



FTMP場の理論に基づく離散転位系の連続像

井原, 史朗

(Degree)

博士 (工学)

(Date of Degree)

2021-03-25

(Date of Publication)

2022-03-01

(Resource Type)

doctoral thesis

(Report Number)

甲第8070号

(URL)

<https://hdl.handle.net/20.500.14094/D1008070>

※ 当コンテンツは神戸大学の学術成果です。無断複製・不正使用等を禁じます。著作権法で認められている範囲内で、適切にご利用ください。



博 士 論 文

(論文題目)

FTMP 場の理論に基づく離散転位系の連続像

2021 年 1 月

神戸大学大学院工学研究科

(氏名) 井原 史朗

目次

第1章 緒論	1
1.1. 金属材料におけるマルチスケール問題およびその取り扱い	2
1.2. 転位下部組織	3
1.2.1. 見かけの弾性定数の減少	5
1.2.2. PSBs (Persistent Slip Bands)	6
1.2.3. GNBs (Geometrically Necessary Boundaries)	7
1.3. 転位動力学法	8
1.4. 転位系の定量評価	9
1.5. FTMP (Field Theory of Multiscale Plasticity)による定量評価について	11
1.6. 本論文の構成	11
第2章 理論および解析手法	13
2.1. FTMP (Field Theory of Multiscale Plasticity) とは	13
2.2. FTMP における基礎概念	14
2.2.1. 転位密度テンソル	14
2.2.2. 不適合度テンソル	16
2.2.3. 転位密度テンソルおよび不適合度テンソルの幾何学的解釈	17
2.2.4. 不適合度テンソルの特徴	20
2.2.5. Flow-evolutionary 則	21
2.2.6. 相空間トラジェクトリ (Phase-Space Trajectory: PhS-T)	23
2.3. 転位密度テンソル・不適合度テンソルの導出・評価法	23
2.3.1. 転位線の成分導出	24
2.3.2. 転位密度テンソルの算出	24
2.3.3. 不適合度テンソルの導出	25
2.3.4. 転位密度テンソルの勾配の取り方について	26
2.4. 転位の自己エネルギー	29
2.4.1. 弾性ひずみエネルギー	29
2.4.2. 転位芯のエネルギー	30
2.5. 離散転位動力学法	30
2.5.1. 離散転位動力学の概要	30
2.5.2. 個々の転位の運動	31
2.5.3. 転位の長距離相互作用	35

2.5.4. 転位の短距離相互作用.....	36
2.5.5. 本解析プログラムのフローチャート.....	37
2.5.6. 解析セルと境界条件.....	38
2.5.7. 交差すべり.....	39
第3章 見かけの弾性定数減少の解析および評価.....	40
3.1. 概要.....	40
3.2. 見かけの弾性定数減少の理論解.....	40
3.3. 単純な転位系に対する解析および評価.....	42
3.3.1. 解析条件.....	42
3.3.2. 解析結果.....	43
3.4. 複雑な転位系に対する解析および評価.....	48
3.4.1. 解析条件.....	48
3.4.2. 解析結果.....	49
3.4.3. 簡易モデルによる検討.....	49
3.5. 結晶塑性解析への導入.....	53
3.5.1. 解析条件.....	53
3.5.2. 解析結果.....	55
3.6. 結言.....	56
第4章 固執すべり帯(PSBs)に対する解析および評価.....	58
4.1. 概要.....	58
4.2. FCC モデル.....	58
4.2.1. 解析条件.....	58
4.2.2. 解析結果.....	60
4.3. BCC モデル.....	64
4.3.1. 解析条件.....	64
4.3.2. 解析結果.....	65
4.4. 結言.....	72
第5章 幾何学的に必要な境界(GNBs)に対する解析および評価.....	74
5.1. 概要.....	74
5.2. 解析条件.....	74
5.3. 解析結果.....	75
5.3.1. 弾性ひずみエネルギーゆらぎおよび不適合度.....	76
5.3.2. Shannon エントロピーによる評価.....	77
5.3.3. 双対線図表現.....	80

5.3.4. 運動エネルギーの寄与.....	81
5.3.5. 運動する転位との相互作用.....	84
5.4. 結言.....	87
第6章 種々の転位壁に対する解析および評価.....	88
6.1. 概要.....	88
6.2. 解析条件.....	88
6.3. 混合転位壁.....	90
6.3.1. 解析結果.....	90
6.3.2. FTMPに基づく評価.....	91
6.4. Lath 壁.....	93
6.4.1. 解析結果.....	94
6.4.2. FTMPに基づく評価.....	95
6.5. 結言.....	99
第7章 結論.....	101
参考文献.....	104
関連発表論文.....	113
付録 A 結晶塑性理論に基づく構成式の定式化.....	115
A.1. 微視的構成式の導出.....	115
A.1.1. 微視的変形機構の力学モデル.....	115
A.1.2. 微視的構成式的具体形.....	117
A.2. 抗応力モデル.....	117
A.2.1. 硬化比 $Q\alpha\beta$ に対する発展方程式.....	118
A.2.2. 転位間相互作用のモデル化.....	119
A.2.3. 有効セルサイズについて.....	120
A.2.4. 背応力モデル.....	121
A.2.5. 不適合度テンソル.....	122
A.2.6. ひずみ勾配項の具体形.....	123
A.3. 結晶塑性理論に基づく運動学と構成式.....	124
A.3.1. 接線係数法の導入.....	129
A.4. 有限要素方程式.....	131
付録 A 参考文献.....	134
謝辞.....	135

第1章 緒論

本論文は、FTMP (Field Theory of Multiscale Plasticity) という近年提唱されている不均質場の取り扱いに関する理論を、種々の転位系に対して適用し、それらの定量評価を試みることで、離散転位系を連続像に還元する道筋を示すことを目的としている。これまで FTMP は、主に結晶塑性論に基づく連続体モデルに活用され、有限要素解析においても変形誘起の不均質場の表現・評価が可能であることを示してきた。本論文では、現象論的仮定が少ない、物理シミュレーションに基づく解析結果に対して FTMP 的観点を適用する。これによって、これまでに無い観点からのメゾスケールにおける知見を示すだけでなく、連続体モデルへ還元する新たな術を見出していく。

対象とする離散転位系として、転位壁に関する4つの課題を取り上げる。すなわち、(a) 転位の可逆的な張り出し運動に伴う見かけの弾性定数の低下 (第3章)、(b) 疲労き裂発生過程に関わる固執すべり帯 (Persistent Slip Bands: PSBs) における転位運動 (第4章)、(c) 変形誘起下部組織の代表例である幾何学的に必要な境界 (Geometrically Necessary Boundaries: GNBs)、および (d) その他の安定・不安定な転位壁 (第6章) である。これらの対象はいずれも、従来からその重要性は認識されて来たが、実験観察を超えての本質的理解やモデル化が困難であったものである。

本論文で主に扱う転位壁は、変形中に金属結晶粒内に形成される、すなわち変形誘起の転位下部組織を代表する構成要素であり、その形成過程だけでなく、形成後の安定性・不安定性が金属材料内の損傷・破壊を含む各種機械的性質を決定付ける支配的な役割を担う。こうした組織に対しては、実験観察だけでなく、計算機による解析も一部行われており、近年の金属におけるマルチスケールの研究では転位壁の取り扱いについて議論されることも多いように思われる。しかしながら、加工硬化一つを取っても、その完全な予測に繋がるような、決定的な理論の構築は完成されていないと言われるほど、金属の力学における非線形領域には未解明な部分が多い [1]。このことは、例え変形誘起の転位下部組織を考慮しようにも、現状の構成式では自然に再現されることはなく、メゾスケールにおける現象をどのようにモデル化すれば良いのか、という手法が確立されていないということが一因にあると考えられる。本論文では、こうした問題に対して、転位下部組織に対する新たな評価法を提案すると共に、具体的な転位系に対して実施することで得られる知見について言及していく。

本章では、まず金属材料におけるマルチスケール問題について概説した後に、転位下部組織について述べる。その後、転位下部組織を数値的かつ直接的に取り扱う転位動力学法、転位を含む場の評価法、および FTMP (Field Theory of Multiscale Plasticity) による定量評価について述べ、本論文の構成を示す。

1.1.1. 金属材料におけるマルチスケール問題およびその取り扱い

金属材料における非線形的な力学的現象の解明には、電子や原子レベルのミクロスケールから、多結晶レベルの現象の理解を必要とする。金属材料の塑性変形は、転位芯の構造等に起因する転位の易動度および結晶格子に依存するだけでなく、結晶粒の寸法や、その数によっても変化する。こうしたことから、金属材料の力学的応答を詳細に予測するために、原子スケールから多結晶スケールの影響までを考慮した、マルチスケール解析の研究が進められている。

FTMP は、後述するように、転位等の欠陥を含む結晶を、転位密度テンソルおよび不適合度テンソルで表現するという、マルチスケールの研究における新たな手法を提案している。本節では他の手法を取り上げ、FTMP の立ち位置を述べる。

原子スケールから連続体モデルへと繋がるマルチスケール解析の手法は、主に、ミクロおよびマクロの問題を連成して同時に解くという、Concurrent 法と、ミクロの情報をパラメータとしてマクロへと還元する Hierarchical 法とに大別できる [2]。

Concurrent 法の例として、van der Giessen らは、2次元における、無限媒質中にある転位、および転位を含まない連続体モデルそれぞれの解を足し合わせることで、転位系が発展する連続体モデルの小ひずみ領域における塑性挙動を再現した [3]。後に 3次元への拡張も行った [4]。転位動力学法と、有限要素法または境界要素法とを組み合わせたこの手法は他の研究においても用いられている。有限要素法を用いた例として、Shehadeh らは衝撃荷重下での転位系の発展を解析している [5]。他にも、Zbib らはナノインデンテーション [6]やマイクロピラーの圧縮 [7]の詳細な解析を行っている。境界要素法と組み合わせた例として、El-Awady らは、転位に働く鏡像力の高精度な再現を行い、マイクロピラーにおける変形挙動を再現した [8]。その他、Takahashi らは、転位析出物間の相互作用の高精度化に成功し、分子動力学における臨界せん断応力との結果と良好な一致を見せている [9]。van der Giessen らの手法とは別に、Lemarchand らは、マイクロメカニクスに基づき、転位を固有ひずみとして取り扱うことで、離散系から連続系へと変換し、有限要素法で解く手法を提案した [10]。この手法は、転位間相互作用の計算負荷が抑えられるといった利点があり、Ni 基超合金における γ - γ' 相界面での転位系の発展の解析等に用いられた [11, 12]。上記の研究成果から見られるように、Concurrent 法は転位系の詳細な発展を追跡できるものの、現状では取り扱うことのできる系が単結晶スケールまでとなっている。

一方、Hierarchical 法では、下部スケールの情報が縮約されて扱われるものの、多結晶レベルのスケールも取り扱うことができる。Kocks および Mecking は、転位の蓄積による塑性への影響を、結晶塑性モデルに組み込んだモデルを提案した [13]。このモデルは今日の結晶塑性モデルにおける基礎となっている。Roters らは、各すべり系で

第 1 章 緒論

発展する SS (Statistically Stored), GN (Geometrically Necessary) 転位密度を考え, 各種転位密度の影響を流れ則に組み込み, FCC のせん断応答や, BCC の圧縮応答を再現した [14, 15]. 転位密度以外を考慮する場合もあり, 転位動力学による知見を活用した例として, Ohashi らは, 有限領域中にある Frank-Read 源の張り出し挙動を転位動力学法で解析することで臨界分解せん断応力を求め, それを連続体モデルへと還元することで, 多結晶体における, 結晶粒寸法に依存した応力応答を再現した [16]. また, Groh らは, 転位系の発展による硬化則を考え, 転位動力学法による解析を基にそのパラメータを求めることで, Al の圧縮応答の再現を行った [17]. その他にも, Shenoy らは, γ' 相の体積分率, サイズおよびサイズの分布の影響を臨界分解せん断応力に反映させることで, Ni 基超合金の応力-ひずみ応答の再現を行った [18]. このように, Hierarchical 法は結晶粒レベルの不均質性を取り扱い易い場合が多い.

金属材料の塑性変形を制御するためには, 変形の素過程となる転位の挙動を詳細に把握することが重要となる. この問題においては, Concurrent 法によるアプローチが威力を発揮すると考えられる. しかし, 工業における応用を視野に入れると, より大きなスケールも取り扱い易い Hierarchical 法は, 実用性の点で上回ると考えられる. Hierarchical 法によるアプローチを高精度化するためには, 金属の塑性変形で普遍的な要素である, 転位系をいかにして適切に捉えるか, ということが問題となる. 中でも, 変形中に形成される転位下部組織は, 転位の運動を支配する要因となるが, 変形に応じて形態が変わり, 材料内部での役割も異なってくることから, 容易にモデル化することはできない.

FTMP におけるミクروسケールの取り扱いは, 不均質場を転位密度テンソルおよび不適合度テンソルで表現し, 連続体モデルへと反映させるという点では Hierarchical 法に近いと言える. 一方で, 本論文のように不均質場の発展も取り扱い, 例えば転位系の安定・不安定性からマクロの応答を推察することも可能であるという点では, Concurrent 法的な側面も併せ持つ. こうした二面性により, 空間的な隔たりを超えて, ミクروسケールおよびマクロスケールの解析を取り扱うことが比較的容易となっている.

1.2. 転位下部組織

本論文では, 転位下部組織を取り扱い, 議論を行う. 本節では転位下部組織について説明し, 金属材料におけるマルチスケール問題での立ち位置を述べた後に, 本論文で対象としている問題に関わる組織について概説する.

まずは, 転位下部組織とは何かを概説する. 転位は正常な格子を歪める状態で導入されることから, その周囲にエネルギー場を形成する [19]. これによって転位の運動は

エネルギーが最小化する方向に決まり、転位同士で反発し合ったり、引き合ったりする。また、転位とはある線に沿って原子が特定の方向にずれた欠陥である、ということも合わせて考えると、転位同士の切り合いや接合によって、転位線の形状変化やトポロジー変化も生じる。こうした種々の反応が転位の移動と同時に生じることで、変形に応じた組織が、結晶の下部スケールで生じると考えられている。この組織が転位下部組織であり、負荷に応じた特徴的な形態が多数報告されている。例えば、圧延時には GNBs (Geometrically Necessary Boundaries) [20, 21], 繰り返し負荷の場合には PSBs (Persistent Slip Bands) [22]等、といった転位壁が普遍的に観察されている。

次に、マルチスケール固体力学における転位下部組織の立ち位置について述べる。Fig. 1.1 に示すように、転位下部組織は一般に、ミクロスケールとマクロスケールを結ぶ、メゾスケールの組織と捉えられ、近年の金属材料におけるマルチスケール問題の中心に位置している。マクロな理論である一般的な連続体力学ベースの弾性論や塑性論は、工業製品をつくる上で現実的な時間および空間スケール内での変形予測に適しており、幅広く用いられている。一方で、特に塑性域での変形応答は、現象論的な扱いが中心であり、理論を拡張させるためには、例えば転位間相互作用といった、ミクロスケールでの知見が必要となる。こうした個々の転位の振る舞いは、理論のみならず分子動力学法や第一原理計算によっても解析が可能ではあるが、ミクロにおける種々の転位間相互作用は材料内部で無数に生じ、必ずしも各素過程がマクロの応答と一対一に結び付けられる訳ではない。このような問題から、転位を個々として捉えるのではなく、集団として捉えることで、マクロの応答と結びつける可能性が拓けてくる。すなわち、一段スケールを上げることによって、転位下部組織が存在することで転位の挙動がどのように変化するのか、また、組織自体が導入されることによって、力学的に安定化するのか不安定化するのか、を議論することができる。こうした現状から、1.3 節に述べるように転位動力学法 [23, 24, 25]によって直接的に転位系の発展を解析する研究がなされている [26, 27]。同手法によって、詳細な転位間相互作用が解析されてきたが、その多くはミクロスケールでの現象の理解に留まっており、統一的な観点でマクロへの還元を試みる手法は確立されていない。

このように、転位下部組織を数値的に取り扱うことが、金属におけるマクロな力学的応答の詳細な予測のために必要であり、工学的にも重要な問題であると考えられる。この問題に対して、1.4 節で述べるように、離散転位系の定量化が種々行われてきた。しかしながら、3 次元の転位系は構造が複雑であることから、統一的な連続像への還元手法は確立されていないと言える。本論文では、転位動力学法を用いて転位系の解析を行うと共に、連続体モデルへの還元を視野に入れて FTMP による評価を試みる。FTMP による定量評価については 1.5 節で述べる。以下では、本論文で扱う非線形現象

第1章 緒論

および転位下部組織について概説し、本研究で取り扱う意義を述べる。

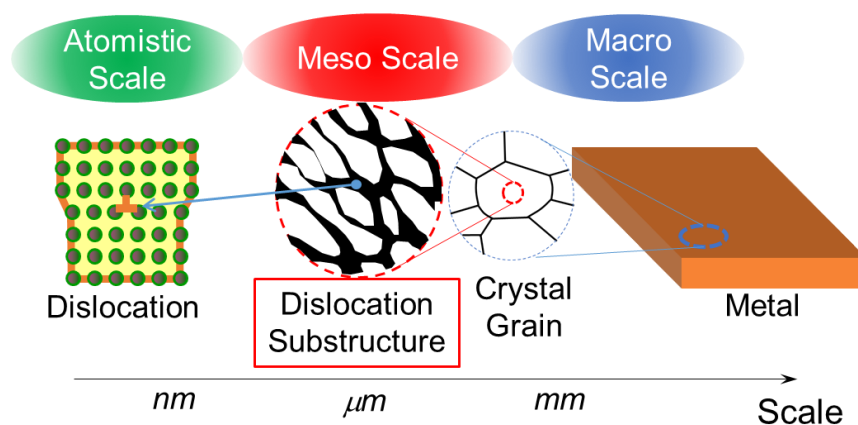


Fig. 1.1 Schematic drawing of hierarchical scales for metals.

1.2.1. 見かけの弾性定数の減少

Bauschinger 効果は、加工硬化した金属材料に反対方向の塑性変形を与えると、予ひずみ方向への負荷を与えた時に比べて低い応力で降伏する現象であり [28]、除荷の過程で生じる、見かけの弾性定数の減少がこれに寄与していると考えられる [29, 30]。塑性加工においては、スプリングバック [31]の予測に関する問題として、Bauschinger 効果のモデル化は重要な位置を占めている。現状では現象論的なモデル [29]が中心となっており、物理モデルの構築に関しては未だに議論の余地がある。Bauschinger 効果の解明に際しては種々の検討 [28]が加えられており、概説すると Fig.1.2 に示すように、負荷の時に発達した転位下部組織や、結晶粒および多結晶レベルの不均質変形によって背応力が生じ、除荷の時に負荷とは反対方向への変形を助長する機構が発現することによって、見かけの軟化が起こる。最もマイクロなスケールでは、ピン留めされた転位が負荷によって張り出し、除荷時に元に戻るという可逆的な運動が起こる [32]。これによって、弾性的なひずみの回復に加えて、転位が動くことによる塑性ひずみが合わさり、除荷時に見かけの弾性定数の低下が生じると考えられる [33]。Bauschinger 効果の再現に際して、転位の堆積による効果を取り入れた解析は行われている [34]が、弾性定数の低下に関しては、現状、現象論的にひずみの関数として扱われている [29]。これに対して、上記、物理的なメカニズムに基づいたモデルの構築によって、より詳細に Bauschinger 効果が予測できるだけでなく、同現象を制御する際の手掛かりとなり得る。

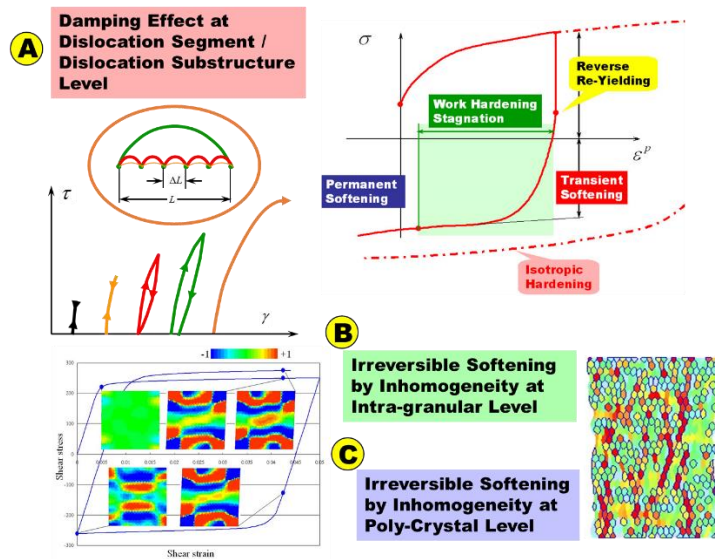


Fig. 1.2 Pictorial presentation of hierarchical scales affecting Bauschinger effect.

1.2.2. PSBs (Persistent Slip Bands)

金属材料の疲労現象の解明および予測は工学における難問の一つであるが、繰り返し負荷時に発達する PSBs [22]がき裂発生の主要因であるということが報告されている [35, 36, 37, 38, 39]. Fig. 1.3 に示すように、PSBs は刃状転位の双極子が密に並んだ Wall 部と、転位がほとんど存在しない Channel 部とで構成されている. 塑性変形が生じる際には、Wall 部から Channel 部へと転位が張り出すことによってほとんどの変形が担われる. この時、対向している Wall 部からの転位と Channel 部で対消滅が頻繁に繰り返される等、複雑な転位間相互作用が生じて、原子空孔や格子間原子が生成される [35, 36]. こうした生成物は、拡散によって Matrix 部へと抜けることによって、入込みや突出しの形成を助長すると言われ、それらはき裂に繋がりが得る [38, 40, 41]. このことから、PSBs における転位の挙動を正確に追跡し、連続体モデルへと還元することは、疲労現象のモデル化に繋がれると期待できる.

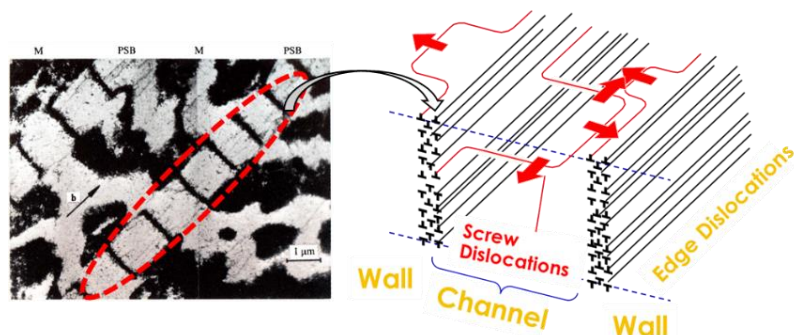


Fig. 1.3 TEM micrograph for PSB ladder structures in fatigued copper [22], together with a schematic illustration of a pair of ladder walls comprised of bundles of dipoles with bowing out screw pairs [42].

1.2.3. GNBs (Geometrically Necessary Boundaries)

GNBs [20]は、金属材料の塑性変形に伴う結晶粒の回転を緩和する形で、方位差を伴って導入される転位下部組織である。亜粒界としての性質を有する [43][44]同組織に対しては詳細に観察が行われており、近年その構造も判明している [21]。さらに、転位が低エネルギー構造を取ることを前提とした理論による予測と、その観察結果とは良好な一致を見せている [45]。GNBs が低エネルギー構造であるということを見極めて場の理論に基づく評価を行うことは、GNBs を出発点として、他の転位下部組織を相対的に捉えられるようになる。このことは、種々報告されている転位下部組織を統一的な視点から整理する際の足がかりになると考えられ、転位壁の性質を見出す上での重要な知見となり得る。

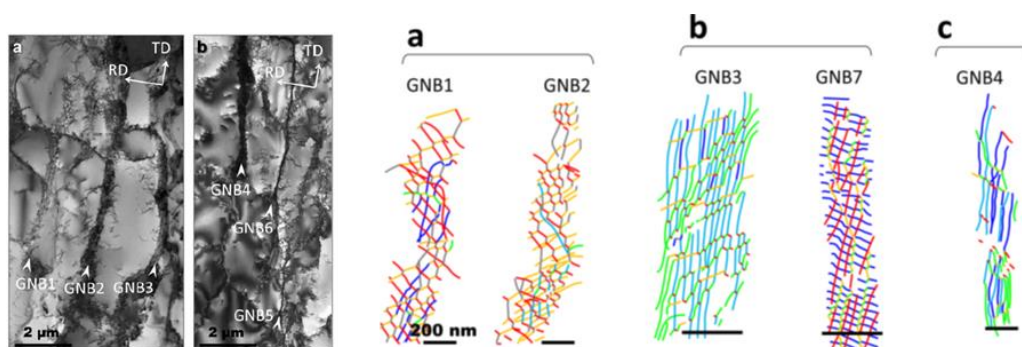


Fig. 1.4 TEM micrographs for GNBs in rolled aluminum [21], together with their detailed morphologies [45].

1.3. 転位動力学法

本論文では、転位動力学法を主とした解析を行い、FTMP に基づく評価を行う。本節では、転位動力学法について述べると共に、同手法を用いた研究例を挙げ、本研究の立ち位置を述べる。

転位を数値的に取り扱う転位動力学法は、メゾスケールでの現象の解明のために開発されてきた。同手法は、Brown [46]やForeman [47]の報告等が基礎になっていると言われており [26]、転位を線で表現して、それらがつくる弾性場から転位の運動を解析する。コンピュータシミュレーションとしての転位動力学法は、Amadeo および Ghoniem の報告 [48]が初めてであり、ここでは 2 次元における解析手法を提案した。その後、Kubin らは 3 次元への拡張を行った [23, 49]。この時の転位線は刃状およびらせん転位の 2 種類で表現されており、混合転位による表現が無かったため、ジグザグ形状をしている。後に Zbib らは直線に離散化する手法を提案し [50]、Ghoniem らは任意曲線による転位の表現を行った [51]。本論文でも用いる、Zbib ら [52][53]が提唱する方法は、任意の曲率を有する転位を直線転位に離散化し、応力場の理論解を適用することで、その運動の発展の源である Peach-Koehler 力を求める。この手法によって、Ghoniem ら [24]が提案するような、スプライン補間によって転位線を表現する手法と比べて低コストで格子欠陥の解析を行うことができる。ジャンクションの形成や、対消滅等の、転位芯を含む反応、および交差すべりは、特定の条件を満たした時に生じるといった、ローカルルールを導入して実現している [54, 55, 25]。

このように発展してきた転位動力学法によって、種々の転位壁に対する解析が行われてきた。転位動力学法によるメゾスケール組織の研究は、Amadeo および Ghoniem による、2 次元における PSBs や Cell といった変形誘起の組織形成シミュレーションに始まる [56]。本報告では、マクロ応答への影響は議論せず、形態形成のみに主眼を置いており、転位下部組織の形態形成は必ずしも低エネルギー化の過程を経て行われる訳では無いと論じている。Cell のマクロへの影響は Kubin の報告にあり、3 次元において、負荷に伴う Cell の形成を行っている [23]。ここでは、Cell は交差すべりによる動的回復によって形成され、構造が安定化することで加工硬化に寄与すると報告している。また、Hussein および El-Awady [57]も Cell 組織形成を試みており、同様に交差すべりが寄与することや、結晶粒サイズの依存性についても議論をしている。PSBs に対する 3 次元シミュレーションは、El-Awady ら [42]や Erel [58]によって行われ、Channel 部で形成される転位双極子を乗り越えるための応力や、双極子ループの形成過程等の転位間相互作用の詳細が報告されている。その他の転位壁に対する研究では、小傾角粒界に関する転位間相互作用の報告が Liu ら [59][60]や、Verdhan および Kapoor [61]によってなされている。これらの報告では、小傾角粒界を転位列によってモデル

第1章 緒論

化し、種々の転位との相互作用を解析することで、詳細な転位間相互作用および応力レベルへの影響等を議論している。

以上のように、転位動力学法を用いることによって、実験や理論による予測では容易にわからない、転位の集団としての機能が多数報告されている。これらのことは、メゾスケールにおける現象の解明に寄与しているが、現状では報告の多くが、あくまでも理解に留まっているように思われる。転位動力学法で得られた知見を、いかにマクロ挙動への予測に繋げれば良いのかといった道筋は必ずしも示されておらず、マルチスケールの観点で言えば不十分であると考えられる。

格子欠陥レベルにおける現象を理解し、マクロへと還元するために種々の定量化手法が用いられてきたが、これについては次節で述べる。

本論文では、転位の集団的挙動の過程を追跡すると共に、解析で得られた離散像を、不適合度テンソルを主とした連続像で捉えていく。上述したような研究と同様にメゾスケールでの現象を詳細に解析するだけでなく、これまでに無い統一的観点で各種転位系を整理することを試みる。こうした試みによって、転位壁としての性質を新たな観点で見出すことができるだけでなく、連続体の言葉として捉えることで、マクロスケールの解析にも適用し得る知見を得ることが可能になると推察できる。

1.4. 転位系の定量評価

前節で述べたように、転位動力学法の登場によって、塑性変形の進行に伴う転位系の発展が詳細に解明しつつある。その結果をいかにしてマクロスケールのモデルへと還元するのか、といった課題に対しては、まず、その得られた転位系を定量的に表現する必要がある。本論文では、主に不適合度テンソルによる評価法を採用しているが、本節では、マルチスケール解析で行われてきた定量化の手法を取り上げ、それぞれの利点および欠点を述べる。

最も簡単に転位系を捉える手段としては、転位密度による評価が挙げられる。これは、単位体積あたりの転位の総長さから求められるため、容易に得られやすく、Bailey-Hirsch の関係から [62]、転位密度とせん断応力を結び付けられるため、変形予測に用いられることが多い。しかしながら、転位系の形態に関する情報は含まれていないため、各種加工条件に応じた変形応答を表現するには不十分であると考えられる。例えば、強加工材の転位密度は $10^{10}\sim 10^{12}[\text{cm}^{-2}]$ と言われている一方で、繰り返し変形時に観察される PSBs の転位密度も、Vein 部と合わせて $10^{11}\sim 10^{12}[\text{cm}^{-2}]$ [22]と、同程度である。1.1.2 項で述べたように、PSBs では、独特な転位の配置から、転位の運動によって通常の変形とは異なる機構が発現すると考えられることから、転位密度のみで転位系を表現するのは不适当である。転位密度を反映させる場合と似たような手法として、

転位壁の間隔等, 組織を特徴づける幾何学的な因子をパラメータとしてマクロ応答を予測する手段もあり, GNBs や PSBs を形成する場合に対しては予測の良好な一致を見せている [63, 64]. しかし, 転位系が規則的な壁を形成しないような場合には適用しにくく, 複雑な形状になればそれを特徴づけるために多数のパラメータが必要になると考えられる.

その他の方法として, 転位系の Shannon エントロピー [65]を計算した例がある [57]. 計算セルや TEM 画像を任意の格子に分割し, その中の転位を数えるという, Box-counting 法 [66]によってエントロピーを求め, 構造を数値的に捉える. 配置のエントロピーという概念によって, 統計力学的な対応から議論の発展の余地がある. さらに, 原理的には構造を定量化するにあたって適当なように考えられるが, Box-counting 法の都合上, 例えば転位双極子がどの程度接近しているか, といった配置の詳細は捉えにくい. 配置のエントロピーは, 転位がどの程度散らばって存在するのかは捉えられるが, 距離の概念が無い場合, 万能な手法とはなりにくいと考えられる.

近年, 転位系を表現するにあたって最も用いられている指標は転位密度テンソルである. Nye [67]によって考案された同テンソルは, 転位の属性, すなわち刃状転位およびらせん転位の情報を含んでおり, 微分幾何学におけるねじれに対応する概念であることが Bilby [68]や Kondo [69]によって発見され [70], 注目を集めた. 転位密度テンソルは転位線の方向およびその Burgers ベクトルの方向の情報を有しているため, 転位壁がどの転位で構成されているのかといったことや, 構成する転位が変形の進行に伴ってどのように変化していくのか, といったことが捉えやすい. しかしながら, 転位密度テンソルも非局所量では無いため距離の概念は無く, 構造そのものを示しているとは言い難い. さらに, 転位双極子を数えた場合に消失するという問題を抱えている.

格子欠陥をいかにして捉えるか, という課題にあたって, Kondo は曲率の概念を提示している [69, 71, 72, 73]. Kondo は, 通常の弾性論におけるひずみの適合条件式が, Riemann-Christoffel 曲率の消失条件と一致するという発見 [74]から, 不適合度テンソルが曲率テンソルに対応するというところを見出し, 欠陥を含んだ場の曲率に着目した. ねじれは格子欠陥を含む任意の回路を正常格子に投影した際, 回路が閉じないということを示す概念であり, このことは転位の Burgers ベクトルと対応する. 一方で, 曲率は, 正常格子に投影した際に, あるベクトルが回転するという概念である. 転位双極子のような, 正常格子に投影しても回路が閉じてしまうような系であっても, ベクトルの回転は生じる. 同様の考え方で, 原子空孔や, 格子間原子でさえも曲率で捉えることが可能である. これに着目した, Hasebe が提唱する FTMP [75, 76, 77, 78, 79]に基づく結晶塑性解析では, 不適合度テンソルを結晶の硬化比に導入することで, 結晶方位に応じた, 転位下部組織の再現に成功している [80].

1.5. FTMP (Field Theory of Multiscale Plasticity)による定量評価について

前節で述べたように、一般の格子欠陥は不適合度テンソルによって表され得る。こうしたことから、FTMP では、転位等の欠陥を含んだ結晶空間を不均質な場として捉え、この場を定量化する手段として特に不適合度テンソルを重要視する。さらに、不均質場の発展を担う原理を具現化した作業仮説として、FTMP において提唱されている Flow-evolutionary 則 [80]では、不適合度テンソルおよび不均質場に働く力であるエネルギー・運動量テンソルのゆらぎとの関係を提唱しており、その帰結として不適合度テンソルの対角和と系のハミルトニアンとの関係が導かれている。この両者をプロットした双対線図によって、転位系の変化とそれに伴うエネルギーの流れとが明確に結び付けられ、時間と共に変化する転位の構造がエネルギーの蓄積を担うのか、または解放に至るのか、などの詳細情報が視覚的かつ定量的に記述される。さらに双対線図に加えて、相空間トラジェクトリ (PhS-T) [78]による評価法も提案されており、双対線図では捉えにくい、転位運動を伴う動的な安定性についても議論を行うことができると期待される。

このような転位系における場の記述によって、例えば、転位下部組織の安定性といった、実験・観察からは得られにくいような知見が得られると期待できる。こうした新たな知見は、より詳細な転位系の機能を示すだけでなく、同組織が与える力学的応答への影響や組織形成の要因についての検討にも繋げられる。また、離散転位系を不適合度テンソル等によって連続像へ還元することは、同じく連続の場で記述されるマクロなモデルへ同転位系を反映させる手段となり得る。

1.6. 本論文の構成

本論文では FTMP に基づく新たな評価法によって転位系を捉えることで、離散像を連続像へと還元し、転位下部組織を統一的な観点で整理する。これまでねじれの概念を中心として捉えられてきた転位系に対して、曲率という概念を用いるという新たな試みを行う。これにより、メゾスケールの組織に対して新たな知見をもたらすだけでなく、マクロな系への適用も視野に入れた報告を行っていく。従来の FTMP に基づいた研究では、マクロな FEM モデルへの適用が主であったが、本論文では具体的な転位系に対して場の理論的評価を行い、マルチスケールの研究への寄与を図る。以下に各章の概略を述べる。

第 2 章では、本論文で用いる転位動力学法や、FTMP に基づく評価について、具体的に述べていく。第 3 章では、見かけの弾性定数の減少について、転位動力学法に基づいた解析および、FTMP に基づく評価を行う。同時に、その知見を結晶塑性解析に適用し、FTMP に基づいたマルチスケールモデリングを試みる。第 4 章では、PSBs の

解析および評価を行う。ここでは、PhS-T [78]による評価法を行い、PSBsにおける安定性や複雑な転位間相互作用がどのように表れるのかを述べる。第5章では、GNBsに対する解析および評価を行う。GNBsという、安定な組織に対して議論を行い、転位下部組織の安定性についての知見を得る。第6章では、混合転位壁やLath壁の解析および評価を行い、第5章で得られた知見と合わせ、転位下部組織に対するFTMPに基づいた新たな描像を提案する。第7章で本論文の総括を述べる。

第2章 理論および解析手法

本論文では離散転位動力学法で求めた転位分布を対象とし、FTMP [80]に基づいて不適合度テンソルおよび弾性ひずみエネルギーを中心とした評価を行う。本章ではFTMP について述べ、その基礎概念となる転位密度テンソルおよび不適合度テンソルについても記述する。また、本論文で中心的に扱う Flow-evolutionary 則、双対線図および相空間トラジェクトリ (Phase-Space Trajectory: PhS-T) についても説明し、それらの構成要素である不適合度テンソルや弾性ひずみエネルギーをどのように具体的に求めるのかを示す。さらに、離散転位系の解析にあたっては既存の解析コードを用いており、ここでは Zbib ら [25]が提案する離散転位動力学法について、その概要を述べる。

2.1. FTMP (Field Theory of Multiscale Plasticity) とは

材料における力学的な種々の問題の解明のためには、階層的な構造を把握する必要がある。すなわち、原子や格子欠陥といったミクロスケールから、転位下部組織や結晶粒といったメゾスケールを通じ、結晶粒集合体や連続体レベルのマクロスケールまでに至る階層を結びつけることで、塑性変形や損傷・破壊の詳細を議論することができる。しかし、一般に全ての階層の影響をモデルに取り入れることは、時空間的なスケールの隔たりから困難である。こうした問題への試みとして、Hasebe [77, 78, 79, 80] は、各階層における、スケール間相互作用を含む不均質性の発展を取り扱う FTMP を提案した。

FTMP においては、3つの場の特徴、3つの場の理論、および3つの階層的なスケールが中心的な概念として据えられている。これらの内、場の特徴は、場の発展、記述および連携であり、(a) 不均質場がなぜ、どのように発展し、(b) それらをどう数学的に記述するのか、そして、(c) 発展する不均質性がなぜ、どのようにして相互作用および連携していくのか、ということを示している。こうした問題に対して、3つの場の理論、すなわち、(1) 微分幾何学的場の理論、(2) ゲージ場の理論、および(3) 量子場の理論によって解決を試みる。材料における主要な階層としては、最下層を(A) 転位下部組織とし、その後は(B) 結晶粒、(C) 結晶粒の集合体(多結晶体)と続く。これらの階層は、材料内において、それぞれ、変形の(A) 貯蔵装置、(B) 吸収装置および(C) 調整装置と見做されている。本論文では、転位下部組織の発展を中心に議論し、FTMP における場の発展、記述および微分幾何学的場の理論を主に取り扱う。

FTMP では、特に曲率テンソル(不適合度テンソル)を“不均質な場を特徴づける量”として捉え、理論の構築および発展をさせている。同理論に基づき、不適合度テ

ンソルを用いることで、前述したような格子欠陥および転位群の表現のみならず以下のような応用が可能である。

- ・複数のスケールにおける不均質変形の表現 [81]
- ・エネルギーとの双対性に基づいた Flow-Evolutionary 則の導出およびその仮説に基づいた各スケールの不均質場の評価 [82]
- ・ミクロな自由度を与えることによる種々のモデル(双晶, ラス等)の作成 [83, 84, 85, 86]

2.2. FTMP における基礎概念

FTMP では、不均質場を記述するにあたって、微分幾何学に基づく空間のねじれおよび曲率にそれぞれ対応する転位密度テンソルおよび不適合度テンソルを用いる。とりわけ、不適合度テンソルは、転位そのものだけでなく、転位の構造やその他、原子空孔を含む一般の不均質場をも定量化し得ることに加え、Flow-evolutionary 則との絡みでこれら不均質場発展の支配因子となることから、FTMP において最も重要な概念となっている。

本節では、FTMP の基礎概念となる転位密度テンソルおよび不適合度テンソルについて述べ、それらの微分幾何学的な意味を示すと共に、本論文で主要な評価方法となる Flow-evolutionary 則, 双対線図, および相空間トラジェクトリについても記述する。さらに、各評価方法の構成要素となる不適合度テンソルおよび弾性ひずみエネルギーの具体的な計算方法についても述べる。

2.2.1. 転位密度テンソル

(a) Burgers ベクトル

転位の性質（刃状, らせん, 混合転位）は、すべり方向への大きさ b を持つベクトル \mathbf{b} と転位線の方向との関係によって定義づけられる。この \mathbf{b} を Burgers ベクトルとよび、Burgers ベクトルの定義について記す。まず Fig. 2.1 (a) に示す、転位を含む不完全結晶を考える。同図における結晶格子の任意の原子 (S) から、反時計回りに転位線のまわりを回って同じ位置 (F) に戻る、閉じた回路 (Burgers 回路) を作る。次に Fig. 2.1 (b) は、格子欠陥を全く含まない完全結晶である。この完全結晶内で、Fig. 2.1 (a) のようにして作成した不完全結晶の Burgers 回路と対応する回路を作ってみると、始点 S と終点 F が一致しない。転位の Burgers ベクトルは、この F と S を結ぶベクトルによって定義される。

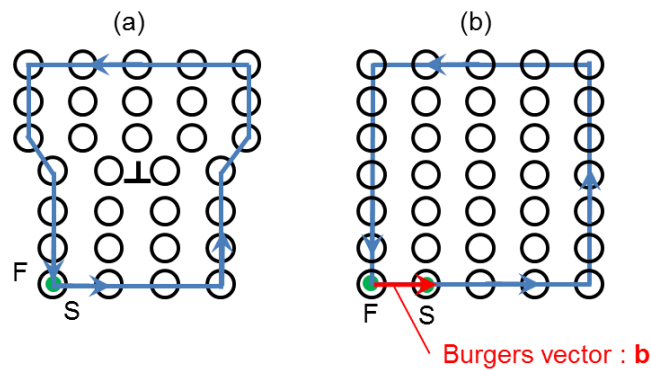


Fig. 2.1 Schematic illustration of Burgers circuit for (a) imperfect crystal with dislocation, and (b) perfect crystal with burgers vector where starting and finishing points are indicated by S and F, respectively.

(b) 転位密度テンソル，GN（Geometrically Necessary）転位

前節で示したような Burgers ベクトル \mathbf{b} が存在する場合，転位密度テンソル $\boldsymbol{\alpha}$ で以下のように表すことができる [67].

$$\mathbf{b} = \int_S \boldsymbol{\alpha} \cdot d\mathbf{S} \quad (2.1)$$

なお， S は任意の Burgers 回路で囲まれた面積， $d\mathbf{S}$ は Burgers 回路内の微小面積要素の方向（通常は転位線方向）を示す。

転位密度テンソルは転位が存在することによる回路のズレを表していることから，Fig. 2.2 で示されるような，GN 転位 [87] と呼ばれる転位を表現している。塑性変形が起こっている箇所と起こっていない箇所の境目には転位が存在し，変形の幾何学と転位を結びつけたものが GN 転位である。GN 転位は Fig. 2.2 に示すように塑性ひずみの勾配を生み出す転位である。

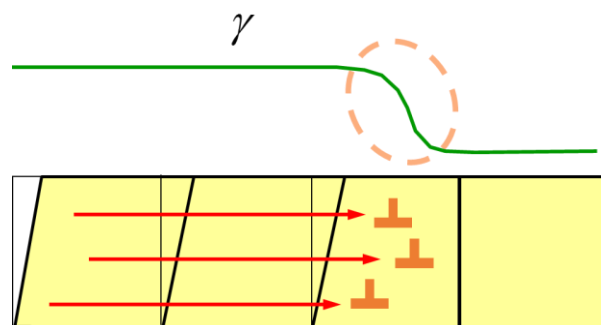


Fig. 2.2 Schematic drawing of effect of GN dislocation on macro strain.

2.2.2. 不適合度テンソル

転位密度テンソルは GN 転位が用いられていることを上述したが、GN 転位では表せない、つまり転位密度テンソルでは表現できない欠陥が存在する。不適合度テンソルは、こうした欠陥も表現できる性質があり、以下にその概念を示す。

Fig. 2.3 (a) に示すのは、転位対（転位双極子）を含む不完全結晶である。ここでも Fig. 2.1 と同様に、結晶格子の任意の原子（S）から、反時計回りに転位線のまわりを回って同じ位置（F）に戻る Burgers 回路を作る。Fig. 2.3 (b) は完全結晶であり、Fig. 2.3 (a) のようにして作成した不完全結晶の Burgers 回路と対応する回路を作ってみると、点 S と終点 F が一致し、Burgers ベクトルが存在しなくなることがわかる。このように、転位が集団で存在すると、転位密度テンソルで表現できない場合が出てくる。こうした転位群は、SS (Statistically Stored) 転位と呼ばれ、Fig. 2.4 (a) に示すように、マクロに見た場合には塑性ひずみの勾配を生み出さない。SS 転位は材料中に、様々な要因（転位対、ジャンクション等）によって蓄積した転位を表現している。

しかし、SS 転位もミクロに見た場合には塑性ひずみの勾配があるように、Burgers 回路の取り方によっては回路内の転位が SS 転位から GN 転位に変わる (Fig. 2.4 (b))。すなわち、Fig. 2.3 のような転位対であっても、ミクロに捉えることで、大きさが同じで正負が反対となる転位密度テンソル対が得られる。この場合の系全体の転位密度テンソルは、総和を取ることで消失するが、不適合度テンソル η は、以下に示すように、転位密度テンソルの勾配によって得られるので、双極子のような格子欠陥も、幾何学量として表現することが可能となる。

$$\eta = -(\nabla \times \alpha)_{sym} \quad (2.2)$$

ここで、 $()_{sym}$ は対称化操作を示す。上式は、塑性ディストーションテンソルおよび塑性ひずみテンソルをそれぞれ β^p および ϵ^p とした時、 $\alpha \equiv -\nabla \times \beta^p$ および $\eta \equiv \nabla \times \nabla \times \epsilon^p$ という関係から求められる。なお、式(2.2)より、不適合度は転位密度テンソルの勾配を取ることで求められることから、転位対以外からも不適合度は得られる。このように、系全体の転位密度テンソルが消失するような場合でも、ミクロな場を介して求めた不適合度テンソルは消失しない。

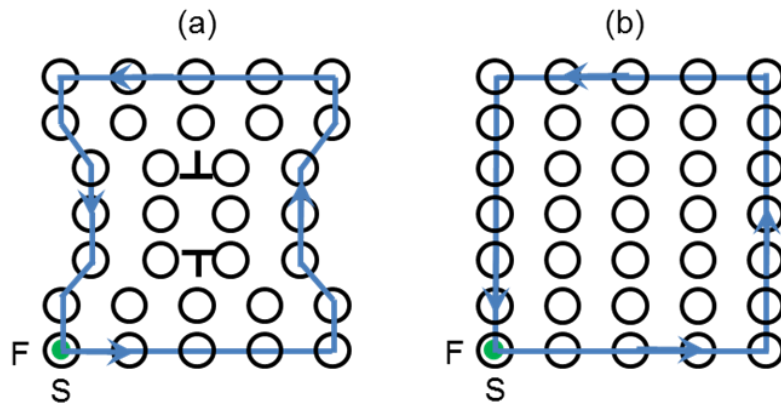


Fig. 2.3 Schematic illustration of Burgers circuit for (a) imperfect crystal with dislocation, and (b) perfect crystal with burgers vector; starting and finishing points of which are indicated with S and F respectively.

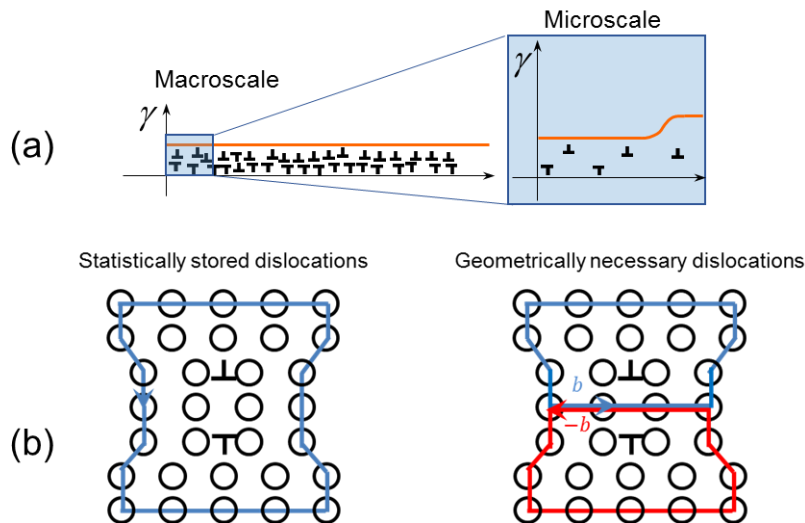


Fig. 2.4 Relation of GN dislocations in micro scale and SS dislocations in macro scale.

2.2.3. 転位密度テンソルおよび不適合度テンソルの幾何学的解釈

転位論と微分幾何学との対応関係は Kondo [69]によって発見され、さらにそれとは独立に Bilby ら [68]によっても見出された。これによって非 Riemann 塑性論が始まり、転位のみならず回位や原子空孔の影響等も連続体モデルに組み込める可能性が示されている [88]。ここでは、転位密度テンソルおよび不適合度テンソルがそれぞれ微分幾何学における捩率テンソルおよび曲率テンソルに対応することを示し、転位密度テンソルおよび不適合度テンソルが FTMP において空間のねじれおよび曲

率と呼ばれる理由について述べる．数式の表記は指標表記で行い，一つの項に同じ指標がある場合は総和規約に従う．

非 Riemann 塑性論は，例えば Fig. 2.1(a)に示したような，欠陥を含む一般の物体が非 Riemann 空間にあるとして，それを Fig. 2.1(b)のように，欠陥のない自然状態へと解放することによる差異から欠陥を定量化する．非 Riemann 空間とは，局所的には Euclid 的である空間が，無数に集まった空間である [89, 90, 91]．局所的には直交座標系を定義することが可能であり，2 点間の Euclid 的距離を求める場合は，接続の係数によって一方の点で定義された Euclid 空間を，他方の点で定義された Euclid 空間に接続する必要がある [92]．このように順次 Euclid 空間を接続していく操作が解放とよばれる操作である．

Fig. 2.5 (a) のような，非 Riemann 空間にある閉回路に沿って点 P が一周する場合を考える．通常の Euclid 空間であれば一周後も一致するはずであるが，非 Riemann 空間にある場合は各点で定義された Euclid 空間を順次点 P の Euclid 空間に接続していく必要があるため，一般に一致しなくなる (Fig. 2.5 (b)) ．接続の係数を $\Gamma_{\mu\lambda}^{\kappa}$ とし，微小項を無視し，さらに点 P におけるベクトルを P_i とした時，この食い違い量 ΔP は， $dP = du^i P_i$ および $dP_i = \Gamma_{jk}^i du^j P_k$ を利用して，次式のようになる．

$$\begin{aligned} \Delta P &= \delta dP - d\delta P \\ &= (\delta du^i) P_i + du^i \delta P_i - (d\delta u^i) P_i - \delta u^i dP_i \\ &= (\Gamma_{jk}^i - \Gamma_{kj}^i) du^j \delta u^k P_i \\ &= S_{jk}^i du^j \delta u^k P_i \end{aligned} \quad (2.3)$$

ここで， S_{jk}^i は捩率テンソルと呼ばれる．同様に，点 P において定義されたベクトル P_i も閉回路を移動することで \bar{P}_i へと変更を受ける．この時のベクトルの変化 ΔP_i は，

$$\begin{aligned} \Delta P_i &= \delta dP_i - d\delta P_i \\ &= \delta(\Gamma_{ik}^j du^k P_j) - d(\Gamma_{ik}^j \delta u^k P_j) \\ &= \left(\frac{\partial \Gamma_{ik}^j}{\partial u^h} - \frac{\partial \Gamma_{ih}^j}{\partial u^k} + \Gamma_{ik}^a \Gamma_{ah}^j - \Gamma_{ih}^a \Gamma_{ak}^j \right) du^k \delta u^h P_j \\ &= R_{ikh}^j du^k \delta u^h P_j \end{aligned} \quad (2.4)$$

上式で， R_{ikh}^j は曲率テンソルと呼ばれる．このように，非 Riemann 空間としての性質は，並進的な変化を示す捩率テンソルおよび，回転的な変化を示す曲率テンソルで表現される．

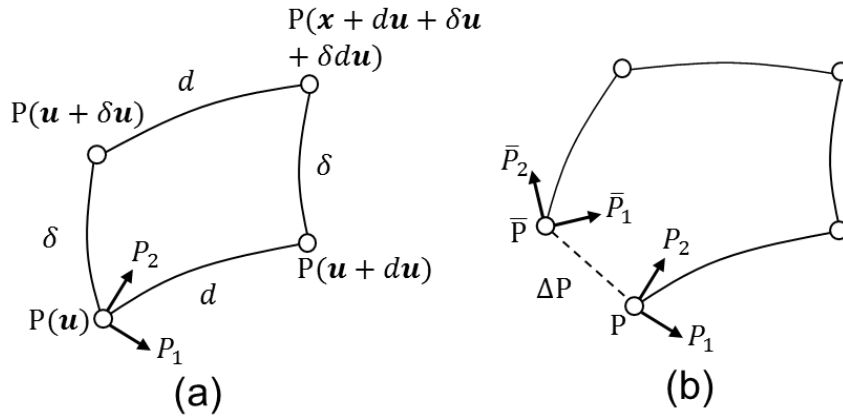


Fig. 2.5 Schematic drawing of concept of torsion and curvature. Discrepancy is generated when a closed circuit in non-Rimannian space (a) is mapped onto Euclidian space on point P (b).

ここで、Fig. 2.1 と Fig. 2.5 とを見比べると、転位密度テンソルの概念が捩率テンソルのそれと対応することがわかる。すなわち、転位を含む領域で回路を取ると始点と終点で一致しなくなる、という考え方は、始点と終点で並進的な食い違いが生じる、という考え方になる。したがって、以下の関係が成立する。

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{2} \epsilon_{ikl} S_{kl}^j \quad (2.5)$$

一方、曲率テンソルは、Levi-Civita の平行性では接続の係数が計量テンソル g_{ij} を用いて、

$$\Gamma_{jk}^i = \frac{1}{2} g^{il} \left(\frac{\partial g_{lj}}{\partial x^k} + \frac{\partial g_{kl}}{\partial x^j} - \frac{\partial g_{jk}}{\partial x^l} \right) \quad (2.6)$$

と書けることから、偏微分係数に関する 2 次以上の項を省略して共変形式で書くことにより、

$$R_{ijkl} = g_{lh} R_{ijk}^h = \frac{\partial g_{lj}}{\partial x^i \partial x^k} + \frac{\partial g_{ik}}{\partial x^j \partial x^l} - \frac{\partial g_{jk}}{\partial x^i \partial x^l} - \frac{\partial g_{lk}}{\partial x^j \partial x^k} \quad (2.7)$$

となる。ここで、物体が変形によって Euclid 空間から非 Riemann 空間に移ったと考えると、ひずみテンソルは計量テンソルおよび Kronecker のデルタ δ_{ij} によって、以下の形式で表現できる [74].

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} (g_{ij} - \delta_{ij}) \quad (2.8)$$

上式を式(2.18)に代入すると,

$$R_{ijkl} = \frac{\partial \varepsilon_{lj}}{\partial x^i \partial x^k} + \frac{\partial \varepsilon_{ik}}{\partial x^j \partial x^l} - \frac{\partial \varepsilon_{jk}}{\partial x^i \partial x^l} - \frac{\partial \varepsilon_{lk}}{\partial x^j \partial x^k} \quad (2.9)$$

が得られる. 式(2.20)はひずみの適合条件式そのものであり, 不適合度テンソルの定義と一致する. したがって, 以下の関係が成り立つ.

$$\eta_{ij} = \frac{1}{4} \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} R_{klmn} \quad (2.10)$$

こうしたことから, 転位密度テンソルは空間の捩じれを表す一方で, 不適合度テンソルは空間の曲率を表すと言える.

2.2.4. 不適合度テンソルの特徴

式(2.2)に示したように, 不適合度テンソルは, 転位密度テンソルに対する Curl 操作で求められることから, 転位系における非局所量となり, 転位の構造を定量化し得る性質を持つ. 本節では, それについて述べていく.

Fig. 2.6 に転位線の配置パターンを変えた, 5通りのモデルを示す. 各モデルの転位密度テンソルノルムは, 空間内の転位成分が同じであるため, 全て同一の値を示す. 一方, 不適合度テンソルノルムは, 不適合度テンソルが空間内の転位密度テンソルの勾配をとるため, それぞれ異なる値をとる. このことから, 転位密度テンソルが個々の転位の情報のみを含むのに対し, 不適合度テンソルは転位群の配置や形態といった情報も含むと言える. したがって, 不適合度テンソルは, 転位対のような欠陥の表現のみならず, 転位群の配置や形態を特徴づけることが可能であると考えられる.

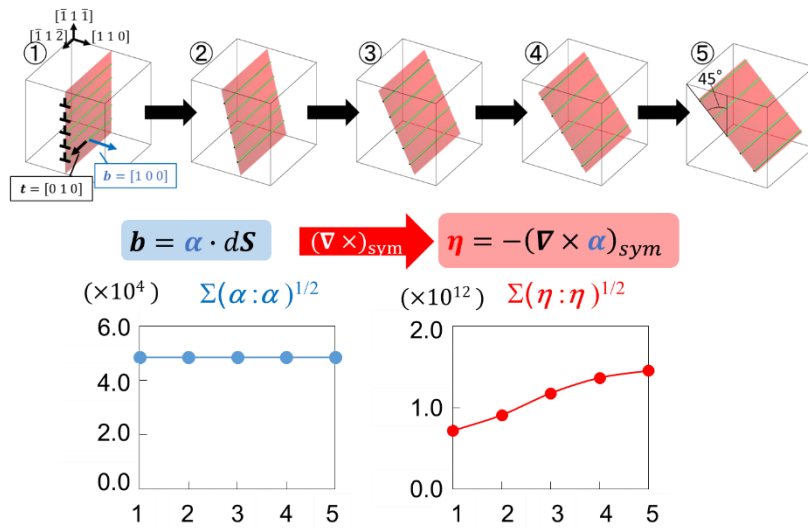


Fig. 2.6 Examples of dislocations in different configurations.

2.2.5. Flow-evolutionary 則

不適合度テンソルは、転位系のような欠陥を含む場の記述に優れる指標ではあるが、微分幾何学に基づく転位系の記述のみでは、場の発展を取り扱うことは難しい。Hasebe はエネルギー散逸に伴う局所塑性流動を表現する Flow-evolutionary 則 [80]を提唱しており、これによって不適合度テンソルという、不均質場を記述する幾何学量と、不均質力という物理量との関係性が示され、場の発展を明確に記述することが可能となる。以下では、同則に基づいた不均質場とエネルギーの間の定式化を示す。

エネルギーモーメントテンソル T_{ij} と不適合度テンソル η_{ij} がともに発散が零であるという数学的性質に基づき、対応する保存ベクトル量を次式で定義する。

$$\begin{cases} \partial_n \eta_{ab} = 0 \\ \partial_n T_{ab} = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \delta u_a^{incom} \equiv u_{ref} \int_S n_b \eta_{ab} dS \\ \delta f_a^{inhom} \equiv \int_S n_b \delta T_{ab} dS \end{cases} \quad (2.11)$$

ここで、 $a, b=1, 2, 3, 4$ であり x_4 は時間座標 t を表す。前者は不適合変位、すなわち基準変位を u_{ref} とした場合の変位の不確定性を表し、後者は不均質力を表す。また、ここで議論されるべきは局所的に発展する不均質場であり、全体の平均は除いて考えるため、上式では、 T_{ab} の代わりにエネルギーモーメントテンソルのゆらぎ $\delta T_{ab} \equiv T_{ab} - \langle T_{ab} \rangle$ を用いている。ここで、 $\langle \cdot \rangle$ は空間平均を示している。

不適合変位の発展が不均質力によって駆動されるとの考えの下、両者の線形関係を仮定することで次式が得られる。

$$\begin{aligned}\delta u_a^{incom} &= \kappa_{ab} \delta f_a^{incom} \Leftrightarrow u_{ref} \int_S n_b \eta_{ab} dS \\ &= \kappa_{abcd} \int_S n_b \delta T_{cd} dS\end{aligned}\quad (2.12)$$

さらに、上式において、局所系を考えることで、形式的に次式を得る。

$$\eta_{ab} = \kappa_{abcd} \delta T_{cd} \quad (2.13)$$

ここで、 a, b は時空間成分を表し、 $a, b=1, 2, 3, 4$ である。なお、式(2.24)の数学的妥当性は、2種類の不均質量が両者ともに発散が零であるという性質により確認される。

不適合度テンソルを4次元時空間に拡張し、再定義すると次式となる。

$$\eta_{ab} = \epsilon_{aklp} \epsilon_{bmnp} \partial_k \partial_m \epsilon_{ln}^p \quad (2.14)$$

なお、ここで、空間成分のみを考慮すると前述の不適合度テンソルの定義式が得られる。

$$\eta_{ij} = \epsilon_{ikl4} \epsilon_{jmn4} \partial_k \partial_m \epsilon_{ln}^p = \epsilon_{ikl} \epsilon_{jmn} \partial_k \partial_m \epsilon_{ln}^p \quad (2.15)$$

式(2.13)において、時空間の対称性を仮定し、 $\kappa_{abcd} = \kappa_1 \delta_{ab} \delta_{cd} + 2\kappa_2 \delta_{ac} \delta_{bd}$ とすると、次式が得られる。

$$\eta_{ab} = \kappa_1 \delta T_{ab} + 2\kappa_2 \delta T_{kk} \delta_{ab} \quad (2.16)$$

さらに、簡単のため、 $\kappa_2 = 0$ を仮定すると、次式が得られる。

$$\eta_{ab} = \kappa \delta T_{ab} \quad (2.17)$$

ここで、 $\kappa_1 \rightarrow \kappa$ と置き換え、 κ は双対係数と呼ばれる。上式で、時間成分のみを考えると、次式が得られる。

$$\eta_{44} = \kappa \delta T_{44} = \kappa \delta (K + U^e) \quad (2.18)$$

ここで、 T_{44} は系全体の Hamiltonian に一致し、全エネルギーを表す。また、 K は運動エネルギー、 U^e は弾性ひずみエネルギーを表す。さらに、左辺 η_{44} は4次元での不適合度テンソルの定義式より以下のように表される。

$$\eta_{44} = \epsilon_{4klp} \epsilon_{4mnp} \partial_k \partial_m \epsilon_{ln}^p = \eta_{AA} = \text{tr} \boldsymbol{\eta} \quad (2.19)$$

ここで、 A は空間成分を表し、 $A=1, 2, 3$ である。すなわち、不適合度テンソルの時間成分は空間成分の対角和となる。さらに、上式において、静的状態 ($K = 0$) を仮定し、 $A \rightarrow K$ と書き換えることで、最終的に次式が得られる。

$$\eta_{KK} = \kappa \delta U^e \quad (2.20)$$

本研究では、不適合度テンソルの対角和 η_{KK} および弾性ひずみエネルギーのゆらぎ δU^e を両軸にとった双対線図を基本として、不均質場の発展を評価する。双対線図表現 (Fig. 2.7) により、システム内の転位応答の観点からエネルギー変換プロセスや“エネルギーの流れ”を“可視化”することが可能となる。

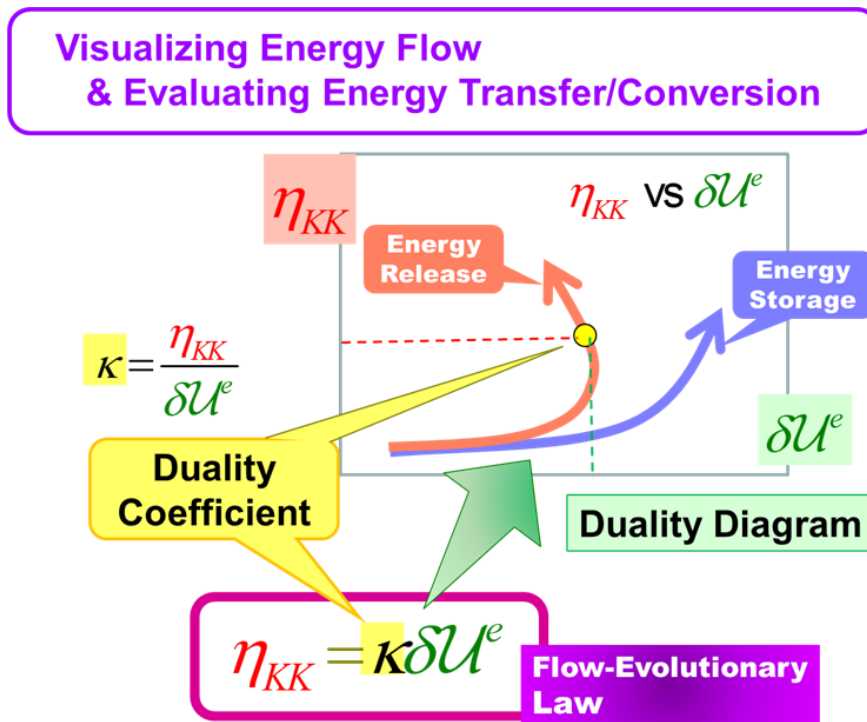


Fig. 2.7 FTMP-based Duality Diagram Representation.

2.2.6. 相空間トラジェクトリ (Phase-Space Trajectory: PhS-T)

相空間トラジェクトリ (Phase-Space Trajectory) [78]は、ある偏微分方程式が直接的に解くことが不可能であっても、与えられた初期条件に対して、解が収束するか発散するか等といった、解の振る舞いを記述する際に適用される手法である [93]。主に非線形力学において用いられる手法であり、あるパラメータ x と、その時間変化 \dot{x} とをプロットすることによって得られる。こうした解の振る舞いの記述に関して、例えば、減衰の無い単振動における Phs-T は閉軌道を示すということがわかっている。本論文では転位系を表現する不適合度の Phs-T を作成し、単振動における知見から、周期負荷を与えた転位系の Phs-T が閉軌道を示した場合、その系の応答は安定であるということが推察される。

2.3. 転位密度テンソル・不適合度テンソルの導出・評価法

本項では、離散転位動力学法によって得られた転位線分布から転位密度テンソル・不適合度テンソルを算出する方法について記す。

2.3.1. 転位線の成分導出

転位密度テンソルは、転位の刃状成分およびらせん成分から構成されている。ここでは、転位線から刃状成分・らせん成分を導出する方法について記す。Fig. 2.8 に転位線と Burgers ベクトルの模式図を示す。なお、転位線方向ベクトルを $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ 、Burgers ベクトルを $\mathbf{b} = (b_1, b_2, b_3)$ 、転位線方向ベクトルのらせん転位成分を $\mathbf{Screw} = (screw_x, screw_y, screw_z)$ 、刃状転位成分を $\mathbf{Edge} = (edge_x, edge_y, edge_z)$ と定義する。

まず、転位線方向ベクトルのらせん成分は Burgers ベクトルに平行であることから、次式に示すように、 \mathbf{b} への正射影によって転位線方向ベクトルのらせん成分を導き出すことができる。

$$\mathbf{Screw} = \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{b}}{|\mathbf{b}|^2} \mathbf{b} \quad (2.21)$$

また、転位線方向ベクトルの刃状成分は、Fig. 2.8 から、次式で計算できる。

$$\mathbf{Edge} = \mathbf{p} - \mathbf{Screw} \quad (2.22)$$

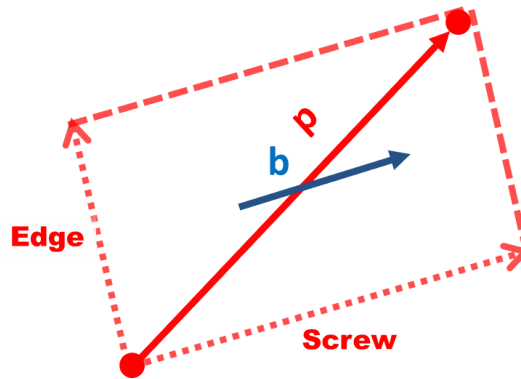


Fig. 2.8 Decomposition of mixed dislocations into edge and screw components.

2.3.2. 転位密度テンソルの算出

前項で示したように、転位線を式(2.21), (2.22)を用いて刃状成分とらせん成分とに分解した後、Fig. 2.9 に示すように、両成分を更に x_1, x_2, x_3 成分(軸)に分解し、それぞれに Burgers ベクトルをかける。このとき、転位密度テンソルの対角成分は転位線方向のらせん成分、非対角成分は転位線方向の刃状成分によって表される。

$$\begin{aligned} \alpha_{11} &= screw_x \cdot b_1, \alpha_{22} = screw_y \cdot b_2, \alpha_{33} = screw_z \cdot b_3 \\ \alpha_{12} &= edge_x \cdot b_2, \alpha_{13} = edge_x \cdot b_3, \alpha_{21} = edge_y \cdot b_1 \\ \alpha_{23} &= edge_y \cdot b_3, \alpha_{31} = edge_z \cdot b_1, \alpha_{32} = edge_z \cdot b_2 \end{aligned} \quad (2.23)$$

さらに転位密度テンソル α とGN転位密度 ρ_{GN} の関係は以下の式(2.24)で表される.

$$\frac{1}{b}\alpha = \rho_{GN} \quad (2.24)$$

転位密度の単位を $[m^{-2}]$ とすると, 転位密度テンソルの単位は $[m^{-1}]$ となる.

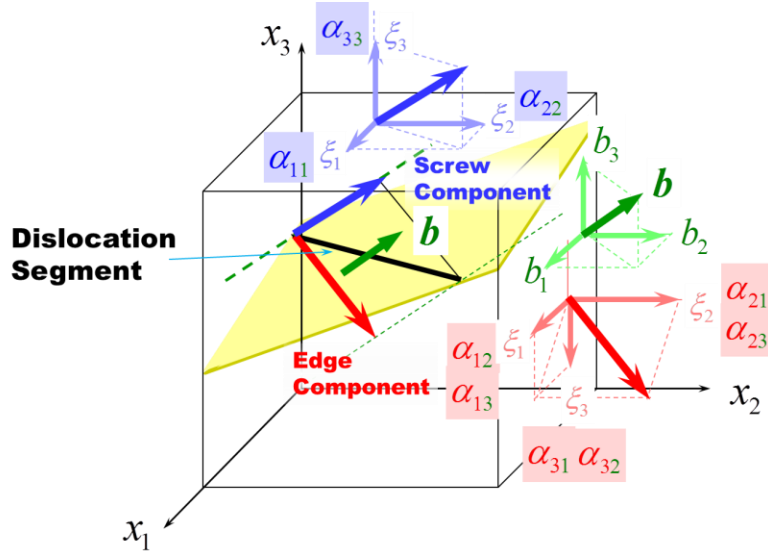


Fig. 2.9 Derivation of a dislocation density tensor via decomposition of dislocation segments.

2.3.3. 不適合度テンソルの導出

不適合度テンソル η は式(2.2)で表されることから, その各成分は以下のような
る.

$$\begin{aligned} \eta_{ij} &= -(\epsilon_{ikl}\partial_k\alpha_{jl})_{SYM} \\ &= -\frac{1}{2}(\epsilon_{ikl}\partial_k\alpha_{jl} + \epsilon_{jkl}\partial_k\alpha_{il}) \\ &= -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2(\partial_2\alpha_{13} - \partial_3\alpha_{12}) & -\partial_1\alpha_{13} + \partial_2\alpha_{23} + \partial_3(\alpha_{11} - \alpha_{22}) & -\partial_3\alpha_{32} + \partial_1\alpha_{12} + \partial_2(\alpha_{33} - \alpha_{11}) \\ & 2(\partial_3\alpha_{21} - \partial_1\alpha_{23}) & -\partial_2\alpha_{21} + \partial_3\alpha_{31} + \partial_1(\alpha_{22} - \alpha_{33}) \\ & & 2(\partial_1\alpha_{32} - \partial_2\alpha_{31}) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2.25)$$

転位密度テンソルの単位を $[m^{-1}]$ とすると, 不適合度テンソルの単位は $[m^{-2}]$ となる. なお, 勾配の求め方に関する詳細については次項に記す.

2.3.4. 転位密度テンソルの勾配の取り方について

不適合度テンソルを計算するためには、転位密度テンソルの勾配を求める必要がある。本研究では、有限要素解析の概念を用いて、解析領域を (x_1, x_2, x_3) 方向にそれぞれ分割し、転位線についても一定の長さに分割した上で解析を行う。ここではその詳細について記す。

(a) サブセル分割および転位密度テンソル算出

本論文では、Fig. 2.10 に示すように、解析領域内を六面体要素(サブセル)で分割し、各サブセル内に含まれる転位線の情報を用いて、前項に記した計算により転位密度テンソルの算出を行う。この時、一つのセル内に複数の転位線が含まれる場合は、それらの転位線より求められた転位密度テンソルは総和され、その結果のみがセルの値として用いられることとなる。すなわち、それらの転位線の方向およびBurgersベクトルの方向次第では、Fig. 2.11 に模式図的に示すように、見かけ上の転位密度テンソルの性質の変化や消失が生じることとなる。この事は、Fig. 2.3 に示したような、Burgers回路の取り方により、転位がその性質を変化させることと対応している。そのため、サブセルの大きさを変化させることにより、転位をマクロに見るかマイクロに見るか、というスケール性の表現が可能である。ただし、この手法は分割の仕方に強く依存している事を注意しておく必要がある。どれだけ近くに転位線が存在していようと、同セル内に含まれない場合は、それらの変化は一切生じないためである。

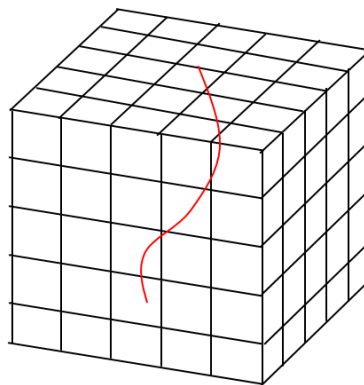


Fig. 2.10 Schematic illustration of a simulation cell division.

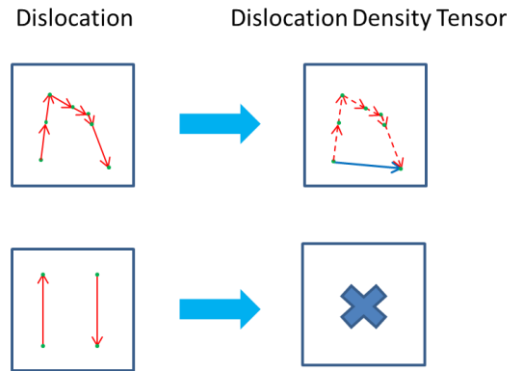


Fig. 2.11 Schematic illustration of disappearance and change of dislocation density tensor.

(b)不適合度テンソルの算出

不適合度テンソルを求めるためには、転位密度テンソルの空間勾配を計算する必要がある。本論文では、ある注目するサブセルの近傍に一定の領域を設定し、領域内での転位密度テンソルの勾配を、以下に示す最小二乗法により求める。

Fig. 2.12 に示すように、注目するサブセルおよび、それを中心として一定の領域内（粗視化半径内）にあるサブセルを考える。まず、領域全体での転位密度テンソルの値 α_{ij} を、係数 $a_0 \sim a_3$ を用いて、次式のような線形関数で近似する。

$$\alpha_{ij} = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 \quad (2.26)$$

これにより、転位密度テンソルの勾配は、次式に示すように、 $a_1 \sim a_3$ に対応することになる。

$$\frac{\partial \alpha_{ij}}{\partial x_1} = a_1, \quad \frac{\partial \alpha_{ij}}{\partial x_2} = a_2, \quad \frac{\partial \alpha_{ij}}{\partial x_3} = a_3 \quad (2.27)$$

次に、サブセル k の中心の座標を (x_{1k}, x_{2k}, x_{3k}) とし、このサブセルに含まれる転位から算出された転位密度テンソルの値を α_{ij}^k とすると、サブセル k の転位密度テンソルと近似値との誤差 s_k は次式で表される。

$$s_k = \alpha_{ij}^k - (a_0 + a_1x_{1k} + a_2x_{2k} + a_3x_{3k}) \quad (2.28)$$

したがって、領域内の全てのサブセルに関する誤差の 2 乗和 D は次式の通りである。

$$D = \sum_k^n (s_k)^2 \quad (2.29)$$

ここで、 $D \rightarrow \min.$ の条件から、

$$\frac{\partial D}{\partial a_0} = \frac{\partial D}{\partial a_1} = \frac{\partial D}{\partial a_2} = \frac{\partial D}{\partial a_3} = 0 \quad (2.30)$$

以上, 式(2.39)~(2.41) より, 次の線形方程式が得られる.

$$\left. \begin{aligned} \sum_k^n \alpha_{ij}^k &- a_0 \sum_k^n 1 - a_1 \sum_k^n x_{1k} - a_2 \sum_k^n x_{2k} - a_3 \sum_k^n x_{3k} = 0 \\ \sum_k^n \alpha_{ij}^k x_{1k} &- a_0 \sum_k^n x_{1k} - a_1 \sum_k^n (x_{1k})^2 - a_2 \sum_k^n x_{1k} x_{2k} - a_3 \sum_k^n x_{1k} x_{3k} = 0 \\ \sum_k^n \alpha_{ij}^k x_{2k} &- a_0 \sum_k^n x_{2k} - a_1 \sum_k^n x_{1k} x_{2k} - a_2 \sum_k^n (x_{2k})^2 - a_3 \sum_k^n x_{2k} x_{3k} = 0 \\ \sum_k^n \alpha_{ij}^k x_{3k} &- a_0 \sum_k^n x_{3k} - a_1 \sum_k^n x_{1k} x_{3k} - a_2 \sum_j^n x_{2j} x_{3j} - a_3 \sum_k^n (x_{3k})^2 = 0 \end{aligned} \right\} \quad (2.31)$$

式(2.31)をマトリクス表示すると次式の通りである.

$$\begin{pmatrix} \sum_k^n 1 & \sum_k^n x_{1k} & \sum_k^n x_{2k} & \sum_k^n x_{3k} \\ \sum_k^n x_{1k} & \sum_k^n (x_{1k})^2 & \sum_k^n x_{1k} x_{2k} & \sum_k^n x_{1k} x_{3k} \\ \sum_k^n x_{2k} & \sum_k^n x_{1k} x_{2k} & \sum_k^n (x_{2k})^2 & \sum_k^n x_{2k} x_{3k} \\ \sum_k^n x_{3k} & \sum_k^n x_{1k} x_{3k} & \sum_k^n x_{2k} x_{3k} & \sum_k^n (x_{3k})^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_k^n \alpha_{ij}^k \\ \sum_k^n \alpha_{ij}^k x_{1k} \\ \sum_k^n \alpha_{ij}^k x_{2k} \\ \sum_k^n \alpha_{ij}^k x_{3k} \end{pmatrix} \quad (2.32)$$

以上より, $a_i (i = 0, 1, 2, 3)$ は次式のようにして求められる.

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_k^n 1 & \sum_k^n x_{1k} & \sum_k^n x_{2k} & \sum_k^n x_{3k} \\ \sum_k^n x_{1k} & \sum_k^n (x_{1k})^2 & \sum_k^n x_{1k} x_{2k} & \sum_k^n x_{1k} x_{3k} \\ \sum_k^n x_{2k} & \sum_k^n x_{1k} x_{2k} & \sum_k^n (x_{2k})^2 & \sum_k^n x_{2k} x_{3k} \\ \sum_k^n x_{3k} & \sum_k^n x_{1k} x_{3k} & \sum_k^n x_{2k} x_{3k} & \sum_k^n (x_{3k})^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \sum_k^n \alpha_{ij}^k \\ \sum_k^n \alpha_{ij}^k x_{1k} \\ \sum_k^n \alpha_{ij}^k x_{2k} \\ \sum_k^n \alpha_{ij}^k x_{3k} \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

式(2.33)から求めた各係数 a_i , すなわち転位密度テンソルの勾配を, 式(2.36)に代入することで, 各不適合度テンソルの値を求めることができる.

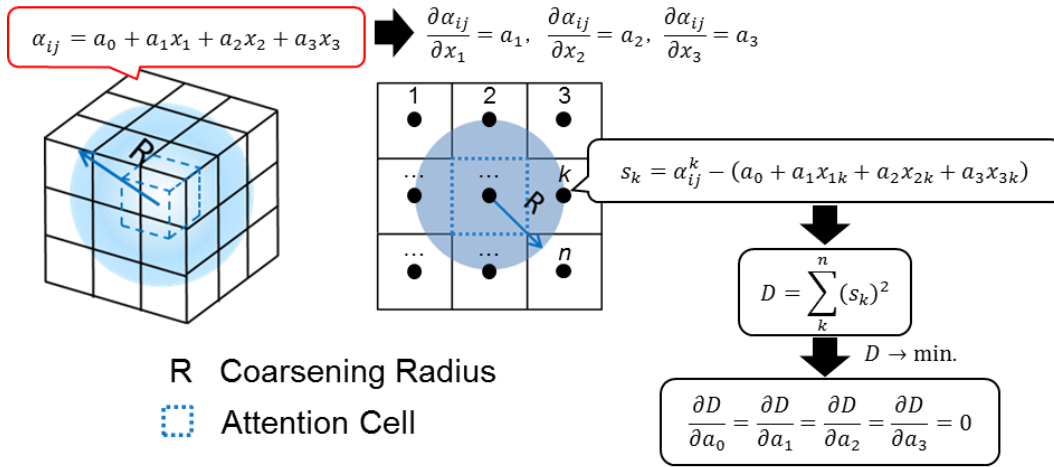


Fig. 2.12 Schematic illustration of coarsening model together with calculation process of a derivative operation.

2.4. 転位の自己エネルギー

転位の自己エネルギーとは、転位を含むことによる結晶のエネルギーの増加、または結晶中に転位を作るのに必要なエネルギーである。表面に働く力を無視すれば、このエネルギーは転位の芯の部分に属するエネルギーと芯の外側の弾性ひずみエネルギーとに分けることができる。

2.4.1. 弾性ひずみエネルギー

物体の弾性ひずみエネルギーを E_{el} で表すと、その一般形は弾性ひずみまたは応力の二次形式で以下のように表される [62].

$$E_{el} = \frac{1}{2} \int_V C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^e \varepsilon_{kl}^e dx = \frac{1}{2} \int_V \sigma_{kl} \varepsilon_{kl}^e dx \quad (2.34)$$

ここで、積分は $dx (= dx_1, dx_2, dx_3)$ を体積要素とする物体 V 全体にわたる体積積分を意味する。直線転位の場合、この弾性ひずみエネルギーは転位の長さに比例する。

本論文では、Fig. 2.13 に示すように解析セル内各点での応力テンソルを観測するための転位（これをダミー転位と称し、ダミー転位は応力場の計算から除外している）を配置し、その各点での応力テンソルの値から弾性ひずみエネルギーを算出する。解析領域内を、ダミー転位間隔をもつ正方形の格子状に分割し、一つの格子の弾性ひずみエネルギーを一定と考え、次式のようにその総和をとることで解析領域全体の弾性ひずみエネルギーを算出する。

$$E_0^e = \frac{l^3}{2} \sum \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} \quad (2.35)$$

ここで l はダミー転位の間隔である。解析領域全体の弾性ひずみエネルギーをダミー転位数で割ることで平均の弾性ひずみエネルギーを算出し、各サブセルにおける弾性ひずみエネルギーとの差を考えることで弾性ひずみエネルギーゆらぎ δU^e を求める。

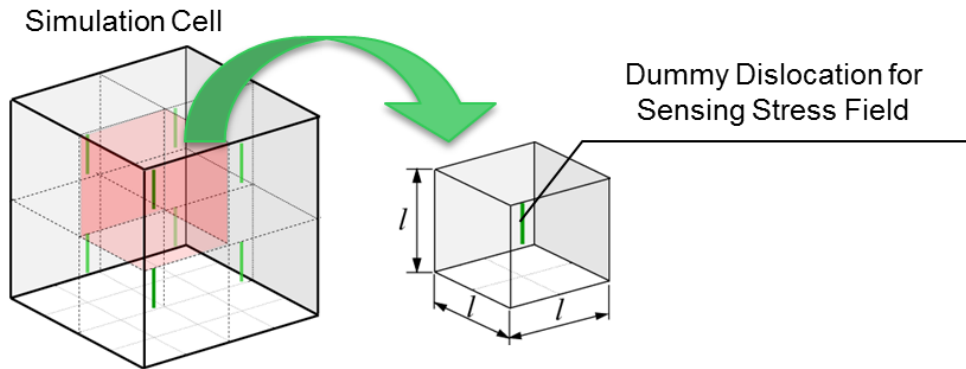


Fig. 2.13 Schematic of the calculated elastic strain energy.

2.4.2. 転位芯のエネルギー

転位芯は Hooke の法則が成り立たない領域であるため弾性論を適用できない。本論文では、転位芯の外のひずみエネルギーの計算精度を考慮し、転位芯のすぐ外側での応力とひずみの値がそのまま芯の内部に当てはまるとすることにより近似的にエネルギーを評価した。このような近似に基づく転位芯のエネルギー密度は次式で与えられる [94].

$$E(0, r_0) = \frac{\mu b^2}{8\pi^2 r_0^2 (1 - \nu)} \quad (2.36)$$

本研究では、転位芯部分を含む要素に対し、式(2.47) で $r_0=5$ [b] [62] とした転位芯エネルギーを与えることとする。

2.5. 離散転位動力学法

本論文では、離散転位動力学コードを用いて転位系の発展を解析する。本節では Zbib ら[25]が開発したコードについて述べていく。

2.5.1. 離散転位動力学の概要

離散転位動力学法 [23, 24, 25]は線欠陥である転位を実体のある線として捉え、転

位の運動を表現する．解析セル内に任意の数の離散転位セグメントを配置することによって，格子欠陥を有する連続的な三次元単結晶をモデル化することができる．同法は原子スケールの現象を直接的に再現できる分子動力学法に比べ，より大きな時空間スケールでの解析が可能であり，転位の集団挙動を詳細に解析できる所に利点がある．転位のパターンニングと力学的特性を結びつける実験結果が報告 [22, 95] されており，その模様がいかにしてできるのか，また，どのように機能するのか，といった詳細な検討は，離散転位動力学法によって可能となることから，特に結晶塑性の分野で注目されてきた [96, 59, 97]. 本論文で使用する，Zbib ら [25] が提案する方法では，任意の曲線形状を有する転位線を，転位の局所的な曲線形状に応じて複数の直線セグメントの集合体に離散化する．直線転位の応力場の理論解を適用することで，他の手法に比べて低コストで転位同士の相互作用を計算し，転位の運動を追跡する．本解析モデルは以下の基礎的物理法則に基づいて構築されている．

- (a) 個々の転位の運動
- (b) 転位間の長距離相互作用
- (c) 転位間の短距離相互作用

2.5.2. 個々の転位の運動

(a) 転位による応力場

Fig. 2.14 に模式的に示すように，任意の曲線形状を有する転位が形成する応力場により，点 P における応力 $\sigma_{\alpha\beta}(P)$ は線積分を用いて次式で表わされる [19].

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}(P) = & -\frac{\mu}{8\pi} \oint_C b_m \epsilon_{im\alpha} \frac{\partial}{\partial x'_i} \nabla'^2 R dx'_\beta - \frac{\mu}{8\pi} \oint_C b_m \epsilon_{im\beta} \frac{\partial}{\partial x'_i} \nabla'^2 R dx'_\alpha \\ & - \frac{\mu}{4\pi(1-\nu)} \oint_C b_m \epsilon_{imk} \left(\frac{\partial^3 R}{\partial x'_i \partial x'_\alpha \partial x'_\beta} - \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial x'_i} \nabla'^2 R \right) dx'_k \end{aligned} \quad (2.37)$$

ここで R は点 P までの距離， b_i は Burgers ベクトル， $\epsilon_{im\alpha}$ は置換記号， μ はせん断弾性係数， ν はポアソン比である．式(2.1)を評価するにあたって，転位曲線上に Fig. 2.14 のようにノードを配置して離散化した場合，転位による応力場は，次式で評価される [6].

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}(P) = & \sum_{\text{all Loops}} \sum_{j=1}^{n-1} \left\{ -\frac{\mu}{8\pi} \int_j^{j+1} b_m \epsilon_{im\alpha} \frac{\partial}{\partial x'_i} \nabla'^2 R dx'_\beta \right. \\ & - \frac{\mu}{8\pi} \int_j^{j+1} b_m \epsilon_{im\beta} \frac{\partial}{\partial x'_i} \nabla'^2 R dx'_\alpha \\ & \left. - \frac{\mu}{4\pi(1-\nu)} \int_j^{j+1} b_m \epsilon_{imk} \left(\frac{\partial^3 R}{\partial x'_i \partial x'_\alpha \partial x'_\beta} - \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial x'_i} \nabla'^2 R \right) dx'_k \right\} \end{aligned} \quad (2.38)$$

ここで n は 1 つの転位曲線もしくは転位ループにおける総ノード数である。

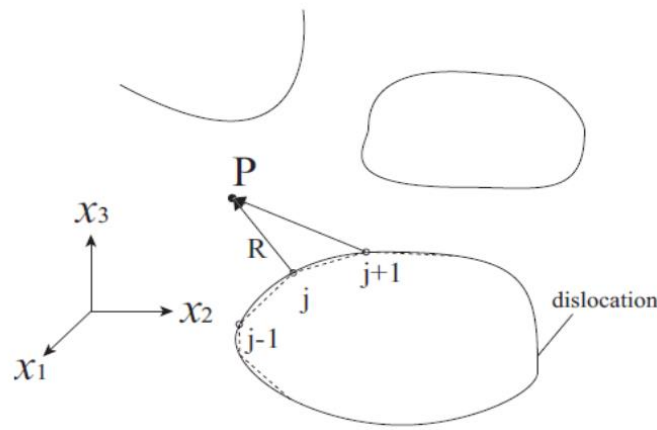


Fig. 2.14 Schematic drawing of stress field produced by dislocation.

(b)直線転位セグメントによる応力場

Hirth ら [19]によると、転位セグメントを直線と仮定した場合、式(2.38) は次式によって評価される。

$$\sigma(P) = \sum_{j=1}^N \sigma_{j,j+1}^D \quad (2.39)$$

ここで、 $\sigma_{j,j+1}^D = \sigma_{j+1}^D - \sigma_j^D$ は Fig. 2.15 に模式的に示すように転位ノード j と $j+1$ で定まる直線セグメントが形成する応力場であり、同図のような局所座標系において σ_j^D , σ_{j+1}^D の各成分は次式で評価される。

$$\begin{aligned}
 \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_0} &= b_x \frac{y}{R(R+\lambda)} \left(1 + \frac{x^2}{R^2} + \frac{x^2}{R(R+\lambda)} \right) \\
 &\quad + b_y \frac{x}{R(R+\lambda)} \left(1 - \frac{x^2}{R^2} - \frac{x^2}{R(R+\lambda)} \right) \\
 \frac{\sigma_{yy}}{\sigma_0} &= -b_x \frac{y}{R(R+\lambda)} \left(1 - \frac{y^2}{R^2} - \frac{y^2}{R(R+\lambda)} \right) \\
 &\quad - b_y \frac{x}{R(R+\lambda)} \left(1 + \frac{y^2}{R^2} + \frac{y^2}{R(R+\lambda)} \right) \\
 \frac{\sigma_{zz}}{\sigma_0} &= b_x \left(\frac{2vy}{R(R+\lambda)} + \frac{y\lambda}{R^3} \right) + b_y \left(-\frac{2vx}{R(R+\lambda)} - \frac{x\lambda}{R^3} \right) \\
 \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_0} &= -b_x \frac{x}{R(R+\lambda)} \left(1 - \frac{y^2}{R^2} - \frac{y^2}{R(R+\lambda)} \right) \\
 &\quad + b_y \frac{y}{R(R+\lambda)} \left(1 + \frac{x^2}{R^2} + \frac{x^2}{R(R+\lambda)} \right) \\
 \frac{\sigma_{zx}}{\sigma_0} &= -b_x \frac{xy}{R^3} + b_y \left(-\frac{v}{R} + \frac{x^2}{R^2} \right) + b_z \frac{y(1-v)}{R(R+\lambda)} \\
 \frac{\sigma_{yz}}{\sigma_0} &= b_x \left(\frac{v}{R} - \frac{y^2}{R^3} \right) + b_y \frac{xy}{R^3} - b_z \frac{x(1-v)}{R(R+\lambda)}
 \end{aligned} \tag{2.40}$$

ここで $\sigma_0 = \frac{\mu}{4\pi(1-\nu)}$, $\lambda = z' - z$, $R^2 = x^2 + y^2 + (z' - z)^2$, b_x , b_y , b_z は転位セグメントの Burgers ベクトルの各成分である。

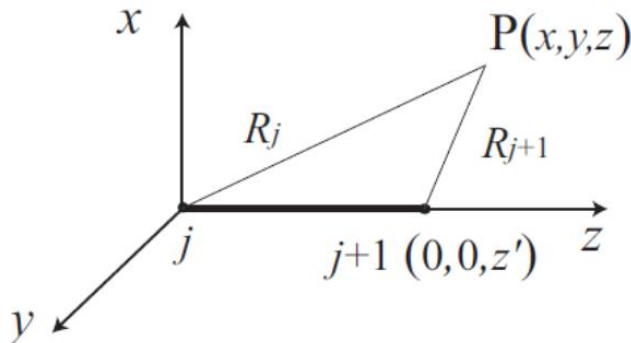


Fig. 2.15 Stress field of dislocation segment.

(c) 転位に働く力

点 P にある任意の転位ノード i に作用する力は、式(2.39) を用いて次式で表すことができる [98].

$$\mathbf{F}_i = \sum_{j=1}^{N-1} \left(\boldsymbol{\sigma}_{j,j+1}^D(p) + \boldsymbol{\sigma}^a(P) \right) \cdot \mathbf{b}_i \times \boldsymbol{\xi}_i + \mathbf{F}_{i-self} \quad (2.41)$$

ここで、 $\boldsymbol{\sigma}_{j,j+1}^D$ は他の転位セグメント $j, j+1$ による応力、 $\boldsymbol{\sigma}^a$ は外部負荷応力(系内で一様)、 $\boldsymbol{\xi}_i$ は転位線ベクトルである。また、転位線張力に対応する \mathbf{F}_{i-self} は Fig. 2.16 に模式的に示すように、隣接セグメントの寄与を積分し、平均することにより、次式で表される。

$$\frac{\mathbf{F}_{i,i+1-self}}{L} = \frac{\mu}{4\pi L} [f_{CA}(\theta_A, b) + f_{DB}(\theta_B, b)] \ln\left(\frac{L}{\rho}\right) \quad (2.42)$$

ここで、 θ は力の作用するセグメントと隣接セグメントのなす角、 ρ はカットオフパラメータ、 L はセグメントの長さ、 $f_{CA}(\theta_A, b)$ の具体形は以下の通りである [19].

$$f_{CA}(\theta_A, b) = \left[b_z^{CA} b_z^{AB} + \frac{1}{1-\nu} b_x^{CA} b_x^{AB} + b_y^{CA} b_y^{AB} \right] \frac{\cos \theta_A - 1}{\sin \theta_A} + \frac{\nu}{1-\nu} b_x^{CA} b_z^{AB} \quad (2.43)$$

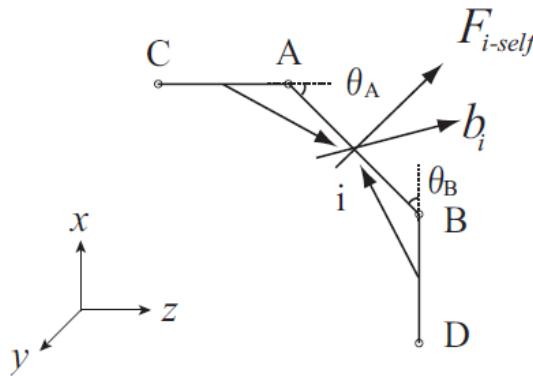


Fig. 2.16 Peach-Koehler force of dislocation segment i operating itself \mathbf{F}_{i-self} .

(d) 転位の運動方程式

転位の時間発展は次式の運動方程式に基づいて行われる [25].

$$m\dot{\mathbf{u}}_i + \frac{1}{M(T,p)}\dot{\mathbf{u}}_i = [\mathbf{F}_i]_{\text{glide-component}} \quad (2.44)$$

転位に働く力 \mathbf{F}_i は式(2.5)から導出され、 m は転位線を見かけの質量をもった弾性弦に見立てた際の単位長さあたりの有効質量、 M は刃状転位とらせん転位の可動性の差を考慮するためのもので、転位の可動性を表すパラメータである。また \mathbf{u}_i はすべり速度、 T は絶対温度、 p は圧力である。式(2.44)に基づき転位線は時間発展するが、Frank-Read 源のように転位ループが成長する際に、転位セグメント数が一定では転位曲線が正しく表現できなくなる。また逆に、転位ループが収縮する場合も同様である。そこで転位セグメントの最大、最小長さを設定しておき、規定の範囲を超えるようなセグメントとなった場合は新しいノードの生成、またはノードの消去を行う。

2.5.3. 転位の長距離相互作用

転位の長範囲応力場による長距離相互作用の計算は、応力場が距離の逆数で減少するという性質上、計算時間を非常に要する。Zbib ら [50, 98] は Lesar ら [99] が考案した多極子展開の手法を応用し、高度な相互作用を単純化する手法 (Superdislocation) を開発した。ここでは Superdislocation について簡潔に記す。

Superdislocation は Fig. 2.17(a) に示すように、解析セルを離散的にサブセルとして分割し、あるサブセル(A)にかかる応力場を求める際、最も近いサブセル(B)からの応力に関しては直接的に算出し、それ以外のサブセルからの応力は多極子展開によって求める手法である。Fig. 2.17(b) に示すように $\mathbf{Z} = \mathbf{X} + i\mathbf{Y}$ に位置する点 P において、 \mathbf{Z}_0 に位置する転位から生じる応力場は、らせん転位の場合、 $\sigma_{xz} = -\frac{\mu b}{2\pi} \frac{y}{x^2+y^2}$ お

よび $\sigma_{yz} = -\frac{\mu b}{2\pi} \frac{x}{x^2+y^2}$ である。ここで、応力ポテンシャル $\phi(\mathbf{Z})$ を次式で導入する。

$$\phi(\mathbf{Z}) = b \ln(\mathbf{Z} - \mathbf{Z}_0) \quad (2.45)$$

上式によって、上記の応力場は $\sigma_{xz} = \frac{\mu}{2\pi} \text{Im}(\phi(\mathbf{Z}))$ および $\sigma_{yz} = \frac{\mu}{2\pi} \text{Re}(\phi(\mathbf{Z}))$ となる。刃状転位についても、 \mathbf{Z} の関数として応力ポテンシャルが得られ、それによって応力場が表現できる。

点 P が十分に離れている場合、 $\phi(\mathbf{Z})$ は Taylor 展開でき、 N 個の転位からの寄与を足し合わせることで、以下のようなになる。

$$\phi(\mathbf{Z}) = \frac{1}{\mathbf{Z}} \sum_{i=1}^N \mathbf{b}_i + \frac{1}{\mathbf{Z}^2} \sum_{i=1}^N \mathbf{b}_i \mathbf{Z}_{0i} + \frac{1}{\mathbf{Z}^3} \sum_{i=1}^N \mathbf{b}_i \mathbf{Z}_{0i}^2 + \dots \quad (2.46)$$

上式の各項は Superdislocations と呼ばれ、それぞれ、第 1 項は単極子(Monopole)、第 2 項は 2 つの双極子(Dipole)、第 3 項は 4 つの四重極子(Quadrupole)に対応し、以下同様に続く。このように、遠方にある応力場を近似することで、長距離相互作用の処理を簡略化する。N 個の転位セグメントで構成される解析モデルでは、転位の長距離相互作用により通常は N^2 オーダーの計算コストがかかるが、Super dislocation を用いることで、 $N \log(N)$ オーダーの計算となり、計算時間を短縮できる。

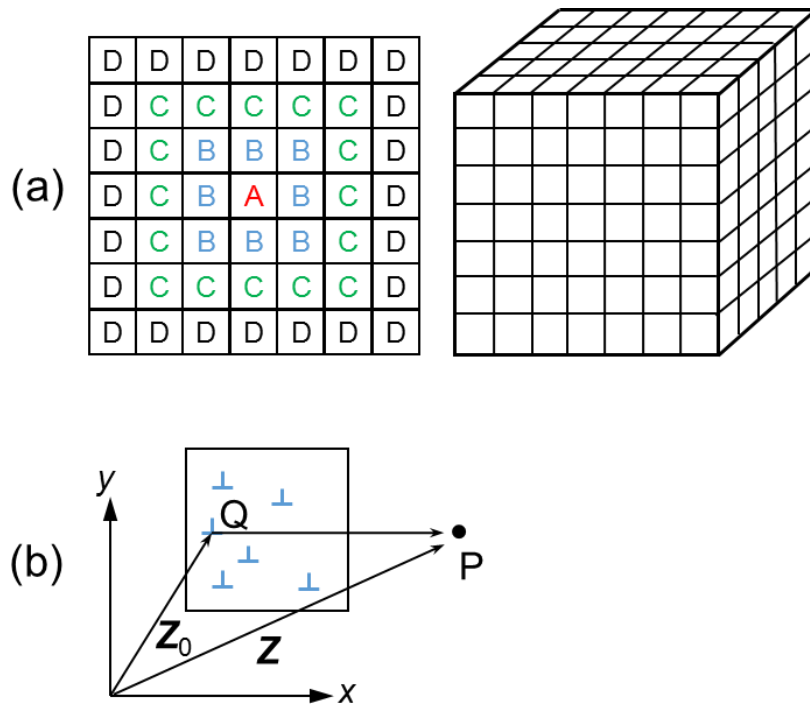


Fig. 2.17 Dislocations in the reflected cells are combined into super dislocations for long range interaction [50].

2.5.4. 転位の短距離相互作用

短距離相互作用は転位同士が転位芯レベルまで接近したときに生じ、対消滅やジョグ、ジャンクションの形成といった現象が起こる。こういった短距離作用は、微小な時間、空間スケールで生じるものであるため、多数の転位を取り扱う場合、それらの現象を直接扱うのは計算コストの観点から望ましくない。そこでそれらの現象を臨界距離や臨界力といったローカルルールを用いて取り扱う。そのルールは以下の通りである [25].

- Rule1.短距離作用するかどうか決定する臨界力基準 “ $F \geq F^c$ ”

- Rule2.対消滅に関する臨界力基準
- Rule3.ジャンクション形成に関する臨界角度基準 “ $\theta_{AB} \leq \theta_{jn}^c$ ”
- Rule4.ジョグ形成に関する臨界角度基準 “ $\theta_{AB} \geq \theta_{jg}^c$ ”
- Rule5.ジョグの強度に関する臨界角度基準 “ $\theta_{AB} \leq \theta_{jgs}^c$ ”
- Rule6.ダイポール形成に関する臨界力・速度基準

これらのルールにおいて、 θ_{AB} は2つの転位セグメント間の角度、 θ_{jg} はジョグにおける湾曲角度、 θ_{jn}^c 、 θ_{jg}^c 、 θ_{jgs}^c はそれぞれジャンクション形成、ジョグ形成、ジョグ強度に関する臨界値である。

2.5.5. 本解析プログラムのフローチャート

Fig. 2.18 に本解析プログラムのフローチャートを示す [100]. 基本的には以下の図に示す流れで解析が行われている。ただし、本研究では使用していない箇所（有限領域、マイクロクラックなど）もフローチャート中には示されている。

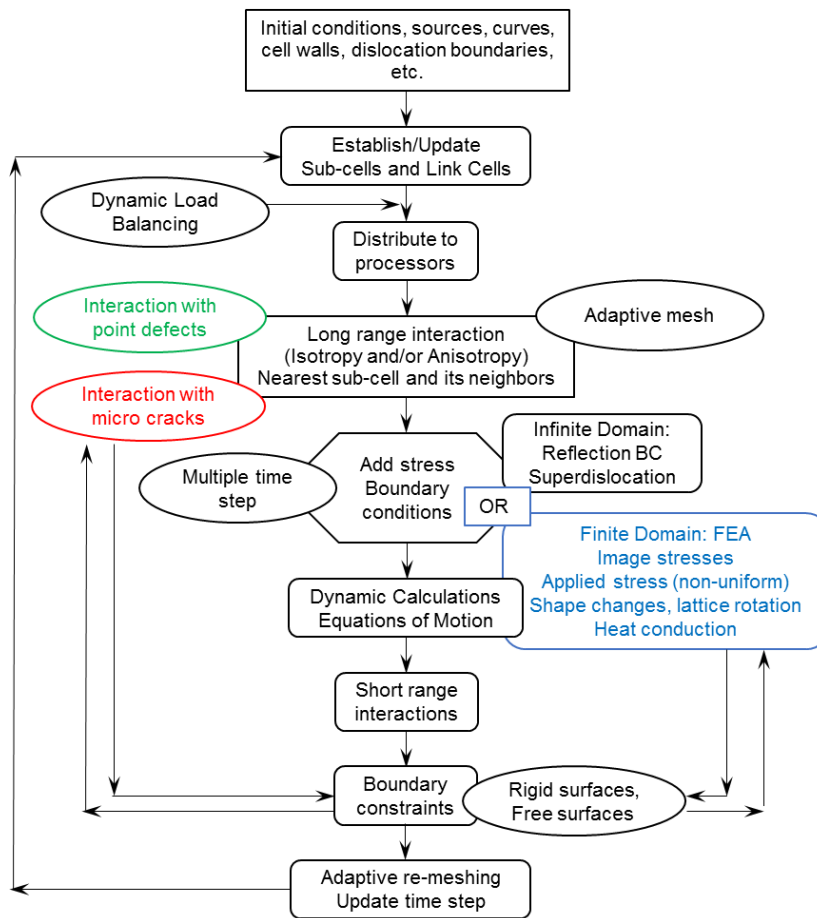


Fig. 2.18 Flow chart of dislocation dynamics problem [100].

2.5.6. 解析セルと境界条件

解析セルの境界条件は大きく分けて無限領域(解析セルを無限領域内の代表セルとして捉える)と、有限領域(試験片全体として捉える手法)の2通りに分けることができ、以下に詳細を示す。なお、本研究で転位間相互作用を基に発展する転位系を対称としているため、境界条件は無限領域としている。

(a) 無限領域

解析セル中の転位はセル境界を越えて影響を及ぼしあうため、本解析モデルでは、転位線の連続性の維持と、隣接セルの影響(剛体境界、周期境界、自由境界、鏡面境界)を反映している。また、転位の長範囲応力場による $1/r$ の応力場の計算を反映するために、隣接サブセルとの直接的な相互作用のほかに、距離の離れた転位からの応力は各サブセルから計算される(解析時間が長時間となる場合は Super dislocation 手法を用いることによって解析時間の短縮が可能である)。

(b) 有限領域

有限領域は、転位動力学法と有限要素法の組み合わせによる解析を行う際に用いられ [6]、マイクロサイズの試験片や、薄膜などを再現することが可能である。

2.5.7. 交差すべり

らせん転位は、他のすべり面に属するらせん転位と引き合って対消滅を生じる場合、内部応力場を緩和する場合、およびピン留め効果を避けるような場合に、交差すべりを起こすとされている [98]。本解析コードでは、らせん転位に生じている分解せん断応力が、一定の閾値を超えた時に交差すべりが生じ得るとしている。転位セグメントを直線とする場合、2次すべり系へと交差すべりするためには、Fig. 2.19に示すような配置を形成する必要がある。このような交差すべりが生じるためには大きな弾性活性化エネルギーを要するが、交差すべりは熱活性化過程であるので、Zbibら [100]が開発したコードでは、転位セグメントが2次すべり系に移る確率をMonte-Carloシミュレーションにより、次式の確率変数 P で決めている。

$$P = \alpha \Omega_1 \delta t \exp\left(-\frac{\Delta W^* - \tau A}{\kappa T}\right) = \alpha \Omega_1 \delta t \exp\left(-\frac{(\tau^* - \tau)A}{\kappa T}\right), \Omega_1 \cong \frac{C_1}{L} \quad (2.47)$$

ここで α は交差すべり制御パラメータ、 Ω_1 は転位セグメントの振動数、 δt は時間増分、 κ はボルツマン定数、 T は絶対温度、 L は転位セグメントの長さ、 C_1 は転位セグメントの速度である。また τ はせん断応力、 A は転位がすべり面を換えて動いた面積、 ΔW^* は Fig. 2.19 に示したダブルキンクに基づく活性化エネルギー、 τ^* は臨界形状を形成するための臨界応力である。ここで臨界形状 ($a = L/2$) とは、転位がピンニングされ湾曲し半円状になるための近似的形状である。

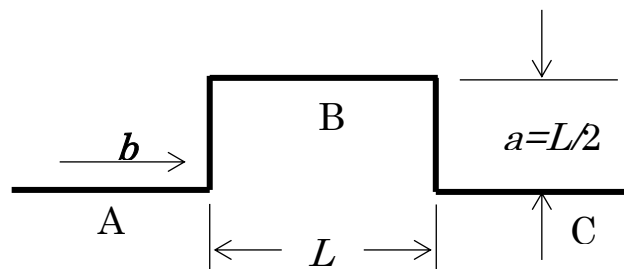


Fig. 2.19 Bow-out “double-kink” model for cross slip.

第3章 見かけの弾性定数減少の解析および評価

3.1. 概要

本章では、転位のダンピング運動に起因する”見かけの弾性定数減少の解析および評価”を課題とし議論することを目的とする。すなわち、すべり面に対して平行および垂直面内に配置した転位セグメントにおいて、その総数を系統的に変化させた2種の解析モデル（それぞれ Case A および B と称す）を設定し、負荷・除荷過程における転位セグメント群の往復運動すなわち可逆運動がもたらす見かけの弾性定数（せん断弾性率）減少について調べる。これらは対比的な挙動を示すのであるが、得られたシミュレーション結果に対する双対線図上での比較に基づく可視化を行うことで、両条件下において、負荷中および除荷中に系に蓄積された、あるいは蓄積されようとしている弾性ひずみエネルギーが、転位セグメント群の形状変化の形で不適合度場へ移行あるいは解放される様子を明らかにし、かつ”双対係数”による定量化を行うことで、転位の”離散像”から、マクロ量である弾性定数の低下という、いわば”連続像”への橋渡しの可能性について検討を加える。他にもより一般的な転位配置に対する応用例についても議論する。

次節以降では、まず、見かけの弾性定数減少の理論解の導出をした後に、単純な転位モデル（Case A および Case B）の解析を行う。理論解および数値計算で得られた解を比較すると共に、両モデルに対して FTMP に基づいた評価を行った結果を示す。その後、析出物の影響を受けてピン留めされた転位に対しても解析および評価を行い、場の理論による評価の有効性を示す。最後に、本章で得られた知見を基に、結晶塑性モデルを作成し、その解析を行う。

3.2. 見かけの弾性定数減少の理論解

除荷におけるひずみの回復について考える。この時回復する弾性ひずみを γ^e 、見かけの弾性定数減少に伴う塑性ひずみを $\Delta\gamma^p$ 、弾性定数を μ 、見かけ上減少した弾性定数を $\Delta\mu$ 、応力を τ とした時、以下の式が成り立つ。

$$\gamma^e + \Delta\gamma^p = (\mu^{-1} + \Delta\mu^{-1})\tau = \mu^{-1}\{1 + (\mu/\Delta\mu)\}\tau \quad (3.1)$$

上式より、実際の応力-ひずみ線図で得られる弾性定数は μ ではなく、 $\mu\{1 + (\mu/\Delta\mu)\}^{-1}$ であることがわかる。したがって、見かけの弾性定数の減少率は以下ようになる。

$$\mu'/\mu \equiv \{1 + (\mu/\Delta\mu)\}^{-1} \quad (3.2)$$

ここで、 $\mu' = \mu\{1 + (\mu/\Delta\mu)\}^{-1}$ とした。

式(3.1)より、 $\Delta\gamma^p$ と τ との関係がわかれば $\Delta\mu$ が得られ、見かけの弾性定数の減少率が

第3章 見かけの弾性定数減少の解析および評価

計算可能となる。ここで、 $\Delta\gamma^p$ は Fig. 3.1 のようにして求められる。Fig.3.1 では、ピン留めされた転位に応力 τ が作用し、張り出すことによって曲率が $1/R = \tau b/T$ (b は Burgers ベクトルの大きさを示す) に達しており、これに伴って転位が ΔA の面積を掃いた様子が示されている。ここで、線張力は $T \approx \mu b^2/2$ で与えられる。Fig.3.1 で表される転位の張り出しによって生じる $\Delta\gamma^p$ は

$$\Delta\gamma^p = b\Delta A/V \quad (3.3)$$

ここで、 V は体積を示す。さらに、Fig.3.1 より、

$$\Delta A = \varphi R^2 - (R^2 \sin 2\varphi)/2 \quad (3.4)$$

であり、 $\sin 2\varphi$ をテイラー展開し、微小項を無視すると、以下のようなになる。

$$\Delta A = 8R^2\varphi^3/12 \quad (3.5)$$

張り出しが小さければ、 $2\varphi R \approx l$ (l は転位線長さを示す) より、

$$\Delta A = l^3/(12R) \quad (3.6)$$

式(3.3)に、式(3.6)、上述した $1/R = \tau b/T$ および $T \approx \mu b^2/2$ を代入することで、次式が得られる。

$$\Delta\gamma^p = l^3\tau/(6\mu V) \quad (3.7)$$

したがって、式(3.7)を式(3.1)に代入し、一辺の長さが L の立方体セルに N 個の転位がある場合を考えると、見かけの弾性定数の減少率は以下のように表される。

$$\mu/\mu' = \{1 + l^3N/(6L^3)\}^{-1} \quad (3.8)$$

3.3 単純な転位系に対する解析および評価

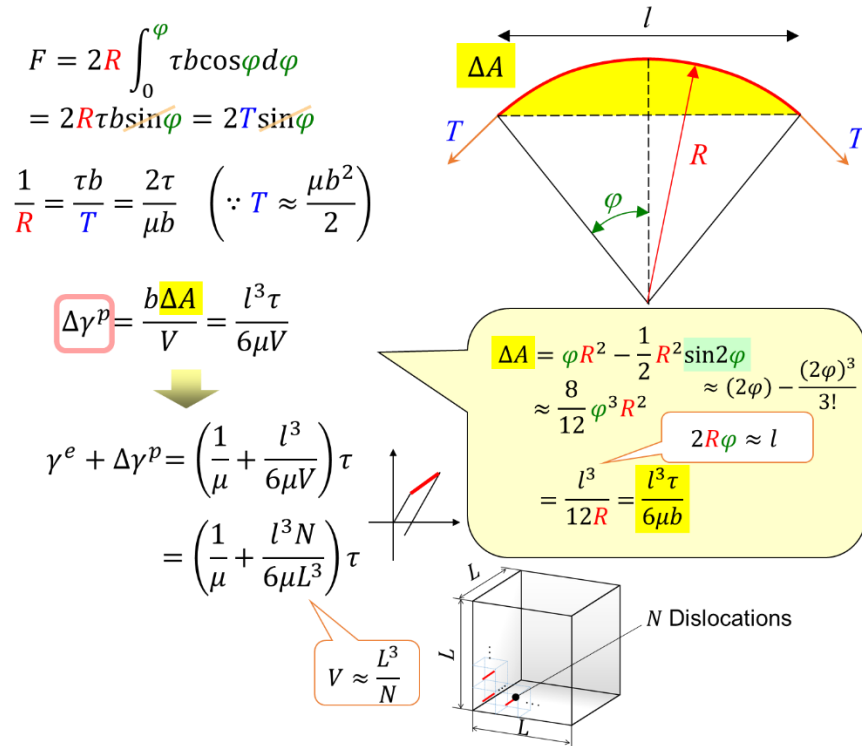


Fig. 3.1 Schematic drawing of derivation process for attendant apparently-reduced shear modulus due to a bowing-out dislocation segment.

3.3. 単純な転位系に対する解析および評価

本節では、ピン留めされた刃状転位に対して負荷・除荷を行い、転位の可逆的な運動を再現する。この過程で得られた見かけの弾性定数の低下率と式(3.8)で求められる理論解とを比較し、理論解の適用限界を示す。その後、FTMPに基づく評価を行い、双対線図によって転位系の変化を可視化し、場の理論的量によって見かけの弾性定数の減少率が定量化され得ることを述べる。

3.3.1. 解析条件

Fig. 3.2 に示すように、一辺 2000 [b] に解析セルに両端をピン留めした長さ 200 [b] の刃状転位を配置し、応力制御で負荷および除荷過程を再現する。この転位線を Fig. 3.3 に示すように、すべり面に対して水平 (Case A) または垂直 (Case B) な面に配置し、転位線の数 $N = 45, 75, 125, 175, 225$ および 325 と変えて、それぞれの場合における張り出し挙動を解析および評価する。材料は α -Fe (BCC) とし、用いた物性値はそれぞれ、密度 7.88×10^3 [kg/m³]、せん断弾性係数 80.0 [GPa]、ポアソン比 0.324、Burgers ベクトル大きさ 2.483×10^{-10} [m] であり、1 step あたりの時間幅は $\Delta t =$

1.8×10^{-12} [s] とした.

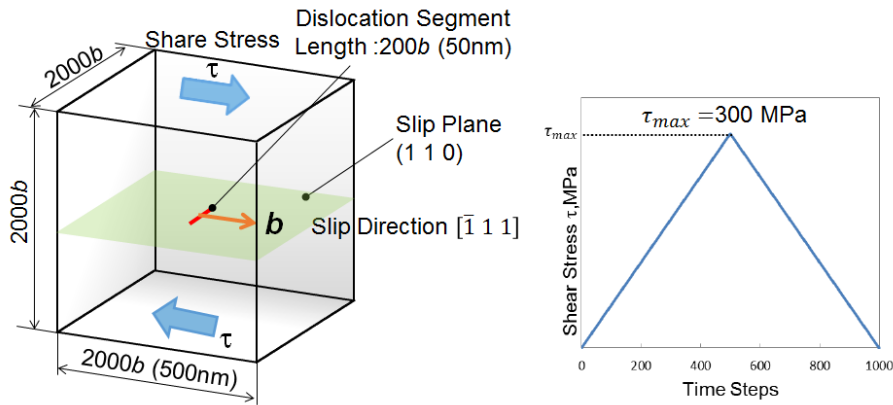


Fig. 3.2 Schematic drawing of simulation cell (left) and loading condition (right).

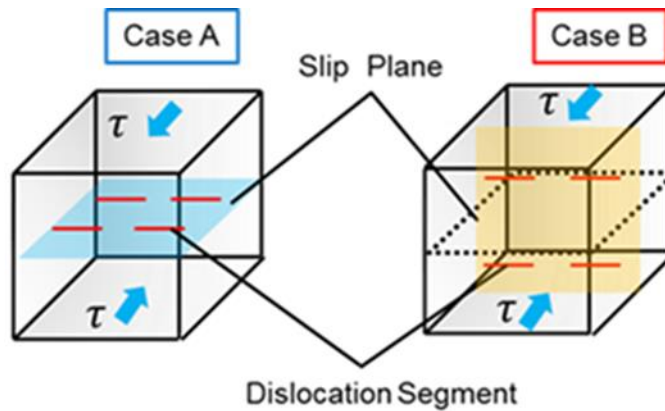


Fig. 3.3 Schematics of simulation models with two representative dislocation arrangements, Case A (horizontal arrangement) and Case B (vertical arrangement).

3.3.2. 解析結果

Fig. 3.4(a) に Case A および B における初期配置, Fig. 3.4 (b) に $N = 175$ を代表例として最大張り出し時の配置図をそれぞれ示す. Fig. 3.4 (b) より, Case B は Case A と比べて転位線の張り出しが抑制されていることがわかる. これは, Case B の方がより強い応力場を形成し, それを背応力の形で受けているためだと考えられる.

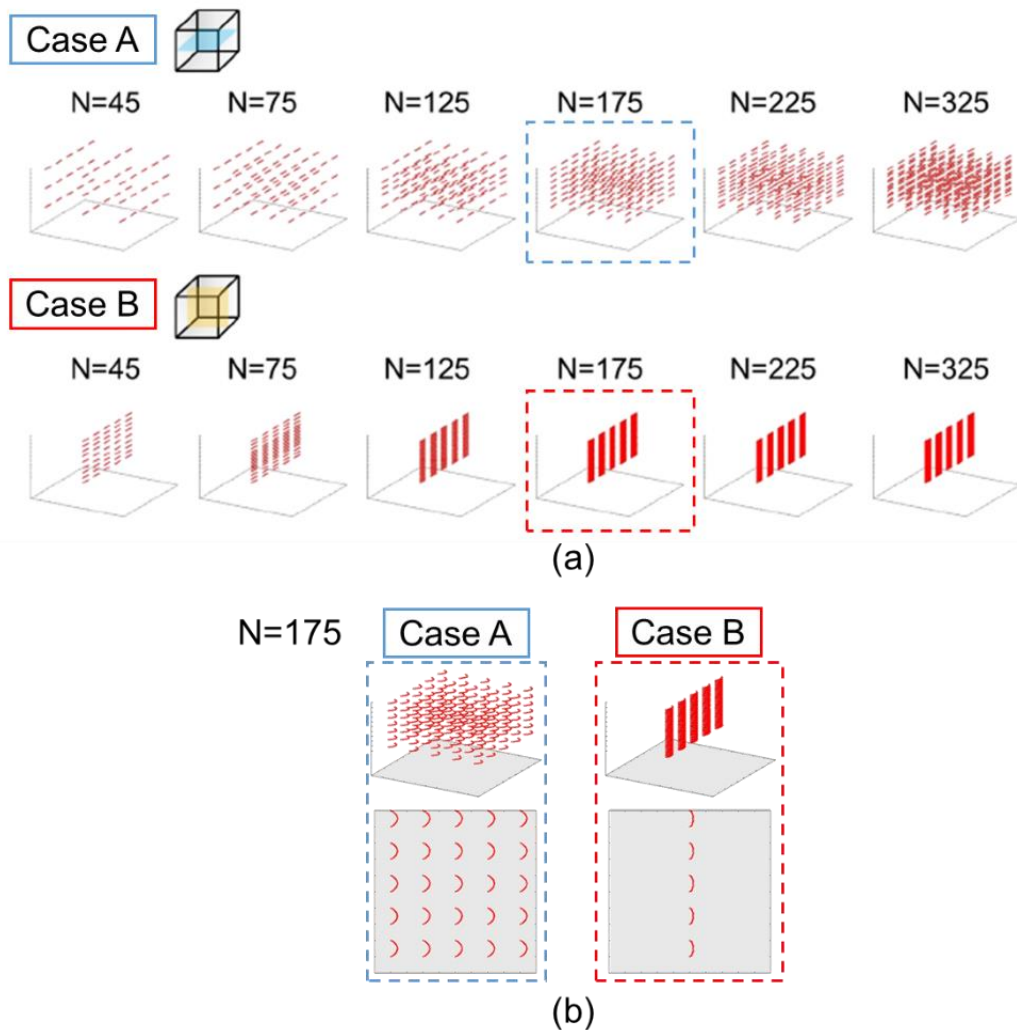


Fig. 3.4 Snapshots of (a) initial configurations of whole models and (b) bowing-out dislocation segments in the case of $N=175$ for Cases A and B.

Case A および Case B における各転位数の応力-ひずみ線図を, Fig. 3.5(a)および (b)にそれぞれ示す. 同図より, 両 Case 共に塑性変形を担う転位数の増加によって, 応力-ひずみ線図の傾きが小さくなっていることがわかる. Case B は上述したように背応力の影響を受けて張り出しが抑制されたため, Case A と比べて傾きの減少が小さい. Fig. 3.5 (c) に $N = 175$ を代表例として両 Case を比較した図を示す. 両 Case 共に, 負荷によって張り出した後にほぼ元の直線に戻るという可逆的な運動を示したため, 塑性ひずみはほぼ 0 付近にまで回復している.

第3章 見かけの弾性定数減少の解析および評価

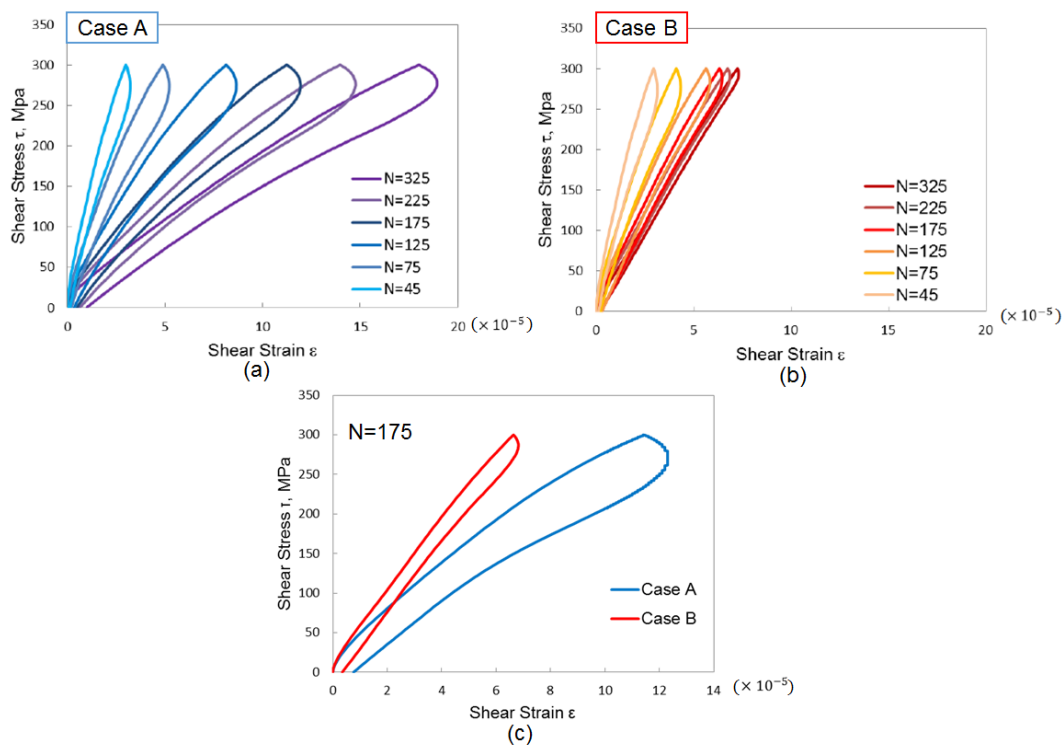


Fig. 3.5 Shear stress-plastic shear strain responses for (a) Cases A, (b) B and (c) both cases in the case of $N=175$.

Fig. 3.5 の除荷時の傾きを元に得られた見かけの弾性定数の減少率と、式(3.8) から得られるその理論解とを比較した結果を Fig. 3.6 に示す。同図より、Case A では理論解と良好な一致を見せる一方で、Case B では理論解とのずれが生じていることがわかる。Case B では、転位の張り出しが強く抑制されたため、理論解と一致しなくなったと考えられる。すなわち、転位線の張り出しが小さいと、Fig. 3.1 中の ϕ が大きくなり、この場合、式(3.5)のような Taylor 展開による近似では誤差が大きくなると考えられる。

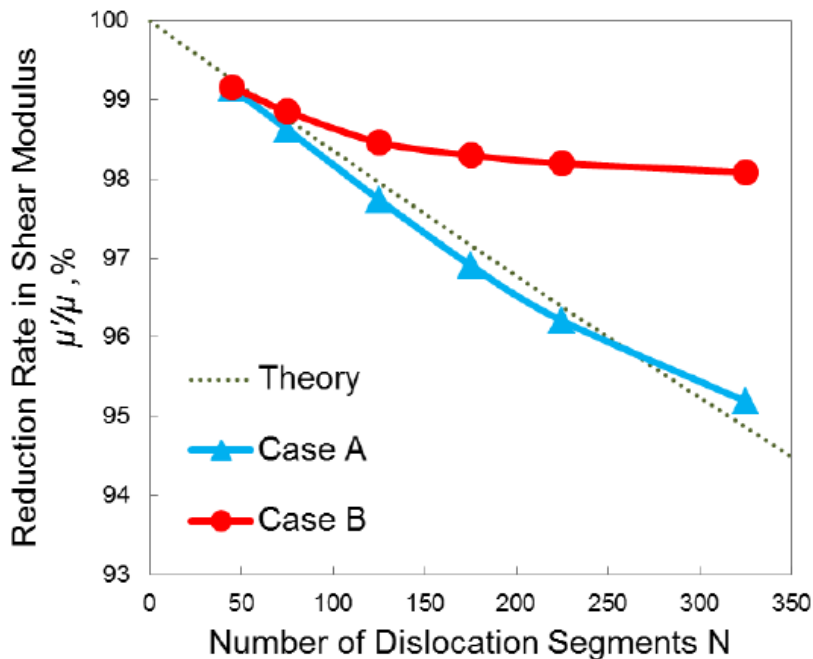


Fig. 3.6 Relationship between “apparent” reduction rate in shear modulus and the number of dislocation segments.

以上の解析によって得られた結果に対して、双対線図を用いた評価を行う。Fig. 3.7(a) に、両 Case における全ての転位数での結果を、同図(b) にそれらの代表例として $N=175$ の結果をそれぞれ示す。Fig. 3.7 (b) より、Case A では、負荷過程で不適合度がほぼ垂直に上昇し、除荷過程で同様に減少していることがわかる。この間、ひずみエネルギーの変化はあまり生じていない。このことはすなわち、外力によって供給された仕事がほぼ不適合度変化に費やされたと見ることができる。Case B では、ひずみエネルギーが上昇していく一方で、不適合度はあまり変化しない。よって、Case B においては、転位が張り出すと共にひずみエネルギーが蓄積していく傾向がある。こうした双対線図における Case A および Case B の挙動の違いは、Fig. 3.4 における転位張り出し挙動に対応する。したがって、転位線張り出しに伴う弾性ひずみエネルギーから不適合度への変化過程が、双対線図によって可視化できると言える。

Fig. 3.7(c) に、Fig. 3.7(a) 中で最大の外部応力が生じた点を抜粋した図を示す。同図より、両 Case 共に不適合度とひずみエネルギーとの間に線形的な関係があることがわかる。線形性の傾きの違いは、上述したような、ひずみエネルギーの変換性の違いを表していると考えられる。すなわち、傾きの大きい Case A は、ひずみエネルギーを不適合度の自由度へと効率よく変換するのに対し、傾きの小さい Case B は反対に

第3章 見かけの弾性定数減少の解析および評価

その変換効率が小さいと言える。この効率を定量的に表すために、Fig. 3.7(c)を元に双対係数 $\kappa \equiv \Sigma \eta / \Sigma U^e$ を評価した。この双対係数は、その定義から、ひずみエネルギーがどれだけ不適合度へ変換されるか、すなわち、転位運動へと散逸したかを示す。この特徴は、エネルギー散逸を伴う見かけの弾性定数の減少率とも対応すると考えられる。そこで、双対係数と見かけの弾性定数の減少率の理論解との対応を取ったのが Fig. 3.7(d) である。同図より、転位線の張り出しの違いや転位数に関わらず、見かけの弾性定数の減少率が双対係数に対応していることがわかる。すなわち、離散転位系の可逆運動に起因する見かけの弾性定数の減少は、双対係数によって定量化され、このことから、FTMP に基づくことで、ミクロスケールでの挙動をマクロスケールに還元し得ることを示す。

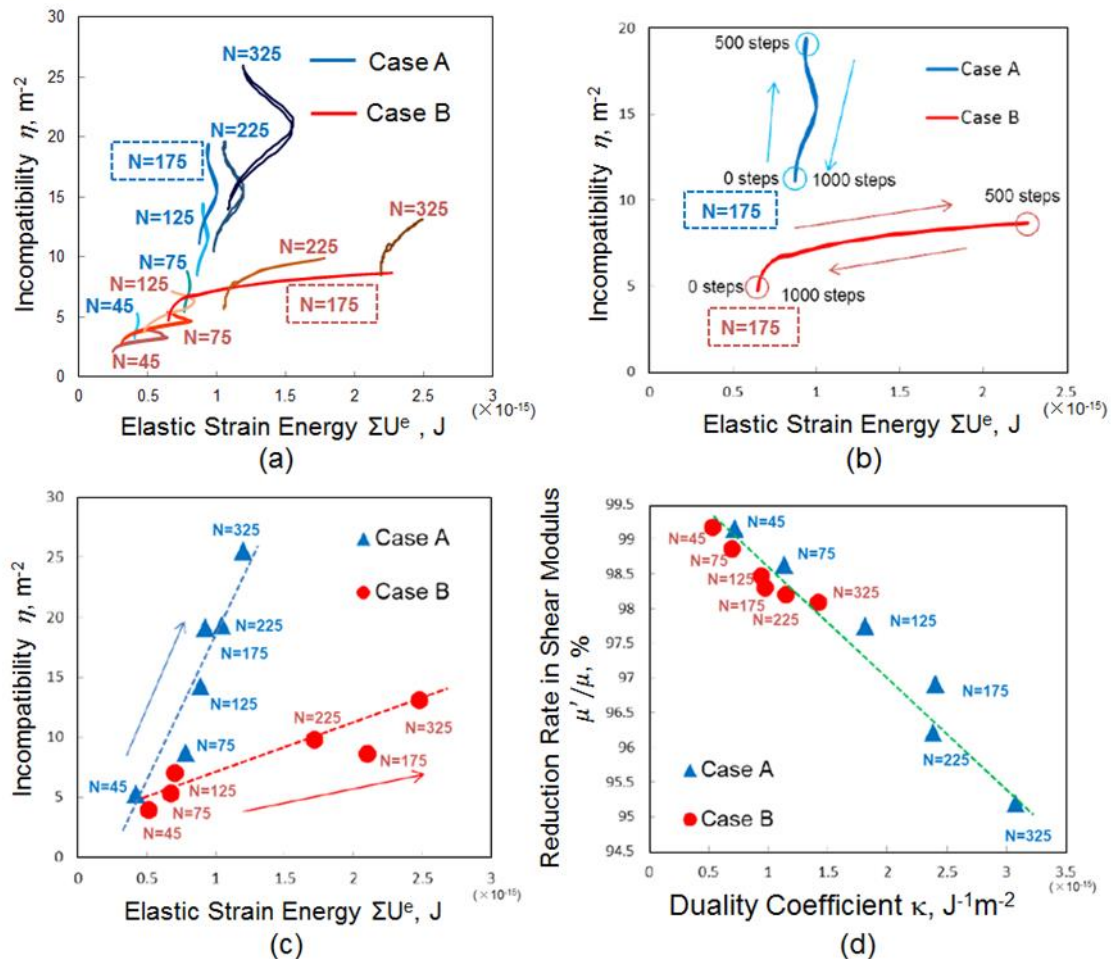


Fig. 3.7 Duality diagrams comparing Cases A and B, (a) through (c), together with correlation of apparent reduction rate of shear modulus with duality coefficient, (d).

3.4. 複雑な転位系に対する解析および評価

前節では、転位の可逆的な運動を、ピン留めされた刃状転位列の運動という単純な系で解析および評価を行った。実際の金属材料では、析出物によるピン留め効果も考えられるため、本節では析出物が及ぼす影響に焦点を当てる。析出物がランダムに配置された状態で崩壊した転位壁を基に、析出物によってピン留めされた転位をモデル化し、FTMP による評価が適用し得るかどうかを検討する。

3.4.1. 解析条件

本項および次項では、析出物の影響でピン留めされた転位系を得ることを考え、それに対して負荷・除荷を行う。前節と同じ物性値を用いて、Fig.3.8 に示すような転位壁モデルを作成する。一辺が 1000 [b]の解析セルに、セルの底面に対してそれぞれ水平および垂直な 2 種類の混合転位を配置する。それぞれの転位群のすべり系は Fig. 3.8 に示したとおりである。この転位壁モデルに対して斥力型の相互作用を示す析出物モデル [101]を導入し、析出物の数 $N=100$ および 400 の 2 通りを対象とする。解析の手順として、まず、両条件共に無負荷で 10000 [Steps]まで解析を行い、緩和後の形態を得る。次に、この得られた形態に対して Fig. 3.2 に示したような負荷条件で、0~5000 [Steps]を負荷、5000~10000 [Steps]までを除荷過程として転位の張り出し挙動の解析を行う。

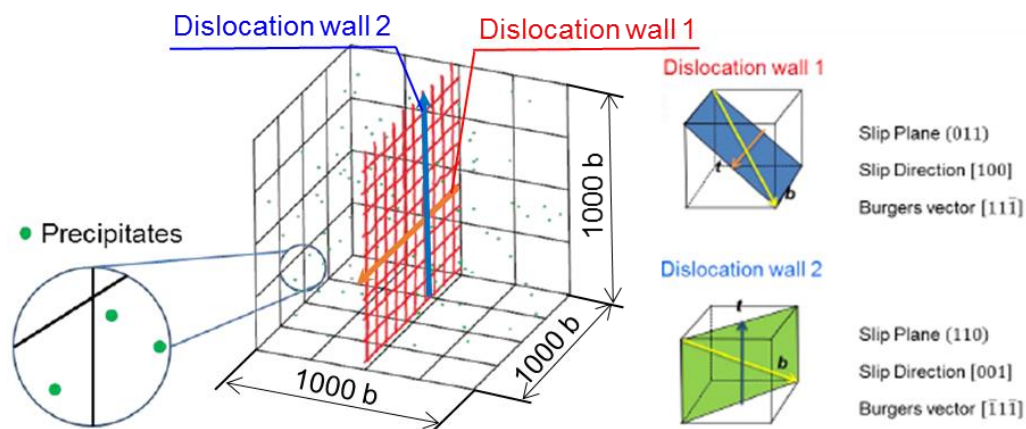


Fig. 3.8 Schematic drawing of simulation cell and characteristics of wall-constructing dislocations in simulation cell.

3.4.2. 解析結果

前項で示した条件で得られた結果を Fig. 3.9 に示す。同図中の応力-ひずみ線図を見ると、最終ステップにおいて不可逆的なひずみが生じており、析出物の数が多いほどそのひずみが大きいということがわかる。これは、始めは析出物にピン留めされていた転位が、負荷によってそのピン留めが外れ、元の配置に戻らなかったためだと考えられる。この析出物によるピン留め効果と不可逆的なひずみ応答との関係を調べるために、本モデルで得られた結果から析出物のピン留め間隔を求め、簡易モデルを作成し検討を行う。

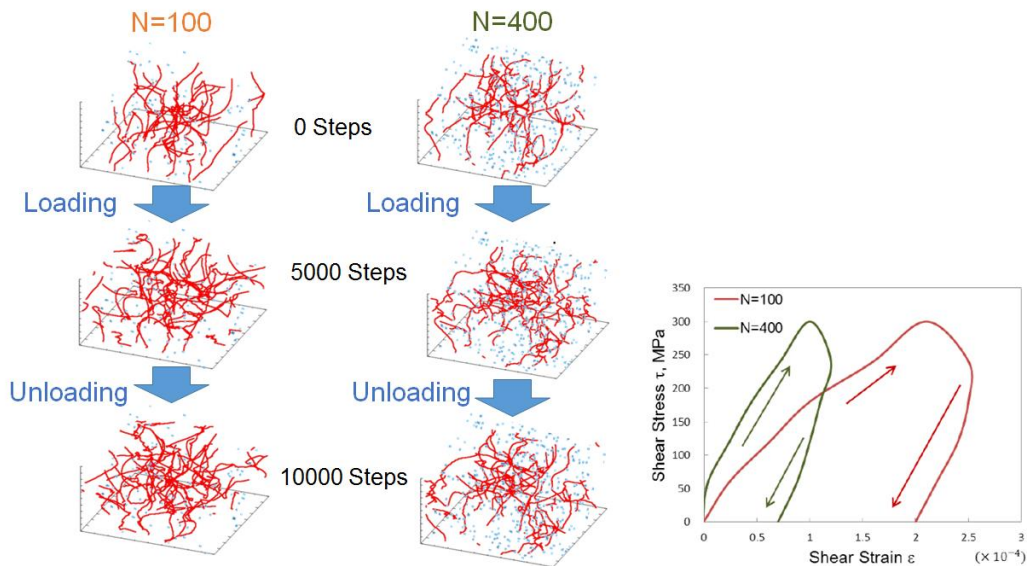


Fig. 3.9 Series of snapshots during loading and unloading processes for models with randomly-distributed precipitates (pinning points), comparing two cases with $N=100$ and 400 (left), together with the corresponding system-wise shear stress-strain curves (right).

3.4.3. 簡易モデルによる検討

前項で得られた転位系からピン留めされた転位を抽出し、負荷・除荷を行い、FTMP による評価を試みる。ここでは、ピン留めされた転位のピン留め間隔を求め、それを用いることで簡易モデルを作成し、解析を行う。

(a) 解析条件

Fig. 3.9 において、 $N=100$ の場合を対象とし、転位をピン留めしている析出物の間隔を調べた。その度数分布を Fig. 3.10 の左に示す。同図よりピン留め間隔は 200 [b] でピークを迎え、半価幅は 100 [b] ~400[b] であることがわかる。この結果を

3.4 複雑な転位系に対する解析および評価

元に、析出物によるピン留め効果再現の簡易モデルを Fig. 3.10 の右のように5つ作成する。一辺 1000 [b] の立方体セルに、長さ 800 [b] の刃状転位を 10 本配置し、析出物が無い場合 (N=0) および析出物を配置した場合 (N=10, 20(200[b]), 20(100[b]), 20(400[b]), 括弧内の数字は析出物間隔を示す) をモデル化し、これらのモデルに対して 3.1 節と同じ条件で解析を行う。

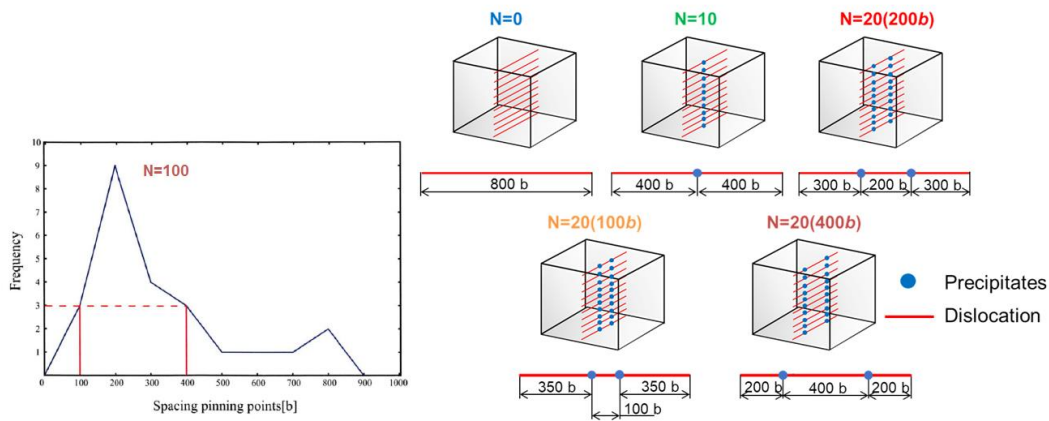


Fig. 3.10 Pinning space distribution (left) of dislocation systems in Figure 9, together with schematics of simplified models based on it (right).

(b)解析結果

どのモデルにおいても、析出物の影響によって転位の張り出し形状は歪められ、転位が最大負荷の辺りで析出物を乗り越える挙動が見られた。Fig. 3.11 に、N=10 の場合を代表例として、双対線図および各点での転位配置を示す。なお、同図中には転位線の形状を把握するために、析出物は示されていない。Fig. 3.11 において、最初と最終ステップにおける緩和挙動に加え、析出物によるピン留めの過程、ピン留めが外れる過程、およびそれらの間を遷移する過程という主に3つの過程が確認できる。ピン留めの効果によって弾性ひずみエネルギーおよび不適合度が上昇するが、ピン留めが外れることによってそれらが緩和する傾向を見せるようになる。負荷が最大になるのは 500 [Steps] であるが、最大張り出しは 700 [Steps] となっている。これは慣性力が働いたためだと考えられる。

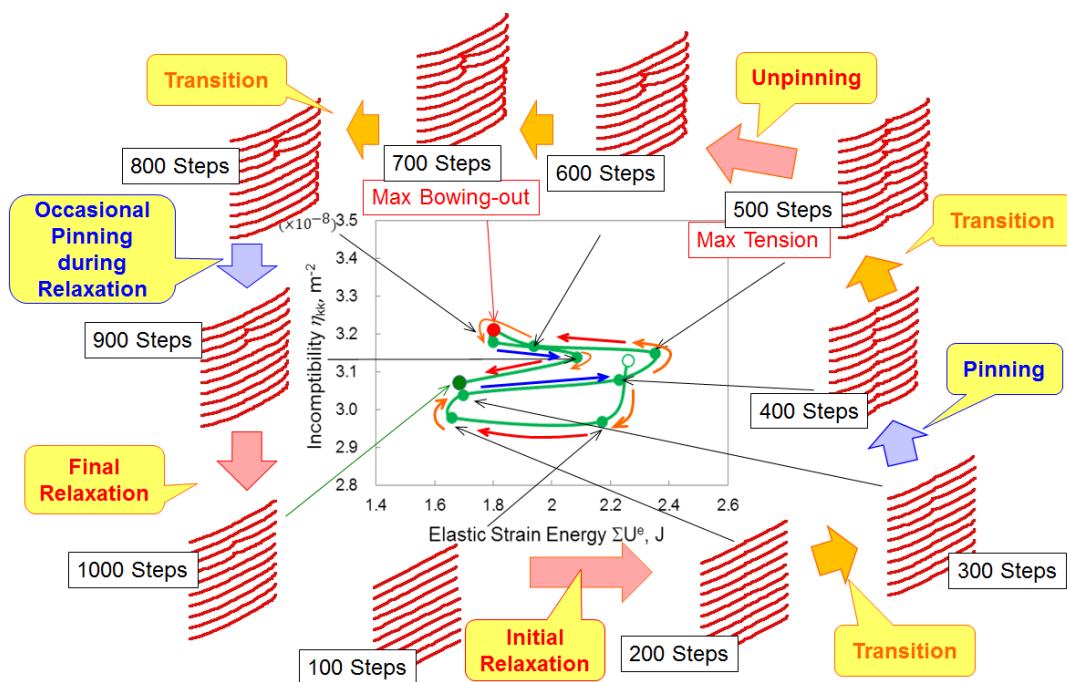


Fig. 3.11 A typical duality diagram obtained for simplified models, together with snapshots at representative steps in the case of $N=10$, where precipitates in Figure 10 are not shown.

Fig. 3.12 に全モデルでの双対線図を示す. 同図より, 析出物の数が増えるほど, また, 析出物間隔が狭まるほど不適合度が大きく上昇する傾向が見て取れる. さらに, 析出物が導入されたモデルでは, Fig. 3.11 で示したような挙動と基本的に同じ挙動を示していることがわかる.

本解析で得られた応力-ひずみ線図を, 各点における $N=10$ の場合の配置図と共に Fig. 3.13 に示す. 同図より, ピン留め効果によって 300 [Steps] から基準となる $N=0$ の場合から応力-ひずみ線図が離れたことがわかる. さらに, 除荷過程における曲線では, ピン留めが外れて最終的な緩和が起こる前である 800~900 [Steps] において傾きが変化している.

3.4 複雑な転位系に対する解析および評価

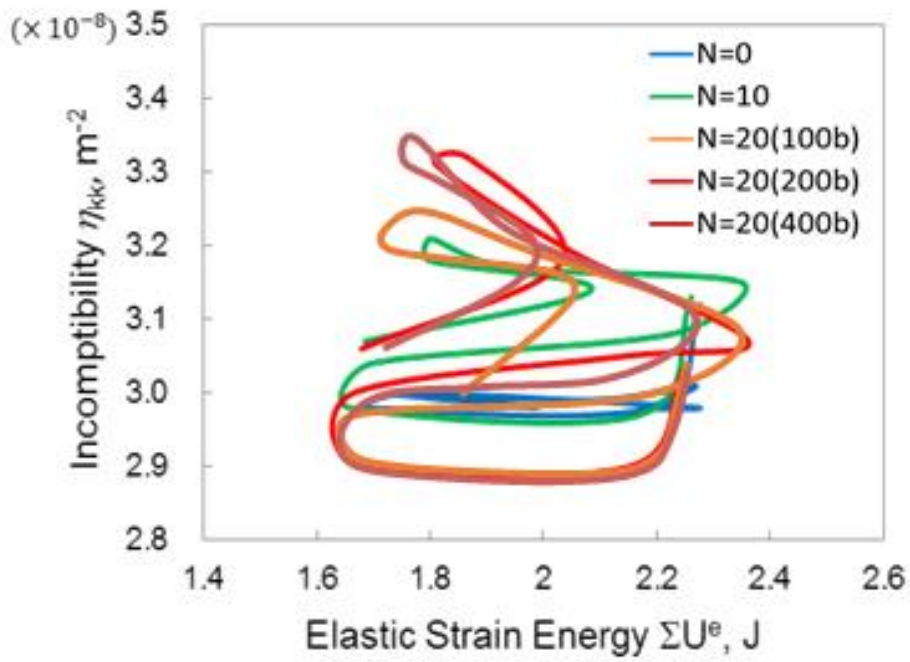


Fig. 3.12 Comparison of duality diagrams among five simplified models in Fig.3.10.

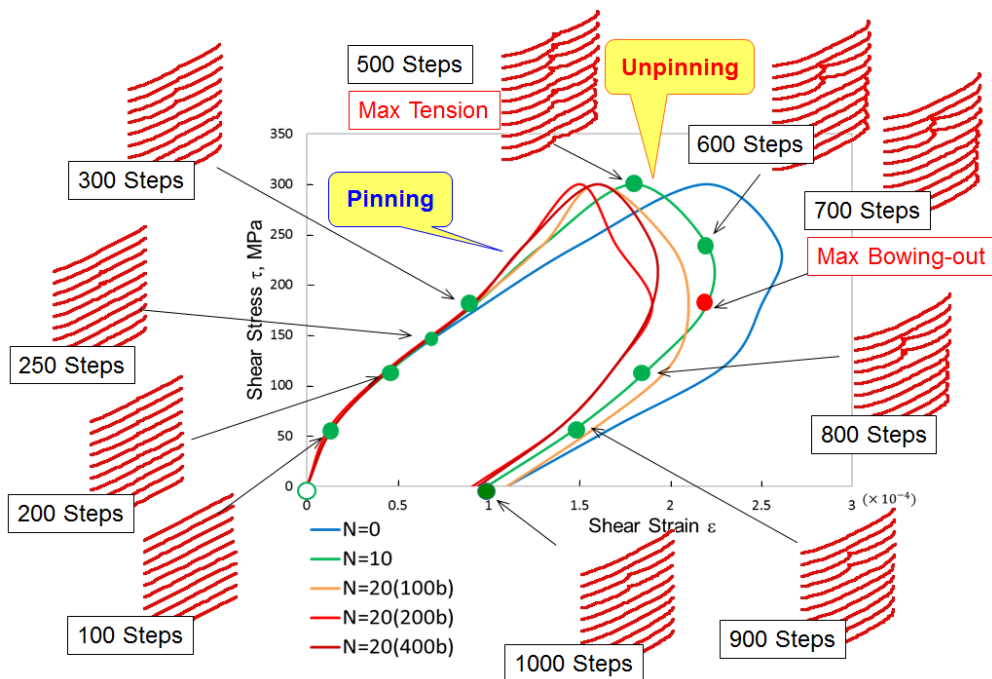


Fig. 3.13 Stress-Strain curves comparing five simplified models in Figure 10, together with snapshots at representative steps for $N=10$.

Fig. 3.14 に負荷過程における曲線の傾き，除荷過程における曲線の傾き，および最大張り出し時から推測される残留ひずみを，それぞれ双対係数と比較した結果を示す．ここで，双対係数は，最もエネルギー散逸が生じたと考えられる，最大張り出し時における値を使用している．Fig. 3.14 より，応力-ひずみ線図を特徴づける諸量および残留ひずみは双対係数と良好な相関を持つことがわかる．したがって，モデルの違いに関わらず双対係数によって整理することができたため，本節においても FTMP に基づく評価の有効性が示されたと言える．

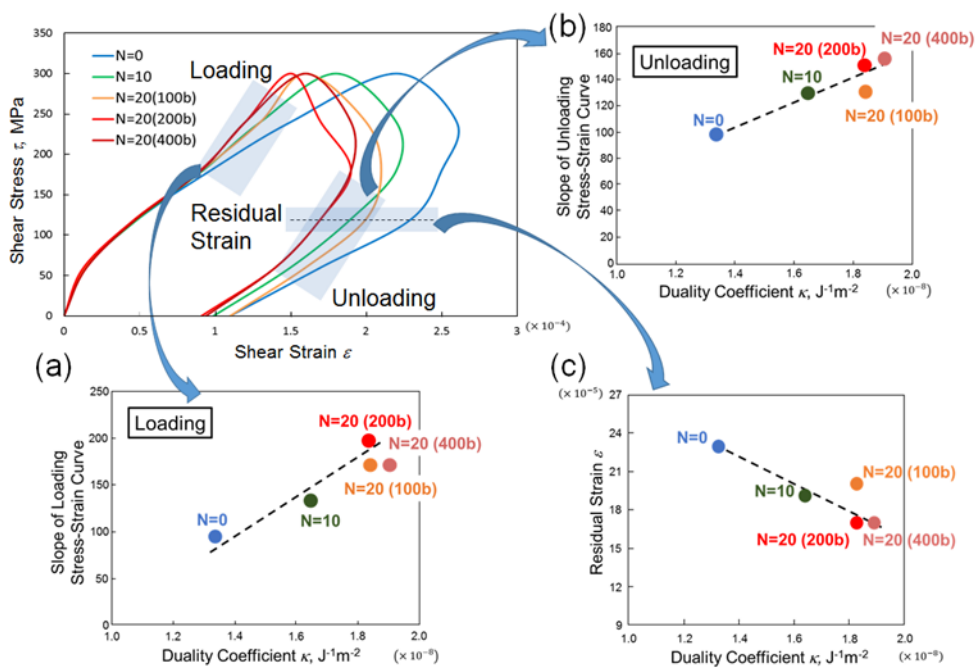


Fig. 3.14 κ -based correlations of (a) loading slope, (b) unloading slope and (c) residual strain for five simplified models, together with system-wise stress-strain curves (redisplayed).

3.5. 結晶塑性解析への導入

3.3 節の結果から，双対係数によって見かけの弾性定数の減少を表すことができるということが示された．本節では，FTMP に基づいた結晶塑性モデル (付録 A を参照) [80] [102] に対してその影響を導入する．

3.5.1. 解析条件

本解析では 12 すべり系 FCC 多結晶モデルを用いる．解析モデルの概略図を Fig. 3.15 に，材料パラメータを Table 3.1 にそれぞれ示す (各パラメータについては付録

A を参照). 平面応力状態を仮定し, 要素分割数は Crossed triangle 要素で $48 \times 48 \times 4$ とした. 各要素には, ランダムに方位を割り当て, 擬似的に等方なモデルを作成する. このモデルに対して, 4×10^{-6} [Steps]の一定ひずみで 2%まで引張りを加えた後に, 負荷を反転させ, 圧縮を加える. 反転負荷後の弾性定数 μ' は, 元々の弾性定数 μ を用いて, 以下の形式で与えることとする.

$$\mu' = \mu \left(1 - \alpha \tanh \frac{\kappa}{\kappa_{sat}} \right) \quad (3.9)$$

ここで, κ_{sat} は定数, α は最大の減少割合を示し, 本解析では $\alpha = 0.25$ とした. 式(3.9)は, Fig. 3.7(d)より, 見かけの弾性定数が双対係数の減少関数として得られたことから, 簡易的に定式化している. 見かけの弾性定数は不可逆とし, $\kappa_{sat} = 1 \times 10^6, 1 \times 10^7, 1 \times 10^8$ および補正が無い場合の 4 種類のモデルで解析を行い, 双対係数による弾性定数の低下がどのように表されるのかを調べていく.

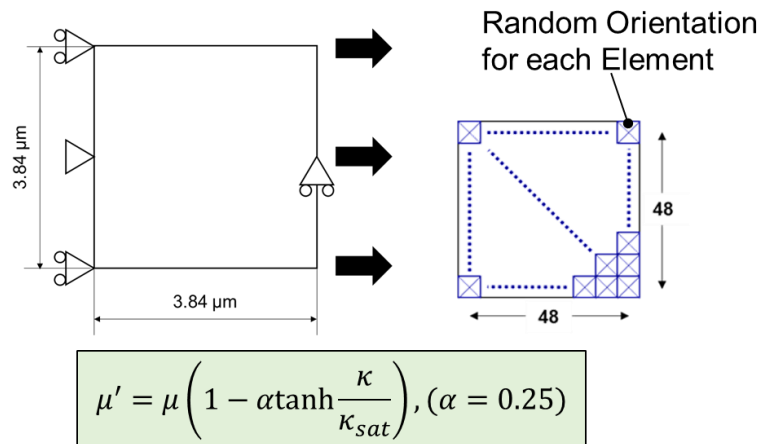


Fig. 3.15 Poly-crystal model used in FE analysis.

Table 3.1 Material parameters used in FE analysis.

Shear Strain Rate $\dot{\gamma}^\alpha$	\dot{A}_{SR} [1/s]	2.75×10^{10}	Back Stress $\Omega^{(\alpha)}$	K_{sat} [MPa]	500.0
	B_{SR}	145.5		A	30
	p_1	0.666		l^* [μm]	5.0
	q_1	2.0		a^*	0.03
Peierls Stress $\tau_{peierls}^{(\alpha)*}$	\dot{A}_{SR2} [1/s]	8.75×10^6	Strain Gradient $F_{(\eta^{(\alpha)}, \alpha^{(\alpha)})}^{(\alpha)}$	P_α [MPa]	100
	B_{SR2}	34.93		P_η [μm]	200
	p_2	0.833		\bar{k} [μm]	0.002
	q_2	2.0		l_{defect} [μm]	10.0
	τ_m^* [MPa]	356.0		B [m]	2.48×10^{10}
Drag Stress $K^{(\alpha)}$	h_0 [MPa]	1.5×10^4	Elastic Constants	C_{11} [GPa]	169.0
	τ_0 [MPa]	244		C_{12} [GPa]	122.0
	n	0.13		C_{44} [GPa]	75.3
	$(W_p)^*_{sat}$	6.0	Time Interval	Δt [s]	2.0×10^{-2}
	d_{GRAIN} [μm]	40.0			

3.5.2. 解析結果

本解析によって得られた応力-ひずみ線図および、弾性マトリクス成分の要素平均の変化を Fig. 3.16(a)および(b)にそれぞれ示す. Fig. 3.16(a) より、反転負荷における見かけの弾性定数の低下が滑らかに表現できており、 κ_{sat} によってその程度を制御することができることがわかる. Fig. 3.16(b) に示した弾性定数の変化を見ると、弾性定数の低下が始まる反転負荷時から、応力が0になる時点までに急激な低下が生じるが、その後の変化は緩やかになっている. このことから、弾性定数は応力が正の領域で大きく減少していることがわかる.

以上より、FTMPに基づいた転位系の評価によって、転位系を表現するパラメータと、見かけの弾性定数の低下というマクロな現象とを結びつけることが可能であると示された.

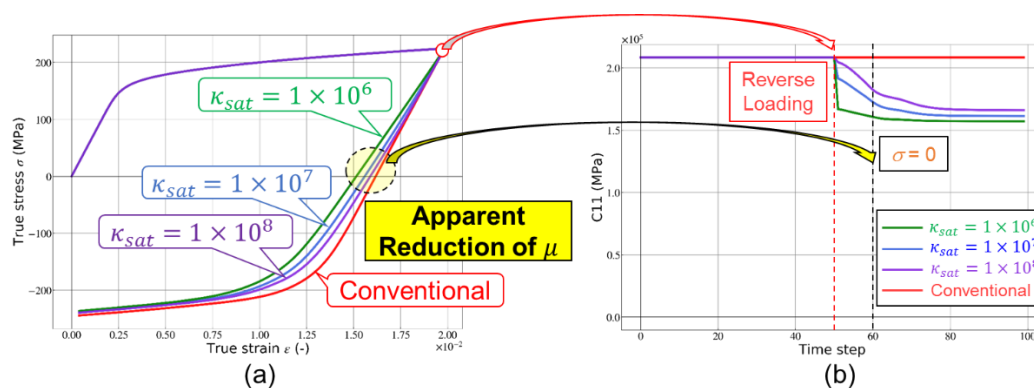


Fig. 3.16 Simulated results among 4 models. (a) Comparison of stress-strain curves and (b) variation of elastic stiffness component are shown.

3.6. 結言

本章では、塑性加工の分野において報告されている、負荷・除荷過程における見かけの弾性定数の低下について、転位の可逆運動に着目し、転位動力学法による表現および FTMP に基づく観点からその評価を行った。

転位の可逆運動を再現し得る、最も単純なケースとして、刃状転位の張り出しを対象に解析を行った。刃状転位列をすべり面に対して水平 (Case A)、または垂直 (Case B) に並べ、せん断応力を負荷した後に除荷した解析では、転位列の並び方によって張り出し挙動が異なり、Case B では Case A と比べ、張り出しが抑制される傾向にあった。これらの解析から見かけの弾性定数の低下率を求め、理論解と比較した所、Case A では良好な一致を見せる一方で、Case B では理論解からの逸脱が見られた。FTMP に基づく双対線図による評価を行うと、両 Case 間でのエネルギー・不適合度の変化過程に特徴的な差異が見られた。さらに、不適合度とエネルギーの比である双対係数と、見かけの弾性定数の低下との間には、両 Case での張り出し挙動の差異に関わらず、良好な相関が得られた。

次に、析出物によるピンニングにより生じる転位の可逆運動に着目して解析を行った。析出物を含む転位壁の崩壊シミュレーションの結果から、ピンニング間隔を抽出し、その間隔を基に析出物を配置したモデルに対して解析および評価を行った。析出物の影響によって転位のピンニングやアンピンニングが生じ、張り出し挙動が複雑になったものの、FTMP による評価によって、その力学的挙動を整理することが可能であることが示された。

上記、双対係数で見かけの弾性定数の低下を評価できるという結果から、双対係数による見かけの弾性定数の低下のモデル化を行った。その結果、除荷過程における見

第3章 見かけの弾性定数減少の解析および評価

かけの弾性定数の低下が表現可能であることがわかった。

このような結果から、FTMPに基づく評価によって、マイクロの現象を統一的な観点で整理することが可能であることや、その知見を活かすことによってマイクロ・マクロを繋ぐマルチスケール解析が可能であることが示されたと言える。

第4章 固執すべり帯(PSBs)に対する解析および評価

4.1. 概要

本章では、金属材料の疲労破壊の起点となるき裂発生過程の起源である固執すべり帯 (Persistent Slip Bands: PSBs) における転位運動を対象とする。すなわち、同組織の主要構成要素である刃状転位双極子の壁構造をモデル化し、同壁構造を構成する転位の壁間における往復運動を各種条件下で解析する。ここでは、負荷応力レベルの違い (FCC 金属)、および交差すべり頻度の違い (BCC 金属) を対象とし、とくに不適合度テンソル場に対する相空間トラジェクトリ (PhS-T) による分析・評価を行う。ラダー組織中の Channel 部に張り出したらせん転位群の往復運動が、PSBs における集中的なせん断変形を担うのであるが、らせん転位群は Channel 内で行き交う運動中に、弾性相互作用の結果時折転位双極子を形成し、他の運動転位の障害物として働く。そのため、負荷応力レベルにより PhS-T へ及ぼす影響が異なる、すなわち、いわゆる安定運動に対する PhS-T 上での閉軌道に至る過程に主として現れると考えられる。一方、交差すべりが生じる場合、往復運動の過程で転位ループが形成されることが予想され、これらの転位ループが原子空孔型を含む場合、疲労き裂形成過程に重要な役割を果たすと想定される。ここでは、転位ループ形成過程が PhS-T に対して及ぼす影響について、とくに重点的に議論を行う。

以下では、まず交差すべりが生じない、安定的な応答を示す PSB モデル (FCC) に対して、負荷応力レベルを変えた 3 ケースについて解析および PhS-T による安定性評価を行う。その次に、交差すべりの頻度を変えた 3 ケースのモデル (BCC) に対して同様に解析および評価を行い、原子空孔型の転位ループの影響がどのように表れてくるのかを検討していく。

4.2. FCC モデル

本節では、FCC における PSB モデルを作成し、転位間相互作用のみの、自律的に発展した転位系に対して、繰り返し負荷を与えることを考える。安定的な挙動を示すまでの過程に対して場の理論的な評価を行い、PSBs における安定な挙動がどのように PhS-T 上で表現されるのかについて言及していく。

4.2.1. 解析条件

まず、PSB モデルの緩和計算によって、安定化した転位系を得ることを考える。Fig. 4.1 に解析モデルを示す。通常、PSBs の Wall 部を構成する刃状転位の双極子

第 4 章 固執すべり帯(PSBs)に対する解析および評価

は、Channel 部に張り出す可動部分と、応力場によって運動が制限されている不動部分とに分けられると考えられる。本解析では、任意の長さの刃状転位を任意に配置し、一部の転位を不動転位化、その他は両端をピン留めして Wall 部をモデル化した。2 枚の Wall を Fig. 4.1 に示すように、対向させて 1 辺 2.0 μm (8000 [b]) の立方体セルに配置し、外力は負荷せずに転位間相互作用のみで駆動させる。周期境界条件を課し、1 [Step]あたりの時間間隔は $\Delta t=1.0\times 10^{-10}$ [s]、対象とする材料は Cu (FCC) で、用いた物性値は、密度 8940 $[\text{kg}/\text{m}^3]$ 、せん断弾性係数 46.1 $[\text{GPa}]$ 、ポアソン比 0.34、Burgers ベクトルの大きさ 2.56×10^{-10} [m]とした。

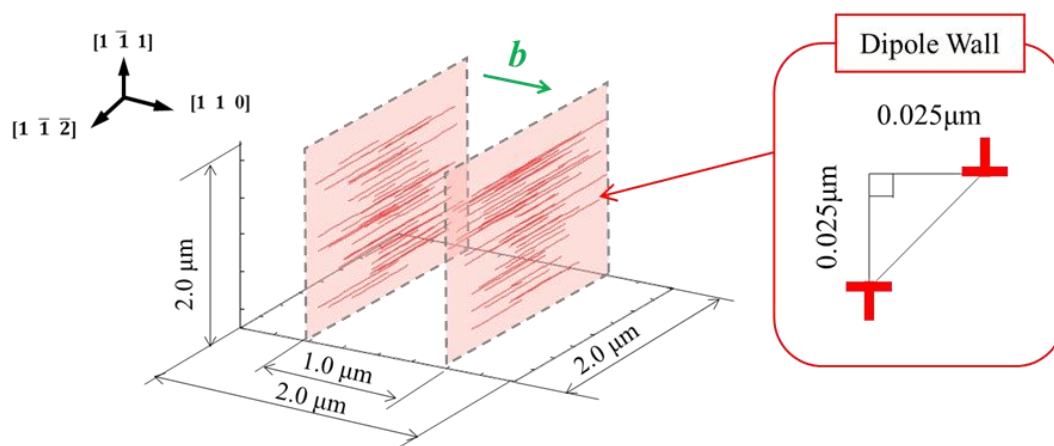


Fig. 4.1 Computational model of PSB for FCC.

転位間相互作用によって、Fig. 4.1 に示すモデルの Wall 部から転位が張り出し、緩和後の形態が得られた。その形態を、転位密度の変化と共に Fig. 4.2 に示す。初期においては、Wall 部の転位が張り出したり、対向する Wall の転位と対消滅したりすることを繰り返すことで、転位密度の時間変化に揺動が生じている。対消滅が生じた後は、転位同士が繋がり、Channel 部にらせん転位として残される。こうした転位間相互作用は次第に収束し、最終的には転位の運動が止まり、転位密度は一定になっている。

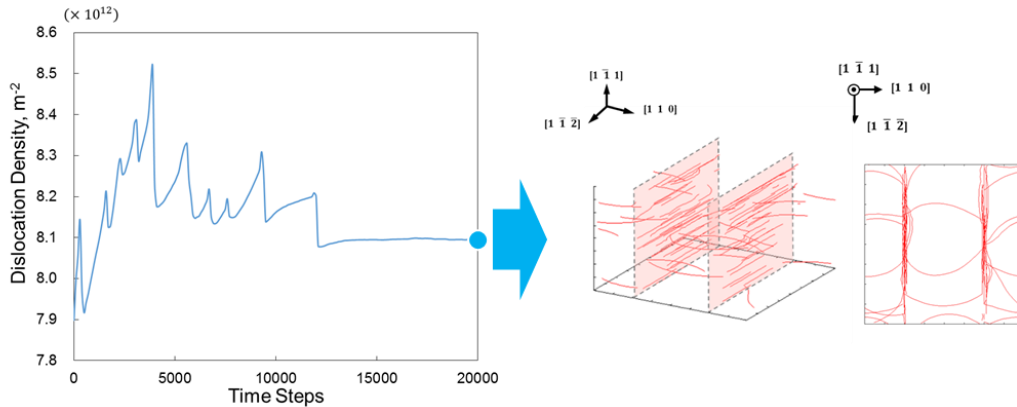


Fig. 4.2 Simulated results for relaxation configuration of PSB model. Variation of dislocation density and configuration at which last step are shown.

Fig. 4.2 に示した転位系に対して、応力制御で繰り返し負荷を掛ける。応力振幅 $\Delta\sigma = 15, 20, 25$ [MPa] の 3 種類を想定し、以下に示すように、5000 [Steps] 周期で、5 周期の負荷を与えていく。

$$\sigma_{13} = \Delta\sigma \sin \left\{ \frac{(\text{Time Steps}) * \pi}{2500} \right\} \quad (4.1)$$

4.2.2. 解析結果

緩和後の PSB モデルに対して周期負荷を掛けた結果を Fig. 4.3 に示す。初期においては、負荷によって転位が張り出し、対向した Wall 部の転位と対消滅を頻繁に起こす。全ケースにおいて、一部では転位の双極子を Channel 部に生成し、それらが運動の障害となっている。しかし、 $\Delta\sigma = 20$ および 25 [MPa] の場合では転位の張り出しが大きいため、双極子はステップを重ねるにつれて解消される。最終的には $\Delta\sigma = 15$ および 20 [MPa] では対消滅がほとんど生じなくなり、15000 [Steps] 以降は基本的に周期負荷に合わせて周期的に前後運動するのみである。一方、 $\Delta\sigma = 25$ [MPa] では、15000 [Steps] 以降も Wall 部から転位が大きく張り出すため、対向した Wall の転位と相互作用を周期的に起こし続けることになる。上述した変化は Fig. 4.4 に示すように、ひずみ速度の変化にも表れている。同図では、初期において波形が乱れているが、転位間相互作用が収束するに従って一定の波形を見せるようになる。15000 [Steps] 以降は全てのケースでほぼ一定の変化傾向を示している。

第 4 章 固執すべり帯(PSBs)に対する解析および評価

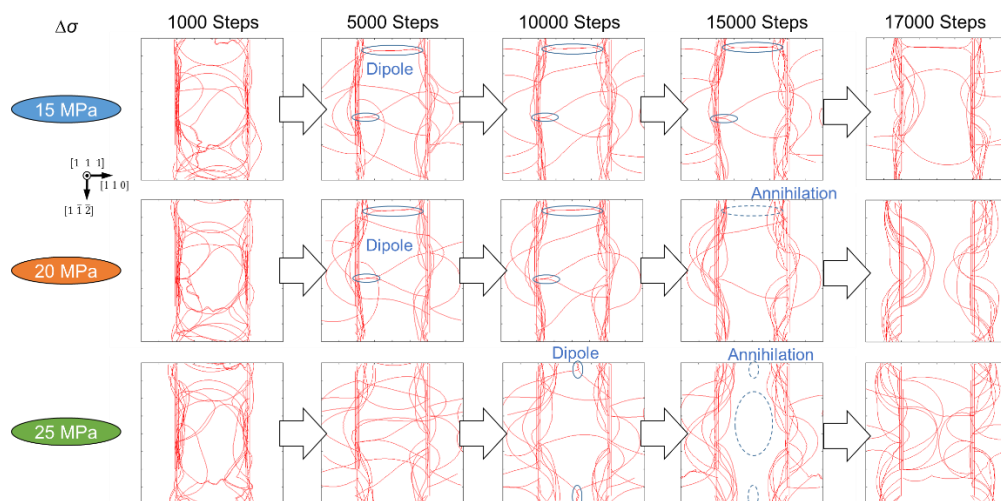


Fig. 4.3 Snapshots of PSB models for 3 stress amplitude cases. Screw dipoles are generated and they annihilate in larger stress amplitude model.

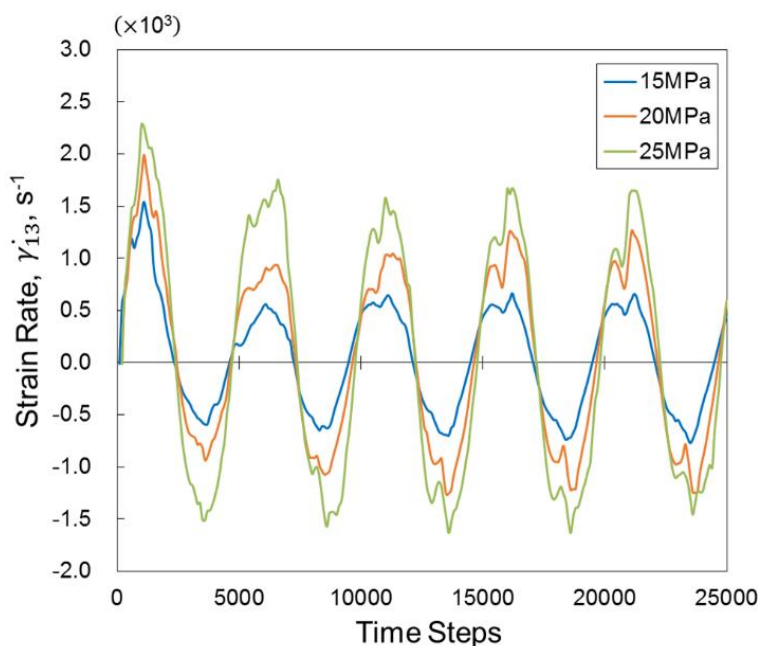


Fig. 4.4 Variations of strain rate for FCC models.

このように、本 PSB モデルは周期的な運動を示すような安定化をする。ここで、PSBs における安定的な挙動が、何によって評価が可能かを考える。FTMP に基づく双対線図では、前後運動する転位系の場合、不適合度およびエネルギーゆらぎ共に

揺動するため、安定化の指標を得にくいということが考えられる。一方、Fig. 4.4 のようにひずみ速度変化を追という方法では、一見周期的な波形が得られたとしても、転位の僅かな変化によって波形が乱れるため、波形のみで系全体の安定性を判別することは難しい。

そこで本研究では、2.2.6 項で述べたように、ある量と、その時間変化とをプロットした、PhS-T [78]による評価を試みる。ここでは、不適合度とその時間変化をプロットすることを考える。不適合度の時間変化は次式で定義される。

$$|\dot{\eta}_{KK}| = \frac{|\eta_{KK}|_{n+\Delta n} - |\eta_{KK}|_n}{\Delta n} \quad (n = 100, 200, \dots, 25000, \Delta n = 100) \quad (4.2)$$

式(4.2)において、 n は Time Steps を示し、本解析では 100 [Steps]毎に不適合度を計算しているため、 $\Delta n = 100$ とした。本モデルは、安定化した状態とそれへの遷移状態との2種類に分けることができる。Fig. 4.4 から、15000 [Steps] 以降はひずみ速度の波形にほとんど乱れが生じていないことから、1~3 周期分 (~15000 [Steps] まで)を遷移状態、それ以降(4 および 5 周期)を安定状態と定義する。本研究では、繰り返し負荷を与えているため、安定状態においては、転位が負荷に応じた運動、すなわち周期的な運動をすることになる。この場合の PhS-T 上での振る舞いは、単振動における解の振る舞いと同一ように閉軌道になると考えられ、PhS-T 上の閉軌道は安定状態を示すと推察される。

Fig. 4.5 に、本研究で得られた PhS-T を示す。同図において、安定状態は遷移状態より強調して表示しており、各周期における PhS-T もそれぞれ示している。全てのケースで、初期において不適合度およびその速度が正となっていることから、外部応力によって不適合度の発展が生じていると言える。その後、反転負荷の際に転位が収縮するため不適合度速度が負になり、再負荷によって再び正になることを繰り返して、遷移状態から安定状態へ移行し、 $\Delta\sigma = 15$ および 20 [MPa]では安定状態のループがほぼ一致するような閉軌道が得られる、すなわち、安定化するということが示される。一方、 $\Delta\sigma = 25$ [MPa]ではループが一致しないものの、周期を重ねるにつれて閉軌道へと収束している。このことから、 $\Delta\sigma = 25$ [MPa]においても同様に安定化しているということが読み取れる。なお、ループが一致しない理由として、 $\Delta\sigma = 25$ [MPa]では、Fig. 4.3 に示したように、対向した Wall 部から張り出した転位と動的に相互作用をし続けるということが挙げられる。この転位間相互作用が、PhS-T 上の何に影響を及ぼしてループ形状が変化しているのかについて、Fig. 4.5 右に示した、 $\Delta\sigma = 25$ [MPa]における 3rd Cycle 以降のトラジェクトリを見ると、縦軸に大きな変化が生じていることがわかる。すなわち、転位間相互作用は不適合度自体ではなく、不適合度速度に大きな影響を与えることが示唆される。このこと

第4章 固執すべり帯(PSBs)に対する解析および評価

を示したのが Fig. 4.6 であり, 同図中(a)においては, 不適合度は一定の中心線の周囲で緩やかに揺動しているのに対し, 同図中(b)を見ると不適合度速度は激しく揺動していることが見て取れる. この転位間相互作用と不適合度速度の関係については次節においても述べる.

以上のことから, PhS-T によって, 周期的に運動をするような, 動的な平衡に関しても安定性の評価が可能であるということが言え, 次節では交差すべりによって PhS-T がどのように変化するかを議論していく.

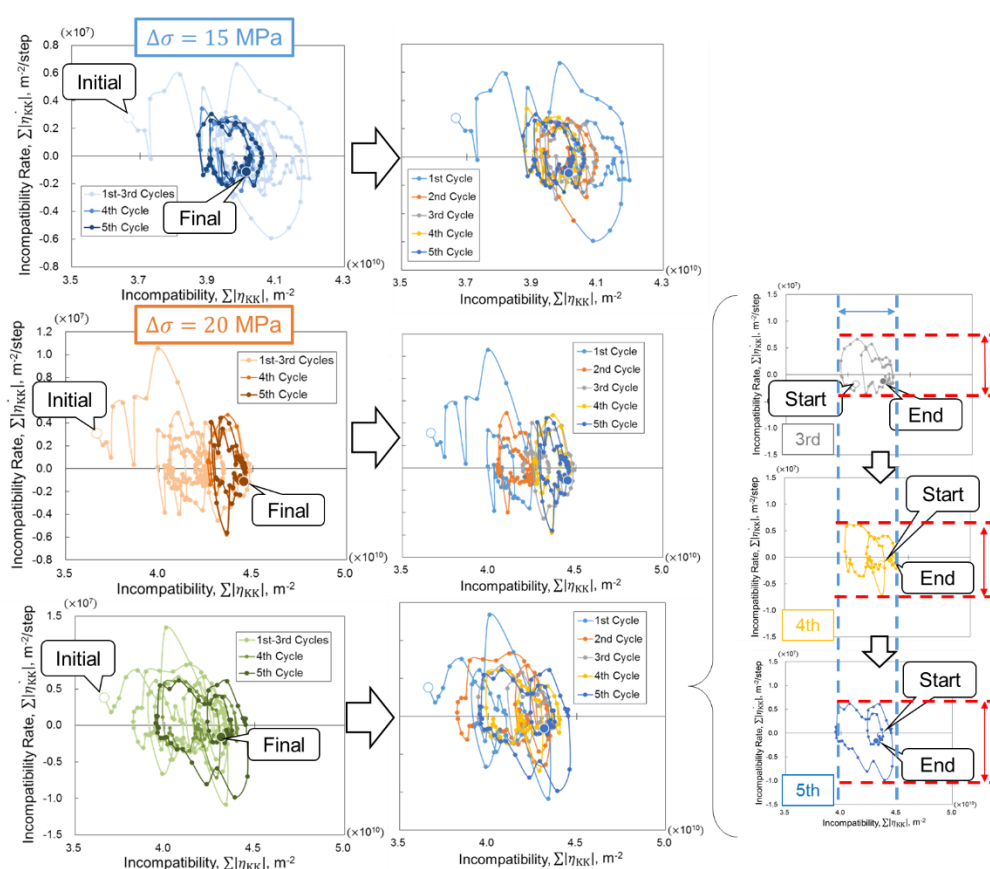


Fig. 4.5 Phase-space trajectories of PSB models for FCC.

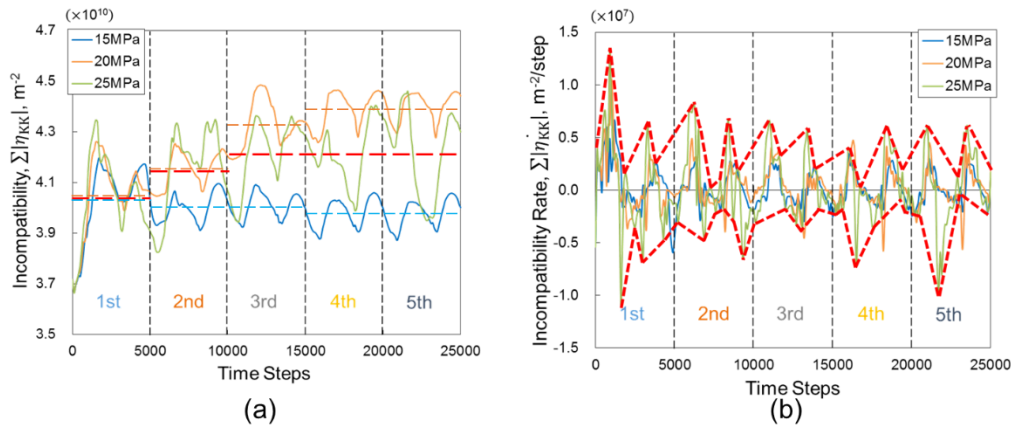


Fig. 4.6 Variation of (a) incompatibility and (b) incompatibility rate of PSB model for FCC.

4.3. BCC モデル

前節では、周期的な運動という安定的な応答を示す PSBs は、相空間トラジェクトリ上で閉軌道を示すことを述べた。本節では、PSBs において交差すべりが生じる場合について、解析および評価を行う。すべり面が多様である BCC を対象に、交差すべりの頻度を変え、交差すべりの影響について述べていく。

4.3.1. 解析条件

Fig. 4.7 に解析モデルを示す。本解析では、計算コストの制約から、刃状転位壁を 1 枚配置し、両端をピン留めした中央の転位のみを可動転位として、それ以外は不動転位とした。交差すべりが生じる臨界応力を 1 桁変えることで、交差すべりの頻度を制御し、高頻度および低頻度、さらには生じない場合の 3 ケースについて解析をする。周期境界条件を課し、1 [Step]あたりの時間間隔は $\Delta t=3.0 \times 10^{-12}$ [s]で、外部応力は式(4.1)を $\Delta \sigma=200$ [MPa]として、前節と同様に 5000 [Steps]周期で与える。対象とする材料は α -Fe (BCC) で、用いた物性値を、密度は 7630 [kg/m³]、せん断弾性係数は 53.8 [GPa]、ポアソン比は 0.334、Burgers ベクトルの大きさは 2.485×10^{-10} [m]とする。なお、本解析では、交差すべりを生じやすくするために、らせん転位の易動度を、刃状転位の易動度の 1/100 にし、転位が張り出した際にらせん成分が Channel 部に残りやすくしている。

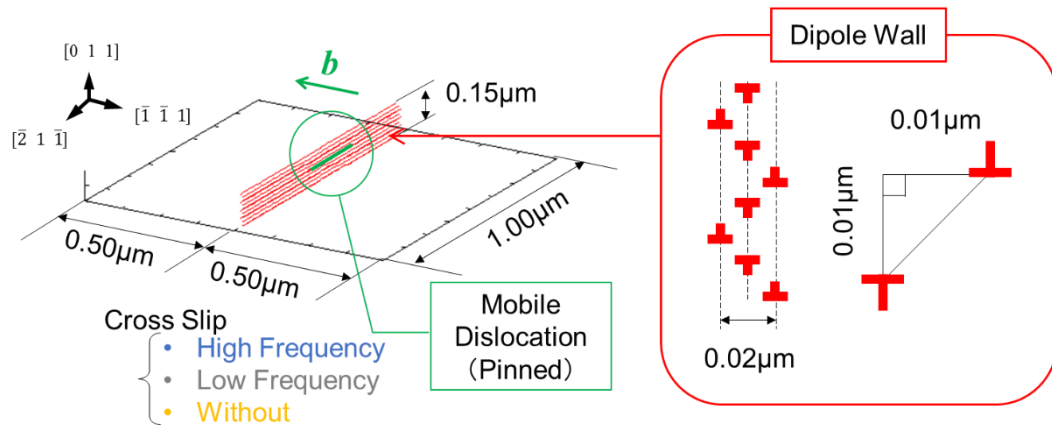


Fig. 4.7 Computational model of PSB for BCC. For computational efficiency, one edge dipole wall is considered and only a pinned edge dislocation can glide.

4.3.2. 解析結果

本解析で得られた各モデルの挙動を Fig. 4.8 に示す. 交差すべり無しモデルとその他のモデルとを比べると, 交差すべりの影響によって転位の張り出し挙動が大きく変化していることがわかる. 交差すべりをした転位は, 反転負荷によって Wall 部に戻されると, Fig. 4.9 に示すように, Wall 部の転位と対消滅を起こす. 高頻度モデルでは, Channel 部に残された転位ループの一部が Wall 部の転位と接続しながら, 外部応力の周期に合わせて拡張および収縮を繰り返す. 一方, 低頻度モデルでは, こうした傾向はごく一部に限られる. このような転位の運動を通して, 交差すべりがあるモデルでは, Channel 部に微小ループが生成される.

ここで, 交差すべりが高頻度であるモデルにおける, 微小ループの生成過程について述べていく. 初期において拡張した転位の至る所で, 交差すべりが生じ (Fig. 4.8 (a)), Fig. 4.8(b)の段階では他のモデルと大きく形状を変えている. 交差すべりが生じた転位はさらに交差すべりを起こし, 対消滅を経て Channel 部に多数の微小ループを残す (Fig. 4.8(c)以降). こうした微小ループの生成は, 交差すべりの頻度が大きくなるにつれて, その数が多くなっていると推察される. それを定量的に示したのが Fig. 4.10 である. 同図では, Fig. 4.8 に示した微小ループを構成する転位のノード数が基本的に 10 以下であったことから, 微小ループを, ノード数 10 以下の転位ループと定義して, 各 Step での値を求めている. Fig. 4.10 より, 交差すべりによって微小ループが解析セル内に蓄積されていくことが定量的に示される.

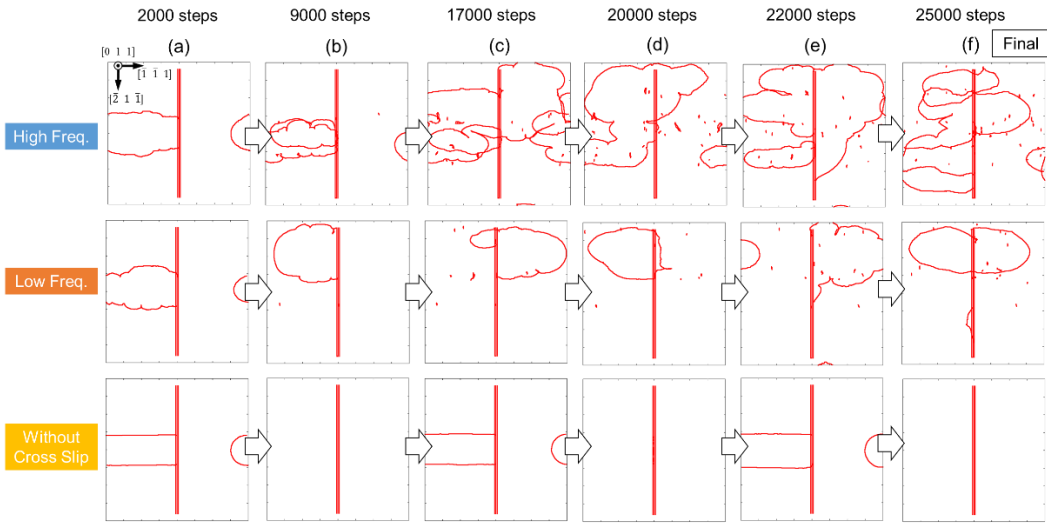


Fig. 4.8 Snapshots of simulated results of PSB models for BCC. Cross slip causes generation of debris loops in channel.

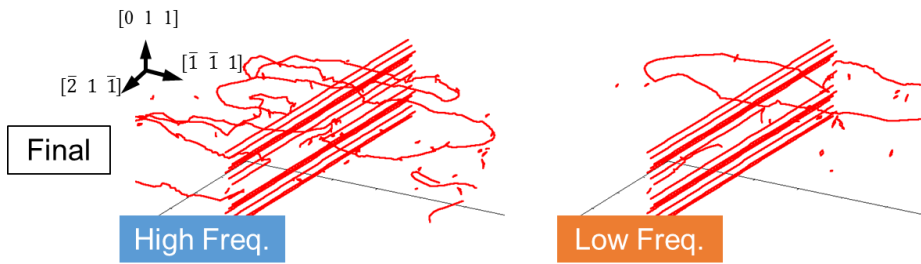


Fig. 4.9 Snapshots of simulated results of PSB models for high-frequency-model and low-frequency-model at last step.

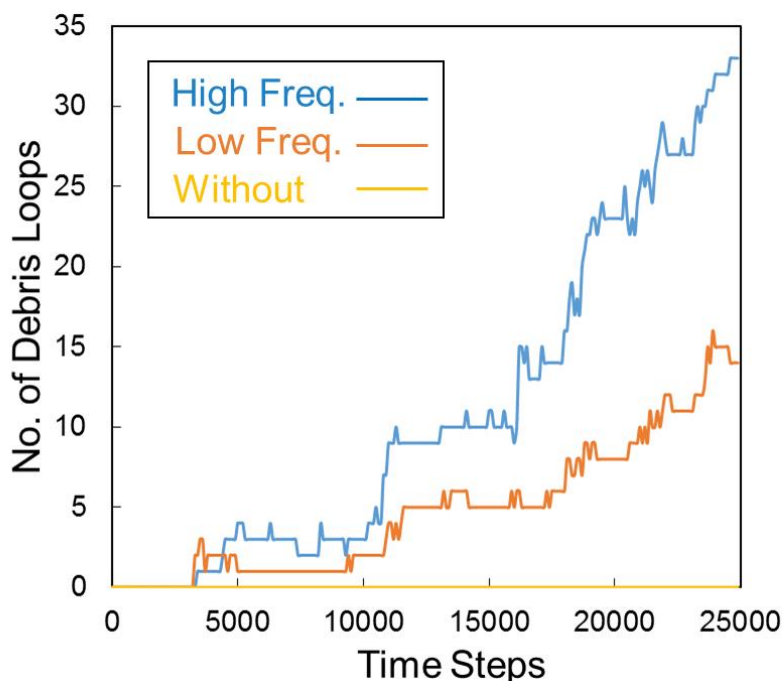


Fig. 4.10 Variation of the number of debris loops.

こうした微小ループの生成について詳細に述べる．高頻度のモデルを例にして生成過程を詳細に示した結果が Fig. 4.11 である．同図では，転位セグメントをそれが属するすべり面毎に色分けしており，1 周期目の反転負荷の時に，微小ループが生成される過程をステップごとに示している．Fig. 4.8 で既に示したように，最初の負荷の段階で無数に交差すべりが起こっており，反転負荷によって転位が戻る際に，元のすべり面 (Fig. 4.11 の赤) に属している転位同士で対消滅が生じる．これによって，4 つのすべり面 (Fig. 4.11 の赤，緑，青，オレンジ) で構成される転位ループが残される．その転位ループは外部応力によって引き伸ばされ，一部はらせん転位になり，更に交差すべりおよび対消滅を起こして，微小ループへと変化していくと考えられる．最終的に，構成する転位が異なるすべり面 (赤，緑) に属した，刃状成分の支配的な微小ループが生成されている．このように，らせん転位は次々と交差すべりを起こし，対消滅していくため，本解析で得られた微小ループは全て刃状成分が支配的であると考えられる．残された転位ループは，そのすべり面との関係から，原子空孔または介在物としての性格を有すると推察される．したがって，微小ループは交差すべりを通して生成されることから，PSBs における交差すべりが，原子空孔の発生を制御し得る，ということが言える．このことを示したのが，Fig. 4.12 にある，交差すべりしたノードと微小ループとの関係である．同図より，

交差すべりの頻度に関わらず、交差すべりしたノードの数と、微小ループ数、すなわち原子空孔数との間には良好な相関があるということが示唆される。

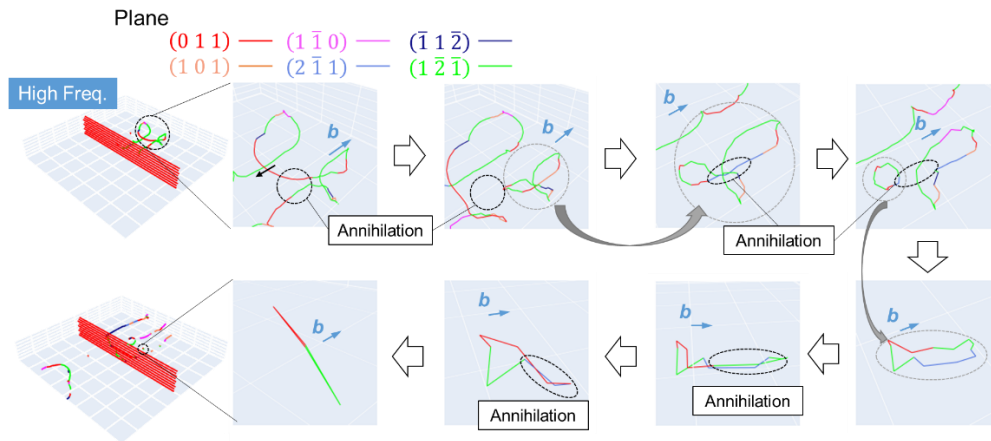


Fig. 4.11 Snapshots of generation process of debris loops. When reversed loading, head of dislocations annihilate with other dislocations, leaving dislocation loops. Such generated dislocation loops repeat cross slip and annihilation with their dislocations. Finally, edge dislocation loops are left in channel.

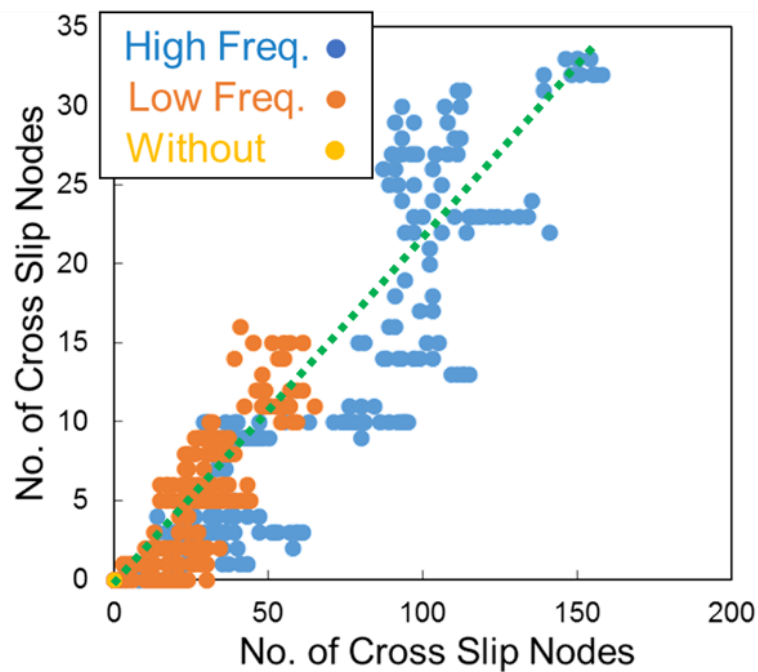


Fig. 4.12 Relationship between the number of debris loops and the number of cross slip nodes.

第4章 固執すべり帯(PSBs)に対する解析および評価

次に、FTMPに基づく評価を行っていく。本解析で得られた PhS-T を Fig. 4.13 に示す。同図では、各モデルの各周期でのトラジェクトリも同時に示している。Fig. 4.13 より、交差すべりの影響によってトラジェクトリの形状が大きく変化することがわかる。高頻度モデルは、縦軸の値（不適合度速度）が最も大きく変化し、ループ形状が揺動しながらも、初期および最終ステップにおける値がほぼ一致した、安定に近い（閉軌道に近い）軌跡を示していることがわかる。一方で、低頻度モデルではトラジェクトリが左側へ遷移している。こうした傾向の違いは、上述したように、高頻度モデルでは多数の転位ループが周期的に運動をするのに対して、低頻度モデルでは、運動する転位ループの数が少なく、交差すべりに伴う Wall 部の対消滅の影響の方が強く出たためだと考えられる。交差すべり無しのモデルでは、転位が前後運動するだけなので、Fig. 4.5 で示した安定的な挙動を示す FCC モデルで見られたような、閉軌道が得られている。

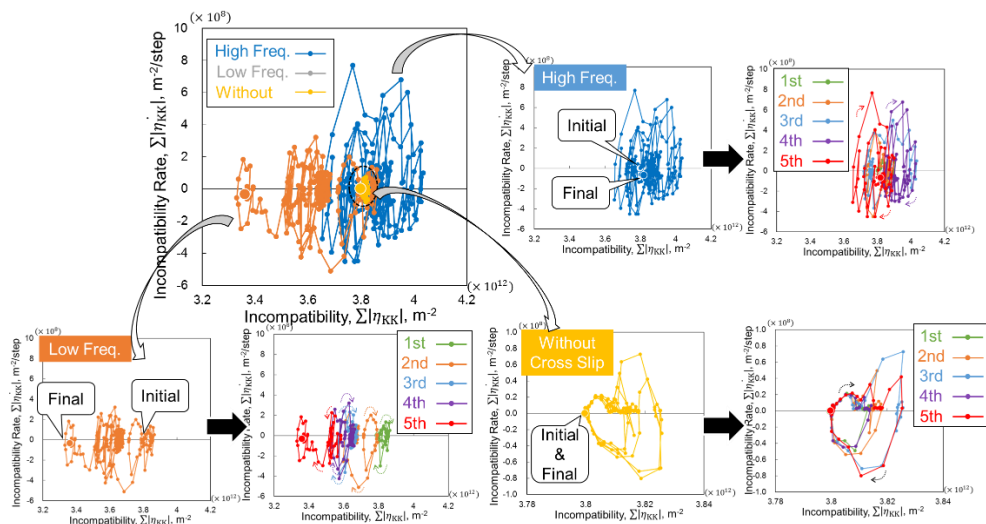


Fig. 4.13 Phase-space trajectories of PSB models for BCC. Colored diagrams for each cycle are also shown. Cross slip disturbs configuration of trajectories, which are originally showing closed loop.

Fig. 4.13 より、交差すべりの頻度が大きくなるにつれて、不適合度速度が大きくなっていることから、交差すべりの影響は不適合度速度に表れると考えられる。そこで、不適合度速度の時間変化を示したのが Fig. 4.14(a)である。同図より、交差すべりの頻度が高くなるほど、不適合度速度の最大値および最小値が大きくなることがわかる。本解析において、トラジェクトリの横軸の不適合度は、転位がどの程度増えたか、あるいは、転位がどの程度動いたか、を示すことから、縦軸の不

適合度速度は、転位やその運動がどの程度変化するのか（増殖するのか、対消滅するのか等）、を表すと考えられる。したがって、Fig. 4.13 で見られた高頻度モデルにおける、縦軸が大きく変化しながらも安定に近い（閉軌道に近い）ような軌跡は、転位の増殖や対消滅が頻繁に生じるような動的平衡を表していると言える。このモデルでは、同時に多数の微小ループを生成していることから、十分な数のループ生成は、PSBs が担う変形過程の安定化に繋がるということが示唆される。一方、低頻度モデルで見られたように、微小ループの生成が少なくなると、トラジェクトリが閉軌道から逸脱することから、不安定化すると考えられる。

上述したように、不適合度速度は転位が増殖または対消滅するのかを表すと考えられ、微小ループの生成との関係性が推測される。そこで、Fig. 4.14(a)に示した不適合度速度の変化から、半周期毎の振幅を計算し、同じく半周期毎に生成された微小ループとの相関を調べた。その結果を Fig. 4.14(b)に示す。同図より、交差すべりの頻度に関わらず、両者の間に良好な相関があることが示される。したがって、PSBs においては、生成された微小ループは不適合度速度の振幅によって測られると言える。こうした微小ループは Fig. 4.11 で示したように、原子空孔になり得る。この原子空孔の源とも言える微小ループは、Fig. 4.15 に示すように、Wall 部だけでなく、Channel 部にも渡って分布している。中谷の拡散解析によると [103]、Channel 部で生成された原子空孔は、一度 Wall 部へと流れ、表面に抜けることで入り込みの形成を促進する。このことから推察されるように、PSBs における転位間相互作用によって生成された原子空孔は、疲労き裂の発生を助長すると言われている [36, 37]。本解析で得られた微小ループと不適合度速度の関係は、連続体モデルにおいても原子空孔の影響を導入できることを示唆しており、疲労モデルの構築へと応用されることが期待される。

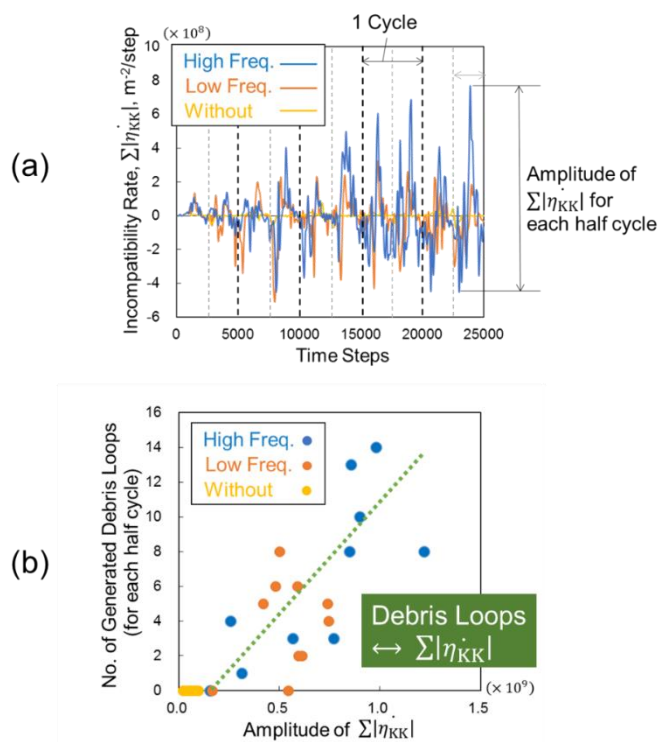


Fig. 4.14 (a) Variation of $\sum|\eta_{KK}|$ and (b) correlation of the number of generated debris loops and amplitude of $\sum|\eta_{KK}|$.

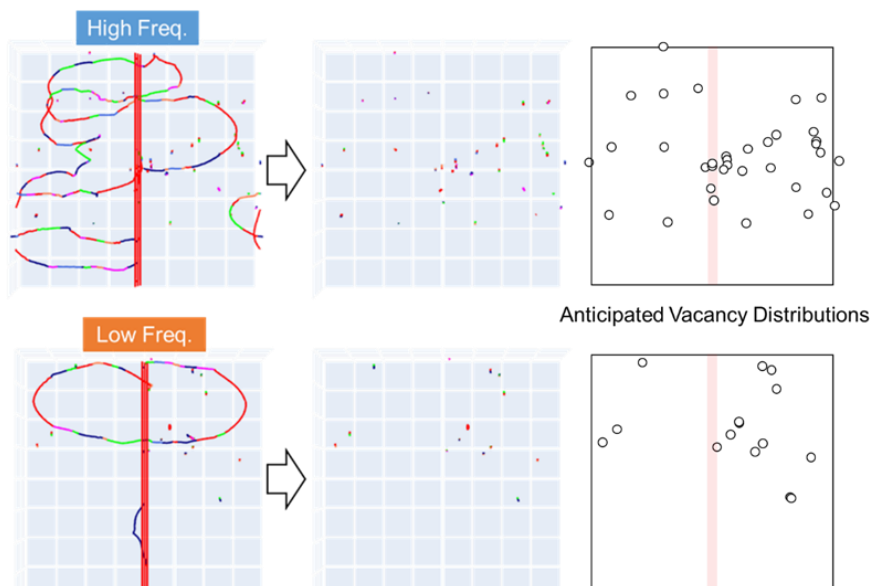


Fig. 4.15 Anticipated vacancy distributions based on those of debris loops, comparing between high and low frequency cross slip conditions.

本章の最後に、Fig. 4.14(b)に示した関係を場の理論的観点から考察する。

FTMP では、不適合度テンソルを4次元時空に拡張していることから、不適合度の無発散条件 $\text{div } \boldsymbol{\eta} = \partial_a \eta_{ab} = 0$ ($a, b = 1, 2, 3$ および 4 (時間)) は、次式のようになる。

$$\frac{\partial \eta_{44}}{\partial x^4} + \frac{\partial \eta_{A4}}{\partial x^A} = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial \eta_{KK}}{\partial t} = -\frac{\partial \eta_{A4}}{\partial x^A}, (A = 1, 2, 3) \quad (4.3)$$

η_{44} に関しては、式(2.30)の関係を用いた。上式より、

$$\dot{\eta}_{KK} = -\text{div } \eta_{A4} \text{ with } \eta_{A4} = -(\alpha_{BC})_{skew}, (B, C = 1, 2, 3) \quad (4.4)$$

$(\)_{skew}$ は、反対称化および時間微分を表す。式(4.4)を考えている系全体へと拡張すると、Gauss の発散定理を用いて、次式が得られる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_v \eta_{KK} dv &= - \int_v \frac{\partial \eta_{A4}}{\partial x^A} dv = - \int_a n_A \eta_{A4} da \\ &= \int_a n_A (\alpha_{BC})_{skew} da \end{aligned} \quad (4.5)$$

n_A は法線ベクトルを示す。式(4.5)が意味することは、 η_{KK} の時間変化 $\dot{\eta}_{KK}$ はある面 da を通る転位フラックスによってもたらされるということである。 $(\alpha_{BC})_{skew}$ は、転位密度テンソルの反対称部分であるため、刃状成分のみを表現している。したがって、 $\dot{\eta}_{KK}$ は、刃状転位のフラックスとの生成と密接な関係を持つと言える。本解析で得られた微小転位ループは、刃状成分が支配的な転位ループであったため、その生成が $\dot{\eta}_{KK}$ の変化に影響を与えたと考えることができる。

4.4. 結言

本章では、PSBs のモデル化を行い、周期的な負荷を掛けることで、その挙動を解析すると共に、FTMP に基づく PhS-T による評価を行った。

負荷応力レベルを変えた3つのモデル (FCC) に対する解析では、Wall 部から転位が張り出すことによって、Channel 部で転位双極子が形成されたが、応力レベルが高くなるとそれらは解消された。最終的に、どのモデルにおいても周期的な運動が見られ、PhS-T 上で閉軌道を示すという安定的な挙動が示されたが、閉軌道に至る過程は応力レベルによって異なった。すなわち、転位双極子が解消される程高い応力レベルにおいては、収束が遅く、PhS-T 上の縦軸である不適合度速度での揺動が見られた。したがって、ここでは不適合度速度と転位間相互作用との間の関係性が示唆された。

交差すべりの頻度を変えた3種類のモデル (BCC) に対する解析では、交差すべりによって、微小ループの生成や、Wall 部における対消滅が見られた。交差すべりの頻度が高い場合は、より多くの転位ループを生成し、それらが周期的に運動することで塑性変形が担われるのに対し、頻度が低いと、運動するループが少なくなり、Wall 部

第4章 固執すべり帯(PSBs)に対する解析および評価

での対消滅も相まって系全体の転位密度が減少する傾向にあった。こうした挙動の差異は PhS-T 上で表れ、交差すべりの頻度が高いと、Wall 部での対消滅と転位ループ生成とが釣り合うような形で、準安定的な挙動を示し、閉軌道に近い軌跡を示した。低頻度になると、閉軌道を示さず、PhS-T 上のループが左へ遷移していくような軌跡を見せた。この結果から、高頻度の交差すべりによって、PSBs における動的な平衡が実現することが示唆される。さらに、生成された微小ループを詳細に解析すると、刃状成分が支配的な転位ループであり、原子空孔の生成元になり得ることがわかった。この生成数と、不適合度速度の振幅との関係を見ると良好な相関が示されたことから、不適合度速度によって空孔数を測ることができる可能性が示された。このことは、4次元時空に拡張された不適合度テンソルの無発散性からも推察されることである。さらに、PSBs 内で生成された原子空孔は拡散によって入り込みや突き出しの形成を助長することから、本解析で示した不適合度速度による原子空孔の表現可能性は、場の理論に基づいた疲労のモデルの高精度化へと繋がり得る。

第5章 幾何学的に必要な境界(GNBs)に対する解析および評価

5.1. 概要

本章では、変形中の金属材料の機械的性質を支配する転位下部組織において、近年その詳細構造が系統的な形で同定されている、数種の幾何学的に必要な境界 (Geometrically-Necessary Boundaries: GNBs) を対象とし、転位動力学法によるその再現と FTMP 的観点からの安定性評価を行う。すなわち、4 つの代表的な GNBs (GNB2, 3, 4 および 7) に対し、初期配置からの緩和過程を解析すると共に、同過程の双対線図表現を行う。さらに、通常、同線図において無視する運動エネルギーゆらぎの寄与を増幅させて再評価することを通じて、各壁の安定性の詳細に繋がる情報の抽出を試みる。加えて、最も安定な GNB に対して外部からの擾乱 (Frank-Read(F-R) 源からの運動転位との相互作用) を与え、形態変化に伴うエネルギー変化を具体的に調べることで、抽出情報に関する部分的検証を行う。

以下では、Winther ら [45]が報告した GNBs の形態を元に、転位動力学法による再現および FTMP に基づく評価を行い、転位壁の安定性に対する知見を得ていく。解析条件、転位壁モデルの形態およびそれらと観察結果との対応を示した後、双対線図による評価および Shannon エントロピーでの検討も併せて示す。なお、本章では転位多体系を取り扱い、複雑な相互作用が生じるため、転位動力学のコードに ParaDiS (Parallel Dislocation Simulator) [104]を用いている。ParaDiS は前章までに用いていた Zbib ら [25]の開発したコードに比べ、転位を直線に近似するという点や相互作用等の取り扱いはほぼ同じであるが、陰解法を採用していることや転位の応力場の非特異化 [105]によって解析が安定的に進められるため、本章のような複雑な相互作用の生じる転位壁の解析に適している。

5.2. 解析条件

Fig. 5.1(a)に、Winther ら [45]が報告した、GNBs の初期配置を示す。同図において、本論文では、Winther らに倣い、2 種類の Burgers ベクトルで構成される GNB を GNB2, 3 種類の Burgers ベクトルで構成される GNB を GNB3 および GNB7, GNB3 と GNB7 を合わせた形態を示す GNB を GNB4 としている。Fig. 5.1(a)を基に、Fig. 5.1(b)に示すような GNBs モデルを作成する。各転位線は $1000 \times 1000 \times 1000$ [b³]の解析セル中に配置され、Fig. 5.1(a)と同様に Burgers ベクトル毎に色分けされており、転位線の両端はピ

ン留めされている。材料は Al (FCC) を対象とし、用いた主な物性値はそれぞれ、密度 $2700[\text{kg}/\text{m}^3]$ 、せん断弾性係数 $25.5[\text{GPa}]$ 、ポアソン比 0.34 、Burgers ベクトル大きさ $2.86 \times 10^{-10}[\text{m}]$ とした。全方位周期境界条件を課し、長範囲の応力場の計算に関して、計算の安定化のために ParaDiS に搭載されている FMM (Fast Multipole Method) [104]を採用している。現状、FMM を用いることにより解析セルは立方体セルに限定されるため、各 GNB はセル内に孤立するように配置されている。そこで、Fig. 5.1(c)に示すように解析セルの中央に $400 \times 400 \times 400 [\text{b}^3]$ とした評価領域を設け、その範囲内で不適合度やエネルギーの計算を行うことで、壁端部の影響を減らすこととする。解析中は外力を与えず、転位間相互作用のみで GNBs の形態形成を再現する。

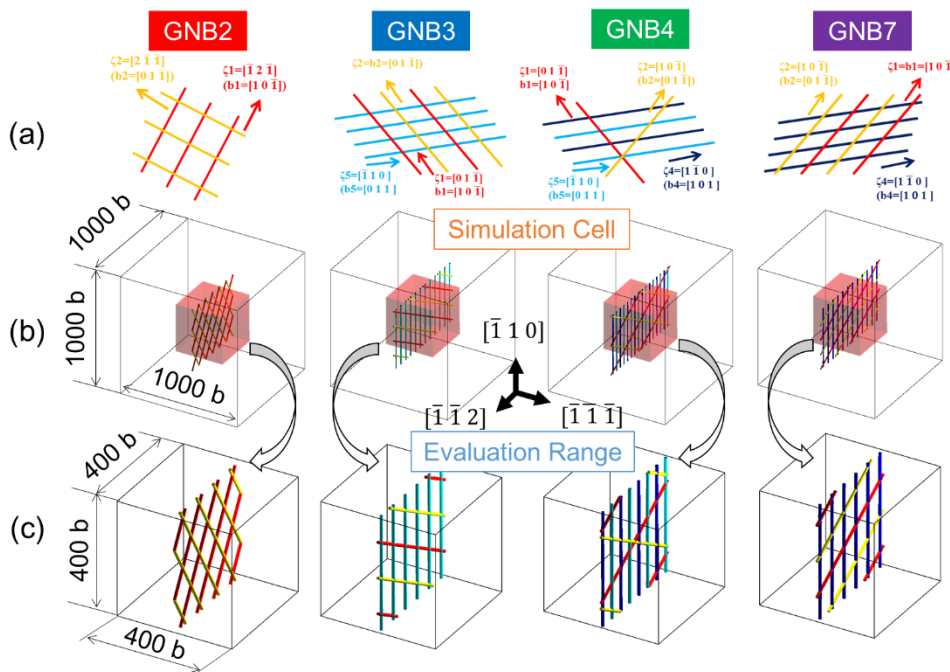


Fig. 5.1 (a) Schematic drawing of initial configurations of GNBs and simulation models of four GNBs, showing (b) initial configurations with periodic boundary conditions, together with (c) evaluation regions for stress and incompatibility calculations.

解析結果

Fig. 5.2 に本解析で得られた初期および最終ステップでの GNBs の形態を示す。比較のため、Winther ら [45]が報告した各 GNB の理想配置を併記している。各 GNB において、ジャンクション形成を中心とした、転位間相互作用に伴う転位壁の顕著な形態変化が生じ、それぞれの理想配置がほぼ再現されていることがわかる。最終的に GNB2

は正六角形状となり，GNB3 および 7 は梯子状のような形態へと変化している．一方 GNB4 は，GNB3 と 7 を重ね合わせたような形態であり，本モデルの中で最も転位密度が大きく，各転位から生じる応力場の影響で転位が歪められて直線状から逸脱している．しかし，赤色の転位線が水色の転位線と，黄色の転位線が青色の転位線とそれぞれ反応し，理想配置を取る傾向にあると言える．

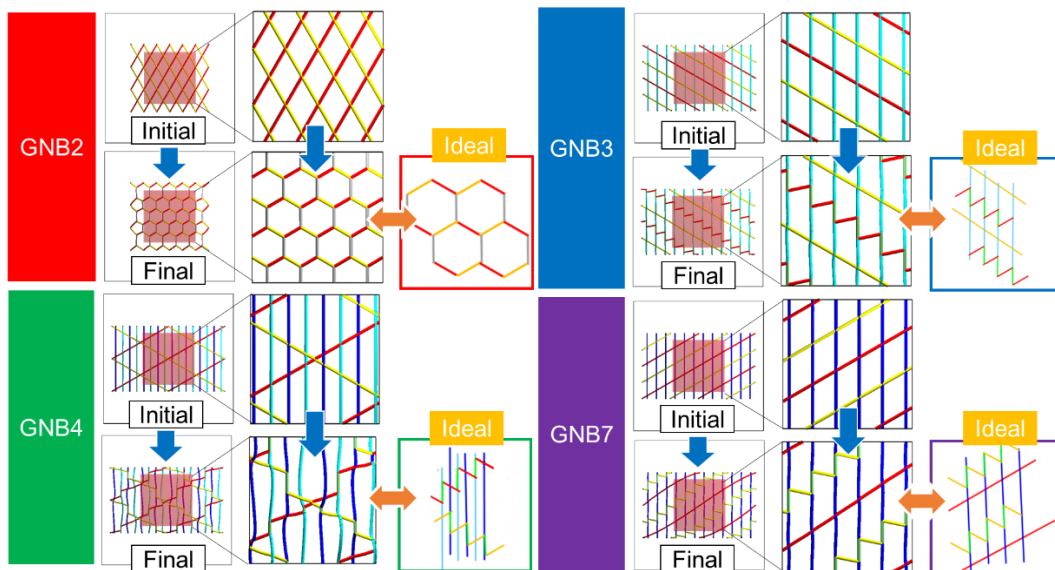


Fig. 5.2 Simulated initial and final configurations for GNBs 2, 3, 4 and 7, compared with those predicted by Winther, et al [45].

5.2.1. 弾性ひずみエネルギーゆらぎおよび不適合度

Fig. 5.3 および Fig. 5.4 に，本解析で得られたひずみエネルギーゆらぎおよび不適合度の時間変化をそれぞれ示す．両図より，GNB4 以外はひずみエネルギーゆらぎおよび不適合度変化の傾向がほぼ同じであることがわかる．GNB2 では両方が初期に急激に減少し，GNB3 および 7 ではほぼ一定の傾向を示す．GNB4 のひずみエネルギーゆらぎは初期に上昇した後に激しく揺動しており，不適合度も緩やかにではあるが上昇と下降を見せている．こうした揺動は，Fig. 5.2 で見られるように，GNB4 は一部でジャンクションを形成することでエネルギーを下げる一方で，自身の応力場によって転位が歪められているという，他の GNBs では顕著に現れない反応を示したためだと考えられる．

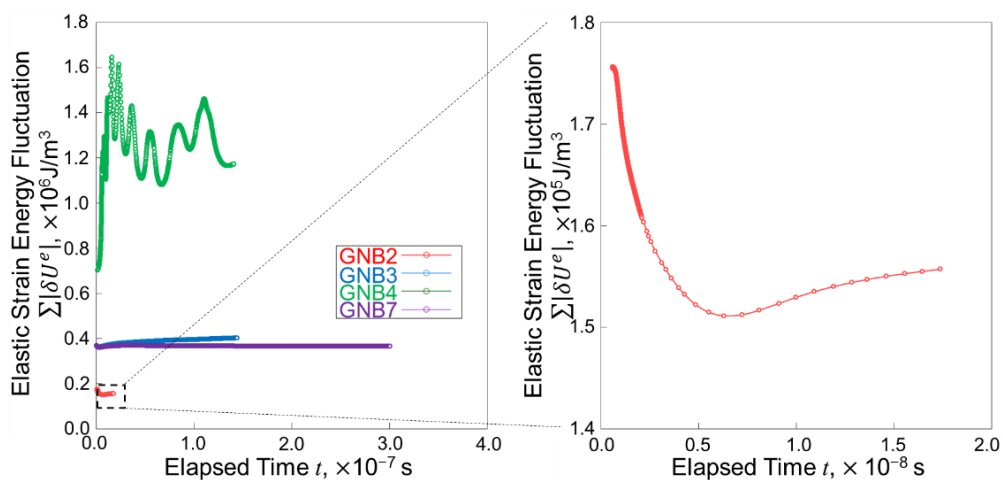


Fig. 5.3 Variation of elastic strain energy fluctuation with elapsed time, comparing four GNBs simulated.

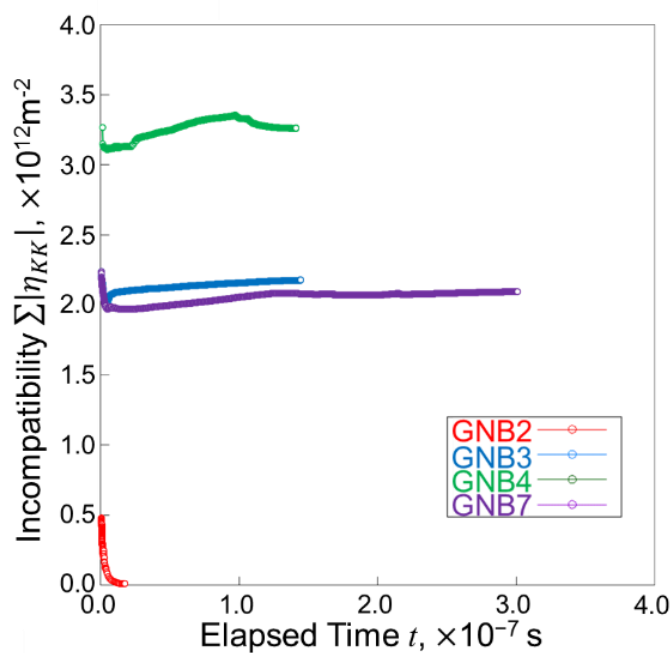


Fig. 5.4 Variation of incompatibility with elapsed time, comparing four GNBs simulated.

5.2.2. Shannon エントロピーによる評価

本項では、本解析で得られた GNBs の形態に対して、Shannon エントロピー [65] による評価を試みる。一般的に、Shannon エントロピーは配置の複雑性を評価する

指標であり，本研究で用いている不適合度と同様の性質を有すると考えられることから，両者の対応関係について述べる．

本研究における Shannon エントロピー S_S^{config} は次式で定義される．

$$S_S^{config} = - \sum f_i \log f_i \quad (5.1)$$

ここで， f_i はサブセル i に含まれる転位の全長さを解析セル全体に含まれる転位の全長で割った，転位の長さ比を示す．通常，Shannon エントロピー評価はサブセルに含まれる点に基づいて行われるが [57]，本解析では，転位を構成するノードの数が線の曲率によっても変わるため，転位の長さに基づいた定義をしている．

式(5.1)に基づいて，各 GNB のエントロピー変化を求めた．Fig. 5.5 にその結果および線形近似した時の直線をそれぞれ示す．同図より，正六角形状の形態を取る GNB2 は最終的に最もエントロピーが低くなり，降下する割合も高いことがわかる．転位密度が高く，形態が複雑な GNB4 は最もエントロピーが高く，減少する割合が小さい．GNB3 および 7 は，それぞれ同様の形態を有するため，最終的に同じようなエントロピーとなる．なお，エントロピーの計算に際しては，サブセル分割によって結果が異なるが，本解析では GNB3 および 7 が同様の値を持ち，GNB2 および 4 と明確に区別される分割数 ($20 \times 20 \times 20$ 分割，Fig. 5.5 参照) を採用した．

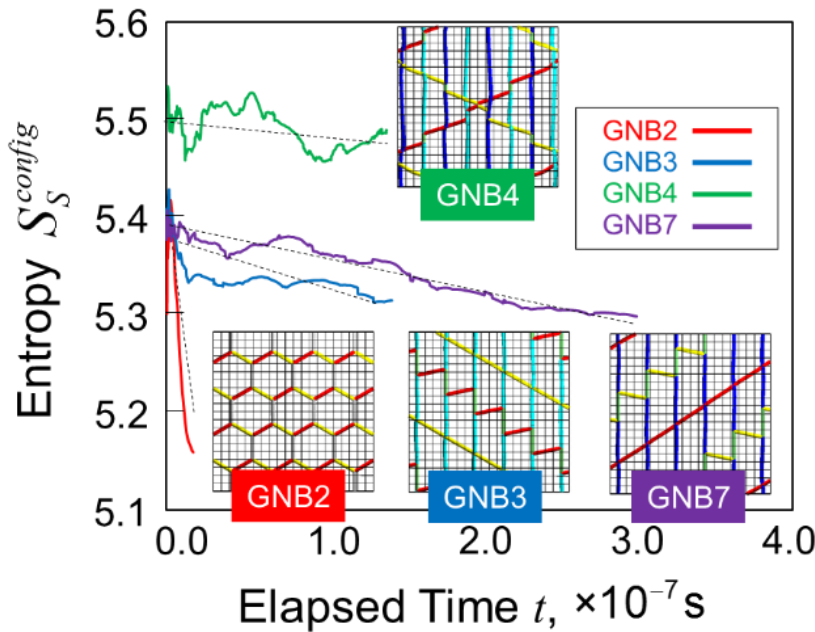


Fig. 5.5 Variation of entropy for four GNBs.

Fig. 5.4 および Fig. 5.5 から, GNBs における不適合度とエントロピーは同様の傾向を示すことが推察される. そこで, 両者の関係をプロットした結果が Fig. 5.6(a) となる. 同図より, GNBs の初期および最終形態において, 大まかには不適合度とエントロピーとの間に線形的な相関があることがわかる. すなわち, k^{config} を定数として,

$$S_S^{config} = k^{config} \eta_{KK} \quad (5.2)$$

という関係が得られる. このことは, 不適合度がエントロピーで表現される形態の情報をもつ, ということを示唆している.

Fig. 5.5 および Fig. 5.6(a) それぞれに対する近似曲線から, 不適合度およびエントロピーの平均の変化率 ($\langle \eta_{KK} \rangle_t$ および $\langle S_S^{config} \rangle_t$) を求め, 両者の関係をプロットした結果を Fig. 5.6(b) に示す. 同図および式(5.2)より, 同じ定数を用いて次式が推察される.

$$\langle S_S^{config} \rangle_t = k^{config} \langle \eta_{KK} \rangle_t \quad (5.3)$$

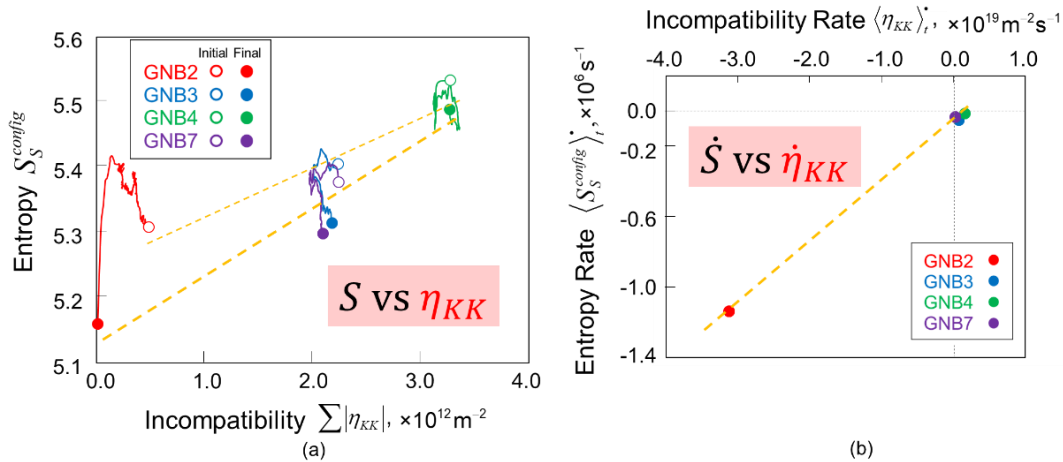


Fig. 5.6 Relationships (a) between entropy and incompatibility and (b) between entropy rate and incompatibility rate.

以上に加えて, Fig. 5.4(a) および Fig. 5.6(b) を見ると, 不適合度の大小とエントロピーの平均変化率の大小との間には相関があると考えられる. そこで, 両者の相関を片対数グラフで示した結果が Fig. 5.7 である. 同図より, エントロピーの平均変化率と不適合度の間には良好な相関があると言える. すなわち, 両者の関係は次式で表現できる.

$$\langle S_S^{config} \rangle_t = k_{\ln}^{config} \ln \eta_{KK} \quad (5.4)$$

以上より、エントロピーの平均変化率と不適合度との関係が示された。Flow-evolutionary 則によると、エネルギーゆらぎによって不適合度の発展が駆動されることから、同則に基づくと、この結果は、エネルギーゆらぎによってエントロピーの平均変化率が律速されるという解釈に繋がる。エントロピーの平均変化率は、形態形成の速さを示すと考えられることから、GNBs の形態形成はエネルギーゆらぎによって制御されていると言える。

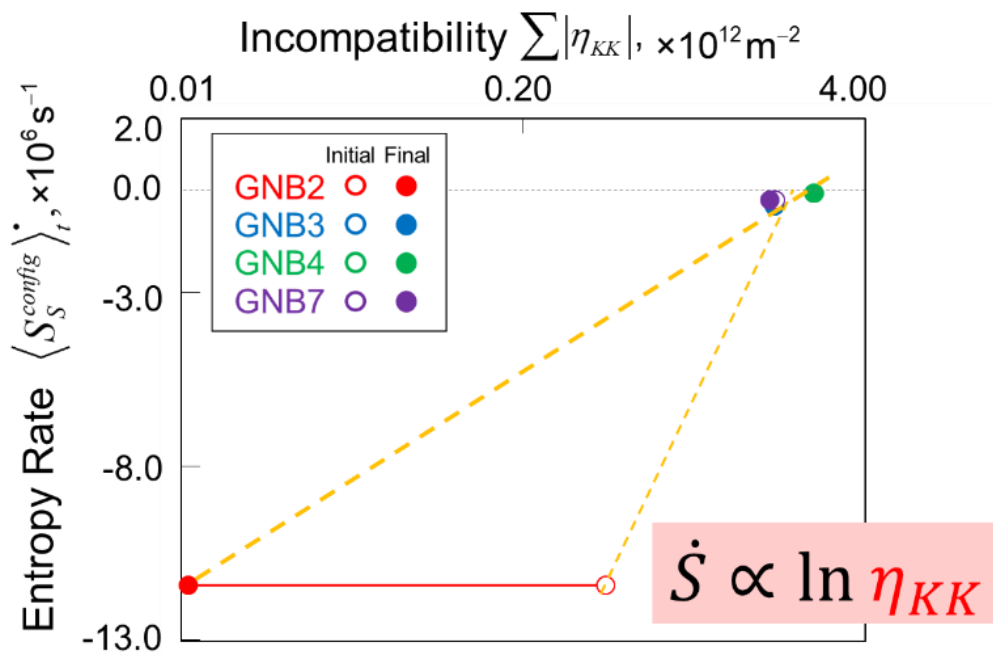


Fig. 5.7 Relationships between entropy rate and log of incompatibility.

5.2.3. 双対線図表現

本項および次項では、GNBs に対して双対線図表現を行い、転位下部組織の安定性に対する知見を示す。ひずみエネルギーゆらぎおよび不適合度の関係をプロットした双対線図を Fig. 5.8 に示す。最終ステップにおける値は同図中で大きな丸で示している。Fig. 5.8 によって、各 GNB の傾向の違いがより強調される。正六角形状の転位網を示す GNB2 は不適合度の急激な減少の後に、双対線図上の左下に位置する。すなわち、本解析における全ての GNBs の中で最も低エネルギー構造であることが示されている。一方 GNB4 は、ジャンクションの形成や、転位線の張り出しを通じて自身の応力場が激しく変化するため、ひずみエネルギーゆらぎが揺動しながら、双対線図の右上に位置するようになると考えられる。GNB3 および 7 はひずみエネルギー

ゆらぎおよび不適合度両者において、GNB2 と GNB4 の中間に位置している。

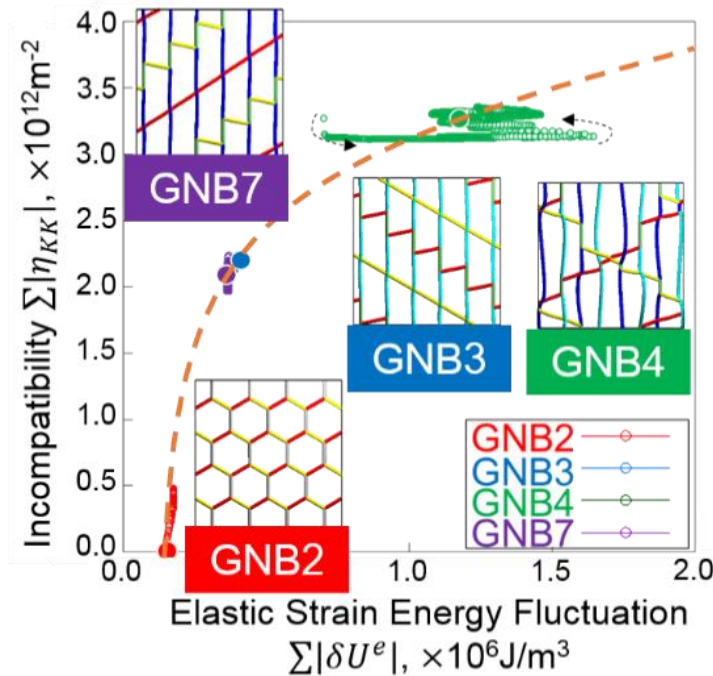


Fig. 5.8 Duality diagrams for four GNBs simulated, where final states are indicated by large solid circles, respectively.

Fig. 5.8 で特筆すべき点は、各 GNB の最終形態が 1 つの滑らかな曲線に位置することである。GNBs が転位下部組織の中でも安定な形態であることを考えると、安定な転位下部組織はこの曲線上に位置することが示唆される。

5.2.4. 運動エネルギーの寄与

これまでは運動エネルギーの影響を無視できる場合を想定してきたが、式(2.18)に示したように、本来は Flow-Evolutionary 則の右辺は全エネルギーのゆらぎであり、双対線図においても運動エネルギーの影響を考慮する必要がある。本節では、上記の各解析において運動エネルギーの評価を行い、その双対線図上での影響について検討を加える。

本研究では転位の運動エネルギー K を次式で定義する。

$$K = \frac{1}{2} m v^2 \quad (5.5)$$

ここで、 m は単位長さあたりの有効質量であり、転位線に沿って原子を 1 列に並べ

た場合の原子列の質量に等しい [106]. 本研究では, $m \sim \rho b^2$ で算出する. また, l は転位線の長さ, v は速さを示す. 運動エネルギーは, 不適合度テンソルの計算と同様に, 解析セルをサブセルに分割した上で, 各サブセル内を通る転位から算出した平均速度によってサブセル毎に計算をする. その後, 全サブセルについて総和を取ることによって系全体の運動エネルギーを求め, それを基に平均の運動エネルギーを算出し, 各サブセルで平均との差を取ることによって運動エネルギーゆらぎを求める.

式(5.2)に基づいて求めた運動エネルギーは, 弾性ひずみエネルギーに比べてその値は十分小さく, そのまま反映させても Fig. 5.8 と差はほとんど生じなかった. そこで本研究では, 運動エネルギーの寄与を仮想的に拡大し, 双対線図へどのような影響が現れるかについて調べる. ここでは, 簡単のため, 各 GNB に対して評価した運動エネルギーの値に補正係数 α を掛けた上で双対線図に反映させた. すなわち, 弾性ひずみエネルギーゆらぎの値を基準に, $\alpha = 1 \times 10^7$ と補正を行い, 運動エネルギーの寄与を変更した. Fig. 5.9 にその双対線図を示す. 最終ステップでの値は黒四角で示している.

Fig. 5.9 および Fig. 5.8 を比べると, 運動エネルギーの寄与は GNBs によって異なることがわかる. GNB2 は運動エネルギーによって横軸方向に顕著に変化し, GNB3 および GNB7 は最も小さい変化を示している. GNB4 は弾性ひずみエネルギーゆらぎのみの場合とほぼ同じような傾向である.

こうした運動エネルギーの寄与の傾向の違いから, GNB2 は他の GNBs と比べて大きな外乱を受けながら形成されたということが示唆される. Fig. 5.8 を再度見ると, GNB2 は外乱に対して不適合度を大きく変えることで対応し, GNB4 は不適合度をあまり変化させずにエネルギーを変化させることで対処しているという見方ができる.

上記の議論から, GNBs は外乱を受けた場合でも双対線図上の曲線へと収束し, その収束の仕方は双対線図上の位置によって異なるということが考えられる. このことは GNBs における安定・不安定性を特徴づける仮説を導く. Fig. 5.10 に Fig. 5.8 を例としたその概要図を示す.

GNB2 が他の転位と衝突する等の影響で $\Delta(\delta U^e + \delta K)$ の外乱を受けた場合を考える (Fig. 5.10 中の①). 外乱を受けた GNB2 は, その後の緩和挙動によって余剰なエネルギーを不適合度へと変化させ, 最終的に安定な形態になった場合は双対線図上の曲線に乗ると考えられる (Fig. 5.10 中の②). 同様な事象が GNB4 に対して起こった場合 (Fig. 5.10 中の③), その緩和後の形態も曲線上に乗ると考えられるが, 不適合度変化 (Fig. 5.10 中の④) は比較的小さくなる (Fig. 5.10 中の⑤). GNBs においては, 双対線図上で左下に位置すると安定であると考えられることから, 安定な組織は外乱に対して不適合度を大きく変化させる特徴を持つということが言える.

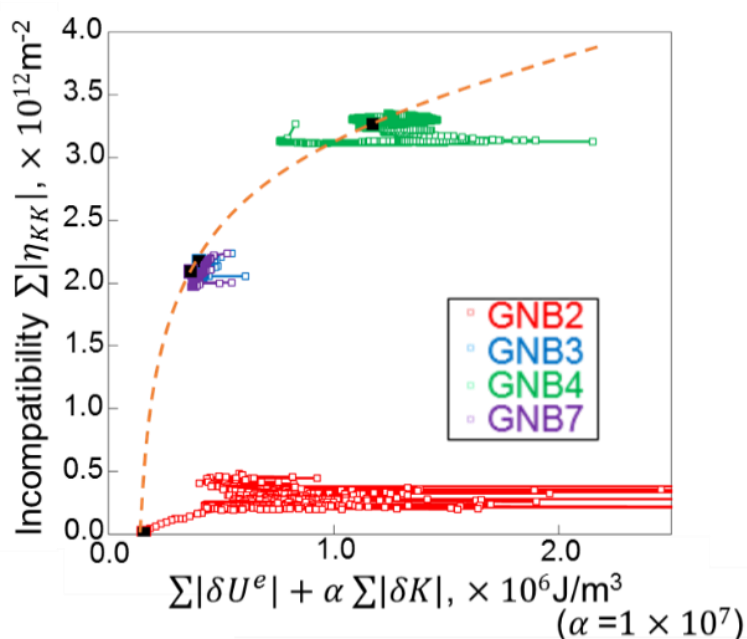


Fig. 5.9 Same results as Fig. 5.8 but with virtually-pronounced contributions of kinetic energy overlotted on final states (solid black squares).

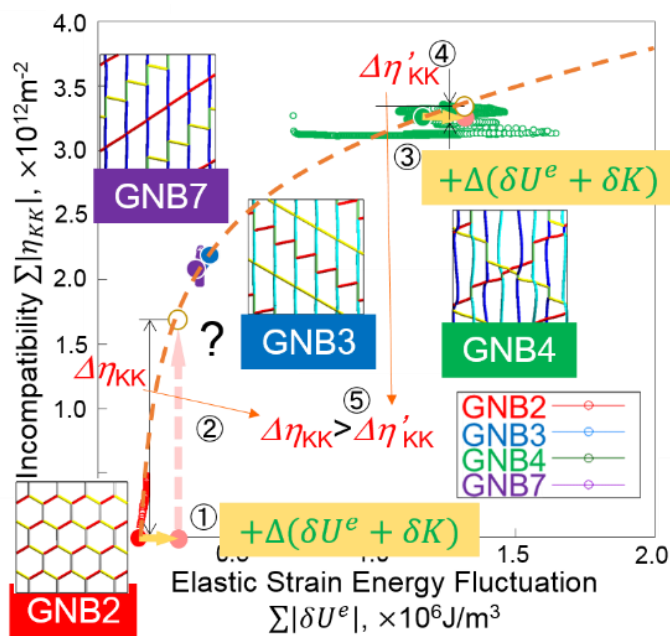


Fig. 5.10 Schematics of new stability/instability criterion, showing evaluation procedures by comparing anticipated incompatibility responses against a prescribed external energy disturbance on duality diagrams.

5.2.5. 運動する転位との相互作用

これまでの議論において、双対線図上で GNBs それぞれの最終形態が、1つの曲線上に乗ることや、運動エネルギーの寄与から転位系の安定性に関する仮説を示した。安定な最終構造であると考えられる GNBs を結ぶ曲線は、転位下部組織の安定性を考える上での指標となり得る。例えば、GNBs が運動する転位と相互作用した場合、この曲線の左側に逸脱するとすれば下部組織が不安定化し、反対に右側へ行くなればエネルギーを蓄える方向に下部組織が働き、系全体としては安定応答を示す、などの可能性が推察される。

ここでは、これまでの解析で得られた GNBs を用いて、Frank-Read 源から射出される転位と相互作用を引き起こさせる、すなわち外乱を与え、その相互作用が双対線図上でどう表されるのかを検証する。

Fig. 5.11 に本解析で用いたモデルを示す。GNB2 を対象に、 $[01\bar{1}]$ 方向の Burgers ベクトルを持つ Frank-Read 源を $x_1 = 100$ [b] の位置に配置した。解析領域、評価領域、材料定数および境界条件はこれまでの解析と同様であり、Frank-Read 源が張り出すように応力 $\sigma_{23} = -1.0$ [GPa] を負荷した。

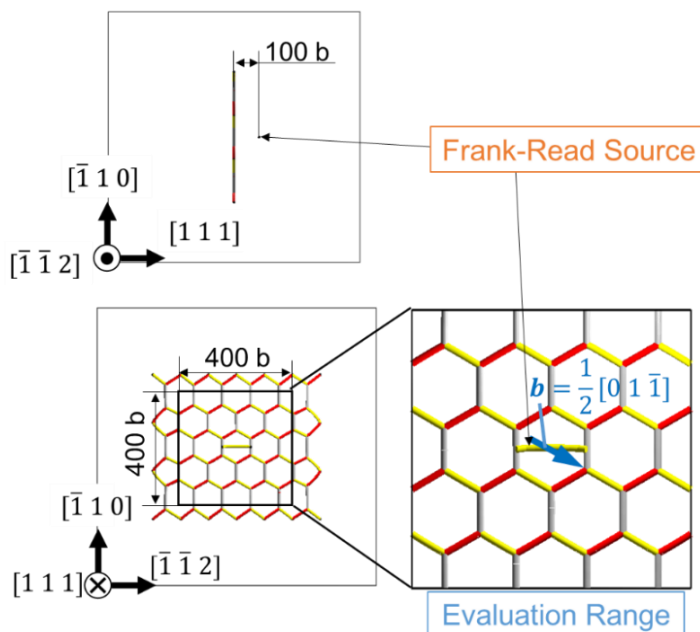


Fig. 5.11 Simulation set up for verifying stability/instability evaluation scheme, where a dislocation expanded from a Frank-Read source is to be collided against GNB2 model as external perturbation

Fig. 5.12 に解析結果を示す. 張り出した Frank-Read 源と GNB2 を構成する転位とが切り合い, 交差すべりが引き起こされることで (Fig. 5.12(a)), GNB2 を構成する転位線が新たに張り出している (Fig. 5.12(b)). この転位線が張り出すことで GNB2 の形態が変化し, 下部の六角形部分と対消滅を起こすことでさらに形態が乱されることがわかる (Fig. 5.12(c)).

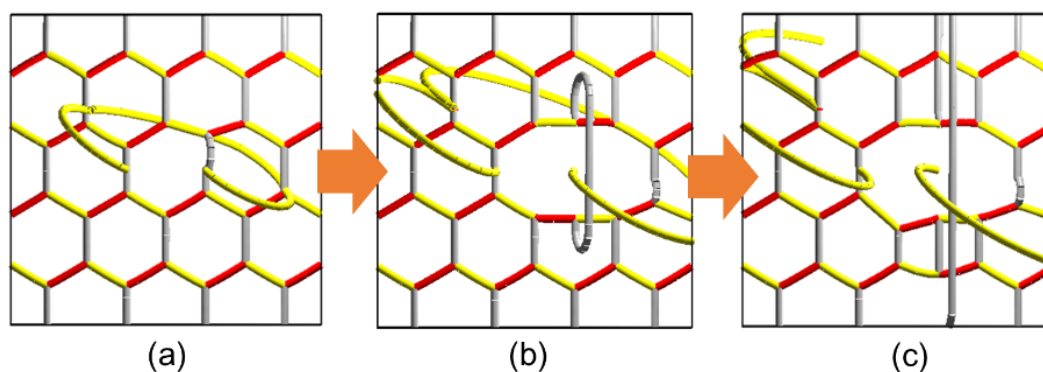


Fig. 5.12 Snapshots for details of interaction with incoming dislocation, giving rise to topological changes of network configuration in GNB2.

本解析で得られた結果をFig. 5.8に追記する形で新たに双対線図を得た. Fig. 5.13(a)に, Frank-Read源の影響を除外した結果を示す. 白抜きしたオレンジの大きな丸は, 最終ステップでの値を示している. Fig. 5.13(a)より, 外部の転位と相互作用を受けたGNB2の形態は双対線図上の曲線から外れていることがわかる. ここで, 壁から張り出した転位を更に除くことで, 正味の形態変化について考える. Fig. 5.13(b)に, その結果をオレンジの大きな丸として示す. 同図より, 壁から張り出した転位を除くことで, 最終形態が左側へ遷移し, 元の曲線に戻ることをわかる. すなわち, 与えられた外乱に対して比較的大きな不適合度変化によって対処していることが読み取れる.

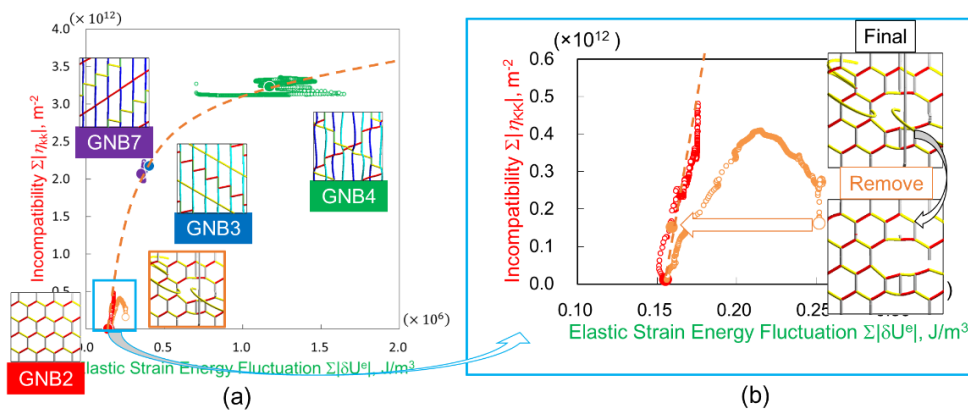


Fig. 5.13 Duality diagram representation for perturbed GNB2 (a) overplotted on Fig. 5.8, and (b) magnified view indicating before and after removal operations for out-of-wall segments in strain energy calculation for final configuration.

最後に、実験結果との対比を考える。Fig. 5.14に、本解析で得られたGNB2の形態および観察結果を、GNB4の観察結果と共に示す。同図における比較より、実験観察においても類似した形態の乱れが見られ (Fig. 5.14中の①), 実際の変形中にも、こうした運動転位との相互作用に伴う形態変化が頻繁に生じた可能性を強く示唆している。一方、GNB4ではGNB2程大きな乱れは生じておらず、比較的強固な転位網であることが示唆される (Fig. 5.14中の②)。このことは、Fig. 5.10で示したように、外乱に対して大きな形態変化を示さないという解釈に繋がり得る。

これらのことから、Fig. 5.10で示したGNBsの安定・不安定性評価の仮説は一部検証されたと言える。

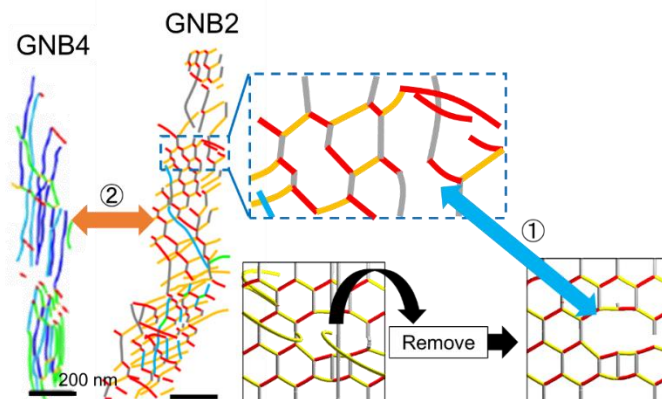


Fig. 5.14 Comparison of disturbed configurations for GNB2 between simulation and experiment, together with GNB4 in experiment.

5.3. 結言

本章では、Winther ら [45]の報告に基づき、GNBs の形態形成を転位動力学法で再現すると共に、FTMP に基づく評価を行った。

解析によって得られた GNBs は理論配置と良好な一致を見せ、双対線図でそれらの評価を行うと、六角形状の GNB2 が左下に、最も複雑な形状をしている GNB4 が右上に来るような、上に凸の曲線上に、GNBs の最終形態が並ぶという傾向が得られた。また、運動エネルギーを加えた評価によって、GNB2 は最も速く形態形成をすることがわかった。これらのことから、安定な組織は外乱に対してより大きな形態変化によって対処するということが推察された。

GNBs における Shannon エントロピー [65]を求め、不適合度との比較を行った。GNBs の初期および最終形態におけるエントロピーと不適合度とは相関を見せ、さらに、エントロピー速度と不適合度との間の相関も示された。この結果は、Flow-evolutionary 則から不適合度はエネルギーゆらぎと関係し、エントロピー速度は形態形成の速さを示すため、エネルギーゆらぎが形態形成に関与していることを示唆する。

安定な組織が外乱に対して形態変化で対処するという仮説を検証するために、GNB2 に対して、運動する転位との相互作用を検証した。GNB2 を構成する転位は、外部の転位と相互作用を起し、GNB2 の形態変化が生じた。変化後の形態を双対線図で評価をすると、上述した、上に凸の曲線上に乗ることが示された。さらに、相互作用後の形態変化と実験によって報告された形態とを比較すると、類似性が見られたため、解析によって得られたような相互作用は実際に生じ得ることが示唆された。こうしたことから、GNBs における安定性に関する仮説は一部検証されたと考えられる。

第6章 種々の転位壁に対する解析および評価

6.1. 概要

本章では、第5章で議論したGNBs以外の転位壁について同様のアプローチを行う。すなわちLath壁および混合転位壁を対象とし、双対線図に基づく安定性評価を行う。Lath壁は、それ自身が安定な構造を有しており、ここではF-R源から射出された転位との相互作用を主として論じる。混合転位壁では、完全崩壊など基本的に不安定な構造からの各種挙動に対する分析・評価を行う。最終的には、第5章で扱ったGNBsを含め、双対線図上で統一的な可視化の可能性について統一的観点からの検討を加える。

以下では、ParaDiS [104]を用いて混合転位壁およびLath壁の解析および評価を行う。FTMPに基づく双対線図評価によって、各種転位壁の特徴がどのように表れるのかを追究していく。

6.2. 解析条件

本解析で対象とする混合転位壁は、格子状に配置した2種類の直線転位に対して、それぞれ任意にBurgersベクトルを割り当てることで作成する。材料は α -Fe(BCC)とし、 $\langle 111 \rangle$ 方向のBurgersベクトル全てを組み合わせ、Fig. 6.1に示すように10種類のモデルを作成した。1000×1000×1000 [b³]の解析セル中に転位を拘束無しで配置し、外力は与えず、周期境界条件を課し、転位間相互作用のみで駆動させる。用いた主な物性値は、密度 7630[kg/m³]、せん断弾性係数 53.8 [GPa]、ポアソン比 0.334、Burgersベクトル大きさ 2.5×10^{-10} [m]とした。

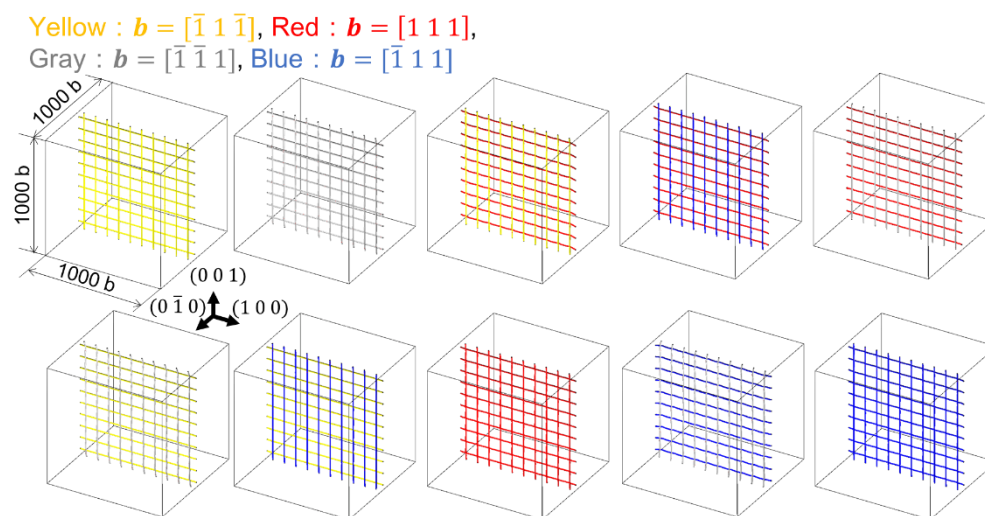


Fig. 6.1 Simulation models of 10 mixed walls.

一方、Lath 壁モデルは、Fig. 6.2(a)に示すような、らせん成分が支配的である構造が報告されており [107]、同観察結果に基づいてモデル化を行う。Lath 壁を構成する転位の両端はピン留めし、解析セルは $400 \times 400 \times 400$ [b³]として、周期境界条件を課す。主要な物性値は混合転位壁モデルと同じである。転位間相互作用を検証するために、Fig. 6.2(b)のように Frank-Read 源 (F-R 源) を配置して外力を加える。同図左では $(110)[\bar{1}11]$ および $(1\bar{1}0)[111]$ 、同図中央では $(110)[\bar{1}1\bar{1}]$ および $(2\bar{1}1)[\bar{1}\bar{1}1]$ (Lath 壁を構成する転位と異符号の Burgers ベクトル)、同図右では $(110)[1\bar{1}1]$ および $(2\bar{1}1)[11\bar{1}]$ (Lath 壁を構成する転位と同符号の Burgers ベクトル)のすべり系に属する F-R 源を配置しており、それぞれ $\sigma_{11}=1.0$ [GPa]、 $\sigma_{33}=1.0$ [GPa]、 $\sigma_{33}=-1.0$ [GPa]を加える。なお、これらの外力は F-R 源からループが生成されるように設定しており、Lath 壁を構成する転位の運動には寄与しない。

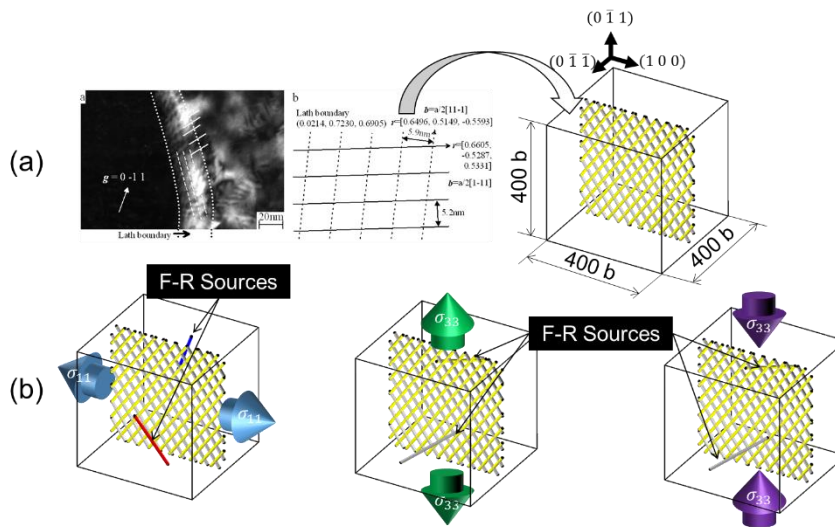


Fig. 6.2 Simulation models of a lath wall. (a) Lath wall is modeled from TEM image [107] and (b) subjected to external stress with Frank-Read (F-R) sources.

6.3. 混合転位壁

6.3.1. 解析結果

混合転位壁の緩和計算で得られた結果を Fig. 6.3 に示す. 同図では, 初期, 中間, および最終ステップでの形状を示しており, 各モデルで特徴的な変化が生じた時点をも中間ステップの図として採用している. Fig. 6.3 より, #2 および #9 以外では不安定的な挙動を示していることがわかる. こうした崩壊の挙動を更に分類する. すなわち, Fig. 6.3(a) に示すモデルを大規模な形態変化, Fig. 6.3(b) に示すモデルを完全崩壊とする.

Fig. 6.3(a)中の転位群は並進的かつ回転的な運動をしており, 更に, 剛体回転的な運動を示すモデル (#1 および #10), および, せん断的な回転を示すモデル (#3 および #8) に分けられる. 前者は, 格子状に配置した状態から各接合点で転位線の組み換えが生じ, 組み換え後の転位がほぼ対角線かつ平行な状態になって, それぞれが回転的な運動をする. 後者は, 転位線の端において回転的な運動が顕著に見られるが, 中心部分では一部ジャンクションを形成することで運動が抑制され, 構造が保たれている.

完全崩壊を示した Fig. 6.3(b)中のモデルに対しても, 上記のように更に分類することができる. すなわち, 回転を示すモデル (#4 および #6) と, せん断型の変化を示すモデル (#5 および #7) に分けられる. 前者は #1 および #10 のような剛体的な回転とは異なり, 転位線が張り出したり反ったりする変化が中心的である. Fig. 6.3(b)

第6章 種々の転位壁に対する解析および評価

で示したモデルでは、ジャンクションの形成が生じないため、最終的には完全な崩壊に至っており、Fig. 6.3(a) で示したモデルとは区別される。

一方、Fig. 6.3(c)に示したモデルは、初期の格子状の形態が保たれており、準安定な挙動を示している。これらは、#3 および#8 よりも広範囲にジャンクションを形成しており、崩壊の挙動をあまり示さない。

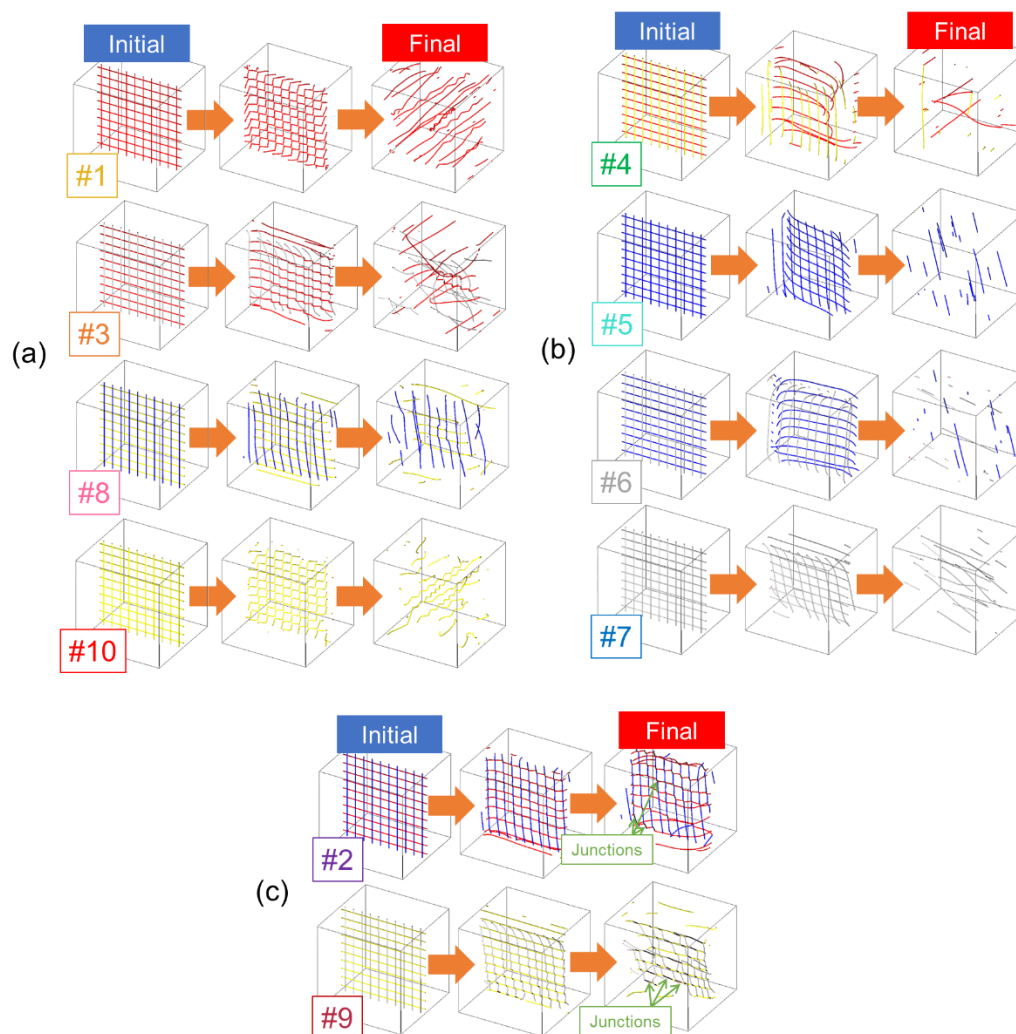


Fig. 6.3 Snapshots of mixed dislocation wall models, which show (a) large configurational changes, (b) complete collapsing, (c) meta-stable configurations, at initial, intermediate, and final steps.

6.3.2. FTMP に基づく評価

本項では、上記、混合転位壁の結果に対して FTMP に基づく評価を行う。不適合

度および弾性ひずみエネルギーゆらぎの時間変化について述べた後に、双対線図によってそれらの発展を可視化し、双対線図上で最終的な形態がどのような位置に来るかに焦点を当て、安定性の議論を行う。

Fig. 6.4 に各モデルにおける弾性ひずみエネルギーゆらぎおよび不適合度変化を上記で分類したカテゴリ毎に、双対線図と共に示す。同図より、不適合度は全体的に、初期段階で急激に減少する傾向があるが、変化の割合は徐々に緩やかになり、最終的にはほぼ一定になるような傾向を示している。一方、弾性ひずみエネルギーゆらぎは、完全崩壊を示すモデルは不適合度と同じような傾向を見せるものの、それ以外は一度上昇し、揺動しながらも緩やかに減少するか (#3 および#8)、ほぼ一定の傾向を示している (#1, #10, #2 および#9)。完全崩壊を示すモデルでは転位の大規模な消滅が生じているため、不適合度および弾性ひずみエネルギーは減少する。#1, #10, #2 および#9 では、崩壊の過程でジャンクションを形成することで構造が維持されることで、両者の減少は完全崩壊に比べて顕著に現れなくなる。#3 および#8 では、転位が格子状に並んだ状態から組み換えが生じ、回転的な運動をするのみなので、両者の減少は見られない。なお、いずれのモデルでも弾性ひずみエネルギーゆらぎが上昇するのは、転位間相互作用によって、一旦は転位線が大きく曲がることによるためだと考えられる。

Fig. 6.4 右に示した、混合転位壁における双対線図について検討を行う。同図では、初期における値を白抜き大きな丸、最終ステップにおける値を中実の大きな丸でそれぞれ示し、さらに矢印も付してある。同図によって、各モデル毎の差異および相互の関係性が明確に表れる。そこで、各転位壁の最終ステップにおける形態に着目し、前章でGNBsに適用したような、相互の形態を特徴づける曲線を当てはめることを考える。その結果を Fig. 6.5 に示す。同図より、大規模な構造変化を示す、Fig. 6.3(a)中のモデルは、完全崩壊を示した、Fig. 6.3(b)中のモデルの延長線上に位置することがわかる。準安定的な挙動を示した Fig. 6.3(c)中のモデルは、それらよりもやや上の、双対線図上右上に位置することがわかる。混合転位壁モデルで用いたような転位が複雑に絡み合うことによってCell壁が形成されることが考えられるため、こうした結果から、Cell壁が双対線図上のどこに位置するのかを類推できる。この議論については本章の最後に行う。

第6章 種々の転位壁に対する解析および評価

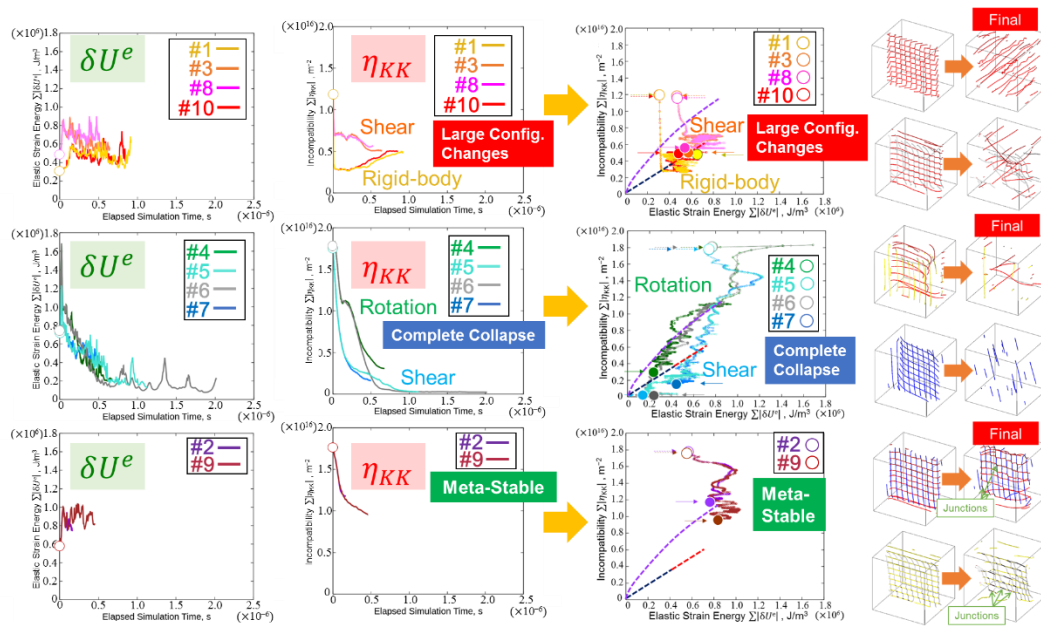


Fig. 6.4 Time variations of elastic strain energy fluctuation and incompatibility, together with corresponding duality diagrams, classified in three categories as “large configurational changes”, “complete collapses” and “meta-stable”.

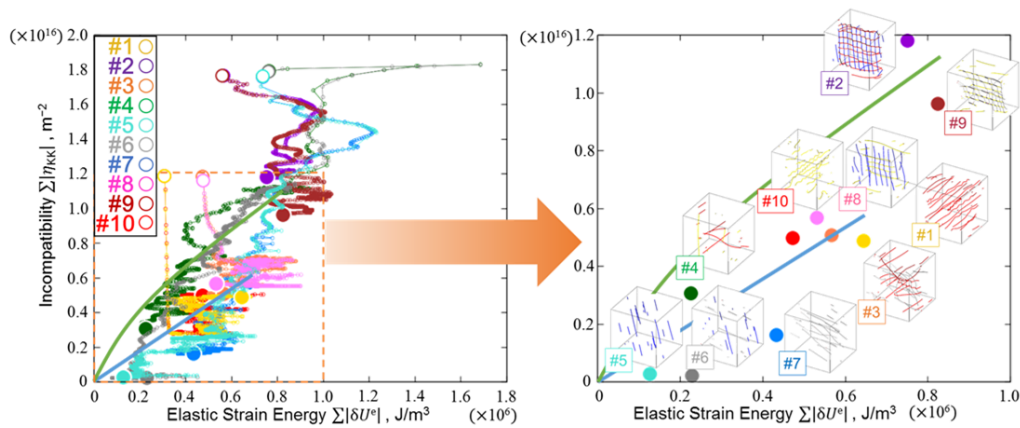


Fig. 6.5 Duality diagrams comparing among currently-simulated ten mixed dislocation wall models, showing trajectories from initial states (open symbols) and final states (solid symbols), together with magnified correlation for the latter.

6.4. Lath 壁

前節では、混合転位壁の結果を示し、FTMPに基づく評価を行った。双対線図表現によって各転位壁の差異が明確に表れた。本節では、前節と同様に Lath 壁に対する解

析結果を示し、FTMP に基づく評価を行う。更に、前節での結果や GNBs との結果も合わせることで、各転位壁の特徴を FTMP に基づいて言及する。

6.4.1. 解析結果

Fig. 6.6 に Fig. 6.2 で示した Lath 壁モデルの解析結果を示す。同図では、Fig. 6.3 と同様に、初期、中間、および最終ステップにおけるモデルを示し、更に最終ステップにおいて F-R 源から張り出した転位や、相互作用によって Lath 壁から張り出した転位を除いた図も同時に示している。以下では、各モデルにおける転位の挙動について述べていく。

$\sigma_{11}=1.0$ [GPa]モデルでは、F-R 源から張り出した転位が Lath 壁と衝突し、Lath 壁を構成している転位の形状を歪め、歪められた転位同士が、一部でジャンクションを形成している (Fig. 6.6 右上, 黒の転位)。F-R 源等を除いた最終ステップにおける形状を見ると、ジャンクションを形成した部分だけでなく、全体的に転位が歪んでいることがわかる。一方、 $\sigma_{33}=1.0$ [GPa]モデルでは、Lath 壁を構成する転位と異符号の Burgers ベクトルを持つ転位を F-R 源としたため、F-R 源から張り出した転位が Lath 壁と衝突すると、対消滅を生じる。最終ステップにおける Lath 壁の形状を見ると、元の形状よりも転位が疎になっていることがわかる。 $\sigma_{33}=-1.0$ [GPa]モデルでは、Lath 壁を構成する転位と同符号の Burgers ベクトルを持つ転位を F-R 源としたため、Lath 壁を構成する転位を衝突の際に弾き出す。弾き出された転位が張り出す等を繰り返し、最終的には $\sigma_{33}=1.0$ [GPa]モデルよりも疎な壁になっている。

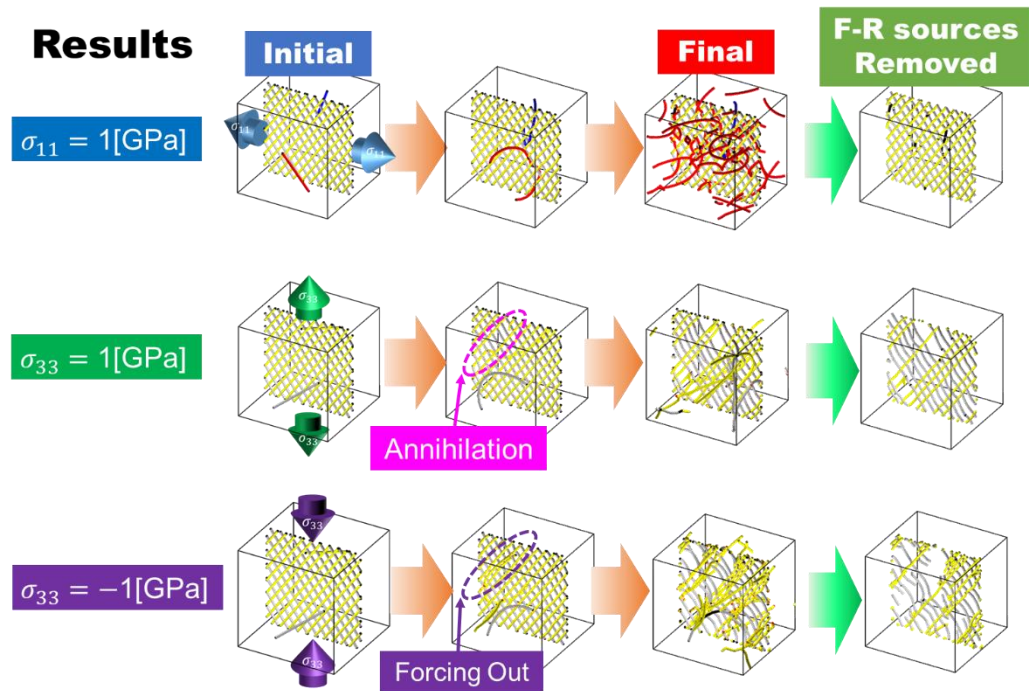


Fig. 6.6 Simulation results for lath wall models, comparing three stress conditions.

6.4.2. FTMP に基づく評価

本解析で得られた不適合度および弾性ひずみエネルギーゆらぎの時間変化を、Fig. 6.7(a)および Fig. 6.7(b)にそれぞれ示す。同図では、F-R 源等を除いた壁のみを評価しており (Fig. 6.6 右)、比較のために応力を加えない、Lath 壁単体での結果も合わせて示している。

Fig. 6.7 より、Lath 壁単体では、自身の応力場によって構成する転位が少し歪むために不適合度が一度上昇するが、その後は不適合度および弾性ひずみエネルギーゆらぎはほぼ一定の傾向を示している。一方、F-R 源を配置し、応力を負荷したモデルでは、不適合度および弾性ひずみエネルギーゆらぎの上昇が見られる。 $\sigma_{11}=1.0$ [GPa] モデルでは、壁を構成するらせん転位が歪められ、刃状成分が増えたために、刃状成分から算出される η_{KK} の値が上昇している。一方、他のモデルと比べて元々の構造が残っているので、エネルギーの上昇は緩やかである。 $\sigma_{33}=1.0$ [GPa]モデルでは、壁を構成する転位が一部対消滅したために、残った転位が少し張り出し、壁全体の刃状成分が増え、 η_{KK} の値が上昇している。しかし、 $\sigma_{11}=1.0$ [GPa]程顕著に歪んでいないため、 η_{KK} の上昇は小さい。エネルギー変化を見ると、 $\sigma_{33}=1.0$ [GPa]モデルは $\sigma_{11}=1.0$ [GPa]モデルよりも最終的に大きく上昇している。これは、Lath 壁は一種の低エネルギー構造であり、転位同士の応力場の打ち消し合いが生じた形で形成されて

いるためだと考えられる。すなわち、 $\sigma_{33}=1.0$ [GPa]モデルのように疎な構造を取ると、こうしたバランスが崩れ、対消滅によって転位密度が減少しても、系全体としては弾性エネルギーゆらぎが上昇すると推察される。こうした傾向は $\sigma_{33}=-1.0$ [GPa]モデルでも見られ、このモデルでも $\sigma_{33}=1.0$ [GPa]モデルとほぼ同様に不適合度および弾性ひずみエネルギーゆらぎの上昇が生じている。

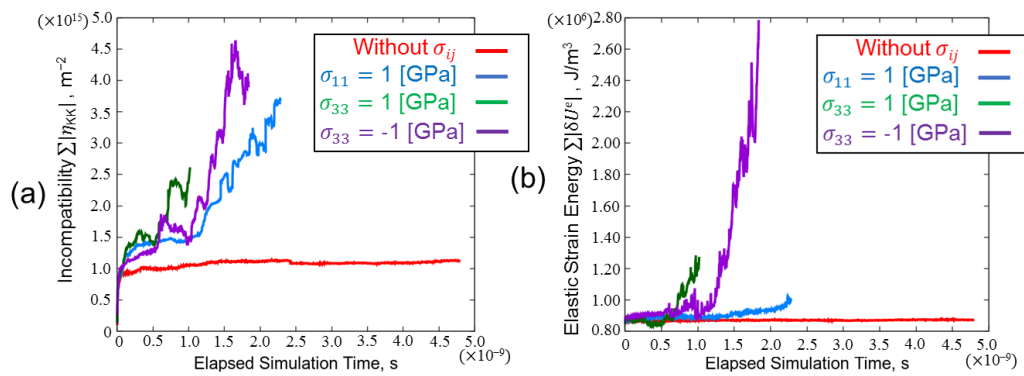


Fig. 6.7 Variations of (a) η_{KK} and (b) δU^e with elapsed time for lath wall models removing influences of F-R sources.

本 Lath モデルにおける双対線図を Fig. 6.8 に示す。同図より、 $\sigma_{11}=1.0$ [GPa]モデルは、外力無しモデルを延長したような軌跡を見せ、不適合度が単調増加する傾向にある。このことは、Lath 壁は安定な構造であると考えられることから、前章で述べたような、安定な構造は外乱に対して大きな不適合度変化で対処するという仮説を支持する結果である。一方、対消滅が生じ、不安定化した $\sigma_{33}=1.0$ [GPa]モデルでは、上述したように、エネルギーの増加が顕著になっている。 $\sigma_{33}=-1.0$ [GPa]モデルでも同様にエネルギーが顕著に増加し、低エネルギー構造からの逸脱が見られる。

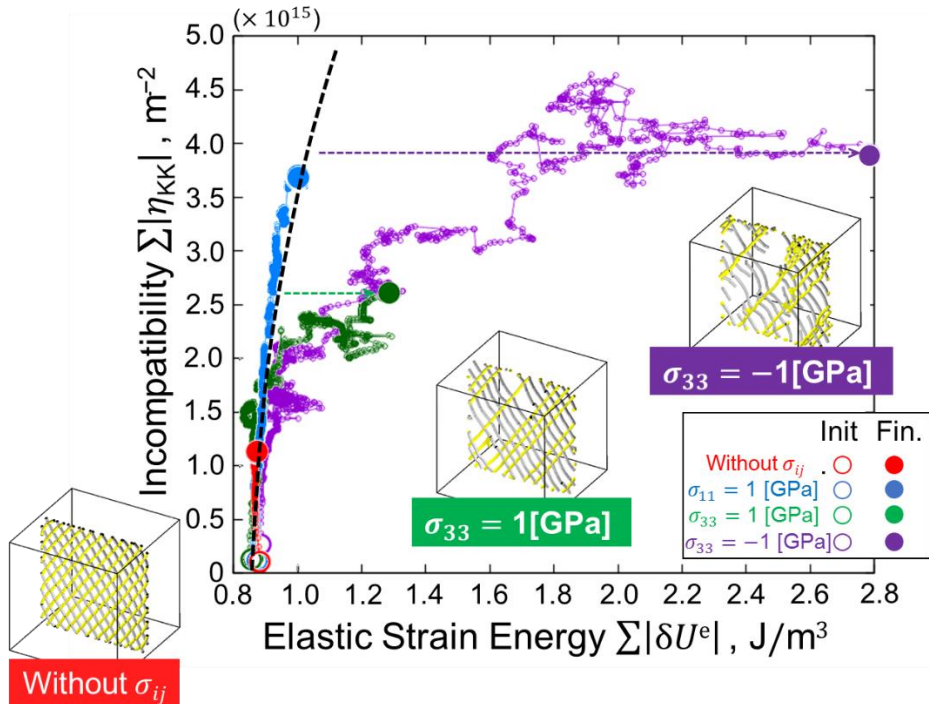


Fig. 6.8 Duality diagrams for lath dislocation wall models

ここで、これまで解析してきた種々の転位壁 (GNBs, 混合転位壁, および Lath 壁) の相互比較を試みる. Fig. 6.9(a) にその全体像を, Fig. 6.9(b) に最終ステップのみを抽出した結果を示す. ここで, Lath 壁は外力無しのモデルのみを用いている. 前章では, Fig. 6.9(b) のように, GNBs の最終形態が 1 つの滑らかな曲線上に乗るということを述べた. GNBs を基準として考えると, 崩壊する混合転位壁は双対線図上の下側に位置し, 準安定な混合転位壁は中間に位置している. 本研究で用いた Lath 壁モデルは, らせん転位で構成されているため, 比較的低い不適合度 (η_{KK}) を示す一方で, 高密度の転位壁であるため, 高いエネルギーを有している.

Fig. 6.9 から, 種々の転位下部組織について, FTMP に基づいた新たな視点が得られる. その概要を Fig. 6.10 に示す. ここで対象とする転位下部組織は, GNBs, Cell 壁, Lath 壁である. GNBs はこれらの中で最も安定な組織であると考えられ, 双対線図から, 同じエネルギーに対して高い不適合度を有することが考えられる. このことは, 一般的に GNBs は比較的大きな方位差を担っており, 結晶内の弾性ひずみエネルギーが十分緩和される形で導入されることから推察される.

一方, Cell 壁は無数の転位で構成されるが, 長範囲の応力場を有し, 比較的小さい方位差しか示さない. したがって, Cell 壁は結晶格子を大きく歪めていると解釈でき, これらのことから, GNBs よりも高い不適合度およびエネルギーを有していると考えら

れる。本解析では、Cell 壁を直接扱っていないが、以上の解釈から、Cell 壁は Fig. 6.10 に示したように双対線図上で、準安定を示した混合転位壁の延長線上に来ると推察される。

高 Cr 系フェライト鋼で見られる Lath 組織では、Lath 壁の間に析出物で留められた無数の転位が存在している。この高密度転位をカウントした場合、Fig. 6.10 で示したように、さらなる不適合度およびエネルギーの上昇が考えられる。

このように、FTMP に基づく評価によって種々の転位壁が明確に分類できる。こうした知見は、FTMP に基づいた FEM モデルで発現した組織がどのような転位壁としての性質を有するのか、といった検討等に利用でき、そこから、転位壁が与えるマクロな応答への影響を考察する際の足掛かりになり得ることが期待できる。

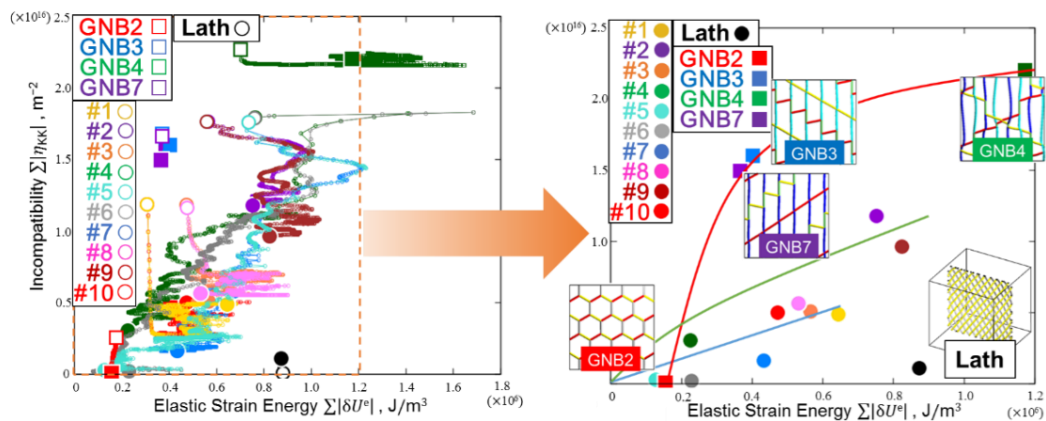


Fig. 6.9 Duality diagrams for mixed dislocation wall models, a lath wall and GNBs for extended comparison, showing (a) trajectories from initial states (open symbols) and final states (solid symbols), together with (b) magnified correlation for the latter.

第6章 種々の転位壁に対する解析および評価

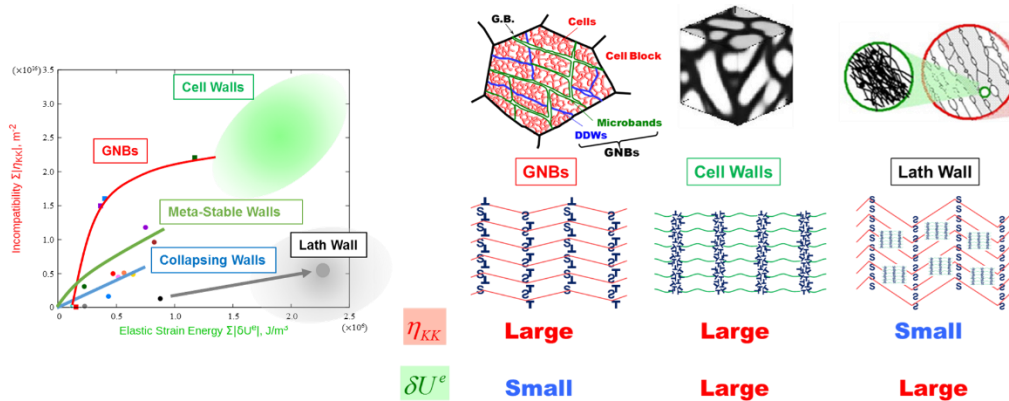


Fig. 6.10 Summary of duality diagram representations, displaying tentative whole picture covering various dislocation wall structures, including lath wall and cell walls presumed based on those for meta-stable walls.

6.5. 結言

本章では、崩壊する混合転位壁および Lath 壁の解析および評価を行った。

崩壊する混合転位壁は、崩壊の仕方によって大まかには3種類に分類でき、それらは双対線図で区別された。完全崩壊した場合は双対線図上の左下に、その延長線上に大きく形態変化したモデルが位置し、準安定的な挙動を示したモデルは右上に位置することがわかった。

Lath 壁の解析では、運動する転位との相互作用を検証した。Lath 壁を構成する転位とは異なる Burgers ベクトルを持つ転位との相互作用では、Lath 壁は安定的な挙動を示した。Lath 壁を構成する転位と同種の転位と相互作用させると、対消滅や、転位の弾き出しが生じた。これらのモデルに対して双対線図評価を行うと、安定的な挙動を示したモデルでは不適合度が大きく上昇する一方で、対消滅や弾き出しが生じると系全体のエネルギーゆらぎが大きく上昇することがわかった。このことから、Lath 壁は応力場を緩和しながら導入された、安定的な組織であり、壁の崩壊によって低エネルギー構造からの逸脱を生じたことが、双対線図によって定量的かつ視覚的に示されたと言える。

こうした転位壁の結果と GNBs の結果を合わせることで、転位壁に対する新たな描像が示唆された。GNBs は低エネルギー構造であるが、緻密な形態を有するため、高い不適合度を有すると考えられる。混合転位壁の延長線上に Cell 壁は位置すると予測できることから、Cell 壁は高いエネルギーおよび不適合度を有すると推察でき、このことは、Cell 壁が高い転位密度で長範囲の応力場を形成することからも推測できる。一方、Lath 壁は高密度でのらせん転位でできているため、高いエネルギーを有するが、本評価

法で用いた不適合度は比較的低い。このような転位壁に対する描像は、FTMP に基づいた結晶塑性モデルによる、転位下部組織の形態形成を模擬した解析において有用性を発揮すると考えられる。各組織の性質を把握することによって、どのような初期条件、構成式でその形態が得られるのか、といったことや、実際に得られた組織が同様の性質を有しているのか、といったことを検討する際の足がかりになると期待できる。

第7章 結論

本論文では、金属材料における不均質場の発展を取り扱う、新たな理論体系である FTMP (Field Theory of Multiscale Plasticity) に基づき、離散転位系を連続像に還元する手法を提案すると共に、転位動力学法による種々の転位系の解析結果に対してその評価を試みた。これまで FTMP はマクロな連続体モデルに用いられてきたが、転位動力学法のようなマイクロ・メソスケール解析においても適用することで、同理論の有用性を検証するだけでなく、マイクロとマクロを繋ぐマルチスケールの解析手法に寄与する概念を提唱した。本論文で対象とした転位系は (a) 転位の可逆的な張り出し運動に伴う見かけの弾性定数の低下 (第 3 章)、(b) 疲労き裂発生過程に関わる固執すべり帯 (Persistent Slip Bands: PSBs) における転位運動 (第 4 章)、(c) 変形誘起下部組織の代表例である幾何学的に必要な境界 (Geometrically Necessary Boundaries: GNBs)、および (d) その他の安定・不安定な転位壁 (第 6 章) である。いずれも金属材料のマクロな応答に影響を及ぼすと考えられる一方で、実験・観察が容易ではない組織であり、本論文で提唱した手法によって新たな知見が示されたと言える。以下に、各章を総括する。

第 1 章では、金属材料におけるマルチスケール問題について概説し、FTMP の立ち位置を述べた。さらに、転位下部組織について述べ、それを取り扱う重要性を示した後に、本論文で対象とする転位下部組織や工学的問題について述べた。加えて、転位系を数値的に取り扱う転位動力学法、種々の転位系の評価法や FTMP に基づく評価法について述べ、本論文の目的や意義を示した。

第 2 章では、FTMP について述べ、転位系に対する具体的な評価方法を示した。さらに、本論文で用いる転位動力学コードの詳細についても述べた。

第 3 章では、金属の負荷・除荷過程における見かけの弾性定数減少が、ピン留めされた転位の可逆的な運動に起因すると考え、そのモデル化、解析、および FTMP に基づく評価を行った。双対線図表現によって転位系のエネルギー・不適合度の変換過程が定量的に可視化され、転位の可逆的な運動に伴う見かけの弾性定数の低下率が、不適合度および弾性ひずみエネルギーの比である双対係数によって整理されることが示された。析出物によって転位の張り出しが阻害される場合についても解析および評価を行い、応力-ひずみ線図の傾き等、系の力学的応答を特徴づける因子が双対係数と良好な相関を示した。さらに、見かけの弾性定数の低下を双対係数で表現し、FTMP に基づく結晶塑性モデルへの導入についても検討を加えた。その結果、負荷・除荷過程における見かけの弾性定数の変化を適切に表現し得ることが示された。これは、本論文

で得られた知見が、有限要素法などを用いたマクロ解析においても活用可能であることを具体的に示している。

第4章では、PSBs (Persistent Slip Bands) を対象に、負荷応力レベルや交差すべり頻度を系統的に変化させて解析および相空間トラジェクトリ (PhS-T) による評価を行った。負荷によって Wall 部から張り出した転位は、Channel 部で転位双極子を形成したが、応力レベルの上昇によって転位間相互作用が促進されると共にその双極子は解消された。PhS-T による評価から、こうした転位間相互作用の差異が PhS-T 上の閉軌道に至る過程、すなわち、安定状態に至る過程に表れることが示された。一方、PSBs における交差すべりの影響についても議論を行い、交差すべりが生じることによって、Channel 部に微小転位ループが残されることがわかった。この微小ループを詳細に解析することで、刃状成分が支配的なループであることがわかり、原子空孔の源になり得ることが示唆された。さらに、PhS-T による評価から、交差すべりが頻繁に生じることで、PSBs 全体が動的な平衡を示すことがわかり、微小転位ループ生成による PhS-T への影響を検討した結果、不適合度速度の半周期毎の振幅と、生成された微小転位ループ数との間の良好な相関が示された。このことは、4次元時空に拡張した不適合度テンソルの無発散性からも推察された。PSBs 内で生成された原子空孔は、疲労き裂の発生を助長すると考えられていることから、不適合度速度と原子空孔との間の相関は、FTMP に基づいた疲労モデル構築への応用に期待される。

第5章では、GNBs (Geometrically Necessary Boundaries) の解析および評価を行った。GNB2, 3, 4, および7を対象とし、初期転位配置から転位間相互作用のみによる形態形成を解析した。その結果得られた最終形態は、GNBs の理論配置と良好な一致を見せた。各 GNB における Shannon エントロピーと不適合度との関係を調べると、両者の間には相関が見られた。さらに、GNBs に対する双対線図評価や、運動エネルギーの寄与を仮想的に増大させた双対線図評価によって、安定な組織は外乱に対してより大きな形態変化で対処するという、GNBs における安定性に関する新たな仮説が提案された。これは GNBs における他の転位との相互作用を検証することで、一部確かめられた。

第6章では、混合転位壁および Lath 壁の解析および評価を行った。混合転位壁は緩和計算によって崩壊する挙動を示したが、一部はジャンクションを形成して準安定的な構造を示した。崩壊の挙動はそれぞれの特徴によって分類され、その差異は双対線図上にも表れた。Lath 壁の解析では、転位との動的な相互作用を検証し、Lath 壁を構成する転位とは異なる Burgers ベクトルを有する転位との相互作用では、Lath 壁は安定的な挙動を示した。一方で、Lath 壁を構成する転位と同種の Burgers ベクトルを有する転位との相互作用では、Lath 壁の崩壊が見られた。これらの差異は双対線図によ

っても捉えられ、Lath 壁の崩壊による低エネルギー構造からの逸脱が定量的かつ視覚的に示された。さらに、各種転位壁における双対線図表現を試みることで、GNBs, Cell 壁, および Lath 壁に関する, FTMP に基づく新たな描像が示唆された。これによって、FTMP に基づいた結晶塑性モデルで得られた組織の検証や、連続体モデルによる転位壁の表現に寄与することが可能になると考えられる。

このように、離散転位系を FTMP に基づいて評価し、整理することで、連続体モデルへの還元につながる知見が得られるだけでなく、転位系に対する新たな視点も、もたらされることが示された。金属材料における種々の力学的応答を予測するためには、変形中に発展する転位下部組織を適切に表現する必要がある。本研究で用いた曲率による表現手法は、マルチスケール解析における新たな基礎となり得る。さらに、転位下部組織に対する、双対線図による統一的な観点での整理は、各種転位壁を特徴付け、従来は実験・観察による形態の報告や、それに基づいた転位運動の予測のみに終始していた同組織に対して、新たな知見をもたらすことができる。例えば、同整理結果をマクロな応答への寄与と結び付けられれば、転位下部組織導入に基づいた、新たな材料設計の指針に繋がり得る。本論文で示した種々の手法や描像が、さらなる転位系に対して活用されることで、FTMP に基づいたマルチスケール解析の発展が期待される。

参考文献

- [1] L. Zepeda-Ruiz, A. Stukowski, T. Ooppelstrup, N. Bertin, N. Barton, R. Freitas and V. Bulatov, "Atomistic insights into metal hardening," *Nat. Mater.*, 2020.
- [2] W. K. Liu, E. G. Karpov, S. Zhang and H. S. Park, "An Introduction to Computational Nanomechanics and Materials," *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, vol. 193, pp. 1529-1578, 2004.
- [3] E. van der Giessen and A. Needleman, "Discrete Dislocation Plasticity: a Simple Planar Model," *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 3, pp. 689-735, 1995.
- [4] D. Weygand, L. H. Friedman, E. van der Giessen and A. Needleman, "Discrete Dislocation Modeling in Three-Dimensional Confined Volumes," *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 309, no. 310, pp. 420-424, 2001.
- [5] M. A. Shehadeh, H. M. Zbib and T. Diaz de la Rubia, "Multiscale Dislocation Dynamics Simulations of Shock Compression in Copper Single Crystal," *Int. J. Plasticity*, vol. 21, pp. 2369-2390, 2005.
- [6] H. M. Zbib and T. D. de la Rubia, "A Multiscale Model of Plasticity," *Int. Jnl. Plasticity*, vol. 18, no. 9, pp. 1133-1163, 2002.
- [7] S. Akarapu, H. M. Zbib and D. F. Bahr, "Analysis of Heterogeneous Deformation and Dislocation Dynamics in Single Crystal Micropillars under Compression," *Int. J. Plasticity*, vol. 26, pp. 239-257, 2010.
- [8] J. A. El-Awady, S. B. Biner and N. M. Ghoniem, "A Self-Consistent Boundary Element, Parametric Dislocation Dynamics Formulation of Plastic Flow in Finite Volumes," *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 56, no. 5, pp. 2019-2035, 2008.
- [9] A. Takahashi and N. M. Ghoniem, "A Computational Method for Dislocation–Precipitate Interaction," *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 56, pp. 1534-1553, 2008.
- [10] C. Lemarchand, B. Devincre and L. P. Kubin, "Homogenization Method for a Discrete-Continuum Simulation of Dislocation Dynamics," *J. Mech. Phys. Solid*, vol. 49, pp. 1969-1982, 2001.
- [11] A. Vattré, B. Devincre and A. Roos, "Orientation Dependence of Plastic Deformation in Nickel-based Single Crystal Superalloys: Discrete–Continuous Model Simulations," *Acta Mater.*, vol. 58, pp. 1938-1951, 2010.

- [12] A. Vattré, B. Devincre, F. Feyel, R. Gatti, S. Groh, O. Jamond and A. Roos, "Modelling Crystal Plasticity by 3D Dislocation Dynamics and the Finite Element Method: The Discrete-Continuous Model Revisited," *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 63, pp. 491-505, 2014.
- [13] H. Mecking and U. F. Kocks, "A Mechanism for Static and Dynamic Recovery," in *Strength of Metals and Alloys*, P. HAASEN, V. GEROLD and G. KOSTORZ, Eds., Pergamon, 1979, pp. 345-350.
- [14] A. Ma, F. Roters and D. Raabe, "A Dislocation Density based Constitutive Model for Crystal Plasticity FEM including Geometrically Necessary Dislocations," *Acta Mater.*, vol. 54, no. 8, pp. 2169-2179, 2006.
- [15] A. Ma, F. Roters and D. Raabe, "A Dislocation Density based Constitutive Law for BCC Materials in Crystal Plasticity FEM," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 39, no. 1, pp. 91-95, 2007.
- [16] T. Ohashi, M. Kawamukai and H. M. Zbib, "A Multiscale Approach for Modeling Scale-Dependent Yield Stress in Polycrystalline Metals," *Int. J. Plasticity*, vol. 23, pp. 897-914, 2007.
- [17] S. Groh, E. B. Marin, M. .. Horstemeyer and H. M. Zbib, "Multiscale Modeling of the Plasticity in an Aluminum Single Crystal," *Int. J. Plasticity*, vol. 25, pp. 1456-1473, 2009.
- [18] M. Shenoy, Y. Tjiptowidjojo and D. McDowell, "Microstructure-Sensitive Modeling of Polycrystalline IN 100," *Int. J. Plasticity*, vol. 24, no. 10, pp. 1964-1730, 2008.
- [19] J. Hirth and J. Lothe, *Theory of Dislocations*, Second Edition ed., New York: John Wiley & Sons, 1982.
- [20] D. Kuhlmann-Wilsdorf and N. Hansen, "Geometrically Necessary, Incidental and Subgrain Boundaries," *Scripta Metall. Mater.*, vol. 25, no. 7, pp. 1557-1562, 1991.
- [21] C. Hong, X. Huang and G. Winther, "Dislocation Content of Geometrically Necessary Boundaries Aligned with Slip Planes in Rolled Aluminium," *Phil. Mag. A*, vol. 93, no. 23, pp. 3118-3142, 2013.
- [22] S. Suresh, *Fatigue of Materials*, Cambridge University Press, 1998.
- [23] L. P. Kubin, "Dislocation Patterns: Experiment, Theory and Simulation," in *Stability of Materials*, A. Gonis, P. E. A. Turchi and J. Kudrnovský, Eds., Plenum Press, New York, 1996, pp. 99-135.
- [24] N. M. Ghoniem, S. H. Tong and L. Z. Sun, "Parametric Dislocation Dynamics: A

参考文献

- Thermodynamics-based Approach to Investigations of Mesoscopic Plastic Deformation," *Phys. rev. B*, vol. 61, no. 2, pp. 913-927, 2000.
- [25] H. M. Zbib, T. D. De La Rubia, M. Rhee and J. P. Hirth, "3D Dislocation Dynamics: Stress-Strain Behavior and Hardening Mechanisms in FCC and BCC Metals," *J. Nuc. Mater.*, vol. 276, no. 1-3, pp. 154-165, 2000.
- [26] S. Groh and H. Zbib, "Advances in Discrete Dislocations Dynamics and Multiscale Modeling," *Journal of Engineering Materials and Technology*, vol. 131, no. 4, 2009.
- [27] G. Po, M. Mohamed, T. Crosby, C. Erel, A. El-Azab and N. Ghoniem, "Recent Progress in Discrete Dislocation Dynamics and Its Applications to Micro Plasticity," *JOM*, vol. 66, no. 10, pp. 2108-2120, 2014.
- [28] 長谷川正, "バウシンガー効果の発生原因," *日本金属学会会報*, 第15巻, 第8, pp. 509-516, 1976.
- [29] F. Yoshida, T. Uemori and K. Fujiwara, "Elastic-Plastic Behavior of Steel Sheets under in-plane Cyclic Tension-Compression at Large Strain," *Int. J. Plast.*, pp. 633-659, 2002.
- [30] M. Yang, Y. Akiyama and T. Sasaki, "Evaluation of Change in Material Properties due to Plastic Deformation," *J. Mater. Process. Technol.*, pp. 232-236, 2004.
- [31] R. H. Wagoner, "Sheet Springback," in *Continuum Scale Simulation of Engineering Materials: Fundamentals - Microstructures - Process Applications*, D. Raabe, F. Roters, F. Barlat and L. Chen, Eds., Wiley-VCH, 2004, pp. 757-774.
- [32] A. Granato and K. Lucke, "Theory of Mechanical Damping Due to Dislocations," *J. Appl. Phys.*, vol. 27, pp. 583-593, 1956.
- [33] N. Brown, "Observations of Microplasticity," in *Microplasticity*, C. J. McMahon Jr., Ed., John Wiley and Sons Inc., New York, 1968, pp. 45-73.
- [34] J. Kim, D. Kim, F. Barlat and M. Lee, "Crystal Plasticity Approach for Predicting the Bauschinger Effect in Dual-Phase Steels," *Mater. Sci. and Eng. A*, vol. 539, pp. 259-270, 2012.
- [35] U. Essmann, U. Gösele and H. Mughrabi, "A Model of Extrusions and Intrusions in Fatigued Metals I. Point-Defect Production and the Growth of Extrusions," *Phil. Mag. A*, vol. 44, no. 2, pp. 405-426, 1981.
- [36] J. Polák, "On the Role of Point Defects in Fatigue Crack Initiation," *Mater. Sci. Eng.*, vol. 92, pp. 71-80, 1987.

- [37] J. Polák, J. Man and K. Obrtlík, "AFM evidence of surface relief formation and models of fatigue crack nucleation," *Int. J. Fatigue*, vol. 25, no. 9-11, pp. 1027-1036, 2003.
- [38] J. Polák, M. Petre nec and J. Man, "Dislocation Structure and Surface Relief in Fatigued Metals," *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 400, no. 401, pp. 405-408, 2005.
- [39] M. Sangid, "The physics of fatigue crack initiation," *Int. J. Fatigue*, vol. 57, pp. 58-72, 2013.
- [40] K. Differt, U. Esmann and H. Mughrabi, "A Model of Extrusions and Intrusions in Fatigued Metals II. Surface Roughening by Random Irreversible Slip," *Phil. Mag. A*, vol. 54, no. 2, pp. 237-258, 1986.
- [41] E. Repetto and M. Ortiz, "A Micromechanical Model of Cyclic Deformation and Fatigue-Crack Nucleation in Fcc Single Crystals," *Acta Mater.*, vol. 45, no. 6, pp. 2577-2595, 1997.
- [42] J. El-Awady, N. Ghoniem and H. Mughrabi, "Dislocation Modelling of Localized Plasticity in Persistent Slip Bands," in *Proceedings of 136th TMS Annual Meeting and Exhibition, Materials Processing and Manufacturing Division Symp.: Mechanics and Materials Modeling and Materials Design Methodologies*, Orlando, FL, The Minerals, Metals and Materials Society, 2007, pp. 23-35.
- [43] N. Hansen, "Microstructural Evolution during Forming of Metals," *J. Mater. Sci. Technol.*, vol. 17, no. 4, pp. 409-412, 2001.
- [44] Q. Liu, X. Huang, D. Lloyd and N. Hansen, "Microstructure and Strength of Commercial Purity Aluminium (AA 1200) Cold-Rolled to Large Strains," *Acta Mater.*, vol. 50, no. 15, pp. 3789-3802, 2002.
- [45] G. Winther, C. Hong and X. Huang, "Low-Energy Dislocation Structure (LEDS) Character of Dislocation Boundaries Aligned with Slip Planes in Rolled Aluminum," *Phil. Mag.*, vol. 95, no. 13, pp. 1471-1489, 2015.
- [46] L. Brown, "The Self-Stress of Dislocations and the Shape of Extended," *Phil. Mag.*, vol. 10, pp. 441-466, 1964.
- [47] A. Foreman, "The Bowing of a Dislocation Segment," *Phil. Mag.*, vol. 15, pp. 1011-1021, 1967.
- [48] R. J. Amodeo and N. M. Ghoniem, "Dislocation dynamics. I. A Proposed Methodology for Deformation Micromechanics," *Phys. Rev. B*, vol. 41, no. 10, pp. 6958-6967, 1990.
- [49] L. P. Kubin, G. Canova, B. Devincre, V. Pontikis and Y. Brechet, "Dislocation

参考文献

- Microstructure and Plastic Flow: 3D Simulation," *Solid State Phenomena*, vol. 23&24, pp. 455-472, 1992.
- [50] H. M. Zbib, M. Rhee and J. P. Hirth, "3D Simulation of Curved Dislocations: Discretization and Long range Interactions," in *Advances in Engineering Plasticity and its Applications*, T. Abe and T. Tsuruta, Eds., Pergamon, 1996, pp. 15-20.
- [51] N. M. Ghoniem and L. Z. Sun, "Fast-Sum Method for the Elastic Field of Three-Dimensional Dislocation Ensembles," *Phys. Rev.*, vol. 60, no. 1, pp. 128-140, 1999.
- [52] H. Zbib, M. Rhee, J. Hirth, "On Plastic Deformation and the Dynamics of 3D Dislocations," *Int. Jnl. Mater. Sci.*, 第 40 卷, 第 2-3, pp. 113-127, 1998.
- [53] H. Zbib and T. de la Rubia, "A Multiscale Model of Plasticity," *Int. Jnl. Plasticity*, vol. 18, no. 9, pp. 1133-1163, 2002.
- [54] V. Bulatov, F. Abraham, L. Kubin, B. Devincere and S. Yip, "Connecting Atomistic and Mesoscale Simulations of Crystal Plasticity," *Nature*, vol. 391, no. 6668, pp. 669-672, 1998.
- [55] B. Devincere and L. Kubin, "Mesoscopic simulations of dislocations and plasticity," *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 8, no. 14, pp. 8-14, 1997.
- [56] R. J. Amodeo and N. M. Ghoniem, "Dislocation Dynamics. II. Applications to the Formation of Persistent Slip Bands, Planar Arrays, and Dislocation Cells," *Phys. Rev. B*, vol. 41, no. 10, pp. 6968-6976, 1990.
- [57] A. Hussein and J. El-Awady, "Quantifying Dislocation Microstructure Evolution and Cyclic Hardening in Fatigued Face-Centered Cubic Single Crystals," *J. Mech. Phys. Solid*, vol. 91, pp. 126-144, 2016.
- [58] C. Erel, "Dislocation Dynamics Simulations of Persistent Slip Bands during Fatigue of FCC Metals," UCLA, 2015.
- [59] B. Liu., D. Raabe, P. Eisenlohr, F. Roters, A. Arsenlis and G. Hommes, "Dislocation Interactions and Low-Angle Grain Boundary Strengthening," *Acta Mater.*, vol. 59, no. 19, pp. 7125-7134, 2011.
- [60] B. Liu, P. Eisenlohr, F. Roters and D. Raabe, "Simulation of Dislocation Penetration through a General Low-Angle Grain Boundary," *Acta Mater.*, vol. 60, pp. 5380-5390, 2012.
- [61] N. Verdhan and R. Kapoor, "Interaction of Dislocations with Low Angle Tilt Boundaries in Fcc Crystals," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 98, pp. 149-157, 2015.

- [62] 加藤雅治, 入門転位論, 6 編, 裳華房, 2010.
- [63] N. Hansen, "Deformation Microstructures with a Structural Scale from the Micrometre to the Nanometre Dimension," in *Evolution of deformation microstructures in 3D. Proceedings*, C. Gundlach, K. Haldrup, N. Hansen, X. Huang, D. Juul Jensen, T. Leffers, Z. Li, S. Nielsen, W. Pantleon, J. Wert and G. Winther, Eds., Roskilde, Risø National Laboratory, 2004, pp. 13-32.
- [64] G. Castelluccio and D. McDowell, "Mesoscale Cyclic Crystal Plasticity with Dislocation Substructures," *Int. Jnl. Plasticity*, vol. 98, pp. 1-26, 2017.
- [65] C. Shannon, "A Mathematical Theory of Communication," *ACM SIGMOBILE mobile computing and communications review*, vol. 5, no. 1, pp. 3-55, 2001.
- [66] M. Zaiser, K. Bay and P. Hähner, "Fractal Analysis of Deformation-Induced Dislocation Patterns," *Acta Mater.*, vol. 47, no. 8, pp. 2463-2476, 1999.
- [67] J. F. Nye, "Some Geometrical Relations in Dislocated Crystals," *Acta Metall.*, vol. 1, pp. 153-162, 1953.
- [68] B. Bilby, R. Bullough and E. Smith, "Continuous Distributions of Dislocations: a New Application of the Methods of non-Riemannian Geometry," *Proc. of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, vol. 231, no. 1185, pp. 263-273, 1955.
- [69] K. Kondo, "Non-Riemannian Geometry of Imperfect Crystals from a Macroscopic View Point," *RAAG Memoirs of Unifying Study of Basic Problems in Engineering and Physical Science by Means of Geometry*, Vols. 1 D-I, pp. 458-469, 1955.
- [70] R. De Wit, "A View of the Relation between the Continuum Theory of Lattice Defects and non-Euclidean Geometry in the Linear Approximation," *Int. J. Eng. Sci.*, vol. 19, no. 12, pp. 1475-1506, 1981.
- [71] K. Kondo, "Energy at Plastic Deformation and the Criterion for Yielding," *RAAG Memoirs of Unifying Study of Basic Problems in Engineering and Physical Science by Means of Geometry*, vol. 1, pp. 484-494, 1955.
- [72] K. Kondo and M. Yuki, "On the Current Viewpoints of Non-Riemannian Plasticity Theory," in *RAAG Memoirs of Unifying Study of Basic Problems in Engineering and Physical Science by Means of Geometry*, vol. 2, K. Kondo, Ed., Gakujutsu Bunken Fukyu-kai, 1958, pp. 202-226.
- [73] K. Kondo, "On the Analytical and Physical Foundations of the Theory of Dislocations

参考文献

- and Yielding by the Differential Geometry of Continua," *Int. J. Engng. Sci.*, vol. 2, pp. 219-251, 1964.
- [74] 近藤一夫, 変形の幾何学 (岩波講座, 現代応用数学 B-7-b) , 岩波書店, 1957.
- [75] T. Hasebe, "Continuum Description of Inhomogeneously Deforming Polycrystalline Aggregate based on Field Theory," *IUTAM Symposium on Mesoscopic Dynamics of Fracture Process and Materials Strength. Edited by Kitagawa, H. and Shibutani, Y., Kluwer Academic Publishers.*, pp. 381-390, 2004.
- [76] T. Hasebe, "Multiscale Crystal Plasticity Modeling based on Field Theory," *CMES*, vol. 11, no. 3, pp. 145-155, 2006.
- [77] T. Hasebe, "Interaction Fields Based on Incompatibility Tensor in Field Theory of Plasticity -Part I: Theory-," *IMMIJ*, vol. 2, no. 1, pp. 1-14, 2009.
- [78] T. Hasebe, "Interaction Fields Based on Incompatibility Tensor in Field Theory of Plasticity -Part II: Application-," *IMMIJ*, vol. 2, no. 1, pp. 15-30, 2009.
- [79] Y. Aoyagi and T. Hasebe, "New Physical Interpretation of Incompatibility Tensor and Its Application to Dislocation Substructure Evolution," *Key Materials Engineering*, vol. 340, no. 341, pp. 217-222, 2007.
- [80] T. Hasebe, M. Sugiyama, H. Adachi, S. Fukutani and M. Iida, "Modeling and Simulations of Experimentally-Observed Dislocation Substructures Based on Field Theory of Multiscale Plasticity (FTMP) Combined with TEM and EBSD-Wilkinson Method for FCC and BCC poly/Single Crystals," *Mater. Trans.*, vol. 55, no. 5, pp. 779-787, 2014.
- [81] 松原康高 , 長谷部忠司, "FTMP 場の理論に基づくラスマルテンサイト組織のクリープ破断過程に対する新しい可視化手法の開発," *計算力学講演会講演論文集*, 第 31 巻, p. 273, 2018.
- [82] T. Hasebe and T. Naito, "FTMP-based 4D Evaluations of Discrete Dislocation Systems," in *New Frontiers of Nanometals (Proc. 35th RisØ int. Symp. on Mater. Sci.)*, S. Faester, Ed., 2014, pp. 305-312.
- [83] N. Kajiwara, K. Imiya and T. Hasebe, "FTMP-based Modeling and Simulation of Magnesium," *Int. J. Comp. Mat. Sci. Eng.*, vol. 2, no. 3&4, p. 1350022, 2013.
- [84] T. Okuda, K. Imiya and T. Hasebe, "FTMP-based Simulation of Twin Nucleation and Substructure Evolution under Hypervelocity Impact," *Int. J. Comp. Mat. Sci. Eng.*, vol. 2, no. 3&4, p. 1350021, 2013.

- [85] 天野裕太, 松原康高, 長谷部忠司, “ラスブロック組織におけるミスオリエンテーション発展に及ぼす転位密度・不適合度情報に関する検討,” *M&M 材料力学カンファレンス*, 第 2019 巻, 2019.
- [86] 長谷部忠司, 名和佑太, “FTMP 場の理論に基づくミルフィーユ構造におけるキンク形成とエネルギー解放特性に関するマルチスケールシミュレーション,” *計算力学講演会講演論文集*, 第 32 巻, p. 197, 2019.
- [87] M. Ashby, "The Deformation of Plastically non-Homogeneous Materials," *Phil. Mag.*, vol. 21, no. 170, pp. 399-424, 1970.
- [88] J. D. Clayton, *Nonlinear Mechanics of Crystals*, Springer, 2010.
- [89] 矢野健太郎, *接続の幾何学*, 森北出版, 1968.
- [90] 大南正瑛編, *マイクロメカニクス入門*, オーム社, 1980.
- [91] 塩沢和章, “微視構造を有する材料の力学 (III),” *精密工学会誌*, 第 54 巻, 第 6, pp. 1029-1034, 1988.
- [92] 大南正瑛, 塩沢和章, *多結晶体の強度と破壊*, 培風館, 1976.
- [93] J. M. T. Thompson and H. B. Stewart, *Nonlinear Dynamics and Chaos*, John Wiley & Sons, 1986.
- [94] 河内一宏, “離散転位動力学シミュレーションに基づくラス内高密度転位組織の構造安定性に関する場の理論的評価,” 神戸大学修士論文, 2012.
- [95] E. Tanaka, S. Murakami and M. Ooka, "Dependence of strain-Hardening under Multi-axial Non-Proportional Cyclic Plastic Deformation on Geometry History of Plastic Strain Trajectory," *Trans. JSME A*, vol. 51, no. 468, pp. 1941-1950, 1985.
- [96] R. Madec, B. Devincre and L. Kubin, "Simulation of Dislocation Patterns in Multislip," *Scr. Mater.*, vol. 47, no. 10, pp. 689-695, 2002.
- [97] A. Hussein, S. Rao, M. Uchic, D. Dimiduk and J. El-Awady, "Microstructurally based Cross-Slip Mechanisms and Their Effects on Dislocation Microstructure Evolution in Fcc Crystals," *Acta Mater.*, vol. 85, pp. 180-190, 2015.
- [98] H. M. Zbib, M. Rhee and J. P. Hirth, "On Plastic Deformation and the Dynamics of 3D Dislocations," *Int. J. Mater. Sci.*, vol. 40, no. 2-3, pp. 113-127, 1998.
- [99] H. Wang and R. LeSar, "O(N) algorithm for dislocation dynamics," *Phil. Mag. A*, vol. 71, no. 1, pp. 149-164, 1995.
- [100] H. M. Zbib, "MDDP-suite version2," 2002.

参考文献

- [101] M. Yamada, T. Hasebe, Y. Tomita and T. Onizawa, "Dislocation Dynamics Simulation on Stability of High Dense Dislocation Structure Interacting with Coarsening Defects," *IMMIJ*, vol. 1, no. 4, pp. 437-448, 2008.
- [102] 高木拓弥, "FTMP 場の理論に基づく不均質場発展の可視化の検討," 神戸大学修士論文, 2020.
- [103] 中谷峻, "固執すべり帯における疲労き裂発生プロセス解明に関する場の理論的研究," 神戸大学修士論文, 2012.
- [104] A. Arsenlis, W. Cai, M. Tang, M. Rhee, T. Opperstrup, G. Hommes, T. G. Pierce and V. V. Bulatov, "Enabling Strain Hardening Simulations with Dislocation Dynamics," *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 15, no. 6, pp. 553-595, 2007.
- [105] W. Cai, A. Arsenlis, C. R. Weinberger and V. V. Bulatov, "A non-Singular Continuum Theory of Dislocations," *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 54, no. 3, pp. 561-587, 2006.
- [106] 日本金属学会, 転位論—その金属学への応用—, 丸善, 1975.
- [107] 森戸茂一, 私信, 2012.
- [108] V. Deshpande, A. Needleman and E. Van der Giessen, "Finite Strain Discrete Dislocation Plasticity," *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 51, pp. 2057-2083, 2003.
- [109] S. Xia and A. El-Azab, "Computational Modelling of Mesoscale Dislocation Patterning and Plastic Deformation of Single Crystals," *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 23, no. 5, pp. 1-26, 2015.
- [110] 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," *日本機械学会論文集 A 編*, 第 72 巻, 第 719, pp. 1009-1016, 2006.

関連発表論文

1. Shiro Ihara, Tadashi Hasebe, "FTMP-based simulations and evaluations of Geometrically-Necessary Boundaries (GNBs) of dislocation", Int. Jnl. of Multiphysics vol.13, no. 3, 253-268, 2019.
 2. Shiro Ihara and Tadashi Hasebe,"FTMP-based Evaluations of Dislocation Wall Structures", Proc. of 10th Japan-China Bilateral Symp. on High Temperature Strength of Materials, 304-310, 2019.
 3. Shiro Ihara and Tadashi Hasebe,"FTMP-Based Quantitative Evaluations for Dynamic Behavior of Dislocation Wall Structures", Materials Research Proceedings, vol.13, 85-90, 2019.
 4. Shiro Ihara, Motoki Uematsu, Tadashi Hasebe, "FTMP-based Simulation and Evaluation of Apparent Reduction in Elastic Modulus", Int. Jnl. of Multiphysics, vol.14, no. 4, 373-388, 2020.
 5. Shiro Ihara, Nobuhiko Kojima, Tadashi Hasebe, "FTMP-based Approach toward Dislocation Dynamics of PSB", Int. Jnl. of Multiphysics, submitted.
 6. 長谷部忠司, 井原史朗, 「転位集団ダイナミクスの3次元離散像をいかに表現すべきか?~FTMP場の理論に基づく視座~」, 計算力学講演会講演論文集, vol. 2017.30, 2017.
 7. 井原史朗, 長谷部忠司, 「FTMP場の理論に基づくGNBs4D詳細構造の可視化および連続場評価」, 計算力学講演会講演論文集, vol. 2018.31, 2018.
 8. 井原史朗, 長谷部忠司, 「FTMP場の理論に基づく転位壁の解析および統一的評価」, 計算力学講演会講演論文集, vol. 2019.32, 2019.
- 国際会議における発表
1. Shiro IHARA and Tadashi HASEBE,"FTMP-based Simulations and Evaluations of Geometrically-Necessary Boundaries (GNBs) of Dislocation", The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling, SY-C11, Osaka, November 2018.
 2. Shiro IHARA and Tadashi HASEBE,"FTMP-based Quantitative Evaluations for Dynamic Behavior of Dislocation Wall Structures", Sixth

International Symposium on Explosion, Shock wave and High-strain rate Phenomena, India, March 2019.

3. Shiro IHARA and Tadashi HASEBE, " FTMP-based Evaluations of Dislocation Wall Structures", 10th Japan-China Bilateral Symposium on High Temperature Strength of Materials, Kagoshima, October 2019.

● 国内会議における発表

1. 井原史朗, 児島信彦, 長谷部忠司, 「FTMP 場の理論に基づく GNBs および結晶粒界に対する評価」, 日本材料学会第 66 期学術講演会, 618, 名城大学, 2017 年 5 月.
2. 長谷部忠司, 井原史朗, 「転位集団ダイナミクスの 3 次元離散像をいかに表現すべきか? ~FTMP 場の理論に基づく視座~」, 日本機械学会第 30 回計算力学講演会, 338, 近畿大学, 2017 年 9 月.
3. 井原史朗, 長谷部忠司, 「FTMP 場の理論に基づく GNBs 形成過程に対する評価」, 日本材料学会第 67 期学術講演会, 534, 高知工科大学, 2018 年 5 月.
4. 井原史朗, 長谷部忠司, 「FTMP 場の理論に基づく GNBs 4 D 詳細構造の可視化および連続場評価」, 日本機械学会第 31 回計算力学講演会, 254, 徳島大学, 2018 年 10 月.
5. 井原史朗, 長谷部忠司, 「FTMP 場の理論に基づく転位壁崩壊の解析および評価」, 第 4 回マルチスケール材料力学シンポジウム, P28, 室蘭工業大学, 2019 年 5 月.
6. 野本恭介, 井原史朗, 長谷部忠司, 「FTMP 場の理論に基づく転位反応素過程の評価」, 日本材料学会第 68 期学術講演会, 523, 室蘭工業大学, 2019 年 5 月.
7. 井原史朗, 長谷部忠司, 「FTMP 場の理論に基づく転位壁の解析および統一的评价」, 日本機械学会第 32 回計算力学講演会, 153, 東洋大学, 2019 年 9 月.

付録 A 結晶塑性理論に基づく構成式の定式化

ここでは、第3章で用いたFTMPに基づく結晶塑性モデルについて述べる。

A.1. 微視的構成式の導出

A.1.1. 微視的変形機構の力学モデル

一般に、FCC金属の場合、Peierls 応力は無視できるほど十分小さく、転位運動に対する固有抵抗はphononによる抵抗である。一方、外的な抵抗としては、散在する点障害による抵抗がある。本研究で対象とするような純金属の場合は、点障害としてはすべり面に交差する転位すなわち林転位が考えられる。したがって、すべり面上の転位を切るときの熱活性化過程と林転位間を通過するときのphonon抵抗に律速されて進む。結晶内で運動転位が受ける抵抗は、ひずみ速度が 10^{-3} [/s]以下の領域では熱活性化過程に基づき、それを超える領域では、phonon抵抗に律速されると考えられている[A1].

以下ではすべり系の違いによる差異を特に考慮しないため、せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ とせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ の、各すべり系の番号を表す添字 (α) を省略することにする。

まず、切りあいの見かけの活性化エネルギー $\Delta G(\tau^*)$ について考える。分解せん断応力の付加によって運動転位が林転位を乗り越えるためには、これに必要なエネルギーを原子の熱振動エネルギーによって与えなければならない。すなわちこのエネルギーが見かけの熱活性化エネルギー $\Delta G(\tau^*)$ であり、一般的な障害を想定して次のように表現できる。

$$\Delta G(\tau^*) = \Delta G_0 \left[1 - \left(\frac{\tau^*}{\hat{\tau}^*} \right)^p \right]^q, \quad 0 \leq p \leq 1, 1 \leq q \leq 2 \quad (\text{A.1})$$

本研究では、この $\hat{\tau}^*$ を後述の抗応力 $K^{(\alpha)}$ と等価であるとして取り扱うものとする。

運動転位が林転位を乗り越えるための切りあい待ち時間を t_{therm} とすると転位の平均速度 \bar{v} は転位の平均間隔 L を用いて

$$\bar{v} = \frac{L}{t_{therm}} \quad (\text{A.2})$$

と表現できる。

次に熱活性化過程について考える。熱活性化過程とは転位が林転位を乗り越えて運動する過程であり、本研究では、転位が林転位を乗り越える頻度にArrhenius型の律速過程の式を適用し、活性化エネルギーを分解せん断応力 τ^* の関数として表現する方法を用いる。この場合、転位が林転位を乗り越える頻度 ν_1 は次式で表される。

$$v_1 = v_0 \exp\left[-\frac{\Delta G(\tau^*)}{kT}\right] \quad (\text{A.3})$$

$$v_0 = v_d \frac{b}{4L} \quad (\text{A.4})$$

ここで v_d はデバイ振動数, $\Delta G(\tau^*)$ は切りあいの見かけの活性化エネルギー, b はBurgersベクトル, k はボルツマン定数, T は絶対温度である. したがって, 運動転位が林転位を乗り越えるために必要な切りあい待ち時間は次式となる.

$$t_{therm} = v_1^{-1} = v_0^{-1} \exp\left[\frac{\Delta G(\tau^*)}{kT}\right] \quad (\text{A.5})$$

次にphonon抵抗に律速されて転移が運動するとき定常状態における転位に作用する力と粘性抵抗とのつりあいの式は, Newton粘性流体を仮定した場合, 次式で与えられる.

$$\tau b = B v_{phonon} \quad (\text{A.6})$$

ここで B は粘性減衰係数であり, 一般に温度の関数になる. 転移の林転位を乗り越えるために必要な切り合い待ち時間は次のようになる.

$$t_{phonon} = \frac{BL}{\tau b} \quad (\text{A.7})$$

転位の平均速度 \bar{v} は, 林転位との切り合い待ち時間 t_{therm} および林転位を通過するのに要する時間 t_{phonon} を用いて,

$$\bar{v} = \frac{L}{t_{therm} + t_{phonon}} \quad (\text{A.8})$$

と書ける. せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}$ はOrowanの式より,

$$\dot{\gamma} = \rho_m b \bar{v} \quad (\text{A.9})$$

と表される. ここで ρ_m は可動転位密度である. したがって式(A.9)は次式のようになる.

$$\dot{\gamma} = \frac{\rho_m b L}{t_{therm} + t_{phonon}} \quad (\text{A.10})$$

式(A.10)に式(A.1), (A.5), (A.7)を代入すると分解せん断応力 τ^* とせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}$ との関係は

$$\dot{\gamma} = \rho_m b L \left[v_0^{-1} \exp\left\{\frac{\Delta G_0}{kT} \left(1.0 - \left(\frac{\tau^*}{\widehat{\tau}^*}\right)^p\right)^q\right\} + \frac{BL}{\tau b} \right]^{-1} \quad (\text{A.11})$$

と表すことができる. 低速の時は近似的に

$$\dot{\gamma} = \rho_m b L \left[v_0^{-1} \exp \left\{ \frac{\Delta G_0}{kT} \left(1.0 - \left(\frac{\tau^*}{\tau} \right)^p \right)^q \right\} \right]^{-1} \quad (\text{A.12})$$

と書ける．これは運動転位が林転位と切り合う熱活性化過程に基づく式で，分解せん断応力 τ^* はせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}$ の対数に線形依存する．また高速の時は近似的に

$$\dot{\gamma} = \frac{\rho_m b^2 \tau}{B} \quad (\text{A.13})$$

となる．これはphonon抵抗により律速された粘性流動の式で，分解せん断応力 τ^* はせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}$ に線形依存する．したがってせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}$ を対数座標で見れば，式(A.12)の熱活性化過程では直線的に緩やかに増加し，式(A.13)のphonon粘性領域に入ると急激に上昇する．

A.1.2. 微視的構成式の具体形

式(A.11)において，内部応力として後述の抗応力 $K^{(\alpha)}$ を用いることにより，微視的構成式の具体形を以下のように得る．

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{A}_{SR} \operatorname{sgn}(\dot{\epsilon}^{(\alpha)}) \left[\exp B_{SR} \left(1.0 - \left| \frac{\dot{\epsilon}^{(\alpha)}}{K^{(\alpha)}} \right|^p \right)^q \right]^{-1} \quad (\text{A.14})$$

$$\dot{A}_{SR} = \rho_m b L v^* , B_{SR} = \frac{\Delta G_0}{kT} \quad (\text{A.15})$$

抗応力は主として温度，ひずみ履歴効果に関係しており，転位間相互作用を考慮することで転位下部組織の構築，発展の過程を想定している．そして等方的なひずみ履歴の蓄積過程を表現することで，等方硬化の発展に対応する．

A.2. 抗応力モデル

抗応力の定式化では，結晶粒内における林転位の蓄積硬化と，運動転位と林転位の相互作用を想定する．この相互作用の結果，転位同士が反応し接合転位(junction)等を形成し，動的回復など一連の複雑なプロセスを経た後，セル組織が構築されるに至る[A2, A3]．その過程の模式図をFig.A.1に示す．式(A.14)における抗応力 $K^{(\alpha)}$ の時間発展に対する硬化発展方程式の一般形として次式を用いる．

$$K^{(\alpha)} = \sum_{(\beta)} Q_{\alpha\beta} \dot{\epsilon}^{(\beta)} \quad (\text{A.16})$$

ここで， $Q_{\alpha\beta}$ は硬化比を表す．せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ の導出において，負荷速度が変化するような場合には，変化直後の解が非常に不安定になる．そこで解の安定性を向上

させるため接線係数法による計算手法が提案されている．詳細は後述に譲るが，同法の導出過程において，硬化発展の時間変化率が必要となる．そこで，この変化率を上式で定義し，抗応力 $K^{(\alpha)}$ はこれを積分して算出する．上式における $\dot{g}^{(\alpha)}$ は次式で表される．

$$\dot{g}^{(\alpha)} = H(\gamma_\alpha) |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| \quad (\text{A.17})$$

ここで， $H(\gamma_\alpha)$ は基準 $\tau - \gamma$ 曲線に対する瞬間の硬化係数である． $H(\gamma_\alpha)$ の具体形として，ここでは純金属に対して提案されている次の現象論的關係を用いる．

$$H(\gamma_\alpha) = h_0 \left(\frac{h_0}{n\tau_0} \gamma_\alpha + 1.0 \right)^{n-1} \quad (\text{A.18})$$

$$\gamma_\alpha = \sum_{(\alpha)} |\gamma^{(\alpha)}| \quad (\text{A.19})$$

h_0 , n , τ_0 は材料定数を表す．なお， $H(\gamma_\alpha)$ については必要に応じて，より微視的な素過程に基づくモデルを導入することができる．

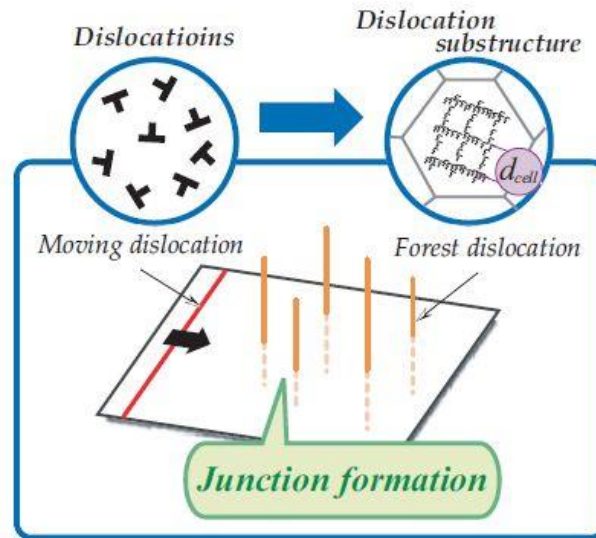


Fig.A.1. Schematic of drag stress model showing dislocation-dislocation interaction, e.g., junction formation as a result of forest cutting alternately leading to cellular substructure evolution specified by cell size.

A.2.1. 硬化比 $Q_{\alpha\beta}$ に対する発展方程式

硬化比 $Q_{\alpha\beta}$ に対する発展方程式を，林転位理論に基づく自己硬化および塑性仕事を反映した潜在硬化，そしてひずみ勾配を考慮した α 項， η 項により次式で定義する．

$$Q_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} + f_{\alpha k} S_{\beta k} + \delta_{\alpha\beta} \{F(\alpha^{(\beta)}) + F(\eta^{(\beta)})\} \quad (\text{no sum on } \beta) \quad (\text{A.20})$$

ここで $f_{\alpha\beta}$ は林転位理論に基づく相互作用マトリクスである。 $S_{\alpha\beta}$ はひずみ履歴の影響を表す履歴マトリクスであり、有効応力による塑性仕事 $(W^p)^*$ の関数として次式を仮定する。

$$S_{\alpha\beta} = \tanh \left[\frac{(W_p)_{\alpha\beta}^*}{(W_p)_{sat}^*} \right] \quad (\text{A.21})$$

ここで $(W_p)_{sat}^*$ は硬化が十分飽和した状態での塑性仕事量を表す。また $(W_p)_{\alpha\beta}^*$ は次式より求める。

$$(W_p)_{\alpha\beta}^* = (\tau^{(\alpha)} - \tau_2^{*(\alpha)}) \cdot \dot{\gamma}^{(\beta)} \quad (\text{2.22})$$

A.2.2. 転位間相互作用のモデル化

結晶のすべり変形に伴い、増殖した転位が結晶粒内に蓄積し、相互作用によって他の転位の運動を阻害することによって結晶が加工硬化することが知られている [A4, A5]。そしてその相互作用の強度は、すべり系同士の幾何学的な位置関係に依存する。FCC 金属におけるすべり系 α と β の上を運動し、蓄積する転位同士の相互作用に基づいて記述できる相互作用のマトリクス $f_{\alpha\beta}$ をTable A.1に示す[A6]。同表では、FCC金属における2組のすべり系上の転位同士の相互作用は6種類に分類されている。同相互作用はそれぞれBurgersベクトル間のなす角によって決まり、固着温度の小さいものから順に、

- (1)自己硬化 (O)
- (2)共線すべり (N; 0°)
- (3)共面すべり (C; 60°)
- (4)Hirth転位を形成 (H; 90°)
- (5)Glissile転位を形成 (G; 60°)
- (6)Lommer-Cottrelの不動転位を形成 (S; 120°)

となる。上分類において、(2)および(3)では接合転位を形成しない。(4)では反応が起こらないが、切り合えばジョグを形成する。しかし、エネルギーの増減は少ないとされている。(5)では互いに接合転位を形成するが、不動転位ではなく可動である。(6)の反応はすべりに対する障害としてLommer-Cottrel不動転位を形成するもので、最

も強い相互作用を示し、すべりに対して障害として最も大きいものとなる。これらの個々の値は潜在硬化試験によって評価されており、本研究ではY. Zhouら[A7]の潜在硬化試験をもとにマトリクス of 値を決定した。

Table A.1 Interaction matrix for dislocation pairs for FCC metals [A6].

	A2	A6	A3	D1	D6	D4	B2	B5	B4	C1	C5	C6
A2	O											
A6	C	O										
A3	C	C	O									
D1	H	G	S	O								
D6	G	N	G	C	O							
D4	S	G	H	C	C	O						
B2	N	G	G	H	S	G	O					
B5	G	H	S	S	H	G	C	O				
B4	G	S	H	G	G	N	C	C	O			
C1	H	S	G	N	G	G	H	G	S	O		
C5	S	H	G	G	H	S	G	N	G	C	O	
C6	G	G	N	G	S	H	S	G	H	C	C	O

SYM

Schmid and Boas	A2	A6	A3	D1	D6	D4	B2	B5	B4	C1	C5	C6
Burgers vectors	$01\bar{1}$	110	101	011	110	$\bar{1}01$	$0\bar{1}1$	$\bar{1}10$	$\bar{1}01$	011	$\bar{1}10$	101
Slip plane	$\bar{1}11$	$1\bar{1}\bar{1}$	$1\bar{1}\bar{1}$	$1\bar{1}1$	$1\bar{1}1$	$1\bar{1}1$	111	111	111	$\bar{1}\bar{1}1$	$1\bar{1}\bar{1}$	$1\bar{1}\bar{1}$

A.2.3. 有効セルサイズについて

従来、結晶塑性レベルの構成式において、組織形成過程や、それに伴い自発的に導入される本質的なスケール(特徴長さ) と、その影響についてはほとんど考慮されていない。これはマクロな硬化挙動に大きく影響するセル組織形成過程については、その定性的な機構でさえ明らかにされていないことと無関係ではない。しかしセル形成は、少なくとも多重すべり条件下での現象であり、接合転位(junction) 形成などの転位間の短範囲相互作用が重要な役割を担っていると考えてよい。メゾスケールでのモデリングや解析の議論では、最低限セルなどの転位組織の発展と、それに伴う本質的なスケールの導入を考慮する必要がある。本モデルでは、有効セルサイズ d_{cell} は硬化比 $Q_{\alpha\beta}$ の二次不変量に基づく平均値の関数とし、次式で仮定する。

$$d_{cell} = f(Q_{\alpha\beta}) = k^* \left(\frac{1}{N} Q_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta} \right)^{1/2} \quad (\text{A.23})$$

ここでは簡単に Q_{mean} の逆数に比例するとおいた。 k^* は比例定数である。また d_{GRAIN} を結晶粒径とし、 $d_{cell} \geq d_{GRAIN}$ ならば $d_{cell} = d_{GRAIN}$ とする。この有効セルサイズは実際のセルサイズとは必ずしも同一ではなく、運動転位に対して結晶粒界と同様、乗り越えることのできない絶対的な障害として働く。

A.2.4. 背応力モデル

背応力 $\Omega^{(\alpha)}$ の定式化では、転位組織形成のモデル化を通じて長範囲的な内部応力場の発展を記述する。一般形として次式が提案されている[A8].

$$\Omega^{(\alpha)} = (\Omega^{(\alpha)})^E + (\Omega^{(\alpha)})^{IN} \quad (\text{A.24})$$

$(\Omega^{(\alpha)})^E$, $(\Omega^{(\alpha)})^{IN}$ はそれぞれ弾性および非弾性成分を表す。前者は転位の堆積に伴う弾性的応力場の発達、後者は結晶粒の拘束などによる不均一変形や結晶粒の回転の影響による不可逆的な抵抗場の発達を表す。本研究では前述のひずみ勾配項を導入することで粒内の不均質性を考慮している。そこで式(A.23) で示した有効セルサイズを用いて前者と後者を1つの構成式で共に表現する。

運動中の転位は粒界等の境界に堆積した転位群から大きな抵抗を受ける。つまり、運動転位は距離に反比例した力を受けることになる。そこで、硬化特性として転位間相互作用を考慮した抗応力 $K^{(\alpha)}$ を想定し、正方向負荷過程では両者の距離(スケール) の関数であるとする。背応力は次式の変化率によって提案される[A8].

$$(\dot{\Omega}^{(\alpha)}) = A \left(\langle d_{cell}^* - \bar{x}_N^{(\alpha)} \rangle + a \right)^{-2} \dot{\bar{x}}_N^{(\alpha)} \quad (\text{A.25})$$

$$(\Omega^{(\alpha)}) = \text{sgn}(\dot{\bar{x}}_N^{(\alpha)}) \int_0^t (\dot{\Omega}^{(\alpha)})^E \left(1 - \frac{K^{(\alpha)}}{K_{sat}} \right) dt \quad (\text{A.26})$$

ここで A は、結晶粒界で堆積した転位群での、互いの転位間にはたらく反発力を表す際に用いられる項で、剛性率 μ として刃状転位の場合は、 $A = \mu b / 2\pi(1 - \nu)$ で表される[A8]. a は式(A.25) 中の分母が0 にならないようにするための打ち切り距離を表す。 a^* を定数とし、 $a = a^* \times d_{cell}$ で表す。また d_{cell}^* は $d_{cell} \equiv 2d_{cell}^*$ とし、障害物の平均サイズとする。 K_{sat} は硬化が十分飽和した状態での抗応力を表す。 $\bar{x}_N^{(\alpha)}$ は転位の平均移動距離とし、スケール因子 l^* を用いて次式のように評価する。

$$\dot{\bar{x}}_N^{(\alpha)} = l^* \cdot \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (\text{A.27})$$

ここで l^* は式(A.9) より形式的に $l^* = 1 / (\rho_m b)$ で与えられ、 $100 \sim 1000 \mu\text{m}$ のオーダーである。

本モデルでは先頭の転位が境界に達すると次の転位が運動を開始するものとし、

簡単のため運動転位間の弾性相互作用は考えないものとする。またセル壁のみを境界と考える。模式図をFig.A.2 に示す。

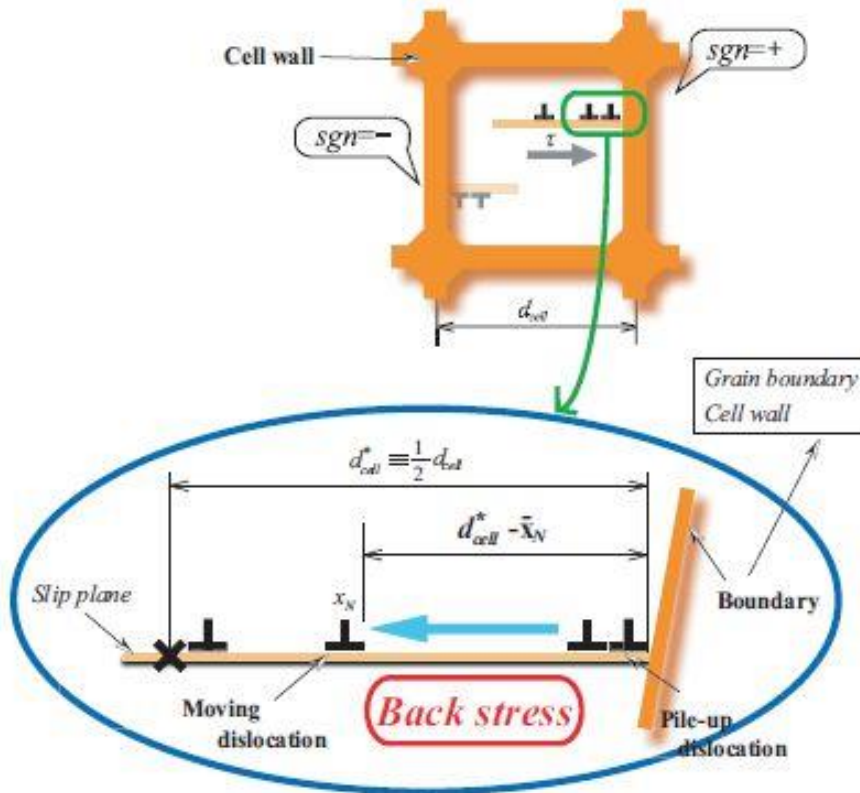


Fig.A.2 Dislocation pile-up model for back stress evolution.

A.2.5. 不適合度テンソル

不適合度テンソルの定義式は、連続体力学におけるひずみの適合条件式そのものであり、ひずみが適合していない度合いを表す。しかしながら、ひずみ自体は適合している必要があり、適合しないのはその弾性あるいは塑性成分である。すなわち、ひずみテンソルを弾性成分と塑性成分の和で表し、それぞれ右辺および左辺に移項すると、各々は有限な値を取り得る。したがって、ここでいう不適合度テンソルとは、弾性ひずみの不適合度かあるいは塑性ひずみの不適合度という意味を持ち、両者には表裏一体の関係がある。

また場の理論では不適合度テンソルに各階層の相互作用を考慮する。微分幾何学的場の理論に基づき、マイクロ変形場およびマクロ変形場の間の相互作用を考える。両場の間の相対変形を考え、両場がAffine 的な意味において共通の座標系で記述さ

れているとすると、その変換テンソルはスケール比を用いて表現することができる。計量レベルでは変形勾配テンソルの相互作用場での式が得られ、これから接続の係数の相互作用場での式が得られる。接続の係数から、ねじれテンソルおよび曲率テンソルの表式がそれぞれ得られる。これらの式より、ねじれテンソルにはマイクロ場とマクロ場の間の相互作用は存在せず、同量の相互作用表示はスケール比を介して両場での曲率テンソルの和で与えられる。これに対し、曲率テンソルには相互作用が存在し、両場それぞれにおける曲率テンソルに加え、相互作用が含まれる。また転位密度テンソルには相互作用項は存在せず、不適合度テンソルには相互作用が存在する。この相互作用項は、塑性ひずみテンソルに対してマイクロ場とマクロ場に関する微分を交互行うことで算出される。すなわち、場のゆらぎを記述する不適合度テンソルには、異なるスケール間で相互作用が生じることを意味しており、場の連携を考える上で考慮すべき重要な視点である。これにより3 スケール以上の場合にも容易に拡張、一般化できる。

A.2.6. ひずみ勾配項の具体形

局所的に大きなひずみが発生するような場合、ひずみ勾配も大きくなり、その影響は無視できなくなる[A4]。またセルなどの微細組織を持つ材料において、微細要素の物理的性質が場所によって大きく変わる場合、材料はもはや単純材料ではなくなり、微細要素の物理的性質が遠隔にある他の要素の物理的性質によって影響を受ける、いわゆる非局所性を持つようになる。そこで本研究では、硬化比 $Q_{\alpha\beta}$ にひずみ勾配項 $F(\alpha^{(\alpha)})$ 、 $F(\eta^{(\alpha)})$ を導入し、ひずみ勾配に基づく非局所作用を表現する。

塑性変形勾配テンソル β^p の1次勾配で表される転位密度テンソル α 、および塑性ひずみテンソル ε^p の2次勾配で表される不適合度テンソル η はそれぞれ次式で表される。

$$\alpha = -\nabla \times \beta^p \quad (\text{A.28})$$

$$\eta = \nabla \times \nabla \times \varepsilon^p \quad (\text{A.29})$$

上式中の α 、 η を各すべり系に分解する。

$$\alpha^{(\alpha)} = \Omega^{\alpha(\alpha)} : \alpha \quad (\text{A.30})$$

$$\eta^{(\alpha)} = \Omega^{\eta(\alpha)} : \eta \quad (\text{A.31})$$

ここで、 $\Omega^{\alpha(\alpha)}$ 、 $\Omega^{\eta(\alpha)}$ は方向テンソルとなり、本研究では、

$$\Omega^{\alpha(\alpha)} = \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)} \quad (\text{A.32})$$

$$\Omega^{\eta(\alpha)} = \mathbf{t}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{(\alpha)} \quad (\text{A.33})$$

とした。ここで $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ 、 $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ はそれぞれすべり方向およびすべり面法線方向の単位ベクトル。 $\mathbf{t}^{(\alpha)}$ は $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ と $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ の外積で与えられる、転位線方向の単位ベクトルである。

転位密度 $\rho_{GN}^{(\alpha)}$ は式(A.34)で表され、平均転位間距離がセルサイズと比例関係にあると仮定することで、セルサイズ $d_{cell}^{\alpha(\alpha)}$ を、比例定数 p_α を用いて式(A.35)のように定義する。

$$\rho_{GN}^{(\alpha)} = \frac{1}{b} \alpha^{(\alpha)} \quad (\text{A.34})$$

$$d_{cell}^{\alpha(\alpha)} = p_\alpha \cdot \rho_{GN}^{(\alpha)} \quad (\text{A.35})$$

基準となる結晶粒径 \bar{k} と式(A.35)のセルサイズ $d_{cell}^{\alpha(\alpha)}$ の比が $F(\alpha^{(\alpha)})$ を与え、次式となる。

$$F(\alpha^{(\alpha)}) = \frac{\bar{k}}{p_\alpha} \left(\frac{|\alpha^{(\alpha)}|}{b} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{A.36})$$

式(A.29)より、転位双極対(dipole)や原子空孔、さらには転位配列など結晶空間における曲率の存在に対応する欠陥密度 $\rho_{defect}^{(\alpha)}$ は次式で表される。

$$\rho_{defect}^{(\alpha)} = \frac{l_{defect}}{b} \eta^{(\alpha)} \quad (\text{A.37})$$

ここで l_{defect} は対象とする欠陥場の特徴長さを表す(転位の場合、 b と一致する)。上記と同様、平均欠陥間隔をセルサイズと比例するものと仮定すると、セルサイズは比例定数を p_η として次式のように与えられる。

$$d_{cell}^{\eta(\alpha)} = p_\eta \cdot \rho_{defect}^{(\alpha)} \quad (\text{A.38})$$

基準となる結晶粒径 \bar{k} と式(A.34)のセルサイズ $d_{cell}^{\eta(\alpha)}$ の比を $F(\eta^{(\alpha)})$ と定義し、次式で表す。

$$F(\eta^{(\alpha)}) = \text{sgn}(\eta^{(\alpha)}) \frac{\bar{k}}{p_\eta} \left(\frac{l_{defect}}{b} |\eta^{(\alpha)}| \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{A.39})$$

A.3. 結晶塑性理論に基づく運動学と構成式

結晶内に生じる主要な塑性変形の様式は、材料の結晶構造によって決まる特定の面における、特定の方向に沿って生じるすべり変形である。このすべり変形は、結晶が外部から受けた力の、すべり面に沿うすべり方向におけるせん断応力成分である分解せん断応力が、臨界値に達した時発生する。

Asaro[A9]は弾塑性変形を受ける単結晶体の変形を次のように考えた。均一な弾塑性変形を受けて変形状態にある単結晶体について、変形勾配 \mathbf{F} は、Fig.A.3に示すように、

結晶格子の伸びと回転を特徴付ける変形勾配 \mathbf{F}^e と、すべり系に沿ったせん断変形を特徴付ける変形勾配 \mathbf{F}^p に弾塑性分解でき、次のように表されるとする。

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^p \quad (\text{A.40})$$

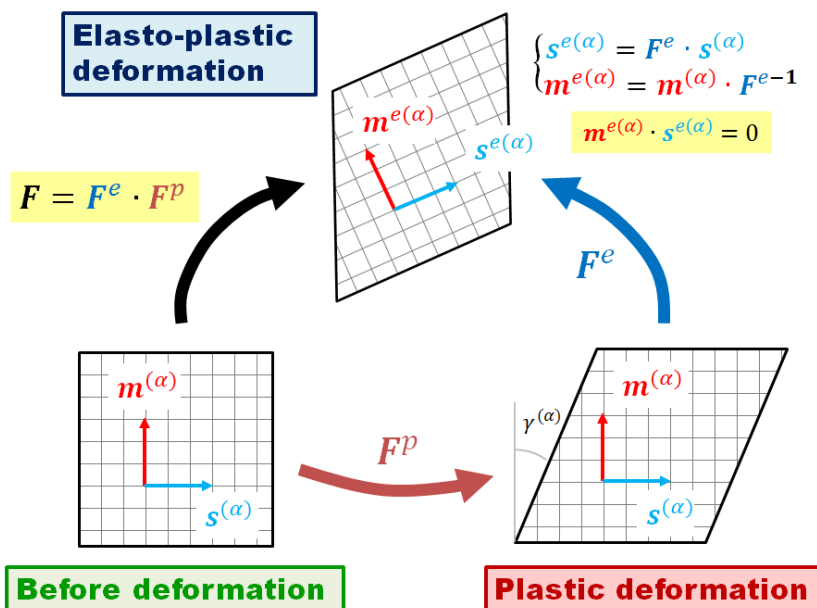


Fig.A.3 Decomposition of deformation gradient tensor \mathbf{F} for crystal plasticity analysis.

図中の $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ はすべり方向の単位ベクトル、 $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ はすべり面に垂直な方向の単位ベクトルである。これらのベクトルは変形後も直交しているため、変形勾配 \mathbf{F} とは次式のような関係をもつ。

$$\mathbf{s}^{e(\alpha)} = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)} \quad (\text{A.41})$$

$$\mathbf{m}^{e(\alpha)} = \mathbf{m}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{F}^{e-1} \quad (\text{A.42})$$

式(A.40)の両辺を時間微分した式を用いることで、現在配置における速度変形勾配 \mathbf{L} は次のように書き直すことができる。

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{F}^{-1} = \dot{\mathbf{F}}^e \cdot \mathbf{F}^{e-1} + \mathbf{F}^e \cdot \dot{\mathbf{F}}^p \cdot \mathbf{F}^{p-1} \cdot \mathbf{F}^{e-1} \quad (\text{A.43})$$

ここで、変形速度テンソル \mathbf{d} およびスピントテンソル $\boldsymbol{\Omega}$ を用いて、 \mathbf{L} を次のように分解

して表現する.

$$\mathbf{L} = \mathbf{d} + \boldsymbol{\Omega} \quad (\text{A.44})$$

ただし, \mathbf{d} および $\boldsymbol{\Omega}$ は, 空間座標 x_i と速度 v_i を用いて, 以下のように定義される.

$$d_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{A.45})$$

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{A.46})$$

さらに, \mathbf{d} および $\boldsymbol{\Omega}$ は, 次のように弾性部分と塑性部分に分解することができる.

$$\mathbf{d} = \mathbf{d}^e + \mathbf{d}^p, \quad \boldsymbol{\Omega} = \boldsymbol{\Omega}^e + \boldsymbol{\Omega}^p \quad (\text{A.47})$$

式(A.47)を式(A.44)に適用し, 式(A.43)と比較することで, 次式が得られる.

$$\mathbf{d}^e + \boldsymbol{\Omega}^e = \dot{\mathbf{F}}^e \cdot \mathbf{F}^{e-1} \quad (\text{A.48})$$

$$\mathbf{d}^p + \boldsymbol{\Omega}^p = \dot{\mathbf{F}}^p \cdot \mathbf{F}^{p-1} \cdot \mathbf{F}^{e-1} \quad (\text{A.49})$$

塑性変形はすべりによってのみ生じると考えると, 現状態において次式が成り立つ.

$$\mathbf{L}^p = \mathbf{d}^p + \boldsymbol{\Omega}^p = \sum_{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \mathbf{m}^{(\alpha)} \quad (\text{A.50})$$

式(A.47), (A.48)および(A.49)を用いることにより, 次のような基準状態に対する塑性の変形勾配 \mathbf{F}^p の発展方程式が得られる.

$$\dot{\mathbf{F}}^p \cdot \mathbf{F}^{p-1} = \sum_{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \mathbf{m}^{(\alpha)} \quad (\text{A.51})$$

式(2.49)の右辺を対称部分と反対称部分に分解することによって次式を得る.

$$\mathbf{d}^p = \sum_{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}^{(\alpha)} \quad (\text{A.52})$$

$$\mathbf{\Omega}^p = \sum_{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{W}^{(\alpha)} \quad (\text{A.53})$$

ここで、 $\mathbf{P}^{(\alpha)}$ と $\mathbf{W}^{(\alpha)}$ はそれぞれ全てのすべり系に対する $\mathbf{s}^{e(\alpha)}\mathbf{m}^{e(\alpha)}$ の対称成分と反対称成分を表すテンソルを表すテンソルであり、次のように定義される。

$$\mathbf{P}^{(\alpha)} = \frac{1}{2}(\mathbf{s}^{e(\alpha)}\mathbf{m}^{e(\alpha)} + \mathbf{m}^{e(\alpha)}\mathbf{s}^{e(\alpha)}) \quad (\text{A.54})$$

$$\mathbf{W}^{(\alpha)} = \frac{1}{2}(\mathbf{s}^{e(\alpha)}\mathbf{m}^{e(\alpha)} - \mathbf{m}^{e(\alpha)}\mathbf{s}^{e(\alpha)}) \quad (\text{A.55})$$

結晶の弾性変形はすべりに影響されないものとする、構成式は次のように表される。

$$\overset{\nabla}{\mathbf{S}}^e = \mathbf{D}^e : \mathbf{d}^e \quad (\text{A.56})$$

上式において、 \mathbf{D}^e は弾性テンソルである。 $\overset{\nabla}{\mathbf{S}}^e$ は結晶格子と共に回転する軸を基準とした Kirchhoff 応力の Jaumann 速度であり、通常の Jaumann 速度 $\overset{\nabla}{\mathbf{S}}$ と以下の関係がある。

$$\overset{\nabla}{\mathbf{S}}^e = \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\Omega}^e \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}^e \quad (\text{A.57})$$

$$\overset{\nabla}{\mathbf{S}} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega} \quad (\text{A.58})$$

ここで、 $\boldsymbol{\sigma}$ は Cauchy の応力テンソルであり、 $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$ は $\boldsymbol{\sigma}$ の物質導関数である。式(A.57)および(A.58)における2つの応力 $\overset{\nabla}{\mathbf{S}}^e$ 、 $\overset{\nabla}{\mathbf{S}}$ の差は、式(A.53)より次のようになる。

$$\overset{\nabla}{\mathbf{S}}^e - \overset{\nabla}{\mathbf{S}} = \sum_{(\alpha)} \boldsymbol{\beta}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (\text{A.59})$$

ここで、 $\boldsymbol{\beta}^{(\alpha)}$ は

$$\boldsymbol{\beta}^{(\alpha)} = \boldsymbol{W}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{W}^{(\alpha)} \quad (\text{A.60})$$

である。式(A.54), 式(A.56)および(A.59)を使って, 応力速度とひずみ速度の関係について, 次の形式の構成式を得る。

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{S}} = \boldsymbol{D}^e : \boldsymbol{d} - \sum_{(\alpha)} \boldsymbol{R}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (\text{A.61})$$

ここで, $\boldsymbol{R}^{(\alpha)}$ は

$$\boldsymbol{R}^{(\alpha)} = \boldsymbol{D}^e : \boldsymbol{P}^{(\alpha)} + \boldsymbol{\beta}^{(\alpha)} \quad (\text{A.62})$$

である。

次に, すべり系 α での分解せん断応力は Schmid 則[A10]で与えられ, 次式のように表わされるものとする。

$$\boldsymbol{\tau}^{(\alpha)} = \boldsymbol{P}^{(\alpha)} : \boldsymbol{\sigma} \quad (\text{A.63})$$

上式の両辺の物質導関数を取ると, 次式のようになる。

$$\dot{\boldsymbol{\tau}}^{(\alpha)} = \dot{\boldsymbol{P}}^{(\alpha)} : \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{P}^{(\alpha)} : \dot{\boldsymbol{\sigma}} \quad (\text{A.64})$$

これはさらに次のように変形できる。

$$\dot{\boldsymbol{\tau}}^{(\alpha)} = \overset{\nabla}{\boldsymbol{P}}^{e(\alpha)} : \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{P}^{(\alpha)} : \overset{\nabla}{\boldsymbol{S}}^e \quad (\text{A.65})$$

$$\dot{\boldsymbol{\tau}}^{(\alpha)} = \overset{\nabla}{\boldsymbol{P}}^{(\alpha)} : \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{P}^{(\alpha)} : \overset{\nabla}{\boldsymbol{S}} \quad (\text{A.66})$$

一方, 式(A.41), (A.42), (A.43)および式(A.54), (A.55)から次式が得られる。

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{P}}^{e(\alpha)} : \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\beta}^{(\alpha)} : \boldsymbol{d}^e \quad (\text{A.67})$$

式(A.65)に式(A.67)を代入すると,

$$\dot{\boldsymbol{\tau}}^{(\alpha)} = \mathbf{P}^{(\alpha)} : \overset{\nabla}{\boldsymbol{S}}^e + \boldsymbol{\beta}^{(\alpha)} : \boldsymbol{d}^e \quad (\text{A.68})$$

さらに，式(A.56)を代入して次式を得る．

$$\dot{\boldsymbol{\tau}}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^{(\alpha)} : \boldsymbol{d}^e \quad (\text{A.69})$$

A.3.1. 接線係数法の導入

式(A.14)に示される構成式は $\boldsymbol{\tau}^{(\alpha)}$ の変化に対し， $\dot{\boldsymbol{\gamma}}^{(\alpha)}$ の変化が指数的に大きくなるため，時間刻みが大きい場合や，特に衝撃荷重を与えた後，静的に変化させるような，変形速度が著しく異なる場合などには，前述の計算はかなり不安定になる．そこで解析の安定性を向上させるために接線係数法を導入する[A11]．

式(A.14)における $\dot{\boldsymbol{\gamma}}^{(\alpha)}$ を現時刻 t と $t + \Delta t$ における値で線形補間して表すと，

$$\Delta \boldsymbol{\gamma}^{(\alpha)} = \left[(1 - \theta) \dot{\boldsymbol{\gamma}}_t^{(\alpha)} + \theta \dot{\boldsymbol{\gamma}}_{t+\Delta t}^{(\alpha)} \right] \Delta t, \quad 0 \leq \theta \leq 1 \quad (\text{A.70})$$

上式の第2項を Taylor 展開して次式を得る．

$$\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{\gamma}}_{t+\Delta t}^{(\alpha)} &= \dot{\boldsymbol{\gamma}}_t^{(\alpha)} + \left. \frac{\partial \dot{\boldsymbol{\gamma}}^{(\alpha)}}{\partial \boldsymbol{\tau}^{(\alpha)}} \right|_t \Delta \boldsymbol{\tau}^{(\alpha)} + \left. \frac{\partial \dot{\boldsymbol{\gamma}}^{(\alpha)}}{\partial K^{(\alpha)}} \right|_t \Delta K^{(\alpha)} \\ &= \dot{\boldsymbol{\gamma}}_t^{(\alpha)} + \dot{\boldsymbol{\gamma}}_t^{(\alpha)} D^{(\alpha)} \Delta t \left(\frac{\boldsymbol{\tau}^{(\alpha)}}{\boldsymbol{\tau}^{(\alpha)}} - \frac{K^{(\alpha)}}{K^{(\alpha)}} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.71})$$

ここで， $D^{(\alpha)}$ は

$$D^{(\alpha)} = B_{SR} \cdot pq \cdot \left(1.0 - \left| \frac{\boldsymbol{\tau}^{(\alpha)}}{K^{(\alpha)}} \right|^p \right)^{q-1} \left| \frac{\boldsymbol{\tau}^{(\alpha)}}{K^{(\alpha)}} \right|^p \quad (\text{A.72})$$

である．式(A.70)に式(A.71)を代入して整理すると，

$$\sum_{(\beta)} N_{\alpha\beta} \Delta\gamma^{(\beta)} = \left(\dot{\gamma}_t^{(\alpha)} + \mathbf{Q}^{(\alpha)} \mathbf{d} \right) \Delta t \quad (\text{A.73})$$

ここで,

$$N_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} + \theta \Delta t \dot{\gamma}_t^{(\alpha)} D^{(\alpha)} \frac{Q_{\alpha\beta} H(\gamma_\beta) \text{sgn}(\tau^{(\beta)})}{K^{(\alpha)}} \quad (\text{A.74})$$

$$\mathbf{Q}^{(\alpha)} = \frac{\theta \Delta t \dot{\gamma}_t^{(\alpha)} D^{(\alpha)}}{\tau^{(\alpha)}} \mathbf{R}^{(\alpha)} \quad (\text{A.75})$$

である. 以上より線形補間された $\gamma_{t+\Delta t}^{(\alpha)}$ は次式で得られる

$$\gamma_{t+\Delta t}^{(\alpha)} = \Delta\gamma^{(\alpha)} / \Delta t \quad (\text{A.76})$$

$N_{\alpha\beta}$ の逆を $M_{\alpha\beta}$ とすると式(A.72)より以下のようになる.

$$\Delta\gamma^{(\alpha)} = \left(\dot{f}^{(\alpha)} + \mathbf{F}^{(\alpha)} : \mathbf{d} \right) \Delta t \quad (\text{A.77})$$

ここで,

$$\dot{f}^{(\alpha)} = \sum_{(\beta)} M_{\alpha\beta} \dot{\gamma}_{old}^{(\beta)} \quad (\text{A.78})$$

$$\mathbf{F}^{(\alpha)} = \sum_{(\beta)} M_{\alpha\beta} \mathbf{Q}^{(\beta)} \quad (\text{A.79})$$

である. 以上より, 式(A.76)を式(A.60)に代入して次の形式の構成式を得る.

$$\overset{\nabla}{\mathbf{S}} = \mathbf{C} : \mathbf{d} - \sum_{(\alpha)} \mathbf{R}^{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)} \quad (\text{A.80})$$

$$\mathbf{C} = \mathbf{D}^e - \sum_{(\alpha)} \mathbf{R}^{(\alpha)} \mathbf{F}^{(\alpha)} \quad (\text{A.81})$$

A.4. 有限要素方程式

大きな塑性変形を伴う弾塑性境界値問題の定式化のために、ここでは現変形状態を基準とした Updated Lagrange 法を用いる。現変形状態の物体の体積を V 、表面積を A 、 A の一部 A_t 上で単位面積当りに作用する表面力を R_i とし、残りの A_u 上では、変位速度 v_i が与えられているものとする。物体力が作用しないとすると、仮想仕事の原理式は次のようになる[A12].

$$\int_V \dot{\pi}_{ji} \delta v_{i,j}^* dV = \int_{A_t} \dot{R}_i \delta v_i^* dA \quad (\text{A.82})$$

ここで、 $\dot{\pi}_{ji}$ は公称応力速度であり、 $(\)_{,j}, (\dot{\ })$ はそれぞれ $(\)$ の現座標による偏微分 $\partial(\) / \partial x_j$ および $(\)$ の物質導関数である。また、 δv_i^* は A_u 上で零となる仮想変位速度を表す。公称応力速度 $\dot{\pi}_{ji}$ は Kirchhoff 応力の Jaumann 速度 $\overset{\nabla}{S}_{ij}$ を用いて次のように表すことができる。

$$\dot{\pi}_{ji} = \overset{\nabla}{S}_{ij} - F_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl} + \sigma_{mj} v_{i,m} \quad (\text{A.83})$$

$$F_{ijkl} = \frac{1}{2} (\sigma_{ij} \delta_{ki} + \sigma_{kj} \delta_{li} + \sigma_{li} \delta_{kj} + \sigma_{ki} \delta_{lj}) \quad (\text{A.84})$$

また、前節で示した構成式(A.80)を成分表示すると以下のようなになる。

$$\overset{\nabla}{S}_{ij} = C_{ijkl} d_{kl} - \sum_{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)} R_{ij}^{(\alpha)} \quad (\text{A.85})$$

式(A.83)に式(A.85)を代入すると、次のようになる。

$$\dot{\pi}_{ji} = (C_{ijkl} - F_{ijkl}) d_{kl} - \sum_{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)} R_{ij}^{(\alpha)} + \sigma_{mj} v_{i,m} \quad (\text{A.86})$$

式(A.82)中の $\dot{\pi}_{ji} \delta v_{i,j}^*$ は式(A.86)より次のようになる。

$$\begin{aligned} \dot{n}_{ji} \delta v_{i,j}^* &= (C_{ijkl} - F_{ijkl}) d_{kl} \delta d_{ij}^* - \sum_{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)} R_{ij}^{(\alpha)} \delta d_{ij}^* \\ &\quad + \sigma_{mj} v_{i,m} \delta d_{ij}^* \end{aligned} \quad (\text{A.87})$$

式(A.87)を式(A.82)に代入すると次式を得る.

$$\begin{aligned} &\int_V \{ \delta d_{ij}^* (C_{ijkl} - F_{ijkl}) d_{kl} + \delta v_{i,j}^* \sigma_{mj} v_{i,m} \} dV \\ &= \int_{A_t} \delta v_i^* \dot{R}_i dA + \int_V \sum_{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)} \delta d_{ij}^* R_{ij}^{(\alpha)} dV \end{aligned} \quad (\text{A.88})$$

上式をマトリクス形式へ改めるため、座標系 x_i の代わりに直交座標系 (x, y, z) 系を導入し、次の記号を用いる.

$$\left. \begin{aligned} \{\sigma\} &= [\sigma_{xx} \ \sigma_{yy} \ \sigma_{zz} \ \sigma_{xy} \ \sigma_{yz} \ \sigma_{zx}]^T \\ \{d\} &= [d_{xx} \ d_{yy} \ d_{zz} \ 2d_{xy} \ 2d_{yz} \ 2d_{zx}]^T \\ \{\dot{R}\} &= [\dot{R}_x \ \dot{R}_y \ \dot{R}_z]^T \\ \{V\} &= [V_x \ V_y \ V_z]^T \\ \{q\} &= [v_{x,x} \ v_{y,y} \ v_{z,z} \ v_{x,y} \ v_{x,z} \ v_{y,x} \ v_{y,z} \ v_{z,x} \ v_{z,y}]^T \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.89})$$

式(A.87)に式(A.88)の表示を導入し、マトリクス表示すると次式を得る

$$\begin{aligned} &\int_V [\delta \{d^*\}^T ([C] - [F]) \{d\} + \delta \{q^*\}^T [Q] \{q\}] dV \\ &= \int_V \sum_{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)} \delta \{d^*\}^T [R^{(\alpha)}] dV + \int_{A_t} \delta \{v^*\}^T [\dot{R}] dA \end{aligned} \quad (\text{A.90})$$

上式において、 $[C]$ 、 $[F]$ および $[Q]$ はそれぞれ C_{ijkl} 、 F_{ijkl} および σ_{mj} に対応するマトリクスである。ここで、任意の要素内の変位速度 $\{v\}$ を要素の節点における変位速度 $\{\delta\}$ と

形状関数 $[\phi]$ との線形結合によって次のように表示する.

$$\{v\} = [\phi]\{\delta\}, \quad \{\delta\} = [\{v^1\}^T \{v^2\}^T \dots \{v^{Ne}\}^T]^T \quad (\text{A.91})$$

ここで, $\{v^N\}^T = (v_x^N \ v_y^N \ v_z^N)$ は, 節点 N における変位速度成分を表す. 要素内のひずみ速度 $\{d\}$ および変位速度勾配 $\{q\}$ は, 節点変位速度 $\{\delta\}$ を用いて次のように表すことができる.

$$\{d\} = [B]\{\delta\}, \quad \{q\} = [E]\{\delta\} \quad (\text{A.92})$$

式(A.91), (A.92)を式(A.90)に代入することにより, 1つの要素に対する仮想仕事の原理式が次のように得られる.

$$\begin{aligned} \delta\{\delta^*\}^T &= \left[\int_V \{[B]^T([C] - [F])[B] + [E]^T[Q][E]\}dV \cdot \{\delta\} \right. \\ &\quad \left. - \int_V \sum_{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)}[B]^T[R^{(\alpha)}]dV - \int_{A_t} [\phi]^T\{\dot{R}\}dA \right] = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.93})$$

任意の $\delta\{\delta^*\}$ に対して式(A.93)を満足するためには, 次式が成立しなければならない.

$$[K]\{\delta\} = \{\dot{f}\} + \{\dot{g}\} \quad (\text{A.94})$$

$$\left. \begin{aligned} [K] &= \int_V \{[B]^T([C] - [F])[B] + [E]^T[Q][E]\}dV \\ \{\dot{f}\} &= \int_{A_t} [\phi]^T\{\dot{R}\}dA \\ \{\dot{g}\} &= \int_V [B]^T \sum_{(\alpha)} \dot{f}^{(\alpha)}[R^{(\alpha)}]dV \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.95})$$

これは, 1つの要素に対する要素剛性方程式を表す.

付録 A 参考文献

- [A1] M. A. Meyers, "Dynamic Behavior of Materials", Wiley Interscience, 1994.
- [A2] 仲町英治, 播本将英, 平岩幸二郎, 森本秀夫, "新硬化・軟化発展方程式に基づく FCC 単結晶塑性変形問題の弾結晶粘塑性有限要素解析", 日本機械学会論文集 A 編, vol. 66, no. 643, pp. 448-453, 2000.
- [A3] 仲町英治, "多結晶体の成形過程シミュレーション", 塑性と加工, vol. 37, no. 424, pp. 477-484, 1996.
- [A4] 大橋鉄也, "転位過程のモデル化と塑性解析", 塑性と加工 vol. 37, no. 424, pp. 451-459, 1996.
- [A5] 大橋鉄也, "FCC 双結晶に生じる不均一多重すべりの計算機シミュレーション", 日本金属学会誌, vol. 51, no. 1, pp. 37-43, 1987.
- [A6] J. L. Bassani and T. Y. Wu, "Latent Hardening in Single Crystals-II. Analytical Characterization and Predictions," *Proc. R. Soc. Lond. A* vol. 435, pp.21-41, 1991
- [A7] Y. Zhou, K. W. Neale and L. S. Toth, "A Modified Model for Simulating Latent Hardening During the Plastic Deformation of Rate-Dependent FCC Polycrystal", *Inter. J. Plasticity*, vol. 9, no. 8, 961-978, 1993.
- [A8] T. Hasebe and Y. Imaida, "Gauge Field Theory of Dislocations and the Non Riemannian Plasticity" *Maters. Process. Technol.*, vol. 3, 1077-1082, 1999.
- [A9] R. J. Asaro, "Crystal Plasticity", *J. Appl. Mech.*, vol. 50, pp. 921-933, 1983.
- [A10] 加藤雅治, "入門転位論", 裳華房, 2002.
- [A11] D. Peirce, C. F. Shih and A. Needleman, "A Tangent Modulus Method for Rate-Dependent Solids", *Comput. & Struct.* vol. 18, no. 5, 875-887, 1984.
- [A12] 富田佳宏, "数値弾塑性力学-有限要素シミュレーションの基礎と応用-", 養賢堂, 1990.

謝辞

本論文は、著者が神戸大学大学院工学研究科在籍時に表面・界面工学研究室（現 構造機能材料学研究分野）にて、長谷部忠司准教授のご指導のもとでの研究成果をまとめたものです。研究を遂行するにあたり、数え切れない人々のお世話になりました。以下に挙げますのは、そのほんの一部となりますが、下記に示すことができなかつた多数の人々に対しても感謝の意を表します。

日頃の研究活動全般においてご指導およびご教授いただき、研究を遂行するための知見を与え、研究に対する姿勢を示してくださった長谷部忠司准教授に深く感謝いたします。先生のご助力のおかげで本論文の執筆まで到達できました。重ねてお礼を申し上げます。

日頃の研究報告会で貴重なご助言をいただき、著者の博士後期課程への進学や、就職活動等、学生生活の要所々々で応援してくださりました田中克志教授に深く感謝いたします。

本論文をご校閲いただき、貴重なご助言をいただきました向井敏司教授に深く感謝いたします。

学生生活や進路等について多くの助言をしてくださり、研究活動以外に関しても面倒を見ていただいた寺本武司助教授にお礼申し上げます。

著者が研究を始めた頃に、様々な指導および活発な議論も行ってくださった児島信彦氏（現 株式会社小糸製作所）に御礼申し上げます。

研究活動を温かく見守っていただき、ご助言いただいた松原康隆氏を始めとする表面・界面工学研究室の諸先輩方、また著者が博士前期課程在籍時まで同輩として互いに励まし合い、切磋琢磨しました北野峻大君（現 日立造船株式会社）、宮元綜史君（現 日本電産株式会社）、河合紀明君（現 東レ株式会社）、黄瀬真人君（現 株式会社デンロコーポレーション）、松浦亮君（現 ダイキン工業株式会社）、山田和樹君に感謝いたします。

最後に、著者の博士号取得を応援してくださった両親に最大限の感謝を申し上げます。

2021年1月 井原史朗

神戸大学博士論文「FTMP 場の理論に基づく離散転位系の連続像」全 135 頁

提出日 2021年1月22日

本博士論文が神戸大学機関リポジトリ **Kernel** にて掲載される場合、掲載登録日（公開日）はリポジトリの該当 ページ上に掲載されます。

© 著者 井原史朗

本論文の内容の一部あるいは全部を無断で複製・転載・翻訳することを禁じます。