

塑性変形が引き起こす転位群パターンの 構造安定性理論

島 弘 幸*

1. 塑性変形と転位運動

塑性変形とは、材料に加えた力が大きすぎたために、その力を取り除いても材料の形状が元に戻らなくなる現象を指す。かつて超能力として話題をよんだ「スプーン曲げ」は、この塑性変形のわかりやすい例といえよう。ほかにも、伸びきったバネや、つぶれすぎたスポンジなど、材料の塑性変形は日常生活のいたるところで起こり得る。この塑性変形は、特に金属(銅・アルミニウムなど)やプラスチックなどの原素材を加工して有用な製品を作り出す際に、重要な役割を果たす。さらに、材料の物性は塑性変形の前で大きく変化することが多いため、その物性変化の微視的なメカニズムを深く理解することも重要である。

特に金属材料の塑性変形については、国内外で長い研究の歴史がある⁽¹⁾。1934年に Taylor⁽²⁾と Orowan⁽³⁾がそれぞれ独立に「転位」という概念を導入して以来、転位の集団運動が金属結晶の塑性挙動を決定することが明らかとなった⁽⁴⁾。転位とは結晶欠陥の一種であり、原子配列の局所的な乱れが曲線状に並んだ構造を指す⁽⁵⁾⁽⁶⁾。多くの金属の場合、転位の発生は、原子スケールのせん断変形に由来する。すなわち、ある曲線に沿って並ぶ原子の集団が、特定の結晶面上を特定の方向に向かって原子一個分だけ一斉に移動することで、結晶内部に曲線状の欠陥が形成されるのである。こうした転位を含む金属材料に外力を加えると、材料内部にもともと存在していた転位が断続的にせん断変形を繰り返す、まるで尺取虫のように特定の方向へ移動する。それと同時に、加えた外力によって新たな転位も次々と発生する。こうしたマイクロなせん断変形の膨大な寄せ集めが、巨視スケールの塑性変形を引き起こすのである。

転位の集団運動を理解することが難しい理由の1つは、隣接する転位が互いに相互作用を及ぼしあうことにある⁽⁵⁾⁽⁶⁾。個々の転位の周囲では、転位の中心部からかなり長距離の範囲にわたって、ひずみ場と応力場が形成される。そのため、あるひとつの転位が作り出すひずみ場の中に、別の転位が入り込むと、両者の転位が作り出すひずみエネルギーの合計値を下げようとする向きの力が、それぞれの転位に作用する。このときに生じる力の向きと大きさは、ペアを組む転位の幾何学的な特徴に応じて多彩に変化し、引力にも斥力にもなる。さらに、複数の転位がある特定の距離を超えて互いに近接すると、強い引力によって互いの動きを束縛しあった結果、転位双極子や転位多極子などを形成することがある。こうした転位間の相互作用力と、金属試料に加えられた外力との兼ね合いによって、塑性変形の過程では多数の転位が複雑でダイナミックな運動を示すのである。

2. 金属疲労が引き起こす転位群パターン

針金の両端をつかんで曲げ伸ばしを繰り返すと、やがて針金はポキッと折れてしまう。このように、金属材料に繰り返し変形を長時間加えると、材料の力学強度が低下し、十分弱い力でも材料が破壊することがある。この劣化現象は金属疲労と呼ばれており、その本質は特定のすべり面でおこる転位集団の不可逆移動にある⁽⁷⁾。

金属疲労に対する学術的な興味のひとつは、主に面心立方格子を組む金属結晶で観察される、各種の転位群パターン(疲労転位構造とも呼ぶ)であろう⁽⁸⁾。繰り返し負荷を加える前の材料内部では、転位は空間的にほぼ均一に分布している。しかし繰り返し負荷を加えると、たまたま近くにいた転位どうしが互いに寄り集まり、空間的な秩序をもった転位群

* 山梨大学大学院総合研究部；教授(〒400-8510 甲府市武田 4-4-37)

Stability Theory of Dislocation Patterns Induced by Plastic Deformation; Hiroyuki Shima (Department of Environmental Sciences, University of Yamanashi, Kofu)

Keywords: metal fatigue, cyclic loading experiment, Turing pattern, reaction-diffusion equation, linear stability analysis

2023年 8月17日受理[doi:10.2320/materia.63.30]

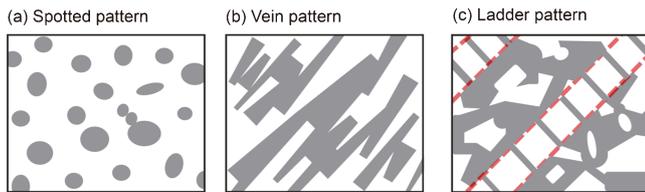


図1 繰り返し負荷実験で観測される転位群パターン(疲労転位構造)の模式図。(a), (b) Vein-Channel 構造。(c) はしご型構造。(オンラインカラー)

パターンが自発的に形成される。この転位群パターンの発生によって、金属試料の断面における転位密度の分布は、高密度領域と低密度領域のふたつに分離される。すなわち、転位が密集して出来たクラスター状の島々が、転位密度の低い大海のなかにぼつぼつと浮かんだような構造を示すのである。

興味深い点は、このクラスター(転位の高密度な集合体)の幾何形状が、繰り返し負荷の回数増加とともに徐々に変化する点である。たとえば銅の実験結果をみると⁽⁹⁾、負荷回数が少ない段階では、ベイン(Vein)と呼ばれる多数の縞模様(または斑点模様)の高密度領域が発生し、隣り合うベイン間の隙間をチャンネル(Channel)と呼ばれる低密度領域が埋める[図1(a), (b)]。負荷回数を中程度まで増やすと、高密度領域の一部に「はしご」のような形をした擬一次元秩序構造が現れる[図1(c)]。このはしご型構造の伸びる向きは、転位が移動しやすい特定のすべり面の向きと一致しており、この面に沿って固執すべり帯(Persistent slip band: PSB)とよばれる塑性ひずみの集中した領域が形成される。さらに負荷回数を増やすと、転位は異なる複数のすべり面を移動するようになるため、ラビリンス構造などの複雑なパターンを形成することになる。

では、こうした転位群パターンの相変化は、どのような仕組みで起こるのだろうか? もともと空間的に均一に分布していた転位が、クラスター化して局所的な高密度領域を作りだすための駆動力は、個々の転位が自分の周囲に作る弾性ひずみ場のはずである。したがって原理的には、多数の転位が作り出すひずみ場と応力場を線形に重ね合わせて、その場の中で実現される転位の集団運動を理論的に記述(または数値計算を用いて再現)できれば、負荷回数の増加に伴う転位群パターンの変化を解釈できたことになる。ただしその考察に必要な転位の数は膨大であり、熱擾乱の効果や転位間相互作用の時間変化までを考慮して各々の転位の運動を追跡することは、理論的に困難を極める。そうしたことも一因として、転位群パターンの相変化を司る物理的なメカニズムは、いまだ完全には解明されていない。

3. 転位群パターンの理論解析

転位群パターンの相変化を理論的に理解するための有望なアプローチのひとつは、転位密度の時空間変化を記述する反応拡散方程式の導出と、それに対する構造安定性解析の適用

である。以下では、これら二つの理論概念について、順を追って解説する。

(1) 物質の反応と拡散

転位群パターンの形成過程においては、個々の転位が周囲から様々な駆動力(熱擾乱、転位間相互作用、試料端効果など)を受けながら、かなりの程度ランダムに動いていると推察される。さらに、金属材料に繰り返し負荷を加えた場合、材料内部の転位に伝わる外部応力の向きは、負荷の一周期ごとに反転する。これらを勘案すると、転位の運動の向きと速度は、時々刻々と変化する。すなわち、繰り返し負荷実験で実現される転位の運動は、あたかも空気中の気体分子が示すような、乱雑な拡散運動に近いと考えてよいであろう。さらに、先にも述べた通り、複数の転位が隣接すると、相対運動の束縛や対消滅などの微視的な反応が起こりうる。すなわち転位の集団運動は、個々の転位の「拡散運動」と「微視的反応」に支配されると仮定できる。こうした系を取り扱える理論手法の代表例が、反応拡散方程式に基づく手法である。

一般に反応拡散方程式とは、系の空間構造が時間とともに変化するタイプの自然現象を記述するための、偏微分方程式の一種である⁽¹⁰⁾。その端緒は、1952年に Turing によって提唱された、生物の形態形成を記述するための数理モデルであった⁽¹¹⁾(ちなみに Turing は、電子計算機の黎明期にチューリングマシンを定式化した業績から、コンピュータの父とも呼ばれている)。この数理モデルはしばらく当該分野で黙殺されていたが、近年ではシマウマの縞模様やヒヨウの網目模様など多様な動物の体表面パターンに適用され、高い注目を集めている⁽¹²⁾⁽¹³⁾。

反応拡散理論によると、系がある一定の条件を満たす場合には、秩序をもつ時空間パターンが自発的に形成される⁽¹⁴⁾⁽¹⁵⁾。たとえば、空間的な周期をもつ斑点模様や縞模様、時間的に系の明るさが振動する明滅運動など、空間または時間に関するパターンが何もない状態から自然に湧き上がってくるのである⁽¹⁶⁾⁽¹⁷⁾。こうしたパターンの自発形成は、拡散という概念が示すもともとの意味を考え直すと、非常に奇妙な現象だと言える。なぜなら、ふつう「物質の拡散」といえば、系を均一化する方向に向かわせる働きを示すからである。たとえば、水の中に垂らしたインクの拡散を考えてみよう。グラスに注いだ水の中に一滴のインクを落として、そのまま何もせずに観察すると、インクの塊が時間経過とともに広がって(つまり拡散して)、最終的に水全体が薄く濁る。つまり拡散というものは、通常は系を均質化するはずなのだ。Turing の慧眼は、この直観に反して、拡散が均質化とは真逆の方向に系を駆動する可能性を指摘した点にある。物質が周囲に散らばろうとする働きが、逆に物質を特定の一点に寄せ集める働きに変換され、きれいな模様ができる…というのである。この最終的な模様が出来るまでの物質濃度の時空間変化を教えてくれるのが、反応拡散方程式と呼ばれる偏微分方程式である。

反応拡散方程式を構成するうえで重要な項は、拡散項と反

応項である。一般に拡散とは、系を構成する微視的要素が濃度の濃い方から薄い方へ徐々に移動することで、系全体の濃度が均一化されるという現象を意味する。たとえば、位置 \mathbf{r} 、時間 t における物質の局所密度を $\zeta(\mathbf{r}, t)$ と書くと、その物質の拡散度合いは微分演算子 ∇^2 を用いて $D\nabla^2\zeta$ で表せる。ここで D は拡散係数とよばれる物性値であり、単位時間あたりに単位面積を通過する物質の量によってその値が定義される。さらに反応拡散理論では、複数の種類の物質が同一の系に含まれることを前提としている。そのうえで、異なる種類の物質同士が局所的に反応しあい、お互いの物質の局所濃度を変化させると想定するのである。この物質間の局所的な反応を意味する項は、反応拡散方程式の中に反応項として取り込まれる。

(2) 転位集団に対する反応拡散アプローチ

実際に転位集団の運動を反応拡散方程式で記述するには、いくつかの数学的な準備が必要となる。まず、金属結晶内部に散在する転位の空間分布(局所密度)を、空間 \mathbf{r} と時間 t の関数である連続場 $\rho(\mathbf{r}, t)$ で近似する。すると、外部からの繰り返し負荷と結晶内部における熱擾乱の両者を受けて運動する転位集団の密度変化は、拡散項 $D\nabla^2\rho$ で記述できる。

さらに、結晶内部に含まれる転位を、2つの種類に分別することを考える⁽¹⁸⁾。1つ目は、近接した複数の転位が互いの運動を束縛しあい、ほとんど移動できない種類の転位である。前述したとおり、ある種の転位同士がある閾値よりも近い距離まで近接すると、引力相互作用によって転位の双極子や多極子が形成される。こうした移動度の低い種類の転位を、以下では「不動転位」と称し、その局所密度を ρ_s で表す。2つ目の種類の転位は、周囲からの引力に苛まれることなく、不動転位たちの隙間を高速で飛び交う転位である。この種の転位は「可動転位」と呼び、局所密度を ρ_m で表すことにする。

以上の準備を踏まえると、不動転位と可動転位の時空間変化は、次に示す連立微分方程式で記述される⁽¹⁸⁾。

$$\begin{aligned}\partial_t\rho_s &= (D_{sx}\partial_x^2 + D_{sy}\partial_y^2)\rho_s + f(\rho_s, \rho_m), \\ \partial_t\rho_m &= (D_{mx}\partial_x^2 + D_{my}\partial_y^2)\rho_m + g(\rho_s, \rho_m)\end{aligned}\quad (1)$$

ここで ∂_t は時間に関する偏微分、 ∂_x と ∂_y はそれぞれ x 方向と y 方向に関する偏微分を表す。拡散係数の添字 s と m は、それぞれ不動転位と可動転位に対応する量であることを意味する。

注目すべきは、式(1)の右辺に含まれている二つの反応項 f と g である。これらは、転位同士が織りなす微視的な反応を意味する関数である。すなわち実際の結晶内部では、不動転位と可動転位の空間密度が時間変化した結果、お互いの密度を局所的に増減させるような微視反応が起こるのである。反応項 f と g の具体的な関数形は、転位間の反応や、転位の自己増殖、転位の対消滅などの微視的な詳細を考慮することによって決定される。この先しばらくは、一般論を展開するために、 f と g の具体的な関数形は決めずに話を進める。

(3) 支配方程式のベクトル-行列表現

解析的な議論を進めるために、式(1)が含む二つの反応項 $f(\rho_s, \rho_m)$ と $g(\rho_s, \rho_m)$ を、空間的に一様な初期状態 ρ_{s0} と ρ_{m0} の周りでテイラー展開しよう。そのうえで、時間発展に伴う初期状態からのずれを $\rho_s^* = \rho_s - \rho_{s0}$ と $\rho_m^* = \rho_m - \rho_{m0}$ で表し、 ρ_s^* と ρ_m^* に関する1次までの項を集めるのである。すると、不動転位と可動転位の密度変化を記述する近似方程式を、次のようなベクトルと行列を用いて表現できる。

$$\partial_t \begin{bmatrix} \rho_s^* \\ \rho_m^* \end{bmatrix} = \partial_x^2 \begin{bmatrix} D_{sx}\rho_s^* \\ D_{mx}\rho_m^* \end{bmatrix} + \partial_y^2 \begin{bmatrix} D_{sy}\rho_s^* \\ D_{my}\rho_m^* \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} f_s & f_m \\ g_s & g_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \rho_s^* \\ \rho_m^* \end{bmatrix}\quad (2)$$

ここで、式(2)の最右辺の行列に含まれる行列要素(f_s など)は、下に定義した偏微分係数(すなわち定数)である。

$$\begin{aligned}f_s &\equiv \left. \frac{\partial f}{\partial \rho_s} \right|_{\rho_s=\rho_{s0}, \rho_m=\rho_{m0}}, & g_s &\equiv \left. \frac{\partial g}{\partial \rho_s} \right|_{\rho_s=\rho_{s0}, \rho_m=\rho_{m0}}, \\ f_m &\equiv \left. \frac{\partial f}{\partial \rho_m} \right|_{\rho_s=\rho_{s0}, \rho_m=\rho_{m0}}, & g_m &\equiv \left. \frac{\partial g}{\partial \rho_m} \right|_{\rho_s=\rho_{s0}, \rho_m=\rho_{m0}}\end{aligned}\quad (3)$$

さらに、一様状態からのずれ $\rho_j^*[j=s, m]$ の時空間依存性に対し、次のような Ansatz 解を適用する(その理由はすぐあとで説明する)。

$$\rho_j^*(x, y, t) \propto e^{\kappa t} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \quad [j=s, m]\quad (4)$$

ここで二つのベクトル $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$ と $\mathbf{r} = (x, y)$ は、それぞれ2次元空間内の波数ベクトルと位置ベクトルを意味する。式(4)を式(2)に代入すると、次のような永年方程式が得られる。

$$\det[J(\mathbf{q}) - \kappa\mathbf{I}] = 0,$$

$$J(\mathbf{q}) = \begin{bmatrix} -D_{sx}q_x^2 - D_{sy}q_y^2 + f_s & f_m \\ g_s & -D_{mx}q_x^2 - D_{my}q_y^2 + g_m \end{bmatrix}\quad (5)$$

ここで $\det[\mathbf{X}]$ は行列 \mathbf{X} の行列式を表す記号であり、 \mathbf{I} は恒等行列を表す。 κ は行列 $J(\mathbf{q})$ の固有値を指す。実は上記の永年方程式は、 κ に関する二次方程式として次のように書き直せる。

$$\kappa^2 - \text{tr}[J(\mathbf{q})]\kappa + \det[J(\mathbf{q})] = 0\quad (6)$$

式(6)は、行列 $J(\mathbf{q})$ がもつ2つの固有値 $\kappa = \kappa_1, \kappa_2$ が、そのトレース $\text{tr}[J(\mathbf{q})]$ と行列式 $\det[J(\mathbf{q})]$ によって決まるを意味している。このトレースと行列式の値は、式(5)から明らかとなっており、どちらも反応項 f と g および拡散定数 $D_{ij}[ij = sx, sy, mx, my]$ の関数として決定される。つまり、行列 $J(\mathbf{q})$ がもつ二つの固有値 κ_1, κ_2 の値は、転位の拡散挙動と反応挙動の両者に左右されるのである。

パターン形成の有無を検討するうえで重要となるのは、行列 $J(\mathbf{q})$ の固有値の符号(正か? 負か?)である。もし固有値 κ_1, κ_2 の実部がともに負であれば、式(4)で与えた Ansatz 解 ρ_j^* は、時間経過とともに指数関数的に減衰する。これはすなわち、転位密度の空間一様状態からのズレ $\rho_j^*[j=s, m]$ は、(仮にあったとしても)時間とともに減り、十分長い時間が経てば一様状態に戻ることを意味する。つまり固有値 κ_1, κ_2 の実部がともに負のときは、空間パターン自発形成は起こり得ないのである。

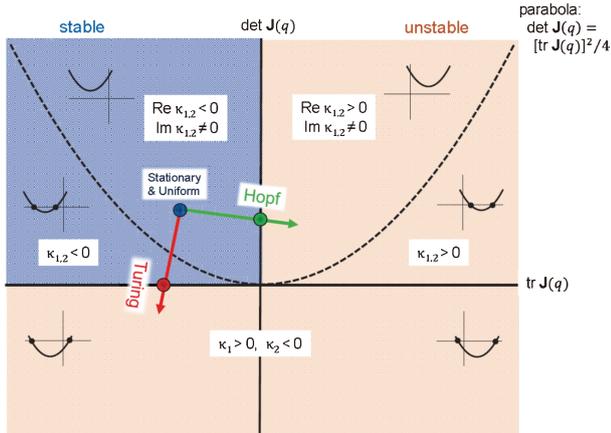


図2 反応拡散系におけるパターン発生条件を示す図。行列 $J(\mathbf{q})$ の性質如何で、空間一様状態の安定性が変化する。特に、青点で示した初期状態から赤線をたどって赤点を超えると、空間周期パターンが自然発生する。(オンラインカラー)

一方、もし2つの固有値のうち少なくとも1つが正の実部を持つならば、状況はガラリと変わる。例えば $\text{Re}(\kappa_1) > 0$ の場合を考えると、この固有値 κ_1 に属する行列 $J(\mathbf{q})$ の固有ベクトルの成分 ρ_j^* [$j=s, m$] は、時間とともに指数関数的に増大する。すなわち、ある特定の波数 \mathbf{q} で表される空間的な周期パターンが自発的に形成されうるのである。したがって、パターン形成の発現有無を調べるためには、(実部が大きい方の)固有値 κ_1 の実部がどんな場合に正となるのか、を調べればよい。より具体的には、 κ_1 の実部が正となるために、反応項 f, g と拡散定数 D_{ij} が満足すべき条件を特定すればよいのである。

図2は、行列 $J(\mathbf{q})$ の固有値 κ_1, κ_2 の符号と、 $\text{tr}[J(\mathbf{q})]$ および $\det[J(\mathbf{q})]$ の値との関係を図示したものである⁽¹⁹⁾。もし系がグラフの第二象限に位置している場合は、空間的に一様な初期状態が時間的に安定である。つまり、いくら時間が経過しても(仮に空間的な擾乱を故意に加えても)、系は一様状態を保つ。いっぽう、反応項 f, g と拡散定数 D_{ij} の値が変化することで、系がグラフ内の第三象限に移動した場合は、空間的に一様な初期状態は不安定となる。この場合は、ある波数 \mathbf{q} をもつ空間周期パターンが発生する。すなわち、パターンの自発形成が起きるための条件は、反応項 f, g と拡散係

数 D_{ij} で決まる $\text{tr}[J(\mathbf{q})]$ と $\det[J(\mathbf{q})]$ が、次の不等式を満たす場合だとわかる。

$$\text{tr}[J(\mathbf{q})] < 0, \quad \det[J(\mathbf{q})] < 0 \quad (\mathbf{q} \neq 0) \quad (7)$$

4. 転位反応項の定式化

ここまでの議論で、転位群パターンの形成条件を特定するための準備が整った。あとは、反応項 f, g の具体的な関数形を定義することで、その形成条件に関わる物理因子を抽出することができる。反応項 f, g の定義の仕方には諸々の流儀があるが、ここでは著者らの公表文献⁽¹⁹⁾に沿って、両者が次のような ρ_s と ρ_m のべき乗で与えられると仮定する。

$$f(\rho_s, \rho_m) = \xi(\rho_s) - \beta\rho_s + \gamma\rho_s^2\rho_m - b\rho_s^2 - 2c\rho_s^3 \quad (8)$$

$$g(\rho_s, \rho_m) = \beta\rho_s - \gamma\rho_s^2\rho_m + c\rho_s^3 \quad (9)$$

式(8)の右辺第一項で与えた関数 $\xi(\rho_s)$ は、繰り返し負荷に起因する転位の増殖を表す項である。これは、 ρ_s に関する多項式展開を用いて $\xi(\rho_s)$ を次のように定義される⁽¹⁹⁾。

$$\xi(\rho_s) \simeq \xi(\rho_{s0}) - \alpha(\rho_s - \rho_{s0}), \quad \alpha = - \left. \frac{d\xi(\rho_s)}{d\rho_s} \right|_{\rho_s = \rho_{s0}} \quad (10)$$

式(8)と(9)に含まれるパラメータ β は、転位双極子(=不動転位)を構成する2つの転位が、外部から強いせん断応力を受けることによって解離し、2つの独立した可動転位に変化する確率を表す[図3(a)]。外力によって双極子が分離することで、不動転位の密度は局所的に減少し、逆に可動転位の密度は局所的に増加する。

ちなみに実際の繰返し負荷実験では、負荷回数の増加とともにせん断ひずみが徐々に増加することで、2次元状のベイン-チャンネル構造から擬1次元的なはしご型構造への遷移が起こる。このせん断ひずみの増加は、双極子が解離する確率を高めるであろう。そこで以下の解析では、実験における負荷回数の増加と理論式におけるパラメータ β の増加が互いに相関すると考え、 β の増加に伴う自発形成パターンの変化を調べることにする。

このほか、式(8)と(9)に含まれるパラメータ γ は、転位間の3体相互作用により、1個の可動転位が1個の転位双極子に捕捉されるという反応を表す[図3(b)]。転位双極子はその周囲に弾性的なひずみ場を発生させるため、ある特定の方向から接近した可動転位を捕捉することができる。パラメータ b と c は、それぞれ双極子と三重極子を構成する不動

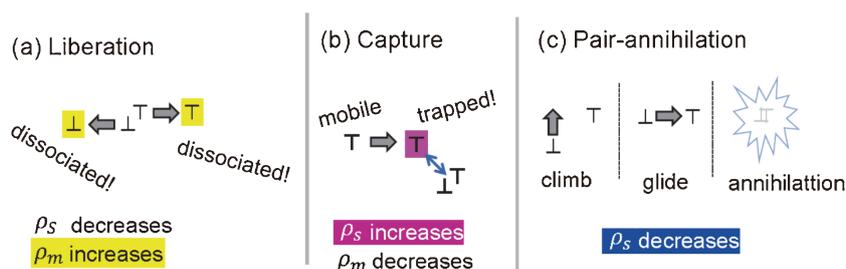


図3 繰返し負荷を受ける金属内部で起こる転位間の相互作用。(a) 転位双極子の解離。(b) 不動転位周囲の弾性場による可動転位の捕捉。(c) 転位対の消滅。(オンラインカラー)

転位の対消滅を意味する。これらの転位は、外力や熱擾乱によって転位間の距離が極端に近づくと、互いに打ち消しあって消滅するためである[図 3(c)]。

5. 転位群パターンの弱非線形解析

前節で定義した反応項 f, g の具体的な関数形を、もとの支配方程式 (2) に代入すれば、転位の時空間変化を追跡計算できることになる。ただし、得られる支配方程式は ρ_s^* と ρ_m^* に関して非線形となるので、そのままでは解析的に解くことができない。そこで、反応項 f, g を ρ_s^*, ρ_m^* に関して 1 次までの範囲で展開すると、次のような線形の行列ベクトル方程式が得られる。

$$\partial_t \rho^* = J(\mathbf{q}) \rho^*, \quad \rho^* = (\rho_s^*, \rho_m^*)^T \quad (11)$$

つまり、行列 $J(\mathbf{q})$ の固有値 κ_1, κ_2 の (少なくとも一方の) 実部が正であれば、その固有値に属する固有ベクトル \mathbf{w}_1 (または \mathbf{w}_2) の振幅が指数関数的に増大し、その固有ベクトルに対応した転位群パターンが時間とともに成長するとわかる。ただし式 (11) はあくまで線形近似の範囲でなりたつ方程式であり、これをそのまま使うと、正の固有値に属する固有ベクトルは永久に成長し続けることになってしまう。実際の金属試料では、転位群パターンの成長は有限の時間で収束することから、より定量的な理論推算を行うには、パターンの成長を止める非線形項を導入する必要がある。

そこで以下の議論では、転位群パターン形成に対する非線形項の寄与を検証する。この目的のために、2 つの反応項のテイラー展開を 3 次までの範囲に拡張する。例えば f の展開は次のように書ける。

$$f(\rho_s, \rho_m) \simeq f(\rho_{s0}, \rho_{m0}) + \sum_{p=1}^3 \frac{1}{p!} \left(\rho_s^* \frac{\partial}{\partial \rho_s} + \rho_m^* \frac{\partial}{\partial \rho_m} \right)^p f(\rho_s, \rho_m) \Big|_{\rho_s = \rho_{s0}} \quad (12)$$

同様の展開を g にも適用すると、次のような非線形ベクトル・行列方程式が得られる：

$$\partial_t \rho^* = J(\mathbf{q}) \rho^* + N_{30}(\rho^*) + N_{21}(\rho^*) + N_{20}(\rho^*) + N_{11}(\rho^*) \quad (13)$$

式 (13) 右辺の N_{mn} は、与えられたベクトル (いまの場合は ρ^*) を、それとは異なるベクトルに変換する関数である。特に式 (13) の場合は、変換後のベクトルの成分が、変換前のベクトル ρ^* の成分の関数として表現される。また、記号 N_{mn} に付けた添え字 mn は、変換後に得られるベクトルの成分が、 ρ_s^* に関する m 次項と ρ_m^* に関する n 次項の積で与えられることを意味する。

式 (13) は非線形であるため、厳密解を解析的に求めることは望めない。そこで、以下の 2 つのステップで解析を進める。まず、状態ベクトル ρ^* は、時間経過とともに成長する固有ベクトル \mathbf{w}_1 のスカラー倍で近似できると仮定する。すなわち、十分に長い時間が経過した後では、負の実部を持つ固有値 κ_2 に属する \mathbf{w}_2 モードが減衰し、正の実部を持つ固有値 κ_1 に属する \mathbf{w}_1 モードだけが生き残ると考えるのである。次に、式 (13) 右辺に含まれる 4 つのベクトル

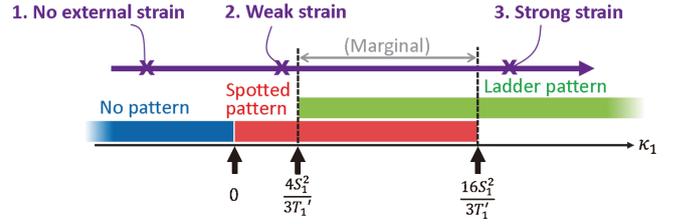


図 4 転位群パターンの分岐図。固有値 κ_1 の増加が繰返し負荷実験におけるせん断ひずみの増加に対応する。 S_1 と T_1' の定義については本文を参照。(オンラインカラー)

$N_{mn}(\rho^*)$ を、固有ベクトル \mathbf{w}_1 と \mathbf{w}_2 の線形結合で表現する。そのうえで、 ρ^* の時間発展に伴い $N_{mn}(\rho^*)$ が時間変化したときに、そこに含まれる \mathbf{w}_1 成分がどんな影響を受けるのかを調べるのである。このように、最も速く成長する \mathbf{w}_1 モードだけに注目することで、転位群パターン形成における低次の非線形効果を近似的に扱うことができる。

さらに数学的な準備として、以下の関係を満たす定数 S_j と T_j [$j=1, 2$] に注目する。

$$N_{20}(\mathbf{w}_1) + N_{11}(\mathbf{w}_1) = S_1 \mathbf{w}_1 + S_2 \mathbf{w}_2 \quad (14)$$

$$N_{30}(\mathbf{w}_1) + N_{21}(\mathbf{w}_1) = T_1 \mathbf{w}_1 + T_2 \mathbf{w}_2 \quad (15)$$

右辺の係数 S_1 と T_1 は、式 (13) 右辺に含まれる 2 次と 3 次の非線形項が \mathbf{w}_1 モードに寄与する度合いを表している (係数 S_2 と T_2 も同様)。これらの設定のもとで、自発的に形成される転位群パターンの幾何形状を求めると、実はそのパターン形状は S_1 と T_1 の比によって決定されるのである。導出の詳細は文献 (19) に譲り、次の節ではその結果のみを紹介する。

6. 転位群パターンの分岐図

図 4 は、固有値 κ_1 の値の変化に応じて、どのような幾何形状の転位網パターンが自律形成されるかを表した分岐図である。この図から、支配方程式 (13) で記述される反応拡散系が示すパターンには、4 つの種類が存在することがわかる。

κ_1 が負の場合は、空間一様状態が安定なのでパターンは生じない。しかし、繰返し負荷回数増加に伴う反応項や拡散項の変化により、 κ_1 が負から正に転じると、Vein-Channel 構造が自律的に形成される (図 4 では spotted pattern と記載されている)。さらに κ_1 の値が増加すると、はしご型構造の発生が許され始める。こうした転位網パターンの遷移は、繰返し負荷実験での観測結果と定性的に一致している。

さらに図 4 からは、パターン遷移の閾値が、転位反応の非線形効果を表す係数 S_1 と $T_1' (= -T_1)$ の比で表せることが分かる。したがって、固有値 κ_1 と負荷回数との関係を定式化できれば、具体的にどの種類の転位反応 (解離・捕獲・対消滅など) がパターン遷移を駆動するのか、その微視的なメカニズムを考察するための手掛かりを与えるものと期待できる。

