結晶粒界三重線における弾性不適合の回位モデル
(回位の有限要素モデルの応用)細矢 隆史^{*1}, 加藤 博之^{*2}, 佐々木 一彰^{*2}Disclination model applied to elastic incompatibility at grain boundary triple line
(Application of finite element model of disclination)Takafumi HOSOYA^{*1}, Hiroyuki KATO^{*2} and Kazuaki SASAKI^{*2}^{*1} Graduate School of Engineering, Hokkaido University

N13 W8 Kita-ku, Sapporo 060-8628, Japan

^{*2} Division of Mechanical and Space Engineering, Hokkaido University

N13 W8 Kita-ku, Sapporo 060-8628, Japan

Received 8 June 2015

Abstract

We examined the stress concentration that would occur at grain boundary triple lines during deformation in two copper tricrystals with [011] tilt boundaries; one was a symmetrical tricrystal with respect to the loading axis and the other was an anti-symmetrical one. In principle, the finite element method can provide solutions with prescribed amount of precision for the anisotropic elasticity problem. It was shown that a close approximation was possible by means of a disclination model in elastically homogeneous material. This disclination model was numerically solved with the finite element method proposed in a previous paper (Hosoya, Kato, Sasaki, Trans. JSME, Vol.80, No.819 (2014)). It was concluded that the disclination model is appropriate for estimating the stress concentration at the grain boundary triple lines in deformed polycrystals.

Key words : Stress concentration, Disclination, Dislocation, Elasticity, Non-uniform deformation, Isotropy, Anisotropy, Tricrystal, Grain boundary triple line, Finite element method

1. 緒 言

回位とは回転の食い違いを持つ格子欠陥であり、並進の食い違いである転位とは幾何学的に区別される線状の格子欠陥(線欠陥)である。弾性論では軸対称変形の例とされる場合が多い(Love, 1927), (Timoshenko and Goodier, 1951), (森口, 1957)。回位は転位とほぼ同時期に提案されたものの、転位に比較して回位の存在する例は限定されていて、結晶粒界(Li, 1972), (Taupin, et al., 2013), 双晶界面(Chopra, et al., 1996), 相変態(Müllner and King, 2010)および粒界三重線の構造(Bollmann, 1984, 1988), (Upadhyay, et al., 2011)など、粒界や界面に現れる ledge や step などの結晶格子レベルの組織が多い。最近では、透過電子顕微鏡で観察されたナノ粒子や転位セル構造(Klemm, et al., 2002)にも回位が見出され、その範囲は結晶格子からマイクロ組織へと適用範囲が拡大しつつある。

本論文はよりマクロな視点で、多結晶の変形解析に回位を適用することを初めて試みる。この目的に近い研究として、Ashbyの幾何学的に必要な転位(Geometrically Necessarily Dislocations)(Ashby, 1970)がある。これは、多結晶の変形前は整合であった結晶粒同士が、結晶粒の変形異方性によって不整合にならないように、食い違い分の変位を与える転位が粒界付近に熱的に安定にとどまったものである。粒界では変位の食い違いが問題になるが、粒界三重線では回転の食い違いが問題になり、回転の食い違いは回位の方がより簡単で自然な記述となる。

Ashby の原論文では、回転の食い違いは回位と等価な回転をもたらす転位壁で与えられている。

この様に、これまで回位の概念は強度解析には現れなかったが、結晶粒界三重線に着目した研究は多数ある。例えば、多結晶の高温変形の粒界すべりで三重線に形成されたき裂型ポイドは破壊や再結晶の起点となる (Sisanbaev and Valiev, 1992), (Okada, et al., 2000), (Miura, et al., 2002)。中間温度では、結晶粒の塑性変形と粒界すべりにより粒界三重線に fold と呼ばれる変形帯を形成する (Hashimoto, et al., 1987)。室温での疲労破壊の起点にもなる (Vinogradov and Hashimoto, 1997)。これらの三重線の応力ひずみ挙動を粒内変形から分離し、観察する実験手法が三重結晶実験である。同じ目的で、三重結晶の弾塑性シミュレーションもいくつかの研究がある (Chen, et al., 2000)。変形で三重線に応力集中が現れることは既知であるが、それがくさび型回位の軸対称応力場と類似していることが指摘されたのは比較的近年の近藤と大橋の研究による (近藤, 大橋, 2006), (近藤他, 2006)。

回位の数値が結晶変形へほとんど適用されていない理由として、回位は均質な弾性体で定義され、そのまま不均質材料である多結晶の粒界三重線へ適用できないこと、さらに応力成分の解析解は等方弾性体の軸対称問題に限られていて、一般の弾性異方性体の任意形状の問題に適用できないことが指摘できる。

本研究では、弾性不均質介在物の等価介在物理論 (Eshelby, 1957) や異相界面上のき裂への線形破壊力学の適用 (結城, 1992) などの例に倣って、粒界三重線における応力集中の問題を、回位を用いた均質化による近似を試み、有限要素解析を行う。近似には界面ひずみの不適合も考慮する。またどの程度の精度の近似であるか、実在結晶である三重結晶の解析結果と比較し、検討する。この近似において、筆者らが前報で示した回位の有限要素モデルの手法を適用する (細矢他, 2014)。本研究で考える変形は弾性限度内であるが、変位の不適合によって生じる応力集中を対象にしているため、降伏条件や破壊につながる欠陥からのき裂形成を予測する問題に結果を適用することが出来る。また回位角の計算式や均質化の手法は塑性ひずみまでそのまま適用することが可能である。

2. 有限要素弾性解析

2・1 三重結晶モデル

多結晶体の内部に三次元ネットワークとして存在する粒界三重線について、一点を通る三重線のまわりの軸対称変形を議論するために、均一な引張り応力が作用する平板三重結晶の平面変形を考える。特に、三重結晶では3つの粒界と外表面の自由境界との相互作用が重要なパラメータとなるので、本論文では、3つの粒界で影響が等しくなるように三重線を中心に持つ円板を解析する。さらに後述する様に、回位は円板領域の軸対称変形のみ解析解が存在することも理由となっている。

図1に示すような半径 R の半円を x 軸で対称拘束している場合を考える。周上に与える外力を、 y 方向の分布荷重 p_y とする。このとき、円板が一方向に均一に引張り変形するためには、 p_y は以下の条件を満たさなければならない。図の任意の微小区間 $[y, y+dy]$ の微小台形要素 PQST について、上面 PQ と下面 TS に様な内部応力 σ_0 が作用するとすれば、 y 方向の力のつり合いより、

$$2\sigma_0 R \cos(\theta + d\theta) - 2\sigma_0 R \cos\theta + 2p_y R d\theta = 0. \quad (1)$$

これから $p_y = \sigma_0 \sin\theta$ を得る。円板が均質な等方弾性体 (ヤング率 E) であれば、 y 方向の軸ひずみは一様に σ_0/E である。

図2(a)の様に三重結晶の粒界 GBa, GBb, GBc を配置する。円板の中心軸を三重線とする平面ひずみ問題で、三重線を原点とする直交座標系 $O-xy$ と円柱座標系 $O-r\theta$ を用いる。簡単のため、3つの結晶粒の頂角は等しく $\varphi^1 = \varphi^2 = \varphi^3 = 2\pi/3$ とする。さらに粒界 GBb が y 軸と一致するようにし、 y 軸に対して結晶粒界を左右対称な配置とした。 $\sigma_0 = 100 \text{ MPa}$ となるよう y 方向引張り荷重 p_y を与える。本論文では応力は σ_0 で規格化した値で表記する。

2・2 要素分割

有限要素解析のために三角形一次要素により要素分割を行った (図3)。先ず、四角形で分割し、周方向は等間隔に $\pi/45$ で 90 分割し、半径方向は半径の増加とともに大きくなるよう 60 分割した。半径方向の四角形の大きさは、原点から数えて i 番目の四角形の大きさが、1番目の四角形を基準にして $2i-1$ 倍になるようにした。

Fig.1 An external load $p_y(\theta)$ was applied on the surface of the semicircular region of radius R . This load is subjected to form uniform internal stress σ_0 .

Fig.2 (a) A tricrystal consists of grains #1,2,3 and the grain boundaries GB a, b, c, of which the central angles are ϕ^1, ϕ^2, ϕ^3 . (b) The imaginary single crystal is composed of the grain #1. (c) When this single crystal is deformed uniformly, the angle ϕ^1 changes by $\Delta\phi^1$ and the grain boundaries GB a and c changes their length by ϵ^{1a} and ϵ^{1c} , respectively. (d) If the imaginary deformations of the three grains are put together, voids or overlaps will appear.

Fig.3 The finite element mesh used for the plane strain analysis of a cylinder of radius R . Here, triangular mesh was used.

外周の四角形の縦横比は 1:2 以下に留めている. この四角形を対角線で 4 分割した三角形一次要素とした. 座標については円柱の半径 R で規格化した値で表示する.

総節点数は 10891, 要素数は 21690 となった. 節点応力は節点を共有する 4 つの要素の平均値をとった. 周辺境界上の応力については, 4 次のラグランジュ補間多項式により内点から外挿して決定した. 拘束は原点を完全固定 (変位および回転自由度) した.

2・3 材料特性

立方晶の実用金属材料で, 比較的弾性異方性の大きい銅の室温における弾性定数, $C_{11}=168.4\text{ GPa}$, $C_{12}=121.4\text{ GPa}$, $C_{44}=75.4\text{ GPa}$ を用いた (日本金属学会編, 2004). 弾性異方性因子は 3.21 であり, アルミニウムのおよそ 3 倍である. 同じ材料の多結晶平均としての等方体はヤング率 $E=136\text{ GPa}$, ポアソン比 $\nu=0.33$ とした.

3. 粒界三重線における変形不適合の回位・転位モデル

3・1 均質・等方弾性体におけるくさび型回位

均質弾性体では, 回転の食い違い (不適合ひずみ) は回位と呼ばれている. 平面変形では回転軸を回位線とするくさび型回位を考えれば良く, 等方弾性体では応力場の解析解があるので容易に定量評価することができる. この応力場は円柱の中心に回位線がある場合で軸対称であり, 円柱座標系 $O-r\theta$ では原点で対数型の特異性を示す. 縦弾性係数 E , ポアソン比 ν , 半径 R の円柱において, 回位角 ω のくさび型回位の応力場は, 直交座標系 $O-xy$ において次式となる (Huang and Mura, 1970).

$$\begin{cases} \sigma_x = \frac{E\omega}{4\pi(1-\nu^2)} \left[\frac{1}{2} \ln \frac{x^2+y^2}{R^2} + \frac{y^2}{x^2+y^2} \right], \\ \sigma_y = \frac{E\omega}{4\pi(1-\nu^2)} \left[\frac{1}{2} \ln \frac{x^2+y^2}{R^2} + \frac{x^2}{x^2+y^2} \right], \\ \tau_{xy} = -\frac{E\omega}{4\pi(1-\nu^2)} \frac{xy}{x^2+y^2}. \end{cases} \quad (2)$$

この応力は軸対称であるから, 円柱座標における成分 σ_r と σ_θ が主応力となる. ここで, 式中の回位角 ω は, 仮想的な拘束の無い変形で測った, くさびの中心角であることに注意する. 仮想的に, 無応力状態の円柱に半平面の切れ目を入れ, 半平面を回転する角度が回位角であり, その後, 切れ目を接合したものが回位である. 符号規約は, くさびを除去する場合を正に決める. 正の回位は中心に負の無限大の特異応力を持ち, 負の回位は正の無限大である. 回位の数理の詳細は, 著者らの前報にある (細矢他, 2014).

3・2 均質化モデル

3・2・1 不適合ひずみの回位・転位成分

結晶格子は弾性異方性を有し, 塑性変形ではすべり系の結晶学的異方性が必ず現れる. 三重結晶では, 変形前の熱ひずみや粒界構造に起因する内部応力を無視しても, 変形すれば結晶粒間の相互拘束による不均一応力が避けられない. その原因は, 3 枚の粒界のそれぞれにおける隣接結晶粒間のひずみの不適合であり, Taylor の多結晶変形のモデルや Ashby の GN 転位モデルで議論されている. さらに, 三重線では 3 つの結晶粒の頂角に生じる回転の不適合は必ず存在する. この頂角の不適合による不均一応力が三重結晶の変形では顕著であることは, 三重結晶実験および弾塑性有限要素シミュレーションで確かめられている.

今, この不均一応力を近似的に定量化するために, 変形された三重結晶を, 3 枚の面欠陥と 1 本の三重線上の線欠陥を持ち, 均質な物性の等方弾性体に置き換える. これは一種の均質化の操作であり, 平面ひずみ問題では, 粒界面のひずみの不適合を転位に置き換え, 三重線の回転不適合を回位に置き換える. この大まかな近似により, 実材料の弾性的に不均質な材料の応力場をどの程度の精度で等方弾性体に再現できるかを検討する.

例えば、異相界面のミスフィットひずみの定義、あるいは Eshelby の等価介在物理論の様に、異種材料の変形不適合を測る基準として、拘束が無い変形を比較することから出発する。図 2 (b) のように、破線で囲まれた結晶粒#1 (頂角 φ^1) の拘束が無い変形は、先ず結晶全体を#1 と同じ物質とし、次に、図 2 (c) の様に、結晶全体を外力によって一様変形させ、この時の#1 の頂角を $\varphi^1 + \Delta\varphi^1$ とする。また、界面に平行な方向の垂直ひずみを界面ひずみと呼ぶことにし、粒界 GBa については ε^{1a} 、粒界 GBc については ε^{1c} とする。結晶粒#2 および#3 についても同様に拘束が無い変形を求める。

図 2 (d) の様に、各結晶粒の拘束が無い変形は一般に一致しない。回転成分の不適合により、粒界にくさび形のすき間あるいは重なりが生じ、界面ひずみの不適合により、粒界面に長さの差が現れる。これらの拘束が無い変形における不適合を無くすためには、内部応力による付加的な変形として、不適合ひずみと同じ大きさで反対符号の回位を三重線に、転位を粒界上に配置する。

3・2・2 回転の不適合

拘束の無い変形として求めた結晶粒の頂角の角度変化 $\Delta\varphi$ の総和を、くさび型回位の回位角 ω とする。せん断ひずみとは直角を成す角部の角度変化であることから、拘束が無い変形では 2 つの粒界の頂角の変化はその頂角を成す 2 つの粒界方向のせん断ひずみから直接得ることができる。頂角を構成する粒界 GBa, GBb の界面角度を a , b とする。頂角は $\varphi=b-a$ となる。粒界 GBa, GBb 方向のせん断ひずみを γ^a , γ^b 、結晶粒内の拘束が無い変形によるひずみを ε_x , ε_y , γ_{xy} とすれば、頂角の角度変化 $\Delta\varphi$ は、

$$\begin{aligned}\Delta\varphi &= -\frac{1}{2}\gamma^b + \frac{1}{2}\gamma^a \\ &= -\frac{1}{2}\{(\varepsilon_x - \varepsilon_y)\sin 2b + \gamma_{xy}\cos 2b\} + \frac{1}{2}\{(\varepsilon_x - \varepsilon_y)\sin 2a + \gamma_{xy}\cos 2a\} \\ &= \{(\varepsilon_x - \varepsilon_y)\cos(b+a) + \gamma_{xy}\sin(b+a)\}\sin(b-a),\end{aligned}\quad (3)$$

である。せん断ひずみの差に負符号をとるのは、前述の通り、回位の符号の定義によるものである。頂角 $\varphi=b-a$ を π とすれば、 $\Delta\varphi$ は恒等的に 0 となる。これは直線境界では回位が存在出来ないことによる自明な解である。図 2 (a) の三重結晶の粒界では、結晶粒# p ($p=1, 2, 3$) の拘束が無い変形のひずみを添え字で (ε_x^p , ε_y^p , γ_{xy}^p) と区別すれば、結晶粒# p の頂角の角度変化 $\Delta\varphi^p$ は、界面角度 $a=11\pi/6$ rad, $b=\pi/2$ rad, $c=7\pi/6$ rad より、

$$\begin{cases} \Delta\varphi^1 = -\frac{\sqrt{3}}{2}(\varepsilon_x^1 - \varepsilon_y^1) & \text{Grain\#1,} \\ \Delta\varphi^2 = \frac{\sqrt{3}}{4}(\varepsilon_x^2 - \varepsilon_y^2) + \frac{3}{4}\gamma_{xy}^2 & \text{Grain\#2,} \\ \Delta\varphi^3 = \frac{\sqrt{3}}{4}(\varepsilon_x^3 - \varepsilon_y^3) - \frac{3}{4}\gamma_{xy}^3 & \text{Grain\#3.} \end{cases}\quad (4)$$

回位角は、

$$\omega = \Delta\varphi^1 + \Delta\varphi^2 + \Delta\varphi^3, \quad (5)$$

となる。立方晶の弾性コンプライアンスは、通常、 6×6 行列で表示するから、 $\varepsilon_i = S_{ij}\sigma_j$ ($i, j=1 \cdots 6$) とする時、 $\sigma_2 = \sigma_3 = \sigma_0$ 、他は 0 であるから各ひずみ成分は次式のようになる。

$$\{\varepsilon_x \ \varepsilon_y \ \varepsilon_z, \gamma_{yz} \ \gamma_{zx} \ \gamma_{xy}\} = \{s_{12} \ s_{22} \ s_{32} \ s_{42} \ s_{52} \ s_{62}\}\sigma_0. \quad (6)$$

上式の弾性コンプライアンスは、予め結晶方位へ座標変換したものをを用いる。

3・2・3 界面ひずみ

粒界における界面ひずみの不適合は、拘束が無い変形における界面ひずみの差である．任意の位置の粒界（ a 方向）について、結晶粒#1 と#2 の拘束が無い変形によるひずみの差 $\Delta\epsilon^a = \epsilon^{2a} - \epsilon^{1a}$ の成分を $\Delta\epsilon_x^a$, $\Delta\epsilon_y^a$, $\Delta\gamma_{xy}^a$ とする．界面ひずみの差は、

$$\Delta\epsilon^a = \frac{\Delta\epsilon_x^a + \Delta\epsilon_y^a}{2} + \frac{\Delta\epsilon_x^a - \Delta\epsilon_y^a}{2} \cos 2a + \Delta\gamma_{xy}^a \sin 2a. \quad (7)$$

図 2 (a) の三重結晶の粒界では、結晶粒#2 と#3 の拘束が無い変形によるひずみの差を $\Delta\epsilon^b = \epsilon^{3b} - \epsilon^{2b}$, #3 と#1 の拘束が無い変形によるひずみの差を $\Delta\epsilon^c = \epsilon^{1c} - \epsilon^{3c}$ とすると、次式のようになる．

$$\begin{cases} \Delta\epsilon^a = \frac{3}{4} \Delta\epsilon_x^a + \frac{1}{4} \Delta\epsilon_y^a - \frac{\sqrt{3}}{2} \Delta\gamma_{xy}^a & \text{GB a,} \\ \Delta\epsilon^b = \Delta\epsilon_y^b & \text{GB b,} \\ \Delta\epsilon^c = \frac{3}{4} \Delta\epsilon_x^c + \frac{1}{4} \Delta\epsilon_y^c + \frac{\sqrt{3}}{2} \Delta\gamma_{xy}^c & \text{GB c.} \end{cases} \quad (8)$$

3・2・4 有限要素法

三重結晶の変形で生じる不均一応力について、二次元有限要素弾性解析を行い、均質等方弾性体に回位と転位を配置した近似モデル解を、より正確度の高い実材料の弾性異方性解析解と比較した．ここでは、均質化による近似モデルを D-model (図 4 (a)), 実材料を T-model (図 4 (b)) と呼ぶことにする．

D-model では、回位と転位の解析解を重ね合わせることも考えられるが、結晶表面の自由境界条件が満たされないため、正解である T-model 解と比較できない．そのため有限要素計算を行った．くさび型回位は、著者らの前報(細矢他, 2014)の手法に従って有限要素モデルに導入した．界面ひずみの不適合は、転位の有限要素モデル(岸田他, 1997)(佐々木他, 2000)の手法を応用した．すなわち、式 (8) の不適合ひずみを粒界面に初期ひずみとして分布させる．初期ひずみを与える領域は、要素分割で粒界の両側に四角形要素 1 列ずつの 2 つの扇型領域

Fig.4 (a) The D-model is an elastically homogeneous material, where the dislocation of ω and the boundary strains of $\Delta\epsilon^a$, $\Delta\epsilon^b$ and $\Delta\epsilon^c$ are prescribed. (b) The T-model is elastically inhomogeneous; it is composed of three $[011]$ oriented grains, where these $[011]$ axes make angles ψ^1 , ψ^2 and ψ^3 with respect to the y -axis.

である．粒界を挟んで反平行の初期ひずみを与えた．変位の大きさは，式 (8) の界面ひずみの差を $\Delta\epsilon$ ，三重線から節点までの距離を r として，一方で $r\Delta\epsilon/2$ ，他方で $-r\Delta\epsilon/2$ である．初期ひずみは粒界面方向のせん断ひずみ γ のみで表すことができ，扇型領域の頂角を ϕ とすると， $\gamma \approx -\Delta\epsilon/\phi$ である．

4. 解析結果

4・1 対称傾角粒界を持つ三重結晶

解析例として，立方晶で3つの対称傾角粒界から構成される結晶対称性の高い三重結晶と，ランダム方位で対称性の比較的小さい三重結晶の結果を示す．

等方弾性体では一様変形となる外力を与えても，三重結晶では結晶の弾性異方性によってひずみの主軸が結晶粒間で異なるから，不均一変形となる．結晶の相互方位関係は任意であるが，本研究では平面問題に近づくように，立方晶について，3つの結晶粒が共通の結晶軸[011]を板面法線と平行に持つものとする．すなわち結晶粒は互いに[011]方位の回りの回転関係にある（傾角粒界）．全ての結晶粒が立方晶の弾性異方性の主軸である[100]および[111]を共に面内に含むので，平面変形に近いモデルとなる．

さらに対称性の良い結晶として，3つの粒界が対称傾角粒界となる場合を考える．図4 (b) の様に，結晶粒#1の結晶方位が， x 軸方向に[100]， y 軸方向に[011]， z 軸方向に[011]であり，他の結晶粒は，引張り軸に対する[011]方向の角度 ψ が，結晶粒#1は $\psi^1=0$ rad，#2は $\psi^2=-\pi/3$ rad，#3は $\psi^3=\pi/3$ rad の場合である．外力と平行な粒界 GBb に界面ひずみの不適合は生じないので，不均一変形はその分だけ減じる．さらに粒界 GBa と GBc は幾何学および結晶学的に左右対称であるから，三重結晶全体で左右対称に変形する．回位角は式 (5) より $\omega=9.73 \times 10^{-4}$ rad となる．

この三重結晶は対称性が極めて良く不適合が小さい結晶であるので，D-model と T-model との偏差を明確にするために，界面ひずみ（転位）を考慮せず，回位のみを導入した D-model を作成し，その結果を図5に等高線によって示す．結果は，いずれの応力成分についても，D-model は T-model の分布をほぼ正しく再現していることがわかる．すなわち，実材料の弾性不均質材料でも，回位の等方弾性体近似は有効である．ただし，T-model で粒界 GBa と GBc における応力の不連続は，均質体で界面ひずみの無い D-model では現れない．

三重線近傍のより詳細な比較のため，図5の x 軸上の応力分布を図6に示す．応力分布は y 軸について左右対称であるので $x>0$ の範囲のみを示す．横軸は対数軸とした．D-model は T-model と大まかには一致しており，原点で対数型の特異性が現れていることが確かめられた．垂直応力 σ_x および σ_y はともに偏差があり，原点に近づくにつれその差は大きくなる．また，せん断応力 τ_{xy} は T-model は原点近傍で特異性を示すが，回位モデルである D-model は式 (2) から予測されるように0で一定である．これらの応力成分の偏差は，①弾性異方性によるひずみの異方性によるものであり，D-model の均質等方性の仮定に伴う誤差，②等方弾性体のヤング率の大きさの仮定による誤差，の両方が原因であろう．T-model では，小さな振幅の長周期（およそ R ）の応力振動が見られる．

粒界の長さは円の半径に等しいので，粒界上の応力の連続性は円柱座標 $O-r\theta$ による表示の方がより明瞭である．図7は三重線近傍である $r/R = 4.2 \times 10^{-4}$ の円周上の応力分布を示す．D-model の半径方向応力 σ_r と周方向応力 σ_θ の応力分布は，結晶表面より十分離れているので表面効果（鏡像力など）の影響はほとんど無ければ，式 (1) の外力 p_y により生じる一様な内部応力 $\sigma_y/\sigma_0=1$ の円柱座標成分による周期関数と，式 (2) の回位による一定値の応力を加えたものとなるはずである．

$$\begin{cases} \sigma_r/\sigma_0 = \sin^2 \theta + \frac{E\omega}{4\pi(1-\nu^2)\sigma_0} \ln \frac{r}{R} = \sin^2 \theta - 0.919, \\ \sigma_\theta/\sigma_0 = \cos^2 \theta + \frac{E\omega}{4\pi(1-\nu^2)\sigma_0} \left(\ln \frac{r}{R} + 1 \right) = \cos^2 \theta - 0.801, \\ \tau_{r\theta}/\sigma_0 = \sin \theta \cos \theta. \end{cases} \quad (9)$$

Fig.5 The stresses in the symmetrical tricrystal ($\psi^1=0$ rad, $\psi^2=-\pi/3$ rad, $\psi^3=\pi/3$ rad) under the load of Eq.(1) are shown. The left figures (a), (c), (e) are the stress contours estimated by the D-model, while the right ones (b), (d), (f) are those obtained by the T-model. All the stress components are normalized by the constant σ_0 . $\sigma_0=100$ MPa.

Fig.6 The changes in the x -direction normal stress σ_x , the y -direction normal stress σ_y and shear stress τ_{xy} are shown as functions of r/R . These stresses are normalized by the constant σ_0 . $\sigma_0=100$ MPa.

Fig.7 The changes in the radial stress σ_r , the circumference stress σ_θ and shear stress $\tau_{r\theta}$ at $r/R=4.2 \times 10^{-4}$ are shown as functions of θ . These stresses are normalized by the constant σ_0 . $\sigma_0=100$ MPa.

式 (9) は周期的な応力の下限と上限として、 $-0.92 \leq \sigma_r/\sigma_0 \leq 0.08$, $-0.80 \leq \sigma_\theta/\sigma_0 \leq 0.20$, $-0.5 \leq \tau_{r\theta}/\sigma_0 \leq 0.5$ を与えるが、図 7 の結果とほぼ一致している。周応力 σ_θ とせん断応力 $\tau_{r\theta}$ は、T-model と D-model でともに、粒界での応力の連続性が確かに満たされている。T-model は半径応力 σ_r の粒界上の不連続を明瞭に示し、粒界上の転位の存在を示している。

4・2 非対称傾角粒界を持つ三重結晶

界面について非対称な結晶方位の組み合わせの一例として、結晶粒#1 は $\psi^1=171\pi/180$ rad, #2 は $\psi^2=17\pi/180$ rad, #3 は $\psi^3=48\pi/180$ rad をとった。この場合、界面ひずみの不適合が大きくなるので相当する大きさの初期ひずみを D-model に入力した。D-model のくさび型回位の回位角 ω と界面ひずみの不適合 $\Delta\epsilon$ は式 (5) および (8) より、 $\omega=6.58 \times 10^{-4}$ rad, $\Delta\epsilon^a=1.58 \times 10^{-4}$, $\Delta\epsilon^b=1.45 \times 10^{-4}$, $\Delta\epsilon^c=1.94 \times 10^{-4}$ となる。

解析結果を図 8 に示す。紙面の都合により垂直応力 σ_x および σ_y のみを示す。図より D-model は T-model の複雑な応力分布をおおよそ再現出来ている。この D-model は界面ひずみの不適合を与えているので、粒界上の応力の不連続が表現出来ている。しかしながら、このモデルの誤差は特に粒界近傍に現れた。これは、粒界上における、初期ひずみによる界面ひずみの不適合の与え方も原因の 1 つであろう。一般に、異相界面の計算力学では、内力としてつりあう不適合応力を分布させるため、界面上で二層により共有される節点を分割して強制変位を与えるなど、様々な解析精度を向上させる手法がある (岸田他, 1997), (佐々木他, 2000), (細矢他, 2014)。

Fig.8 The stress fields in the non-symmetrical tricrystal ($\psi^1=171\pi/180$ rad, $\psi^2=17\pi/180$ rad, $\psi^3=48\pi/180$ rad) during deformation are compared between the D-model (the left figures) and the T-model (the right ones). All the stress components are normalized by the constant σ_0 . $\sigma_0=100$ MPa.

本研究の場合，界面近傍の要素分割において，初期ひずみを与える領域の幅（界面に対して垂直な方向）の寸法を小さくすることで精度が向上するであろう．

5. 結言

本研究は，三重結晶の変形における粒界三重線での応力集中を定量的に見積もる手法として，回転の変形不適合の線欠陥である回位を持つ均質な等方弾性体に置き換えて解析する，一種の均質化モデルを提案した．著者らの前報である，応力特異性を持つ格子欠陥である転位および回位を初期ひずみとして有限要素モデルに取り入れる計算手法の具体的な応用例を示した．本研究は，結晶粒界三重線で接合された3つの結晶粒の頂角の不適合を測る指標として，くさび型回位の回位角を用いることを初めて提案した．

本研究では，この近似モデルの精度の検証のために，平面変形に近く，結晶対称性が高い立方晶（純銅）の[011]傾角粒界の例を示した．これらは平面変形であり，不適合ひずみによる不均一応力が比較的小さい例である．三次元変形かつランダムな結晶方位の三重結晶では，より大きな不均一変形が起こりうる．本研究の提案する回位

モデルには適用限界があるか明らかではないが、少なくとも不適合ひずみが小さければ、かなり良い精度を与える近似であることが確かめられた。

文 献

- Ashby, M.F., The deformation of plastically non-homogeneous materials, *The philosophical magazine*, Vol.21 (1970), pp.399-424.
- Bollmann, W., Triple lines in polycrystalline aggregates as disclinations, *Philosophical Magazine A*, Vol.49 (1984), pp.73-79.
- Bollmann, W., Triple-line disclinations Representations, continuity and reactions, *Philosophical Magazine A*, Vol.57 (1988), pp.637-649.
- Chen, C.R., Li, S.X., Wen, J.L. and Jia, W.P., Finite element analysis about effects of stiffness distribution on stresses and elastic strain energy near the triple junction in a tricrystal, *Materials Science and Engineering: A*, Vol.282 (2000), pp.170-176.
- Chopra, H.D., Bailly, C. and Wutting, M., Domain structures in bent In-22.5 at.% Ti polydomain crystals, *Acta Materialia*, Vol.44 (1996), pp.747-751.
- Eshelby, J.D., The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems, *Proceedings of the Royal Society of London Series A, Mathematical and physical science*, Vol.241, No.1226 (1957), pp.376-396.
- Hashimoto, S., Fujii, T.K. and Miura, S., Grain-boundary sliding and triple-point fold in aluminum tricrystals, *Scripta Metallurgica*, Vol.21 (1987), pp.169-179.
- 細矢隆史, 加藤博之, 佐々木一彰, くさび型回位の有限要素モデル, *日本機械学会論文集*, Vol.80, No.819 (2014), DOI:10.1299/transjsme.2014smm0313.
- Huang, W. and Mura, T., Elastic fields and energies of a circular edge disclination and a straight screw disclination, *Journal of Applied Physics*, Vol.41, No.13 (1970), pp.5175-5179.
- 岸田路也, 佐々木一彰, 驛田寛, 転位の有限要素モデル, *日本機械学会論文集 A 編*, Vol.63, No.609 (1997), pp.1076-1082.
- Klemm, V., Klimanek, P. and Motylenko, M., Transmission electron microscopy analysis of disclination structures in plastically deformed metals, *Materials Science and Engineering: A*, Vol.324 (2002), pp.174-178.
- 近藤了嗣, 大橋鉄也, 適合型三重結晶の引張りに伴う結晶粒の多体相互作用と回位型変位場の形成, *日本機械学会論文集 A 編*, Vol.72, No.718 (2006), pp.937-944.
- 近藤了嗣, 大橋鉄也, 三浦精, Cu-9 at.% Al 合金対称双結晶の引張りにおける微視的非適合性と転位密度不均質性の関係, *日本機械学会論文集 A 編*, Vol.72, No.716 (2006), pp.582-589.
- Li, J.C.M., Disclination model of high angle grain boundaries, *Surface Science*, Vol.31 (1972), pp.12-26.
- Love, A.E.H., *A Treatise on the mathematical theory of elasticity*, Cambridge University Press (1927), pp.221-228.
- Miura, H., Andiarwanto, S., Sato, K. and Sakai, T., Preferential Dynamic Nucleation at Triple Junction in Copper Tricrystal During High-Temperature Deformation, *Materials Transactions*, Vol.43 (2002), pp.494-500.
- Müllner, P. and King, A.H., Deformation of hierarchically twinned martensite, *Acta Materialia*, Vol.58 (2010), pp.5242-5261.
- 森口繁一, 二次元弾性論 (1957), pp.45-46, 岩波書店.
- Okada, T., Urushibara, K., Tagami, M., Inoko, F. and Hashimoto, S., Morphology of [011]-tilt $\Sigma 3$ boundaries in pure copper and copper-aluminum alloy tricrystals, *Materials Science and Engineering: A*, Vol.282 (2000), pp.8-15.
- 佐々木一彰, マド・シャム・ミリ, 岸田路也, 任意角傾いた刃状転位の有限要素モデル, *日本機械学会論文集 A 編*, Vol.66, No.651 (2000), pp.1977-1983.
- Sisanbaev, A.V. and Valiev, R.Z., The effect of triple junction type on grain-boundary sliding and accommodation in aluminium tricrystals, *Acta Metallurgica et Materialia*, Vol.40 (1992), pp.3349-3356.
- Taupin, V., Capolungo, C., Fressengeas, C., Das, A. and Upadhyay, M., Grain boundary modeling using an elasto-plastic theory of dislocation and disclination fields, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol.61 (2013), pp.370-384.
- 日本金属学会編, 改訂 4 版金属データブック (2004), pp.31-33, 丸善株式会社.
- Timoshenko, S.P. and Goodier, J.N., *Theory of Elasticity*, Third Edition (1951), p.120, McGraw-Hill.
- Upadhyay, M., Capolungo, L., Taupin, V. and Fressengeas, C., Grain boundary and triple junction energies in crystalline media: A disclination based approach, *International Journal Solids and Structures*, Vol.48 (2011), pp.3176-3193.
- Vinogradov, A. and Hashimoto, S., Effect of triple junction on fatigue crack growth in copper and copper-3at.% aluminum tricrystals, *Scripta Materialia*, Vol.36 (1997), pp.417-423.
- 結城良治, 界面の力学 (1992), 5-7 章, 培風館.

References

- Ashby, M.F., The deformation of plastically non-homogeneous materials, *The philosophical magazine*, Vol.21 (1970), pp.399-424.
- Bollmann, W., Triple lines in polycrystalline aggregates as disclinations, *Philosophical Magazine A*, Vol.49 (1984), pp.73-79.
- Bollmann, W., Triple-line disclinations Representations, continuity and reactions, *Philosophical Magazine A*, Vol.57 (1988), pp.637-649.
- Chen, C.R., Li, S.X., Wen, J.L. and Jia, W.P., Finite element analysis about effects of stiffness distribution on stresses and elastic strain energy near the triple junction in a tricrystal, *Materials Science and Engineering: A*, Vol.282 (2000), pp.170-176.
- Chopra, H.D., Bailly, C. and Wutting, M., Domain structures in bent In-22.5 at.% Ti polydomain crystals, *Acta Materialia*, Vol.44 (1996), pp.747-751.
- Eshelby, J.D., The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems, *Proceedings of the Royal Society of London, Series A, Mathematical and physical science*, Vol.241, No.1226 (1957), pp.376-396.
- Hashimoto, S., Fujii, T.K. and Miura, S., Grain-boundary sliding and triple-point fold in aluminum tricrystals, *Scripta Metallurgica*, Vol.21 (1987), pp.169-179.
- Hosoya, T., Kato, H. and Sasaki, K., Finite element model of wedge disclination, *Transactions of the JSME (in Japanese)*, Vol. 80, No. 819 (2014), DOI:10.1299/transjsme.2014smm0313.
- Huang, W. and Mura, T., Elastic fields and energies of a circular edge disclination and a straight screw disclination, *Journal of Applied Physics*, Vol.41, No.13 (1970), pp.5175-5179.
- Kishida, M., Sasaki, K. and Ekida, Y., Dislocation model in finite element method, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol.63, No.609 (1997), pp.1076-1082 (in Japanese).
- Klemm, V., Klimanek, P. and Motylenko, M., Transmission electron microscopy analysis of disclination structures in plastically deformed metals, *Materials Science and Engineering: A*, Vol.324 (2002), pp.174-178.
- Kondou, R. and Ohashi, T., Multi-body-interaction of crystal grains in compatible-type tricrystals under tensile loading and formation of disclination-type displacement field, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol.72, No.718 (2006), pp.937-944 (in Japanese).
- Kondou, R., Ohashi, T. and Miura, S., Relationship between micro-incompatibility and heterogeneity of dislocation density distribution in Cu-9at.%Al symmetric type bicrystal models under tensile loading, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol.72, No.716 (2006), pp.582-589 (in Japanese).
- Li, J.C.M., Disclination model of high angle grain boundaries, *Surface Science*, Vol.31 (1972), pp.12-26.
- Love, A.E.H., *A Treatise on the mathematical theory of elasticity*, Cambridge University Press (1927), pp.221-228.
- Miura, H., Andiarwanto, S., Sato, K. and Sakai, T., Preferential Dynamic Nucleation at Triple Junction in Copper Tricrystal During High-Temperature Deformation, *Materials Transactions*, Vol.43 (2002), pp.494-500.
- Müllner, P. and King, A.H., Deformation of hierarchically twinned martensite, *Acta Materialia*, Vol.58 (2010), pp.5242-5261.
- Moriguchi, S., *Two-dimensional problems of elasticity* (1957), pp.45-46, Iwanami Shoten Press (in Japanese).
- Okada, T., Urushibara, K., Tagami, M., Inoko, F. and Hashimoto, S., Morphology of [011]-tilt $\Sigma 3$ boundaries in pure copper and copper-aluminum alloy tricrystals, *Materials Science and Engineering: A*, Vol.282 (2000), pp.8-15.
- Sasaki, K., Md sham Miri Abd Rahman and Kishida, M., Finite element model of arbitrary inclined edge dislocations, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A*, Vol.66, No.651 (2000), pp.1977-1983 (in Japanese).
- Sisanbaev, A.V. and Valiev, R.Z., The effect of triple junction type on grain-boundary sliding and accommodation in aluminium tricrystals, *Acta Metallurgica et Materialia*, Vol.40 (1992), pp.3349-3356.
- Taupin, V., Capolungo, C., Fressengeas, C., Das, A. and Upadhyay, M., Grain boundary modeling using an elasto-plastic theory of dislocation and disclination fields, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol.61 (2013), pp.370-384.
- The Japan Institute of Metals ed., *Metal data book*, Forth edition (2004), pp.31-33, Maruzen Co., Ltd. (in Japanese).
- Timoshenko, S.P. and Goodier, J.N., *Theory of Elasticity*, Third Edition (1951), p.120, McGraw-Hill.
- Upadhyay, M., Capolungo, L., Taupin, V. and Fressengeas, C., Grain boundary and triple junction energies in crystalline media: A disclination based approach, *International Journal Solids and Structures*, Vol.48 (2011), pp.3176-3193.
- Vinogradov, A. and Hashimoto, S., Effect of triple junction on fatigue crack growth in copper and copper-3at.% aluminum tricrystals, *Scripta Materialia*, Vol.36 (1997), pp.417-423.
- Yuuki, R., *Mechanics of Interface* (1992), chapter5-7, Baifukan (in Japanese).