

幾何学的理論に基づくキンク変形のモデリングと解析

稲 邑 朋 也* 垂 水 竜 一**

1. 緒 言

長周期積層構造 (Long Period Stacking Order: LPSO) 型の Mg 合金を圧縮変形すると、キンク変形と呼ばれる特異な塑性変形が生じる⁽¹⁾。図 1 はキンク変形によって生じる 3 つの形態であるキンクバンド、Ridge キンク、Ortho キンクを模式的に表している。物体に描かれた縦線はすべり面を表しており、すべり面上でのせん断変形と剛体回転が同時に起こり、キンクバンドやそれらが結合した特徴的な変形組織が出現する。キンク変形は、マクロには塑性座屈に類似した屈曲形態を有しており、塑性ひずみはキンクバンドに集中する。一方、ミクロには、Hess と Barrett⁽²⁾が提唱したような傾角

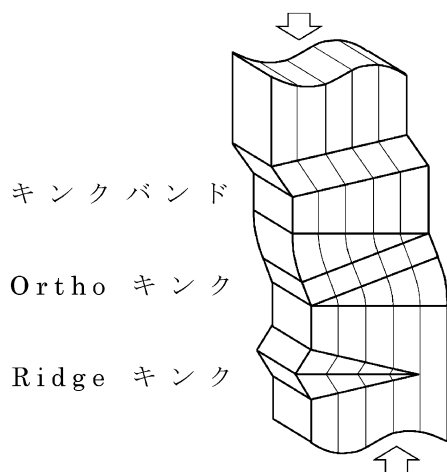


図1 キンクバンド、Ortho キンク、Ridge キンクの模式図。

粒界状のシャープな界面を持っており⁽³⁾、この界面を挟んで明瞭な結晶回転が発生する。

金属のキンク変形は1942年に Orowan によって Cd 単結晶において発見されたが⁽⁴⁾、材料工学的な価値が見出されなかったこともあり、その後研究が活性化されることはなく、現在に至ってもキンク変形の基礎研究は欠落している。ところが近年、熱間加工によって多量のキンク変形が導入された LPSO-Mg 合金が高い強度を持つことが発見され⁽⁵⁾、キンクバンドの存在自体が材料強化に寄与していることが明らかになっている⁽⁶⁾。この「キンク強化」の機構を解明するためには、まずキンク組織の幾何学的な特徴を明確にする必要がある。

著者らは、新学術領域研究「ミルフィーユ構造の材料科学」において、ミルフィーユ構造体に生じるキンク変形の形成機構、およびそれに伴う材料強化機構の理論構築を進めている。この理論解析の要点は、キンクを対象とした幾何学と力学の相関解明、すなわち、キンクの持つ特異な変形形態を幾何学的に特徴付けるとともに、その帰結として発現する力学特性を明らかにすることである。この一連の解析では、これまで材料科学分野で多用されてきた線形近似(線形弾性理論)は適用できず、これを一般化した連続体力学が必須である。また、通常のユークリッド空間内で得られる知見は多分に限定的となるため、詳細な力学特性の理解には多様体上の弾塑性理論が有用である。換言すると、キンク変形を理解し、実材料の新しい強化機構として応用するためには、既存の枠組みに囚われない新しい学術理論の構築が必要である。

本稿では、これまで著者等が進めてきた理論解析の現状について説明する。解析手法は何れも連続体力学を基盤としている。前半では、Rank-1 接続を応用したキンク変形の形態

* 東京工業大学 科学技術創成研究院 フロンティア材料研究所；教授(〒226-8503 横浜市緑区長津田町4259)

** 大阪大学 大学院基礎工学研究科；教授

Modeling and Analysis of Kink Deformation Based on Geometry; Tomonari Inamura* and Ryuichi Tarumi** (*Institute of Innovative Research, Tokyo Institute of Technology, Yokohama. **School/Graduate School of Engineering Science, Osaka University, Toyonaka)

Keywords: continuity of deformation, disclination, differential geometry, Riemann-Cartan manifold

2022年5月31日受理[doi:10.2320/materia.61.563]

解析について取り上げる。これはキンク変形をアフィン変形として捉えた際に、キンク界面において不連続な変形勾配を接続して変形の連続性を保持するための必要十分条件である。

Rank-1 接続解析によって、材料内部に埋め込まれたキンクバンド結合部は不可避免的に回位を伴うことが示される。また、複雑なキンク組織の形成とその変形には、キンク界面の移動に関わる外部仕事が必要となり、これが強化機構の一因となることを述べる。一方、後半では微分幾何学を用いたキンク解析について概説する。ミクロなキンク界面は刃状転位列としてモデル化できるが、格子欠陥の微分幾何学を用いることで、任意のキンク組織を Riemann–Cartan 多様体としてモデル化することができる。ここでは数値解析の一例として Ortho 型と Ridge 型の二つのキンクを取り上げ、Ridge 型キンクの近傍には、回位による顕著な応力集中が生じることを示す。

2. 変形の連続性に基づくキンク変形の記述

(1) 変形の連続性

キンク変形を幾何学的にモデル化するにあたって、まずはキンクバンドの観察結果⁷⁾から読み取ることのできる特徴、すなわち①キンク変形部は平均的には(すくなくとも区分的には)均一な変形を被る、②シャープなキンク界面を介して結晶回転が生じる、③試料表面のケガキ線がシャープなキンク界面で途切れない、の3点は注目に値する。特に③はキンク界面では変形の連続性が保たれることを意味している。

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4-\delta^2}{4+\delta^2} & \frac{4\delta}{4+\delta^2} \\ 0 & \frac{-4\delta}{4+\delta^2} & \frac{4-\delta^2}{4+\delta^2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \frac{\sqrt{4+\sigma^2}}{4+\delta^2} \begin{pmatrix} 0 \\ -\delta^2 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{m}} = \frac{1}{\sqrt{4+\sigma^2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ \sigma \end{pmatrix} \quad (4)$$

の2つの解が得られることが証明されている⁹⁾。ここで $\delta = s_2 - s_1$, $\sigma = s_1 + s_2$ である。式(3)の解はすべり量の異なる2領域がすべり面 \mathbf{e}_z を介して結合した状態を表しており、領域2が領域1に対してすべり量 δ だけ相対的に \mathbf{e}_y 方向に滑った、単純なすべり変形を表している。それに対して解(4)は、領域2がゼロでない結晶回転 \mathbf{Q} を被り、すべり面ではない面 $\hat{\mathbf{m}}$ で領域1と結合している。解(4)を用いると典型的なキンク形態であるキンクバンド、Ridge キンク、Ortho キンクの幾何学を知ることができる。詳細は文献(9)に譲り次節で主要な結果を述べる。

(2) キンクバンド

解(4)において、 $s_1=0$, $s_2=s$ とすればキンクバンドが得られる。図2(a)に得られるキンクバンドの模式図を示す。キンクバンド内の結晶回転量を θ 、キンク界面法線と \mathbf{e}_y 軸のなす角を ϕ とする。 θ, ϕ の s 依存性を図2(b)に示す。 s に依存せず $\theta=2\phi$ であることからキンク界面はつねに対称傾

キンク組織は、ただひとつのすべり系しか作動できない結晶塑性系において、変形量の異なる2領域が変形の連続性を保ちながら結合したものと捉えることができる。また、キンク内部の結晶回転は数十度に及ぶ。こうしたキンクバンドが複雑に連結した幾何構造がキンク組織であることから、キンク組織の幾何を正確に捉えるためには、幾何学的非線形性を考慮した定式化が必要である。

キンクバンドを構成する2領域のアフィン変形をそれぞれ $\mathbf{y} = \mathbf{S}_1\mathbf{x}$, $\mathbf{y} = \mathbf{S}_2\mathbf{x}$ とする。このとき、2領域が単一の界面において連続接続されるための必要十分条件は、与えられた変形勾配行列 $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2$ に対して

$$\mathbf{Q}\mathbf{S}_2 - \mathbf{S}_1 = \mathbf{b} \otimes \hat{\mathbf{m}} \quad (1)$$

が解 $(\mathbf{Q}, \mathbf{b}, \hat{\mathbf{m}})$ を持つことである⁸⁾。ここで \mathbf{Q} は領域2に要求される剛体回転、 \mathbf{b} は両領域の相対的な変形方向および量に関わるベクトル、 $\hat{\mathbf{m}}$ は両領域の結合面単位法線ベクトルである。この条件は Rank-1 接続、Kinematic compatibility, Hadamard jump condition などと呼ばれており解法は Ball と James により明らかにされている⁸⁾。単一のすべり系によって構成されるキンク変形の場合、単位行列を \mathbf{I} 、すべり面単位法線ベクトルを \mathbf{e}_z 、すべり方向の単位ベクトルを \mathbf{e}_y とすると、変形勾配 $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2$ はすべり量を表す相異なる実数 (s_1, s_2) を用いて、

$$\mathbf{S}_1 = \mathbf{I} + s_1 \mathbf{e}_y \otimes \mathbf{e}_z, \quad \mathbf{S}_2 = \mathbf{I} + s_2 \mathbf{e}_y \otimes \mathbf{e}_z \quad (2)$$

である。このとき、 $s_1 = s_2$ を除く任意の s_1, s_2 において、

$$\mathbf{Q} = \mathbf{I}, \quad \mathbf{b} = \delta \mathbf{e}_y, \quad \mathbf{m} = \mathbf{e}_z, \quad \text{および} \quad (3)$$

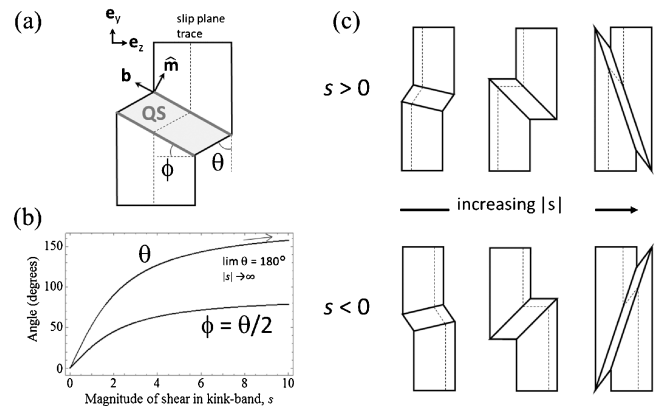


図2 Rank-1 接続から求められるキンクバンド。

(a)はキンクバンドを表す解の模式図でありすべり面の回転角を θ 、 \mathbf{e}_y 面とキンク界面がなす角を ϕ とすると、(b)のように $\phi = \theta/2$ でありキンク界面を介してすべり面が対称傾角の関係になる。キンクバンドを形成するすべり s の符号が異なると(c)に示す様に \mathbf{e}_y 面に対して鏡像関係にあるキンクバンドが得られる。後述するように Ridge キンクは s の符号が異なるキンクバンドが結合したものである。

角境界となることが保証され、刃状転位列による Hess-Barrett 型のキंक界面の描像⁽²⁾と一致する。また s の増加に伴い θ, ϕ は増加し、 $\lim_{s \rightarrow \infty} \theta = 180^\circ$ である。 s の絶対値および符号に応じてキंक形態は図 2(c) の様に変化する。これらの特徴は実際に観察されるキंकバンドの特徴と定量的に一致する⁽⁹⁾。キंकバンドが物体を貫通していない場合には、キंकバンド先端には正負の回位対が形成され⁽¹⁰⁾、その強度は θ に等しく、 s の値に応じて 0° から 180° までのあらゆる値をとり得る。

(3) Ridge キंकと Ortho キंक

キंक変形により形成される組織はキंकバンド同士が結合したものである。個々のキंकバンドはマトリクスと Rank-1 接続していると考え、キंकバンド同士の結合には必然的に回位が発生することが示される。

Ridge キंकは符号の異なるゼロでないせん断変形によって形成された 2 つのキंकバンドが結合したものであり、 $s_1 s_2 < 0$ である。図 3(a) に示すようにすべり方向の異なるせん断変形 S_1, S_2 が働き、図 3(b) に示すような 1 対のキंकバンドが形成されるとする。各キंकバンドはマトリクスと Rank-1 接続され、

$$Q_1 S_1 - I = a_1 \otimes \hat{n}_1 \quad (5)$$

$$Q_2 S_2 - I = a_2 \otimes \hat{n}_2 \quad (6)$$

である。しかし Ridge キंकとなるためにはキंकバンド同士も Rank-1 接続されなくてはならないので、さらに次式が要求される。

$$W Q_2 S_2 - Q_2 S_1 = b \otimes \hat{m} \quad (7)$$

ところが、回転 W による回転角 ω が 0 になるためには $s_1 = s_2, s_1 = 0, s_2 = 0$ でなければならず、Ridge キंकの条件： $s_1 s_2 < 0$ に反する。つまり Ridge キंकには角度 ω の空隙が必ず出現する。 ω は s_1, s_2 の関数であり次式で与えられる (δ の定義は 2.(1)節と同じ)。

$$|\omega| = \cos^{-1} \frac{4(s_1^2 + s_2^2 - s_1 s_2 + 4)^2 - s_1^2 s_2^2 \delta^2}{(4 + s_1^2)(4 + s_2^2)(4 + \delta^2)} \quad (8)$$

Ortho キंकの場合も同様に考えることができる。Ortho キंकはゼロでない相異なる同符号の s_1 と s_2 によって形成された 2 つのキंकバンドの結合によって形成される ($s_1 \neq s_2, s_1 s_2 > 0$)。図 3(c) に示すように Ortho キंकにおいても Ridge キंकの場合と同様に角度 ω の空隙が必ず出現する。

Ridge, Ortho 共にキंकバンド同士の結合面が物体を貫通していれば、結合面を境にして一方が W の回転を被ればすべての界面で Rank-1 接続が保たれるが、結合面が物体内部に存在する場合には角度 ω の空隙を埋めるために、必ず回位対が発生することになる。その回位強度は式 (8) で与えられ、フランクベクトルは e_x に平行である。図 4 に回位強度 ω の s_1, s_2 依存性を示す。Ridge キंकは s_1, s_2 が異符号の領域に対応し、Ortho キंकは s_1 と s_2 が同符号の領域に対応する。いずれの場合もフランクベクトル w は

$$w = \begin{pmatrix} |\omega| t \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad t = \text{sign}(s_1 s_2 \delta (\delta^2 + s_1 s_2 + 4)),$$

である。この図から明らかな様に、キंकバンド同士の結合によって生じる回位の大きさもまた、幾何学的には 0° から 180° までのあらゆる値をとり得る。これらの回位は幾何学

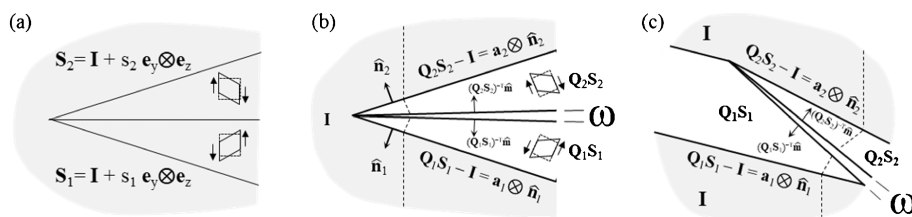


図 3 Ridge キंकおよび Ortho キंकの模式図。

(a) は Ridge キंकの基準配置であり、未変形部と変形部での変形の連続性が保たれているとせん断部には回転が作用せざるを得ず (b) の現配置を得る。上下のキंकバンド間には不可避免的にゼロでない回転性のギャップ (ω) が発生する。(c) は同様の考え方で得られる Ortho キंकの現配置であり、キंकバンド間には角度 ω に相当する回転性のギャップが不可避免的に出現する。物体が変形の連続性を保った場合、これらのギャップ ω は回位をもたらす。

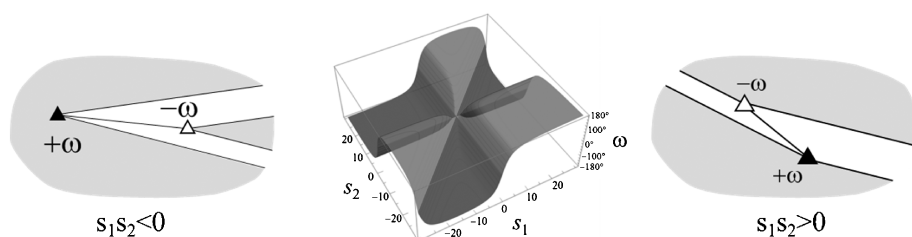


図 4 Ridge および Ortho キंकに生じる回位強度 ω の s_1, s_2 依存性。

図中 $s_1 s_2 < 0$ の領域は Ridge キंकの回位強度、 $s_1 s_2 > 0$ の領域は Ortho キंकの回位強度を表す。 $\omega = 0$ となるのは $s_1 = 0, s_2 = 0, s_1 = s_2$ のいずれかの場合であり、Ridge や Ortho キंकが単一のキंकバンドになった状態である。

的非線形性を考慮して初めて検知し正確に定量化できるものであり、歪みを線形近似して解析すると回位が存在しないかのように見える点には、注意が必要である。

すべり系が多数ある一般的な材料であれば、回位は局所的な塑性変形によって緩和されてしまうだろう。だが本解析はすべり系が1つしかない場合には回位の塑性緩和は不可能であることを明示している。したがって回位の存在はキンク組織の形態やその変形を考える際に本質的である。

(4) 弾性エネルギーゼロのキンク組織

熱力学的には、変形に伴って形成するキンク組織は、外力ポテンシャル、組織形成(変形)に伴う散逸エネルギー、キンク組織のもつ弾性エネルギーのバランスによって変分原理的に決定されると考えることができる。したがって、弾性エネルギーゼロの組織が存在しうのかという点は明確にしておく必要がある。キンク組織は互いに結合したキンクバンドの集合体である。前節で見た様にあらゆるキンクバンドの結合部には必然的に回位が発生する。後述するように回位は巨大な弾性エネルギーを持つので、キンク組織は回位による弾性エネルギーを低減するように形成するであろう。だが果たして弾性エネルギーをゼロにすることは可能であろうか？ここでは1例だけを示す。図5(a)はOrtho型結合によって形成される回位四重極子である。図5(b)のようにこの回位を打ち消す回位を先端を持ったキンクバンドが必ず存在する。したがって図5(c)のような交差キンクでは回位は対消滅しており弾性エネルギーはゼロになる。回位を対消滅させる組織の形態は他にも存在し、LeiとNakataniが示したように⁽¹¹⁾、マトリクスがわずかにすべり変形することでも回位を消滅させることができる。この様に弾性エネルギーゼロのキンク組織は理論上存在する。キンク組織形成は回位を緩和・対消滅するように進行すると考えることは妥当に思われる。

(5) キンク組織形成による強化

上記の解析から明らかになったように、キンク同士は変形の連続性を保つように、また回位を小さくするように結合し

ていると考えられる。ひとたび形成されたキンク組織に外力を負荷し、高いシュミット因子をもつキンクバンド内ですべり変形が生じた場合、変形の連続性を保ち、なおかつ結合部の回位を大きくしないように、そのキンクバンドに結合しているキンクバンドは連携的に変形せざるを得ない。この連携変形は理論的には連結したキンクバンドすべてに及ぶ。ここで本質的に重要なのは、キンク変形が容易く生じる材料はそもそもすべり系が極めて限定的なので、隣接キンクバンドに連携した変形が必ずしも外力に沿った変形とはなり得ない点である。ここが通常多結晶体とは大きく異なる点であり、著しい変形応力の上昇をもたらす一つの要因であると考えられる。このようにキンク組織には、すべり系が限定的であることに起因した強い幾何学的拘束をもたらす強化機構が、転位論的な強化機構と共存していると考えられる。また残存した回位と転位の相互作用も強化機構として働くだろう。最近の研究ではキンクバンドにすべりが交差すると新たに回位が生まれることも明らかになっている⁽¹²⁾。回位と転位の相互作用はキンク強化を論じる上で不可欠であり、次節で紹介する微分幾何学に基づく力学解析が重要になってくる。

3. 微分幾何学に基づくキンク変形の力学解析

(1) 格子欠陥の微分幾何

微分幾何学に基づく転位論はKondoにより提案された⁽¹³⁾。その後、Bilbyら⁽¹⁴⁾やKronerら⁽¹⁵⁾がこの考え方を支持し、YavariとGorielyが現代的な立場から転位の応力場を求めている⁽¹⁶⁾。近年、KobayashiとTarumiはKondo理論を数値計算に実装することで、自由境界を持つ連続体内部における転位の力学解析に成功した⁽¹⁷⁾⁽¹⁸⁾。キンク界面のミクロ組織は刃状転位列として表現できるため、この数値解析法を応用することで微分幾何学に基づいたキンク変形の解析が可能である。

(2) Riemann-Cartan 多様体上の弾塑性理論

Kondoにより提案された微分幾何学に基づく転位論は⁽¹³⁾、現代ではRiemann-Cartan多様体上の弾塑性理論と

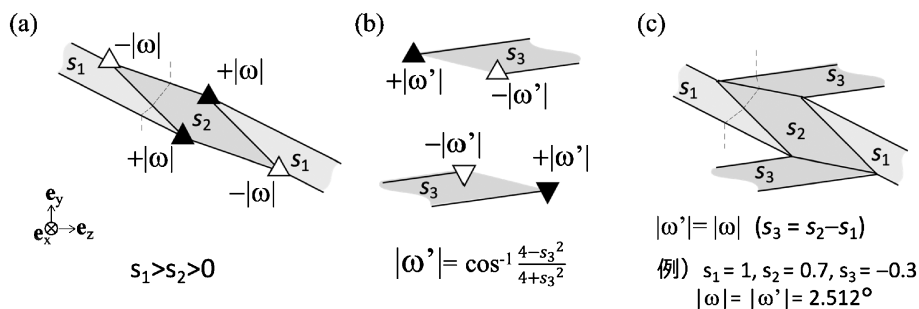


図5 交差キンクによる回位対消滅。

(a)に示す様な回位4重極子による屈曲したキンクバンドに、(b)に示すキンクバンドが連結した場合、任意の s_1, s_2 に対して $|\omega'| = |\omega|$ となる s_3 が必ず存在するので、(c)のように回位が対消滅した弾性エネルギーゼロの組織(交差キンク)の形成が可能である。

して理解することができる⁽¹⁶⁾。ここで Riemann–Cartan 多様体とは、Riemann 計量 g と接続 ∇ が備わった性質の良い多様体であり、接続に含まれる振率が転位を、曲率が回位を表している。この理論の中心的な考え方は、連続分布転位論における転位密度テンソルと、微分幾何学における振率形式の同値性にある。通常、連続体内部に存在する転位密度テンソル α は次のように定義することができる。

$$\alpha = \left(f b^i \frac{\partial}{\partial x^i} \right) \otimes (n^j \delta_{jk} dx^k)$$

ここで b は Burgers ベクトル、 n は転位線の方向を表している。係数 f は転位線の中心からの距離に依存した転位密度の分布関数である。一方、この二階テンソルの Hodge 双対は次のように表される。

$$\tau = * \alpha = (f b^i n^j \epsilon_{ijk}) dx^j \wedge dx^k \otimes \frac{\partial}{\partial x^i} = \tau^i \otimes \frac{\partial}{\partial x^i}$$

こうして定義された τ が振率形式となる。Riemann–Cartan 多様体上の振率形式は、Cartan の第一構造方程式 $\tau^i = d\theta^i$ を満たすことから、これを積分することで双対枠 θ^i が得られ、転位の導入による塑性変形が数学的に決定される。こうして得られた塑性変形状態は、通常のユークリッド空間内には存在しないが、ここへ補足変形を加えることでユークリッド空間内へ埋め込むことができる。この補足変形が弾性変形である。ここで超弾性体の変分原理と St. Venant–Kirchhoff 型ひずみエネルギーを用いると、弾性変形は次のひずみエネルギー汎関数の最小点として特徴付けられる。

$$W(y) = \int_R \frac{1}{2} C^{ijkl} E_{ij} E_{kl} \det F_p \nu_R$$

ここで C は弾性係数テンソル、 E は Green ひずみテンソルであり、次のように定義されている。

$$E_{ij} = \frac{\delta_{ij}}{2} \left(\frac{\partial y^i}{\partial x^k} \frac{\partial y^j}{\partial x^l} - (F_p)_k^i (F_p)_l^j \right) dx^k \otimes dx^l$$

上式において、 F_p は転位による塑性変形勾配を表しており、双対枠 θ^i から求めることができる。このエネルギー最小化問題をアイソジオメトリック解析へ実装する。これは、Galerkin 法を用いた弱形式解析の一種であり、基底関数に NURBS (Non-Uniform Rational B-Spline) を用いる点に最大の特徴がある。

(3) 数値解析結果

ここでは二種類のキック変形モデルに対する解析結果を説明する。図 6 は解析に用いた転位の配置を示している。このうち (a) は、 x_1 軸と平行な Burgers ベクトルを持ち、転位線方向は x_2 軸と平行な刃状転位列を表している。ここで、転位列は互いの距離 (x_2 軸方向の間隔) が十分に小さいと考え、転位密度が薄い板面 (キック界面) に集中したモデルを考える。これを数値計算へ実装する際にはレベルセット関数を用いている。ここでは、正負の刃状転位列をモデルの中心から等距離の位置に導入しており、これによってキック特有の屈曲変形を発生させるとともに、屈曲角の向きを逆に取ること、Ortho 型キックの変形形態を再現している。一方、

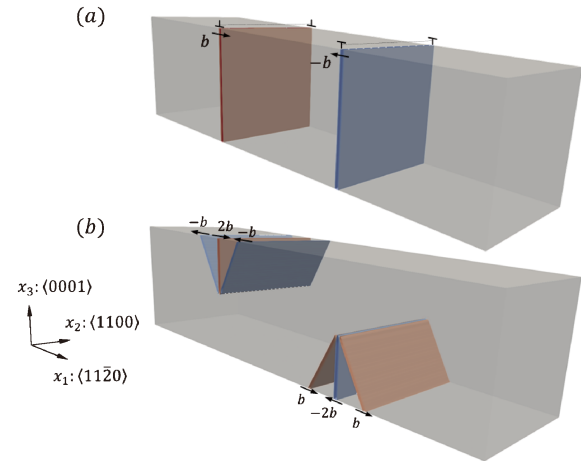


図 6 Ortho 型キックおよび Ridge 型キックの転位モデル。いずれのモデルも Burgers ベクトルは x_1 軸と平行、転位線方向は x_2 軸と平行な刃状転位より構成されており、転位密度分布はレベルセット関数を用いて表現している。(オンラインカラー)

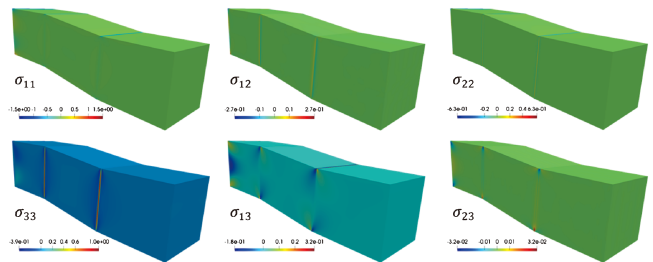


図 7 アイソジオメトリック解析により得られた Ortho 型キックの巨視的変形と Piola–Kirchhoff の第二応力の分布。転位密度の集中するキック界面ではキック変形に特有の屈曲変形が認められるものの、キック界面での応力集中は比較的小さい。(オンラインカラー)

(b) は Ridge 型キックの解析モデルを表している。Ridge 型の解析もレベルセット関数を用いて転位列を表現することで進めているが、ここでは Ridge の中心部に側面の 2 倍の Burgers ベクトルを持つ転位列を配置することが特徴である。

Ortho 型キックモデルに対して行った応力場の解析結果を図 7 に示す。これより明らかなように、転位列を用いて表現したキック界面では明瞭な屈曲変形が認められる。この転位列を傾角粒界と考えると、理論的に予想される粒界方位差とキック変形の屈曲角は一致することから、本研究によるモデル化は適切に行われたものと考えられる。次に、キック変形による内部応力場について考察する。本研究におけるレベルセット関数を用いた転位列のモデリングでは、キック界面を構成する転位列は互いの距離が十分に小さいことから、個々の転位による応力場は互いに打ち消し合って消滅している。そのため、図 2 の応力場はキックの幾何形態に起因して生じるものである。解析の結果、 σ_{33} および σ_{13} はキック界面に沿ってわずかに発生するものの、他の応力はほぼ発生しないことが確認される。

