仮想転位分布によるせん断不適合型双結晶に生ずる 弾性不適合応力の近似評価法

大 橋 鉄 也* 半 澤 宏**

J. Japan Inst. Metals, Vol. 50, No. 11 (1986), pp. 956-960

An Approximate Evaluation Method for Elastic Stresses in Shear
Incompatible Bi-crystals by a Virtual Array of Dislocations

Tetsuya Ohashi* and Hiroshi Hanzawa**

An approximate method is proposed for a solution of local elastic stress that occurs near grain boundary planes by an effect of elastic anisotropy. In this method, the local stress is represented by a sum of internal stresses of grain boundary dislocations which are virtually introduced to satisfy the elastic compatibility condition on grain boundary planes. Stress distribution in a bicrystal of shear incompatible type is calculated by this method and the result agreed well with the one obtained by the finite element method. Employing this method, stress distribution is calculated for bicrystals of various aspect ratios, and it is shown that stress singularity at an edge of grain boundary planes in bicrystals of this type is in the order of $\log r$. The last part of this paper shows that an effect of the elastic incompatibility stresses on movement of lattice dislocations near grain boundary planes can be estimated through an insight into interaction between the lattice and the virtual dislocations.

(Received March 20, 1986)

Keywords : elastic incompatibility stress, grain boundary, approximate evaluation, virtual dislocation arrays, shear incompatible bicrystal, dislocations near grain boundaries

I. 結 言

多結晶体中の結晶粒界面などの近傍に発生する局所的な弾性応力(いわゆる弾性不適合応力)を知ることは、結晶粒内の転位の運動の理解などの点から重要であり、これまでいくつかの解析が行なわれている⁽¹⁾⁻⁽⁸⁾。これらの解析で用いられている方法としては有限要素法⁽¹⁾⁻⁽⁵⁾、差分法⁽⁶⁾および応力関数を用いたもの⁽⁷⁾⁽⁸⁾などがあげられる。しかし、いずれも複雑な手順を経て実際に計算を行なわなければ、結晶転位の受ける影響がどのような性質をもっているか不明なことが多い。

本報は、Eshelby⁽⁹⁾が変態問題を取り扱ったときに示した概念を弾性問題に適用したときに考えられる。上述の問題に対する一近似解法を示し、さらに多結晶体の最も単純なモデルである双結晶の変形解析例を通し、本解法のこの種の問題に対する有効性について検討したものである。

II. 理 論

多結晶体が一様な外力のもとで弾性変形している場合を考える。各々の結晶粒に加わる作用として、外力の作用と、隣接する結晶との界面を通した変形の相互拘束作用を

考えることができる。このような変形状態は弾性変形が線形であることにより、上述の2種類の作用が別々に作用したときに生ずる弾性場を重ね合わせることで得られると考えて良い。いま簡単のために2個の結晶粒を考える(Fig.1(a))。結晶粒AとBは粒界面abで結合した状態で外力を受ける。この状態は前述したように、結晶粒AとBが分離した状態で外力の作用を受けている仮想的状態

Fig.1 Deformation of crystalline aggregate.
(a) Real state; compatible but non-uniform deformation.
(b) Virtual state; uniform but incompatible deformation.

* 株式会社日立製作所日立研究所 (Hitachi Research Laboratory, Hitachi Ltd., Hitachi)

** 北海道大学名誉教授 (Professor Emeritus, Hokkaido University)

(Fig.1(b)) と, 平面 $a'b$ と $a''b$ が同一の変位場をもつ(適合条件)ための結晶粒相互の変形拘束により生ずる状態との和に等しい.

さて, 仮想的状態(Fig.1(b)) では平面 $a'b$ と $a''b$ の間に変位量の跳躍があるが, この跳躍はこの面上に大きさが同じで符号が反対の跳躍量をもつ変位場を重ね合わせることで相殺することができる. 一方跳躍のある変位場は連続体中の転位(いわゆる Volterra 転位)の導入によって得ることができる. よって界面上に適当な Volterra 転位⁽¹⁰⁾の並びを導入することにより, 仮想的に生じていた変位の跳躍は相殺され適合な変形状態が得られる. 幾何学的な考察から, 界面に導入すべき転位の種類と密度は, 塑性 distortion の空間的変動ともなっている転位密度の表式⁽¹¹⁾と全く同様の式により与えられることがわかる. すなわち,

$$\alpha_{hi} = -\varepsilon_{hij}\beta_{ji,l} \quad (1)$$

ただし

$$\beta_{ji} = U_{i,j} \quad (2)$$

ここで, l は座標 x_l による偏微分, U_i は変位の i 成分, β_{ji} は弾性 distortion, α_{hi} は転位線の向きが h , バーガスベクトルの向きが i である連続分布転位の密度を表わすテンソルである. また ε_{hij} は順列テンソルである.

結晶粒相互の変形拘束により生ずる弾性不適合応力は, 導入した転位群の自己応力場を積分することにより得ることができる.

III. せん断不適合型双結晶の弾性変形

Fig.2(a) に示した双結晶を考える. いまこの双結晶を構成する結晶粒 A と B の弾性定数成分の間に一致しないものがあり, 外力の作用下で生ずる z 方向の変位 W につぎのような仮想的な跳躍量がある場合を考える. すなわち,

$$W(-0, y, z) - W(+0, y, z) = Ny \quad (3)$$

ここで N は定数である. せん断不適合型双結晶⁽¹²⁾の変形は実際, このような変形状態と結晶粒界面を通した変形の相互拘束状態との和であると考えられる. 式(2), (3)より弾性 distortion はつぎのようになる.

$$\beta_{23}(-0, y, z) - \beta_{23}(+0, y, z) = N \quad (4)$$

式(1), (4)より式(3)の変位跳躍量を相殺するために必要な転位の密度は

$$\alpha_{33} = N\delta(x) \quad (5)$$

となる. ただし $\delta(x)$ は Dirac のデルタ関数である. 式(5)は界面($x=0$)上に z 方向のらせん転位が一様に分布し, その面密度が N であることを示している.

つぎに, このように分布するらせん転位により生ずる応力場を求める. ただし, 以下では単独の転位の自己応力場として等方性体に対して求められているもの⁽¹⁰⁾を用いる.

結晶粒 A と B がそれぞれ $x < 0$ および $x > 0$ の半無限領域をしめる場合, 連続に分布したらせん転位によって形成

Fig.2 (a) Geometry of the bicrystal employed.
(b) Crystal orientation relation.

される応力場は, 微小転位の応力場を y の無限区間 $[-\infty, +\infty]$ で積分することにより与えられる. 2つの平面 $y = \pm H$ が自由表面であるときの応力場は, 積分を有限区間 $[-H, H]$ で行ない, さらに自由表面 $y = \pm H$ に関する鏡像転位の周期的配列⁽¹⁰⁾によって発生する応力場を重ね合わせる. すなわち

$$\sigma_{yz} = I(x, y) + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \{I(x, y-2kH) + I(x, y+2kH)\} \equiv K(x, y) \quad (6)$$

$$\sigma_{zx} = J(x, y) + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \{J(x, y-2kH) + J(x, y+2kH)\} \equiv L(x, y) \quad (7)$$

ここで

$$I(x, y) = \int_{-H}^H \frac{\mu N}{2\pi} \frac{xd\eta}{x^2 + (y-\eta)^2} = \frac{\mu N}{2\pi} \left[\arctan \frac{y+H}{x} - \arctan \frac{y-H}{x} \right] \quad (8)$$

$$J(x, y) = \int_{-H}^H -\frac{\mu N}{2\pi} \frac{(y-\eta)d\eta}{x^2 + (y-\eta)^2} = \frac{\mu N}{4\pi} \log \frac{x^2 + (y-H)^2}{x^2 + (y+H)^2} \quad (9)$$

であり, μ はせん断剛性率である.

同様の方法により x 軸に垂直な自由表面を導入することができる. すなわち界面に導入した転位列と, それを囲む

4 個の自由表面 (鏡映面) により反射されてできるらせん転位群の周期配列のすべてについて、転位の自己応力場を積分することにより、弾性不適合応力に関する表現が得られる。 $y = \pm H$, $x = \pm W$ を自由表面とすると、この応力場はつぎのように表わされる。

$$\sigma_{yz} = K(x, y) + \sum_{j=1}^{\infty} \{K(x-2jW, y) + K(x+2jW, y)\} \quad (10)$$

$$\sigma_{zx} = L(x, y) + \sum_{j=1}^{\infty} \{L(x-2jW, y) + L(x+2jW, y)\} \quad (11)$$

IV. 応力分布

式 (10), (11) で表わされる級数和を計算機を用いて数値的に求めた。以下では k と j の最大値は 20 とした。このとき双結晶試料の表面 $y = \pm H$ および $x = \pm W$ における $\sigma_{yz}/\mu N$ および $\sigma_{zx}/\mu N$ の値はそれぞれ 4.6×10^{-4} 以下および 1.4×10^{-3} 以下であった。

1. 有限要素法による解析結果との比較

Fig. 2 で示された形状の 3 次元異方性双結晶の弾性変形を有限要素法 (以下 FEM と略) により解析し、式 (10), (11) より得られる結果との比較を行なった。FEM 解析に用いたモデル双結晶の結晶方位関係を Fig. 2(b) に示す。結晶基準軸方位の弾性定数データには Cu (弾性異方性比 $2(S_{11}-S_{12})/S_{44}$ は約 3.2) のもの⁽¹⁰⁾を用いた。以下に FEM 解析で用いた主なデータを示す。

- Fig. 2(b) に示した方位をとるときの弾性コンプライアンス S_{ij} および弾性スティフネス C_{ij}

$$\left. \begin{aligned} S_{22}^A &= S_{22}^B = 11.33 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{N} \\ S_{52}^A &= -S_{52}^B = -7.32 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{N} \\ C_{55}^A &= C_{55}^B = 4.95 \times 10^{10} \text{ N/m}^2 \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

- 公称ひずみ

$$\bar{\epsilon}_{yy} = \Delta H / 2H = 1 \times 10^{-4} \quad (13)$$

ただし ΔH は負荷として面 $y = -H$ の y 方向変位を拘束し、面 $y = H$ に y 方向変位を与えた際の強制変位量である。

- 公称応力

$$\bar{\sigma}_{yy} = \bar{\epsilon}_{yy} / S_{22} = 8.826 \text{ MPa} \quad (14)$$

このときつぎの量が得られる。

- 仮想的なせん断 distortion 差

$$N = \beta_{yz}^A - \beta_{yz}^B = (S_{52}^A - S_{52}^B) \bar{\sigma}_{yy} = -0.129 \times 10^{-3} \quad (15)$$

$$\mu N = C_{55} N = -6.38 \text{ MPa} \quad (16)$$

比較結果を Fig. 3, 4 に示す。FEM 解析の結果は白丸で、また式 (10), (11) による結果を実線で表わしている。本解法を異方性 3 次元体に適用するとき生ずる疑義として (1) z 方向の寸法 D の問題、(2) 転位の自己応力場として等方性体に対するものを用いることの妥当性の問題、があげられる。まず (1) の問題を検討するため、 $D/W = 5$ および $D/W = 10$ の 2 種類のアスペクト比の場合について

Fig. 3 Distribution of σ_{zx} obtained by the finite element method and the present one. Unit of the stress is 10 MPa.

Fig. 4 Distribution of σ_{yz} obtained by the finite element method and the present one. Unit of the stress is 10 MPa.

FEM 解析を行ない、応力分布の比較を行なったところ、両者の間には有意な差は見られなかった。またこれまでの FEM による解析結果⁽²⁾でも D/W がある程度以上の大きになると応力分布に有意な変化は生じなくなることがわかっている。したがって、 z 方向の寸法の十分大きな試料の内部 ($z/D \ll 1$) に生ずる変形状態として本方法による結果を適用することができる。また (2) の問題に対しても、Fig. 3, 4 の比較結果から等方性体に対して与えられている自己応力場を用いても、定性的な点だけでなく定量的にも十分良好な結果が得られることがわかる。

Fig.5 Distribution of σ_{zx} . Aspect ratio H/W of the bicrystal specimen is 3.

Fig.6 Distribution of σ_{yz} . Aspect ratio H/W of the bicrystal specimen is 3.

2. 応力分布

Fig.5, 6 は試料 (アスペクト比 $H/W=3$) に生ずる弾性不適合応力の計算結果を示している。応力値は μN で除して正規化している。界面と自由表面との交差点 ($x=0, y=\pm H$) で応力分布は特異になっている。とくに σ_{zx} はこれらの点で無限大の値となるが、式 (11) を調べると、この特異性は $\log r$ のオーダーであることがわかる。 r は特異点からの距離である。 σ_{yz} は交差点 ($x=0, y=\pm H$) で有限であるが不連続になる。

Fig.7, 8 は試料のアスペクト比 H/W の変化にともなう弾性不適合応力分布の違いを示している。

V. 考 察

以上はせん断変形に仮想的な不適合性が生ずる双結晶の解析例であり、この場合応力場は単に式 (10), (11) の級数和を計算するだけで求められた。またこの級数の収束も試料のアスペクト比によらず良好であった。一方一般の双結

Fig.7 Variation in the distribution of σ_{zx} along $x/W=0$ when the aspect ratio H/W is changed.

Fig.8 Variation in the distribution of σ_{yz} along $x/W=0$ when the aspect ratio H/W is changed.

晶の場合、界面に生ずる仮想的な不適合性にはせん断成分のほかに垂直成分も含まれる。この場合界面には刃状転位成分も導入されるが、刃状転位の自己応力場の場合、その鏡像転位の自己応力場との重ね合わせだけでは自由表面上で (面力) $=0$ の条件が満たされない等の問題がある⁽¹⁰⁾。したがって一般の双結晶に生ずる応力場の解析には、粒界面上の転位列の自己応力場を自由表面上で打ち消すなどのための付加的な手続きが必要になる。このような試みの一例としてはリューススエッジ近傍の応力場の解析⁽¹³⁾がある。

一方定性的な観点に立てば、本手法の最も大きな利点は双結晶のような幾何学的に単純な形状をもつ多結晶材料の粒界の近傍に生ずる弾性不適合応力の、粒内の結晶転位の

運動におよぼす複雑な影響を、比較的簡単にとらえる点にあると思われる。すなわち、粒界近傍に生ずる弾性不適合応力が結晶粒内の転位におよぼす力を評価する際、本手法や FEM 等により弾性変形解析を行ない、得られた応力値を Peach-Koehler の式に代入してそれを計算する方法が考えられる。しかし、本手法で粒界に導入すべき転位の性質が決定できれば、粒界転位列と粒内結晶転位との反発、吸引などの相互作用として結晶転位の受ける力の性質を評価することができる。簡単な例として IV.1. 節で解析した双結晶試料中に z 軸と平行に転位がある場合を考える。試料に生ずる弾性不適合応力は σ_{yz} と σ_{zx} だから、Peach-Koehler の式を用いると、この転位が受ける単位長さあたりの力 $\mathbf{f} = (f_x, f_y, f_z)$ はつぎのようになる。

$$f_x = \sigma_{yz} b_z, \quad f_y = \sigma_{zx} b_z, \quad f_z = 0 \quad (17)$$

ここで $\mathbf{b} = (b_x, b_y, b_z)$ は考えている結晶転位のバーガースベクトルである。式(17)には b_z のみが表われているから、転位線のらせん成分のみが弾性不適合応力によって力を及ぼされること、また Fig.3, 4 で示したように σ_{yz} と σ_{zx} には分布があるから、 $\mathbf{f}$ は試料中の転位の位置によって変化することなどがこの計算から概略得られる結論である。

Fig.9 中の○印は今考えている z 軸方向のらせん転位で矢印が式(17)で得た力 $\mathbf{f}$ を模式的に示している。一方同図中の粒界に並んだ⊗印は式(15)で求められた粒界転位列を表わしたものであるが、この図からわかるように、結晶転位が受ける力 $\mathbf{f}$ の方向は、結晶転位が粒界転位列との相互作用によって受ける引力の方向に一致する。また式(17)に刃状成分が表われなかったことと、刃状転位とらせん転

位が平行な場合には相互作用がない⁽¹⁴⁾こととは符合する。すなわち、この例で示されたように、弾性不適合応力が結晶転位におよぼす作用は、粒界転位列との弾性相互作用によって結晶転位が受ける力に置きかえて考えることができる。そうして、この置きかえは結晶転位の受ける力の概略を、弾性不適合応力の計算を行わずに把握することができるという大きな利点がある。

VI. 結 言

以上の検討の結果、つぎのことが結論される。

(1) 本手法は双結晶のような幾何学的に単純な形状をもつ多結晶材料の粒界の近傍に生ずる弾性不適合応力を評価する方法として簡単で、かつ定量的にも満足しうる結果が得られる。

(2) 粒界近傍での結晶転位の運動を理解するときに重要となる結晶転位に対する弾性不適合応力の作用を、粒界面上に仮想的に導入した転位列と結晶転位との相互作用に置きかえて考えることができ、Peach-Koehler の式を用いるのに比べ、簡単に直観的な方法である。

文 献

- (1) 阿部武治：機械学会論文集，**37** (1971)，2263.
- (2) 大橋鉄也，半澤 宏，岸田路也：日本金属学会誌，**44** (1980)，876.
- (3) 橋本 敏，三浦 精：第 21 回 X 線材料強度シンポジウム講演論文集，日本材料学会，(1984)，138.
- (4) K. Kitagawa, H. Asada, R. Monzen and M. Kikuchi: 私信.
- (5) T. Ohashi: *Proc. 4th JIM Int. Symp. on Grain Boundary Structure and Related Phenomena*, Supplement to Trans. JIM, Vol. 27 (1986), 835.
- (6) R. B. Pipes and N. J. Pagano: *J. Compo. Mat.*, **4** (1970), 538.
- (7) T. W. Chou and J. P. Hirth: *J. Compo. Mat.*, **4** (1970), 102.
- (8) K. T. S. R. Iyenger and R. S. Alwar: *ZaMP*, **14** (1963), 344.
- (9) J. D. Eshelby: *Proc. Roy. Soc.*, **A241** (1957), 376.
- (10) J. P. Hirth and J. Lothe: *Theory of Dislocations*, McGraw-Hill, New-York, (1968), 3, 60, 94, 86, 836.
- (11) E. Kröner: *Annal. Phys.*, **11** (1963), 13.
- (12) R. E. Hook and J. P. Hirth: *Acta Met.*, **15** (1967), 535.
- (13) 大橋鉄也：昭和 51 年度修士論文，北海道大学機械工学科.
- (14) 鈴木秀次：転位論入門，アグネ，(1967)，105.

Fig.9 Schematic illustration of a force acting on screw dislocations near the grain boundary in the shear incompatible bicrystals by an effect of the elastic incompatibility stress.