寄　書

日本金属学会誌 第44巻 第7号(1980)836～837

拘束変形下における結晶回転について

金　谷　健　一*
Ken-ichi Kanatani*

A Note on Crystal Rotations under Constrained Deformation

本誌において関根和喜氏らは拘束変形下における結晶回転に関する一連の研究を報告されている[(1)]が，原著者とは異なる解釈も可能であると思われるのでこれを指摘したい．まず Schmidt 則を基礎とする Taylor-Bishop-Hill の理論を整理してみる[(2)～(4)]．結晶粒の第 α 種すべり面の単位法線を $n_i^{(\alpha)}$，その面上の第 κ 種すべり方向を $l_i^{(\alpha\kappa)}$ とする．応力を σ^{ji} とするとその面上の力は $\sigma^{ji}n_j^{(\alpha)}$ であるから，$l_i^{(\alpha\kappa)}$ 方向の剪断力 $\tau^{(\alpha\kappa)}$ は $\sigma^{ji}n_j^{(\alpha)}l_i^{(\alpha\kappa)}$，すなわち

$$\tau^{(\alpha\kappa)}=\sigma^{ji}B_{ji}^{(\alpha\kappa)} \tag{1}$$

である．ただし $B_{ji}^{(\alpha\kappa)}=\eta_{(j}^{(\alpha)}l_{i)}^{(\alpha\kappa)}$ であり，指標 i,j に関する総和規約を用いた．(　)は対称化を表わす．これは σ^{ji} が対称なためである．すべり系 (α,κ) に通し番号 $A=1, 2, \cdots, N$ をつけ，また対称な指標対 (j,i) にも通し番号 $I=1,2,\cdots,6$ をつけると(1)は

$$\tau^A=\sum_I B_I{}^A\sigma^I \tag{2}$$

と書ける．ただし，すべり方向は反対向きのものも別々に数えている．すべりが生じない条件は $\tau^A\leqq\tau_c{}^A$ である．ただし $\tau_c{}^A$ はすべり系 A の臨界剪断力である．各すべり系に γ_A だけのすべりが生じて，結晶粒に e_{ji} だけの歪が生じたとすれば，なされた仕事は

$$\sum_I\sigma^Ie_I=\sum_A\tau^A\gamma_A \tag{3}$$

である．一方，降伏条件を破らない応力を σ^{*ji} とし，それが各すべり系に τ^{*A} だけの剪断力を生じたとすると，

$$\sum_I\sigma^{*I}e_I=\sum_A\tau^{*A}\gamma_A\leqq\sum_A\tau^A\gamma_A=\sum_I\sigma^Ie_I \tag{4}$$

である．なぜなら，すべりの生じている系では $\gamma_A>0$，$\tau^A=\tau_c{}^A\geqq\tau^{*A}$ であり，その他の系では $\gamma_A=0$ だからである．(2)，(4)より，与えられた歪 e_I を生じさせる応力 σ^I は次のような線形計画問題によって定まる(最大仕事の原理)．

$$\sum_I B_I{}^A\sigma^I\leqq\tau_c{}^A \text{ のもとで } W_1=\sum_I e_I\sigma^I\to\max. \tag{5}$$

一方，各系のすべりを γ_A とすると結晶粒の歪は

$$e_I=\sum_A B_I{}^A\gamma_A \tag{6}$$

である(相反定理)．なぜなら(2)より $\sum_A\tau^A\gamma_A=\sum_I(\sum_A B_I{}^A\gamma_A)\sigma^I$ であるが，これが $\sum_I\sigma^Ie_I$ に等しくなければならないからである．ところで，別のすべり方 γ_A^* によっても同じ歪 e_I が生じるとすると $\sigma^Ie_I=\sum_A\tau^A\gamma_A=\sum_A\tau^A\gamma_A^*$ であるが，γ_A は0であるか，そうでなければ $\tau^A=\tau_c{}^A$ であるから $\sum_A\tau^A\gamma_A=\sum_A\tau_c{}^A\gamma_A$．一方，$\gamma_A^*\geqq0$，$\tau^A\leqq\tau_c{}^A$ より $\sum_A\tau^A\gamma_A^*\leqq\sum_A\tau_c{}^A\gamma_A^*$．ゆえに

$$\sum_A\tau_c{}^A\gamma_A\leqq\sum_A\tau_c{}^A\gamma_A^* \tag{7}$$

したがって，与えられた歪 e_I を生じさせるすべり γ_A は次のような線形計画問題によって定まる(最小仕事の原理)．

$$\sum_A B_I{}^A\gamma_A=e_I,\ \gamma_A\geqq0 \text{ のもとで } W_2=\sum_A\tau_c{}^A\gamma_A\to\min. \tag{8}$$

線形計画の理論でよく知られているように，線形計画問題(5)と線形計画問題(8)とは互に双対の関係にあり[(4)(5)]，

$$\max W_1=\min W_2 \tag{9}$$

が成立する(双対定理)．以上が Taylor，Bishop，Hill，大久保らによって述べられた結果である[(2)(3)(6)]．

結晶粒が周囲より β_{ij}(変形テンソル)なる拘束変形を受けたとする．これを対称部分と反対称部分とにわけて

$$\left.\begin{aligned}&\beta_{ji}=e_{ji}+\omega_{ji}\\&e_{ji}\equiv\beta_{(ji)},\ \omega_{ji}\equiv\beta_{[ji]}\end{aligned}\right\} \tag{10}$$

とすると e_{ji} が塑性歪であり ω_{ji} が結晶粒周囲の回転を表わす([ ]は指標の反対称化を表わす)．各すべり系に γ_A だけのすべりが生じたとき，引き起こされる変形は $\sum_A n_j{}^A l_i{}^A\gamma_A$ であるから，結晶粒の剛体回転を ϕ_{ji}(反対称テンソル)とすると，結晶粒周囲の変形と結晶粒の変形とが一致しなければならないから(拘束変形)

$$\beta_{ji}=\sum_A n_j{}^A l_i{}^A\gamma_A+\phi_{ji} \tag{11}$$

である．ゆえに

$$\left.\begin{aligned}&e_{ji}=\sum_A n_{(j}{}^A l_{i)}{}^A\gamma_A\\&\omega_{ji}=\sum_A n_{[j}{}^A l_{i]}{}^A\gamma_A+\phi_{ji}\end{aligned}\right\} \tag{12}$$

であるが $\sum_A n_{[j}{}^A l_{i]}{}^A\gamma_A$ はすべりによる回転であるから結晶軸方向は一定である．ゆえに結晶軸の回転は ϕ_{ji} であり，すべり γ_A が与えられたとき

$$\phi_{ji}=\omega_{ji}-\sum_A n_{[j}{}^A l_{i]}{}^A\gamma_A \tag{13}$$

によって定まる(通常は $\omega_{ji}=0$ の拘束変形を与える)．したがって線形計画問題(8)を解いて γ_A を求め，これを(13)へ代入すれば結晶軸回転 ϕ_{ji} が求まる．これが Taylor[(2)]によって述べられた方法である．ところが線形計画問題(8)は縮退を生じやすく，γ_A が一意的に定まらないことが多い．これを偶応力の導入によって定めようというのが原著者の主張である．しかし，偶応力の導入は後にまわし，ここで次の仮定をおいてみよう．「可能なすべりのうち結晶軸回転の最小なものが実現する」(最小回転の仮説)結晶軸回転 ϕ_{ji} が微小なときは x, y, z 各軸のまわりの回転の1次結合で表わせる．ただし，各軸に関する右回りと左回りの回転は別々に数える．$\Omega_{ji}{}^K$ $(K=1, 2, \cdots 6)$ を各軸回りの右回り，左回りを区別した回転を表わす反対称テンソルとすると，結晶軸回転は

* 群馬大学工学部情報工学科(Department of Computer Science, Gunma University, Kiryu)

$$\phi_{ji}=\sum_K \Omega_{ji}{}^K\phi_K,\quad \phi_K\geqq 0 \tag{14}$$

となる．(11)は次のように表わされる．

$$\sum_A D_{ji}{}^A\gamma_A+\sum_K \Omega_{ji}{}^K\phi_K=\beta_{ji} \tag{15}$$

ただし $D_{ji}{}^A\equiv n_j{}^A l_i{}^A$ である．次の線形計画問題を考える．

$$\left.\begin{array}{l}\sum_A D_{ji}{}^A\gamma_A+\sum_K \Omega_{ji}{}^K\phi_K=\beta_{ji},\gamma_A,\phi_K\geqq 0 \text{ のもとで}\\ W_3=\sum_A \tau_c{}^A\gamma_A+\sum_K c^K\phi_K\rightarrow\min.\end{array}\right\} \tag{16}$$

もし c^K を十分小さい正数に選んでおくとまず $\sum_A\tau_c{}^A\gamma_A$ を最小にする γ_A が選ばれ，そのような γ_A のなかで最小の回転を与えるものが選ばれることになる．これは微小な摂動によって縮退を解くという一般的方法の応用でもある．この方法は実は原著者の方法と同等であることを次に示そう．線形計画問題(16)の双対問題を形式的につくると次のようになる[(4)(5)]．

$$\left.\begin{array}{l}\sum_{ji} B_{ji}{}^A\sigma^{ji}\leqq\tau_c{}^A,\quad \sum_{ji}\Omega_{ji}{}^K\sigma^{ji}\leqq c^K \text{ のもとで}\\ W_4=\sum_{ji}\beta_{ji}\sigma^{ji}\rightarrow\max.\end{array}\right\} \tag{17}$$

双対定理により

$$\min.\, W_3=\max.\, W_4 \tag{18}$$

である．(17)で σ^{ji} は(16)の制約に対する形式的双対変数であり，応力という意味はもっていない．そして一般に非対称($\sigma^{ji}\neq\sigma^{ij}$)である．しかし $c^K\rightarrow 0$ の極限で Taylor-Bishop-Hill の理論に帰着するので，σ^{ji} は対称となり，応力という意味をもつ．しかし，もし $c^K\neq 0$ でも σ^{ji} を応力と解釈するなら，(17)は(i)すべり系の剪断力が臨界値を越えないこと，(ii)応力の反対称成分の生じる回転力が臨界値(極めて小さい)を越えないこと，と解釈できる．すなわち，応力の反対称成分 $\sigma^{[ji]}$ が存在し，結晶軸回転の降伏条件が存在することを意味する(これが原著者の最初の仮定であった)．そこで降伏条件をより一般の形で書くと，次の非線形計画問題となる．

$$\left.\begin{array}{l}f^A(\sigma^{ji})\leqq\tau_c{}^A,\quad g^K(\sigma^{[ji]})\leqq c^K \text{ のもとで}\\ W_4=\sum_{ji}\beta_{ji}\sigma_{ji}\rightarrow\max.\end{array}\right\} \tag{19}$$

f^A, g^K はそれぞれすべりと回転の降伏関数である．これらの制約の双対変数を γ_A, ϕ_K とすると，双対問題は次のように書ける[(7)(8)]

$$\left.\begin{array}{l}\beta_{ji}=\sum_A\gamma_A\dfrac{\partial f^A}{\partial\sigma^{ji}}+\sum_K\phi_K\dfrac{\partial g^K}{\partial\sigma^{ji}},\ \gamma_A,\phi_K\geqq 0 \text{ のもとで}\\ W_5(\sigma^{ji},\gamma_A,\phi_K)=\sum_{ji}\sigma^{ji}\beta_{ji}-\sum_A\gamma_A(f^A(\sigma^{ji})-\tau_c{}^A)\\ \qquad -\sum_K\phi_K(g^K(\sigma^{[ji]})-c^K)\rightarrow\min.\end{array}\right\} \tag{20}$$

特に f^A, g^K が σ^{ji} の1次同次式であれば(n 次同次式なら $1/n$ 乗する)Euler の同次式の定理により

$$\left.\begin{array}{l}\beta_{ji}=\sum_A\gamma^A\dfrac{\partial f^A}{\partial\sigma^{ji}}+\sum_K\phi_K\dfrac{\partial g^K}{\partial\sigma^{ji}},\ \gamma_A,\ \phi_K\geqq 0\\ W_5=\sum_A\tau_c{}^A\gamma_A+\sum_K c^K\phi_K\rightarrow\min.\end{array}\right\} \tag{21}$$

となる．β_{ji} の右辺第1項はすべり変形であり，結晶軸は回転しないから，結晶軸回転は第2項より

$$\phi_{ji}=\sum_K\phi_K\frac{\partial g^K}{\partial\sigma^{ji}} \tag{22}$$

となる．これが原著者が結晶軸回転の関連流れ則と呼んでいるものである．

以上のように最小回転の仮説を導入すれば，原著者と同じ結果が得られることがわかった．それではこの仮説は妥当なものであろうか．原著者は応力反対称成分 $\sigma^{[ji]}$ の存在の根拠として，結晶軸の回転には結晶粒界上の回位(転傾)ループの移動が伴うと考えた．回位線に働く Peach-Koehler 的力は単位長さ当り $\mu^{kji}n_k\omega_{ji}{}^K$ である．μ^{kji} は偶応力，$\omega_{ji}{}^K$ は回位線の Frank ベクトルである．K は回位ループの種類の番号である．これを粒界上で合計して，ある臨界値 c^K に達すると移動を始めるとすれば，部分積分により

$$\begin{aligned}c^K&=\omega_{ji}{}^K\oint\mu^{kji}n_k\mathrm{d}S=\omega_{ji}{}^K\int\partial_k\mu^{kji}\mathrm{d}V\\ &=-2\omega_{ji}{}^K\int\sigma_{[ji]}\,\mathrm{d}V\end{aligned} \tag{23}$$

となる．ただし $\partial_k=\partial/\partial x^k$ であり，偶応力のつりあい式

$$\partial_k\mu^{kji}+2\sigma^{[ji]}=0 \tag{24}$$

を用いた．$\sigma^{[ji]}$ が結晶粒中ほぼ一定であれば $c^K\propto\omega_{ji}{}^K\sigma_{[ji]}$ となるが，回位ループに多種類あるときはこれらを平均すれば $\sqrt{\sum_K(c^K)^2}\propto\sqrt{(1/2)\sigma^{[ji]}\sigma^{[ji]}}$ となる．ゆえに，結晶軸回転の降伏関数 $g(\sigma^{[ji]})$ として von-Mises 型のものが採用できるであろう．これが回位ループを導入する原著者の主張であるように思われる．

ところで原著者は結晶粒界を通しての結晶方向の相違を回位とみなしているようであるが，そのような回位の存在や回位の解釈[(9)]に対して議論もわかれることと思われる．また，偶応力 μ^{kji}，応力反対称成分 $\sigma^{[ji]}$ の存在も問題であり[(10)]，微視的にみれば存在しているであろうが，Taylor-Bishop-Hill 理論は一様な結晶粒を前提にしており，その中で結晶軸の回転に対する一様なモーメントが作用していると考える具体的根拠は乏しいように思われる．それよりむしろ，原著者のシミュレーションが事実を説明しているなら，先に述べた最小回転の仮説を事実として認めるほうがよいのではないか．それを裏づけるには結晶粒間の弾性相互作用や硬化の影響等のより詳細な研究が必要と思われる[(11)(12)]．

文　献

(1) 関根和喜，上城太一：日本金属学会誌，**39**(1975)，1045；関根和喜，吉村　修，井上威恭，上城太一：**40**(1976)，457；関根和喜，吉村　修，井上威恭：**40**(1976)，769；関根和喜，吉村 修：**40**(1976)，1205；**41**(1977)，535；関根和喜：**41**(1977)，874.
(2) G.I.Taylor：J.Inst.Metals，**62**(1938)，307.
(3) J.F.W.Bishop and R.Hill：Phil. Mag.，**62**(1951)，414；**42**(1951)，1298；J.F.W.Bishop：Phil.Mag.，**44**(1953)，51.
(4) 伊理正夫：線形計画法，白水社，(1973).
(5) M.L.Balinski and A.W.Tucker：SIAM Review，**11**(1969)，347.
(6) 大久保忠恒：塑性と加工，**9**(1968)，681.
(7) 竹内　啓：非線形計画法，白水社，(1972).
(8) A.M.Geoffrion：SIAM Review，**13**(1971)，1.
(9) S.Amari：RAAG Memoirs，**3**(1962)，99.
(10) 金谷健一：日本機械学会論文集，**44**(1978)，4081；**45**(1979)，507；**45**(1979)，515；粉体工学会誌，**16**(1979)，445；**16**(1979)，703.
(11) 高橋　寛：日本機械学会論文集，**39**(1973)，3272；**40**(1974)，97；**42**(1976)，396.
(12) 後藤　学：日本機械学会論文集，**42**(1976)，3117；**43**(1977)，3723；**45**(1979)，943.

(1979年12月10日受理)