \mathbf{T} \mathbf{R}^* + \mathbf{R}^{*T} \dot{\mathbf{T}} \mathbf{R}^* + \mathbf{R}^{*T} \mathbf{T} \dot{\mathbf{R}}^*) \cdot (\mathbf{R}^{*T} \mathbf{P}^{(\alpha)} \mathbf{R}^*) \\ &\Rightarrow \dot{R}_{ki}^* T_{kl} R_{lj}^* R_{mi}^* P_{mn}^{(\alpha)} R_{nj}^* + R_{ki}^* \dot{T}_{kl} R_{lj}^* R_{mi}^* P_{mn}^{(\alpha)} R_{nj}^* + R_{ki}^* T_{kl} \dot{R}_{lj}^* R_{mi}^* P_{mn}^{(\alpha)} R_{nj}^* \\ &= W_{kn}^* T_{kl} \delta_{ln} P_{mn}^{(\alpha)} + \dot{T}_{kl} \delta_{km} \delta_{ln} P_{mn}^{(\alpha)} + T_{kl} W_{ln}^* \delta_{km} P_{mn}^{(\alpha)} \\ &= W_{kn}^* T_{kl} P_{ml}^{(\alpha)} + \dot{T}_{kl} P_{kl}^{(\alpha)} + T_{kl} W_{ln}^* P_{kn}^{(\alpha)} = -W_{mk}^* T_{kl} P_{ml}^{(\alpha)} + \dot{T}_{kl} P_{kl}^{(\alpha)} + T_{kl} W_{ln}^* P_{kn}^{(\alpha)} \\ &\Rightarrow -(\mathbf{W}^* \mathbf{T}) \cdot \mathbf{P}^{(\alpha)} + \dot{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{P}^{(\alpha)} + (\mathbf{T} \mathbf{W}^*) \cdot \mathbf{P}^{(\alpha)} = (\dot{\mathbf{T}} + \mathbf{T} \mathbf{W}^* - \mathbf{W}^* \mathbf{T}) \cdot \mathbf{P}^{(\alpha)} \\ &= \overset{\nabla}{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{P}^{(\alpha)} = (\mathbf{C}^e : \mathbf{D}^e) \cdot (\mathbf{P}_S^{(\alpha)} + \mathbf{P}_A^{(\alpha)}) = (\mathbf{C}^e : \mathbf{D}^e) \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \\ &= (\mathbf{C}^e : \mathbf{P}_S^{(\alpha)}) \cdot \mathbf{D}^e \dots \dots \dots (D.9) \end{aligned}$$

補足E

第5章の補足

E.1 Updated Lagrange 形式の第1種 Piola-Kirchhoff 応力

第1種 Piola-Kirchhoff 応力 (公称応力) $\mathbf{H} = J\mathbf{T}\mathbf{F}^{-T}$ の物質時間微分は, Cauchy 応力 \mathbf{T} を用いて

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{H}} &= (J\mathbf{T}\mathbf{F}^{-T}) = J\dot{\mathbf{T}}\mathbf{F}^{-T} + J\dot{\mathbf{T}}\mathbf{F}^{-T} + J\mathbf{T}\dot{\mathbf{F}}^{-T} \\ &= (J\operatorname{div}\mathbf{v})\mathbf{T}\mathbf{F}^{-T} + J\dot{\mathbf{T}}\mathbf{F}^{-T} + J\mathbf{T}\dot{\mathbf{F}}^{-T} \\ &= J\{\dot{\mathbf{T}} + (\operatorname{div}\mathbf{v})\mathbf{T} + \mathbf{T}\dot{\mathbf{F}}^{-T}\mathbf{F}^T\}\mathbf{F}^{-T} \dots\dots\dots(\text{E.1})\end{aligned}$$

と表現される。ここで,

$$\dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} + \mathbf{F}\dot{\mathbf{F}}^{-1} = \mathbf{F}(\mathbf{F}^{-1}\dot{\mathbf{F}} + \dot{\mathbf{F}}^{-1}\mathbf{F})\mathbf{F}^{-1} = \mathbf{F}(\mathbf{F}^{-1}\dot{\mathbf{F}})\mathbf{F}^{-1} = 0 \dots\dots\dots(\text{E.2})$$

となり, この式より次式が得られる。

$$\dot{\mathbf{F}}^{-T}\mathbf{F}^T = (\mathbf{F}\dot{\mathbf{F}}^{-1})^T = (-\dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1})^T = -\mathbf{L}^T \dots\dots\dots(\text{E.3})$$

式 (E.3) を式 (E.1) に代入し, $(\operatorname{div}\mathbf{v}) = \operatorname{tr}\mathbf{L}$ として整理すれば, 次式が得られる。

$$\dot{\mathbf{H}}\mathbf{F}^T = J(\dot{\mathbf{T}} + \mathbf{T}\operatorname{tr}\mathbf{L} - \mathbf{T}\mathbf{L}^T) \dots\dots\dots(\text{E.4})$$

したがって, 参照配置を現配置に変換 ($J \rightarrow 1$) すれば, Updated Lagrange 形式の第1種 Piola-Kirchhoff 応力 $\boldsymbol{\pi}$ の物質時間微分が次式のようなになる。

$$\dot{\boldsymbol{\pi}} = \dot{\mathbf{T}} + \mathbf{T}\operatorname{tr}\mathbf{L} - \mathbf{T}\mathbf{L}^T \dots\dots\dots(\text{E.5})$$

ただし, $\dot{\boldsymbol{\pi}} \equiv \dot{\mathbf{H}}\mathbf{F}^T$ である。次に, Cauchy 応力の Jaumann 速度 $\overset{\circ}{\mathbf{T}} = \dot{\mathbf{T}} - \mathbf{W}\mathbf{T} + \mathbf{T}\mathbf{W}$ を式 (E.5) の右辺に代入して整理すれば,

$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{\pi}} &= \overset{\circ}{\mathbf{T}} + \mathbf{W}\mathbf{T} - \mathbf{T}\mathbf{W} + \mathbf{T}\operatorname{tr}\mathbf{L} - \mathbf{T}\mathbf{L}^T \\ &= \overset{\circ}{\mathbf{T}} + \mathbf{W}\mathbf{T} - \mathbf{T}\mathbf{W} + \mathbf{T}\operatorname{tr}\mathbf{L} - \mathbf{T}(\mathbf{D} + \mathbf{W})^T \\ &= \overset{\circ}{\mathbf{T}} + \mathbf{W}\mathbf{T} - \mathbf{T}\mathbf{W} + \mathbf{T}\operatorname{tr}\mathbf{L} - \mathbf{T}\mathbf{D} + \mathbf{T}\mathbf{W} \\ &= \overset{\circ}{\mathbf{T}} + (\mathbf{L} - \mathbf{D})\mathbf{T} + \mathbf{T}\operatorname{tr}\mathbf{L} - \mathbf{T}\mathbf{D} \\ &= \overset{\circ}{\mathbf{T}} - \mathbf{D}\mathbf{T} - \mathbf{T}\mathbf{D} + \mathbf{L}\mathbf{T} + \mathbf{T}\operatorname{tr}\mathbf{L} \dots\dots\dots(\text{E.6})\end{aligned}$$

さらに，非圧縮性 ($\text{tr}L = 0$) を仮定すれば，次式が得られる．

$$\dot{\pi} = \overset{\circ}{T} - DT - TD + LT \dots \dots \dots (E.7)$$

E.2 マクロ応力速度の関係式

式 (5.10) を式 (5.8) に適用し，定義式 (5.12)₁ を考慮すれば，次式が得られる．

$$\dot{H}^H = \langle \dot{T} + T\text{tr}L - TL^T \rangle = \langle \dot{T} + T\text{tr}L \rangle - \langle TL^T \rangle \dots \dots \dots (E.8)$$

ここで，式 (5.12)₂ の両辺の物質時間微分を考える．

$$\begin{aligned} \dot{T}^H &= \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{|Y|} \int_Y T dY \right) = \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{|Y|} \right) \int_Y T dY + \frac{1}{|Y|} \frac{D}{Dt} \left(\int_Y T dY \right) \\ &= -\frac{1}{|Y|^2} \frac{D|Y|}{Dt} \int_Y T dY + \frac{1}{|Y|} \int_Y (\dot{T} + T\text{tr}L) dY \\ &= -\frac{1}{|Y|} (\text{tr}L^0) \int_Y T dY + \frac{1}{|Y|} \int_Y (\dot{T} + T\text{tr}L) dY \\ &= \langle \dot{T} + T\text{tr}L \rangle - T^H \text{tr}L^0 \dots \dots \dots (E.9) \end{aligned}$$

なお，ここでは輸送定理および $D|Y|/Dt = (\text{tr}L^0)|Y|$ という関係を用いている．式 (E.9) から， $\dot{T}^H \neq \dot{T}$ であることがわかる．また，式 (E.8) の右辺第2項は以下のように書き換えることができる．

$$\langle TL^T \rangle = \frac{1}{|Y|} \int_Y TL^T dY = \frac{1}{|Y|} \int_Y T(L^0 + L^\dagger)^T dY = \frac{1}{|Y|} \int_Y TL^{0T} dY + \frac{1}{|Y|} \int_Y TL^{\dagger T} dY \dots \dots \dots (E.10)$$

ここで式 (E.10) の右辺第2項は，部分積分と発散定理を適用することで，

$$\int_Y TL^{\dagger T} dY = \int_Y (Tn) \otimes v^\dagger dY - \int_\Gamma \text{div} T \otimes v^\dagger dY \dots \dots \dots (E.11)$$

となり，式 (E.11) の右辺第1項は Tn の反 Y -周期性および v^\dagger の Y -周期性から零，式 (E.11) の右辺第2項は応力の釣合い方程式 (5.5) から零となる．したがって，式 (E.10) は

$$\langle TL^T \rangle = \frac{1}{|Y|} \int_Y TL^{0T} dY = \left(\frac{1}{|Y|} \int_Y T dY \right) L^{0T} = T^H L^{0T} \dots \dots \dots (E.12)$$

となる．式 (E.10) および式 (E.12) を式 (E.8) に代入すれば，マクロ応力速度の関係式が次式のように得られる．

$$\dot{H}^H = \dot{T}^H + T^H \text{tr}L^0 - T^H L^{0T} \dots \dots \dots (E.13)$$

補足F

第7章の補足

F.1 巨視的な局所変形のメッシュ依存性

F.1.1 マクロ構造における積分点の配置の不規則性による影響

本解析のように，マクロ構造の要素分割に次数低減積分を適用した8節点四辺形要素を用いる場合には，マクロ構造内の積分点は完全に規則正しく配置されることはない．そこで，図F.1に示すように，巨視的な試験片を分割する要素数は同程度とし，各要素のアスペクト比を変化させることで，積分点の配置を変えた3通りの解析モデルによる解析を行い，マクロ構造における積分点の配置が解析結果に及ぼす影響について検討する．ここでは，初期平均粒径は $\bar{d} = 0.27\mu\text{m}$ (強ひずみ加工のみが施されたUFGM)とし，ユニットセルの形状，初期結晶方位，材料定数および数値パラメータに関しては7.5節の解析と同様のものを用いている．なお，7.5節の解析では，図F.1(a)の解析モデルを用いている．

図F.2は各解析モデルに対応する試験片の公称応力-公称ひずみ線図であり，図F.3は塑性変形の局所化が起こった際における試験片内の相当塑性ひずみ速度分布である．図F.2を見ると，いずれの解析モデルを用いた場合にも，塑性変形の局所化に伴う公称応力の急激な減少が起こるまでの荷重履歴は一致している．しかしながら，解析モデルによって塑性局所化が始まる時期が異なっており，要素が試験片の長手方向に長く伸びているほど，

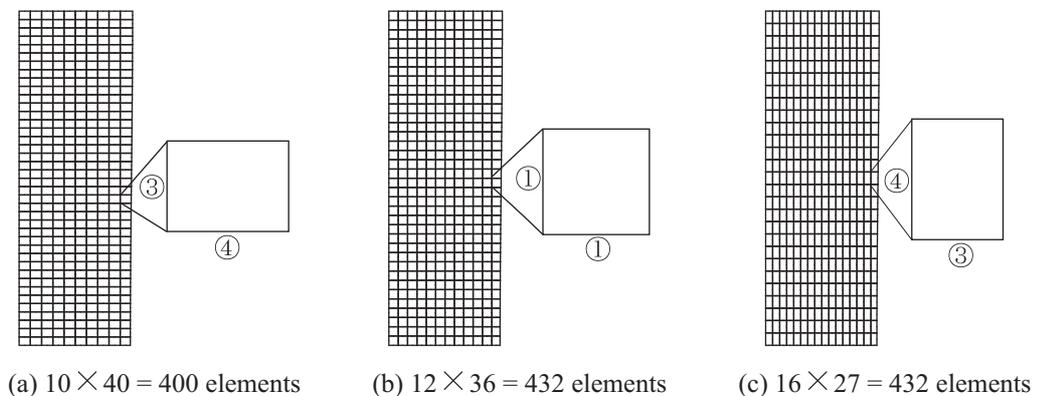


Fig. F.1 Computational models for macroscopic specimen

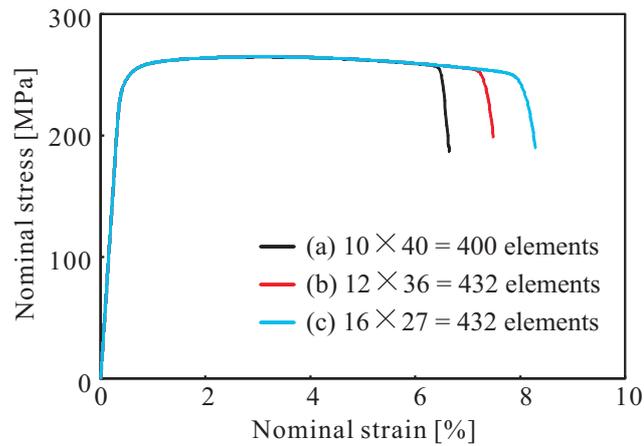


Fig. F.2 Nominal stress versus nominal strain curves (effect of distribution of macroscopic integration points)

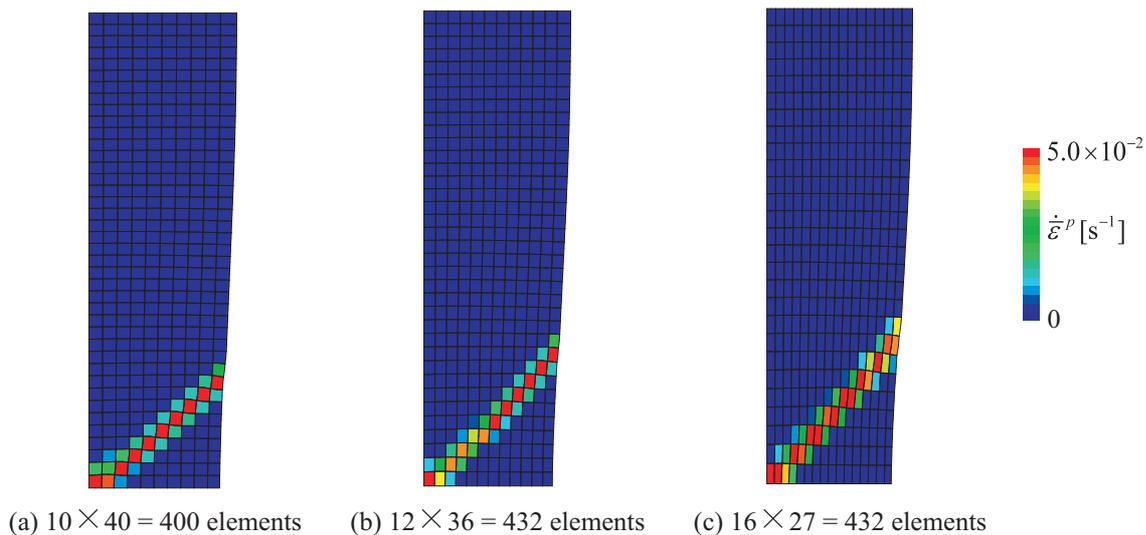


Fig. F.3 Distributions of equivalent plastic strain rate (effect of distribution of macroscopic integration points)

その時期が遅れることが確認できる。一方，図F.3を見ると，解析モデルによらず試験片に発現するせん断帯の位置および形状は類似している。以上の結果から，本解析の場合にはマクロ構造内の積分点の配置は塑性局所化の発生時期に影響を及ぼすことがわかる。なお，上記の解析結果の違いは，従来の単スケール解析においても同様に見られる現象であり，これは本研究で構築したトリプルスケール転位-結晶塑性モデルに起因するものではなく，FEM特有の現象であると考えられる。

F.1.2 マクロ構造におけるメッシュサイズの影響

マクロ構造のメッシュのサイズが局所変形に及ぼす影響を調べるために、要素のアスペクト比は固定し、要素数を 10×40 (7.5 節の解析と同様)、 15×60 および 20×80 と変化させて解析を行う。なお、ここでも次数低減積分を適用した 8 節点四辺形要素を用いており、初期平均粒径は $\bar{d} = 0.27 \mu\text{m}$ (強ひずみ加工のみが施された UFGM) としている。また、ユニットセルの形状、初期結晶方位、材料定数および数値パラメータに関しては 7.5 節の解析と同様のものを用いている。

図 F.4 は各要素数に対応する試験片の公称応力-公称ひずみ線図であり、図 F.5 は塑性変形の局所化が起こった際における試験片内の相当塑性ひずみ速度分布である。図 F.4 を見ると、いずれの要素数の場合にも、塑性変形の局所化に伴う公称応力の急激な減少が起こるまでの荷重履歴は一致しており、メッシュのサイズによらず塑性局所化が開始する時期がほぼ一致している。また図 F.5 を見ると、試験片に発生するせん断帯の位置および形状は類似しているが、メッシュが細かいほど巨視的な塑性変形の局所化領域は狭くなり、せん断帯がよりシャープになっていることが確認できる。以上の結果から、本解析におけるせん断帯の幅は、1 要素の大きさに依存することがわかる。

従来の塑性局所化現象に関する計算力学的研究においては、ひずみこう配を考慮した非局所性モデルを用いることで、メッシュに非依存の塑性局所変形を再現できることが報告されている⁽⁴⁰⁾。本研究では、すべりの 1 次こう配で表される GN 転位密度を結晶の硬化則に導入しているが、このような非局所性は転位場と結晶場を橋渡しする転位-結晶塑性モデルにおいてのみ考慮されている。そのため、その効果はマクロ構造の変形には直接反映されず、本解析では上記のようなメッシュ依存性が現れると考えられる。また、本モデルを用いてメッシュ非依存の局所変形を数値解析的に再現する方法としては、巨視的なひずみこう配の効果を材料モデルに導入する手法が考えられるが、この場合には巨視的な変形のこう配が存在する近傍において、ミクロスケールの γ -周期性が大きく崩れる恐れがある。そのため、そのような材料モデリングを行う際には、さらに厳密な理論的考察が必要となる。

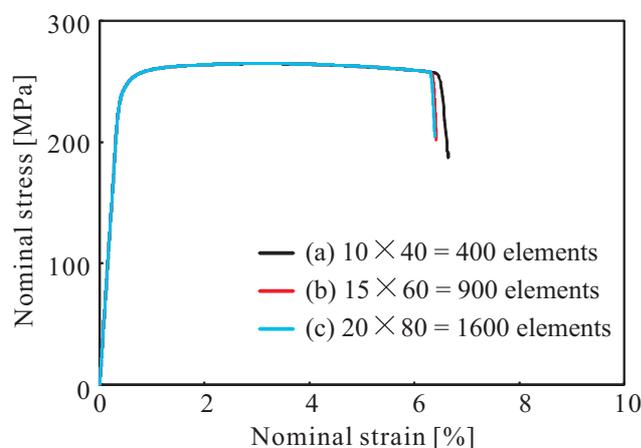


Fig. F.4 Nominal stress versus nominal strain curves (effect of fineness of mesh)

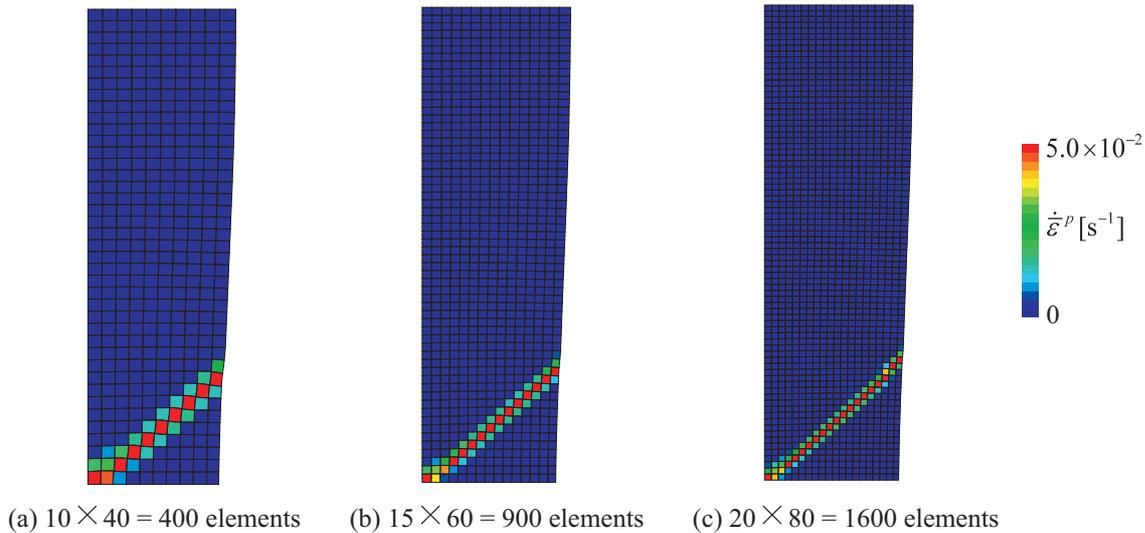


Fig. F.5 Distributions of equivalent plastic strain rate (effect of fineness of mesh)

F.2 巨視的な局所変形とY-周期性

本研究で行っているようなミクロ-マクロ連成解析では，マクロ構造の変形が一様でない限り，ミクロ構造におけるY-周期性は厳密には崩れている．しかしながら，本解析ではマクロ構造の各積分点においてミクロ構造を定義しているため，積分点近傍で一様変形が成り立てば，ミクロ構造におけるY-周期性はほぼ満たされると考えられる．一方で，巨視的な変形のこう配が無視できない場合には，その点におけるミクロ構造のY-周期性の満足度が減少することになる．塑性局所化問題のように，非常に強い巨視的な不均一変形が生じる場合には，試験片に発生するせん断帯近傍において巨視的な変形のこう配は存在するが，それ以上にせん断帯の内外で不連続な変形場が生じるのが特徴であるといえる．その際，ほとんどの積分点はせん断帯の内部または外部に存在しており，巨視的な変形の不連続面上に積分点がかかることはほとんどない．そのため，巨視的な塑性変形の局所化領域に存在する積分点の近傍では，塑性変形はほぼ均一に起こっているとみなすことができ，その点におけるミクロ構造のY-周期性はほぼ満たされているといえる．

図F.6は図F.5(a)および(c)に対応する試験片内の相当塑性ひずみ分布であり，それぞれの場合において巨視的な塑性変形が局所化している付近の積分点I~VIに配置されたユニットセル内の全すべり分布は図F.7のようになる．図F.7を見ると，いずれの解析モデル(マクロ構造の要素数が 10×40 または 20×80)の場合にも，巨視的に見ると非常に近距離に配置されたユニットセルであるにもかかわらず，ユニットセル内のすべり分布は完全には一致していない．しかしながら，変形後のユニットセルの形状およびすべり変形が集中している結晶粒の位置は類似しており，同様の傾向を示していることが確認できる．一方で，マクロ構造を分割する要素数を増加させることで，ユニットセルを配置する積分点間距離を減少させているにもかかわらず，図F.7(a)-Iと図F.7(c)-IV，図F.7(a)-IIと図F.7(c)-Vおよび図F.7(a)-IIIと図F.7(c)-VIを比較すると，対応するユニットセル内のすべり分布はほぼ一致している．本解析では，マクロ積分点間の距離が10mmオーダーであるのに対し，ミク

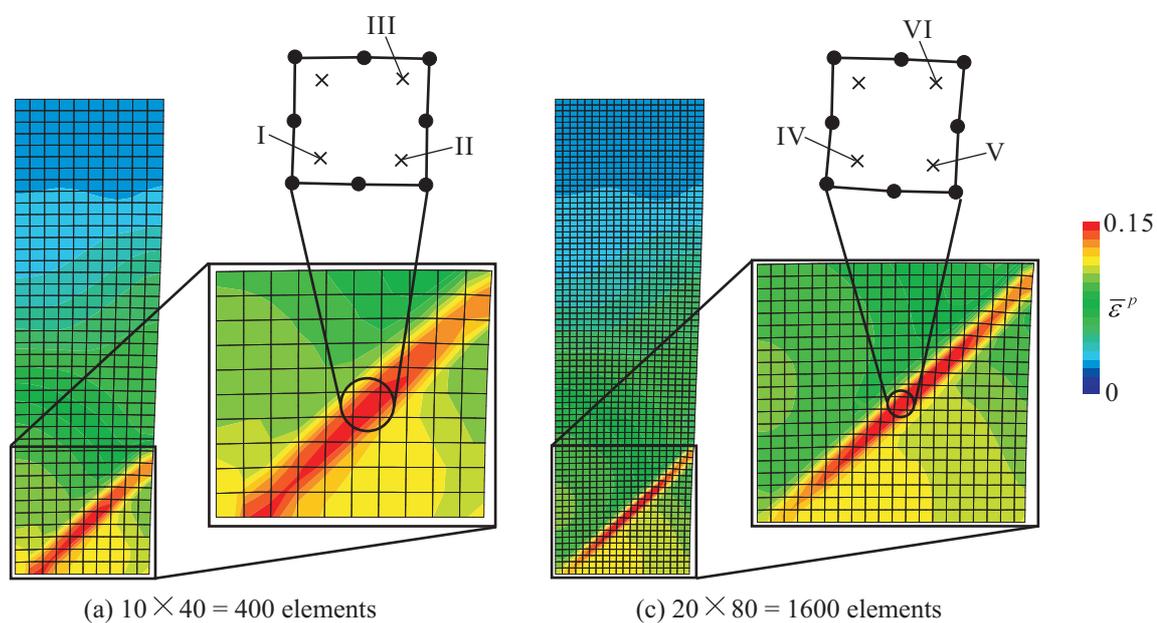


Fig. F.6 Distributions of equivalent plastic strain

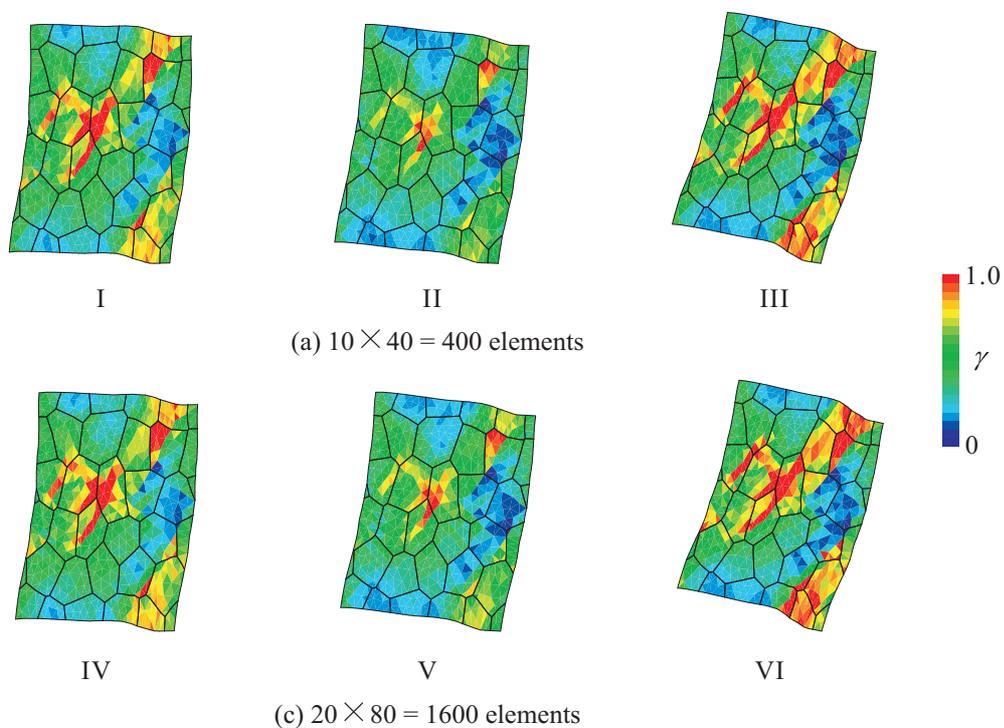


Fig. F.7 Distributions of slip in unit cells located at sampling points I-VI in Fig. F.6

口構造のユニットセルの1辺の長さは $1\mu\text{m}$ オーダーであるため、その寸法比は $10^4 \approx \infty$ となる。そのため、要素分割数を2倍程度にするだけでは、上記のようにせん断帯近傍のユニットセルの変形挙動に違いが現れないと考えられる。ユニットセルを配置する積分点間距離とユニットセルサイズの比、すなわちマクロ構造と結晶粒構造の代表寸法の比が解析結果に及ぼす影響を調べるためには、マクロ構造を分割するメッシュをさらに細かくする、あるいはユニットセルサイズをさらに大きくした場合の解析を行うなどして、今後さらに検討を加える必要がある。