完全拘束モデルに基づく α -Ti 合金の低温すべり挙動の解析

盛田 元彰*・梅澤 修**

Journal of Japan Institute of Light Metals, Vol. 60, No. 2 (2010), pp. 61-67

Slip deformation analysis based on full constraints model for α -type titanium alloy at low temperature

Motoaki MORITA* and Osamu UMEZAWA**

Effects of restricted slip conditions on both Taylor factor and plastic strain energy under the condition of tensile yielding have been analyzed in α -titanium alloys at low temperature, using full constraints model. Role of secondary slip systems, i.e. $\langle a \rangle$ basal slip and $\langle c+a \rangle$ pyramidal slip, was clarified, when prismatic slip was dominant. Although no influence of secondary slip conditions on Taylor factor was detected, the plastic strain energy was sensitive to the operating secondary slip systems. When the basal system was chosen as secondary slip, the energy increased in all tensile axes, especially around $\langle 0001 \rangle$. In addition, no basal slip operation decreased the plastic strain energy. In the tensile axis around $\langle 0001 \rangle$, the plastic strain energy was the highest and the operation of $\langle c+a \rangle$ pyramidal slip was necessary. High elastic strain energy, therefore, must be accumulated to a high level around $\langle 0001 \rangle$, since pyramidal slip can be hardly active because of its very high critical resolved shear stress.

(Received June 23, 2009 Accepted October 16, 2009)

Keywords: Taylor factor, critical resolved shear stress, hexagonal close packed structure, fatigue, primary slip

1. 緒 言

α -Ti 合金の低温高サイクル疲労破壊では、試験片内部からのき裂発生が低応力側で顕著に生じる¹⁾。その起点部はファセットを呈し、 $\{0001\}$ 面割れ^{2)~5)} の場合が多い。変形組織は、Planar すべりが支配し、 $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ 転位列が堆積する²⁾。これより、不均一変形に伴う結晶界面における局所的応力集中が高サイクル疲労強度とそのき裂発生に大きく関与していることが推測され、結晶塑性学の理解を加えた疲労変形と破壊機構の検討が必要である。ここで、疲労過程を①微小塑性変形の繰返しによる飽和転位組織の形成、②特定界面などに生じた局所応力場を開放するための局所変形集中や微視割れ、③微小き裂の成長と主き裂選択、④き裂伝播に区別して考える³⁾。③および④の過程では、線形力学（第一近似）に基づき、微小き裂（ファセット）の臨界サイズ⁶⁾ とき裂伝播寿命の解析⁷⁾ が得られる。しかし、①および②の過程は、ミクロかつ断片的な観察と推定に基づいており、結晶塑性学に基づく検討から事象のマクロな裏付けを得て前述の観察結果を補完することが、疲労き裂形成機構の理解に有意義と考える。

過程①では、 $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ すべり系が結晶方位に依存して部分的に生じ、弾性変形と混在する。過程②では、粒内割れの原因がすべり面分離（すべり集中）であれ、微視割れで

あれ、ファセット面上の変形開始が容易でなく、弾性場の蓄積が必要である。多結晶全体が均一変形することを仮定した完全拘束モデル^{10),11)} において、任意微小変形に必要なすべり系の活動を解析（Taylor 解析）すれば、過程①および②で考える弾性場について、ある結晶粒内に必要な二次すべり系を考えることにより考察が可能である。完全拘束モデルは、面心立方構造（FCC）を有する合金を中心に適用され、その均一・大変形の機構解明に役立てられてきた^{8),9)}。しかし、稠密六方構造（HCP）を有する金属では、均一・大変形に及ぼす双晶の影響が大きく¹⁰⁾、すべり変形のみを考慮した Taylor 解析はほとんど適用されない。本研究では、低温域における α -Ti の主すべり系による臨界分解せん断応力（CRSS）の大きな差を考慮するために、発展させた完全拘束モデルを用い、塑性変形に達する仕事量（塑性ひずみエネルギー）と Taylor 因子から、 α -Ti 合金の主すべり系の役割および応力場が蓄積される結晶方位について検討した。

2. 解析方法

2.1 完全拘束モデルの適用

繰返し引張変形により形成された引張応力場内にある任意の結晶粒は、多結晶体中で他の結晶粒で囲まれ拘束状態にある。周りの結晶粒との整合性を維持するために、引張応力場内の結晶粒がすべて同様に変形すると仮定した完全拘束モデル

* 横浜国立大学大学院工学府システム統合工学専攻材料設計工学コース（〒240-8501 神奈川県横浜市保土ヶ谷区常盤台 79-5）。Department of Materials Science and Engineering Division of Systems Integration, Yokohama National University (79-5, Tokiwadai, Hodogaya-ku, Yokohama, 240-8501).

** 横浜国立大学大学院工学研究院（横浜市）。Dept. of Materials Science and Engineering, Yokohama National University (Yokohama-shi, Kanagawa). E-mail: umezawa@ynu.ac.jp

ルを適用した。すなわち、任意の結晶粒に対して完全モデルに基づく多重すべり変形を考えた。引張応力場に対して塑性変形を行うためには5つの独立すべり系が必要である^{8),9)}。試料空間に直交軸 x , y , z 軸を定め、任意の結晶粒に対して z 軸方向にひずみを与えたとき、巨視的に結晶粒に体積変化がなく ($d\epsilon_{xx} + d\epsilon_{yy} + d\epsilon_{zz} = 0$)、等方変形であるとする、(1) および (2) 式が成立する。

$$d\epsilon_{xx} = d\epsilon_{yy} = -\frac{1}{2} d\epsilon_{zz} \quad (1)$$

$$d\gamma_{xy} = d\gamma_{yz} = d\gamma_{zx} = 0 \quad (2)$$

ここで、 $d\epsilon_{xx}$, $d\epsilon_{yy}$, $d\epsilon_{zz}$ は任意の結晶粒の主ひずみ成分、 $d\gamma_{xy}$, $d\gamma_{yz}$, $d\gamma_{zx}$ は任意の結晶粒のせん断ひずみ成分である。次に、結晶粒内で活動した5つの独立すべり系の仕事量の和から、単位体積当たりの仕事量 dw を与える ((3) 式)。 dw 値は、外部応力が結晶粒に与える仕事量に等しく ((4) 式)、 dw 値を塑性ひずみエネルギーと定義する。

$$dw = \sum_i \tau d\gamma_i = \tau \sum_i |d\gamma_i| \quad (i=1,2,\dots,5) \quad (3)$$

$$dw = \tau d\gamma = \sigma_{zz} d\epsilon_{zz} \quad (4)$$

$$\frac{\sigma_{zz}}{\tau} = \frac{d\gamma}{d\epsilon_{zz}} = M \quad (5)$$

次に、(4) 式を変換して、Taylor 因子 M を得る ((5) 式)。 M 値は、1 結晶粒に単位ひずみを与えたとき、活動する5つの独立すべり系のせん断ひずみの和であり、応力方向 (z 軸) と結晶方位との関係に依存する。

2.2 α -Ti の低温すべり変形への完全拘束モデルの発展

2.2.1 稠密六方構造における座標変換

試料空間におけるひずみは、5つの独立すべり系それぞれが活動したときに与えるひずみの和と等しい ((6) 式)。

$$d\epsilon_{ij} = \begin{vmatrix} d\epsilon_{xx} & d\gamma_{xy} & d\gamma_{xz} \\ d\gamma_{yz} & d\epsilon_{yy} & d\gamma_{yz} \\ d\gamma_{zz} & d\gamma_{zy} & d\epsilon_{zz} \end{vmatrix} = \sum_k E_{ij}^k \quad \begin{matrix} (i,j=1,2,3) \\ (k=1,2,\dots,5) \end{matrix} \quad (6)$$

ここで、試料座標系における $\mathbf{E}$ はひずみテンソルであり、試料座標系で指数付けを行ったすべり方向ベクトル $\mathbf{b}$ と、すべり面の法線ベクトル $\mathbf{n}$ を用いて導出した。その際、Fig. 1 に示すように結晶の4指数表記から結晶空間の直行軸へと座標変換を行った。すなわち、4指数 (軸: a^1 , a^2 , a^3 , c ; Fig. 1) で指数付けした $\mathbf{b}^{mbi} [ijkh]$ を斜交座標系 (軸: A^1 , A^2 , C , $\gamma=120^\circ$) の $\mathbf{b}^{norh} [(i-k)(i-j)(c/a) \times h]$ (c/a : 軸比) に置換え、続いて $\mathbf{b}^{norh}$ を直交座標系 (軸: x' , y' , z') で記述した $\mathbf{b}^{orh}$ へ変換した ((7) 式)。

$$\mathbf{b}^{orh} = \mathbf{b}^{norh} \cdot \mathbf{Q} \quad (7)$$

ここで、 $\mathbf{Q}$ は結晶空間における斜交座標系のそれぞれの軸 (A^1 , A^2 , C) の単位ベクトルと結晶空間における直交座標系 (x' , y' , z') のそれぞれの軸の単位ベクトルの関係を表した座標変換テンソルである。なお、すべり面法線ベクトル $\mathbf{n}$ は、同一すべり面上のすべり方向ベクトル2種 ($\mathbf{b}_1^{orh}$, $\mathbf{b}_2^{orh}$) の外積から $\mathbf{n}^{orh}$ を与え ((8) 式)、結晶空間の直交軸でベクトル

Fig. 1 Definition of a and b on the standard stereographic projection of (0001) plane with Miller-Brave index (a^1 , a^2 , a^3 , c), orthogonal coordinates system (x' , y' , z'), nonorthogonal coordinates system (A^1 , A^2 , C) in crystal and orthogonal coordinates system (x , y , z).

表記された $\mathbf{n}^{orh}$ と $\mathbf{b}^{orh}$ を試料空間の直交軸でベクトル表記した $\mathbf{n}$ と $\mathbf{b}$ へ ((9) 式)により変換した。

$$\mathbf{n}^{orh} = \mathbf{b}_1^{orh} \times \mathbf{b}_2^{orh} \quad (8)$$

$$n_{ij} \text{ or } b_{ij} = n_{ij}^{orh} \text{ or } b_{ij}^{orh} \begin{pmatrix} \cos \beta & \cos \alpha \sin \beta & \sin \alpha \sin \beta \\ -\sin \beta & \cos \alpha \cos \beta & \sin \alpha \cos \beta \\ 0 & -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \quad (i,j=1,2,3) \quad (9)$$

ここで、 α と β は、指数付けされたすべり面法線およびすべり方向を材料空間の直交軸による表記に変換する角度パラメータである (Fig. 1)。 α は結晶空間の直交軸 x , y' , z' において、 x 軸を回転軸とした回転角 ($0^\circ < \alpha < 90^\circ$) を表し、 β は結晶空間の直交軸 x' , y'' , z' において z' 軸を回転軸とした回転角 ($0^\circ < \beta < 30^\circ$) を表す。

2.2.2 臨界分解せん断応力の考慮

解析で考慮する変形モードは、 α -Ti 合金の主すべり系^{12)~15)} の $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$, $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$, $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ である。変形双晶および ϵ マルテンサイト変態は考慮しない。各すべり系の CRSS は低温域で大きく異なる^{10)~13),15)} ため、完全拘束モデルにおいて、(3) および (5) 式を、多重すべりを考慮するとした (10) および (11) 式にそれぞれ変換した。なお、降伏応力から直接的に M 値を求められないため、 M 値は1結晶粒に単位ひずみを与えるために必要な活動すべり系のせん断ひずみの和と定義した ((10) 式)。

$$dw = \sum_i \tau_i |d\gamma_i| \quad (i=1,2,\dots,5) \quad (10)$$

$$\frac{\sum_i |d\gamma_i|}{d\epsilon_{zz}} = M \quad (i=1,2,\dots,5) \quad (11)$$

したがって、 z 軸に沿った引張変形は (12) 式で与えられる。

$$\sum_i \tau_i |d\gamma_i| = \sigma_{zz} d\epsilon_{zz} \quad (i=1,2,\dots,5) \quad (12)$$

次に、各すべり系の CRSS 値の比を仮定して M 値と dw 値を

Table 1 Ratios of critical resolved shear stress in major slip systems

Type	Ratio of CRSS		
	{0001} <11 $\bar{2}$ 0>	{01 $\bar{1}$ 0} <11 $\bar{2}$ 0>	{10 $\bar{1}$ 1} <11 $\bar{2}$ 3>
1	1	1	1
2	10	1	10
3	10	1	15
4	15	1	10
5	4	1	22
6	13.5	3	30

Fig. 2 Relationship between critical resolved shear stress (CRSS) and temperature for <a> prismatic, <a> basal and <c+a> pyramidal slips in α -Ti. Dash curved lines indicate scales with 5, 10 and 15 times as large as the CRSS of <a> prismatic slip, respectively. Dashed-dotted line indicates the athermal component of <a> basal slip in pure Ti¹⁴⁾.

解析するために、Table 1 に示す 6 通りのモデル化を行った。Type 1 は 3 つの主すべり系の活動が等価な場合である。その他の Types 2~6 はすべて {01 $\bar{1}$ 0} <11 $\bar{2}$ 0> を優先すべり系とした。Types 2~4 では、二次すべり系 ({0001} <11 $\bar{2}$ 0> および {10 $\bar{1}$ 1} <11 $\bar{2}$ 3>) の選択の影響について、単純モデル化を行った。すなわち、Fig. 2 に示すように、これら二次すべり系の低温域における CRSS 値は、{01 $\bar{1}$ 0} <11 $\bar{2}$ 0> に比べて約 5~15 倍である。そこで、二次すべり系のすべり難度を優先すべり系に比して CRSS 値で 10 倍と仮定した。また、二次すべり系のすべり難度を区別するにあたっては、一方を 15 倍として両者に有意差を設けた。Type 5 および Type 6 は、それぞれ 300K および 77K での CRSS 値より予測される比を与えた。すなわち、{01 $\bar{1}$ 0} <11 $\bar{2}$ 0> および {0001} <11 $\bar{2}$ 0> の CRSS 値には、純 Ti の CRSS 値^{11)~14)}を用いた。ただし、200K 以下の温度域では、変形双晶の影響により {0001} <11 $\bar{2}$ 0> の CRSS は測定が困難であるため¹³⁾、熱活性化過程に基づく熱的成分 τ^* と非熱的成分 τ' との和として $\tau_{\text{basal}} (= \tau^* + \tau')$ を用いた¹⁴⁾。{10 $\bar{1}$ 1} <11 $\bar{2}$ 3> の CRSS 値は、純 Ti 単結晶では変形双晶の発生により測定できないため¹⁰⁾、Ti-7mol%Al 合金の値を用いた¹¹⁾。

3. 解析結果

3.1 すべり系選択に伴う Taylor 因子の変化

3 種すべり系の CRSS の活動が等価な場合 (Type 1), M 値

Fig. 3 Dependence of Taylor factor on tensile axis under the condition of homogeneous primary slips. **Fig. 4** Dependence of Taylor factor on tensile axis under the conditions of Types 2, 3 and 4.

は、引張応力軸方位 $(\alpha, \beta) = (57, 30)$ で最大値 $M_{\text{max}} = 2.792$ 、応力軸方位 $(\alpha, \beta) = (19, 8)$ で最小値 $M_{\text{min}} = 2.075$ である (Fig. 3)。 $\alpha = 45 \sim 65^\circ$ の範囲では、 M 値が大きい ($M = 2.473 \sim 2.792$)。つまり、単軸引張変形においてすべり系の CRSS が等価な場合、 M 値の異方性は小さい。

優先すべり系を {01 $\bar{1}$ 0} <11 $\bar{2}$ 0> に設定し、二次すべり系の選択を変化させた場合 (Types 2~4)、二次すべり系の違いによる M 値およびその応力軸方位への影響はなく、同一である (Fig. 4)。最小値 $M_{\text{min}} = 2.075$ の応力軸方位は $(\alpha, \beta) = (19, 8)$ であり、最大値 $M_{\text{max}} = 3.282$ の応力軸方位は $(\alpha, \beta) = (33, 30)$ である。応力軸方位 $\alpha < 19^\circ$ および $\alpha > 82^\circ$ では、 M 値は Type 1 と同様である。しかし、Type 1 と比較して、 $(\alpha, \beta) = (33, 30)$ と $(\alpha, \beta) = (70, 0)$ を中心とした応力軸方位で、 M 値の増大が顕著である。 $M_{\text{max}} (= 3.282)$ は [0001]–[01 $\bar{1}$ 0] 軸上を $\alpha = 33^\circ$ 傾いていた方位であり、Type 1 ($M_{\text{max}} = 2.792$) よりも大きい。その結果、応力軸方位 $\alpha = 19^\circ$ と $\alpha = 82^\circ$ の近傍では、 M 値に急勾配が生じている。

HCP 構造の主すべり系のみが活動するとした Sachs モデルによる簡易解析では、 $M = 6.5$ との報告がある¹⁶⁾。1 結晶粒内ですべりのみで理想的な変形が得られる場合、全応力軸方位の平均値 M_{ave} は、その約半分である (Type 1: $M_{\text{ave}} = 2.42$, Types 2~4: $M_{\text{ave}} = 2.63$, Types 5~6: $M_{\text{ave}} = 2.46$)。

3.2 塑性ひずみエネルギーに及ぼす二次すべり系選択の影響

{01 $\bar{1}$ 0} <11 $\bar{2}$ 0> を優先すべり系とした場合、 dw 値は二次すべり系の選択により大きく異なる。二次すべり系である {0001} <11 $\bar{2}$ 0> と {10 $\bar{1}$ 1} <11 $\bar{2}$ 3> が等価である場合 (Type 2)、最大値 $dw_{\text{max}} = 24.67$ ($(\alpha, \beta) = (0, 0)$) と最小値 $dw_{\text{min}} = 12.08$ ($(\alpha, \beta) = (79, 22)$) は、 M_{max} および M_{min} と異なる応力軸方位にある (Fig. 5(a))。ただし、 dw 値は、応力軸方位 $(\alpha,$

Fig. 5 Dependence of plastic strain energy on tensile axis under the conditions of Types 2, 3 and 4.

$\beta = (0, 0)$ で最大値 $dw_{\max}$ となり、 α が大になるに伴い $\alpha = 80^\circ$ 近傍まで連続的に減少する。

さらに、 $\{0001\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ を二次すべり系に選択し、錐面すべりの活動を抑制した場合 (Type 3)、Type 2 に比べていずれの方位とも dw 値が大きい (Fig. 5 (b))。最大値 $dw_{\max} = 37.02$ は同じく応力軸方位 $[0001]$ ($(\alpha, \beta) = (0, 0)$) に存在し、最小値 $dw_{\min} = 15.42$ は応力軸方位 ($(\alpha, \beta) = (55, 0)$) にある。また、 $M_{\min}$ および $M_{\max}$ の応力軸方位と異なる。Type 2 の dw 値と比べて、応力軸方位 $\alpha = 0^\circ$ では 1.5 倍、応力軸方位 $\alpha = 77 \sim 90^\circ$ では 1.3~1.4 倍であるのに対し、 $\alpha = 55^\circ$ 近傍では錐面すべりの活動を抑制した影響が認められず、ほぼ同様の値である。

一方、 $\{10\bar{1}1\}\langle 11\bar{2}3 \rangle$ を二次すべり系に選択して、 $\{0001\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ の活動を抑制した場合 (Type 4)、 dw 値は最大値 $dw_{\max}$ を与える応力軸方位 $(\alpha, \beta) = (43, 30)$ の方位を中心に $\alpha = 20 \sim 70^\circ$ の領域で増大した (Fig. 5 (c))。最大値 ($dw_{\max} = 27.79$) は、Type 2 と比べて約 1.3 倍であった。 $\alpha = 0^\circ$ 近傍や、 $\alpha = 90^\circ$ 近傍では dw 値は変化せず、最小値 $dw_{\min}$ は、Type 2 の場合と変化ない。

3.3 低温環境下における α -Ti 合金の変形挙動

300K での各すべり系の CRSS 値 (Type 5) を代入して求めた M 値と dw 値の応力軸方位依存性を評価した。Fig. 6 に示すように M の最大値 $M_{\max} (=2.882)$ は、応力軸方位 $(\alpha, \beta) = (70, 0)$ である。一方、Fig. 7 (a) に示すように dw 値の最

Fig. 6 Dependence of Taylor factor on tensile axis under the conditions of Types 5 and 6.

Fig. 7 Dependence of plastic strain energy on tensile axis under the conditions of Types 5(a) and 6(b).

大値 $dw_{\max} (=54.29)$ は応力軸方位 $(\alpha, \beta) = (0, 0)$ 、最小値 $dw_{\min} (=7.12)$ は応力軸方位 $(\alpha, \beta) = (55, 0)$ である (Fig. 7 (a))。最小値の方位との差が大きくなるにつれ、連続的に dw 値は増加している。77K においても、 M 値は 300K の場合と同様の値を示し、最大値 $dw_{\max} (=74.03)$ 、最小値 $dw_{\min} (=22.89)$ の応力軸方位も変化がない (Fig. 7 (b))。これらの結果は、各すべり系に与えた CRSS 値の比が類似している Type 3 と比べ、 $M_{\max}$ の応力軸に違いがあるが、 dw 値の応力軸方位との関係は、同じ傾向を示している。

4. 考 察

4.1 支配的変形モードの応力軸方位依存性

主すべり系の活動が等価と設定した場合 (Type 1: Fig. 3) と比較して、 $\{01\bar{1}0\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ を優先すべり系と設定した場合 (Types 2~4: Fig. 4)、応力軸方位 $(\alpha, \beta) = (33, 30)$ と $(\alpha, \beta) = (70, 0)$ 近傍において M 値が増加している。これは、優先すべり系である $\{01\bar{1}0\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ の活動する応力軸方位領域を拡大し、そのせん断ひずみを増加する必要があることを示している。そこで、活動すべり系とそのせん断ひずみに着目して議論する。

主すべり系を等価に活動すると設定した場合 (Type 1) と

Fig. 8 Number of active prismatic slip systems under the conditions of Type 1 (a) and Types 2, 3 and 4 (b).

Table 2 Active five independent slip systems and their shear strain for tensile directions A, B and C shown in Figs. 8 (b) and 10 (a)

	A-1	$(\bar{1}100) [\bar{1}1\bar{2}0]$	$(10\bar{1}0) [\bar{1}2\bar{1}0]$	$(0001) [\bar{1}1\bar{2}0]$	$(0001) [\bar{1}2\bar{1}0]$	$(01\bar{1}1) [2\bar{1}\bar{1}3]$
M=3.282		0.898	0.257	0.204	0.553	1.370
	A-2	$(\bar{1}100) [\bar{1}1\bar{2}0]$	$(10\bar{1}0) [\bar{1}2\bar{1}0]$	$(0001) [\bar{1}1\bar{2}0]$	$(0001) [\bar{1}2\bar{1}0]$	$(01\bar{1}1) [\bar{1}\bar{1}23]$
M=3.282		0.257	0.898	0.553	0.204	1.370
	B	$(\bar{1}100) [\bar{1}1\bar{2}0]$	$(0\bar{1}10) [\bar{2}110]$	$(0001) [\bar{1}2\bar{1}0]$	$(\bar{1}101) [2\bar{1}\bar{1}3]$	$(01\bar{1}1) [\bar{1}\bar{1}23]$
M=2.547		0.257	0.257	0.664	0.685	0.685
	C	$(\bar{1}100) [\bar{1}1\bar{2}0]$	$(0\bar{1}10) [\bar{2}110]$	$(0001) [\bar{1}2\bar{1}0]$	$(\bar{1}101) [2\bar{1}\bar{1}3]$	$(01\bar{1}1) [\bar{1}\bar{1}23]$
M=2.882		0.765	0.765	0.551	0.400	0.400

$\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ を優先すべり系と設定した場合 (Types 2~4) とを比較すると、応力軸方位 $\alpha=33^\circ$ 近傍では、 $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ の選択数が、0 から 2 へ増加する (Fig. 8)。 $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ の独立すべり系の最大数は 2 であり、この応力軸方位の変形に対し、 $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ の活動が支配的にみえる。しかし、 M 値の増加は、 β 角によって大きな違いがあり (Fig. 4)、主すべり系の活動する数のみでは、変形に対するすべり系の寄与を十分に議論できない。そこで、 M 値が増加した領域の代表点として、Fig. 8 (b) 中に示す応力軸方位 A: $(\alpha, \beta) = (33, 30)$, B: $(\alpha, \beta) = (33, 0)$, C: $(\alpha, \beta) = (70, 0)$ を選択し、それらの活動すべり系とせん断ひずみを検討し、Table 2 にまとめて示す。

応力軸方位 A は、最大値 $M_{\max}$ であり、主すべり系を等価に活動するとした場合の同様の応力軸方位と比べ、 M 値は 0.941 の増加を示している。また、最小仕事量を示す 5 つの独立なすべり系の可能な組合せは 2 組ある (Table 2 中の A-1 および A-2)。それぞれ、活動する 2 種の $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ のうち 1 種は、大きいせん断ひずみを必要としている。しかし、2 種のすべり系である $(\bar{1}100) [\bar{1}1\bar{2}0]$ および $(10\bar{1}0) [\bar{1}2\bar{1}0]$ の

Fig. 9 Number of active slip systems under the conditions of Types 5 and 6 for prismatic (a) and pyramidal (b).

Schmid 因子 (S 値) は $S=0.128^{15),17)}$ と等しく、両者は等価である。さらに、 S 値が小さく、 $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ の活動は困難である。したがって、Types 2~4 における応力軸方位 A では、他のすべり系が抑制され、 $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ が駆動せざるをえない。同時に 1 つの優先すべり (a 軸方向への変形) のせん断ひずみが大きい場合に $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ (c 軸方向への変形) のせん断ひずみが非常に大である。

応力軸方位 B では、2 種のすべり系 $(\bar{1}100) [\bar{1}1\bar{2}0]$, $(0\bar{1}10) [\bar{2}110]$ の S 値は等しく ($S=0.128^{15),17)}$ 、応力軸方位 A の S 値とも等しい。しかし、2 つのすべり系ともにそれらのせん断ひずみは小さい。したがって、活動する $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ の数は、主すべり系を等価に活動するとしたときと比べ増加しているが、変形に対する寄与は小さい。

応力軸方位 C の場合、 $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ の S 値 ($=0.382$) は大きく、 $(\bar{1}100) \langle 11\bar{2}0 \rangle$ と $(0\bar{1}10) [\bar{2}110]$ の活動は容易である。そのため、応力軸方位 A および B と比べ、二次すべり系の抑制により比較的容易に $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ すべりが活動する応力軸方位の範囲拡大が生じ、そのせん断ひずみも大きくなる。すなわち、二次すべり系を抑制すると $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ は容易に駆動する。

Type 5 および Type 6 において同様に解析した結果 (Fig. 9, Table 3)、応力軸方位 B と C では、選択したすべり系とそのせん断ひずみは、Types 2~4 の場合と同様であり、 $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ の活動の様相は同じである。しかし、応力軸方位 A において、 M 値に上昇は見られない。また、 $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ は選択されず、代わりに $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ より 3 つ選択されている。したがって、 $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ と $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ の 2 つが支配的な方位であると理解できる (Table 3)。

以上をふまえて、4.2 節において $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ による変形支配、4.3 節において均一変形に必要な二次すべり系の役割について考察する。

Table 3 Active five independent slip systems and their shear strain for tensile directions A, B and C shown in Fig. 9

	A-1	(0001) [1120]	(0001) [1210]	(1011) [2113]	(1101) [2113]	(0111) [2113]
A	M=2.341	0.416	0.556	0.685	0.549	0.136
	A-2	(0001) [1120]	(0001) [1210]	(1011) [2113]	(1101) [2113]	(0111) [1123]
A	M=2.341	0.556	0.416	0.549	0.685	0.136
	B	(1100) [1120]	(0110) [2110]	(0001) [1210]	(1101) [2113]	(0111) [1123]
B	M=2.547	0.257	0.257	0.664	0.685	0.685
	C	(1100) [1120]	(0110) [2110]	(0001) [1210]	(1101) [2113]	(0111) [1123]
C	M=2.882	0.765	0.765	0.551	0.400	0.400

4.2 優先すべり系による変形支配

すべてのすべり系の活動度が等しい場合 (Type 1), M 値に急勾配が生じた領域 (A および C) では, $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ は駆動しにくい (Fig. 8 (a)). しかし, $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ が優先すべり系である場合 (Types 2~4), $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ と $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ の活動が困難となり, $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ が駆動せざるをえない (Fig. 8 (b)). その結果, $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ のせん断ひずみが増加し, 変形に対し支配的になる。低温域における CRSS の実験値を設定した場合においても, 応力軸方位 C では同様のことがいえる。しかし, 応力軸方位 A では, 優先すべり系 $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ に加えて, 二次すべり系である $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ がともに変形を支配している。一方, $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ 変形の支配から外れた応力軸方位 B は, $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ の選択数は 2 と多いものの (Fig. 8 (b)), それらのせん断ひずみはいずれも小さく, 変形に対し支配的なすべり系でない (Table 2, 3)。つまり, $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ および $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ が変形を支配している。

次に, 優先すべり系 $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ の活動が塑性変形を支配する応力軸方位について検討する。二次すべり系を設定した場合 (Types 2~4), 応力軸方位 $\alpha=18^\circ$ および 77° 近傍で生じた M 値の急勾配は, $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ の支配する応力軸範囲が拡大したのが要因である (Fig. 4)。応力軸方位 $\alpha=40\sim 77^\circ$ 近傍では, 応力軸方位 A よりも S 値が大きいにもかかわらず^{15),17)}, すべての主すべり系を等価とした場合 (Fig. 3) と比べ, M 値に大きな増加は生じていない (Fig. 4)。これは, 二次すべり系の抑制の有無にかかわらず比較的 M 値が大きく, 主すべり系の選択数にほとんど変化はない (Fig. 8)。また, 二次すべり系を抑制した場合の dw 値は他の応力軸方位と比べ小さい (Fig. 5)。つまり, 応力軸方位 $\alpha=40\sim 70^\circ$ 近傍は, 二次すべり系の影響が小さく, $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ が変形を支配している。

以上より, 二次すべり系を設定した場合 (Types 2~6), 応力軸方位 A と C 近傍, その間の $\alpha=40\sim 77^\circ$ で $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ の活動が変形を支配している。

4.3 均一な塑性変形に必要な二次すべり系とその役割

$\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ が優先する引張変形において, $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ と $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ を二次すべり系に設定した場合 (Type 2: Fig. 5 (a)) と比べ, $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ の活動度を抑制した場合 (Type 3: Fig. 5 (b)) の dw 値は, すべての応力軸方位で増大している。つまり, 任意変形を満足するために最低 1 種の $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ の活動が必要である (Fig. 10 (a))。また, 応

Fig. 10 Number of active slip systems under the conditions of Types 2, 3 and 4 for pyramidal (a) and basal (b).

力軸方位 $\alpha=0\sim 30^\circ$ における dw 値の増加が顕著であり, $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ の活動は応力軸方位 $\alpha=0\sim 30^\circ$ の変形に対し支配的である。ここで, 応力軸方位 $[0001]$ 近傍に注目すると, 他の応力軸よりも比較的 M 値は小さく (Fig. 4), また, 応力軸方位 $\alpha=0\sim 20^\circ$ で $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ は 5 つのすべり系が活動する (Fig. 10 (a))。つまり, $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ の活動は均一な塑性変形に必須である。しかし, 応力軸方位 $[0001]$ において, 低温で $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ の活動の観察は困難である¹⁰⁾。これは, 低温になるに伴い $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ の CRSS 値が増加し^{10),11)}, dw 値が大きくなることが要因である (Fig. 7 (b))。

次に, 応力軸方位 $\alpha=77\sim 90^\circ$ では, $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ を多く選択しているが (Fig. 10 (a)), $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ を抑制したときに dw 値の変化は小さい (Fig. 5)。すなわち, 応力軸方位 $\alpha=77\sim 90^\circ$ では, $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ は変形に対し支配的でない。また, 応力軸方位 $\alpha=45\sim 65^\circ$ でも, $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ を抑制したとき, dw 値はほぼ増加せず, 他のすべり系が支配的である応力軸方位とわかる。

応力軸方位 $\alpha=45\sim 65^\circ$ では, $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ と $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ が独立すべり系として多く選択されている (Fig. 10 (a))。ここで, $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ と $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ を二次すべり系と設定した (Type 2) 場合と, $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ を二次すべり系と設定し $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ を抑制した (Type 4) 場合の dw 値を比較すると, 応力軸方位 $(\alpha, \beta) = (43, 30)$ で $dw_{\max}$ となり, 応力軸方位 $\alpha=30\sim 65^\circ$ で dw 値の増加が見られる (Fig. 5)。したがって, 応力軸方位 $\alpha=30\sim 65^\circ$ で $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ の活動が支配的である。また, すべての応力軸で活動するすべり系でないことから (Fig. 10 (b)), $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ は任意変形に必要なすべり系ではないが, 塑性ひずみエネルギーを小さくするために選択されたすべり系であるといえる。

二次すべり系の活動が共に支配的でない応力軸方位 $\alpha=77\sim 90^\circ$ では, $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ が変形に対する寄与が大である。これは, Schmid 則から考えても活動が容易であるとわか

Fig. 11 Schematic illustration of dominant slip systems for tension in α -titanium at low temperature.

る^{16),17)}。

以上より、優先すべり系 $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ 支配下の変形において、均一な塑性変形を与えるために積極的に活動する主すべり系を Fig. 11 にまとめて示す。二次すべり系の活動が抑制されると $\alpha=0\sim 40^\circ$ の範囲では塑性変形が進行しにくい状況であることが理解できる。

4.4 α -Ti 合金の低温高サイクル疲労におけるすべり変形挙動

300K と 77K の α -Ti 合金の CRSS を用いた解析を行った結果 (Types 5, 6), dw 値が小さく変形が容易な応力軸方位 ($\alpha=40\sim 65^\circ$) では, $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ と $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ の活動が容易である (Fig. 11)。しかし, M 値が大きくなり, $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ と $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ は, 1 結晶粒に単位ひずみを与えるために大きいせん断ひずみを生じる。このとき, 変形に必要な大きいせん断量は, 転位密度を増加させることで補っていると考えられ, $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ と $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ の転位の堆積が容易に生じる状況にある。実際の 77K における高サイクル疲労試験においても, $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ 転位の堆積が観察されており, この解析結果を裏付けるものとなっている²⁾。

最大値 $dw_{\max}$ となる応力軸方位 (α, β) = (0, 0) 近傍では, $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ が支配的であり, その CRSS 値が大きく活動しにくい。疲労材等の TEM 観察においても, $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ の活動は活発ではない²⁾。その結果, 大きな弾性ひずみ場が蓄積され则认为られる。 α -Ti 合金の高サイクル疲労試験では, $\{0001\}$ 界面割れが確認されており¹⁾⁻⁵⁾, $\{0001\}$ ファセットを形成するための開口応力場 (モード I) の存在を裏付けることになる。しかし, この開口応力場のみで, 破壊に至るとは考えにくい。これまでファセット形成機構として, 応力場と外部応力の組合せで $\{0001\}$ ファセットが形成されるモデル²⁾ や, すべり集中に伴うすべり面分離で生じた $\{0001\}$ 界面の微視割れが成長することでファセットが形成されるモデル¹⁸⁾ 等が提案されている。解析の結果, $\{0001\}$ 上では, 堆積転位が生じやすい状態にありすべり面分離が生じた可能性は大きい。しかし, 直接的な実験証拠は得られていない。

また, α -Ti 合金の高サイクル疲労破壊では, $\{0001\}$ ファセットのほかに, $\{10\bar{1}0\}$ ファセット¹⁹⁾ と $\{11\bar{2}2\}$ 双晶ファセット^{20),21)} を起点とする疲労破壊が報告されている。 $\{10\bar{1}0\}$ ファセット形成は, $\{0001\}$ 割れと同様に $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ や $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ の転位堆積に伴う応力集中による破壊である可能性が指摘されている。低温環境下における CRSS を設定した場合において, 応力軸方位 $\alpha=90^\circ$ では dw 値が比較的大き

く (Fig. 7), $\{10\bar{1}0\}$ に垂直な方位に応力場を形成しやすい。 $\{11\bar{2}2\}$ 双晶割れについては, $\{0001\}$ 割れや $\{10\bar{1}0\}$ 割れとは異なる機構であると推測され, 双晶変形を考慮した変形モデルの検討が必要である。

5. 結 言

α -Ti 合金の低温微小塑性変形域における主すべり系の役割と応力場の蓄積について検討した結果, 以下の結論を得た。

(1) 優先すべり系 $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ は, 応力軸方位 (α, β) = (33, 30) 近傍と $\alpha=40\sim 90^\circ$ で支配的である。

(2) $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ は, 応力軸方位 $\alpha=30\sim 65^\circ$ において, 塑性ひずみエネルギーを小さくし, 支配的なすべり系である。

(3) $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ は応力軸方位 $\alpha=0\sim 30^\circ$ において支配的なすべり系である。また, $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ は, すべての応力軸方位において変形に関与しており, 任意変形に必要な不可欠である。

(4) 応力軸方位 (α, β) = (0, 0) で塑性ひずみエネルギーが大きいのは, $\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ の CRSS 値が低温で大きいことが要因である。

(5) 応力軸方位 $\alpha=40\sim 65^\circ$ において, $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ と $\{01\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ の転位の堆積が容易であると推定される。

(6) 応力軸方位 (α, β) = (0, 0) において, 最も大きい弾性エネルギーが蓄積されていると考えられ, $\{0001\}$ 界面割れの要因を与える。

参 考 文 献

- 1) O. Umezawa and K. Nagai: ISIJ Inter., **37** (1997), 1170–1179.
- 2) H. Yokoyama, O. Umezawa, K. Nagai, T. Suzuki and K. Kokubo: Metall. Mater. Trans. A, **31A** (2000), 2793–2805.
- 3) M. R. Bache, W. J. Evans, H. M. Davies: J. Mater. Sci., **32** (1997), 3435–3442.
- 4) C. Sarrazin, R. Chiron, S. Lesterlin, J. Petit: Fatigue Fracture Eng. Mater. Structure, **17** (1994), 1383–1389.
- 5) V. Sinha, M. J. Mills, J. C. Williams: Metall. Mater. Trans. A, **37A** (2006), 2015–2026.
- 6) O. Umezawa, K. Nagai and K. Ishikawa: Tetsu-to-Hagané, **76** (1990), 924–931.
- 7) M. Hamada and O. Umezawa: ISIJ Inter., **49** (2009), 124–131.
- 8) W. F. Hosford: The Mechanics of Crystals and Textured Polycrystals, Oxford Univ. Press (1993), 56–85.
- 9) G. Y. Chin and W. L. Mammel: Trans. Met. Soc. AIME, **239** (1967), 1400–1405.
- 10) S. Hanada: Tetsu-to-Hagané, **4** (1990), 495–502.
- 11) H. Numakura: Materia Jpn., **37** (1998), 117–124.
- 12) H. Conrad, M. Doner and B. Meester: Titanium Science and Technology, Vol. 2, Plenum, New York (1973), 969–1005.
- 13) N. E. Paton and W. A. Backofen: Metall. Trans. **1** (1970), 2839–2847.
- 14) E. D. Levine: Trans. Met. Soc. AIME, **236** (1966), 1558–1564.
- 15) F. Bridier, P. Villechaise and J. Mendez: Acta Mater., **53** (2005), 555–567.
- 16) R. Armstrong, I. Codd, R. M. Douthwaite and N. J. Petch: Phil. Mag., **7** (1962), 45–58.
- 17) F. Bridier, P. Villechaise and J. Mendez: Acta Mater., **56** (2008), 3951–3962.
- 18) M. R. Bache: Inter. J. Fatigue, **25** (2003), 1079–1087.
- 19) E. E. Sackett, L. Germain and M. R. Bache: Inter. J. Fatigue, **29** (2007), 2015–2021.
- 20) C. J. Beevers and M. D. Halliday: Metall. Sci., **3** (1969), 74–79.
- 21) Y. Ono, M. Demura, T. Yuri, T. Ogata, S. Matsuoka, S. Hori: Trans. Jpn. Soc. Mechanical Engineers A, **74** (2008), 329–334.