

10 結晶塑性

10.1. 結晶構造および結晶方位

10.1.1. 結晶とすべり系

原子が規則的に配列したものを結晶 (crystal) と言う。金属材料は結晶が多数集まった集合体であり、多結晶体 (polycrystal) と呼ばれる。図 10.1 に光学顕微鏡による結晶粒の観察例を示す。ここで、図中の細線は結晶粒界であり、これを境に原子配列の向きが変化する (原子配列の規則性は同じである)。工業用金属の多くは、面心立方構造 (fcc: face centered cubic)、体心立方構造 (bcc: body centered cubic)、最密六方構造 (hcp: hexagonal closed pack) のいずれかに分類される。それぞれの結晶構造を図 10.2 に示す。金属が弾性変形する場合は、原子間距離が伸縮する。一方、塑性変形する場合は、図 10.3 に示すようにある原子との結合がいったん剥がれ、別の原子と結合する。この現象が連続的に起こると、結晶は特定の面の特定の方向へすべり運動する。ここで、特定の面をすべり面、特定の方向をすべり方向と言い、それらを合わせてすべり系 (slip system) と呼ぶ。すべり変形を数理モデルで表した理論を結晶塑性モデル (crystal plasticity model) と言い、本章で詳細に説明する。

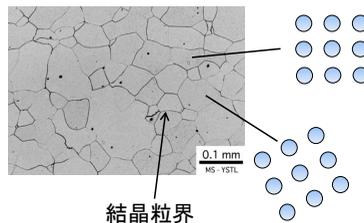


図 10.1 結晶粒と原子配列

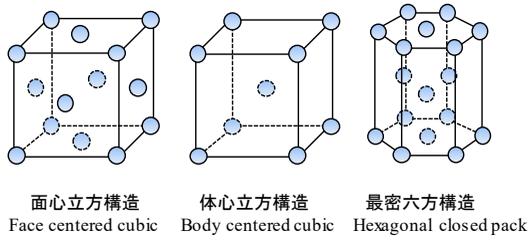


図 10.2 結晶構造と原子配列

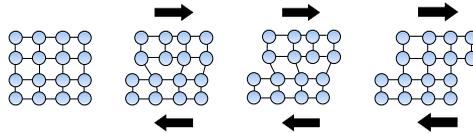


図 10.3 転位によるすべり変形

10.1.2. Miller 指数

結晶の中の面や方向を表すために Miller 指数 (Miller index) を用いることがある。面を (hkl) ，方向を $[uvw]$ のように表す。この時，結晶の軸を座標軸として，次のように定義する。

(hkl)	面と各座標軸の交点の逆数の最小整数比
$[uvw]$	原点を通る直線上の座標値の最小整数比

図 10.4 に Miller 指数による面の表し方を示す。中央の図に示すように，平行な面は全て同じ Miller 指数によって表される。また，右図に示す通り， (010) 面と (020) 面は平行であるが，その周期性に相違がある。Miller 指数による方向の表し方を図 10.5 に示す。図中の \overline{OA} と \overline{OB} のように大きさが異なっても，その方向は $[121]$ である。これらと同じ向きであれば， \overline{CD} のように原点を通過していても， $[121]$ と表される。

立方晶において， (100) ， (010) ， (001) の面は結晶構造の対称性を考慮すると等価

である。そのような等価な面や方向をまとめて以下のように示す。

等価な面 : $\{hkl\}$

等価な方向 : $\langle uvw \rangle$

(例) : $\{111\} = \{(111), (\bar{1}11), (1\bar{1}1), (11\bar{1})\}$

$\langle 101 \rangle = \langle [110], [101], [011], [1\bar{1}0], [10\bar{1}], [01\bar{1}] \rangle$

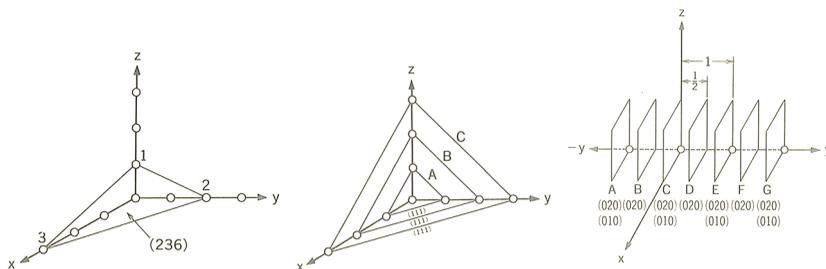


図 10.4 Miller 指数による面の表し方

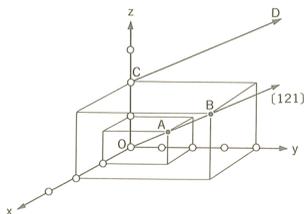


図 10.5 Miller 指数による方向の表し方

結晶の面や方向を表すこととは別に、Miller 指数によって結晶方位を表すことがある。いくつかの流儀があるので注意が必要である。一つ目は、結晶方位が $\{hkl\} \langle uvw \rangle$ と表記された場合は、 $\{hkl\}$ 面の法線方向が板厚方向（板面法線方向）に、 $\langle uvw \rangle$ 方向が圧延方向に一致する結晶方位を意味する。二つ目は、集合組織を表記する際に $\langle uvw \rangle$ と表す。 $\langle uvw \rangle$ がある特定の方向（圧延方向、板厚方向、引抜方向など）にそろっていることを意味する。

次に、結晶座標系を \bar{x}_i とし、基底ベクトルを \bar{e}_i とする。 (hkl) 面の単位法線ベ

クトルを \mathbf{m} とすると、 $\mathbf{m} = \bar{m}_i \bar{\mathbf{e}}_i$ と表せる。 \bar{m}_i は Miller 指数によって次のように与えられる（導出過程は 10.1.10. 付録に示す。）。

$$\bar{m}_1 = \frac{h}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}, \quad \bar{m}_2 = \frac{k}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}, \quad \bar{m}_3 = \frac{l}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}. \quad (10.1)$$

Miller 指数を用いて、 $[uvw]$ と方向が指定される時、その方向の単位ベクトル $\mathbf{s} = \bar{s}_i \bar{\mathbf{e}}_i$ は次のように与えられる。

$$\bar{s}_1 = \frac{u}{\sqrt{u^2+v^2+w^2}}, \quad \bar{s}_2 = \frac{v}{\sqrt{u^2+v^2+w^2}}, \quad \bar{s}_3 = \frac{w}{\sqrt{u^2+v^2+w^2}}. \quad (10.2)$$

すべり面 $(h \ k \ l)$ の面内にすべり方向 $[uvw]$ があるため、 \mathbf{m} と \mathbf{s} は直交する。 \mathbf{m} と \mathbf{s} の角度 θ_{ms} は、ベクトルの内積より求められる。

$$\cos \theta_{ms} = \frac{hu + kv + lw}{\sqrt{(h^2+k^2+l^2)(u^2+v^2+w^2)}}. \quad (10.3)$$

したがって、上式の分子が零 ($hu + kv + lw = 0$) の場合、 $\theta_{ms} = 90^\circ$ であり、すべり面の法線方向とすべり方向は直交する。 θ_{ms} を計算することで、 \mathbf{m} 、 \mathbf{s} が正しく求められたか確認できる。

図 10.6 に示すように fcc 結晶の場合、すべり面は $\{111\}$ 、すべり方向は $\langle 110 \rangle$ である。つまり、最密面がすべり面で、最密方向がすべり方向である。すべり面の間隔 a とパーガスベクトルの大きさ b の比 b/a が小さいほど、転位を運動させるのに必要なせん断応力（パイエルス応力）は小さくなる。そのため、最密面がすべり面となり、最密方向がすべり方向となることが理論的に導出できる¹。なお、実験的にも $\{111\} \langle 110 \rangle$ の 12 個のすべり系が確認されている。

一方、bcc 構造では、最密面は $\{110\}$ で、最密方向は $\langle 111 \rangle$ である。そのため、 $\{110\} \langle 111 \rangle$ の 12 個のすべり系が活動する。Fe に関しては、それ以外にも $\{112\} \langle 111 \rangle$ の 12 個、 $\{123\} \langle 111 \rangle$ の 24 個のすべり系の活動が実験的に確認されている。図 10.7 にこれらのすべり系を図示する。

¹ 例えば、加藤雅治：入門転位論，裳華房。木村宏：材料高度の考え方，アグネ技術センター，に詳しく書かれている。

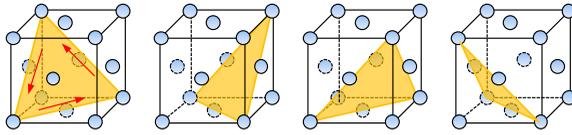


図 10.6 fcc 結晶の $\{111\}\langle 110\rangle$ すべり系

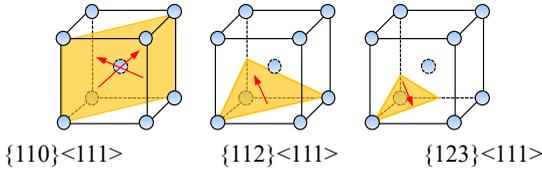


図 10.7 bcc 結晶のすべり系

10.1.3. 正極点図

結晶方位を表すために特定の結晶面の向きを図示したものを極点図 (pole figure) または正極点図と言う. $\{hkl\}$ 面の法線方向をステレオ投影して極点図を作成する方法を示す. $\{hkl\}$ 面の法線方向を示す単位ベクトルを \mathbf{a} とし, \mathbf{a} の成分は既知とする. 圧延方向 (RD), 圧延直角方向 (TD), 板厚方向 (ND) をそれぞれ $\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3$ 座標軸と一致させる. 図 10.8 に示すように \mathbf{a} と半径 1 の球面の交点を点 Q とする. 南極と点 Q を通る直線を描き, それと北極に接している投影面との交点を点 P とする. さらに, 図に示すように角度 ϕ' , ϕ を定義する. 投影面上の点 P の座標を (X, Y) とする. 図形の相似性より, $X:Y = \hat{a}_1:\hat{a}_2$ であるので, 相似比を r として次の関係式を得る.

$$X = r\hat{a}_1, \quad Y = r\hat{a}_2, \quad R = \sqrt{X^2 + Y^2} = r\sqrt{\hat{a}_1^2 + \hat{a}_2^2} \quad (10.4)$$

\hat{a}_1, \hat{a}_2 は既知なので, r を求めれば, 点 P の座標 (X, Y) を決定できる. まず, \mathbf{a} の成分 $(\hat{a}_1 \hat{a}_2 \hat{a}_3)$ を用いて ϕ' を求める.

$$\phi' = \text{Arc tan} \frac{\hat{a}_3}{\sqrt{\hat{a}_1^2 + \hat{a}_2^2}} \quad (10.5)$$

南極—原点—点 Q からなる二等辺三角形の幾何学的関係より, ϕ を求める.

$$\phi = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{2} - \phi' \right) \quad (10.6)$$

ϕ は北極-南極一点 P の角度を表していることを考慮して、 R を求める。

$$R = 2 \tan \phi \quad (10.7)$$

式(10.5)~式(10.7)を整理すると、相似比 r は次式のように表せる。

$$r = \frac{2 \tan \phi}{\sqrt{\hat{a}_1^2 + \hat{a}_2^2}}, \quad \phi = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{2} - \text{Arctan} \frac{\hat{a}_3}{\sqrt{\hat{a}_1^2 + \hat{a}_2^2}} \right) \quad (10.8)$$

式(10.8)と式(10.4)より、ステレオ投影された点 P の座標 (X, Y) を求められる。この時、 (X, Y) は半径 2 の円の内部の点である。このように北極側に投影した図を正の半球 (positive hemisphere) の極点図と言い、 $0 \leq \phi' \leq \pi/2$ の範囲となる。南極側へ投影した図は負の半球 (negative hemisphere) の極点図と言う。このように正と負の半球を使い分けることもあるが、一方、全てを正の半球に図示することもある。すなわち、ベクトル \mathbf{a} が $\pi/2 \leq \phi' \leq \pi$ の向きであった場合、 \mathbf{a} の代わりに $-\mathbf{a}$ を用いることで、極点を正の半球に図示できる。そもそも結晶の面に表と裏の区別がないので、多結晶体の集合組織を表すような場合は全てを正の半球に図示すればよい。図 10.9 には $\{100\}$ 面に関する正の半球の極点図を示す。

極点図は特定の面の向きを 2 次元平面に表した図であり、結晶面の向きは把握できる。しかし、 \mathbf{a} の周りの回転は図に反映されず、結晶方位を完全には表していないことに注意が必要である。

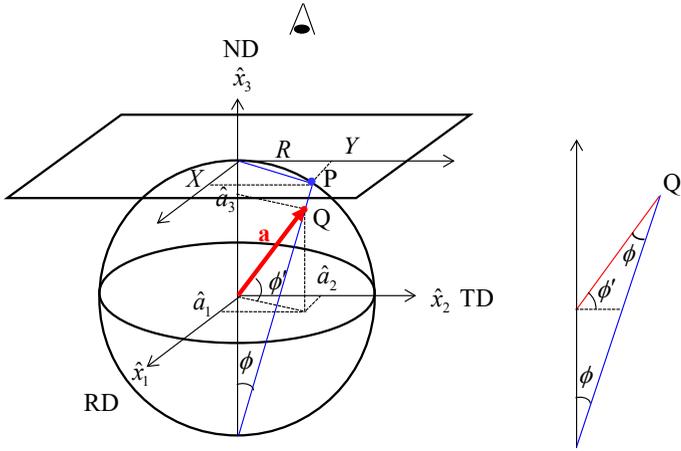


図 10.8 ステレオ投影

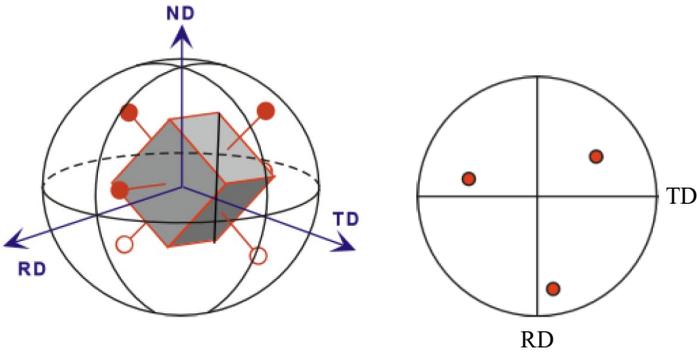


図 10.9 $\{100\}$ 面の正の極点図

アルミニウムや銅のような fcc 結晶においては、 $\{111\}$ 面の極点図を用いることが一般的である。結晶構造の対称性より、 $\{111\}$ 面は $(111), (\bar{1}11), (1\bar{1}1), (11\bar{1})$ の 4 面を含む。まず、それぞれの面の法線ベクトル \mathbf{a} を求める。ここで、面心立方構造の場合、 $\{111\}$ 面の法線方向はすべり面の法線ベクトル $\mathbf{m}^{(a)}$ である。そこで、12 個の $\mathbf{m}^{(a)}$ の中から 4 つを選んで $\mathbf{a} = \mathbf{m}^{(a)}$ とすればよい。なお、選択された $\mathbf{m}^{(a)}$ が $m_3^{(a)} < 0$ で負の半球側を向いていることがあるが、ここでは面の正負の区別は

ないので、 $\mathbf{a} = -\mathbf{m}^{(\alpha)}$ として正の半球側を向くベクトルとす。この操作を行うと、常に $0 \leq \phi \leq \pi/2$ となる。

体心立方構造においては、 $\{110\}$ 面の極点図が用いられることが多い。結晶構造の対称性より、 $\{110\}$ 面は $(110), (101), (011), (1\bar{1}0), (10\bar{1}), (01\bar{1})$ の6面からなる。 $\{110\}$ 面はすべり面なので、単位法線ベクトル $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ と一致する。そこで、 $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ の中から6つを選んで、 $\mathbf{a} = \mathbf{m}^{(\alpha)}$ とする。なお、 $m_3^{(\alpha)} < 0$ の場合は、 $\mathbf{a} = -\mathbf{m}^{(\alpha)}$ とする。

上記以外の面の極点図を描く場合、結晶座標の基底 $\bar{\mathbf{e}}_i$ を用いて、任意の単位法線ベクトル \mathbf{a} を作ればよい。

10.1.4. 逆極点図

極点図（または正極点図）では材料座標系を基準として特定の結晶面の方位を表していた。これに対して、結晶座標系を基準として特定の方向を表した図を逆極点図（inverse pole figure）と言う。特定の方位として、圧延方向、板厚方向、または引張方向などが一般的である。

逆極点図の作成方法は極点図のそれと類似している。図 10.10 に示すように結晶座標系 \bar{x}_i に関して特定の方向を単位ベクトル \mathbf{a} で表す。この時、極点図と同じ方法によって点 P の座標 (X, Y) を求めることができる。なお、図中の ϕ' 、 β と \mathbf{a} の関係は次のようになる。

$$\phi' = \text{Arctan} \frac{\bar{a}_3}{\sqrt{\bar{a}_1^2 + \bar{a}_2^2}} \quad (10.9)$$

$$\beta = \text{Arctan} \frac{\bar{a}_2}{\bar{a}_1} \quad (10.10)$$

ここで、 $\bar{a}_3 < 0$ の場合は、事前に $\mathbf{a} = -\mathbf{a}$ としておく。したがって、 $0 \leq \phi' \leq \pi/2$ の範囲である。一方、 $0 \leq \beta \leq 2\pi$ の範囲なので、Fortran では DATAN2(a_2, a_1)を用いて計算する ($-\pi/2 \leq \text{DATAN} \leq \pi/2$ 、 $-\pi \leq \text{DATAN2} \leq \pi$ である)。

立方晶を $[100]$ 軸の周りに $\pi/2, \pi, 3\pi/2$ だけ回転させても、結晶構造は不変である。立方晶にはこのような対称性が24個ある。この対称性を考慮すると、逆極点図は図 10.11 に示すように24個の領域に分割される。つまり、ある結晶方位に対して対称性を考慮すると24通りの方位が導出できる。それらの逆極点を

求めるとそれぞれが 24 個の領域に一つずつ図示される。言い換えると、ある結晶方位を表すのに 24 個もの領域は不要で、どれか一つの領域で表すことができる。そのような領域を基準ステレオ三角形と呼ぶ。

まず、ベクトル \mathbf{a} に対する ϕ' 、 β を計算し、その極点が基準ステレオ三角形の範囲に入っているか確認する。入っていない場合は、対称性を考慮して \mathbf{a} に回転を加える。それを繰り返すことで、基準ステレオ三角形に対する \mathbf{a} および ϕ' 、 β が得られる。

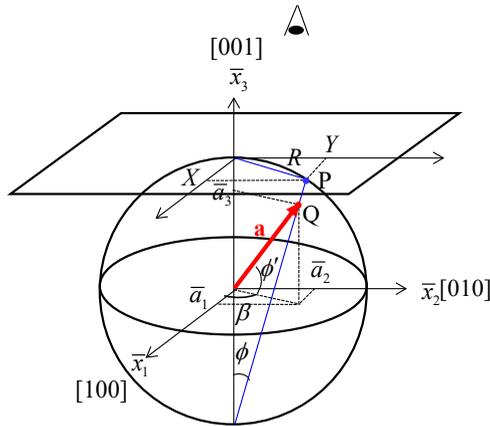


図 10.10 逆極点図

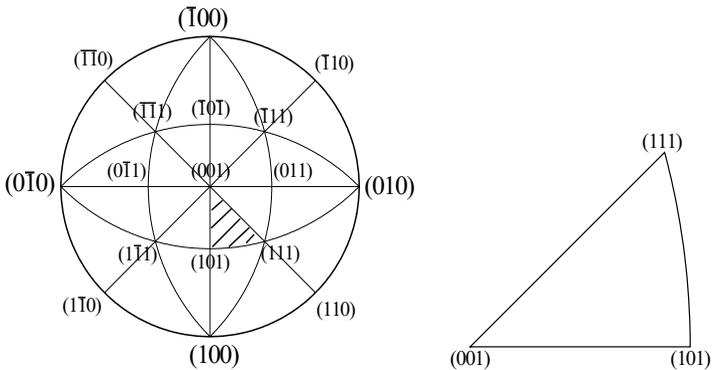


図 10.11 立方晶の逆極点図

立方晶の対称性を詳しく示しておく. 24通りの回転対称性を図 10.12 に示す. まず, 各結晶軸の周りに 4 回回転対称である. つまり, 各結晶軸の周りに $\pi/2$, π , $3\pi/2$ の回転を加えても等価であり, 9 通りの対称性がある. 次は, $[011]$, $[101]$, $[\bar{1}10]$, $[10\bar{1}]$, $[0\bar{1}\bar{1}]$ 軸の周りに 2 回回転対称 (π 回転) であり, 6 通りある. 最後は, $[111]$, $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$, $[1\bar{1}\bar{1}]$, $[\bar{1}1\bar{1}]$ の周りに 3 回回転対称 ($2\pi/3$, $4\pi/3$) であり, 8 通りである. これらに回転を加えてない元の状態を足し合わせると 24 通りの対称性が得られる.

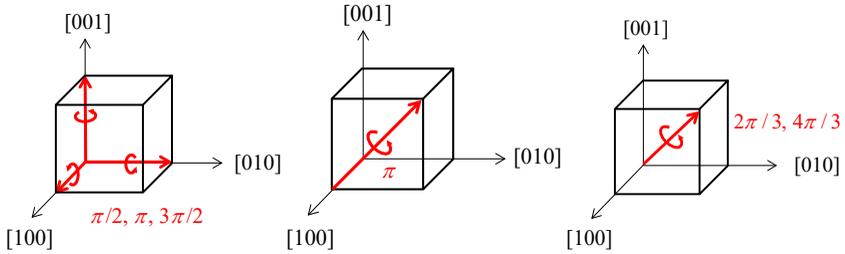


図 10.12 立方晶の回転対称性

ベクトル \mathbf{a} を単位ベクトル \mathbf{n} の周りに ω 回転することを考える. この時, Rodrigues の回転公式を用いると, 回転を表す直交テンソル \mathbf{R} は次のように書ける.

$$\mathbf{R} = \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \cos \omega + (\mathbf{I} \times \mathbf{n}) \sin \omega \quad (10.11)$$

$$\bar{R}_{ij} \bar{\mathbf{e}}_i \otimes \bar{\mathbf{e}}_j = \{ n_i n_j + (\delta_{ij} - n_i n_j) \cos \omega + \varepsilon_{ijk} n_k \sin \omega \} \bar{\mathbf{e}}_i \otimes \bar{\mathbf{e}}_j \quad (10.12)$$

$$\left[\begin{array}{c} \bar{R} \\ \bar{R} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{ccc} n_1^2 + (1 - n_1^2) \cos \omega & n_1 n_2 (1 - \cos \omega) + n_3 \sin \omega & n_1 n_3 (1 - \cos \omega) - n_2 \sin \omega \\ n_1 n_2 (1 - \cos \omega) - n_3 \sin \omega & n_2^2 + (1 - n_2^2) \cos \omega & n_2 n_3 (1 - \cos \omega) + n_1 \sin \omega \\ n_1 n_3 (1 - \cos \omega) + n_2 \sin \omega & n_2 n_3 (1 - \cos \omega) - n_1 \sin \omega & n_3^2 + (1 - n_3^2) \cos \omega \end{array} \right] \quad (10.13)$$

\mathbf{R} によって $\mathbf{a} (= \bar{a}_i \bar{\mathbf{e}}_i)$ を $\mathbf{a}' (= \bar{a}'_i \bar{\mathbf{e}}_i)$ に変換する計算は以下のものである.

$$\mathbf{a}' = \mathbf{R} \cdot \mathbf{a} \quad (10.14)$$

$$\bar{a}'_i = \bar{R}_{ij} \bar{a}_j \quad (10.15)$$

\bar{a}'_i は \mathbf{a}' の回転前の結晶座標系の成分である. 立方晶に対する回転テンソルの成分 \bar{R}_{ij} を **図 10.13** に示す.

cubic branch

1	0	0	0	0	-1
0	1	0	0	-1	0
0	0	1	-1	0	0
0	0	1	0	0	1
1	0	0	0	-1	0
0	1	0	1	0	0
0	1	0	0	0	1
0	0	1	0	1	0
1	0	0	-1	0	0
0	-1	0	0	0	-1
0	0	1	0	1	0
-1	0	0	1	0	0
0	-1	0	-1	0	0
0	0	-1	0	0	-1
1	0	0	0	-1	0
0	1	0	1	0	0
0	0	-1	0	0	-1
-1	0	0	0	1	0
0	0	-1	1	0	0
1	0	0	0	0	1
0	-1	0	0	-1	0
0	0	-1	-1	0	0
-1	0	0	0	0	1
0	1	0	0	1	0
0	0	1	0	-1	0
-1	0	0	-1	0	0
0	-1	0	0	0	-1
0	0	1	0	0	0
-1	0	0	-1	0	0
0	-1	0	0	0	-1
-1	0	0	0	1	0
0	1	0	-1	0	0
0	0	-1	0	0	1
-1	0	0	0	1	0
0	-1	0	1	0	0
0	0	1	0	0	-1
1	0	0	0	-1	0
0	-1	0	1	0	0
0	0	-1	0	0	1
23					

432

hexagonal branch

1	0	0			
0	1	0			
0	0	1			
-1	a	0			
-a	-1	0			
0	0	1			
-1	-a	0			
a	-1	0			
0	0	1			
3					
.5	a	0			
-a	.5	0			
0	0	1			
-1	0	0			
0	-1	0			
0	0	1			
.5	-a	0			
a	.5	0			
0	0	1			
6					
-1	0	0			
0	-1	0			
0	0	-1			
1	0	0			
0	-1	0			
0	0	-1			
-1	a	0			
a	.5	0			
0	0	-1			
.5	a	0			
a	-1	0			
0	0	-1			
-1	0	0			
0	1	0			
0	0	-1			
.5	-a	0			
-a	.5	0			
0	0	-1			
622					

(a) 立方晶

(b) 六方晶

図 10.13 回転テンソルの成分

六方晶においては、12通りの対称性がある。図10.14に示すようにc軸の周りに6回回転対称（ $\pi/3, 2\pi/3, \pi, 4\pi/3, 5\pi/3$ 回転）であり、5通りある。さらに、底面の6方向の周りに2回回転対称（ π 回転）であり、6通りある。回転を加えていない元の状態を考慮すると合計で12通りの対称性となる。このような回転を表す回転テンソルの成分を図10.13に示している。この対称性によって、六方晶の逆極点図は図10.15に示す12個の領域に分割される。斜線部を基準ステレオ三角形とすると、 $0 \leq \phi' \leq \pi/2$ 、 $0 \leq \beta \leq \pi/6$ の範囲となる。aに回転を与えてこの範囲に含まれるaを見つけ出す。その後は、(X,Y)を計算して極点を求める。基準ステレオ三角形に回転を加えて表示するので、Xを横座標にYを縦座標にそのままプロットすればよい。

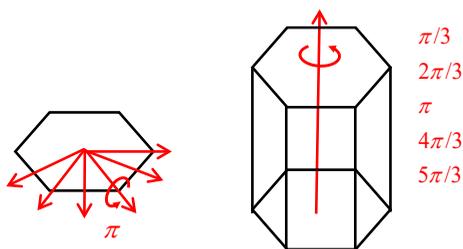


図 10.14 六方晶の回転対称性

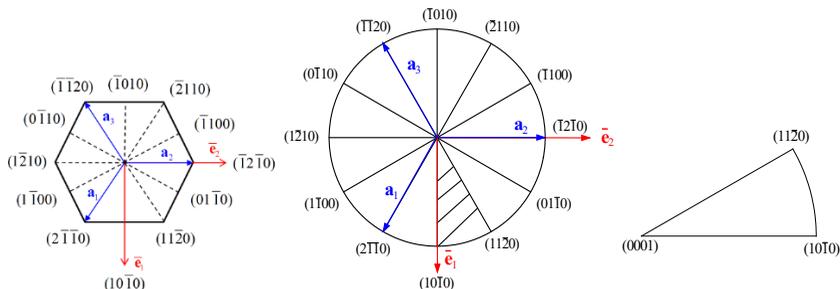


図 10.15 六方晶の逆極点図

10.1.5. Euler 角から座標変換行列を導出

Euler 角によって材料と結晶の 3 次元的な方位関係，すなわち材料座標系と結晶座標系の関係を示すことができる．材料座標系 \hat{x}_i (= 直交異方性座標系) の基底ベクトルを \hat{e}_i とし，結晶座標系 \bar{x}_i の基底ベクトルを \bar{e}_i とする． $\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3$ はそれぞれ板材の圧延，圧延直交，板厚方向と一致し， $\bar{e}_1, \bar{e}_2, \bar{e}_3$ はそれぞれ [100], [010], [001] と一致する．

図 10.16 に示すように，はじめに材料座標系 \hat{x}_i と結晶座標系 \bar{x}_i を一致させ，結晶座標系 \bar{x}_i を順次回転させる．材料座標系に固定されているベクトル $\mathbf{a} = a_i \hat{e}_i$ の結晶座標系に対する成分を考える．Bunge の Euler 角の定義は以下のである．

① 初期の状態では，ベクトル \mathbf{a} の成分は $\hat{a}_i = \bar{a}_i$ である．以後， \hat{a}_i は不変である．

① \bar{x}_3 軸の周りに φ_1 回転する．ベクトル \mathbf{a} の \bar{x}_i に関する成分を \bar{a}_i とする． \hat{x}_i 座標から \bar{x}_i 座標への座標変換行列は $P_{ij} = \bar{e}_i \cdot \hat{e}_j$ である．したがって， $\bar{a}_i = P_{ij} \hat{a}_j$ である．

$$\begin{Bmatrix} \bar{a}_1 \\ \bar{a}_2 \\ \bar{a}_3 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \varphi_1 & \sin \varphi_1 & 0 \\ -\sin \varphi_1 & \cos \varphi_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \hat{a}_1 \\ \hat{a}_2 \\ \hat{a}_3 \end{Bmatrix}.$$

② 新たな \bar{x}_1 軸の周りに ϕ 回転する．座標変換則は $P_{ij} = \bar{e}_i^{\text{new}} \cdot \bar{e}_j^{\text{old}}$ ， $\{\bar{a}^{\text{new}}\} = [P] \{\bar{a}^{\text{old}}\}$ となる．

$$\begin{Bmatrix} \bar{a}_1^{\text{new}} \\ \bar{a}_2^{\text{new}} \\ \bar{a}_3^{\text{new}} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi & \sin \phi \\ 0 & -\sin \phi & \cos \phi \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{a}_1^{\text{old}} \\ \bar{a}_2^{\text{old}} \\ \bar{a}_3^{\text{old}} \end{Bmatrix}.$$

③ 新たな \bar{x}_3 軸の周りに φ_2 回転する．

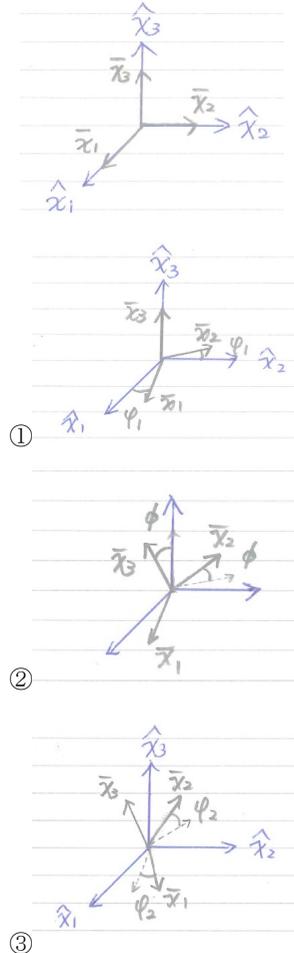


図 10.16 Bunge の Euler 角

$$\begin{Bmatrix} \bar{a}_1^{\text{new}} \\ \bar{a}_2^{\text{new}} \\ \bar{a}_3^{\text{new}} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \varphi_2 & \sin \varphi_2 & 0 \\ -\sin \varphi_2 & \cos \varphi_2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{a}_1^{\text{old}} \\ \bar{a}_2^{\text{old}} \\ \bar{a}_3^{\text{old}} \end{Bmatrix}.$$

以上、3回の座標変換をまとめて、材料座標系の成分 \hat{a}_i と最終的な結晶座標系の成分 \bar{a}_i の座標変換則が導出できる。

$$\begin{Bmatrix} \bar{a}_1 \\ \bar{a}_2 \\ \bar{a}_3 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \varphi_2 & \sin \varphi_2 & 0 \\ -\sin \varphi_2 & \cos \varphi_2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi & \sin \phi \\ 0 & -\sin \phi & \cos \phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \varphi_1 & \sin \varphi_1 & 0 \\ -\sin \varphi_1 & \cos \varphi_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \hat{a}_1 \\ \hat{a}_2 \\ \hat{a}_3 \end{Bmatrix}$$

行列計算を実行して、次の座標変換則を得る。

$$\{\bar{a}\} = [P]\{\hat{a}\}, \quad \{\hat{a}\} = [P]^T\{\bar{a}\} \quad (10.16)$$

$$\begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & P_{13} \\ P_{21} & P_{22} & P_{23} \\ P_{31} & P_{32} & P_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 - \sin \varphi_1 \cos \phi \sin \varphi_2 & \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 + \cos \varphi_1 \cos \phi \sin \varphi_2 & \sin \phi \sin \varphi_2 \\ -\cos \varphi_1 \sin \varphi_2 - \sin \varphi_1 \cos \phi \cos \varphi_2 & -\sin \varphi_1 \sin \varphi_2 + \cos \varphi_1 \cos \phi \cos \varphi_2 & \sin \phi \cos \varphi_2 \\ \sin \varphi_1 \sin \phi & -\cos \varphi_1 \sin \phi & \cos \phi \end{bmatrix} \quad (10.17)$$

すべり面法線方向 \mathbf{m} とすべり方向 \mathbf{s} は結晶座標系 $\bar{\mathbf{e}}_i$ を参照して作成するのが便利である。実際に、式(10.1), (10.2)では、 $\mathbf{m} = \bar{m}_i \bar{\mathbf{e}}_i$ 、 $\mathbf{s} = \bar{s}_i \bar{\mathbf{e}}_i$ と表して、結晶座標系の成分 \bar{m}_i 、 \bar{s}_i を求めた。この結晶が、 $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ の方位を向いている場合、材料座標 $\hat{\mathbf{e}}_i$ に関する成分は、式(10.16)より次のように表せる。

$$\{\hat{m}\} = [P]^T\{\bar{m}\}, \quad \{\hat{s}\} = [P]^T\{\bar{s}\} \quad (10.18)$$

10.1.6. 座標変換行列より Euler 角を導出

前節では式(10.17)に示す通り Euler 角をもとにして座標変換行列 $[P]$ を導出した。ここでは、逆に座標変換行列 $[P]$ から Euler 角 $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ を導出する。式(10.17)より次の関係を得る。

$$\frac{P_{31}}{P_{32}} = \frac{\sin \varphi_1}{-\cos \varphi_1} = -\tan \varphi_1 \quad \rightarrow \quad \varphi_1 = \tan^{-1} \left(\frac{P_{31}}{-P_{32}} \right)$$

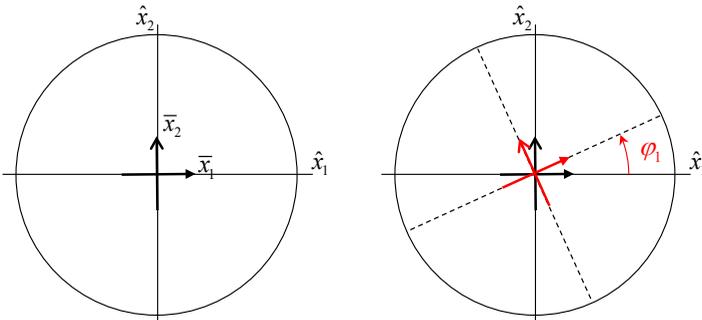
$$P_{33} = \cos \phi \quad \rightarrow \quad \phi = \cos^{-1}(P_{33}) \quad (10.19)$$

$$\frac{P_{13}}{P_{23}} = \frac{\sin \phi_2}{\cos \phi_2} = \tan \phi_2 \quad \rightarrow \quad \phi_2 = \tan^{-1}\left(\frac{P_{13}}{P_{23}}\right)$$

ここで、Euler 角の定義域を確認すると、 $0 \leq \phi_1 \leq 2\pi$ 、 $0 \leq \phi \leq \pi$ 、 $0 \leq \phi_2 \leq 2\pi$ である。Fortran における ACOS の範囲は $-\pi/2 \leq \text{ACOS} \leq \pi/2$ であり、 ϕ の定義域と一致する。一方、ATAN の範囲は $-\pi/2 \leq \text{ATAN} \leq \pi/2$ であり、これでは ϕ_1 、 ϕ_2 の定義域を網羅できない。そこで、ATAN2 関数の範囲が、 $-\pi \leq \text{ATAN2} \leq \pi$ であることを利用する。（ $\text{ATAN2}(Y, X) = \tan^{-1}(y/x)$ ）

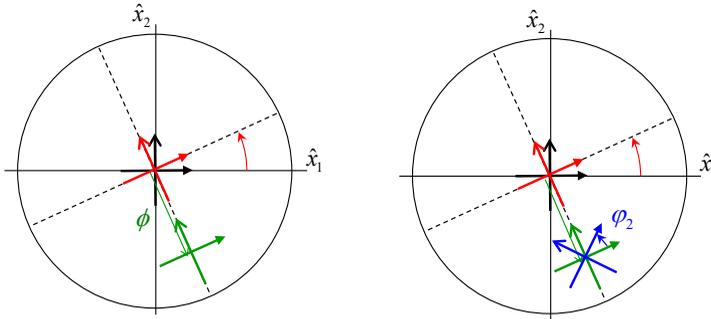
10.1.7. Euler 角の平面図表示

Euler 角 (ϕ_1, ϕ, ϕ_2) の定義に従って、材料座標系 \hat{x}_i に対して結晶座標系 \bar{x}_i を回転する様子を平面図で表示する。図 10.17 において、①は初期状態であり結晶座標系 \bar{x}_i と材料座標系 \hat{x}_i を一致させる。②において \bar{x}_3 軸回りに ϕ_1 回転させる。③において \bar{x}_1 軸回りに ϕ 回転させる。④において \bar{x}_3 軸回りに ϕ_2 回転させる。



① 結晶座標 \bar{x}_i と材料座標 \hat{x}_i を一致

② 軸 \bar{x}_3 まわりに ϕ_1 回転



③ \bar{x}_1 まわりに ϕ 回転させる.

④ \bar{x}_3 まわりに ϕ_2 回転させる.

図 10.17 Euler 角の平面図表示

10.1.8. Miller 指数と Euler 角の関係

10.1.2 節で述べた通り Millar 指数を用いて結晶方位を表すことができる。 $(hkl)[uvw]$ と与えられた場合、 (hkl) 面の法線方向 \mathbf{n} をND方向とし、 $[uvw]$ 方向 \mathbf{b} をRD方向とする。TD方向は $\mathbf{t} = \mathbf{n} \times \mathbf{b}$ と与えられる。材料座標系 $\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2, \hat{\mathbf{e}}_3$ をそれぞれRD, TD, NDに一致させると、 $\hat{\mathbf{e}}_1 = \mathbf{b}$, $\hat{\mathbf{e}}_2 = \mathbf{t}$, $\hat{\mathbf{e}}_3 = \mathbf{n}$ の関係を得る。結晶座標系はそれぞれ $\bar{\mathbf{e}}_1 = [100]$, $\bar{\mathbf{e}}_2 = [010]$, $\bar{\mathbf{e}}_3 = [001]$ と Miller 指数で与えることができる。式(10.1), (10.2)を参照すると次の関係が得られる。

$$\mathbf{b} = \bar{b}_i \bar{\mathbf{e}}_i = \frac{1}{\sqrt{u^2 + v^2 + w^2}}(u\bar{\mathbf{e}}_1 + v\bar{\mathbf{e}}_2 + w\bar{\mathbf{e}}_3) = \hat{\mathbf{e}}_1,$$

$$\mathbf{n} = \bar{n}_i \bar{\mathbf{e}}_i = \frac{1}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}(h\bar{\mathbf{e}}_1 + k\bar{\mathbf{e}}_2 + l\bar{\mathbf{e}}_3) = \hat{\mathbf{e}}_3,$$

$$\mathbf{t} = \bar{t}_i \bar{\mathbf{e}}_i = \mathbf{n} \times \mathbf{b} = \varepsilon_{opm} \bar{n}_o \bar{b}_p \bar{\mathbf{e}}_i = \hat{\mathbf{e}}_2,$$

$$\begin{aligned} \mathbf{t} &= (\bar{n}_2 \bar{b}_3 - \bar{n}_3 \bar{b}_2) \bar{\mathbf{e}}_1 + (\bar{n}_3 \bar{b}_1 - \bar{n}_1 \bar{b}_3) \bar{\mathbf{e}}_2 + (\bar{n}_1 \bar{b}_2 - \bar{n}_2 \bar{b}_1) \bar{\mathbf{e}}_3 \\ &= \frac{1}{\sqrt{(u^2 + v^2 + w^2)(h^2 + k^2 + l^2)}}(kw - lv) \bar{\mathbf{e}}_1 + (lu - hw) \bar{\mathbf{e}}_2 + (hv - ku) \bar{\mathbf{e}}_3. \end{aligned}$$

次に、この2つの座標系の座標変換行列を導出する。 $P_{ij} = \bar{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_j$ を考慮すると、

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & P_{13} \\ P_{21} & P_{22} & P_{23} \\ P_{31} & P_{32} & P_{33} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{e}}_1 \cdot \hat{\mathbf{e}}_1 & \bar{\mathbf{e}}_1 \cdot \hat{\mathbf{e}}_2 & \bar{\mathbf{e}}_1 \cdot \hat{\mathbf{e}}_3 \\ \bar{\mathbf{e}}_2 \cdot \hat{\mathbf{e}}_1 & \bar{\mathbf{e}}_2 \cdot \hat{\mathbf{e}}_2 & \bar{\mathbf{e}}_2 \cdot \hat{\mathbf{e}}_3 \\ \bar{\mathbf{e}}_3 \cdot \hat{\mathbf{e}}_1 & \bar{\mathbf{e}}_3 \cdot \hat{\mathbf{e}}_2 & \bar{\mathbf{e}}_3 \cdot \hat{\mathbf{e}}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{e}}_1 \cdot \mathbf{b} & \bar{\mathbf{e}}_1 \cdot \mathbf{t} & \bar{\mathbf{e}}_1 \cdot \mathbf{n} \\ \bar{\mathbf{e}}_2 \cdot \mathbf{b} & \bar{\mathbf{e}}_2 \cdot \mathbf{t} & \bar{\mathbf{e}}_2 \cdot \mathbf{n} \\ \bar{\mathbf{e}}_3 \cdot \mathbf{b} & \bar{\mathbf{e}}_3 \cdot \mathbf{t} & \bar{\mathbf{e}}_3 \cdot \mathbf{n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{b}_1 & \bar{t}_1 & \bar{n}_1 \\ \bar{b}_2 & \bar{t}_2 & \bar{n}_2 \\ \bar{b}_3 & \bar{t}_3 & \bar{n}_3 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \frac{u}{\sqrt{u^2+v^2+w^2}} & \frac{kw-lv}{\sqrt{(u^2+v^2+w^2)(h^2+k^2+l^2)}} & \frac{h}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \\ \frac{v}{\sqrt{u^2+v^2+w^2}} & \frac{lu-hw}{\sqrt{(u^2+v^2+w^2)(h^2+k^2+l^2)}} & \frac{k}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \\ \frac{w}{\sqrt{u^2+v^2+w^2}} & \frac{hv-ku}{\sqrt{(u^2+v^2+w^2)(h^2+k^2+l^2)}} & \frac{l}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{10.20}$$

このように結晶方位が $(hkl)[uvw]$ と表された場合の座標変換行列 $[P]$ が得られた。次に、上式と式(10.19)を比較して Euler 角を導出する。

$$\begin{aligned}
\varphi_1 &= \tan^{-1} \left(\frac{P_{31}}{-P_{32}} \right) = \tan^{-1} \left(\frac{w\sqrt{h^2+k^2+l^2}}{-hv+ku} \right) \\
\phi &= \cos^{-1}(P_{33}) = \cos^{-1} \left(\frac{l}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \right) \\
\varphi_2 &= \tan^{-1} \left(\frac{P_{13}}{P_{23}} \right) = \tan^{-1} \left(\frac{h}{k} \right)
\end{aligned} \tag{10.21}$$

ここで、Euler 角の範囲は、 $0 \leq \varphi_1 \leq 2\pi$ ， $0 \leq \phi \leq \pi$ ， $0 \leq \varphi_2 \leq 2\pi$ なので、Fortran においては ATAN2 ($-\pi \leq \text{ATAN2} \leq \pi$) を利用する。

10.1.9. 板材の直交異方性および立方晶の対称性

材料の対称性として直交異方性を考える。直交異方性は材料の特性を示しており、結晶粒 1 つのことではないことに注意しなければならない。直交異方性とは材料座標系の $\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3$ 軸まわりに 2 回回転対称性を有することである。言い換えれば、各軸まわりに π 回転しても巨視的な特性が同じである。もしくは、2 つの軸からなる面について鏡面对称とも言える。材料がこのような特性を有するには、材料は最低 4 個の結晶から構成される必要がある。一つの結晶方位を $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ とし、それに加えて結晶座標の $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3$ 軸回りに π 回転した 3 つ

の結晶方位を創製する。これら 4 個の結晶によって構成される材料は直交異方性を有している。

はじめに、材料座標系 $\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3$ と結晶座標系 $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3$ を一致させ、結晶を $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3$ 軸回りに π 回転する。その様子を図 10.18 に示す。その後、これらの 4 結晶を $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ 方位に回転させる。図 10.19 に平面図で結晶方位の変化を示している。図 10.20 にこれら 4 結晶粒の方位を図示している。 \bar{x}_1 と \bar{x}_2 は等価であることを考慮すれば、 $\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3$ 軸まわりに π 回転しても 4 結晶粒が示す方位は同じとわかる。すなわち、4 結晶粒によって直交異方性が表現された。

このように直交異方性を構成する 4 つの結晶方位は次のように表せる。

$$\textcircled{1} (\varphi_1, \phi, \varphi_2), \quad \textcircled{2} (-\varphi_1, \phi, -\varphi_2), \quad \textcircled{3} (\pi - \varphi_1, \phi, -\varphi_2), \quad \textcircled{4} (\pi + \varphi_1, \phi, \varphi_2)$$

ここで、 ϕ に負号がつかないように取り扱った。また、 $\textcircled{2}$ の $-\varphi_1$ は $2\pi - \varphi_1$ と等価である。 $\textcircled{1}$ において $0 \leq \varphi_1 \leq \pi/2$ と仮定すると、 $\textcircled{2}$ では $3\pi/2 \leq \varphi_1 \leq 2\pi$ 、 $\textcircled{3}$ では $\pi/2 \leq \varphi_1 \leq \pi$ 、 $\textcircled{4}$ では $\pi \leq \varphi_1 \leq 3\pi/2$ である。したがって、直交異方性材料に対しては、 $0 \leq \varphi_1 \leq \pi/2$ のみが独立であり、それ以外の $\pi/2 \leq \varphi_1 \leq 2\pi$ の範囲は直交異方性の仮定によって創製される等価な方位によって表現可能である。

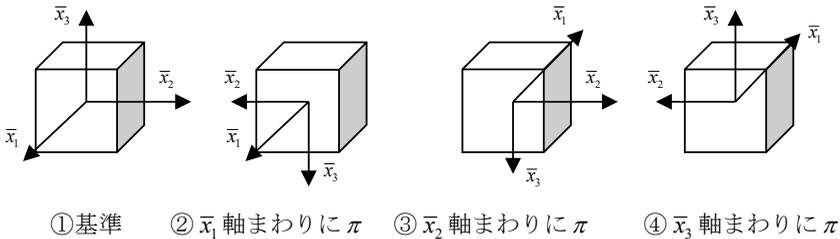


図 10.18 各軸回りに π 回転

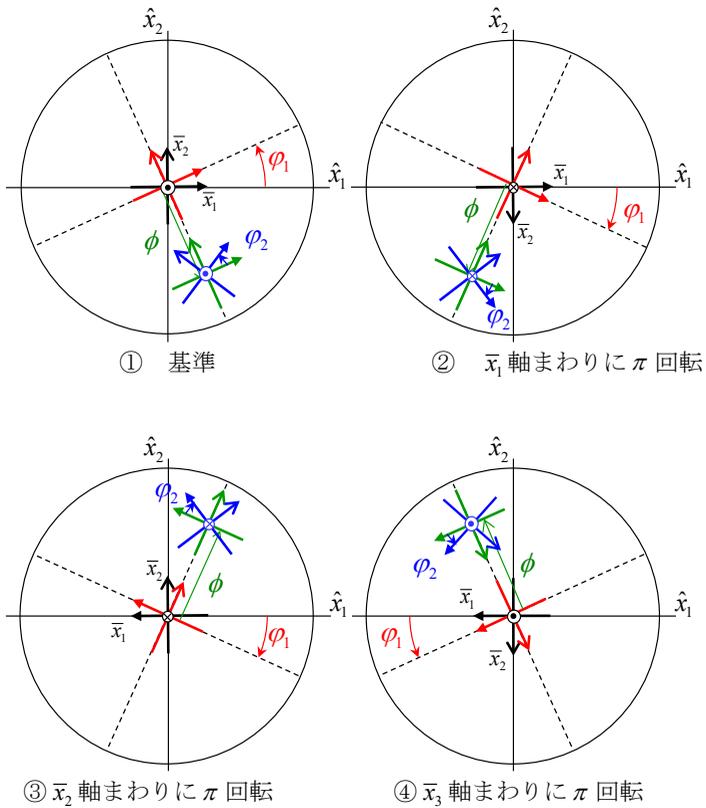


図 10.19 直交異方性材料の等価な 4 方位

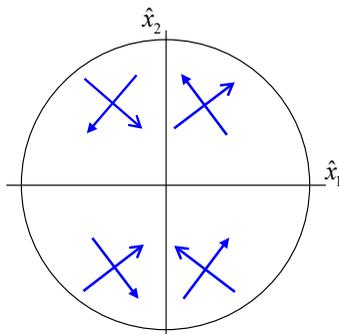


図 10.20 直交異方性を有する 4 結晶粒からなる集合組織

立方晶は、結晶座標 $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3$ に関して 4 回回転対称性を有している。ここでは、 \bar{x}_3 軸回りに回転することを考える。 φ_2 を $\varphi_2 + \pi/2, \varphi_2 + \pi, \varphi_2 + 3\pi/2$ とすると \bar{x}_3 軸回りに $\bar{x}_1 - \bar{x}_2$ 座標が $\pi/2$ ずつ回転する。 \bar{x}_1, \bar{x}_2 方向の特性は等しいので、これらは全て等価な方位を表している。したがって、 φ_2 の独立な範囲は $0 \leq \varphi_2 \leq \pi/2$ である。同様に、 $\langle 110 \rangle$ に対する 2 回回転対称性を考慮すると、 ϕ の独立な範囲は $0 \leq \phi \leq \pi/2$ とわかる。

以上より、立方晶から構成される直交異方性材料の Euler 角の独立な範囲は、 $0 \leq \varphi_1, \phi, \varphi_2 \leq \pi/2$ である。そのため、ODF はこの範囲のみを図示することが多い。一方、直交異方性に対して Euler 角が $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ であるということは、同時に、それと等価な下記の 3 方位も存在することを意味することを忘れてはならない。

$$(\varphi_1, \phi, \varphi_2), \quad (-\varphi_1, \phi, -\varphi_2), \quad (\pi - \varphi_1, \phi, -\varphi_2), \quad (\pi + \varphi_1, \phi, \varphi_2) \quad (10.22)$$

10.1.10. 付録

式(10.1)の導出方法を示す。まず、図 10. 21 の三角錐 OABC について考える。単位法線ベクトル \mathbf{m} の成分比は、ベクトル \overline{OM} の成分比と等しい。すなわち、

$$\bar{m}_1 : \bar{m}_2 : \bar{m}_3 = \overline{OM}_1 : \overline{OM}_2 : \overline{OM}_3$$

である。幾何学的関係より \overline{OM} の成分は以下のように与えられる。

$$\overline{OM}_1 = \overline{OM} \cos \theta_1, \quad \overline{OM}_2 = \overline{OM} \cos \theta_2, \quad \overline{OM}_3 = \overline{OM} \cos \theta_3$$

三角形 $\triangle OMA, \triangle OMB, \triangle OMC$ の幾何学的関係より、方向余弦は次のように与えられる。

$$\cos \theta_1 = \frac{\overline{OM}}{l_1}, \quad \cos \theta_2 = \frac{\overline{OM}}{l_2}, \quad \cos \theta_3 = \frac{\overline{OM}}{l_3}$$

したがって、単位法線ベクトル \mathbf{m} の成分比は次のように書ける。

$$\bar{m}_1 : \bar{m}_2 : \bar{m}_3 = \frac{1}{l_1} : \frac{1}{l_2} : \frac{1}{l_3}$$

\mathbf{m} が単位ベクトルであることを考慮すると、 \bar{m}_i は次式で与えられる。

$$\bar{m}_1 = \frac{1}{Al_1}, \quad \bar{m}_2 = \frac{1}{Al_2}, \quad \bar{m}_3 = \frac{1}{Al_3}, \quad A = \sqrt{\left(\frac{1}{l_1}\right)^2 + \left(\frac{1}{l_2}\right)^2 + \left(\frac{1}{l_3}\right)^2}$$

ここで、Miller 指数と切片の関係は、

$$h = \frac{1}{l_1}, \quad k = \frac{1}{l_2}, \quad l = \frac{1}{l_3}$$

である。これらを用いると、 \bar{m}_i は次式で表せる。

$$\bar{m}_1 = \frac{h}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}, \quad \bar{m}_2 = \frac{k}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}, \quad \bar{m}_3 = \frac{l}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

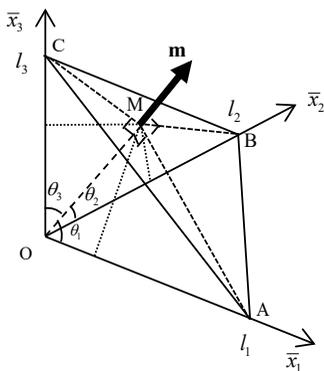


図 10.21 三角錐と三角形の参考図

10.2. 単結晶の弾塑性

10.2.1. 弾性構成則

金属結晶の弾性ひずみは 0.01 以下の大きさであり、応力とひずみはほとんど比例関係にある。線形弾性体の構成式を次式で与える。

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}^e : \boldsymbol{\varepsilon} \quad (10.23)$$

ここで、 \mathbf{C}^e は 4 階の弾性係数テンソル (elastic tensor) であり、 $\boldsymbol{\sigma}$ と $\boldsymbol{\varepsilon}$ は微小ひずみ理論における応力とひずみとする。結晶座標系の基底ベクトルを $\bar{\mathbf{e}}_i$ とすると、 $\mathbf{C}^e = \bar{C}_{ijkl}^e \bar{\mathbf{e}}_i \otimes \bar{\mathbf{e}}_j \otimes \bar{\mathbf{e}}_k \otimes \bar{\mathbf{e}}_l$ と表せる。 $\boldsymbol{\sigma}$ と $\boldsymbol{\varepsilon}$ の対称性より、結晶座標系の成分 \bar{C}_{ijkl}^e には $\bar{C}_{ijkl}^e = \bar{C}_{jikl}^e = \bar{C}_{jilk}^e$ の対称性がある。その結果、 \bar{C}_{ijkl}^e の $3^4 = 81$ 個の成分のうち独立な成分は 36 個となる。さらに、弾性ひずみエネルギーを考慮すると、 $ij \leftrightarrow kl$ の対称性が得られるため独立成分は 21 個となる。これらを行列で表すと次のように表せる。

$$\begin{Bmatrix} \bar{\sigma}_{11} \\ \bar{\sigma}_{22} \\ \bar{\sigma}_{33} \\ \bar{\sigma}_{12} \\ \bar{\sigma}_{23} \\ \bar{\sigma}_{31} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{C}_{1111}^e & \bar{C}_{1122}^e & \bar{C}_{1133}^e & \bar{C}_{1112}^e & \bar{C}_{1123}^e & \bar{C}_{1131}^e \\ & \bar{C}_{2222}^e & \bar{C}_{2233}^e & \bar{C}_{2212}^e & \bar{C}_{2223}^e & \bar{C}_{2231}^e \\ & & \bar{C}_{3333}^e & \bar{C}_{3312}^e & \bar{C}_{3323}^e & \bar{C}_{3331}^e \\ & & & \bar{C}_{1212}^e & \bar{C}_{1223}^e & \bar{C}_{1231}^e \\ & & & & \bar{C}_{2323}^e & \bar{C}_{2331}^e \\ & & & & & \bar{C}_{3131}^e \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{\varepsilon}_{11} \\ \bar{\varepsilon}_{22} \\ \bar{\varepsilon}_{33} \\ 2\bar{\varepsilon}_{12} \\ 2\bar{\varepsilon}_{23} \\ 2\bar{\varepsilon}_{31} \end{Bmatrix} \quad (10.24)$$

ここで、 $\bar{\sigma}_{ij}$ 、 $\bar{\varepsilon}_{ij}$ は結晶座標系 $\bar{\mathbf{e}}_i$ に関する $\boldsymbol{\sigma}$ 、 $\boldsymbol{\varepsilon}$ の成分である。

(1) 立方晶

結晶の対称性を考慮することで、弾性係数テンソルの独立成分の数をさらに減らすことができる。面心立方構造および体心立方構造の単結晶は、立方対称性 (cubic symmetry) を有している。この対称性を有するとき弾性係数テンソルの独立な成分は 3 個となる²。立方対称性を有する材料の弾性係数は以下のようになる。

² Reid, C. N., 1973, Deformation geometry for materials scientists, Pergamon Press.

$$\begin{pmatrix} \bar{\sigma}_{11} \\ \bar{\sigma}_{22} \\ \bar{\sigma}_{33} \\ \bar{\sigma}_{12} \\ \bar{\sigma}_{23} \\ \bar{\sigma}_{31} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{C}_{1111}^e & \bar{C}_{1122}^e & \bar{C}_{1122}^e & 0 & 0 & 0 \\ & \bar{C}_{1111}^e & \bar{C}_{1122}^e & 0 & 0 & 0 \\ & & \bar{C}_{1111}^e & 0 & 0 & 0 \\ & & & \bar{C}_{1212}^e & 0 & 0 \\ & sym. & & & \bar{C}_{1212}^e & 0 \\ & & & & & \bar{C}_{1212}^e \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \bar{\epsilon}_{11} \\ \bar{\epsilon}_{22} \\ \bar{\epsilon}_{33} \\ 2\bar{\epsilon}_{12} \\ 2\bar{\epsilon}_{23} \\ 2\bar{\epsilon}_{31} \end{pmatrix} \quad (10.25)$$

独立な 3 個の成分 \bar{C}_{1111}^e , \bar{C}_{1122}^e , \bar{C}_{1212}^e を決定するには, 単結晶を用いた実験が必要である. 言い換えると, これらの成分を多結晶体に関する実験から正確に決定することは困難である. 表 10.1 に立方晶の単結晶の弾性係数を示す³. 表において, $A = 2\bar{C}_{1212}^e / (\bar{C}_{1111}^e - \bar{C}_{1122}^e)$ で与えられる定数である. 等方性では $A = 1$ であり, 弾性異方性の強度を表している.

表 10.1 弾性係数

	\bar{C}_{1111}^e GPa	\bar{C}_{1122}^e GPa	\bar{C}_{1212}^e GPa	A
Aluminum	106.78	60.74	28.21	1.2
Copper	168.39	121.42	75.39	3.2
Iron	233.1	135.44	117.83	2.4

(2) 最密六方晶

最密六方構造の金属結晶では, 独立な弾性係数は 5 個である. $\bar{\mathbf{e}}_3$ を c 軸, $\bar{\mathbf{e}}_2$ を a 軸に一致させる (結果的に, $\bar{\mathbf{e}}_1$ を a 軸から 30° 回転した方向に一致する.) と弾性係数は以下ようになる.

³ Reid C. N., 1973. Deformation geometry for materials scientists, Pergamon.

$$\begin{Bmatrix} \bar{\sigma}_{11} \\ \bar{\sigma}_{22} \\ \bar{\sigma}_{33} \\ \bar{\sigma}_{12} \\ \bar{\sigma}_{23} \\ \bar{\sigma}_{31} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{C}_{1111}^e & \bar{C}_{1122}^e & \bar{C}_{1133}^e & 0 & 0 & 0 \\ & \bar{C}_{1111}^e & \bar{C}_{1133}^e & 0 & 0 & 0 \\ & & \bar{C}_{3333}^e & 0 & 0 & 0 \\ & & & \frac{1}{2}(\bar{C}_{1111}^e - \bar{C}_{1122}^e) & 0 & 0 \\ & sym. & & & \bar{C}_{2323}^e & 0 \\ & & & & & \bar{C}_{2323}^e \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{\varepsilon}_{11} \\ \bar{\varepsilon}_{22} \\ \bar{\varepsilon}_{33} \\ 2\bar{\varepsilon}_{12} \\ 2\bar{\varepsilon}_{23} \\ 2\bar{\varepsilon}_{31} \end{Bmatrix} \quad (10.26)$$

(3) 等方性

弾性等方性の場合、独立変数は2個である。弾性係数は次のようになる。

$$\begin{Bmatrix} \bar{\sigma}_{11} \\ \bar{\sigma}_{22} \\ \bar{\sigma}_{33} \\ \bar{\sigma}_{12} \\ \bar{\sigma}_{23} \\ \bar{\sigma}_{31} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{C}_{1111}^e & \bar{C}_{1122}^e & \bar{C}_{1122}^e & 0 & 0 & 0 \\ & \bar{C}_{1111}^e & \bar{C}_{1122}^e & 0 & 0 & 0 \\ & & \bar{C}_{1111}^e & 0 & 0 & 0 \\ & & & \bar{C}_{1212}^e & 0 & 0 \\ & sym. & & & \bar{C}_{1212}^e & 0 \\ & & & & & \bar{C}_{1212}^e \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{\varepsilon}_{11} \\ \bar{\varepsilon}_{22} \\ \bar{\varepsilon}_{33} \\ 2\bar{\varepsilon}_{12} \\ 2\bar{\varepsilon}_{23} \\ 2\bar{\varepsilon}_{31} \end{Bmatrix} \quad (10.27)$$

ここで、

$$\bar{C}_{1111}^e = \bar{C}_{1122}^e + 2\bar{C}_{1212}^e \quad (10.28)$$

の関係がある。また、Lame 定数 λ , μ , もしくは Young 率 E , Poisson 比 ν を用いると、弾性係数は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} \bar{C}_{1111}^e &= \lambda + 2\mu = \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)}, & \bar{C}_{1122}^e &= \lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}, \\ \bar{C}_{1212}^e &= \mu = \frac{E}{2(1+\nu)} \end{aligned} \quad (10.29)$$

(4) 速度形の弾性構成式

金属材料に見られる塑性流動現象を表すためには、ひずみではなく、ひずみ速度を用いる方が自然である。そこで、弾性変形を速度形で表して、弾性と塑性の構成式を速度形に統一すると都合がよい。塑性変形は有限変形を考慮した定式化が必須であるため、有限変形を考慮しつつ弾性構成則を速度形に拡張する。客観応力速度と変形速度の弾性成分の間に線形関係を仮定する。

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}}^* = \mathbf{C}^e : \mathbf{D}^* \quad (10.30)$$

ここで、 $\dot{\boldsymbol{\sigma}}^*$ は結晶格子と共回転する Cauchy 応力速度、 \mathbf{D}^* は変形速度の弾性成分、 \mathbf{C}^e は本節で示した弾性係数テンソルである。結晶格子の共回転については、10.2.6 節で述べる。

10.2.2. Schmid 則

単結晶の丸棒を単軸引張りする様子を **図 10.22** に示す。ここで、すべり面の法線方向を \mathbf{m} 、すべり方向を \mathbf{s} とする。丸棒の断面積を A_0 とし、引張軸と \mathbf{m} のなす角を ϕ とすると、すべり面の面積は $A_0 / \cos \phi$ と与えられる。引張力を F 、引張軸と \mathbf{s} のなす角を λ とすると、 \mathbf{s} の方向に作用するせん断力は $F \cos \lambda$ と求められる。したがって、すべり面のすべり方向に作用するせん断応力は、次式で与えられる。

$$\tau = \sigma \cos \lambda \cos \phi, \quad \sigma = F / A_0 \quad (10.31)$$

ここで、 σ は引張応力である。このようなせん断応力を 分解せん断応力 (resolved shear stress) と呼ぶ。

多くの単結晶を用いた実験において、分解せん断応力 τ が臨界値 τ_c に達するとすべり変形が起こることが分かっている。この事実より、すべり系に対する降伏条件が次式で与えられる。

$$\tau = \tau_c \quad \text{または} \quad f = \tau - \tau_c = 0 \quad (10.32)$$

臨界値 τ_c を 臨界分解せん断応力 (critical resolved shear stress) と呼び、CRSS と表されることが多い。このように分解せん断応力が臨界値に達するとすべりが発生するという条件を Schmid 則 と呼ぶ。

次に、テンソル解析を利用した分解せん断応力の求め方を示す。単結晶に応力 $\boldsymbol{\sigma}$ が作用している。 \mathbf{s} および \mathbf{m} に直交する単位ベクトルを \mathbf{t} とする。 $\mathbf{s} - \mathbf{m} - \mathbf{t}$ を基底ベクトルとする直交座標において、分解せん断応力は \mathbf{m} 面の \mathbf{s} 方向の応力である。したがって、固定座標系 \mathbf{e}_i に関する応力テンソルの成分が $\sigma_{ij} = \mathbf{e}_i \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e}_j$ と与えられることを考慮すると、分解せん断応力は次式で与えられる。

$$\begin{aligned}
\tau &= \mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{m} \\
&= s_1 m_1 \sigma_{11} + s_2 m_2 \sigma_{22} + s_3 m_3 \sigma_{33} \\
&\quad + (s_1 m_2 + s_2 m_1) \sigma_{12} + (s_2 m_3 + s_3 m_2) \sigma_{23} + (s_3 m_1 + s_1 m_3) \sigma_{31}
\end{aligned} \tag{10.33}$$

N_{slip} 個のすべり系を考慮する場合は、すべり系を表すベクトルを $\mathbf{m}^{(\alpha)}$, $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ ($\alpha = 1, 2, \dots, N_{\text{slip}}$) と表す。各すべり系のせん断応力は、次のように書き表せる。

$$\tau^{(\alpha)} = \mathbf{s}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{m}^{(\alpha)} \quad \text{for } \alpha = 1, 2, \dots, N_{\text{slip}} \tag{10.34}$$

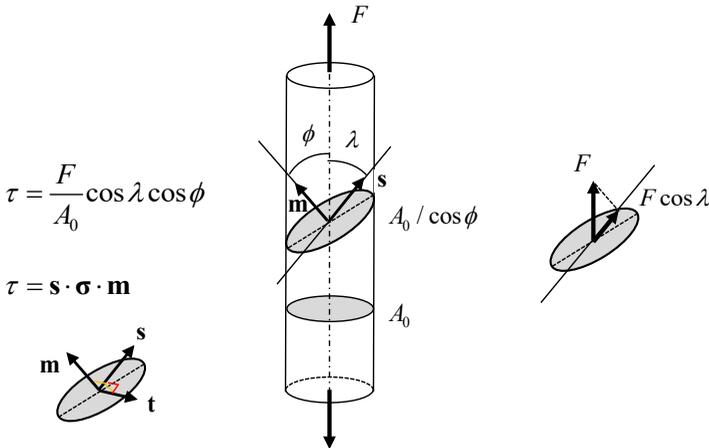


図 10.22 分解せん断応力

10.2.3. すべり速度とひずみ速度

すべり系において分解せん断応力が臨界値に達すると原子のすべりによる単純せん断変形が起こる。まず、2次元変形に限定して単純せん断変形を考える。

図 10.23 に示すように高さ h の結晶が、 \mathbf{e}_1 方向に u だけ変位を受ける。このとき変位勾配は次のように書ける。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} &= 0 \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \frac{u}{h} \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2 + 0 \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_1 + 0 \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 \\
&= \gamma \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2
\end{aligned} \tag{10.35}$$

ここで、 $\gamma = u/h$ は工学せん断ひずみに一致する。ここで、 \mathbf{e}_1 はすべり方向なので \mathbf{s} 、 \mathbf{e}_2 はすべり面法線方向なので \mathbf{m} と一致する。 \mathbf{s} と \mathbf{m} を用いると変位勾配は次のように書ける。

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} = \gamma \mathbf{s} \otimes \mathbf{m} \quad (10.36)$$

図 10.24 のように、 \mathbf{s} 、 \mathbf{m} が \mathbf{e}_1 、 \mathbf{e}_2 に一致していない場合でも、式(10.36)によって変位勾配を表すことができる。固定座標系に関する変位勾配の成分を求めたいときは、10.1.5 の方法を用いて \mathbf{s} 、 \mathbf{m} を \mathbf{e}_i について書き表せばよい。

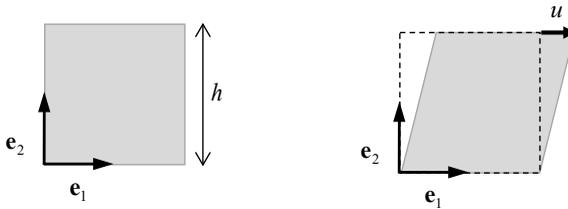


図 10.23 単純せん断変形における変位勾配

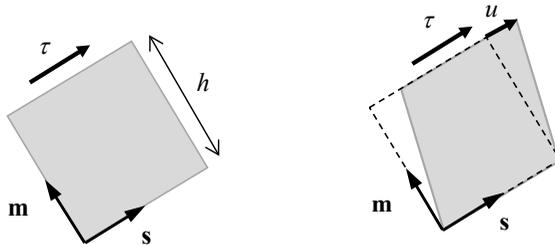


図 10.24 すべり変形による変位勾配

塑性変形は速度形の表記が適していた。そこで、変位 u による単純せん断変形の代わりに、現配置において速度 $\dot{\gamma}$ による瞬間的な単純せん断変形を考える。変位勾配の代わりに速度勾配を考えると、次のように書き表せる。

$$\mathbf{L}^p = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} = \dot{\gamma} \mathbf{s} \otimes \mathbf{m} \quad (10.37)$$

ここで、塑性変形によって発生する速度勾配のため \mathbf{L}^p とした。

すべり系 α の活動による速度勾配を $\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)}$ と表す。 N_{slip} 個のすべり系が同時に活動する場合、各すべり系による単純せん断変形を重ね合わせたものが結晶の速度勾配となる。結晶の塑性速度勾配は次式で与えられる。

$$\mathbf{L}^p = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{slip}}} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)} \quad (10.38)$$

10.2.4. すべり抵抗の発展（硬化則）

すべり系が活動することは、転位が運動し増殖することを意味する。あるすべり系が活動することで、そのすべり面上の転位が増加し、次の転位の運動の抵抗となる。また、この転位は別のすべり系に突き刺さった林立転位となっており、別のすべり系の転位の運動を妨げる。このように転位の運動は、そのすべり系のみならず他のすべり系の転位運動にも影響を与える。これらの結果として加工硬化が起こる。したがって、臨界分解せん断応力はすべり変形に伴って増加する。このことより、臨界分解せん断応力をすべり抵抗 (slip resistance) と言う。すべり抵抗の発展は形式的に次式のように書き表す。

$$\dot{\tau}_c^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^{N_{\text{slip}}} h^{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \quad (10.39)$$

ここで、 $h^{\alpha\beta}$ は硬化係数行列 (hardening matrix) と呼ばれ、すべり系 β の活動がすべり系 α の硬化に寄与する度合いを表している。すなわち、 $h^{\alpha\beta}$ の定式化が、結晶の加工硬化を決める重要な役割を担っている。

$h^{\alpha\beta}$ の具体的な形として比較的単純な次式がある。

$$\dot{\tau}_c^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^{N_{\text{slip}}} h^{\alpha\beta} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \quad (10.40)$$

$$h^{\alpha\beta} = h \begin{bmatrix} A & qA & qA & qA \\ qA & A & qA & qA \\ qA & qA & A & qA \\ qA & qA & qA & A \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (10.41)$$

ここでは、 $\{111\}\langle 110 \rangle$ の 12 すべり系の fcc 結晶としている。 q はすべり系が共

面にある時は 1 で、それ以外は q となる潜在硬化係数 (latent hardening coefficient) と呼ばれる係数である。Kocks の実験研究では、 $q \approx 1.4$ と導出されている。n 乗硬化則をもとに定式化された硬化率 h は以下のように与えられる。

$$h = h_0 \left(1 + \frac{h_0 \gamma_A}{\tau_0 n} \right)^{n-1}, \quad \gamma_A = \int_0^t \dot{\gamma}_A dt, \quad \dot{\gamma}_A = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{slip}}} |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| \quad (10.42)$$

ここで、 τ_0 は臨界分解せん断応力 (初期すべり抵抗)、 h_0 は初期硬化率、 n は加工硬化指数である。一方、飽和型の Voce 則をもとに導出すると硬化率は以下のように得られる。

$$h = h_0 \exp \left(- \frac{h_0}{\tau_\infty - \tau_0} \gamma_A \right) \quad (10.43)$$

ここで、 τ_∞ は飽和分解せん断応力である。飽和型の Voce 則では高ひずみ域の加工硬化を低く見積もり過ぎる傾向がある。それを改善するために線形硬化項を追加した拡張 Voce 則は以下の式で与えられる。

$$h = (h_0 - h_1) \exp \left(- \frac{h_0 - h_1}{\tau_1 - \tau_0} \gamma_A \right) + h_1 \quad (10.44)$$

ここで、右辺第一項は τ_1 に飽和する項、第二項は h_1 の線形硬化の項である。

10.2.5. 速度勾配の弾塑性分解，結晶の回転，応力速度

塑性変形の記述は速度形が適しているので、速度勾配について詳しく検討する。既に、塑性変形に起因する速度勾配 \mathbf{L}^p を式(10.38)で求めた。その他の速度勾配の成分として、原子間距離の伸縮に関する弾性変形の成分および剛体回転による成分がある。速度勾配は次のように表せる。

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}^* + \mathbf{L}^p \quad (10.45)$$

\mathbf{L}^* は弾性変形と剛体回転の影響を合わせた速度勾配であり、 \mathbf{L}^p はすべり変形の影響を表している。

\mathbf{L}^p を再び示す。

$$\mathbf{L}^p = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{slip}}} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)} \quad (10.46)$$

$\mathbf{s}^{(\alpha)}$ 、 $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ は結晶方位によって決定される量であり、結晶塑性においては既知の

値である。したがって、各すべり系のすべり速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ が求められれば、塑性変形を求めることができる。

\mathbf{L}^* および \mathbf{L}^p はそれぞれ対称成分と反対称成分に分解できる。

$$\mathbf{L}^* = \mathbf{D}^* + \mathbf{W}^* \quad (10.47)$$

$$\mathbf{L}^p = \mathbf{D}^p + \mathbf{W}^p \quad (10.48)$$

ここで、 \mathbf{D}^* は原子間距離の瞬間的な変化に起因する弾性ひずみ速度 (elastic strain rate)、 \mathbf{W}^* は結晶格子の弾性的なゆがみと結晶格子の剛体回転に起因する格子スピンの (lattice spin)、 \mathbf{D}^p と \mathbf{W}^p はそれぞれすべり変形による塑性ひずみ速度 (plastic strain rate) と塑性スピンの (plastic spin) である。

速度勾配が $\mathbf{L} = \mathbf{D} + \mathbf{W}$ と分解できることを考慮すると、

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^* + \mathbf{D}^p = \frac{1}{2}(\mathbf{L}^* + \mathbf{L}^{*\top}) + \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{p}^{(\alpha)} \quad (10.49)$$

$$\mathbf{W} = \mathbf{W}^* + \mathbf{W}^p = \frac{1}{2}(\mathbf{L}^* - \mathbf{L}^{*\top}) + \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \boldsymbol{\omega}^{(\alpha)} \quad (10.50)$$

ここで、

$$\mathbf{p}^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} (\mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)} + \mathbf{m}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{(\alpha)}) \quad (10.51)$$

$$\boldsymbol{\omega}^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} (\mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)} - \mathbf{m}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{(\alpha)}) \quad (10.52)$$

と表すことができる。 $\mathbf{p}^{(\alpha)}$ を Schmid テンソルと呼ぶことがある。

\mathbf{W}^* は結晶格子の弾性変形と剛体回転による格子スピンを表している。すなわち、結晶軸を表す基底ベクトル $\bar{\mathbf{e}}_i$ は、格子スピン \mathbf{W}^* によって回転する。

$$\dot{\bar{\mathbf{e}}}_i = \mathbf{W}^* \cdot \bar{\mathbf{e}}_i \quad (10.53)$$

すべり系を表す単位ベクトル $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ 、 $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ も \mathbf{W}^* と共に回転する。

$$\dot{\mathbf{s}}^{(\alpha)} = \mathbf{W}^* \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)}, \quad \dot{\mathbf{m}}^{(\alpha)} = \mathbf{W}^* \cdot \mathbf{m}^{(\alpha)} \quad (10.54)$$

結晶座標系 $\bar{\mathbf{e}}_i$ とすべり系は次のように更新される。

$$\bar{\mathbf{e}}_i^{new} = \bar{\mathbf{e}}_i + \dot{\bar{\mathbf{e}}}_i \Delta t = \bar{\mathbf{e}}_i + \mathbf{W}^* \cdot \bar{\mathbf{e}}_i \Delta t \quad (10.55)$$

$$\mathbf{s}^{(\alpha)new} = \mathbf{s}^{(\alpha)} + \mathbf{W}^* \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)} \Delta t, \quad \mathbf{m}^{(\alpha)new} = \mathbf{m}^{(\alpha)} + \mathbf{W}^* \cdot \mathbf{m}^{(\alpha)} \Delta t \quad (10.56)$$

結晶方位の回転または集合組織の発展は上式によって決定される。

10.2.6. 応力速度

式(10.30)に示した弾性構成式 ($\overset{\circ}{\boldsymbol{\sigma}}^* = \mathbf{C}^e : \mathbf{D}^*$) において, 弾性ひずみ速度 \mathbf{D}^* は原子間距離の変化速度を表している. このような弾性ひずみ速度は結晶格子の回転 \mathbf{W}^* の影響を受けない. 同様に, 応力速度 $\overset{\circ}{\boldsymbol{\sigma}}^*$ も結晶格子の回転の影響を受けないように定義するのが都合よい. そのような速度として, 結晶格子と共に回転する観測者による客観速度がある. 結晶格子と共に回転する Cauchy 応力の速度は次式で与えられる.

$$\overset{\circ}{\boldsymbol{\sigma}}^* = \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \mathbf{W}^* \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{W}^* \quad (10.57)$$

まず, 式(10.30)の弾性構成式に式(10.49)を代入する.

$$\begin{aligned} \overset{\circ}{\boldsymbol{\sigma}}^* &= \mathbf{C}^e : \mathbf{D}^* \\ &= \mathbf{C}^e : \mathbf{D} - \mathbf{C}^e : \mathbf{D}^p \\ &= \mathbf{C}^e : \mathbf{D} - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{C}^e : \mathbf{p}^{(\alpha)} \end{aligned} \quad (10.58)$$

次に, 式(10.50), (10.57)より,

$$\begin{aligned} \overset{\circ}{\boldsymbol{\sigma}}^* &= \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \mathbf{W}^* \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{W}^* \\ &= \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \left(\mathbf{W} - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \boldsymbol{\omega}^{(\alpha)} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\mathbf{W} - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \boldsymbol{\omega}^{(\alpha)} \right) \\ &= \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \mathbf{W} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{W} + \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \left(\boldsymbol{\omega}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega}^{(\alpha)} \right) \\ &= \overset{\circ}{\boldsymbol{\sigma}} + \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \left(\boldsymbol{\omega}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega}^{(\alpha)} \right) \end{aligned} \quad (10.59)$$

ここで, $\overset{\circ}{\boldsymbol{\sigma}}$ は Cauchy 応力の Jaumann 速度である. Jaumann 速度は連続体スピン \mathbf{W} と共に回転しながら観測する速度である.

式(10.58), (10.59)より, Cauchy 応力の Jaumann 速度を基にした速度形の構成式を得る.

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C}^c : \mathbf{D} - \mathbf{P} \quad (10.60)$$

$$\mathbf{P} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \left(\mathbf{C}^c : \mathbf{p}^{(\alpha)} + \boldsymbol{\omega}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega}^{(\alpha)} \right) \quad (10.61)$$

Cauchy 応力の Jaumann 速度は、 $\overset{\circ}{\boldsymbol{\sigma}} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \mathbf{W} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{W}$ と与えられるので、固定座標系で観測する応力速度は次式で求められる。

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \overset{\circ}{\boldsymbol{\sigma}} + \mathbf{W} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{W} \quad (10.62)$$

現在の Cauchy 応力に応力増分を足し合わせることで、新たな応力が求められる。

$$\boldsymbol{\sigma}^{new} = \boldsymbol{\sigma} + \dot{\boldsymbol{\sigma}} \Delta t \quad (10.63)$$

10.2.7. 時間非依存の結晶塑性

応力-ひずみ関係がひずみ速度の大きさに無関係であるとき、時間非依存 (rate independent) であると言う。時間非依存の結晶塑性においては、Schmid 則を満たした時にすべり系は活動する。つまり、次式を満たすすべり系が活動する。

$$f^{(\alpha)} = \tau^{(\alpha)} - g^{(\alpha)} = 0 \quad (10.64)$$

ここで、すべり抵抗 $\tau_c^{(\alpha)}$ を $g^{(\alpha)}$ と書き換えた。すべり系が活動するとそれに対応してすべり抵抗が増加する。

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^{N_{\text{slip}}} h^{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \quad (10.65)$$

塑性変形が進行する時は、すべり抵抗の増加と分解せん断応力の増加は常に等しくなければならない。すなわち、次の適応の条件 (consistency condition) を満たしている。

$$\dot{f}^{(\alpha)} = \dot{\tau}^{(\alpha)} - \dot{g}^{(\alpha)} = 0 \quad (10.66)$$

ここで、

$$\begin{aligned}
\dot{\mathbf{t}}^{(\alpha)} &= \left(\mathbf{s}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{m}^{(\alpha)} \right)' \\
&= \dot{\mathbf{s}}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{m}^{(\alpha)} + \mathbf{s}^{(\alpha)} \cdot \dot{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{m}^{(\alpha)} + \mathbf{s}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \dot{\mathbf{m}}^{(\alpha)} \\
&= \mathbf{W}^* \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{m}^{(\alpha)} + \mathbf{s}^{(\alpha)} \cdot \dot{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{m}^{(\alpha)} + \mathbf{s}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{W}^* \cdot \mathbf{m}^{(\alpha)} \\
&= \mathbf{s}^{(\alpha)} \cdot \left(-\mathbf{W}^* \cdot \boldsymbol{\sigma} + \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{W}^* \right) \cdot \mathbf{m}^{(\alpha)} \\
&= \mathbf{s}^{(\alpha)} \cdot \overset{\circ}{\boldsymbol{\sigma}}^* \cdot \mathbf{m}^{(\alpha)} \\
&= \overset{\circ}{\boldsymbol{\sigma}}^* : \mathbf{p}^{(\alpha)} \\
&= \mathbf{p}^{(\alpha)} : \mathbf{C}^e : \mathbf{D} - \sum_{\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \mathbf{p}^{(\alpha)} : \mathbf{C}^e : \mathbf{p}^{(\beta)}
\end{aligned} \tag{10.67}$$

である。式(10.65) ~ (10.67)より，次式を得る。

$$\sum_{\beta} N^{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} = \mathbf{p}^{(\alpha)} : \mathbf{C}^e : \mathbf{D} \tag{10.68}$$

$$N^{\alpha\beta} = h^{\alpha\beta} + \mathbf{p}^{(\alpha)} : \mathbf{C}^e : \mathbf{p}^{(\beta)} \tag{10.69}$$

N_{act} 個のすべり系が活動する時，式(10.68)は N_{act} 元連立一次方程式となる。それを解くことで，すべり速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ が求められる。行列形式では次のように書ける。

$$\left(\dot{\gamma}^{(\beta)} \right) = \left[N^{\alpha\beta} \right]^{-1} \left(\mathbf{p}^{(\alpha)} : \mathbf{C}^e : \mathbf{D} \right) \tag{10.70}$$

しかしながら，時間非依存の結晶塑性には， $N^{\alpha\beta}$ の逆が求められずすべり速度が決定できない，活動すべり系の組み合わせを唯一に決定できないといった問題が発生することがある。その対策の一つとして，特異値分解を用いて $N^{\alpha\beta}$ の擬逆を求める方法が提案されている。一方，本来，塑性変形は時間依存性を有しており，時間非依存の結晶塑性は理想化したモデルである。このことを考慮すると，時間依存の結晶塑性の方が物理的に妥当と解釈できる。次節に示すように，時間依存モデルにおいては全てのすべり系が活動すべり系であり，活動すべり系の決定に関する問題はなくなり，すべり速度も容易に決定できる。

10.2.8. 時間依存の結晶塑性

応力-ひずみ曲線がひずみ速度に依存する時間依存モデル (rate dependent model) として，粘塑性モデル (viscoplastic model) について単軸引張を例にとり考える。一般的には，ひずみ速度が速いほど塑性流動応力が大きくなる。このよ

うな挙動は次式のクリープ型の粘塑性モデルによって表すことができる。

$$\sigma = g \left(\frac{\dot{\epsilon}^p}{\dot{\epsilon}_0} \right)^m \quad (10.71)$$

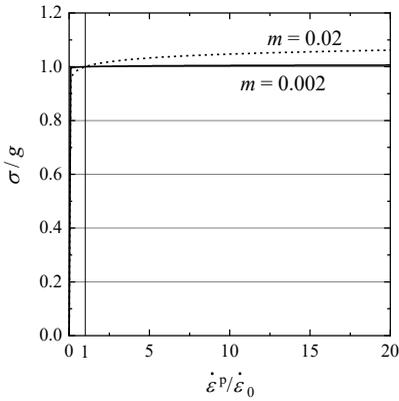
ここで、 g は塑性ひずみ速度が $\dot{\epsilon}_0$ の時の塑性流動応力であり、 $\dot{\epsilon}_0$ は基準ひずみ速度、 m はひずみ速度感受性指数である。室温の金属は、 $0 \leq m \leq 0.05$ 程度の大きさである。塑性ひずみ速度 $\dot{\epsilon}^p$ が基準ひずみ速度 $\dot{\epsilon}_0$ と一致する時、 m に関わらず $\sigma = g$ である。一方、 $\dot{\epsilon}^p > \dot{\epsilon}_0$ において $\sigma > g$ となり、逆に $\dot{\epsilon}^p < \dot{\epsilon}_0$ において $\sigma < g$ となり、ひずみ速度に依存して塑性流動応力が変化する。

粘塑性モデルを用いると、式(10.71)を書き換えた次式によって塑性ひずみ速度が表せる。

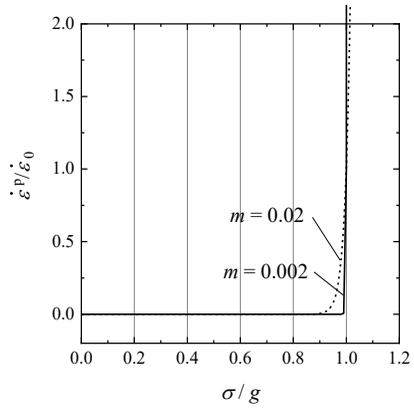
$$\dot{\epsilon}^p = \dot{\epsilon}_0 \left(\frac{\sigma}{g} \right)^{\frac{1}{m}} \quad (10.72)$$

応力 σ が非零であれば、降伏応力以下の応力を負荷しても塑性ひずみが発生することを意味している。これはクリープという現象である。時間非依存の塑性変形では、応力が降伏応力未満であれば塑性変形は起こらないためクリープ現象を表すことはできない。

図 10.25 に粘塑性モデルによって与えられる塑性流動応力と塑性ひずみ速度の関係を示す。(a)より、 $\dot{\epsilon}^p / \dot{\epsilon}_0 = 1$ では $\sigma / g = 1$ であり、基準塑性ひずみ速度の時の塑性流動応力に一致する。一方、 $\dot{\epsilon}^p / \dot{\epsilon}_0 > 1$ においては、 $\sigma / g > 1$ であり、塑性ひずみ速度の増加に伴って塑性流動応力が増加している。 $m = 0.02$ ではこの様子がよくわかるものの、 $m = 0.002$ では塑性流動応力の増加は極わずかである。つまり、 m が小さいと時間依存性はあるもののその量はわずかである。次に、(b)より、応力が降伏応力以下であっても σ / g が 0.9 を超えると塑性ひずみ速度が発生することが分かる。一方、それ以下の応力では、ほとんど塑性ひずみ速度は発生しないこともわかる。 $m = 0.002$ の挙動は、時間非依存の弾塑性に酷似している。



(a) 塑性流動応力



(b) 塑性ひずみ速度

図 10.25 時間依存型の粘塑性モデル

上述のような粘塑性モデルを結晶塑性に適用する際は、次式のように分解せん断応力とすべり速度に対して粘塑性モデルを構築する。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0 \operatorname{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \left(\left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g} \right| \right)^{\frac{1}{m}} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau^{(\alpha)}}{g} \right) \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g} \right|^{\frac{1}{m}-1} \quad (10.73)$$

ここで、 $x > 0$ において $\operatorname{sgn}(x) = 1$ 、 $x < 0$ において $\operatorname{sgn}(x) = -1$ である。粘塑性モデルを使用すると、分解せん断応力が分かれば直ちにすべり速度が決定できる。すべり速度を式(10.46)に代入して塑性速度勾配を求め、式(10.61)に代入して応力速度が得れば応力を更新できる。

粘塑性モデルを使用する際、すべり速度は応力の $1/m$ 乗で与えられる。つまり、 $0 \leq m \leq 0.05$ とすると $20 \sim \infty$ 乗であり、分解せん断応力のわずかな変化によって、すべり速度は大きく変化することになる。簡単な前進 Euler 法によって増分計算する際は、時間増分を極めて小さくして応力増分を小さくする必要がある。計算を効率化する方法として、rate-tangent modulus 法がよく用いられる。また、陰解法に基づいた応力積分方法もある。

10.2.9. 単結晶の弾粘塑性モデルによる数値計算

均一変形する物体の変形解析を行う。つまり、物体内部において応力（速度）および速度勾配は一様とする（変形を表す量として、ひずみ速度（変形速度）は物体の回転を表す情報を持っていないので不十分である）。この解析において、応力速度の 6 成分と速度勾配の 9 成分の合計 15 個の成分が変数である。これらの関係をもう少し詳しく見ていく。

Jaumann 速度の定義と速度形の構成式 ($\overset{\circ}{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C}^e : \mathbf{D} - \mathbf{P}$) より、次式を得る。

$$\overset{\circ}{\boldsymbol{\sigma}} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \mathbf{W} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{W} = \mathbf{C}^e : \mathbf{D} - \mathbf{P}$$

変形速度と連続体スピンを速度勾配によって書き表す。

$$\overset{\circ}{\boldsymbol{\sigma}} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{L}^T) \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{L}^T) = \mathbf{C}^e : \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{L}^T) - \mathbf{P}$$

応力速度 $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$ に関して整理すると次のように書ける。

$$\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{\sigma}} &= \mathbf{C}^e : \mathbf{L} + \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{L}^T) \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{L}^T) - \mathbf{P} \\ &= \tilde{\mathbf{C}} : \mathbf{L} - \mathbf{P} \end{aligned} \quad (10.74)$$

ここで、

$$\tilde{C}_{ijkl} = C_{ijkl}^e + \frac{1}{2}(\delta_{ik}\sigma_{lj} - \delta_{il}\sigma_{kj} - \sigma_{ik}\delta_{jl} + \sigma_{il}\delta_{jk}) \quad (10.75)$$

である。導出過程を以下に示す。

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{ij} &= C_{ijkl}^e L_{kl} + \frac{1}{2}(L_{im} - L_{mi})\sigma_{mj} - \frac{1}{2}\sigma_{im}(L_{mj} - L_{jm}) \\ &= C_{ijkl}^e L_{kl} + \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{ml}L_{kl} - \delta_{mk}\delta_{il}L_{kl})\sigma_{mj} - \frac{1}{2}\sigma_{im}(\delta_{mk}\delta_{jl}L_{kl} - \delta_{jk}\delta_{ml}L_{kl}) \\ &= \left\{ C_{ijkl}^e + \frac{1}{2}((\delta_{ik}\delta_{ml} - \delta_{mk}\delta_{il})\sigma_{mj} - \sigma_{im}(\delta_{mk}\delta_{jl} - \delta_{jk}\delta_{ml})) \right\} L_{kl} \\ &= \left\{ C_{ijkl}^e + \frac{1}{2}(\delta_{ik}\sigma_{lj} - \delta_{il}\sigma_{kj} - \sigma_{ik}\delta_{jl} + \sigma_{il}\delta_{jk}) \right\} L_{kl} \\ &= \tilde{C}_{ijkl}L_{kl} - P_{ij} \end{aligned}$$

$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \tilde{\mathbf{C}} : \mathbf{L} - \mathbf{P}$ は 6 元連立方程式である。 $\tilde{\mathbf{C}}$ および \mathbf{P} は構成式より求められる既知の値である。一方、応力速度の 6 成分と速度勾配の 9 成分の合計 15 成分が未

知変数である。ただし、構成式によって 15 成分のうち 6 成分は関連付けられているので、独立な未知成分は 9 個である。解析者はこれら 9 個の成分を任意に指定できる。もしくは、これらを指定しなければ、変形状態を既定できない。

ここでは、単結晶の単軸引張試験を解析する。単軸応力状態を実現するために応力速度について以下の 5 個の成分を指定する。

$$\dot{\sigma}_{22} = \dot{\sigma}_{33} = \dot{\sigma}_{12} = \dot{\sigma}_{23} = \dot{\sigma}_{31} = 0 \quad (10.76)$$

次に、速度勾配について、次のように 4 個の成分を指定する。

$$L_{11} = a, \quad L_{21} = L_{31} = L_{32} = 0 \quad (10.77)$$

ここで、 L_{11} は引張ひずみ速度を指定する役割を持っている。 $L_{21} = L_{31} = L_{32} = 0$ は剛体回転を固定する役割を持っている。仮に L_{12} と L_{21} の両者を未知数とおくと、 $W_{12} = (1/2)(L_{12} - L_{21})$ を唯一に決めることができず、いかなる回転も許容してしまう。単軸引張を想定すると、試験片がチャックで固定されているため L_{21} が非零のような変形は極めて起こりにくい(図 10.26)。したがって、 $L_{21} = 0$ とした。 $L_{31} = 0$ も同じである。一方、 $L_{32} = 0$ には明確な根拠はなく、 $x_1 - x_2$ 面が同じ平面を保つように指定した。

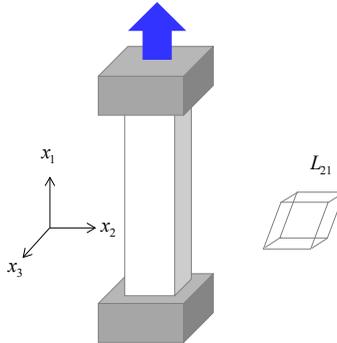


図 10.26 単軸引張を受ける単結晶

$\dot{\sigma} = \tilde{\mathbf{C}} : \mathbf{L} - \mathbf{P}$ の形の構成式を行列で表すと次式となる。

$$\begin{pmatrix} \dot{\sigma}_{11} \\ \dot{\sigma}_{22} \\ \dot{\sigma}_{33} \\ \dot{\sigma}_{12} \\ \dot{\sigma}_{23} \\ \dot{\sigma}_{31} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{C}_{1111} & \tilde{C}_{1122} & \tilde{C}_{1133} & \tilde{C}_{1112} & \tilde{C}_{1121} & \tilde{C}_{1123} & \tilde{C}_{1132} & \tilde{C}_{1131} & \tilde{C}_{1113} \\ \tilde{C}_{2211} & \tilde{C}_{2222} & \tilde{C}_{2233} & \tilde{C}_{2212} & \tilde{C}_{2221} & \tilde{C}_{2223} & \tilde{C}_{2232} & \tilde{C}_{2231} & \tilde{C}_{2213} \\ \tilde{C}_{3311} & \tilde{C}_{3322} & \tilde{C}_{3333} & \tilde{C}_{3312} & \tilde{C}_{3321} & \tilde{C}_{3323} & \tilde{C}_{3332} & \tilde{C}_{3331} & \tilde{C}_{3313} \\ \tilde{C}_{1211} & \tilde{C}_{1222} & \tilde{C}_{1233} & \tilde{C}_{1212} & \tilde{C}_{1221} & \tilde{C}_{1223} & \tilde{C}_{1232} & \tilde{C}_{1231} & \tilde{C}_{1213} \\ \tilde{C}_{2311} & \tilde{C}_{2322} & \tilde{C}_{2333} & \tilde{C}_{2312} & \tilde{C}_{2321} & \tilde{C}_{2323} & \tilde{C}_{2332} & \tilde{C}_{2331} & \tilde{C}_{2313} \\ \tilde{C}_{3111} & \tilde{C}_{3122} & \tilde{C}_{3133} & \tilde{C}_{3112} & \tilde{C}_{3121} & \tilde{C}_{3123} & \tilde{C}_{3132} & \tilde{C}_{3131} & \tilde{C}_{3113} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} L_{22} \\ L_{33} \\ L_{12} \\ L_{21} \\ L_{23} \\ L_{32} \\ L_{31} \\ L_{13} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} P_{11} \\ P_{22} \\ P_{33} \\ P_{12} \\ P_{23} \\ P_{31} \end{pmatrix}$$

ここで、指定した成分を赤字で示した． $\dot{\sigma}_{ij}$ 、 L_j の内、黒字の成分は未知数であり、これらを求めていく．式(10.76)、(10.77)において指定した値を代入して式変形すると次のようになる．

$$\begin{pmatrix} \dot{\sigma}_{11} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - a \begin{pmatrix} \tilde{C}_{1111} \\ \tilde{C}_{2211} \\ \tilde{C}_{3311} \\ \tilde{C}_{1211} \\ \tilde{C}_{2311} \\ \tilde{C}_{3111} \end{pmatrix} - 0 \begin{pmatrix} \tilde{C}_{1121} \\ \tilde{C}_{2221} \\ \tilde{C}_{3321} \\ \tilde{C}_{1221} \\ \tilde{C}_{2321} \\ \tilde{C}_{3121} \end{pmatrix} - 0 \begin{pmatrix} \tilde{C}_{1132} \\ \tilde{C}_{2232} \\ \tilde{C}_{3332} \\ \tilde{C}_{1232} \\ \tilde{C}_{2332} \\ \tilde{C}_{3132} \end{pmatrix} - 0 \begin{pmatrix} \tilde{C}_{1131} \\ \tilde{C}_{2231} \\ \tilde{C}_{3331} \\ \tilde{C}_{1231} \\ \tilde{C}_{2331} \\ \tilde{C}_{3131} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} P_{11} \\ P_{22} \\ P_{33} \\ P_{12} \\ P_{23} \\ P_{31} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{C}_{1122} & \tilde{C}_{1133} & \tilde{C}_{1112} & \tilde{C}_{1123} & \tilde{C}_{1113} \\ \tilde{C}_{2222} & \tilde{C}_{2233} & \tilde{C}_{2212} & \tilde{C}_{2223} & \tilde{C}_{2213} \\ \tilde{C}_{3322} & \tilde{C}_{3333} & \tilde{C}_{3312} & \tilde{C}_{3323} & \tilde{C}_{3313} \\ \tilde{C}_{1222} & \tilde{C}_{1233} & \tilde{C}_{1212} & \tilde{C}_{1223} & \tilde{C}_{1213} \\ \tilde{C}_{2322} & \tilde{C}_{2333} & \tilde{C}_{2312} & \tilde{C}_{2323} & \tilde{C}_{2313} \\ \tilde{C}_{3122} & \tilde{C}_{3133} & \tilde{C}_{3112} & \tilde{C}_{3123} & \tilde{C}_{3113} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} L_{22} \\ L_{33} \\ L_{12} \\ L_{23} \\ L_{13} \end{pmatrix} \quad (10.78)$$

ここで、6元連立方程式に対して、右辺の未知数は5個である．左辺に未知数を含む1行目を削除して、2～6行目による5元連立方程式を作製する．

$$\begin{pmatrix} -a\tilde{C}_{2211} + P_{22} \\ -a\tilde{C}_{3311} + P_{33} \\ -a\tilde{C}_{1211} + P_{12} \\ -a\tilde{C}_{2311} + P_{23} \\ -a\tilde{C}_{3111} + P_{31} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{C}_{2222} & \tilde{C}_{2233} & \tilde{C}_{2212} & \tilde{C}_{2223} & \tilde{C}_{2213} \\ \tilde{C}_{3322} & \tilde{C}_{3333} & \tilde{C}_{3312} & \tilde{C}_{3323} & \tilde{C}_{3313} \\ \tilde{C}_{1222} & \tilde{C}_{1233} & \tilde{C}_{1212} & \tilde{C}_{1223} & \tilde{C}_{1213} \\ \tilde{C}_{2322} & \tilde{C}_{2333} & \tilde{C}_{2312} & \tilde{C}_{2323} & \tilde{C}_{2313} \\ \tilde{C}_{3122} & \tilde{C}_{3133} & \tilde{C}_{3112} & \tilde{C}_{3123} & \tilde{C}_{3113} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} L_{22} \\ L_{33} \\ L_{12} \\ L_{23} \\ L_{13} \end{pmatrix} \quad (10.79)$$

式(10.79)を未知数を (x) とする $(b)=[A](x)$ の連立方程式と見做して、

$(x)=[A]^{-1}(b)$ と解くことで、未知であった速度勾配が求められる。速度勾配の全成分が求められたので、式(10.74)または式(10.60), (10.62)を用いることで、応力速度 $\dot{\sigma}_{11}$ が求められる。このようにして未知であった応力速度と速度勾配を求めることができる。

10.2.10. 転位密度に基づいた結晶塑性モデル

上述の結晶塑性モデルにおいて、臨界分解せん断応力は材料定数として与えられ、すべり系の加工硬化は累積すべり γ_A の関数として与えられた。これに対して、転位密度を基にしたモデルがある。すべり抵抗は転位密度の平方根に比例するという Bailey–Hirsch の実験結果をもとに次式で与えられる。

$$g^{(\alpha)} = \tau_0 + \bar{\alpha}\mu b \sqrt{\sum_{\beta} A^{\alpha\beta} \rho^{(\beta)}} \quad (10.80)$$

ここで、 τ_0 は格子摩擦、 $\bar{\alpha}$ は材料定数で 0.2~0.5 程度の値をとる。 μ はせん断弾性係数、 b は Burgers ベクトルの大きさ、 $\rho^{(\alpha)}$ はすべり系 α に関連した転位密度、 $A^{\alpha\beta}$ は転位の切りあい等の強度を表す相互作用行列である。Fcc 結晶の場合、 $A^{\alpha\beta}$ は 12×12 の 144 成分を有する。しかしながら、結晶の対称性を考慮すると、以下の 6 種類の相互作用に分類できる。 A_{self} : self-interaction, A_{cp} : coplanar interaction, A_{cl} : colinear interaction, A_{gl} : glissile junction, A_{LC} : Lomer–Cottrell lock, A_{H} : Hirth lock である。 $A^{\alpha\beta} = 1$ とおけば、転位の相互作用は等しくなる。一方、転位動力学法によるシミュレーションより⁴、 $A_{\text{self}} = A_{\text{cp}} = A_{\text{LC}} = 1$ 、 $A_{\text{cl}} = 5.12$ 、 $A_{\text{H}} = 0.57$ 、 $A_{\text{gl}} = 1.12$ と報告されている。

転位密度の発展則として、Kocks–Mecking モデルと呼ばれる次式が適用される。

$$\dot{\rho}^{(\alpha)} = \frac{1}{b} \left(\frac{\sqrt{\sum_{\beta} B^{\alpha\beta} \rho^{(\beta)}}}{k_1} - k_2 \rho^{(\alpha)} \right) |\dot{\gamma}^{(\alpha)}|, \quad (81)$$

ここで、 k_1 、 k_2 は材料定数である。 $B^{\alpha\beta}$ は転位の相互作用行列である。第一項は転位の自由飛行工程に関する項、第二項は回復項である。簡易的には、 $B_{\text{self}} = B_{\text{cp}} = 0$ とし、その他を 1 とおく。

⁴ Kubin, L., Devincere, B., & Hoc, T. (2008). Acta Materialia, **56**(20), 6040-6049.

10.3. 多結晶塑性

10.2 節において、単結晶の塑性変形を表す結晶塑性の基礎を示した。多結晶体の弾塑性変形を解析するには、上述の結晶塑性を結晶粒内部の変形に適用すればよい。多結晶体の解析として最も分かりやすい方法は、有限要素法によって多結晶体を離散化することである。個々の要素の積分点における変形を結晶塑性で解析すれば、多結晶体の変形解析が実施できる。その方法は、10.3.2 および 10.3.3 に示す。

一方、有限要素法を使用すると多くの解析時間が必要となる。そこで、近似的に解析する方法として、Taylor モデル、Sachs モデル、各種 Self-consistent モデル、Alamel モデルが開発されている。次節では、最も簡単でありつつ、定性的な挙動を再現可能な Taylor モデルについて説明する。

10.3.1. Taylor モデル

本節で述べる Taylor は、元々、Taylor が提案した“結晶粒の塑性ひずみと巨視的な塑性ひずみは一致する”と言う仮定ではなく、Asaro–Needleman による“各結晶粒内の速度勾配は一定であり、巨視的な速度勾配に一致する（速度勾配の代わりに変形勾配としても同じである）”という仮定である。速度勾配は全ての結晶粒で等しいものの、結晶方位に依存して弾性成分と塑性成分の割合は個々の結晶粒で異なる。その結果、個々の結晶粒の応力も異なっている。

i 番目の結晶粒の応力を $\boldsymbol{\sigma}^i$ 、速度勾配を \mathbf{L}^i 、塑性ひずみ速度を $\mathbf{D}^p{}^i$ とする。これらの巨視的な量を以下の様に定義する。

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{N_g} \sum_{i=1}^{N_g} \boldsymbol{\sigma}^i, \quad \bar{\mathbf{L}} = \mathbf{L}^i, \quad \bar{\mathbf{D}}^p = \frac{1}{N_g} \sum_{i=1}^{N_g} \mathbf{D}^p{}^i \quad (i=1, \dots, N_g) \quad (10.82)$$

ここで、 N_g は結晶粒数を表しており、各結晶粒の体積は等しいと仮定する。

巨視的な速度勾配が与えられると、個々の結晶粒の速度勾配は $\mathbf{L}^i = \bar{\mathbf{L}}$ と与えられる。速度勾配 \mathbf{L}^i より、10.2.5 節の手順に沿って Cauchy 応力の Jaumann 速度が次のように与えられる。

$$\overset{\circ}{\boldsymbol{\sigma}}^i = \mathbf{C}^{el} : \mathbf{D}^i + \mathbf{P}^i = \mathbf{C}^{el} : \bar{\mathbf{D}} + \bar{\mathbf{P}}^i \quad (10.83)$$

ここで、Taylor モデルの仮定より個々の結晶粒の変形速度は巨視的な変形速度と同じであるという条件を用いた。全ての結晶粒に対して応力速度を計算し、体積平均を求めることで巨視的な Cauchy 応力の Jaumann 速度が得られる。

$$\overset{\circ}{\boldsymbol{\sigma}} = \bar{\mathbf{C}}^e : \bar{\mathbf{D}} + \bar{\mathbf{P}} \quad (10.84)$$

$$\overset{\circ}{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{N_g} \sum_{i=1}^{N_g} \overset{\circ}{\boldsymbol{\sigma}}^i, \quad \bar{\mathbf{C}}^e = \frac{1}{N_g} \sum_{i=1}^{N_g} \mathbf{C}^{el}, \quad \bar{\mathbf{P}} = \frac{1}{N_g} \sum_{i=1}^{N_g} \mathbf{P}^i \quad (10.85)$$

この後、式(10.74)の導出と同様にして次式を得る。

$$\dot{\bar{\boldsymbol{\sigma}}} + \bar{\mathbf{P}} = \tilde{\tilde{\mathbf{C}}} : \bar{\mathbf{L}} \quad (10.86)$$

$$\tilde{\tilde{\mathbf{C}}}_{ijkl} = \bar{\mathbf{C}}_{ijkl}^e + \frac{1}{2} (\delta_{ik} \bar{\sigma}_{lj} - \delta_{il} \bar{\sigma}_{kj} - \bar{\sigma}_{ik} \delta_{jl} + \bar{\sigma}_{il} \delta_{jk}) \quad (10.87)$$

10.2.8 節で述べた方法と同様で、巨視的な速度勾配と応力速度の 15 個の変数の内、9 個を指定する。例えば、板材の単純せん断の場合は、

$$\bar{L}_{12} = a, \quad \bar{L}_{11} = \bar{L}_{22} = \bar{L}_{21} = \bar{L}_{13} = \bar{L}_{31} = \bar{L}_{23} = \bar{L}_{32} = 0, \quad \dot{\bar{\sigma}}_{33} = 0 \quad (10.88)$$

と規定する。構成式を利用して未知数である \bar{L}_{33} , $\dot{\bar{\sigma}}_{11}$, $\dot{\bar{\sigma}}_{22}$, $\dot{\bar{\sigma}}_{12}$, $\dot{\bar{\sigma}}_{23}$, $\dot{\bar{\sigma}}_{31}$ を求める。以上の計算により、巨視的な速度勾配 $\bar{\mathbf{L}}$ の全成分が決定できる。その後の計算は以下の様である。

各結晶粒について：

- ・速度勾配は $\mathbf{L}^i = \bar{\mathbf{L}}$ として求められる。
- ・応力は既知の値なので、すべり速度および速度勾配の塑性成分が求められる。
- ・速度勾配の弾性寄与成分が求められる。 $\mathbf{L}^* = \mathbf{L} - \mathbf{L}^P$
- ・格子スピンの更新が求められる。 $\mathbf{W}^* = (1/2)(\mathbf{L}^* - \mathbf{L}^{*\top})$
- ・式(10.55), (10.56)より、結晶座標系 $\bar{\mathbf{e}}_i$, すべり系の $\mathbf{s}^{(\alpha)}$, $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ を更新する。
- ・式(10.74)より応力速度が求まり、応力を更新できる。

10.3.2. 計算手順

Taylor モデルを用いた結晶塑性解析プログラム (cp) の計算手順の概要を示

す. なお, 数値積分は前進 Euler 法を用いているため, 時間増分を小さくとる必要がある. Rate tangent modulus 法を使用すれば, より安定した解析が実現できる.

- 1) 材料特性値の読み込み (弾性特性, 塑性特性, 結晶粒数, Euler 角).
- 2) 結晶粒数に対応して, プログラム上の変数を定義.
- 3) 各変数の初期値を設定.
- 4) 結晶座標系を参照して弾性係数テンソルを作成.
- 5) Millar 指数を用いて, 結晶座標系に関する \mathbf{s} , \mathbf{m} の成分を指定.
- 6) 各結晶粒の Euler 角を用いて, 材料座標系に関する \mathbf{s} , \mathbf{m} に変換.
- 7) 正極点図, 逆極点図を作成.
- 8) 固定座標系 (全体座標系) に関する \mathbf{s} , \mathbf{m} に変換.
- 9) 増分解析を開始する.
- 10) 各結晶粒に対して, 以下を求める.
 - ① 結晶座標系を参照した弾性係数テンソルを固定座標系に変換.
 - ② 各すべり系に対して, $\mathbf{p}^{(\alpha)}$, $\boldsymbol{\omega}^{(\alpha)}$, $\tau^{(\alpha)}$, $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$, $\mathbf{C}^e : \mathbf{p}^{(\alpha)} + \boldsymbol{\omega}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega}^{(\alpha)}$ を求める.
 - ③ 足し合わせて, $\mathbf{P} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} (\mathbf{C}^e : \mathbf{p}^{(\alpha)} + \boldsymbol{\omega}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega}^{(\alpha)})$ を求める.
- 11) 各結晶粒の構成式と応力より, 巨視的な $\bar{\mathbf{C}}^e$, $\bar{\mathbf{P}}$, $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ を求める.