HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	くさび型回位の有限要素モデルと弾性不適合問題への適用
Author(s)	細矢, 隆史
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(工学)
Dissertation Number	甲第12019号
Issue Date	2015-09-25
DOI	https://doi.org/10.14943/doctoral.k12019
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/59924
Type	doctoral thesis
File Information	Takafumi_Hosoya.pdf

Hokkaido University Collection of Scholarly and Academic Papers : HUSCAP

くさび型回位の有限要素モデルと
弾性不適合問題への適用

(Finite element method in solid with disclination and its application to elastic incompatibility problem)

2015 年

北海道大学大学院 工学院
機械宇宙工学専攻 材料力学研究室

細矢　隆史

目次

第 1 章　序論　1

1.1　回位の幾何学的な性質　1

1.2　変位の不連続の有限要素モデルの研究背景　3

1.3　金属材料における回位に関する研究背景　4

1.4　本論文の目的と構成　5

第 1 章の参考文献　8

第 2 章　くさび型回位の有限要素モデル　12

2.1　諸言　12

2.2　くさび型回位の弾性応力場の解析解　14

2.3　回位の有限要素モデル　16

2.3.1 強制変位法　16

2.3.2 初期ひずみ法　20

2.4　計算結果　24

2.5　考察　37

2.6　結言　39

第 2 章の参考文献　40

第 3 章　結晶粒界三重線における弾性不適合の回位モデル　42

3.1　緒言　42

3.2　有限要素弾性解析　44

3.2.1　三重結晶モデル　44

3.2.2　要素分割　47

3.2.3　材料特性　47

3.3　粒界三重線における変形不適合の回位・転位モデル　49

3.3.1　均質・等方弾性体におけるくさび型回位　49

3.3.2　均質化モデル　50
3.3.2.1 不適合ひずみの回位・転位成分　50
3.3.2.2 回転の不適合　51
3.3.2.3 界面ひずみの不適合　52
3.3.3 有限要素モデル　53
3.4　解析結果　57
3.4.1　対称傾角粒界を持つ三重結晶　57
3.4.2　非対称傾角粒界を持つ三重結晶　67
3.5　結言　77
第 3 章の参考文献　78

第 4 章　結論　81

Appendix A　83
Appendix B　89
Appendix C　90

謝辞

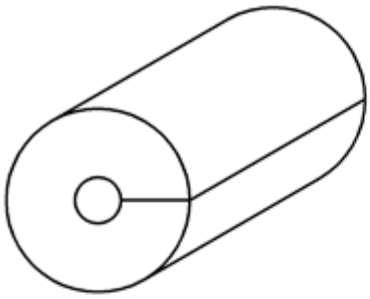
第1章　序　　論

1.1　回位の幾何学的な性質

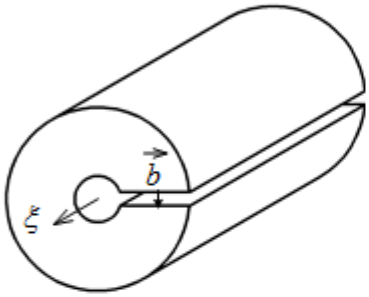
連続体の変形において，変位に不連続があると特異応力場が発生する[1]．変位の不連続は並進成分と回転成分に分けることができる．並進成分を持つ変位の不連続は転位と呼ばれ，金属の塑性変形において重要な役割を果たしている．回転成分が回位であり，回転軸に沿って軸対称なひずみ場および応力場を持つ．回位の概念は転位と同時期に導入された[2]．

変位の不連続は，円筒に切れ目を入れ，その切れ目を変位させてつなぎ直すという弾性論の問題（いわゆる Volterra cut）として説明できる（図 1.1）[2][3]．Volterra は，変位の不連続を，並進成分と回転成分の方向の違いから，それぞれ 3 種類の計 6 種類に分類した[2]．この内，並進成分である転位は，並進ベクトルであるバーガースベクトル$\vec{b}$で表され，円筒の対称軸が転位線となる．バーガースベクトル$\vec{b}$が転位線に対して垂直である場合は刃状転位（図 1.1（b），（c）），バーガースベクトル$\vec{b}$が平行である場合はらせん転位（図 1.1（d））となる．回転成分である回位は，回転ベクトルである Frank ベクトル$\vec{\omega}$で表され，円筒の対称軸は回位線となる．Frank ベクトル$\vec{\omega}$が回位線に対して垂直で，かつ，切れ目に対して垂直である場合はツイストねじれ型回位（図 1.1（e）），Frank ベクトル$\vec{\omega}$が回位線に対して垂直で，かつ，切れ目に対して平行である場合はレンチねじれ型回位（図 1.1（f）），Frank ベクトル$\vec{\omega}$が回位線に対して平行である場合はくさび型回位（図 1.1（g））となる[1][3]．

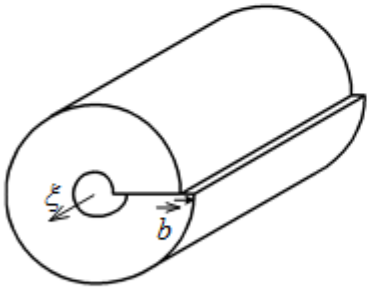
回位の符号は，回位線と Frank ベクトルの幾何学的関係により正負が決まる．レンチねじれ型回位については，Frank ベクトルの向きが，回位線に対して外側に向かう方向が正となる．ツイストねじれ型回位は，Frank ベクトルの向きが回路の進む向きと同じ方向になるものが正となる．くさび型回位は，Frank ベクトルの向きが回位線と同じ方向になるものが正となる．図 1.1（g）は負のくさび型回位である．完全結晶に導入したくさび形の切れ目を閉じると，正のくさび型回位となる．



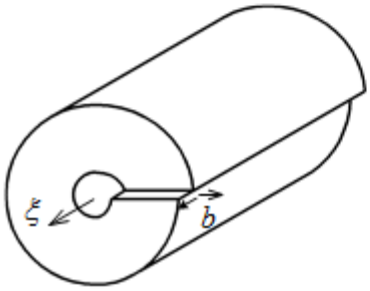
(a) Original cut cylinder.



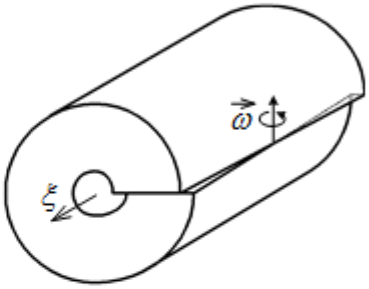
(b) Edge dislocation.



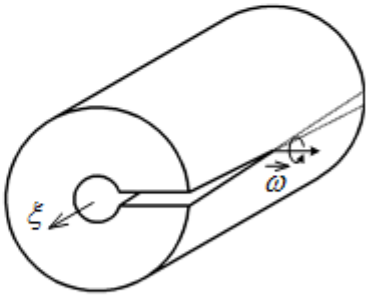
(c) Edge dislocation.



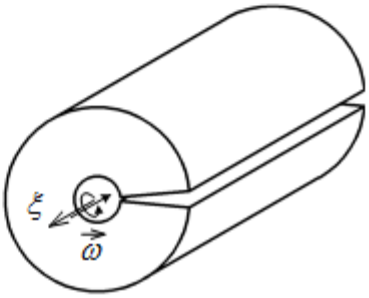
(d) Screw dislocation.



(e) Twist disclination.



(f) Wrench disclination.



(g) Wedge disclination.

Fig.1.1 The Volterra's idea of creating dislocations and disclinations. The dislocation and disclination lines are in the ξ direction. The Burgers vector is $\vec{b}$ and the Frank vector $\vec{\omega}$.

1.2　変位の不連続の有限要素モデルの研究背景

変位の不連続については，二次元問題において複素応力関数を用いた解析例が森口によってまとめられている[4]．森口は，変位の不連続を変位の食い違いと呼んでいる[4]．変位に食い違いが存在する場合，変位は数学的に多価となる．また，一般に，複雑な形状や境界条件において，弾性問題を解析的手法により求めることは困難を伴うことが多い．そのため，多価性を伴う弾性問題を精度良く取扱うために，数値計算的手法が必要となる．

先に述べたように，変位の食い違いを数値計算で扱う場合，物体に導入した切れ目を変位させてから切れ目を接合するモデルを考える．この時，接合した後の切れ目の位置は元の位置とは異なり，弾性変形のつりあいから決まるので，計算力学では一種の接触解析と同様な手続きが必要となる．

接触問題の数値解析の手法を大まかに分類すると，接触面上に存在する節点に力学的および幾何学的な接合条件を境界条件として適用する計算手法と，接触要素と呼ばれる特殊要素を自由表面間に挿入する計算手法に分けることができる[5]．これらの方法にはそれぞれメリットとデメリットがある．接合条件を境界条件に適用する方法では，幾何学的条件と力学的条件を同時に満足させる必要がある．そのため，繰り返し計算が必要となり計算コストが膨大になるというデメリットがある．接触要素を用いる方法には，解の収束性を最優先にしているため，接触面に食い込みが生じる可能性があり，解析精度に難がある．

変位の食い違いが存在する問題を数値計算で解析する試みは，佐々木らによって，転位の応力場の有限要素解析について報告されている[6]-[9]．これらの研究は，前者の接合条件を与える手法に相当する．ただし，接合面の力学的条件を完全接合とし，接合条件を全体剛性マトリクスに組み込むことで一度に解く手法をとっている．これにより収束計算は必要なくなるため，計算コストを圧縮するとともに，精度のよい結果が得られている[6]-[8]．一方，熱ひずみ問題のアナロジーとして，初期ひずみを体積領域に分布させることによって解析する手法も提案されている[9]．これらの転位の解析例に比較して，回位については研究が少ないこともあり，有限要素法解析は今日まで実行されていなかった．

1.3　金属材料における回位に関する研究背景

回位は，転位と同時期に提案された格子欠陥である[2]．転位は，中間温度以下での金属の塑性変形の主たる原因（担い手）となることから，その研究は極めて多い．その一方で，回位は，配向性のある物体中に存在する格子欠陥として液晶[10]や高分子結晶[11]では良く知られていたが，金属材料中で観察された研究例は少ない．それらは，多結晶材料の粒界構造 [12]，双晶界面の構造，マルテンサイトのバリアント間の界面[13]，マルテンサイト相とオーステナイト相の形状の差による異相界面[14], 結晶粒界三重線の幾何学的モデル[15]-[17], といった研究，すなわち結晶格子の食い違いの幾何学モデルに限定されていた．

ところが近年になって，回位の概念が結晶構造に対してだけではなく，塑性変形に伴うひずみこう配や結晶回転を連続体力学で取り扱うために有効であることが認識されはじめている．これは，以下に述べるように，結晶塑性変形研究において，結晶粒界の接合部である三重線における局所変形の結晶学的な研究の進展があったためである．

多結晶体の変形特性は，単結晶の変形特性により推定される[18]が，それは一般に単結晶の変形とは一致しない．結晶粒界と粒界三重線近傍での局所的な変形が大きく影響するためである．例えば，多結晶体が塑性変形すると，各結晶粒のすべり方向の違いによって変形の差が生じ結晶粒の界面（粒界）で変形が不整合となる．Ashby は，この不整合を正すための塑性変形をもたらす転位を，変形において生成消滅する転位として特別視して，GN 転位（Geometrically Necessarily Dislocation）と呼んでいる[19]．

結晶粒界における局所的な塑性変形については実験における観察例が数多くあるが，それに比べて粒界三重線に関する研究例は少ない．粒界三重線では，3 つの結晶粒の変形異方性によって応力集中が発生する[20]．その応力集中は増加するだけでなく，結晶粒の結晶方位の組み合わせ次第では減少することもあることが分かっている[21]．すなわち，結晶学的方位関係で決まる現象であり，三結晶ではその組み合わせは極めて多い．さらに試験片の準備は極めて難しく，実験や解析で結晶学的な一般性をもった結論を導くことが困難であることが，研究例が少ない一因であろう．

粒界三重線の局所変形に関する研究の多くは, 塑性変形や破壊の起点としての役割に着目している．三浦らによるアルミニウムや銅合金を用いた双結晶や三重結晶の実験[22][23]が先駆的に行われるとともに，大橋らによる一連の結晶塑性の計算シミュレーションの成果[24]-[27]が得られている．

例えば，実験では，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ボイドは，破壊や再結晶の起点となる[28]-[30]．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[31]．また，室温での疲労破壊の起点にもなる[32]．

計算では，大橋らによれば，粒界に堆積した GN 転位は，回位型応力場を形成すること．そして，その回位型応力場によって新たな GN 転位が生成されることが指摘されている[25]．さらに，回位型応力場によって，主すべり系，および 2 次すべり系が不均一に活性化することが示され，微視的な非対称変形が変形の進行とともに発展することが指摘されている[26]．さらに最近の研究で，回位を多結晶金属の粒界三重線に配置した塑性変形の連続体力学シミュレーションが提案されている[33]．

このような結晶粒界とその三重線に支配された塑性変形研究の進展の経緯から，回位を直接に異種物質の界面や結晶粒界の局所変形の定量評価に用いることを目指したのが本研究のきっかけである．回位を結晶格子のレッジやステップの表現としてではなく，マクロな連続体の力学に適用する点において，本研究はこれまでに例のない成果を目指している．

1. 4　本論文の目的と構成

以上の背景から, 本論文では, まず, 回位の有限要素モデルについて提案する．そして，三重線に生じる不均一応力場の定量的評価手法として回位を用いる方法を提案し，三重線に生じる不均一応力場の，回位を用いた均質化モデルによる近似解析を行う．本論文の目的は，手法の確立と精度の検証であるため，単純な二次元平面問題を対象とする．回位については，平面変形であるくさび型回位を取り扱う．

まず，回位によって生じる応力場を簡便に解析するための有限要素モデルを 2 種類提案する．一つは，物体に切れ目を入れ，その切れ目に対して変位の食い違いに相当する変位を与える手法である．これは転位の有限要素モデルと同様な手法である[6)-8)]．この方法は接触解析のアナロジーである．もう一つは，変位の食い違いに相当する変位を初期ひずみとして体積領域に分布させる手法を提案する[9)]．この解析は熱ひずみ問題のアナロジーである．

さらに，異種物質の接合体における応力集中に回位を適用する．接合体の一例として，弾性異方性を持つ物質で構成された三重結晶を対象とする．外力を受けることで三重結晶中の粒界三重線にくさび型回位が発生すると捉え，それによって回位型の不均一応力場が生じているとみなす．この回位角を定量的に評価する手法を提案する．また，本研究では，弾性不均質介在物の等価介在物理論[34)]や異相界面上のき裂への線形破壊力学の適用[36)]などの例に倣って，弾性定数が均一な物体において，回位を与えることで不均一応力場を再現する均質化モデルを提案する．均質化モデルによる不均一応力場と，三重結晶に生じる不均一応力場をそれぞれ有限要素法で解析し，比較することで，均質化モデルの妥当性を示す．

本論文は全 4 章で構成されている．以下にこの論文の構成の詳細を示す．

第 1 章は，序論である．回位の幾何学的性質，およびその研究背景や，変位の食い違いの有限要素モデルの研究背景，異種物質の接合体に生じる弾性不適合の研究背景を説明した．

第 2 章では，有限要素法におけるくさび型回位の解析手法を提案している．提案している方法は 2 種類ある．1 つは，物質に導入した変位の食い違いに相当する切れ目を強制変位させて接合させる従来の手法である．もう 1 つは，体積領域に変位の食い違いに相当する初期ひずみを分布させる新たな手法である．強制変位を用いて解析した結果と，初期ひずみを用いて解析した結果には違いは見られなかった．数値計算結果と理論解と比較を行った．数値計算結果と理論解はほぼ一致した．数値計算結果と理論解との偏差は，離散化によるものであり，要素のサイズに依存するものであることを示した．

第 3 章では，くさび型回位の有限要素モデルの応用例の 1 つとして，外力を受ける結晶粒界三重線において，弾性不適合によって生じる不均一応力への適用について示した．弾性不適合を，各結晶粒の拘束が無いとした時の変形の差によって生じているものとみなし，その変形の差を回位角とした．また，くさび型回位によって不均一応力場を近似した均質化モデルを有限要素法により解析した．均質化モデルの妥当性は，解析結果を実材料のものと比較することで，検討した．不均一応力場をくさび型回位のみで近似した対称傾角粒界の場合と，くさび型回位と転位で近似した結晶方位がランダムな組み合わせの場合の結果を示した．いずれの場合においても，均質化モデルの解析結果は，実材料の解析結果とよく似た結果となった．

第 4 章は結論である．本研究で得られた結論を要約している．

第１章の参考文献

(1) Love, A.E.H., A Treatise on the Mathematical Theory of Elasticity, Cambridge University Press (1927), pp.221-228.

(2) Volterra, V., L'equilibre des Corps Elastiques, Annls scient. Ec. norm. sup., Vol. 24, (1907), pp. 400-517.

(3) Nabbaro, F.R.N., Theory of Crystal Dislocations, Oxford: Clarendon Press (1967), pp.120-130.

(4) 森口繁一, 二次元弾性論 (1957), pp.45-46, 岩波書店.

(5) 鷲津久一郎, 宮本博, 山田嘉昭, 山本善之, 川井忠彦, 有限要素法ハンドブック, I 基礎編 (1981), pp.421-425, 培風館.

(6) 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.

(7) 岸田路也, 佐々木一彰, 岩崎徹也, 結晶三重境界の応力解析 (転位の有限要素モデルによる検討), 日本機械学会論文集 A 編, Vol.64, No.620 (1998), pp.969-974.

(8) 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.

(9) 小田憲司, 佐々木一彰, 初期ひずみを利用した刃状転位の有限要素モデル, 日本機械学会第 14 回計算力学講演会講演論文集 (2001), pp.127-128.

(10) Frank, F.C., I. Liquid crystals. On the theory of liquid crystals, Discussions of the Faraday Society, Vol.25 (1958), pp.19-28.

(11) Li, J.C.M. and Gilman, J. J., Disclination loops in polymers, Journal of Applied Physics, Vol.41 (1970), pp.4248-4256.

(12) Li, J.C.M., Disclination model of high angle grain boundaries, Surface Science, Vol.31 (1972), pp.12-26.

(13) Chopra, H.D., Bailly, C. and Wutting, M., Domain structures in bent In-22.5 at.%Tl polydomain crystals, Acta Materialia, Vol.44 (1996), pp.747-751.

(14) Müllner, P. and King, A.H., Deformation of hierarchically twinned martensite, Acta Materialia, Vol.58 (2010), pp.5242-5261.

(15) Bollmann, W., Triple lines in polycrystalline aggregates as disclinations, Philosophical Magazine A, Vol.49 (1984), pp.73-79.

(16) Bollmann, W., Triple-line disclinations Representations, continuity and reactions, Philosophical Magazine A, Vol.57 (1988), pp.637-649.

(17) Upadhyay, M., Capolungo, L., Taupin, V. and Fressengeas, C., Grain boundary and triple junction energies in crystalline media: A disclination based approach, International Journal of Solids and Structures, 48 (2011), 3176-3193.

(18) Kocks, U.F., The relation between polycrystal deformation and single-crystal deformation, Metallurgical and Materials Transactions, Vol.1 (1970), pp.1121-1143.

(19) Ashby, M.F., The deformation of plastically non-homogeneous materials, The philosophical magazine, Vol.21 (1970), pp.399-424.

(20) Tvgaard, V. and Hutchinson, J.W., Microcracking in ceramics induced by thermal expansion or elastic anisotropy, Journal of the American Ceramic Society, Vol.71 (1988), pp.157–166.

(21) Wu, M.S. and Niu, J., A theoretical analysis of crack nucleation due to grain boundary dislocation pile-ups in a random ice microstructure, Philosophical Magazine A, Vol.71 (1995), pp.831-854.

(22) 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.

(23) Okada T., Onaka, S., Hashimoto, S. and Miura, S., Suppression of grain-boundary sliding by a boundary node in Cu-9at.%Al tricrystals, Scripta Metallurgica, Vol.23 (1989), pp.49-54.

(24) 大橋鉄也, 半澤宏, 岸田路也, 双結晶に生ずる弾性不適合応力, 日本金属学会誌, Vol.44, No.8 (1980), pp.876-883.

(25) 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.

(26) 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.

(27) Ohashi, T. and Kondou, R., Evolution of dislocation patterns in a tricrystal model subjected to cyclic loading, Philosophical Magazine,Vol.93, No.4 (2013), pp.366-387.

(28) 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.

(29) Okada, T., Urushibara, K., Tagami, M., Inoko, F. and Hashimoto, S., Morphology of [011]-tilt Σ3 boundaries in pure copper and copper–aluminum alloy tricrystals, Materials Science and Engineering: A, Vol.282 (2000), pp.8-15.

(30) 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.

(31) 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.

(32) Vinogradov, A. and Hashimoto, S., Effect of triple junction on fatigue crack growth in copper and copper-3at.% aluminum tricrystals, Scripta Mater, Vol.36 (1997), pp.417-423.

(33) 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.

(34) Eshelby, J.D., The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems, Proceedings of the Royal Society of London A, Mathematical and physical science, Vol.241, No.1226 (1957), pp.376-396.

(35) 結城良治, 界面の力学 (1992), 5-7 章, 培風館.

第 2 章　くさび型回位の有限要素モデル

2.1　緒　　言

回位は食い違いの一つであり，Frank の定義では，完全結晶に切れ目を入れ，それを食い違わせて接合したとき，並進による食い違いが転位であり，回転によるものが回位である[1]．連続体の変形で変位に食い違いがあれば，ひずみが不適合となり特異応力が現れる[2]．解析的な手法として複素応力関数を用いるものがある[3]．一方で，近似解を得る手法として並進の食い違いを有限要素法で解析する試みがあり，転位については既にいくつかの報告がある[4][5]．しかし，回位については今日まで報告例は無い．

転位と回位は，ともに結晶格子の周期性の乱れ（格子欠陥）であるが，回位は，転位のように金属材料で塑性ひずみを生じる直接の原因とは認められていない．また，塑性変形で回位が増殖する実験的証拠も得られていない．これらの特徴から，従来から塑性変形における回位の役割は，原子配列に回転の食い違いが現れる結晶粒界[6]，結晶粒界三重線[7]の幾何学的モデルおよびその有限要素解析[8]に限定されていた様である．

しかしながらその一方で，第 1 章 1.3 項でも述べたように，回位の概念が塑性変形に伴うひずみこう配や結晶回転を連続体力学で取り扱うために有効であることが，三浦による双結晶や三重結晶の実験[9][10]，大橋による一連の結晶塑性シミュレーションの成果[11]-[13]，および，Taupin らによる回位を多結晶金属の粒界三重線に配置した塑性変形の連続体力学シミュレーション[14]によって認識されつつある．

転位や回位の食い違いは，物質に切れ目を入れて変位させてつくる．この操作はき裂の開口と似ているが，切れ目に同じ物質を削除あるいは挿入して接合し，切れ目がなくなる点でき裂と異なる．すなわち，切れ目をつくる 2 つの自由表面が変位してから完全固着する現象であるから，食い違いの問題は一種の接触解析とみなすこと出来る．一般に，有限要素法による接触解析は，接触面に力接合条件を境界条件として適用する計算手法と，接触要素を自由表面間に挿入する計算に大別される[15]．転位については，バーガースベクトル分の厚さの結

晶を有限要素モデル上で除去あるいは挿入し，接合することで食い違いを与えた有限要素モデルが報告されている[4][5]．この研究は，前者の接合条件を与える手法に相当する．本章でも前者の方法を回位に適用し，回転の食い違いに相当する変位境界条件を接合面のみに与える方法を提案する．また，もう 1 つの方法として，回転の食い違いに相当する初期ひずみを体積領域に分布させる計算手法を提案し，両者のモデルを検討する．

2.2　くさび型回位の弾性応力場の解析解

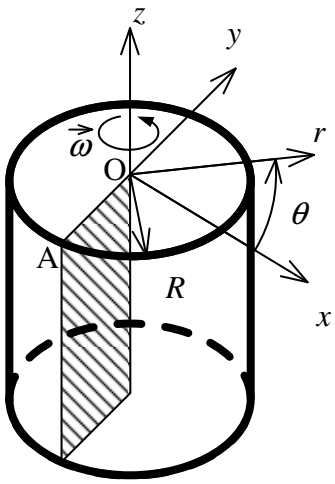
回位は回位線とFrankベクトルの関係からくさび型回位とねじれ型回位に分類され，回位線とFrankベクトルが平行である場合がくさび型回位であり，垂直な場合がねじれ型回位[(1)(2)]である．くさび型回位は回位線方向について十分長い物質中では，平面ひずみ，あるいは平面応力状態となる．一方で，ねじれ型回位では三次元のひずみと応力場が現れる．そのため，ねじれ型回位は，くさび型回位に比べて計算コストが大きくなる．食い違いの一般論ではねじれ成分の考慮が必要となるが，本章では有限要素モデルの作成手法の確立と精度の検証が目的であるので，単純な二次元平面問題であるくさび型回位に焦点を絞る．

図2.1（a）のような半径Rの横断面を持つ円柱に半直線の切れ目OAを入れ，図2.1（b）のように中心角ω［rad］を成す2つの面OA，OBではさまれたくさび形の物質を切り取った後，切り口を接合したものが正のくさび型回位であり，図 2.1（c）のようにくさび形の物質を挿入したものが負の回位である．このとき，図2.1（a）に示すように，回位線は中心軸に平行で，くさび型回位のFrankベクトルは回位線と平行である．切れ目を接合した後には，円柱の中心軸について軸対称な応力場が形成される．十分長い円柱では，平面ひずみ，あるいは平面応力状態となる．

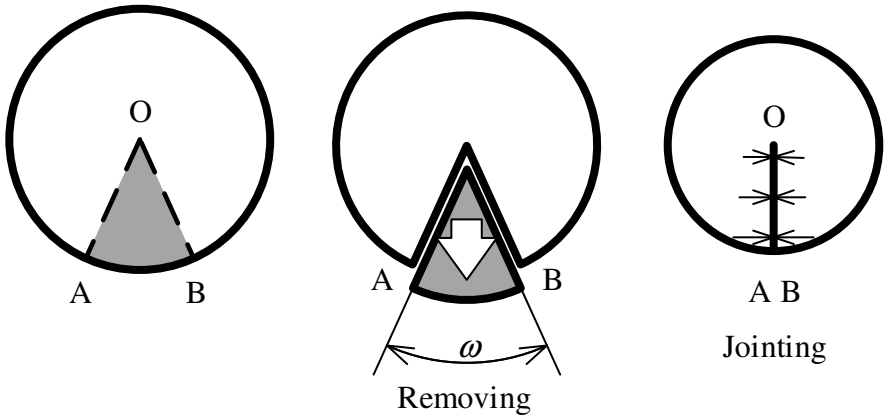
軸対称の変位と応力は，応力関数による方法[(3)]や曲がりはりの純曲げの解[(16)]の解析解があって，いずれの解も，応力成分は縦弾性係数E，ポアソン比νの等方弾性体では円筒座標O-$r\theta z$において，

$$\sigma_r = \frac{E\omega}{4\pi(1-\nu^2)}\ln\frac{r}{R}, \sigma_\theta = \frac{E\omega}{4\pi(1-\nu^2)}\left(\ln\frac{r}{R}+1\right), \tau_{r\theta}=0, \qquad (2.1)$$

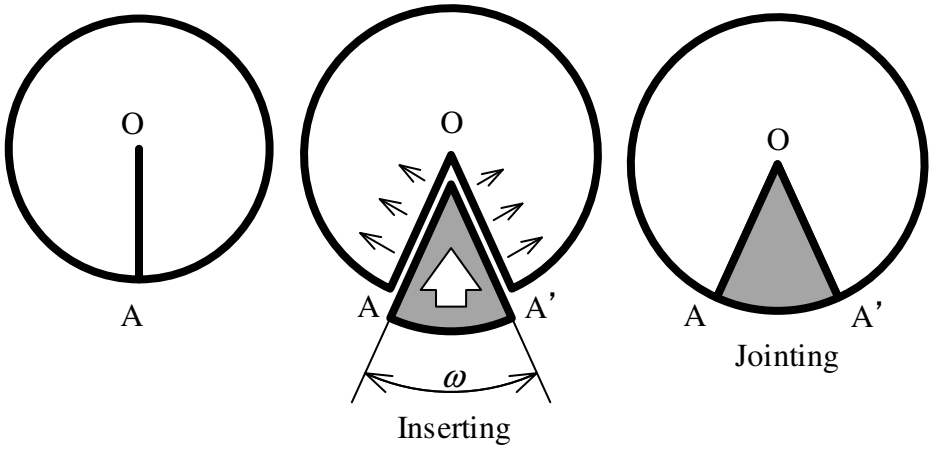
となる[(17)]．応力場は半径rの対数関数であり，原点に近付くと無限大となる．現実の結晶はそこで非弾性を示すはずである．しかしながら本章では，応力特異性を有する欠陥の数値モデルの有効性を検証するために，数値モデルと解析解の比較を行うことが目的であるので，特異点を含めた弾性解析を行うこととし，回位芯の非弾性挙動については計算には考慮しない．この影響については後で議論する．



(a)



(b) A positive wedge disclination, $\omega>0$.



(c) A negative wedge disclination, $\omega<0$.

Fig.2.1 (a) The cylindrical and orthogonal coordinates are taken in the cylinder where a positive disclination (b) and a negative one (c) are formed.

2.3　回位の有限要素モデル

2.3.1　強制変位法

円柱の横断面における平面ひずみ解析を行った. 回位線を単位円の原点に配置するために, 食い違いの無い単位円について, 三角形一次要素で要素分割した. 先ず, 周方向に等間隔にπ/45（=4°）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. 外周の四角形の縦横比は 1 : 2 以下に留められている. この四角形を, 頂点を結んで 4 つの三角形に分割し, 三角形一次要素とした. この分割による節点数は 10891, 要素数は 21690 である.

回転の食い違いを接触面の接合条件としてモデル化する. この手法を本論文では強制変位法と呼ぶ. 図 2.1 の回位の説明で行った仮想的な物体変形の手順を, そのまま数値モデルで再現する. すなわち, 完全結晶に半直線の切れ目を入れ, 回位角に相当するくさび形の隙間の要素を取り除くか, あるいはくさび形の物質を挿入して, 切れ目を接合するように切れ目上にある節点に変位境界条件を与える.

正の回位角$\omega=\pi/180$の回転の食違いをモデル化する具体的な手順を, 図 2.2(a), (b) に示す. 図 2.2 (a) では, 単位円において原点から半直線 ($0<r<1$, $\theta=3\pi/2$) の切れ目を入れて, そこから頂角π/180 のくさび形の空間 OAB を取り除いている. 図 2.2（b）に切れ目の一部を示す. 今, 切れ目が左右対称となるような直交座標 O-xy で解析する. 切れ目が閉じるための接合条件は, 切れ目の左側と右側の対応する節点の水平方向変位 u と垂直方向変位 v, および水平方向節点力 P, 垂直方向節点力 Q にそれぞれ添え字 L, R をつけて表すと,

$$u_{\mathrm{L}}-u_{\mathrm{R}}=2r\sin\frac{\omega}{2},\ v_{\mathrm{L}}-v_{\mathrm{R}}=0. \tag{2.2}$$

節点力はつり合うので,

$$P_{\mathrm{L}} + P_{\mathrm{R}} = 0, Q_{\mathrm{L}} + Q_{\mathrm{R}} = 0. \tag{2.3}$$

全ての接合節点について上式の 4 条件を全体剛性マトリクスに組み込む．具体的には，接合する 2 節点について，剛性方程式中の P_{L}，P_{R}，Q_{L}，Q_{R} に関する式を，式（2.3）に代入して剛性方程式を 2 つ減らす．さらに，未知の節点変位の関係式（2.2）を用い，未知変位の数を 2 個減らすよう全体剛性マトリクスを組み替える[4][5]（Appendix A を参照）．要するに，強制変位法では物体に切れ目が入っている有限要素モデルを作成して，その剛性マトリクスを作成し，それから接合条件を取り入れて剛性マトリクスを正則にする．剛性方程式を解くためにこの処理が必要となるが，一般的な有限要素法プログラムをそのまま使用できない点で不便である．

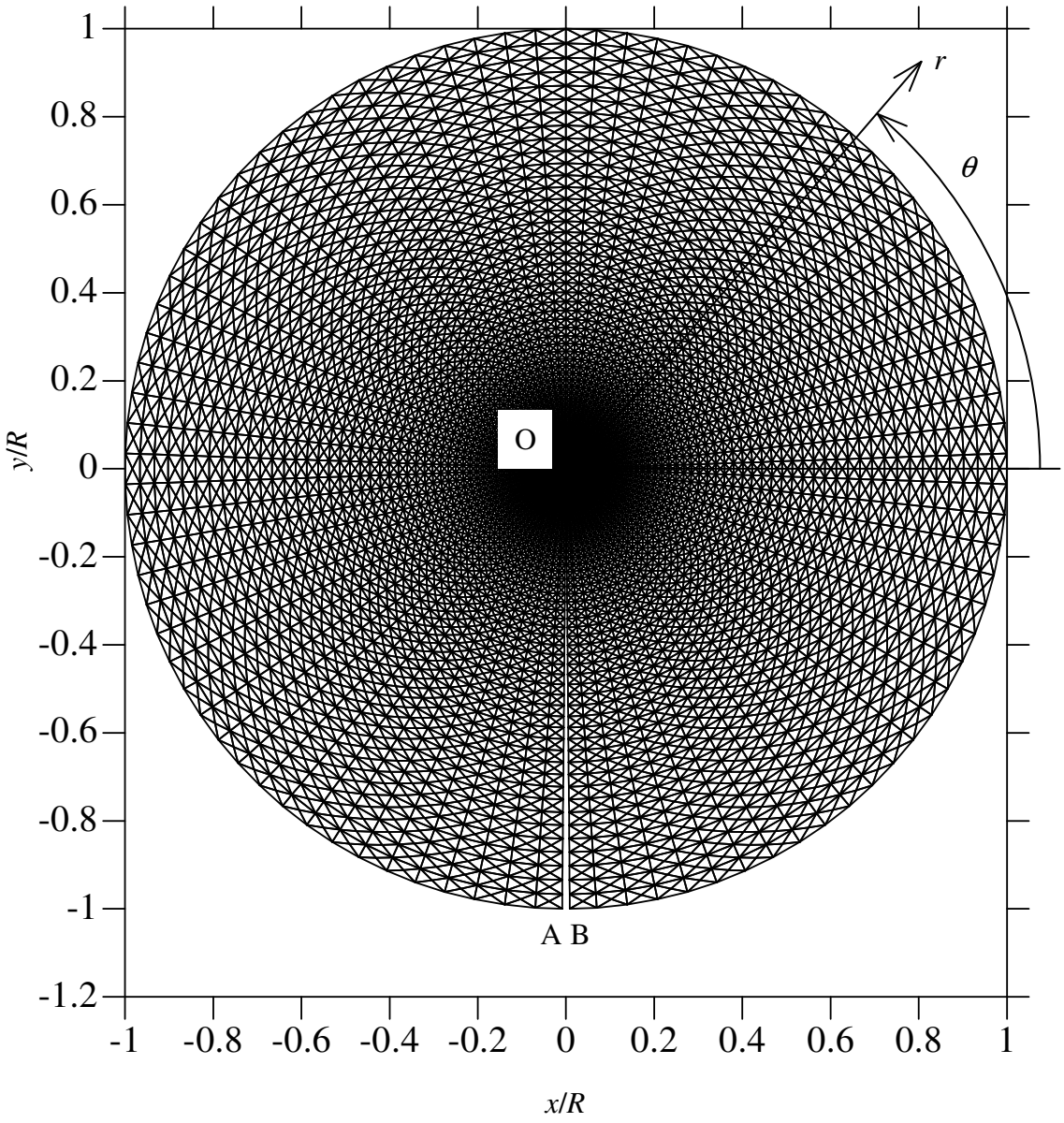


Fig.2.2 (a) Finite element model of wedge disclination; the entire circular area. Plane strain analysis of a cylinder of radius R with a wedge shaped open slit AOB at the angle of $\theta=3\pi/2$. Triangular mesh was used.

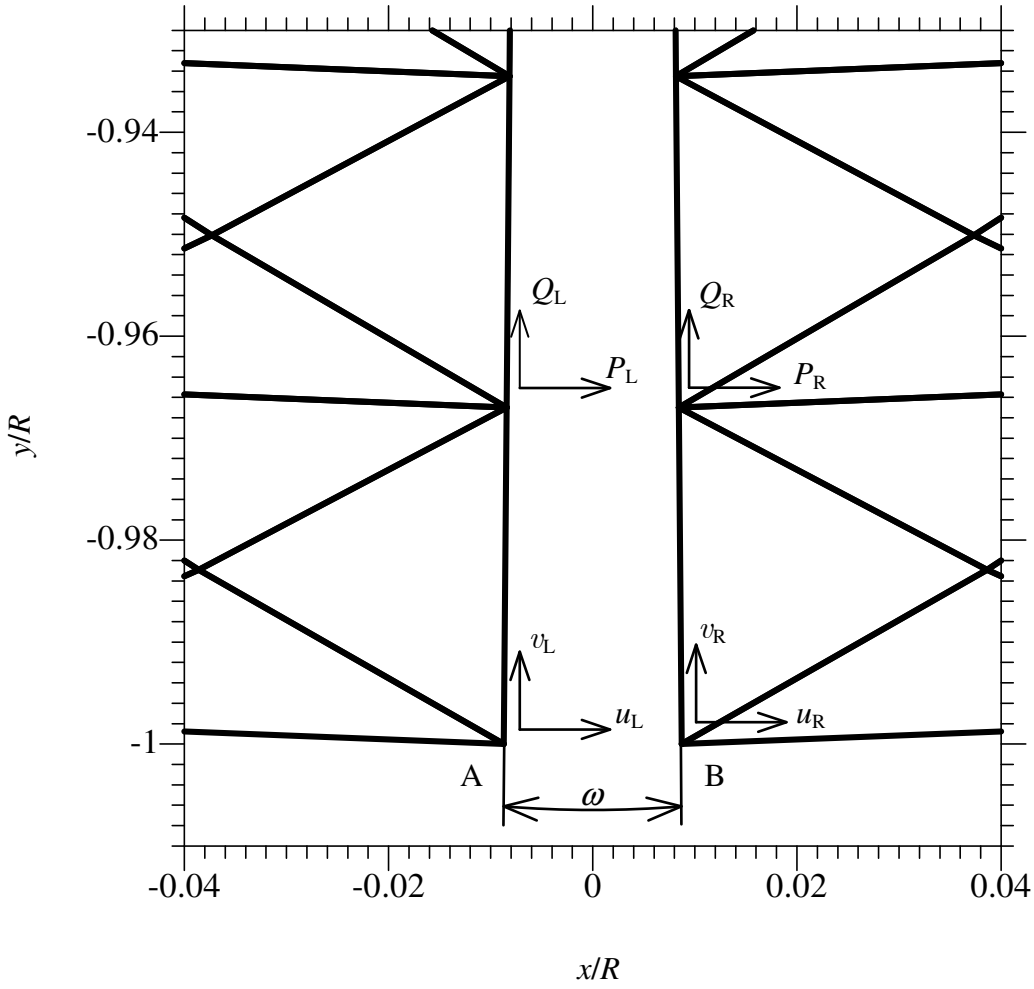


Fig.2.2 (b) Finite element model of wedge disclination; the enlarged part of linking interfaces. Linking of nodal points on two interfaces OA and OB.

2.3.2 初期ひずみ法

剛性マトリクスの組み替えを必要としない方法として, 熱応力問題のアナロジーで，食い違いに相当する初期ひずみ（固有ひずみ）を与える有限要素モデルを検討する．この手法を本論文では初期ひずみ法と呼ぶ．初期ひずみを与えるくさび形の領域の中心角で，初期ひずみの大きさが決まる．あるいは初期ひずみに合わせてその中心角を決める．初期ひずみは円全面に与えても良く，半直線上だけにデルタ関数を用いて与えてもよい．初期ひずみは一様でなくとも良いが，一様であれば解析が容易である．一般に，回位角ω［rad］の回位を表現するためには，中心角φ［rad］のくさび形領域に初期ひずみを与えるとすれば，そのくさびの両辺が$\omega/2$ だけ周方向に回転し，中心角が$\varphi-\omega$となるような変位を生じる初期ひずみとなる．節点変位はくさび形領域の中心線の位置をθ_0 とすれば,

$$u_\theta = -r\,\omega(\theta-\theta_0)/\varphi, \tag{2.4}$$

となる．マイナス符号がつくのは回位の正負の定義によるものである．半径方向の変位 u_rはゼロとすることができる．従って，初期ひずみは

$$\varepsilon_r = \partial u_r/\partial r = 0, \tag{2.5}$$

$$\varepsilon_\theta = u_r/r + r^{-1}\,\partial u_\theta/\partial\theta = -\omega/\varphi, \tag{2.6}$$

$$\gamma_{r\theta} = 0, \tag{2.7}$$

となる．直交座標系における数値計算では式（2.5）～（2.7）を座標変換する（Appendix B を参照）.

初期ひずみを与えるくさび形領域の位置θ_0は円周内で任意であるから，図 2.2 に合わせて，図 2.3（a），（b）のように$\theta=3\pi/2$ の線分 OC について左右対称に置く．例えば, 図 2.3（a）で頂角$\varphi=2\pi/45$（=8°）のくさび形領域に, 回位角$\omega=\pi/180$（=1°）の回位を発生させることにする．半直線 OC の左右の領域を L と R とす

る．式（2.6）の周方向ひずみを与えるためには，L 領域の左端の線分 OA 上の節点が$+\omega/2$の回転をし，R 領域の右端の線分 OB 上の節点が$-\omega/2$の回転をして，$\theta=3\pi/2$の線分 OC 上の節点は回転しないような変形を与える．これは，式（2.6）より周方向ひずみ

$$\varepsilon_\theta = -1/8, \tag{2.8}$$

の大きさの初期ひずみをくさび形領域だけに与えることに相当する．式（2.6）の初期ひずみに相当する等価節点力を算出し，それを境界条件として有限要素計算を行う．

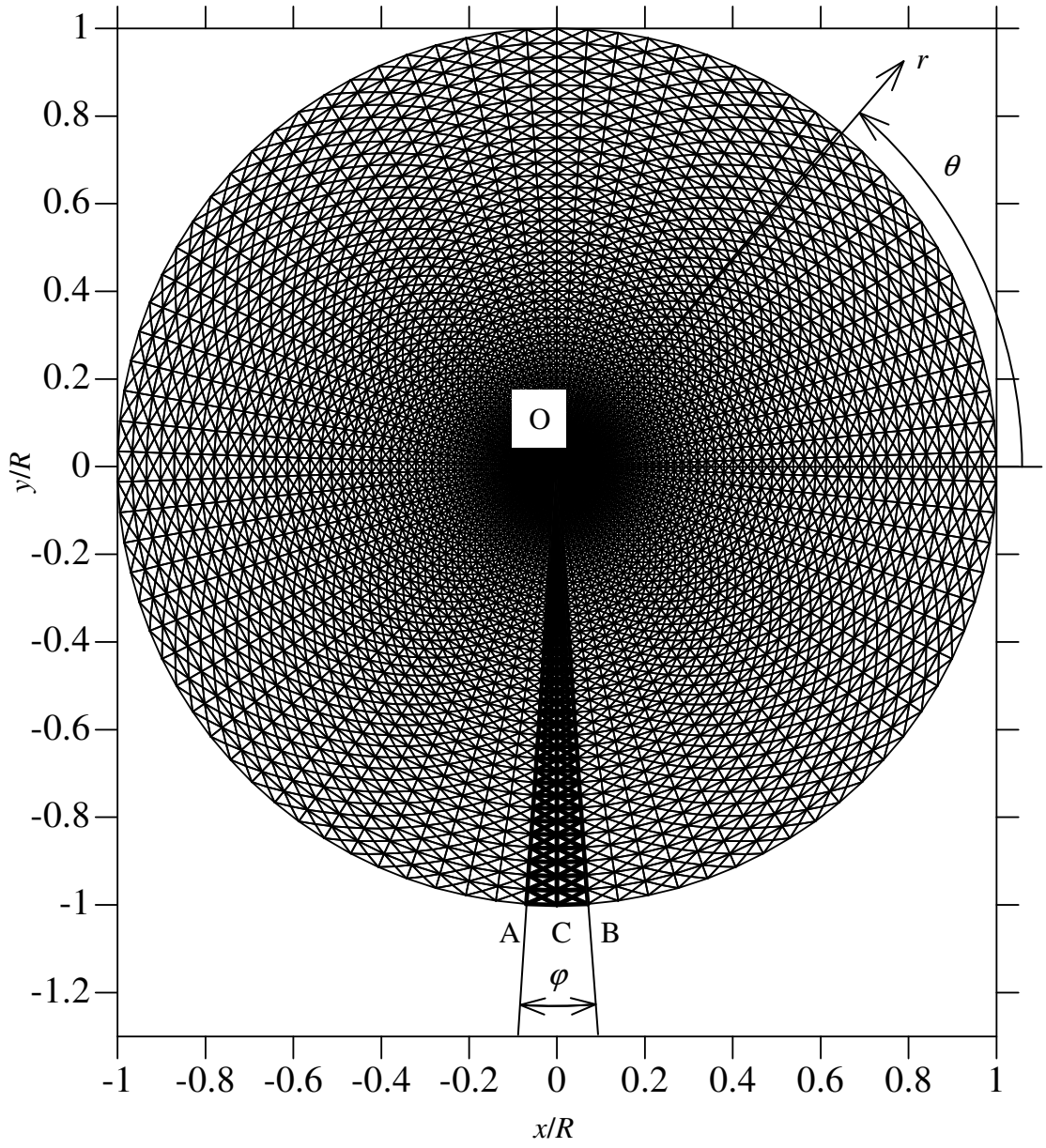


Fig.2.3 (a) Initial strain model of wedge disclination; the entire circular area. Plane strain analysis of a cylinder of radius R with a wedge AOB of angle φ at $\theta=3\pi/2$.

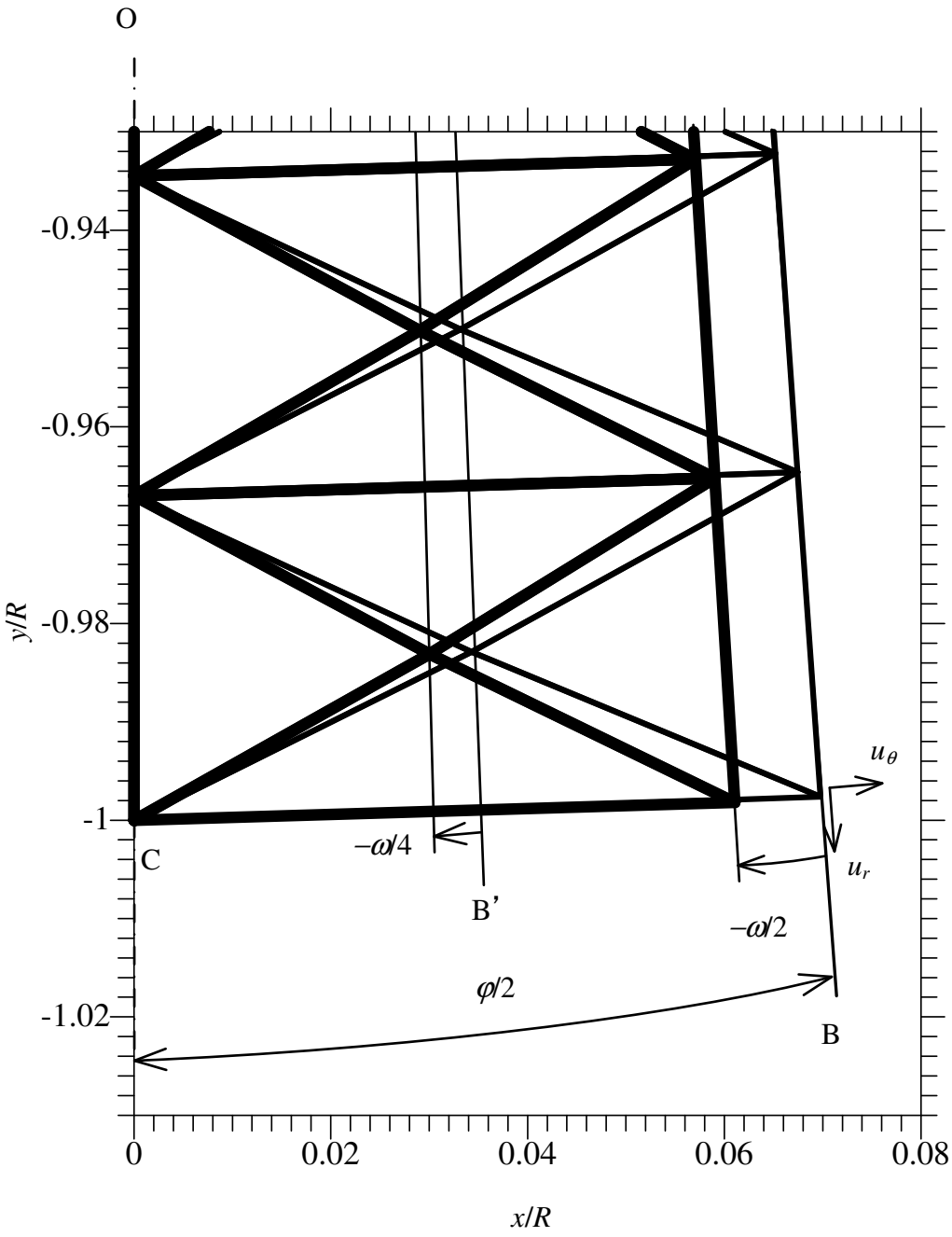


Fig.2.3 (b) Initial strain model of wedge disclination; the enlarged part of the area AOB where initial strain is given. Initial strain in order to rotate OB by $-\omega/2$, OB' by $-\omega/4$, and does not change OC.

2.4 計 算 結 果

回位角ωを 1.75×10^{-2} rad（$=\pi/180$rad=1°）として，有限要素法による平面ひずみ弾性解析を行った．ポアソン比νは 0.3 として解析した．強制変位法は図 2.2（a）の要素を用い，初期ひずみ法は図 2.3（a）を用いた．前述のように，強制変位法では，図 2.2（a）の様に回位角を頂角とするくさび形を取り除いて初期形状とした．初期ひずみ法では，図 2.3（a）のように要素 4 つ分のくさび形領域（$\varphi=2\pi/45$）に初期ひずみ$\varepsilon_\theta=-1/8$（式（2.8））, を与えた．ともに原点を完全拘束した．応力は節点を共有する要素解の平均値をその節点値とした．モデルの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部の要素の値から外挿して決定した．応力はすべて基準応力$\sigma_0=E/4\pi(1-\nu^2)$で規格化した．

図 2.4（a）に強制変位法による有限要素解の変形図を示す．強制変位を与えた切り口の右側の要素であり，細い線が変形前の要素，太い線が変形図である．正符号の回位であるので，半径方向垂直応力は圧縮で，これに対応して節点は半径方向では中心に向かって変位している．円柱の外表面では周方向垂直応力は引張りである．図 2.4（b）は初期ひずみ法による変形図である．図の $x=0$ 面上の節点はy方向に変位するだけであり, $x>0$ の節点はx方向に大きく変位する．回位による変形は中心対称であるので，図 2.4（a），（b）の変形後の要素の形状は周方向に沿って一様である．これは，以下に示す半径方向垂直応力と円周方向垂直応力の分布図から明らかである．

半径方向垂直応力と円周方向垂直応力について，節点解を図 2.5 に示す．両者の応力は式（2.1）よりともに原点対称であるから$\theta=0$ 面における値を示している．規格化された応力は，式（2.1）より正の回位であれば中心で無限大の圧縮，半径方向応力は円柱表面で 0，周方向応力は回位角に等しい引張りとなる．解析解は実線で示したが，この表示では偏差はほとんど判別できない．

半径方向垂直応力を図 2.6 に，円周方向垂直応力を図 2.7 にそれぞれ等高線分布で示す．強制変位法によるものを（a）に，初期ひずみ法によるものを（b）に，解析解によるものを（c）に示す．いずれの応力成分においても同心円状の分布であることが確認できる．強制変位法の表面に現れた断続的な分布は，等

高線の作図の性質によるものである．値は表面全体でほぼ 0 であるが，正負の入れ替わりが起きているため断続的な分布となった．数値解と解析解との偏差は，この図でも判別できない．

数値解と解析解の偏差を図 2.8 に示す．偏差は，強制変位法，および初期ひずみ法による数値解から解析解を引き，基準応力σ_0 で割った値とした．強制変位法については（a）に，初期ひずみ法については（b）に示す．偏差の最大値は図 2.9 に示すように，強制変位法および初期ひずみ法ともに，回位線である原点近傍に現れた． $\theta=0$ 面での結果のみ示す．図に示すように，偏差は原点に近づくほど大きくなり，原点に最も近い $r/R=4.17\times10^{-4}$ の節点において，強制変位法では-1.35×10^{-3} であった．初期ひずみ法の偏差も同様の大きさである．

図 2.9 に原点からの距離 $r/R=4.17\times10^{-4}$ での規格化された半径方向垂直応力と周方向垂直応力の周方向分布を示す．最大偏差が生じる要素は，モデルの中心周りに 90 個ある．いずれの値も中心対称で θ にかかわらず一定である．この対称性は解析解では自明ではあるが，有限要素モデルにおいて強制変位や初期ひずみを与えている所（この図では$-\pi/2$）でも計算値の値はほとんど乱れていないことが確認出来る．図より，半径方向と周方向応力はともに有限要素解が解析解よりも小さい値を示している．

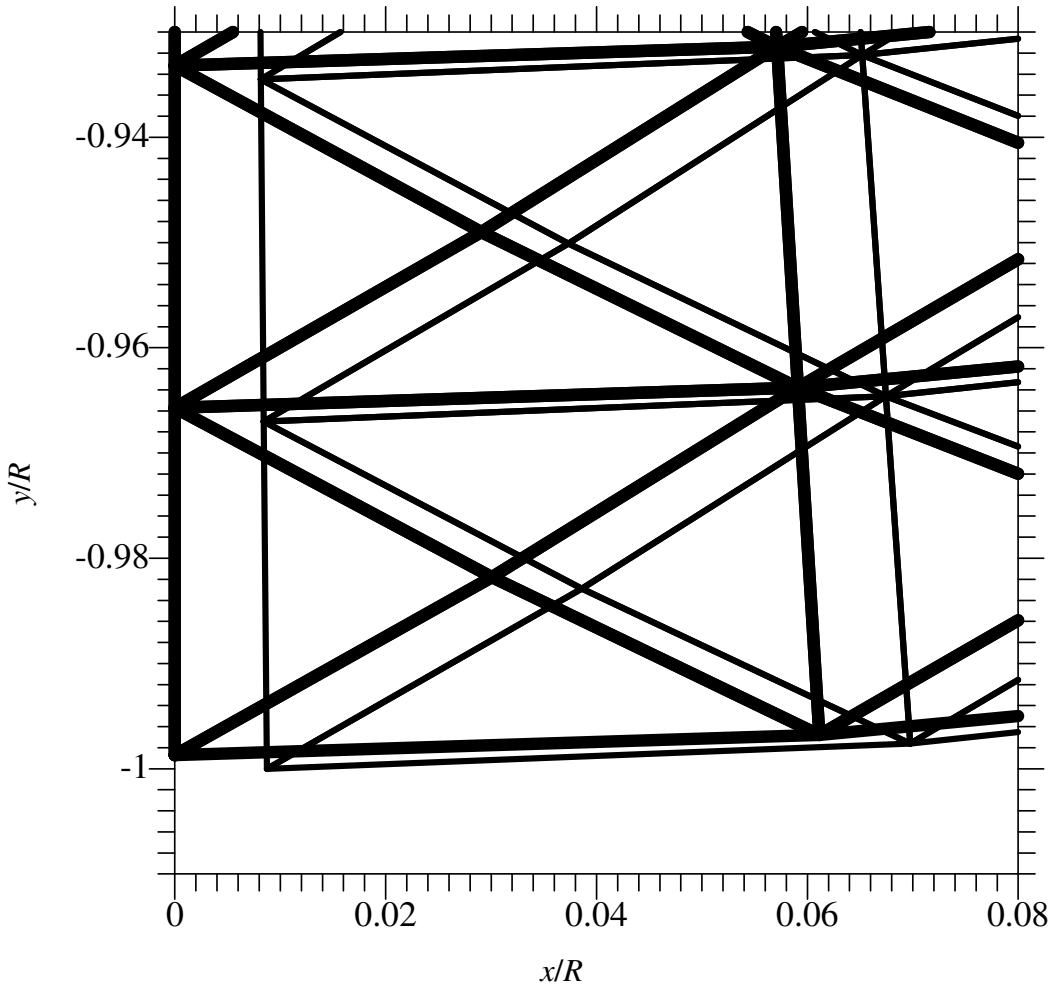


Fig.2.4 (a) Enforced displacement. Deformation of nodal points after finite element calculation; the enlarged part of the open slit of Fig.2.2(a). The elements enclosed by thin line is deformed to the elements enclosed by heavy line.

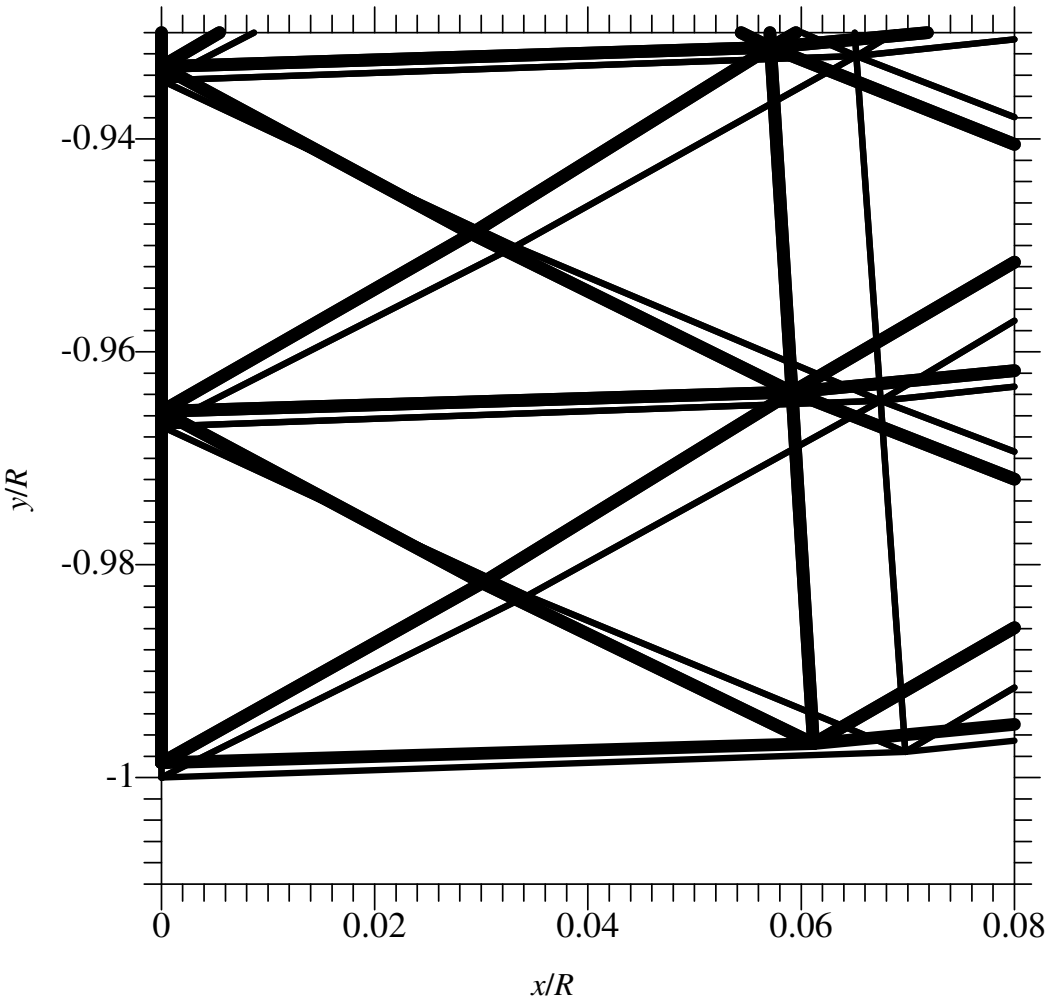


Fig.2.4 (b) Initial strain. Deformation of nodal points after finite element calculation; the enlarged part of Fig.2.3(a). The elements enclosed by thin line is deformed to the elements enclosed by heavy line.

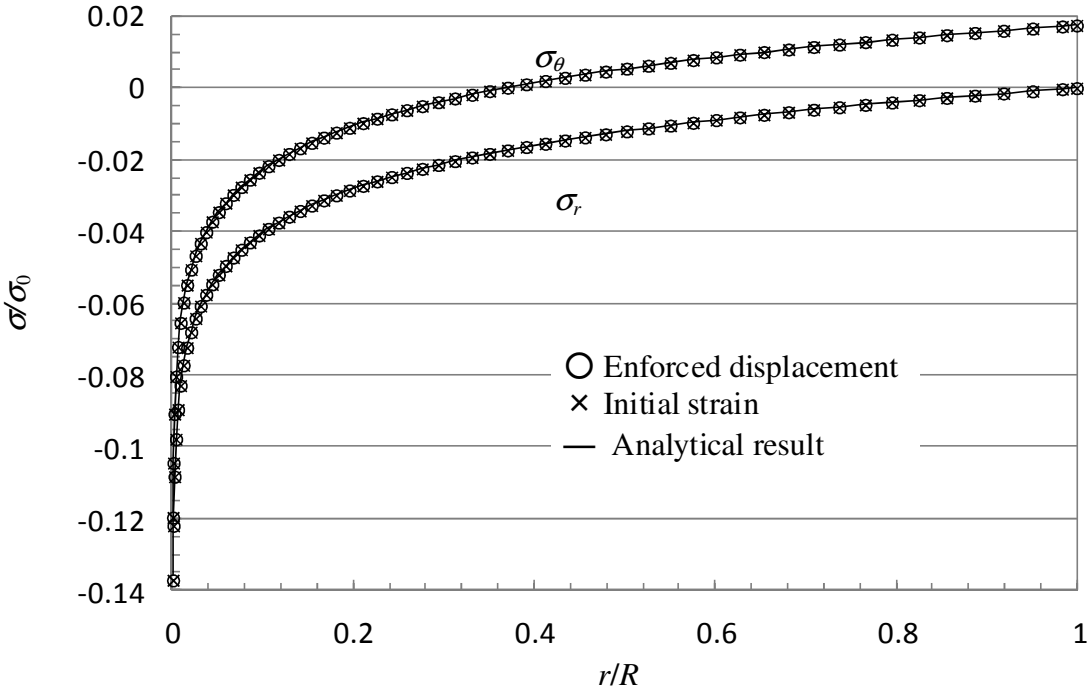


Fig.2.5 Radial distribution of the radial stress σ_r and the circumference stress σ_θ, both of which are normalized by the constant σ_0. Numerical results are plotted by symbols and Eq.(2.1) are solid lines.

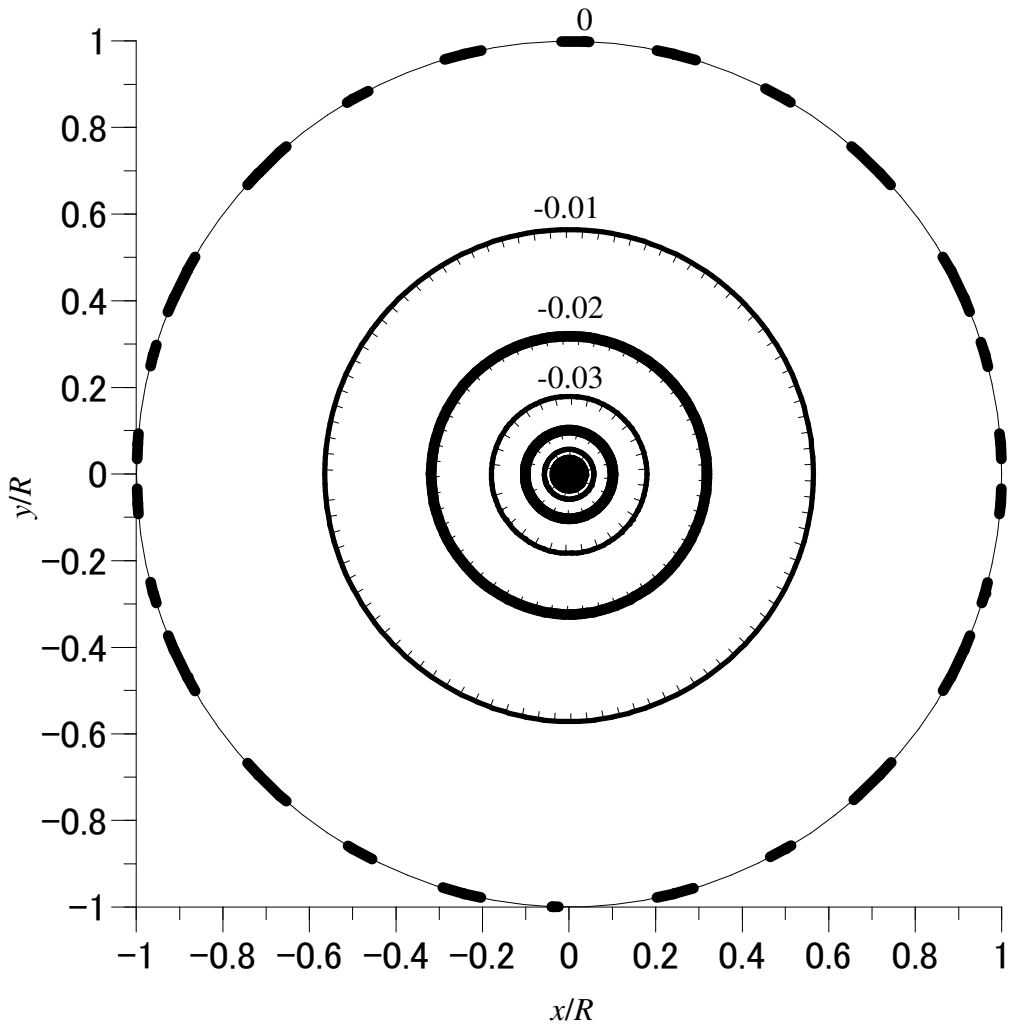


Fig.2.6 (a) Enforced displacement. Axisymmetrical distribution of the radial stresses caused by a wedge disclination.

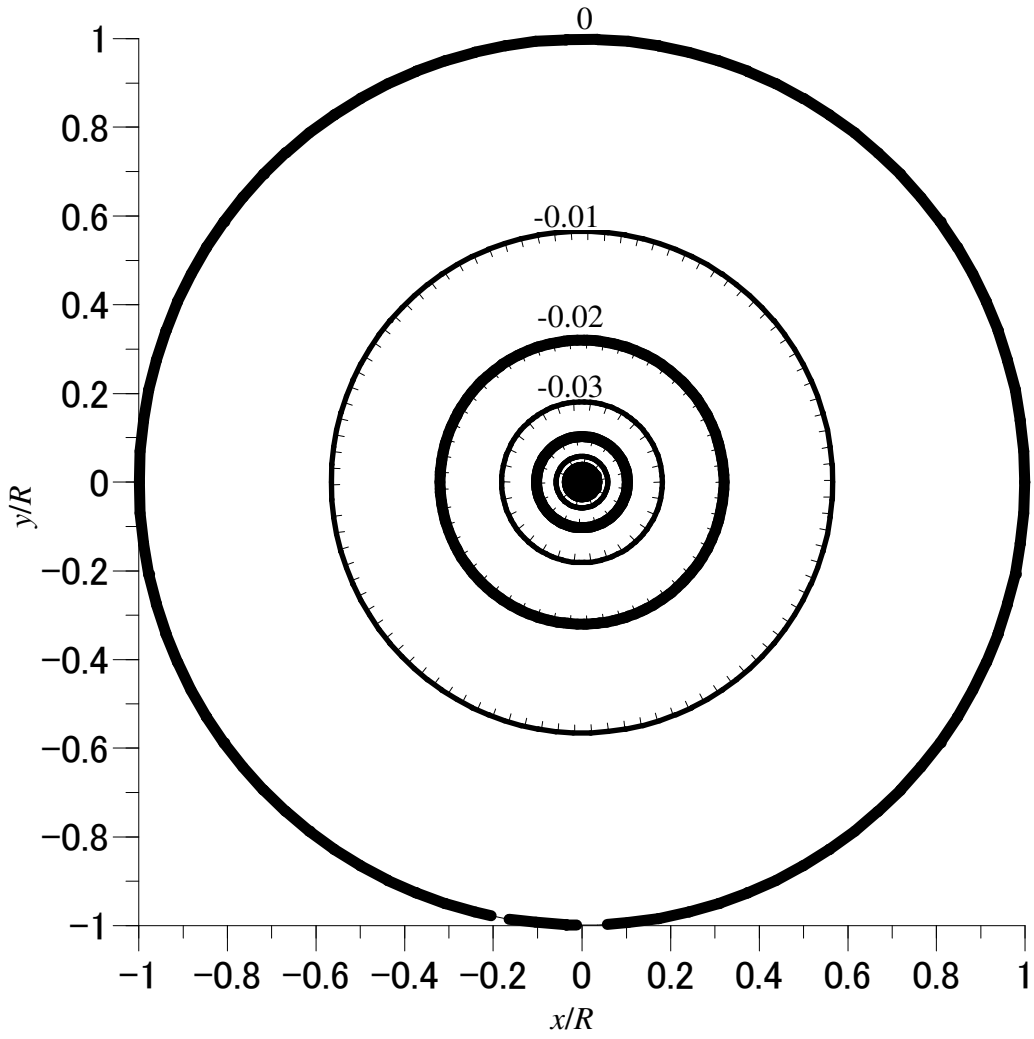


Fig.2.6 (b) Initial strain. Axisymmetrical distribution of the radial stresses caused by a wedge disclination.

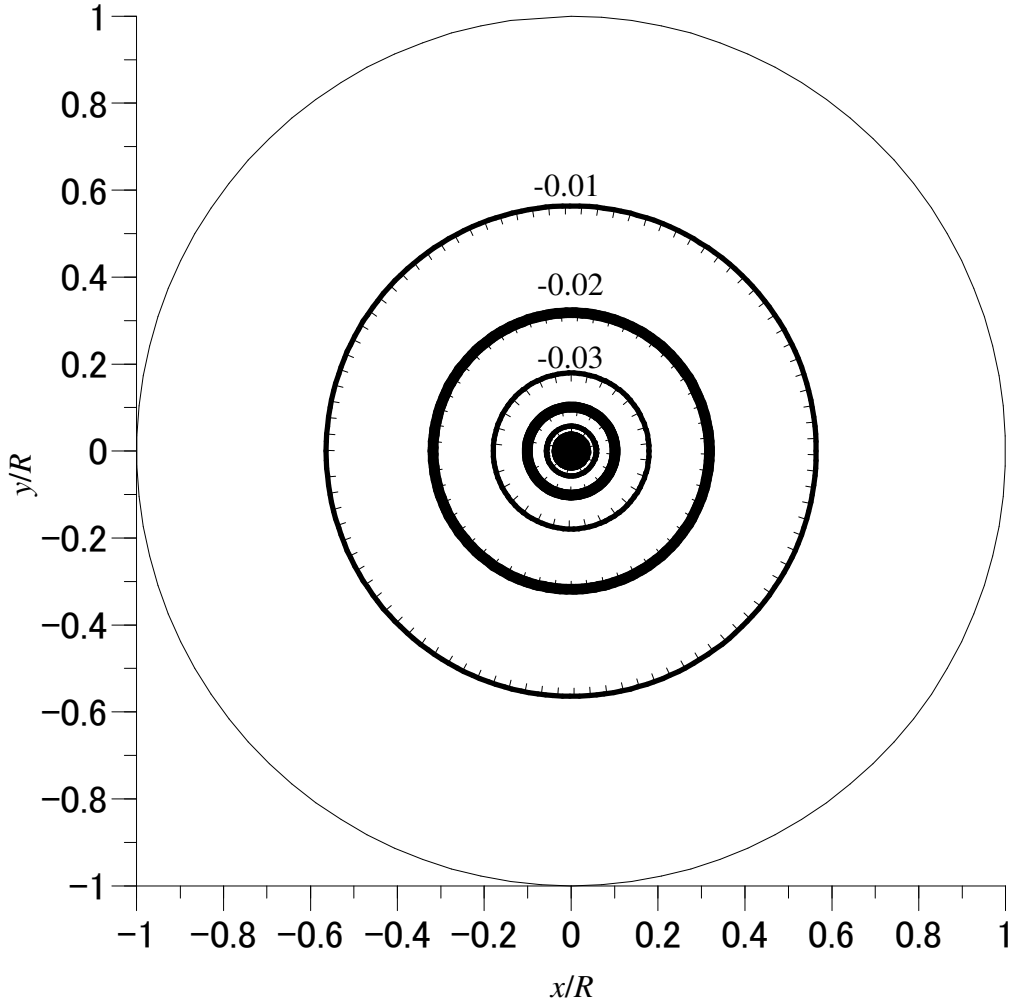


Fig.2.6 (c) Analytical result of Eq.(2.1). Axisymmetrical distribution of the radial stresses caused by a wedge disclination.

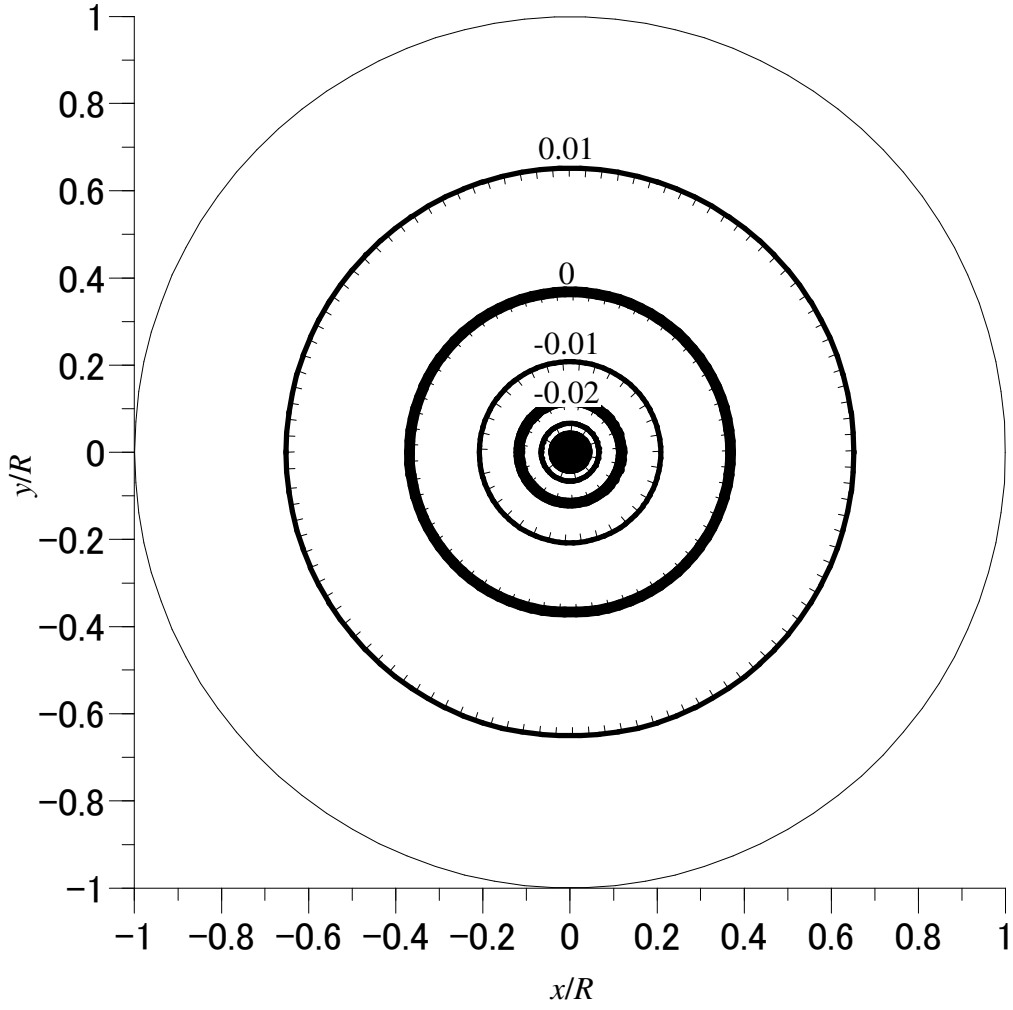


Fig.2.7 (a) Enforced displacement. Axisymmetrical distribution of the circumference stresses caused by a wedge disclination.

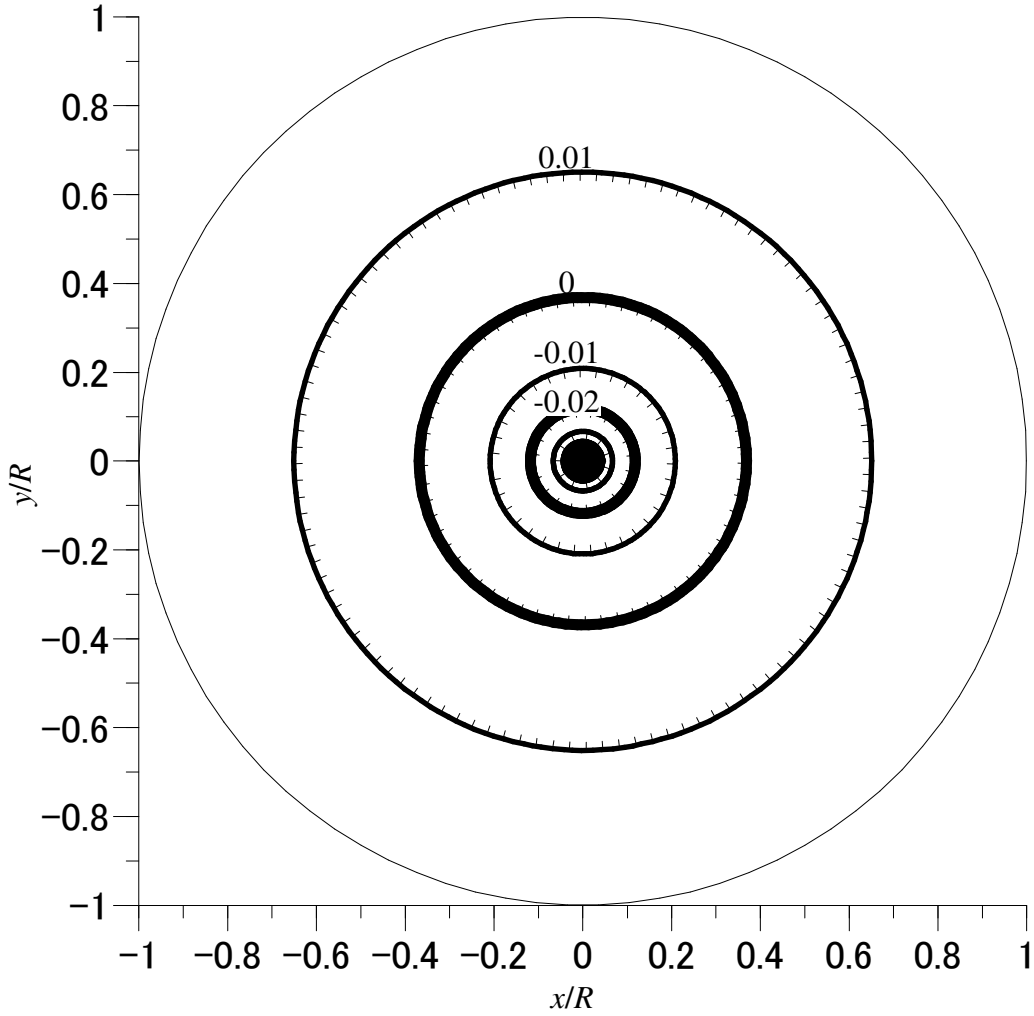


Fig.2.7 (b) Initial strain. Axisymmetrical distribution of the circumference stresses caused by a wedge disclination.

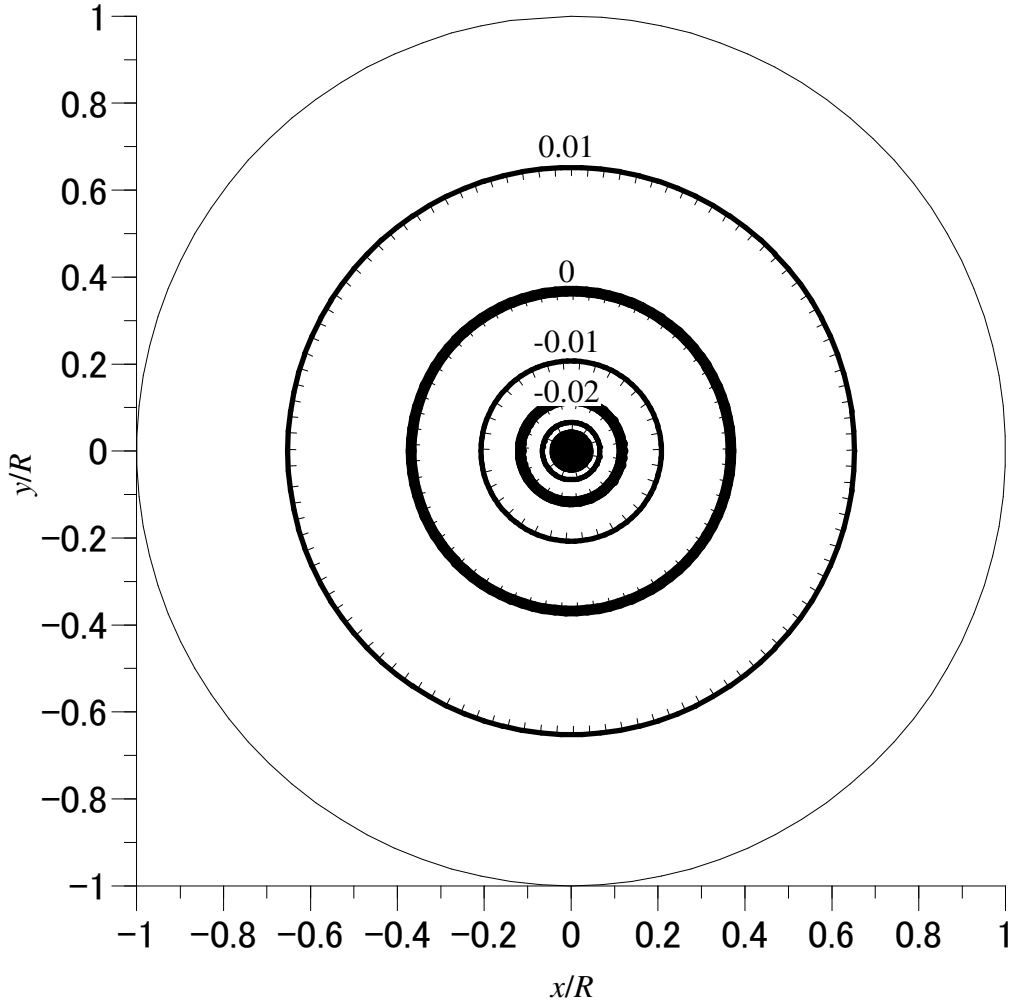
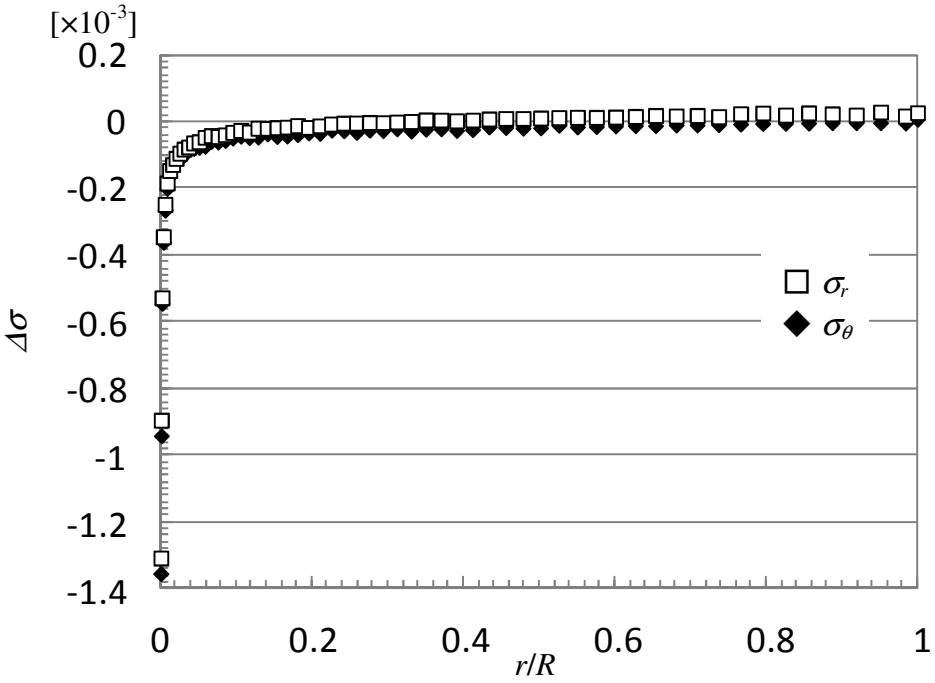
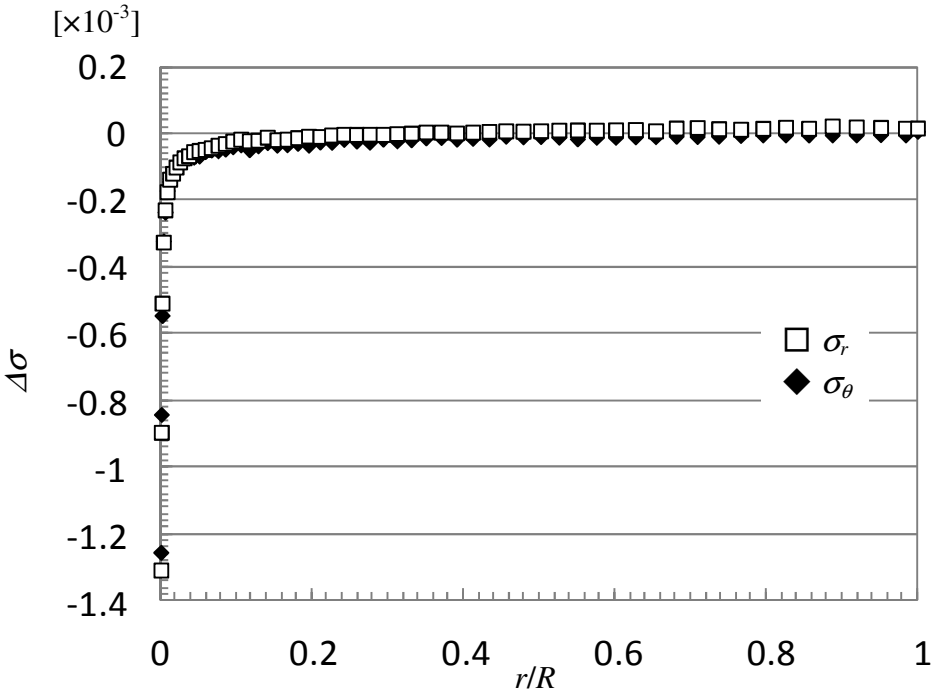


Fig.2.7 (c) Analytical result of Eq.(2.1). Axisymmetrical distribution of the circumference stresses caused by a wedge disclination.



(a) Enforced displacement.



(b) Initial strain.

Fig.2.8 Deviation of calculated stress from the analytical solution $\Delta\sigma = (\sigma_n - \sigma_a)/\sigma_0$ isplotted as the function of radius, where σ_n is the stress in calculation and σ_a is the stress of Eq.(2.1).

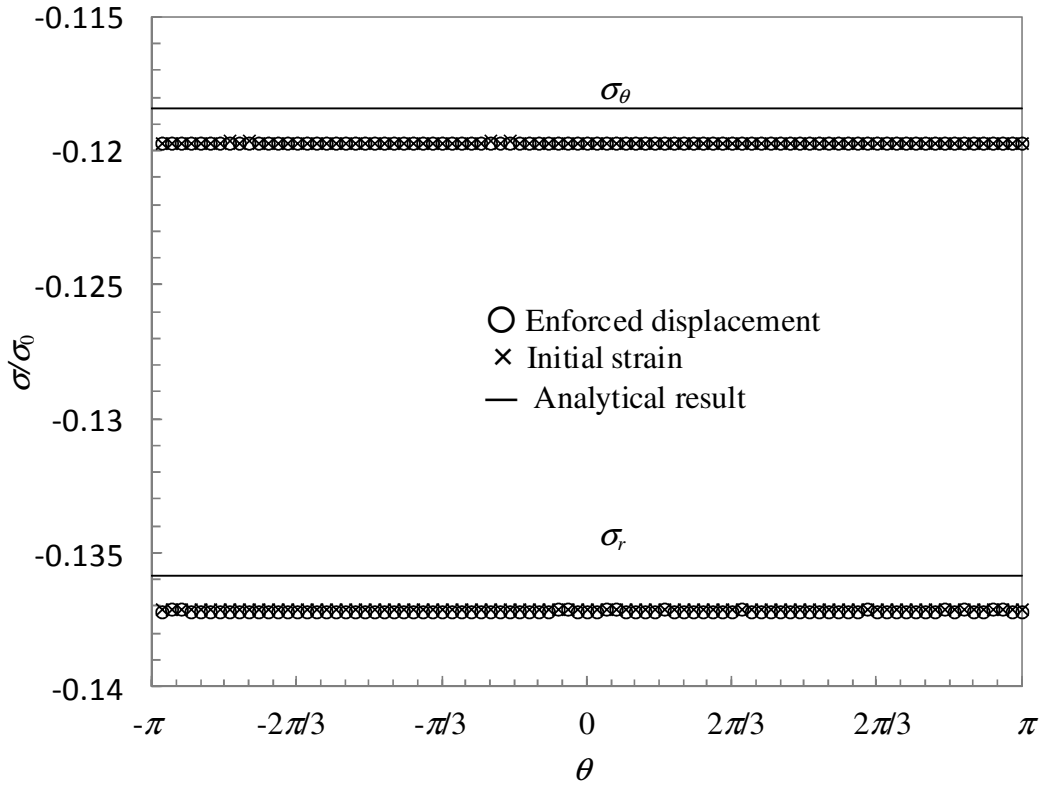


Fig.2.9 Calculated stress and the analytical solution of Eq.(2.1) in the close vicinity of the origin, $r/R = 4.17\times10^{-4}$, is plotted as the function of angle θ.

2.5 考　　察

円柱に孤立するくさび型回位については, 強制変位法および初期ひずみ法の有限要素モデルは，特異応力となる回位芯近傍を除けば，ともに良い精度の解が得られることが確認できた．要するに，強制変位法で切り口の自由境界上に与える変位境界条件に等価な初期ひずみを領域に分布させる手法が初期ひずみ法である．そのため，解析精度の優劣がないのは明らかである．しかしながら，数値モデルを作成する手続きには違いがあって，強制変位法のモデルでは，物質の重なりや，すき間がある切れ目があって，解析する物体と異なる形状であること，かつ境界条件を取り入れるために剛性マトリクスの組み替えをする必要がある．一方，初期ひずみ法の場合，解析対象と同じ形状のモデルを初期形状とし，かつ剛性マトリクスの組み替えは無い．初期ひずみのある構造の解法は，熱ひずみ問題と等価であるから，汎用の有限要素プログラムを利用できる点がメリットとなるであろう．

転位の応力場の解析解は無限体において得られているから, 有限体における有限要素解とは単純比較が出来ない．これと異なり，回位の解析解（式（2.1））は円柱における厳密解であり，有限要素モデルとの誤差評価が可能である．回位の持つ弾性応力場の場合，対数関数の原点における特異性の取り扱いが解析精度における課題となる．本論文では要素分割は円筒座標において半径方向には中心に近い程小さい要素を用いているので，離散化誤差は外周よりも中心に近付く程小さくなるはずである．

一次要素による変位法では，変位の数値解の誤差は要素サイズ h について h^2 のオーダの収束を示す[18]．同様な議論で，応力の数値解の節点値について真値からの偏差を見積もる．応力は変位の一次導関数であるので，偏差=h×応力こう配の誤差，と近似できる．応力こう配の誤差は式（2.1）より

$$h\frac{\partial^2\sigma_r}{\partial r^2}=-h\frac{\sigma_0\omega}{r^2}, \tag{2.9}$$

程度であり，周方向応力についても同じ式になる．従って，h/R=1.4×10^{-4} の要素サイズで，r/R=4.2×10^{-4} の位置では，規格化された応力の数値解は

$$-\omega\left(\frac{h}{r}\right)^2 \approx -1.75\times10^{-2}\times\left(\frac{1.4\times10^{-4}}{4.2\times10^{-4}}\right)^2 = -1.9\times10^{-3}\ , \qquad (2.10)$$

程度の偏差と見積もることが出来るが，実際，数値解の偏差の図 2.8 および図 2.9 は，この程度の値となっている．

ところが以下の理由により，回位の回位芯近傍での解析精度は，転位の転位芯近傍の応力場に比べればあまり問題とならない．先ず，式（2.1）の対数関数 ln$r$ で表される応力場は，r^{-1} の関数である転位の応力場の場合に比べて小さく，

$$\lim_{r\to0} \ln r / r^{-1} = 0\,, \qquad (2.11)$$

である．また，式（2.1）を用いて平面ひずみ状態の弾性エネルギーを計算すると，回位線の単位長さ辺りで

$$\int_0^{2\pi}\int_0^R \frac{1}{2E}\left[(1-\nu^2)(\sigma_r^2+\sigma_\theta^2)-2\nu(1+\nu)\sigma_r\sigma_\theta\right]rdrd\theta = \frac{E\omega^2R^2}{16\pi(1-\nu^2)}, \qquad (2.12)$$

となり，村と Huang の計算結果[17]と一致する．式（2.12）から弾性ひずみエネルギーは横断面の単位面積当たり一定の値となる．すなわち，円柱の中心の回位線を取り囲むごく小さい半径の円柱を切り取って円筒状の領域としても，全体の弾性エネルギーはほとんど変わらない．したがって，回位では中心近傍の計算精度はあまり必要とならない．これに比較して転位では，転位線近傍のいわゆる転位芯のひずみエネルギーは弾性解では無限大であり，非弾性で計算しても極めて大きいことが知られている[1]．

金属材料では，$\sigma_0 \approx E/11$ であるので，およそ $\sigma/\sigma_0 \approx 10^{-2}$ 程度が降伏条件となる．図 2.5 以降の結果は回位角 $\omega=\pi/180$ の場合であるが，モデル円のほぼ全面で降伏が起こる．このモデルの弾性解析における適用範囲は，回位角 $\omega=\pi/180$ よりもかなり小さい回位角であると考えられる．

2.6 結　　言

くさび型回位の弾性解析を有限要素法で行った. 中心軸にくさび型回位を持つ円柱では，中心近傍で特異応力場となり，有限要素法ではそこでの離散化誤差が計算精度を決めた．しかしながら回位の中心部での弾性エネルギーは外周に比べて小さく，この特異応力場の計算精度はモデル全体の弾性ひずみエネルギーにはほとんど影響がないことを指摘した．回位を結晶中に作る手順をそのまま再現した方法（強制変位法）と，回位によるひずみを初期ひずみとして結晶内に分布させる方法（初期ひずみ法）を検討した．2 つの解法の精度は離散化誤差で決まり，要素寸法が同じであれば精度は同じであった．2 つの方法を比較すると，初期ひずみ法では回位が存在する物体の形状をそのまま要素分割するので，有限要素モデルの作成が容易という利点がある．

第 2 章の参考文献

(1) Nabbaro, F.R.N., Theory of Crystal Dislocations, Oxford: Clarendon Press (1967), pp.120-130.

(2) Love, A.E.H., A Treatise on the Mathematical Theory of Elasticity, Cambridge University Press (1927), pp.221-228.

(3) 森口繁一, 二次元弾性論 (1957), pp.45-46, 岩波書店.

(4) 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.

(5) 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.

(6) Li, J.C.M., Disclination model of high angle grain boundaries, Surface Science, Vol.31 (1972), pp.12-26.

(7) Bollmann, W., Triple lines in polycrystalline aggregates as disclinations, Philosophical Magazine A, Vol.49 (1984), pp.73-79.

(8) 岸田路也, 佐々木一彰, 岩崎徹也, 結晶三重境界の応力解析 (転位の有限要素モデルによる検討), 日本機械学会論文集 A 編, Vol.64, No.620 (1998), pp.969-974.

(9) 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.

(10) Okada T., Onaka, S., Hashimoto, S. and Miura, S., Suppression of grain-boundary sliding by a boundary node in Cu-9at.%Al tricrystals, Scripta Metallurgica, Vol.23 (1989), pp.49-54.

(11) 大橋鉄也, 半澤宏, 岸田路也, 双結晶に生ずる弾性不適合応力, 日本金属学会誌, Vol.44, No.8 (1980), pp.876-883.

(12) 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.

(13) 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.

(14) 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.

(15) 鷲津久一郎, 宮本博, 山田嘉昭, 山本善之, 川井忠彦, 有限要素法ハンドブック, I 基礎編 (1981), pp.421-425, 培風館.

(16) Timoshenko, S.P. and Goodier, J.N., Theory of Elasticity, Third Edition (1951), pp.71-80, McGraw-Hill.

(17) 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.

(18) Zienkiewicz, O.C., Taylor, R.L. and Zhu, J.Z., The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals, Sixth Edition (2005), pp.38-39, Elsevier.

第 3 章　結晶粒界三重線における弾性不適合の回位モデル

3.1　緒　　言

回位は弾性論では軸対称変形の例として記述されている[(1)-(3)]．転位と比較して回位の存在する例は限定されていて，結晶粒界[(4)(5)]，双晶界面[(6)]，相変態[(7)]および粒界三重線の構造[(8)-(10)]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．しかし，最近では，透過電子顕微鏡で観察された転位セル構造[(11)]にも回位が見出され，その範囲は拡大しつつある．

本章では，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，GN 転位）[(12)]がある．この GN 転位は粒界付近に堆積し転位壁を形成する．この転位壁は回位と等価な回転の食い違いとみなすことができる．そのため，粒界では変位の食い違いが問題になる一方で，粒界三重線では回転の食い違いが問題となる．

結晶格子の弾性変形は異方性を有し, 塑性変形においてもすべり系による結晶学的異方性が現れる．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[(13)]や Ashby の GN 転位モデル[(12)]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[(14)-(21)]．

回位の数理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．

本章では，粒界三重線における応力集中の問題に対して，均質化による近似を試みることで, 回位を適用する．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つ，均質な物性の等方弾性体に置き換える．これは，弾性不均質介在物の等価介在物理論[22]や異相界面上のき裂への線形破壊力学の適用[23]などと同様な一種の均質化の操作である．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．

本章で考える変形は弾性限度内であり，解析は弾性変形にとどめるが，降伏条件や破壊につながる欠陥からのき裂形成の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．

3.2　有限要素弾性解析

3.2.1　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，本章では，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．

均質な円板が一方向に均一に変形する外力について考える．図 3.1 に示すような半径 R の円板について考える．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，均質な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 に一様な内部応力σ_0 が作用するとすれば，y 方向の力のつり合いより，

$$2\sigma_0 R\cos(\theta+d\theta)-2\sigma_0 R\cos\theta+2p_y Rd\theta=0. \tag{3.1}$$

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 3.2（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 $\varphi_{(1)}$=$\varphi_{(2)}$=$\varphi_{(3)}$=2π/3 とする．さらに粒界 b 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．σ_0=100 MPa となるよう y 軸方向に引張り荷重を与える．本章では応力をσ_0 で規格化した値で表記する．

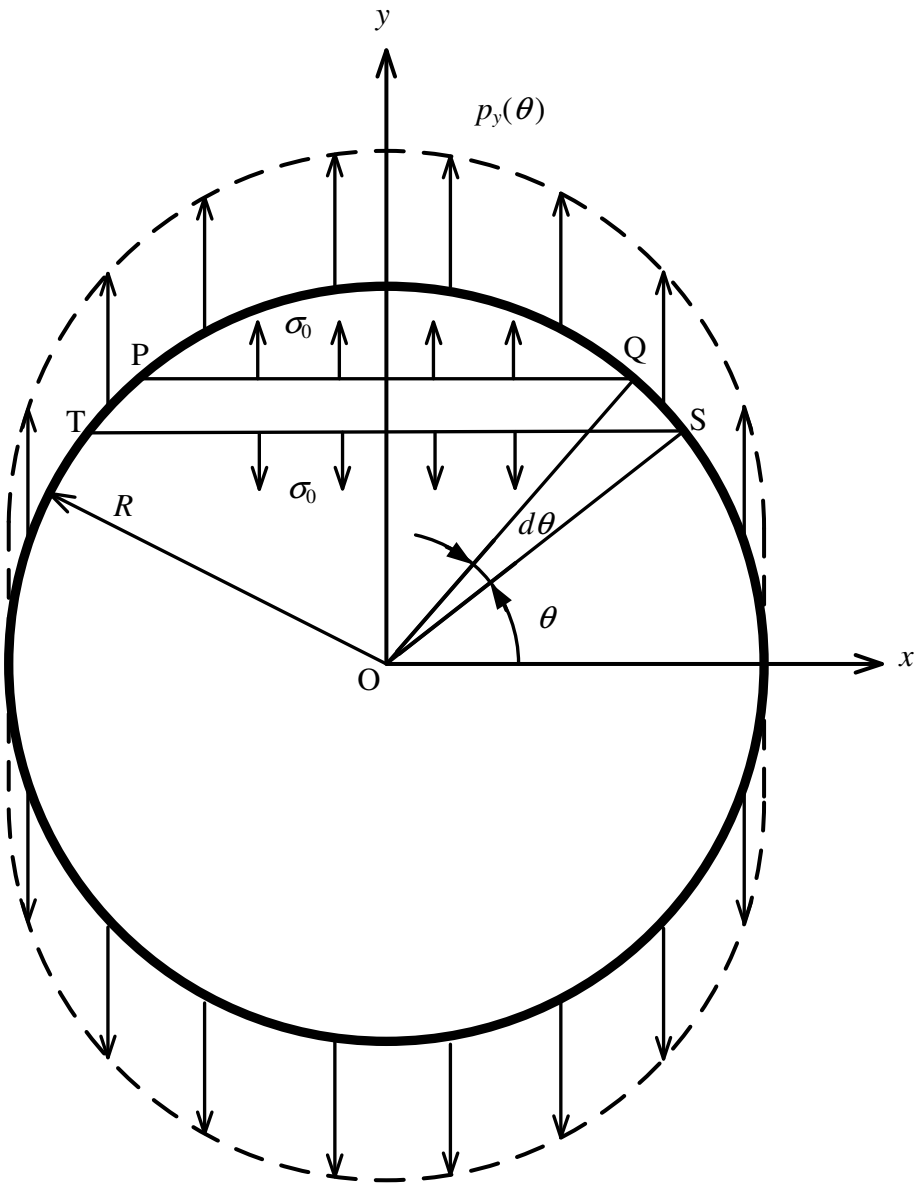


Fig.3.1 An external load $p_y(\theta)$ was applied on the surface of the circular region of radius R. This load is subjected to form uniform internal stress σ_0.

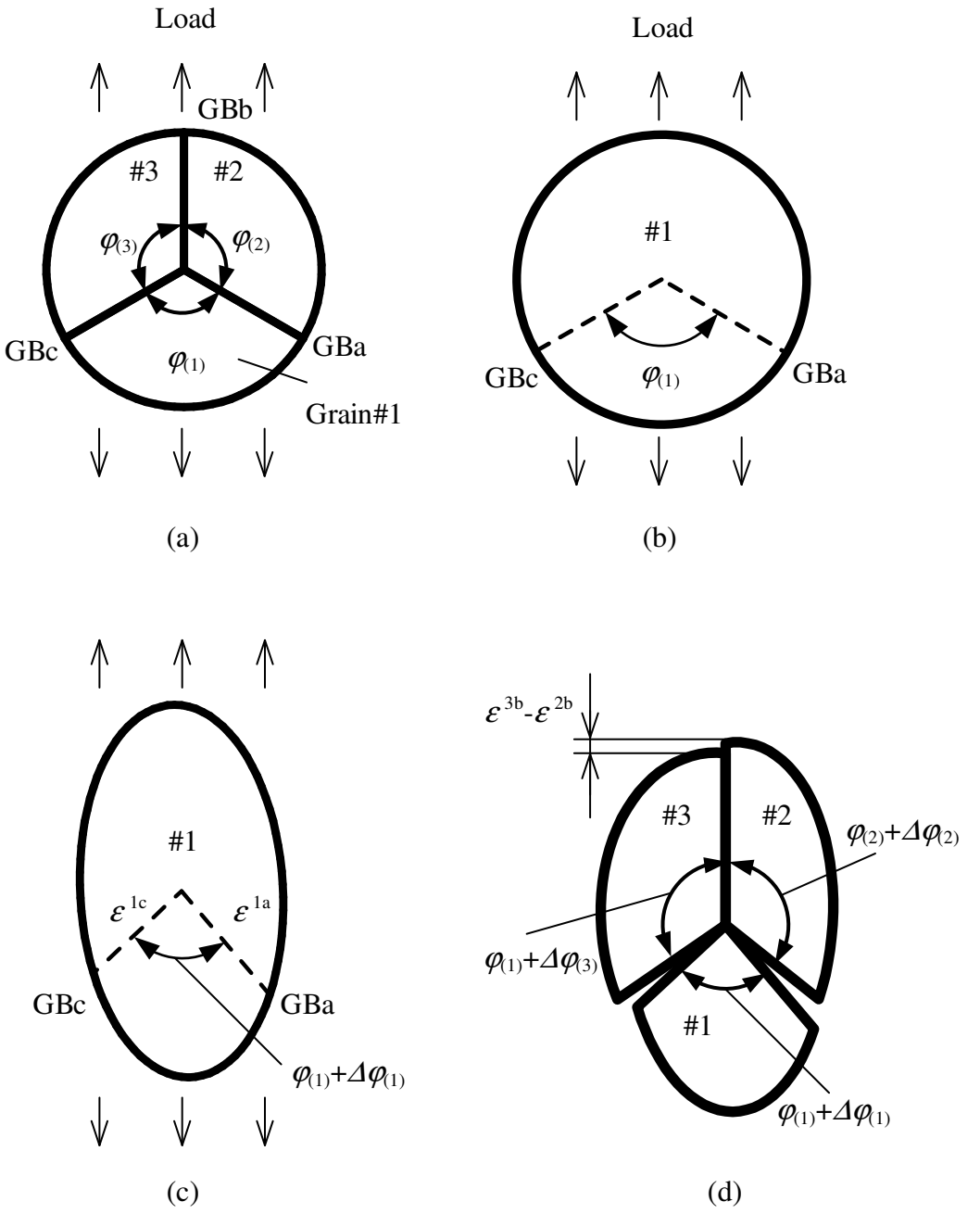


Fig.3.2 (a) A tricrystal consists of grains #1,2,3 and the grain boundaries GB a, b, c, of which the central angles are $\varphi_{(1)}$, $\varphi_{(2)}$, $\varphi_{(3)}$. (b) The imaginary single crystal is composed of the grain #1. (c) When this single crystal is deformed uniformly, the angle $\varphi_{(1)}$ changes by $\Delta\varphi_{(1)}$ and the grain boundaries GB a and c changes their length by ε^{1a} and ε^{1c}, respectively. (d) If the imaginary deformation of the three grains is put together, voids or overlaps will appear.

3.2.2 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 3.3). 先ず, 四角形で分割し, 周方向は等間隔にπ/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. 外周の四角形の縦横比は 1 : 2 以下に留めている. そして, この四角形を対角線で 4 つの三角形に分割し, 三角形一次要素とした. 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. 拘束は原点を変位のみを完全固定した. 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.

3.2.3 材料特性

解析には立方晶系の弾性定数を用いる. 独立な 3 つの弾性コンプライアンス C_{11},C_{12},C_{44} で記述される. $\{\boldsymbol{\sigma}\}$とひずみ$\{\boldsymbol{\varepsilon}\}$の関係を弾性マトリクス$[\boldsymbol{D}]$を用いて表すと, 次式のようになる（Appendix C 参照).

$$\{\boldsymbol{\sigma}\}=[\boldsymbol{D}]\{\boldsymbol{\varepsilon}\}$$

$$\begin{Bmatrix}\sigma_x\\ \sigma_y\\ \sigma_z\\ \tau_{yz}\\ \tau_{zx}\\ \tau_{xy}\end{Bmatrix}=\begin{bmatrix}C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0\\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0\\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44}\end{bmatrix}\begin{Bmatrix}\varepsilon_x\\ \varepsilon_y\\ \varepsilon_z\\ \gamma_{yz}\\ \gamma_{zx}\\ \gamma_{xy}\end{Bmatrix}. \tag{3.2}$$

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 GPa, C_{12}=121.4 GPa, C_{44}=75.4 GPa を用いた[24]. 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=136GPa, ポアソン比ν= 0.33 とした.

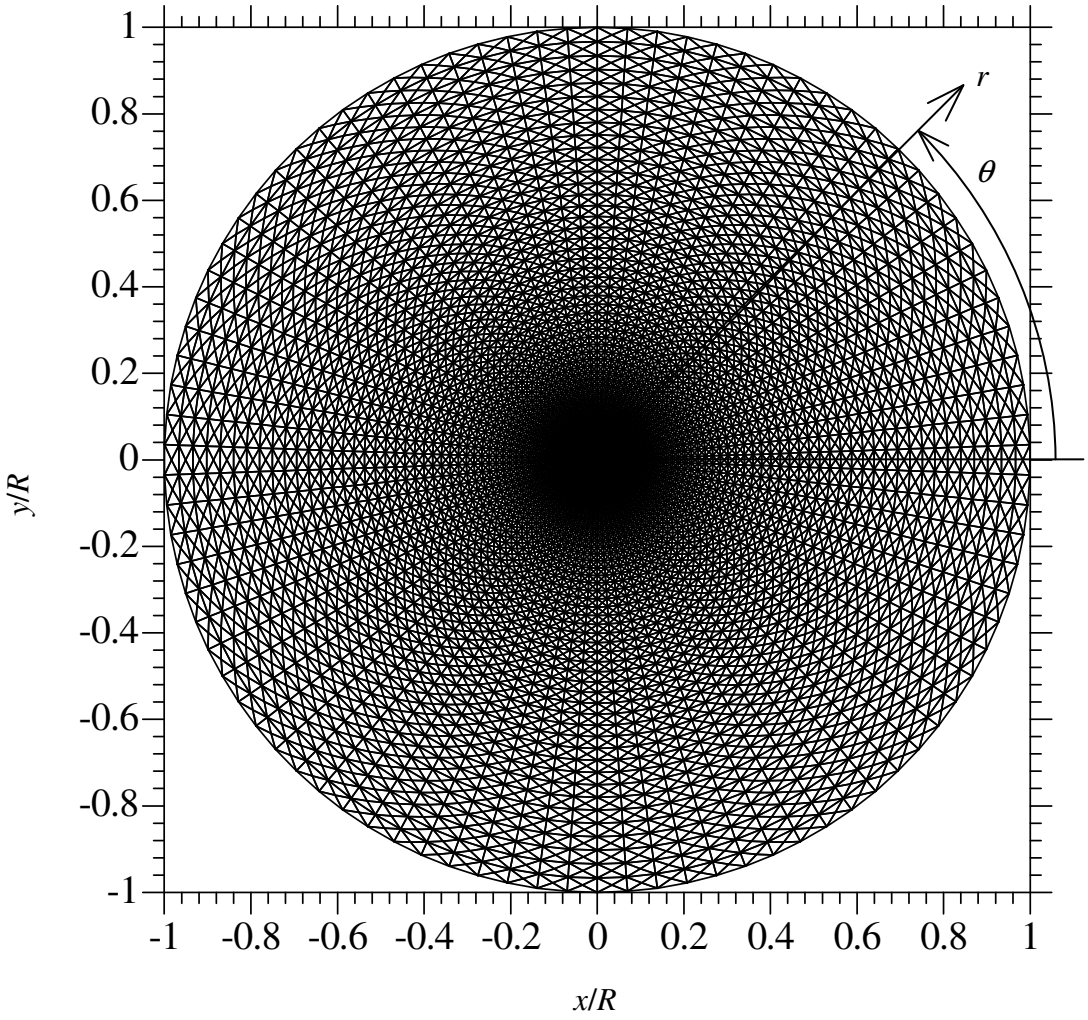


Fig.3.3 Triangular mesh was used for the finite element model of a cylinder of radius *R* in the plane strain analysis.

3.3　粒界三重線における変形不適合の回位・転位モデル

3.3.1　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有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[25]．

$$\begin{cases} \sigma_x = \dfrac{E\omega}{4\pi(1-\nu^2)}\left[\dfrac{1}{2}\ln\dfrac{x^2+y^2}{R^2}+\dfrac{y^2}{x^2+y^2}\right], \\ \sigma_y = \dfrac{E\omega}{4\pi(1-\nu^2)}\left[\dfrac{1}{2}\ln\dfrac{x^2+y^2}{R^2}+\dfrac{x^2}{x^2+y^2}\right], \\ \tau_{xy} = -\dfrac{E\omega}{4\pi(1-\nu^2)}\dfrac{xy}{x^2+y^2}. \end{cases} \tag{3.3}$$

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．

3.3.2　均質化モデル

3.3.2.1　不適合ひずみの回位・転位成分

三重結晶に生じる不均一応力を近似的に定量化する．不均一応力を，均質な物性の等方弾性体における，3 枚の界面上の面欠陥と 1 本の三重線上の線欠陥によって生じる応力場に置き換える．平面ひずみ問題では，粒界面での面欠陥であるひずみの不適合は転位に置き換え，三重線での線欠陥である回転不適合は回位に置き換える．この大まかな近似により，弾性的に不均質な実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 3.2（b）のように，破線で囲まれた結晶粒#1（頂角$\varphi_{(1)}$）について，先ず結晶全体を#1 と同じ物質とし，次に，図 3.2（c）の様に，結晶全体を外力によって一様変形させる．この時の破線で囲まれた領域の変形を，結晶粒#1 の拘束が無い変形とする．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 3.2（d）の様に，各結晶粒の拘束が無い変形は異なる．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．

3.3.2.2　回転の不適合

拘束が無い変形として求めた結晶粒の頂角の角度変化の総和$\Delta\varphi_{(1)}+\Delta\varphi_{(2)}+\Delta\varphi_{(3)}$を，くさび型回位の回位角$\omega$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の半分の差から得ることができる．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#2 の拘束が無い変形によるひずみを$\varepsilon_{x(2)}$，$\varepsilon_{y(2)}$，$\gamma_{xy(2)}$とすれば，結晶粒#2 の頂角の角度変化$\Delta\varphi_{(2)}$ は，

$$\begin{aligned}\Delta\varphi_{(2)} &= -\frac{1}{2}\gamma^{b} + \frac{1}{2}\gamma^{a} \\ &= -\frac{1}{2}\left\{-\left(\varepsilon_{x(2)} - \varepsilon_{y(2)}\right)\sin 2b + \gamma_{xy(2)}\cos 2b\right\} \\ &\quad + \frac{1}{2}\left\{-\left(\varepsilon_{x(2)} - \varepsilon_{y(2)}\right)\sin 2a + \gamma_{xy(2)}\cos 2a\right\} \\ &= \left\{\left(\varepsilon_{x(2)} - \varepsilon_{y(2)}\right)\cos(b+a) + \gamma_{xy(2)}\sin(b+a)\right\}\sin(b-a),\end{aligned} \tag{3.4}$$

となる．粒界の図心位置をϕ=(a+b)/2 とすれば，

$$\Delta\varphi_{(2)} = \left\{\left(\varepsilon_{x(2)} - \varepsilon_{y(2)}\right)\cos 2\phi + \gamma_{xy(2)}\sin 2\phi\right\}\sin\varphi_{(2)}, \tag{3.5}$$

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φ=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 3.2（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=11π/6 rad, b=π/2 rad, c=7π/6 rad より，

$$\begin{cases}\Delta\varphi_{(1)} = -\dfrac{\sqrt{3}}{2}\left(\varepsilon_{x(1)} - \varepsilon_{y(1)}\right) & \text{Grain\#1,} \\ \Delta\varphi_{(2)} = \dfrac{\sqrt{3}}{4}\left(\varepsilon_{x(2)} - \varepsilon_{y(2)}\right) + \dfrac{3}{4}\gamma_{xy(2)} & \text{Grain\#2,} \\ \Delta\varphi_{(3)} = \dfrac{\sqrt{3}}{4}\left(\varepsilon_{x(3)} - \varepsilon_{y(3)}\right) - \dfrac{3}{4}\gamma_{xy(3)} & \text{Grain\#3.}\end{cases} \tag{3.6}$$

回位角は，

$$\omega = \Delta\varphi_{(1)} + \Delta\varphi_{(2)} + \Delta\varphi_{(3)}, \tag{3.7}$$

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，$\varepsilon_i=S_{ij}\sigma_i$（$i$，$j$=1…6）とする時，$\sigma_2=\sigma_y=\sigma_0$，他は 0 であるから各ひずみ成分は次式のようになる．

$$\{\varepsilon_x \ \varepsilon_y \ \varepsilon_z \ \gamma_{yz} \ \gamma_{zx} \ \gamma_{xy}\}=\{s_{12} \ s_{22} \ s_{32} \ s_{42} \ s_{52} \ s_{62}\}\sigma_0 . \tag{3.8}$$

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用いる（Appendix C を参照）．

3.3.2.3 界面ひずみの不適合

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，粒界によって接合された各結晶粒の界面ひずみの差によって表す. 任意の位置の粒界（a 方向）について，結晶粒#1 と#2 の拘束が無い変形のひずみの差 $\Delta\varepsilon^{\mathrm{a}}=\varepsilon_{(2)}-\varepsilon_{(1)}$ の直交座標系 O-xy による成分を$\Delta\varepsilon_x^{\mathrm{a}}$，$\Delta\varepsilon_y^{\mathrm{a}}$，$\Delta\gamma_{xy}^{\mathrm{a}}$ とする．粒界 GBa における界面ひずみの差は，

$$\Delta\varepsilon^{\mathrm{a}}=\frac{\Delta\varepsilon_x^{\mathrm{a}}+\Delta\varepsilon_y^{\mathrm{a}}}{2}+\frac{\Delta\varepsilon_x^{\mathrm{a}}-\Delta\varepsilon_y^{\mathrm{a}}}{2}\cos 2a+\Delta\gamma_{xy}^{\mathrm{a}}\sin 2a , \tag{3.9}$$

となる．図 3.2（a）の三重結晶の粒界では，結晶粒#2 と#3 の拘束が無い変形の差を$\Delta\varepsilon^{\mathrm{b}}=\varepsilon_{(3)}-\varepsilon_{(2)}$，#3 と#1 の拘束が無い変形の差を$\Delta\varepsilon^{\mathrm{c}}=\varepsilon_{(1)}-\varepsilon_{(3)}$とすると，それぞれの界面ひずみの差$\Delta\varepsilon^{\mathrm{a}}$，$\Delta\varepsilon^{\mathrm{b}}$，$\Delta\varepsilon^{\mathrm{c}}$，は，次式のようになる．

$$\begin{cases} \Delta\varepsilon^{\mathrm{a}}=\dfrac{3}{4}\Delta\varepsilon_x^{\mathrm{a}}+\dfrac{1}{4}\Delta\varepsilon_y^{\mathrm{a}}-\dfrac{\sqrt{3}}{2}\Delta\gamma_{xy}^{\mathrm{a}} & \text{GB a}, \\ \Delta\varepsilon^{\mathrm{b}}=\Delta\varepsilon_y^{\mathrm{b}} & \text{GB b}, \\ \Delta\varepsilon^{\mathrm{c}}=\dfrac{3}{4}\Delta\varepsilon_x^{\mathrm{c}}+\dfrac{1}{4}\Delta\varepsilon_y^{\mathrm{c}}+\dfrac{\sqrt{3}}{2}\Delta\gamma_{xy}^{\mathrm{c}} & \text{GB c}. \end{cases} \tag{3.10}$$

3.3.3 有限要素モデル

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，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 3.4 (a)），実材料を T-model（図 3.4（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，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，第 2 章で提案した，くさび型回位の有限要素モデル[26]の手法に従って導入した．界面ひずみの不適合は，転位の有限要素モデル[27][28]の手法を応用した．すなわち，式（3.10）の不適合ひずみを，粒界面を挟む体積領域に初期ひずみとして分布させる（図 3.5）．初期ひずみを与える領域は，図 3.5（a）のような，要素分割で粒界 OB の両側に四角形要素 1 列ずつの 2 つの扇型領域 ABCO である．図 3.5（b）のような，粒界 OB を挟んで反平行の初期ひずみを与えた．変位の大きさは，粒界OBを y 軸にとり，式(3.10)の界面ひずみの差を$\Delta\varepsilon$とすると，一方の辺 AO で $y\Delta\varepsilon/2$，他方の辺 CO で$-y\Delta\varepsilon/2$である．初期ひずみは粒界面方向のせん断ひずみのみで表すことができる．扇型領域の頂角∠AOC をαとすると，せん断ひずみは$-\Delta\varepsilon/\alpha$である．

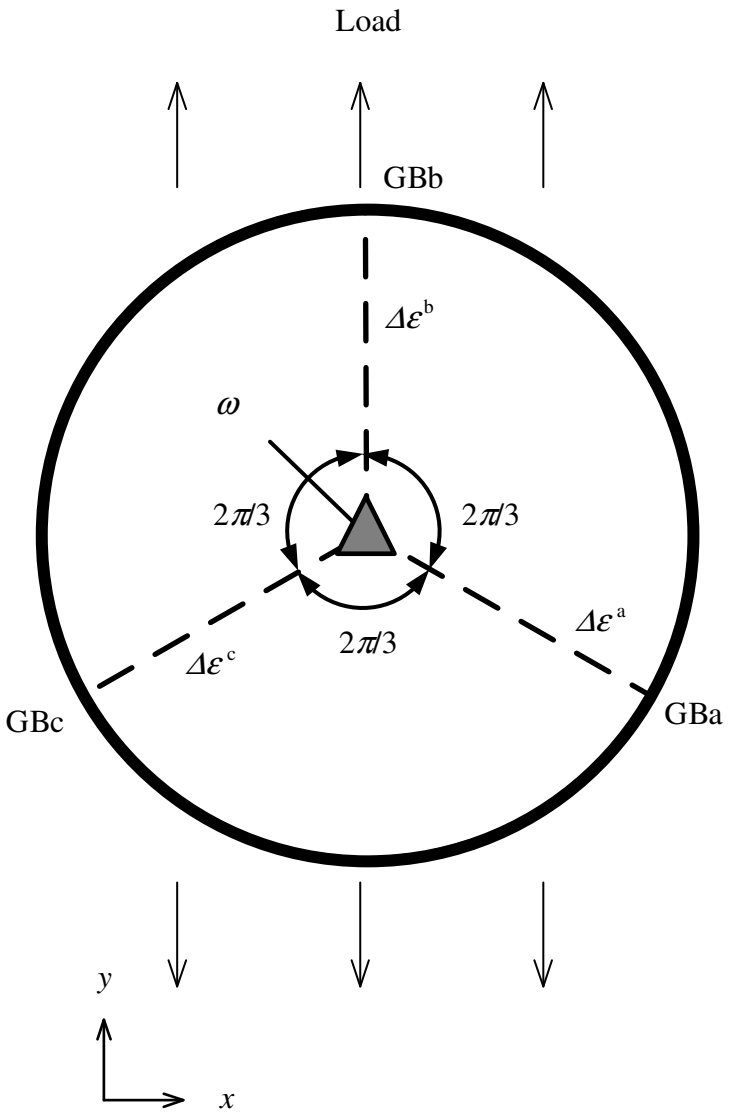


Fig.3.4 (a) The D-model of an elastic homogeneous material; there is a disclination of angle ω and the initial strain, $\Delta\varepsilon^a$, $\Delta\varepsilon^b$ and $\Delta\varepsilon^c$ on the lines.

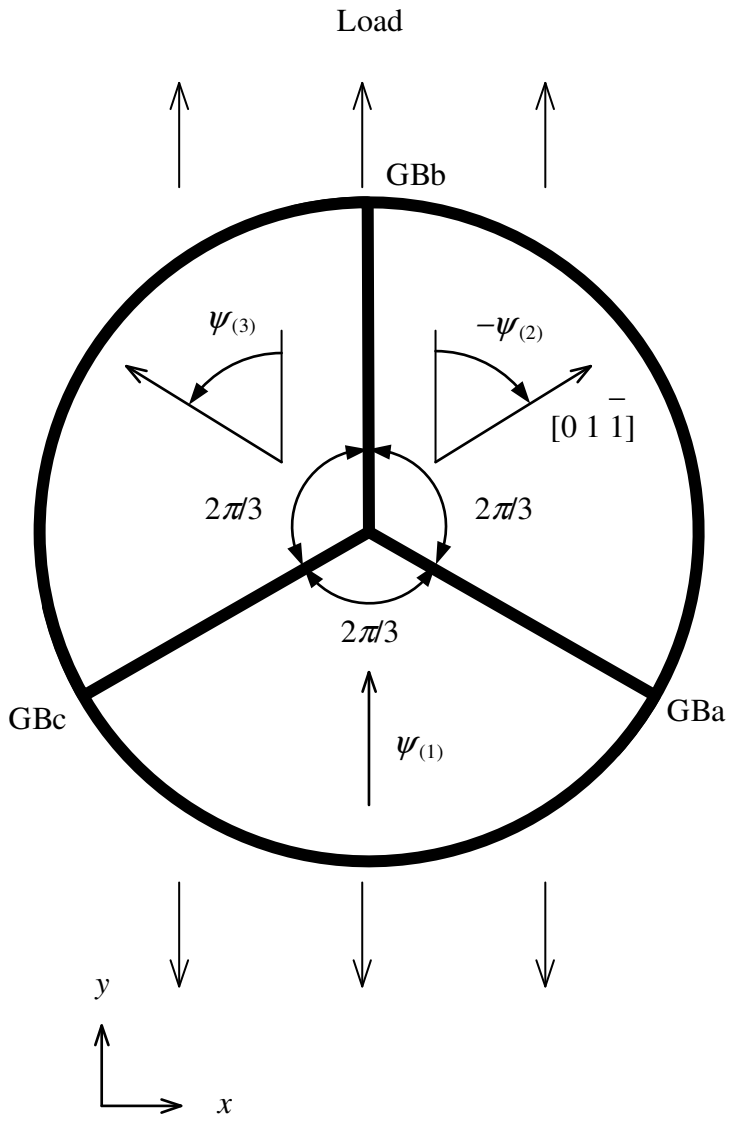
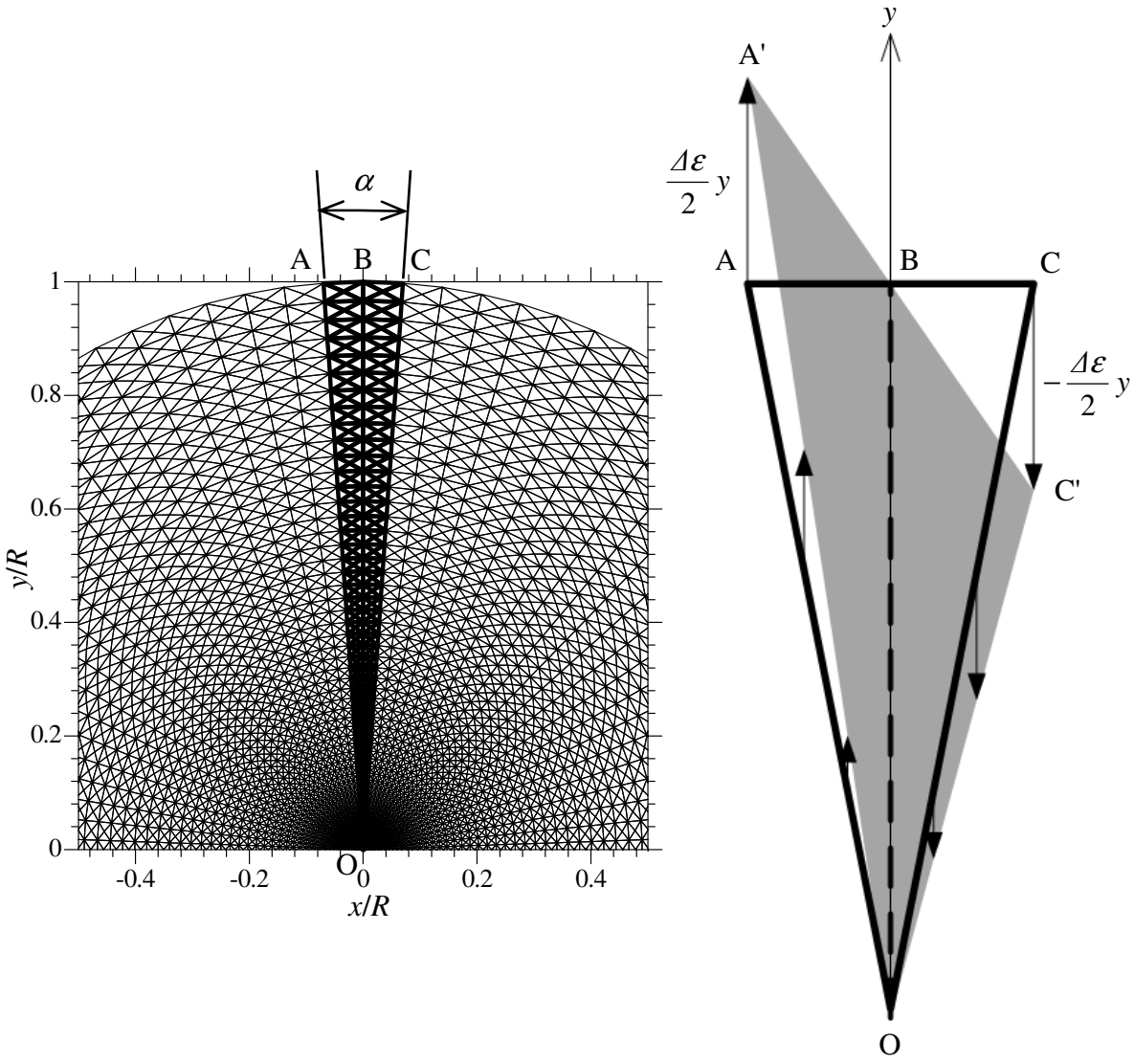


Fig.3.4 (b) The T-model is the real tricrystal; the elastically inhomogeneous material. This tricrystal is composed of three grains of which $[01\bar{1}]$ axis making angles $\psi_{(1)}$, $\psi_{(2)}$ and $\psi_{(3)}$.



(a) (b)

Fig.3.5 The initial strain was applied in order to subject the incompatible boundary strain in the finite element model. (a) The enlarged part of the area where initial strain is given. The angle ∠AOC is α. (b) The elements enclosed by heavy line ABCO are deformed to the elements painted gray A'BC'O with initial strain. The broken line OB is boundary.

3.4 解析結果

3.4.1 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，本章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.

対称性を有する結晶として，3 つの粒界が対称傾角粒界となる場合を考える．図 3.4（b）の様に，結晶粒#3 の結晶方位が，x 軸方向に[100]，y 軸方向に[01$\bar{1}$]，z 軸方向に[011]であり，他の結晶粒は，引張り軸に対する[01$\bar{1}$]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 GBa と GBc は幾何学的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(3.7)より$\omega=9.73\times10^{-4}$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 3.6 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．このことから，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 での粒界 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 3.6 の x 軸上の応力分布を図 3.7 に示す．横軸は対数軸で示す．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．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, 原点に近付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（3.3）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．

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系 O-$r\theta$による表示の方がより明瞭である．図 3.8 に三重線近傍である r/R = 4.2×10^{-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（3.1）の外力 p_y により生じる一様な内部応力σ_y/σ_0=1 の円柱座標系成分で表すことによる周期関数と，式（3.3）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．

$$\begin{cases} \sigma_r/\sigma_0 = \sin^2\theta + \dfrac{E\omega}{4\pi(1-\nu^2)\sigma_0}\ln\dfrac{r}{R} = \sin^2\theta - 0.919, \\ \sigma_\theta/\sigma_0 = \cos^2\theta + \dfrac{E\omega}{4\pi(1-\nu^2)\sigma_0}\left(\ln\dfrac{r}{R}+1\right) = \cos^2\theta - 0.801, \\ \tau_{r\theta}/\sigma_0 = \sin\theta\cos\theta. \end{cases} \qquad (3.11)$$

式（3.10）は周期的な応力の下限と上限として，$-0.92 \leqq \sigma_r/\sigma_0 \leqq 0.08$，$-0.80 \leqq \sigma_\theta/\sigma_0 \leqq 0.20$，$-0.5 \leqq \tau_{r\theta}/\sigma_0 \leqq 0.5$ を与えるが，図 3.7 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．

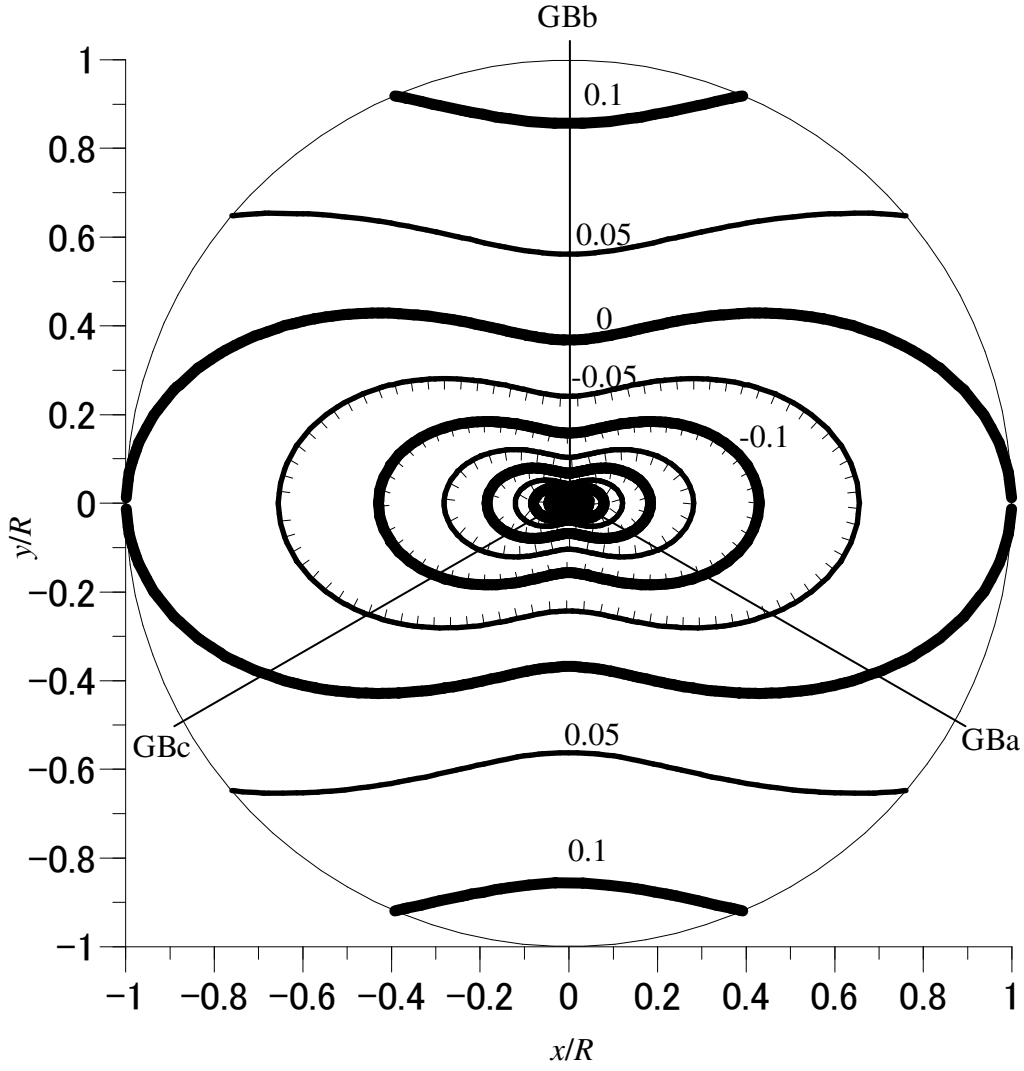


Fig.3.6 (a) The stress field obtained by the D-model of σ_x/σ_0, σ_0=100 MPa and ω=9.73$\times$10^{-4}rad in the symmetrical tricrystal ($\psi_{(1)}$=0 rad, $\psi_{(2)}$=$-\pi$/3 rad, $\psi_{(3)}$=π/3 rad) under the load of Eq.(3.1).

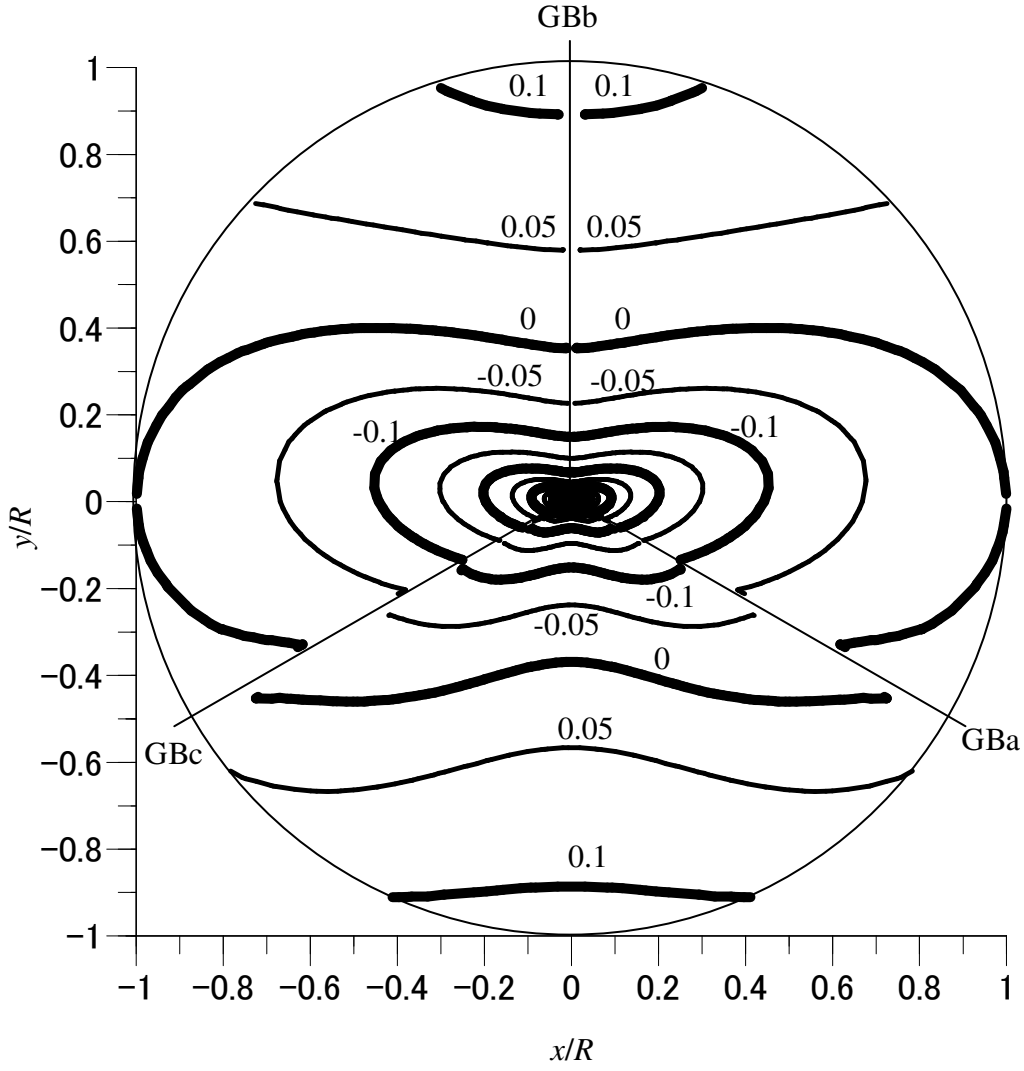


Fig.3.6 (b) The stress field obtained by the T-model of σ_x/σ_0, σ_0=100 MPa in the symmetrical tricrystal ($\psi_{(1)}$=0 rad, $\psi_{(2)}$=$-\pi/3$ rad, $\psi_{(3)}$=$\pi/3$ rad) under the load of Eq.(3.1).

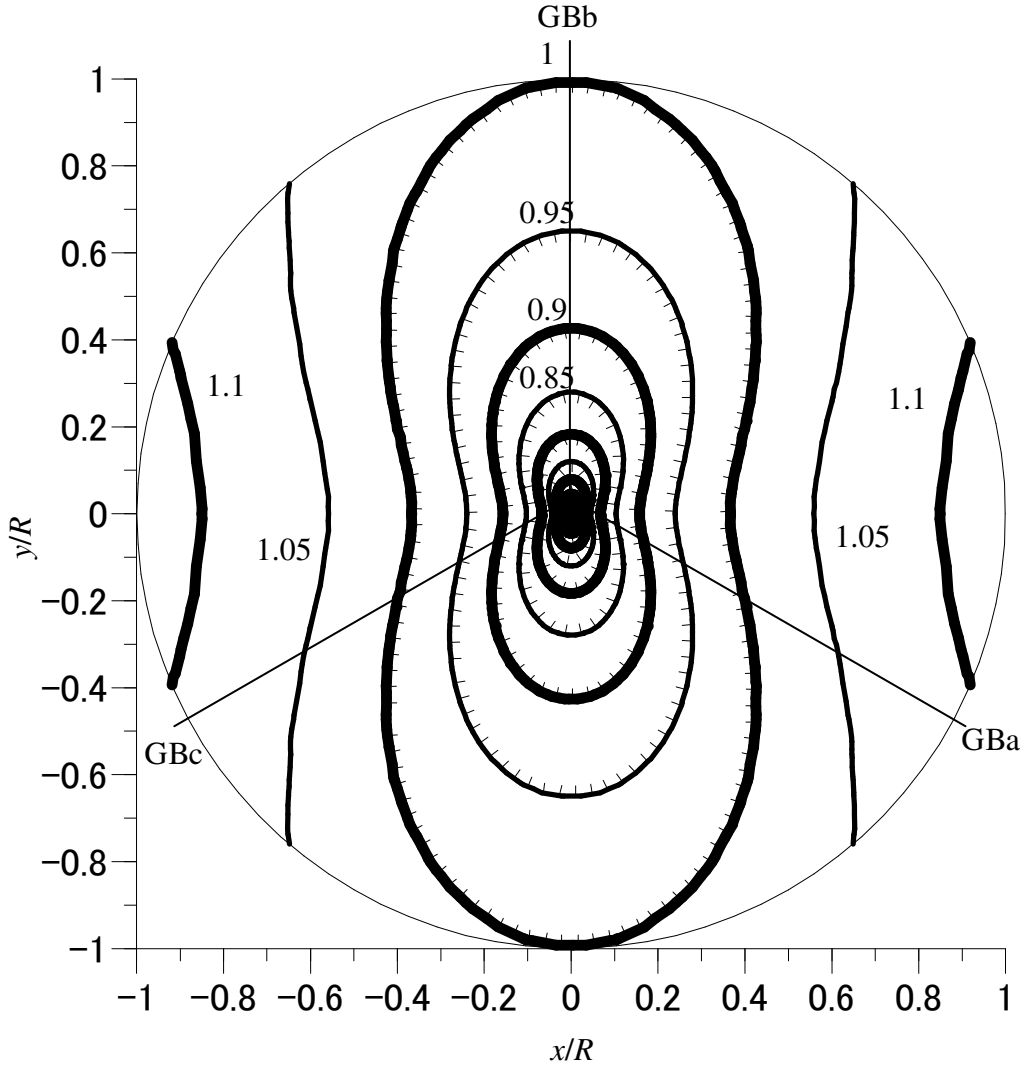


Fig.3.6 (c) The stress field obtained by the D-model of σ_y/σ_0, σ_0=100 MPa and ω=9.73$\times$10^{-4}rad in the symmetrical tricrystal ($\psi_{(1)}$=0 rad, $\psi_{(2)}$=$-\pi$/3 rad, $\psi_{(3)}$=π/3 rad) under the load of Eq.(3.1).

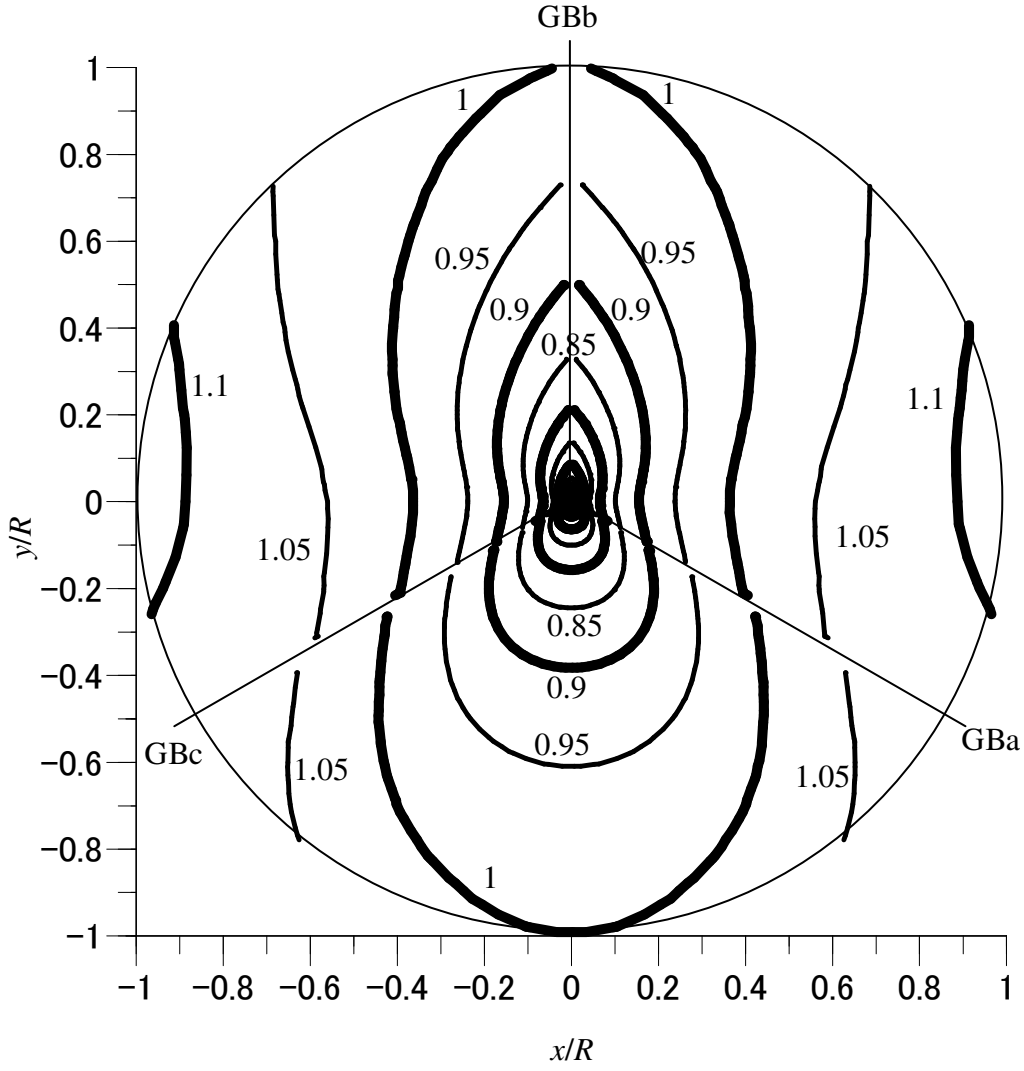


Fig.3.6 (d) The stress field obtained by the T-model of σ_y/σ_0, σ_0=100 MPa in the symmetrical tricrystal ($\psi_{(1)}$=0 rad, $\psi_{(2)}$=$-\pi/3$ rad, $\psi_{(3)}$=$\pi/3$ rad) under the load of Eq.(3.1).

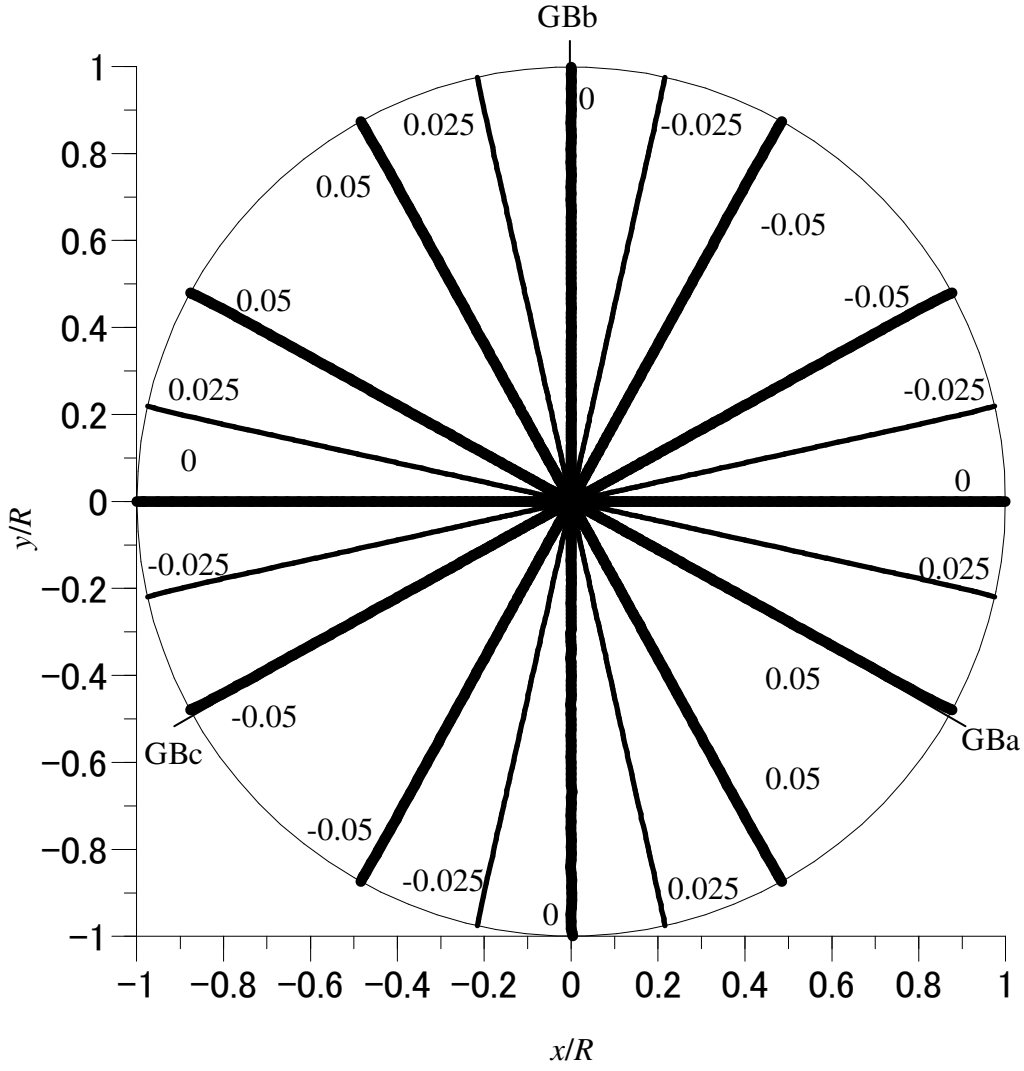


Fig.3.6 (e) The stress field obtained by the D-model of τ_{xy}/σ_0, σ_0=100 MPa and ω=9.73×10^{-4}rad in the symmetrical tricrystal ($\psi_{(1)}$=0 rad, $\psi_{(2)}$=$-\pi$/3 rad, $\psi_{(3)}$=π/3 rad) under the load of Eq.(3.1).

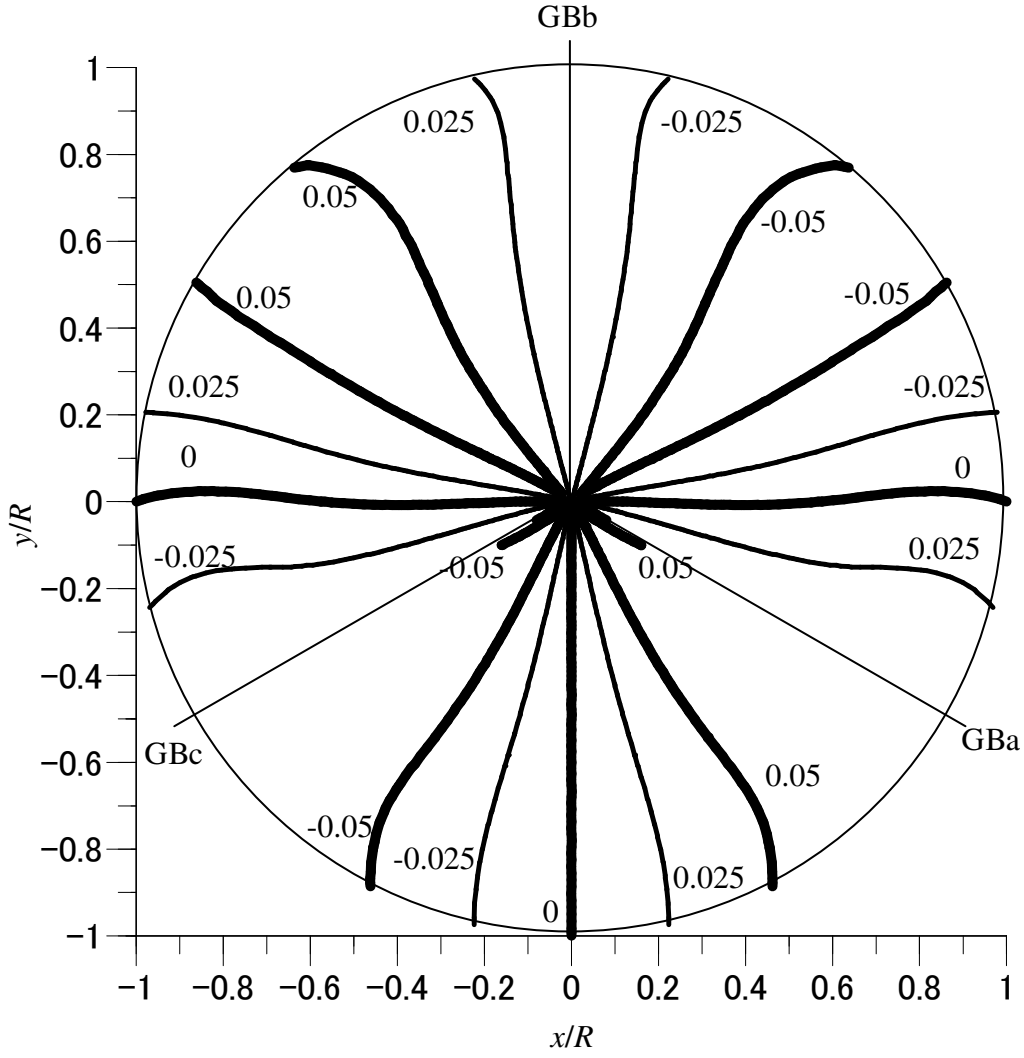


Fig.3.6 (f) The stress field obtained by the T-model of τ_{xy}/σ_0, σ_0=100 MPa in the symmetrical tricrystal ($\psi_{(1)}$=0 rad, $\psi_{(2)}$=$-\pi/3$ rad, $\psi_{(3)}$=$\pi/3$ rad) under the load of Eq.(3.1).

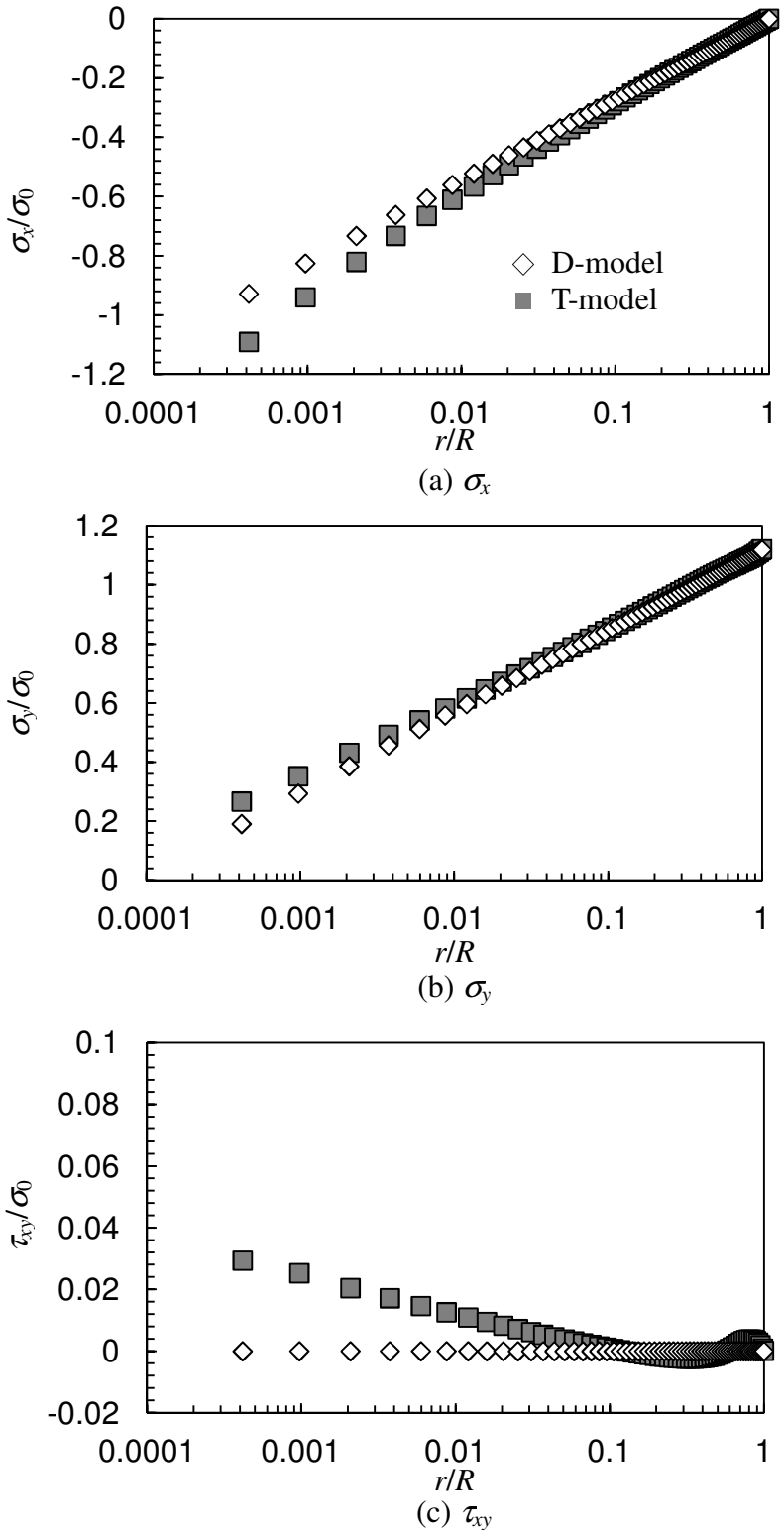


Fig.3.7 The distributions of the *x*-direction normal stress σ_x, the *y*-direction normal stress σ_y and shear stress τ_{xy} in the symmetrical tricrystal ($\psi_{(1)}$=0 rad, $\psi_{(2)}$=$-\pi/3$ rad, $\psi_{(3)}$=$\pi/3$ rad). These stresses are normalized by the constant σ_0 in the *x*-axis, σ_0=100 MPa.

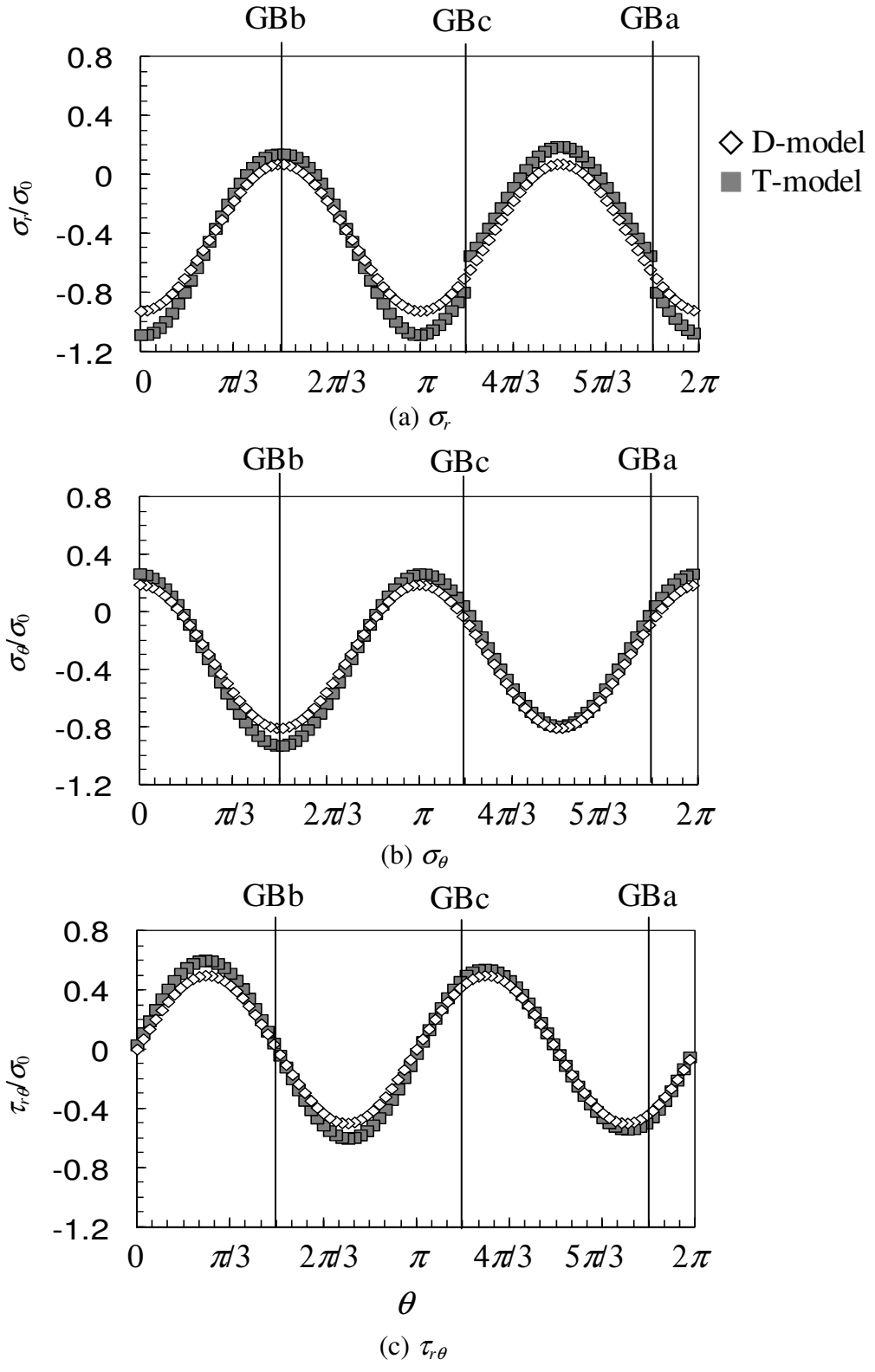


Fig.3.8 The distributions of the radial stress σ_r, the circumference stress σ_θ and shear stress $\tau_{r\theta}$ in the symmetrical tricrystal ($\psi_{(1)}$=0 rad, $\psi_{(2)}$=$-\pi/3$ rad, $\psi_{(3)}$=$\pi/3$ rad). These stresses are normalized by the constant σ_0 in r/R=4.2×10^{-4}, σ_0=100 MPa.

3.4.2 非対称傾角粒界を持つ三重結晶

結晶方位の非対称な組み合わせの一例として，$\psi_{(1)}= 171\pi/180$ rad，$\psi_{(2)}=17\pi/180$ rad，$\psi_{(3)}= 48\pi/180$ 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 に与えた．D-model のくさび型回位の回位角ωと界面ひずみの不適合 は式（3.7）および（3.10）より，$\omega = 6.58\times10^{-4}$ rad，$\Delta\varepsilon^{a} = 1.58\times10^{-4}$，$\Delta\varepsilon^{b} = 1.45\times10^{-4}$，$\Delta\varepsilon^{c} = 1.94\times10^{-4}$ となる．

解析結果を図 3.9 に等高線で示す．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．D-model と T-model の差異は使用した弾性定数の違いが主な原因であろう．D-model は界面ひずみの不適合を与えているので，界面上の応力の不連続が表現出来ている．

図 3.8 の x 軸上の応力分布を図 3.10 に示す．横軸は対数軸で示す．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．D-model は T-model と大まかには一致している．対称傾角粒界の場合と同様に，垂直応力σ_x およびσ_y はともに偏差があり，原点に近付くにつれその差は大きくなった．また，せん断応力τ_{xy} において，D-model は T-model と似た結果となり，原点近傍での特異性を再現した．これは，界面ひずみの不適合を与えていることによるものと考えることができる．

図 3.11 に三重線近傍である $r/R = 4.2\times10^{-4}$ の円周上の応力分布を示す．円柱座標系 O-$r\theta$ による応力成分で表す．この場合でも D-model と T-model はよく似た結果となった．結晶方位が全ての界面に対して非対称な解析であるため，全ての界面で半径方向垂直応力σ_r に不連続が現れた．D-model においても界面での σ_r の不連続を再現できている．D-model では，界面ひずみの不適合の初期ひずみを与えた領域内の 2 つのデータ点が，界面での不連続のおよそ中間に現れた．これは界面ひずみの不適合の初期ひずみの与え方によるものである．

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[(26)-(28)]．本章では，初期ひずみによって界面ひずみの不適合を表現している．図 3.5 に示したように，初期ひずみは体積

領域に与えている．そのため，食い違いは領域内で連続的になる．それにより，D-model の界面近傍の 2 つのデータ点が連続的になり，不連続のおよそ中間に現れたものと思われる．この場合，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．

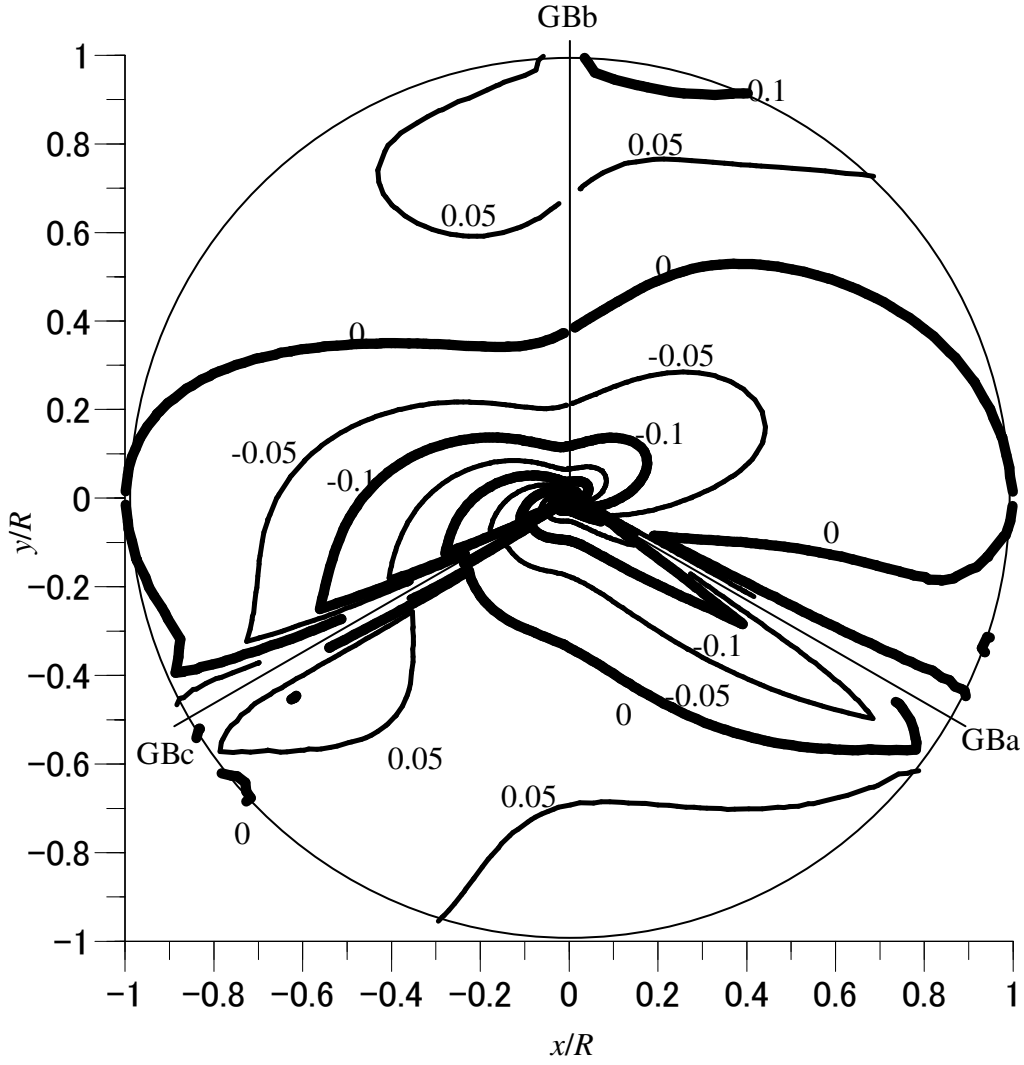
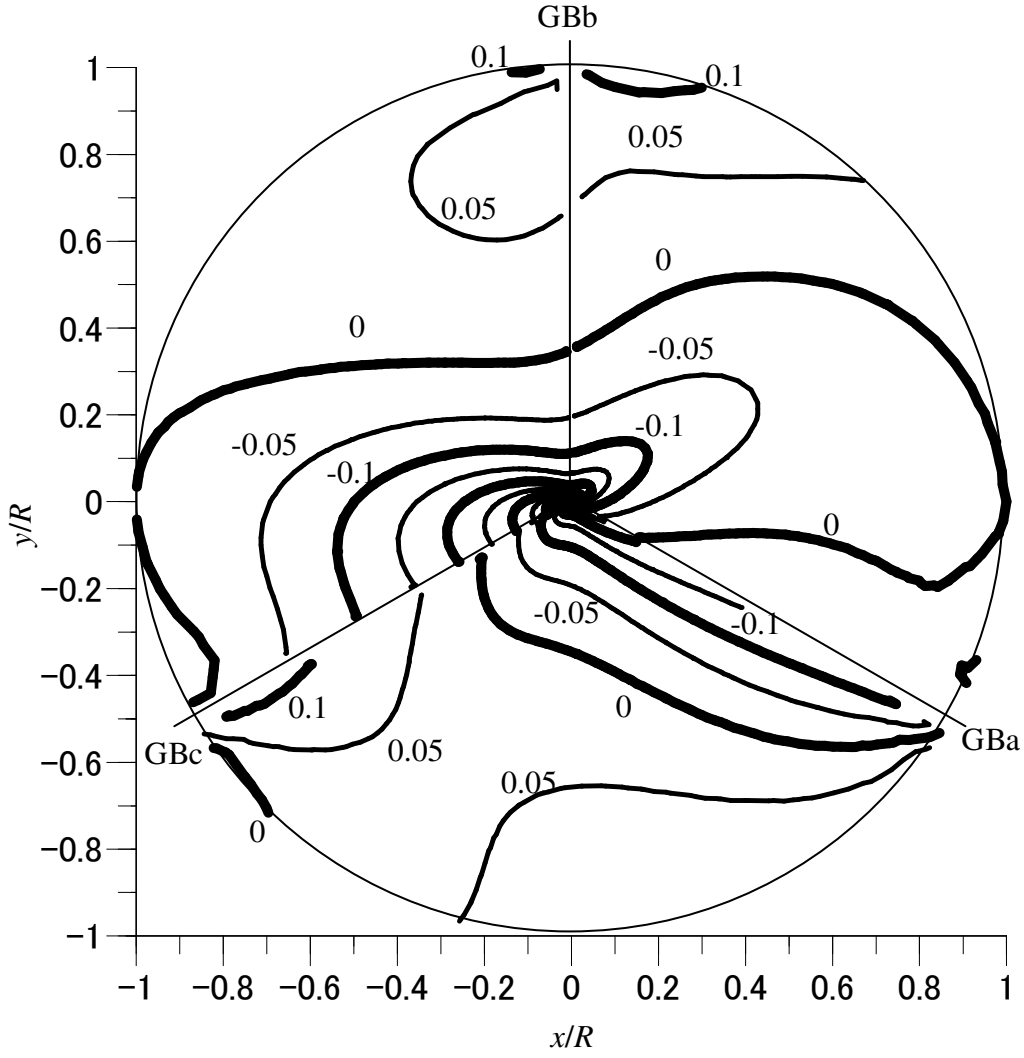


Fig.3.9 (a) D-model of σ_x/σ_0, σ_0=100 MPa, and $\omega = 6.58\times10^{-4}$ rad, $\Delta\varepsilon^a = 1.58\times10^{-4}$, $\Delta\varepsilon^b = 1.45\times10^{-4}$, $\Delta\varepsilon^c = 1.94\times10^{-4}$. This stress field was obtained in the loaded non-symmetrical tricrystal ($\psi_{(1)}$=171π/180 rad, $\psi_{(2)}$=17π/180 rad, $\psi_{(3)}$=48π/180 rad).



(b) T-model. σ_x/σ_0.

Fig.3.9 (b) T-model, σ_x/σ_0, σ_0=100 MPa. This stress field was obtained in the loaded non-symmetrical tricrystal ($\psi_{(1)}$=171π/180 rad, $\psi_{(2)}$=17π/180 rad, $\psi_{(3)}$=48π/180 rad).

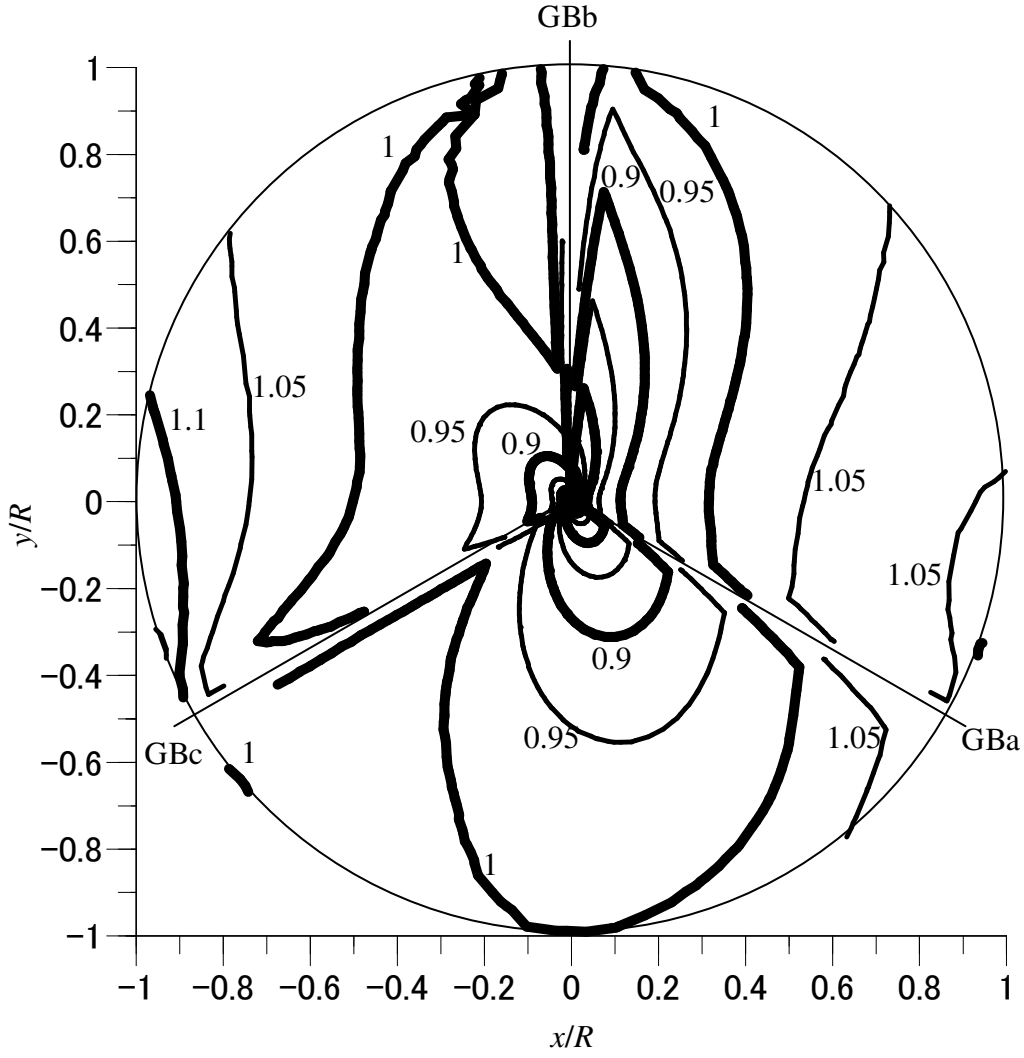


Fig.3.9 (c) D-model of σ_y/σ_0. σ_0=100 MPa and $\omega = 6.58\times10^{-4}$ rad, $\Delta\varepsilon^a = 1.58\times10^{-4}$, $\Delta\varepsilon^b = 1.45\times10^{-4}$, $\Delta\varepsilon^c = 1.94\times10^{-4}$. This stress field was obtained in the loaded non-symmetrical tricrystal ($\psi_{(1)}$=171π/180 rad, $\psi_{(2)}$=17π/180 rad, $\psi_{(3)}$=48π/180 rad).

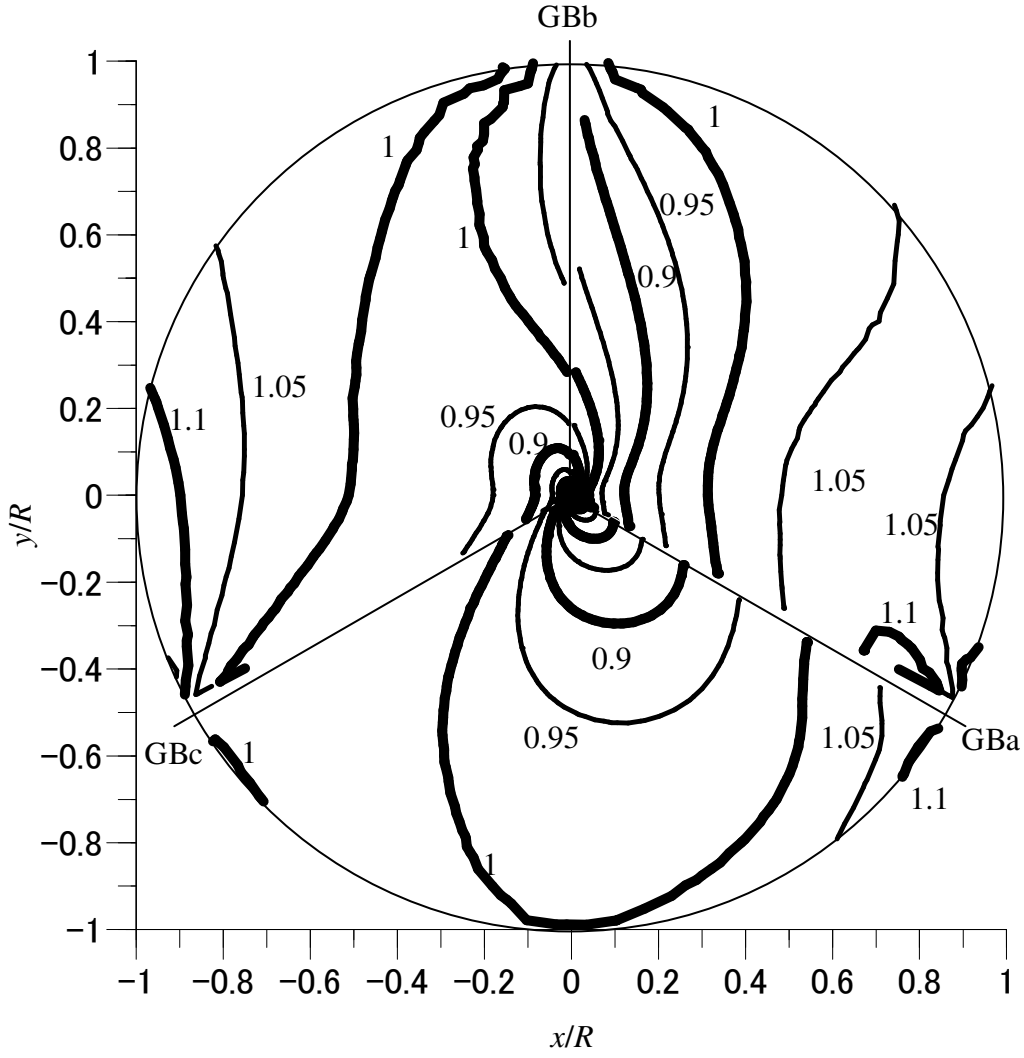


Fig.3.9 (d) T-model of σ_y/σ_0, σ_0=100 MPa. This stress field was obtained in the loaded non-symmetrical tricrystal ($\psi_{(1)}$=171π/180rad, $\psi_{(2)}$=17π/180 rad, $\psi_{(3)}$=48π/180 rad).

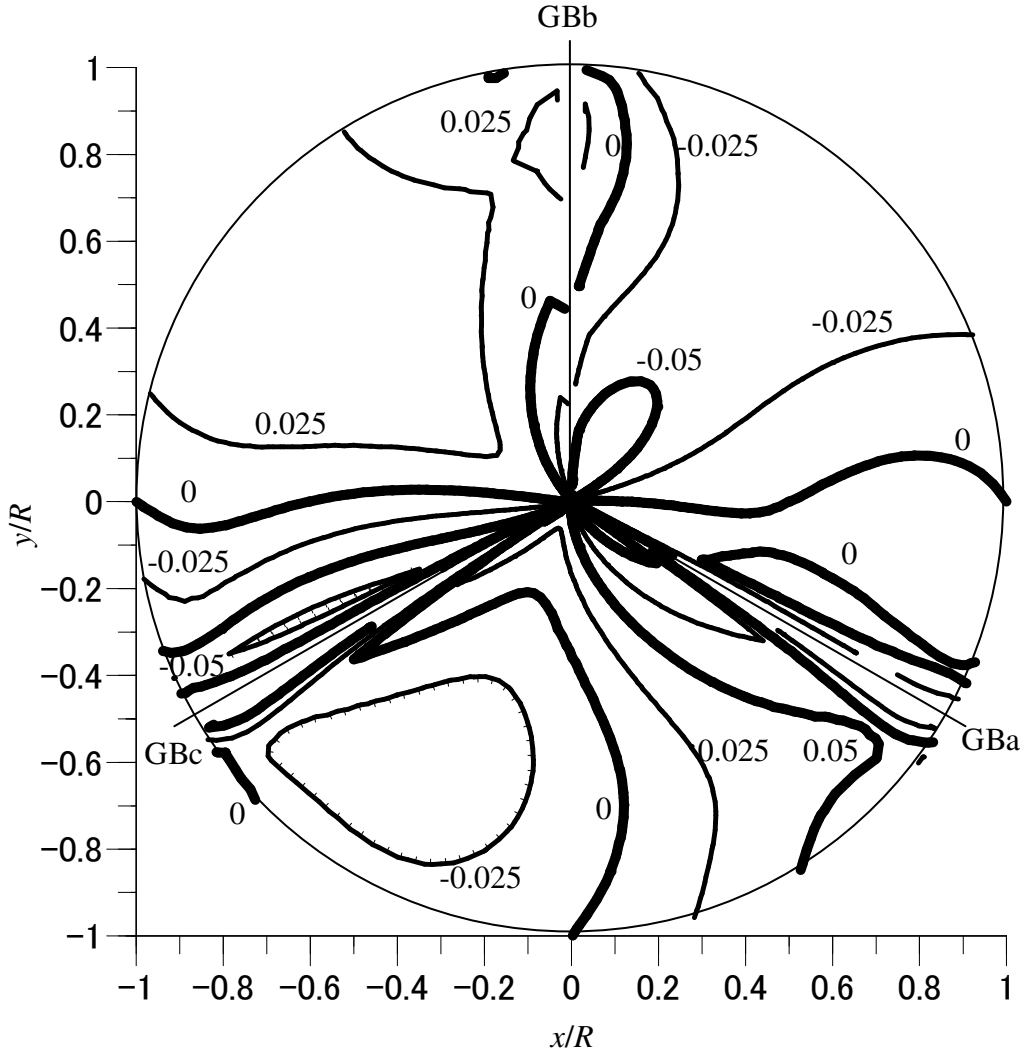


Fig.3.9 (e) D-model of τ_{xy}/σ_0, σ_0=100 MPa and $\omega = 6.58\times10^{-4}$ rad, $\Delta\varepsilon^{a} = 1.58\times10^{-4}$, $\Delta\varepsilon^{b} = 1.45\times10^{-4}$, $\Delta\varepsilon^{c} = 1.94\times10^{-4}$. This stress field was obtained in the loaded non-symmetrical tricrystal ($\psi_{(1)}$=171π/180rad, $\psi_{(2)}$=17π/180 rad, $\psi_{(3)}$=48π/180 rad).

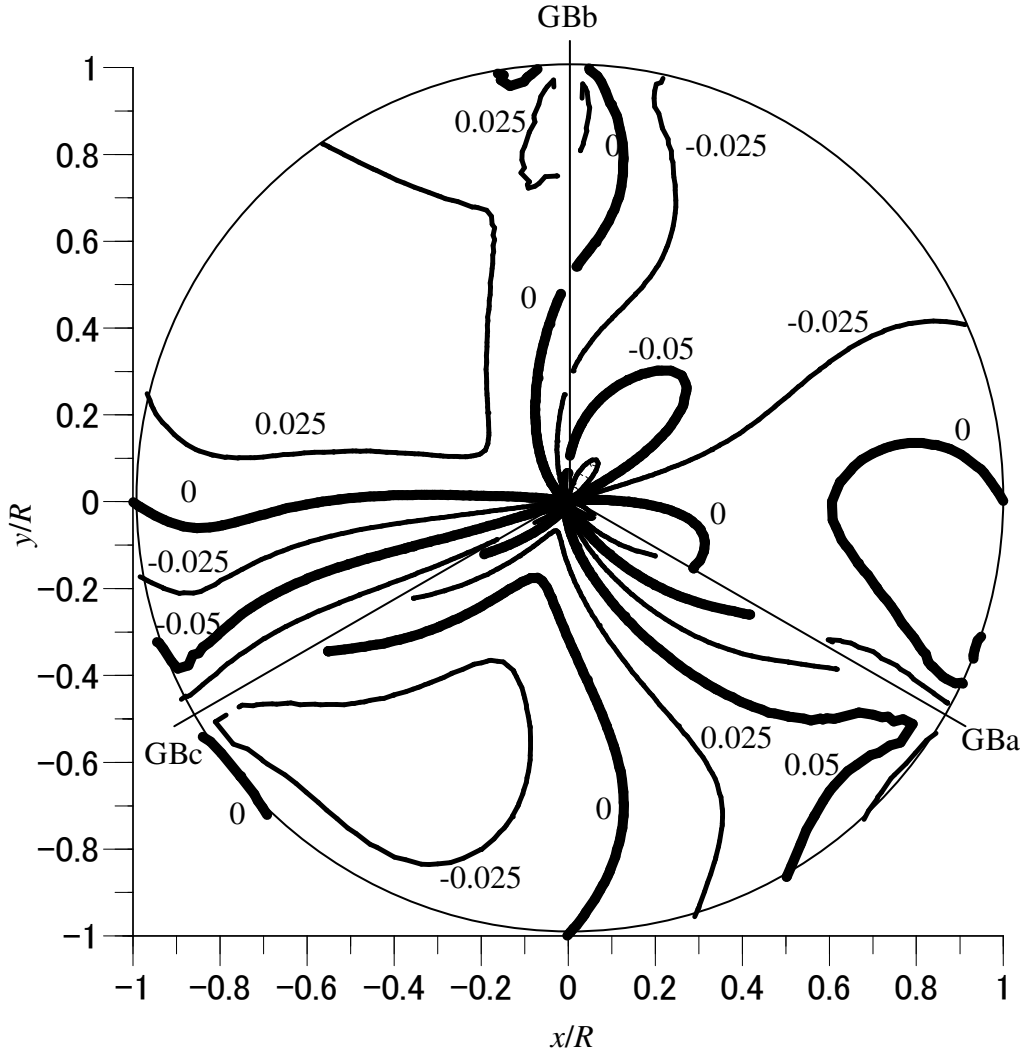


Fig.3.9 (b) T-model of τ_{xy}/σ_0, σ_0=100 MPa. This stress field was obtained in the loaded non-symmetrical tricrystal ($\psi_{(1)}$=171π/180rad, $\psi_{(2)}$=17π/180 rad, $\psi_{(3)}$=48π/180 rad).

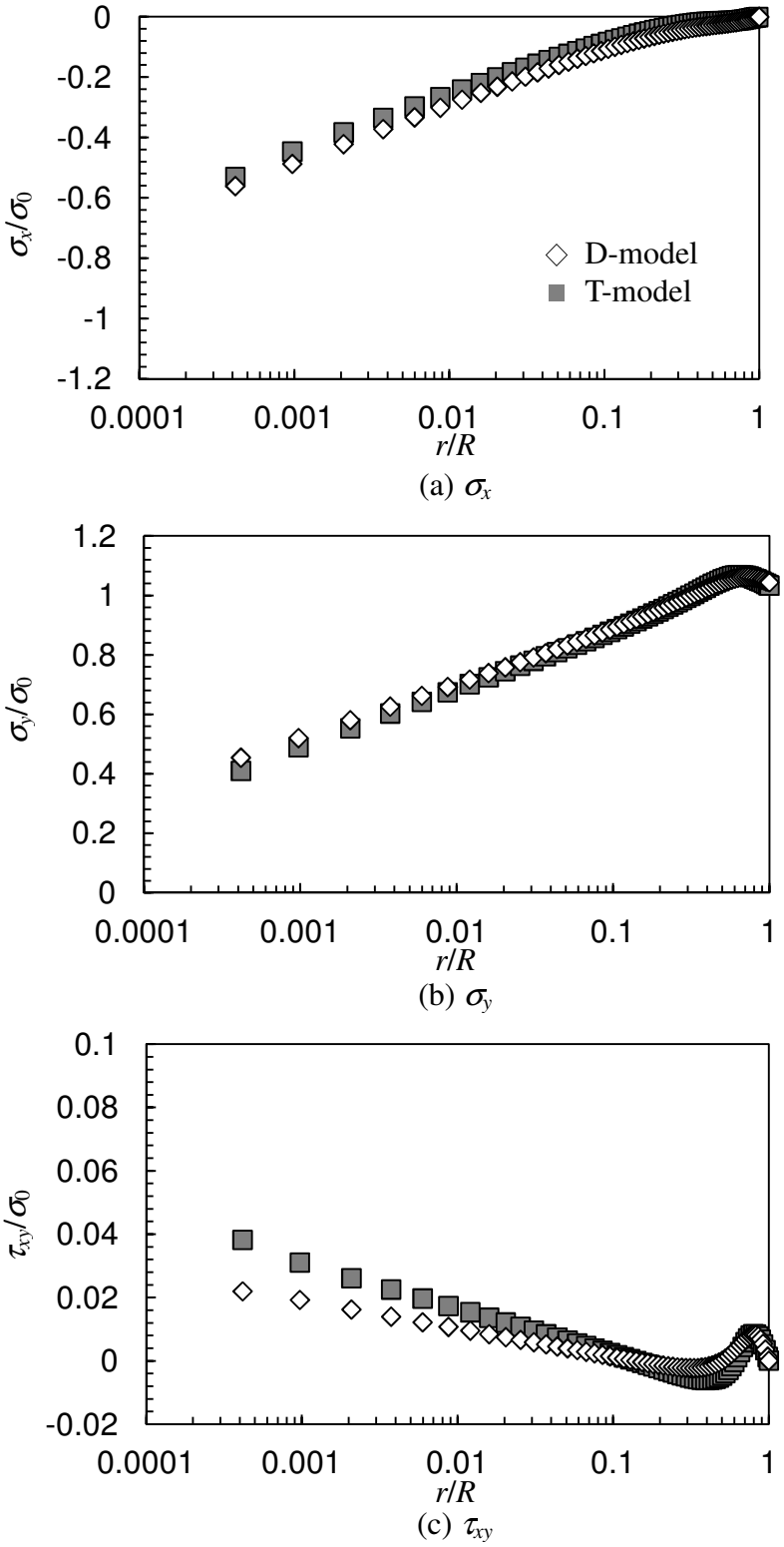


Fig.3.10 The distributions of the *x*-direction normal stress σ_x, the *y*-direction normal stress σ_y and shear stress τ_{xy}, in the non-symmetrical tricrystal ($\psi_{(1)}$=171π/180 rad, $\psi_{(2)}$=17π/180 rad, $\psi_{(3)}$=48π/180 rad). These stresses are normalized by the constant σ_0 in the *x*-axis, σ_0=100 MPa.

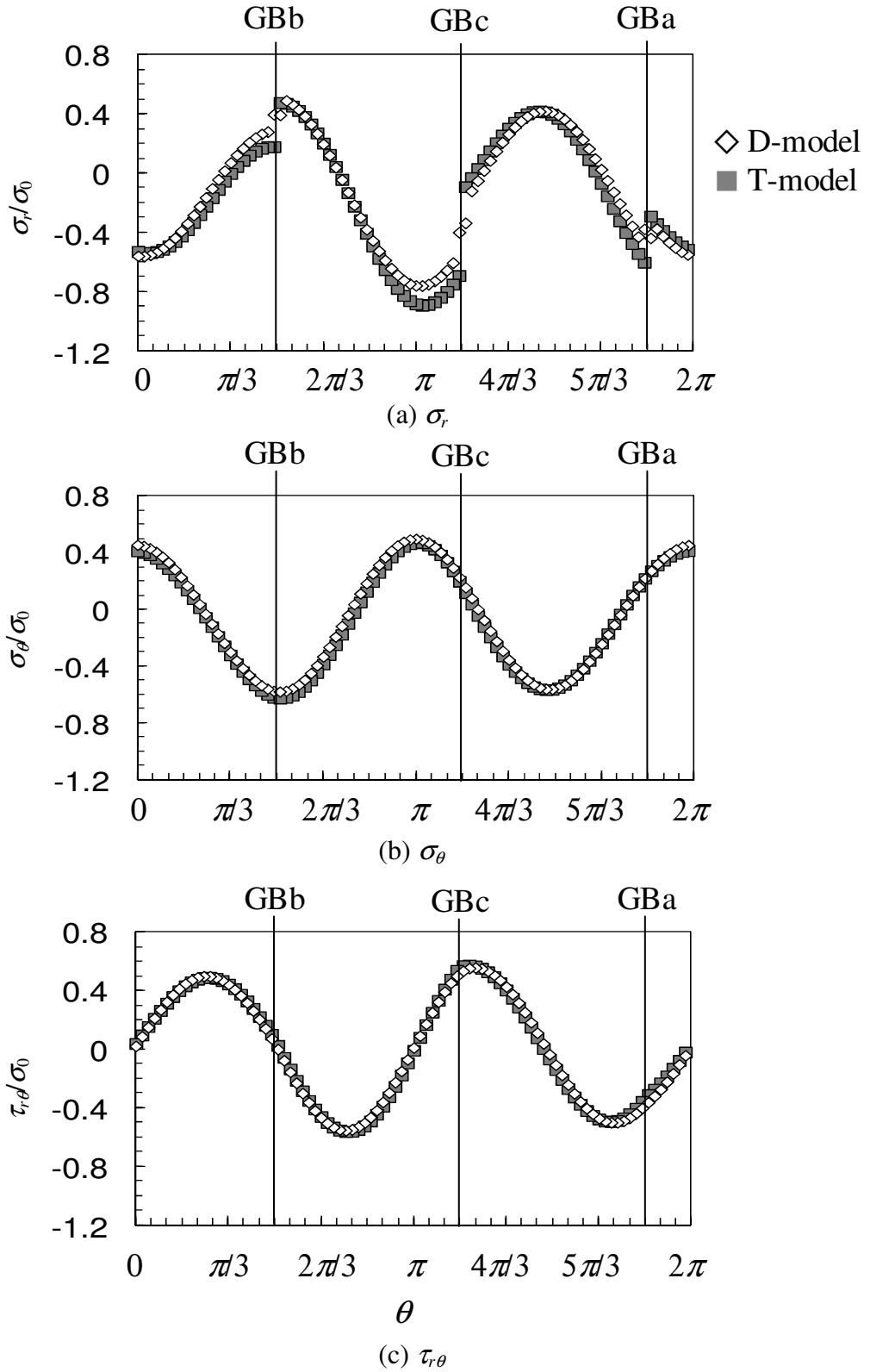


Fig.3.11 The distributions of the radial stress σ_r, the circumference stress σ_θ and shear stress $\tau_{r\theta}$, in the non-symmetrical tricrystal ($\psi_{(1)}$=171π/180rad, $\psi_{(2)}$=17π/180 rad, $\psi_{(3)}$=48π/180 rad). These stresses are normalized by the constant σ_0 in r/R=4.2 $\times 10^{-4}$, σ_0=100 MPa.

3.5 結言

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．第 2 章で提案した，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．本章では，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．

本章では，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．本章において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．

均質な等方弾性体は粗い近似であり，三重結晶の解析に目的を限定すれば，三結晶の弾性定数の重み付き平均などを用いれば近似の精度は明らかに向上する．しかしながら，多結晶解析で極めて多数の結晶粒の統計的平均をとる時，等方弾性体のヤング率とポアソン比を用いるモデルはモデル化が簡略化され，直感的には多結晶について良い近似を与えると期待できる．

第 3 章の参考文献

(1) Love, A.E.H., A Treatise on the mathematical theory of elasticity, Cambridge University Press (1927), pp.221-228.

(2) Timoshenko, S.P. and Goodier, J.N., Theory of Elasticity, Third Edition (1951), p.120, McGraw-Hill.

(3) 森口繁一, 二次元弾性論 (1957), pp.45-46, 岩波書店.

(4) Li, J.C.M., Disclination model of high angle grain boundaries, Surface Science, Vol.31 (1972), pp.12-26.

(5) 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.

(6) Chopra, H.D., Bailly, C. and Wutting, M., Domain structures in bent In-22.5 at.%Tl polydomain crystals, Acta Materialia, Vol.44 (1996), pp.747-751.

(7) Müllner, P. and King, A.H., Deformation of hierarchically twinned martensite, Acta Materialia, Vol.58 (2010), pp.5242-5261.

(8) Bollmann, W., Triple lines in polycrystalline aggregates as disclinations, Philosophical Magazine A, Vol.49 (1984), pp.73-79.

(9) Bollmann, W., Triple-line disclinations Representations, continuity and reactions, Philosophical Magazine A, Vol.57 (1988), pp.637-649.

(10) Upadhyay, M., Capolungo, L., Taupin, V. and Fressengeas, C., Grain boundary and triple junction energies in crystalline media: A disclination based approach, International Journal of Solids and Structures, 48 (2011), 3176-3193.

(11) 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.

(12) Ashby, M.F., The deformation of plastically non-homogeneous materials, The philosophical magazine, Vol.21 (1970), pp.399-424.

(13) Taylor, G.I., Plastic strain in metals, Journal of the Institute of Metals, Vol.62 (1938), pp.307-324.

(14) 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.

(15) Okada, T., Urushibara, K., Tagami, M., Inoko, F. and Hashimoto, S., Morphology of [011]-tilt Σ3 boundaries in pure copper and copper–aluminum alloy tricrystals, Materials Science and Engineering: A, Vol.282 (2000), pp.8-15.

(16) 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.

(17) 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.

(18) 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.

(19) 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.

(20) 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.

(21) 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.

(22) Eshelby, J.D., The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems, Proceedings of the Royal Society of London, A, Mathematical and physical science, Vol.241, No.1226 (1957), pp.376-396.

(23) 結城良治, 界面の力学 (1992), 5-7 章, 培風館.

(24) 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.

(25) 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.

(26) 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.

(27) 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.

(28) 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.

結　　論

本論文では，くさび型回位の平面問題弾性有限要素解析モデルを初めて提案した．さらに，弾性不均質体の典型例である三重結晶を例として，外力によって粒界三重線に生じる不均一応力の弾性異方性有限要素解を求めた．この不均一応力場をくさび型回位とみなし，弾性定数が均一な物体（弾性均質体）にくさび型回位を与えることで，ほぼ同等な不均一応力場が得られる均質化モデルを初めて提案した．以下にその成果を示す．

（1）有限要素モデルとして 2 種類提案した．一つは，物体の一部に切れ目を入れその切れ目を回転させてつなぎ直すという，弾性論において回位を作る手順と同様な方法（強制変位法）である．もう一つは，物体内部の一部，あるいは全部の体積領域に回位によるひずみを初期ひずみとして分布させる方法（初期ひずみ法）である．2 つの解法の精度は離散化誤差で決まり，要素寸法が同じであれば精度は同じであった．有限要素解の精度は理論解と同程度であった．2 つの方法を比較すると，初期ひずみ法では回位が存在する物体の形状をそのまま要素分割するので，有限要素モデルの作成が容易という利点があることを指摘した．

（2）くさび型回位の応力場を有限要素法により求めた結果，回位の中心部での弾性エネルギーは外周に比べて小さい．そのため，回位中心部の応力場の計算精度は，モデル全体の弾性ひずみエネルギーにはほとんど影響がないことを指摘した．

（3）外力によって三重結晶に生じる不均一な弾性応力場は，各結晶粒が拘束を受けないで変形した場合による応力場と，くさび型回位と界面ひずみの不適合による応力場を重ね合わせることで表現できることを示した．このとき，くさび型回位と界面ひずみの不適合の大きさを，各結晶粒の拘束を受けないとした場合の変形の差とすれば，実際の応力場を良い精度で近似できることを示した．

（4）弾性定数が一様な物体に，くさび型回位および界面ひずみの不適合を与えて，三重結晶に生じる不均一な応力場を再現する均質化モデルを初めて提案した．応力場は有限要素法で解析し，三重結晶に外力によって生じる不均一応力場と比較を行った．両者はほぼ一致した．この結果から，三重結晶に外力によって生じる不均一応力場をくさび型回位で評価すること，および，均質化モデルが妥当であることを示した．

（5）均質化モデルにおいて，三重結晶の解析に目的を限定すれば，材料の巨視的平均であるヤング率を用いるよりも三結晶の弾性定数の重み付き平均を用いれば近似の精度は明らかに向上する．しかしながら，今後，多結晶解析で極めて多数の結晶粒の統計的平均をとるような場合には，材料のヤング率とポアソン比を用いることでモデル化が簡略化され，多結晶の巨視的平均として良い近似を与えると期待できる．

今後の展望を，以下に示す．

解析はいずれも二次元平面弾性問題に限定して行った．これは，本研究は新たな手法の提案を目的としており，問題の単純化のためである．実際の現象は，三次元である．その場合，くさび型回位のみではなく，三次元の変位場を持つねじれ型回位を考慮することで同様に議論することが可能になるはずである．同様に，塑性変形までの変形解析および破壊力学に発展する研究が必要である．

また，粒界三重線が一つしか存在しない三重結晶を対象としたが，多結晶へ適用するには，三重線は複数となり，三重線が形成するノード（節点）の存在を考慮する必要がある．このノードについては，本研究の手法が同様に適用可能であるかどうか，検討が必要になるであろう．これらの検討を進めることで，実際の多結晶体の変形挙動がより明らかにされることが期待される．

Appendix A

接合条件を全体剛性マトリクスに直接取り込むことにより一度に解く．図 A1 のような簡単な問題を例に挙げてその方法を示す. 図 A1 のように節点番号を付け，λだけ離れた節点 3 と 4 を接合する．それぞれの節点の変位の x 成分，y 成分を，u_i, v_i（i=1~6），節点力の x 成分，y 成分を，f_i, g_i（i=1~6）とする．λの x 成分，y 成分を，λ_x, λ_y とする．接合条件は次式のように表される．

$$\begin{cases} u_3 - u_4 = \lambda_x\,,\ v_3 - v_4 = \lambda_y\,, \\ f_3 + f_4 = 0\,,\ g_3 + g_4 = 0\,. \end{cases} \tag{A1}$$

また，全体剛性マトリクス［$\boldsymbol{K}$］の成分を K_j^i（i=1~12，j=1~12）とする．節点力｛$\boldsymbol{f}$｝と節点変位｛$\boldsymbol{u}$｝の関係は次式のようになる．

$$[\boldsymbol{K}]\{\boldsymbol{u}\} = \{\boldsymbol{f}\},$$

$$\begin{bmatrix} K_1^1 & K_2^1 & \cdots & K_{11}^1 & K_{12}^1 \\ K_1^2 & K_2^2 & \cdots & K_{11}^2 & K_{12}^2 \\ \vdots & & \ddots & \vdots & \\ K_1^{11} & K_2^{11} & \cdots & K_{11}^{11} & K_{12}^{11} \\ K_1^{12} & K_2^{12} & \cdots & K_{11}^{12} & K_{12}^{12} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ v_1 \\ \vdots \\ u_{12} \\ v_{12} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_1 \\ g_1 \\ \vdots \\ f_{12} \\ g_{12} \end{Bmatrix}. \tag{A2}$$

有限要素法の性質から全体剛性マトリクスは対称マトリクスであるので,

$$K_j^i = K_i^j \quad (i = 1 \sim 12\,,\ j = 1 \sim 12), \tag{A3}$$

である.

u_i, v_i, f_i, g_i（i=1, 2, 5, 6）のうちの 8 個と，u_i, v_i, f_i, g_i（i=3, 4）の 8 個，合計 16 個の未知数について 16 本の連立方程式を解けばよい．しかし，プログラムの連立方程式を解くサブルーチンとしてガウス消去法を用いているため，境界条件が変位で与えられている形では，解を求めることはできない．そのため，式の形を変える.

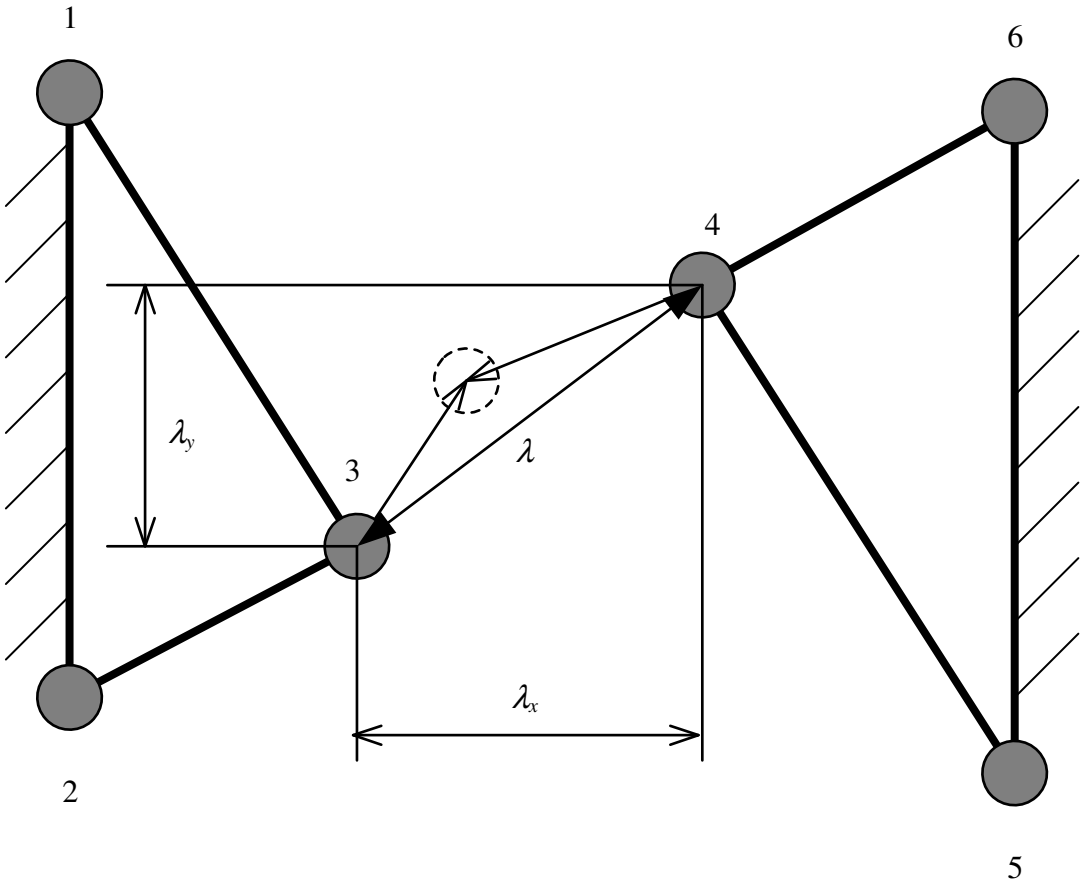


Fig.A1 Conjunction of nodal points 3 and 4. The distance of the nodal points is λ.

まず，式（A1）から，f_3 と f_4，g_3 と g_4 に関わる方程式を足し合わせ，f_4，g_4 を消去する．

$$\begin{aligned} f_3 + f_4 &= \left(K_1^5 + K_1^7\right)u_1 + \cdots + \left(K_{12}^5 + K_{21}^7\right)v_1, \\ &\equiv K_1^{5'} u_1 + \cdots + K_{12}^{5'} v_1. \end{aligned} \tag{A4}$$

$$\begin{aligned} g_3 + g_4 &= \left(K_1^6 + K_1^8\right)u_1 + \cdots + \left(K_{12}^6 + K_{21}^8\right)v_1, \\ &\equiv K_1^{6'} u_1 + \cdots + K_{12}^{6'} v_1. \end{aligned} \tag{A5}$$

ただし，

$$K_i^{5'} \equiv K_i^5 + K_i^7 \,,\, K_i^{6'} \equiv K_i^6 + K_i^8 \quad (i = 1 \sim 12), \tag{A6}$$

である．以後，変化した記号には ’ を付ける．

f_4，g_4 に関わる方程式の係数を 0 にする．

$$K_i^7 = 0 \,,\, K_i^8 = 0 \quad (i = 1 \sim 12). \tag{A7}$$

また，

$$f_3' = 0 \,,\, g_3' = 0. \tag{A8}$$

次に，式（A1）を使って u_4, v_4 に関する係数を消去する．変位の接合条件の式を式（A2）の節点番号 1, 2, 5, 6 に関わる方程式に代入する．f_i（i=1, 3, 9, 11）に関わる方程式では，

$$\begin{aligned} f_i = K_1^i u_1 + \cdots + K_5^i u_3 + K_6^i v_3 + K_7^i \left(u_1 - \lambda_x\right) + K_8^i \left(v_3 - \lambda_y\right) + \cdots + K_{12}^i v_{12} \\ \left(i = 1, 3, 9, 11\right), \end{aligned} \tag{A9}$$

となる．接合条件にかかわる項を左辺に移項させると，

$$f_i + K_7^i \lambda_x + K_8^i \lambda_y = K_1^i u_1 + \cdots + \left(K_5^i + K_7^i\right) u_3 + \left(K_6^i + K_8^i\right) v_3 + \cdots + K_{12}^i v_{12} \quad (i = 1, 3, 9, 11),$$

（A10）

となる．g_i（i=2, 4, 10, 12）に関わる方程式でも同様に,

$$g_i + K_7^i \lambda_x + K_8^i \lambda_y = K_1^i u_1 + \cdots + \left(K_5^i + K_7^i\right) u_3 + \left(K_6^i + K_8^i\right) v_3 + \cdots + K_{12}^i v_{12} \quad (i = 2, 4, 10, 12),$$

（A11）

となる．式（A4）の場合も同じく考えると,

$$f_3 + f_4 = K_1^{5'} u_1 + \cdots + K_5^{5'} u_3 + K_6^{5'} v_3 + K_7^{5'} \left(u_1 - \lambda_x\right) + K_8^{5'} \left(v_3 - \lambda_y\right) + \cdots + K_{12}^{5'} v_{12},$$

（A12）

となる，式（A1）より f_3+f_4=0 なので式（A12）は,

$$K_7^{5'} \lambda_x + K_8^{5'} \lambda_y = K_1^{5'} u_1 + \cdots + \left(K_5^{5'} + K_7^{5'}\right) u_3 + \left(K_6^{5'} + K_8^{5'}\right) v_3 + \cdots + K_{12}^{5'} v_{12},$$

（A13）

となる．式（A5）も同様にして,

$$K_7^{6'} \lambda_x + K_8^{6'} \lambda_y = K_1^{6'} u_1 + \cdots + \left(K_5^{6'} + K_7^{6'}\right) u_3 + \left(K_6^{6'} + K_8^{6'}\right) v_3 + \cdots + K_{12}^{6'} v_{12},$$

（A14）

が得られる．

変更があった剛性マトリクスと節点力は次のようになる.

$$K_i^{5\prime} \equiv K_i^5 + K_i^7 \,,\; K_i^{6\prime} \equiv K_i^6 + K_i^8 \quad (i = 1 \sim 4\,,\, 9 \sim 12), \tag{A15}$$

$$K_5^{5\prime\prime} = K_5^{5\prime} + K_7^{5\prime} = K_5^5 + K_5^7 + K_7^5 + K_7^7 \,, \tag{A16}$$

$$K_6^{5\prime\prime} = K_6^{5\prime} + K_8^{5\prime} = K_6^5 + K_6^7 + K_8^5 + K_8^7 \,, \tag{A17}$$

$$K_5^{6\prime\prime} = K_5^{6\prime} + K_7^{6\prime} = K_5^6 + K_5^8 + K_7^6 + K_7^8 \,, \tag{A18}$$

$$K_6^{6\prime\prime} = K_6^{6\prime} + K_8^{6\prime} = K_6^6 + K_8^8 + K_8^6 + K_8^8 \,, \tag{A19}$$

$$K_i^7 = 0 \,,\; K_i^8 = 0 \quad (i = 1 \sim 12), \tag{A20}$$

$$f_i^{\prime} = f_i + K_7^i \lambda_x + K_8^i \lambda_y \quad (i = 1, 3, 9, 11), \tag{A21}$$

$$g_i^{\prime} = g_i + K_7^i \lambda_x + K_8^i \lambda_y \quad (i = 2, 4, 10, 12), \tag{A22}$$

$$f_3^{\prime\prime} = K_7^{5\prime} \lambda_x + K_8^{5\prime} \lambda_y \,, \tag{A23}$$

$$g_3^{\prime\prime} = K_7^{6\prime} \lambda_x + K_8^{6\prime} \lambda_y \,. \tag{A24}$$

最後に，仮に u_4, v_4 を 0 としておくために,

$$K_7^{7\prime\prime} = K_8^{8\prime\prime} = 1 \,,\; f_4^{\prime} = g_4^{\prime} = 0 \tag{A25}$$

とする.

最終的な全体剛性マトリクス［$\boldsymbol{K}$］は次式のようになる．

$$[\boldsymbol{K}]=\begin{bmatrix}
K_1^1 & K_2^1 & K_3^1 & K_4^1 & K_5^{1\prime} & K_6^{1\prime} & 0 & 0 & K_9^1 & K_{10}^1 & K_{11}^1 & K_{12}^1 \\
K_1^2 & K_2^2 & K_3^2 & K_4^2 & K_5^{2\prime} & K_6^{2\prime} & 0 & 0 & K_9^2 & K_{10}^2 & K_{11}^2 & K_{12}^2 \\
K_1^3 & K_2^3 & K_3^3 & K_4^3 & K_5^{3\prime} & K_6^{3\prime} & 0 & 0 & K_9^3 & K_{10}^3 & K_{11}^3 & K_{12}^3 \\
K_1^4 & K_2^4 & K_3^4 & K_4^4 & K_5^{4\prime\prime} & K_6^{4\prime\prime} & 0 & 0 & K_9^4 & K_{10}^4 & K_{11}^4 & K_{12}^4 \\
K_1^5 & K_2^5 & K_3^5 & K_4^5 & K_5^{5\prime\prime} & K_6^{5\prime\prime} & 0 & 0 & K_9^5 & K_{10}^5 & K_{11}^5 & K_{12}^5 \\
K_1^6 & K_2^6 & K_3^6 & K_4^6 & K_5^6 & K_6^6 & 0 & 0 & K_9^6 & K_{10}^6 & K_{11}^6 & K_{12}^6 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0' & 0' & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
K_1^9 & K_2^9 & K_3^9 & K_4^9 & K_5^{9\prime} & K_6^{9\prime} & 0 & 0 & K_9^9 & K_{10}^9 & K_{11}^9 & K_{12}^9 \\
K_1^{10} & K_2^{10} & K_3^{10} & K_4^{10} & K_5^{10\prime} & K_6^{10\prime} & 0 & 0 & K_9^{10} & K_{10}^{10} & K_{11}^{10} & K_{12}^{10} \\
K_1^{11} & K_2^{11} & K_3^{11} & K_4^{11} & K_5^{11\prime} & K_6^{11\prime} & 0 & 0 & K_9^{11} & K_{10}^{11} & K_{11}^{11} & K_{12}^{11} \\
K_1^{12} & K_2^{12} & K_3^{12} & K_4^{12} & K_5^{12\prime} & K_6^{12} & 0 & 0 & K_9^{12} & K_{10}^{12} & K_{11}^{12} & K_{12}^{12}
\end{bmatrix}. \tag{A26}$$

節点力｛$\boldsymbol{f}$｝は次式のようになる．

$$\{\boldsymbol{f}\}=\begin{bmatrix} f_1' & g_1' & f_2' & g_2' & f_3'' & g_3'' & 0 & 0 & f_5' & g_5' & f_6' & g_6' \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}. \tag{A27}$$

式（A2），（A26）および（A27）より，u_i, v_i,（i=1, 2, 3, 5, 6）が得られる．u_4, v_4 は，接合条件である式（A1）に u_3, v_3 を代入することで求める．

この方法の利点は，全体剛性マトリクスの修正によって行われることと，接合する 2 つの節点の右側の節点番号を（左側の節点番号+1）とすることにより，全体剛性マトリクスをバンド化する際に，バンド幅が 2 つしか増えない点である．

Appendix B

一般的には，解析対称の物体は円柱ではない場合が多く，さらに 2 つ以上の回位が存在することもある，その場合，直交座標である試料座標系のモデル化が便利である．そこで，円筒座標系の初期ひずみ（式（2.6）～（2.8））を図 2.3 の直交座標系に変換する．対称位置 OC からの角度$\varphi=\theta-3\pi/2$ を用いる．

$$\varepsilon_x=\frac{1}{2}(\varepsilon_r+\varepsilon_\theta)-\frac{1}{2}(\varepsilon_r-\varepsilon_\theta)\cos\frac{\varphi}{2}+\frac{1}{2}\gamma_{r\theta}\sin\frac{\varphi}{2}\ , \tag{B1}$$

$$\varepsilon_y=\frac{1}{2}(\varepsilon_r+\varepsilon_\theta)+\frac{1}{2}(\varepsilon_r-\varepsilon_\theta)\cos\frac{\varphi}{2}-\frac{1}{2}\gamma_{r\theta}\sin\frac{\varphi}{2}\ , \tag{B2}$$

$$\gamma_{xy}=-(\varepsilon_r-\varepsilon_\theta)\sin\frac{\varphi}{2}-\gamma_{r\theta}\cos\frac{\varphi}{2}\ . \tag{B3}$$

式（1.6）～（1.8）を用い，L 領域と R 領域では回転の方向が異なることを考慮して，L 領域では,

$$\varepsilon_x=-\frac{\omega}{2\varphi}\left(1+\cos\frac{\varphi}{2}\right), \tag{B4}$$

$$\varepsilon_y=-\frac{\omega}{2\varphi}\left(1-\cos\frac{\varphi}{2}\right), \tag{B5}$$

$$\gamma_{xy}=\frac{\omega}{\varphi}\sin\frac{\varphi}{2}\ , \tag{B6}$$

となる．R 領域では，せん断ひずみγ_{xy}のみが符号が反転する．

$$\gamma_{xy}=-\frac{\omega}{\varphi}\sin\frac{\varphi}{2}\ . \tag{B7}$$

これは左右対称の純曲げに似た変形として理解できる．

Appendix C

直交座標系 O-*xyz* において，3 次元異方性弾性体のある点における応力{$\boldsymbol{\sigma}$}とひずみ{$\boldsymbol{\varepsilon}$}の関係は，弾性マトリクス[$\boldsymbol{D}$]を用いて，次式のように表される．

$$\{\boldsymbol{\sigma}\}=[\boldsymbol{D}]\{\boldsymbol{\varepsilon}\}$$

$$\begin{Bmatrix}\sigma_x\\ \sigma_y\\ \sigma_z\\ \tau_{yz}\\ \tau_{zx}\\ \tau_{xy}\end{Bmatrix}=\begin{bmatrix}C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16}\\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26}\\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36}\\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46}\\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56}\\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66}\end{bmatrix}\begin{Bmatrix}\varepsilon_x\\ \varepsilon_y\\ \varepsilon_z\\ \gamma_{yz}\\ \gamma_{zx}\\ \gamma_{xy}\end{Bmatrix}. \tag{C1}$$

C_{ij} は弾性コンプライアンスである．ここで微小なひずみ変化によりなされる単位体積あたりの仕事をδW，ひずみエネルギーの変化をδU とするとそれぞれ，

$$\delta W=\sigma_x d\varepsilon_x+\sigma_y d\varepsilon_y+\sigma_z d\varepsilon_z+\tau_{yz}d\gamma_{yz}+\tau_{zx}d\gamma_{zx}+\tau_{xy}d\gamma_{xy}\ , \tag{C2}$$

$$\delta U=\frac{\partial U}{\partial\varepsilon_x}d\varepsilon_x+\frac{\partial U}{\partial\varepsilon_y}d\varepsilon_y+\frac{\partial U}{\partial\varepsilon_z}d\varepsilon_z+\frac{\partial U}{\partial\gamma_{yz}}d\gamma_{yz}+\frac{\partial U}{\partial\gamma_{zx}}d\gamma_{zx}+\frac{\partial U}{\partial\gamma_{xy}}d\gamma_{xy}\ , \tag{C3}$$

となる．δW とδU は等しいので，

$$\sigma_x=\frac{\partial U}{\partial\varepsilon_x},\ \sigma_y=\frac{\partial U}{\partial\varepsilon_y},\ \sigma_z=\frac{\partial U}{\partial\varepsilon_z},\ \tau_{yz}=\frac{\partial U}{\partial\gamma_{yz}},\ \tau_{zx}=\frac{\partial U}{\partial\gamma_{zx}},\ \tau_{xy}=\frac{\partial U}{\partial\gamma_{xy}}, \tag{C4}$$

となる．

$$\frac{\partial\sigma_x}{\partial\varepsilon_y}=\frac{\partial^2U}{\partial\varepsilon_y\partial\varepsilon_x},\quad \frac{\partial\sigma_y}{\partial\varepsilon_x}=\frac{\partial^2U}{\partial\varepsilon_x\partial\varepsilon_y}. \tag{C5}$$

となることから，

$$\frac{\partial \sigma_x}{\partial \varepsilon_y} = \frac{\partial \sigma_y}{\partial \varepsilon_x}. \tag{C6}$$

が得られる．以上より C_{12}=C_{21} が得られる．他の成分も同様に計算すると，C_{ij}=C_{ji} が得られる．また，立方晶系金属は x，y，z 軸それぞれに対して 90 度の回転対称性を持つので，弾性マトリクス[$\boldsymbol{D}$]は次式のようになる．

$$[\boldsymbol{D}] = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix}. \tag{C7}$$

立方晶系の弾性定数は, 独立な 3 つの弾性コンプライアンス C_{11},C_{12},C_{44} で記述される．

弾性に異方性がある場合を考えるため，弾性定数の座標変換が必要となる．座標変換後の弾性定数を元の座標系の弾性定数を使って表す．元の座標系を O-xyz, 座標変換後の座標系を O-$x'y'z'$とし，座標変換後の記号には「′」をつけて区別する．x，y，z 軸の単位ベクトルをそれぞれ，$\boldsymbol{i}$，$\boldsymbol{j}$，$\boldsymbol{k}$ とし，ひずみテンソルを $\boldsymbol{E}$ とする．ひずみテンソルの 1 行目を $\boldsymbol{e_x}$，2 行目を $\boldsymbol{e_y}$，3 行目を $\boldsymbol{e_z}$，とベクトルでおいて，これをひずみベクトルと呼ぶ．x'，y'，z'軸に対して，x 軸のなす角の方向余弦をα_1，α_2，α_3，y 軸のなす角の方向余弦をβ_1，β_2，β_3，z 軸のなす角の方向余弦をδ_1，δ_2，δ_3 とする．変換前の座標系のひずみを，変換後の座標系のひずみを用いて表す．変換前の単位ベクトルは変換後のものを使って次式のように書ける．

$$\begin{cases} \boldsymbol{i} = \alpha_1 \boldsymbol{i}' + \alpha_2 \boldsymbol{j}' + \alpha_3 \boldsymbol{k}', \\ \boldsymbol{j} = \beta_1 \boldsymbol{i}' + \beta_2 \boldsymbol{j}' + \beta_3 \boldsymbol{k}', \\ \boldsymbol{k} = \delta_1 \boldsymbol{i}' + \delta_2 \boldsymbol{j}' + \delta_3 \boldsymbol{k}'. \end{cases} \tag{C8}$$

変換後のひずみベクトルは次式のように書ける．

$$\begin{cases} \boldsymbol{e}'_{\boldsymbol{x}} = \varepsilon'_x \boldsymbol{i}' + \dfrac{1}{2}\gamma'_{xy}\boldsymbol{j}' + \dfrac{1}{2}\gamma'_{xz}\boldsymbol{k}', \\ \boldsymbol{e}'_{y} = \dfrac{1}{2}\gamma'_{yx}\boldsymbol{i}' + \varepsilon'_y \boldsymbol{j}' + \dfrac{1}{2}\gamma'_{yz}\boldsymbol{k}', \\ \boldsymbol{e}'_{\boldsymbol{x}} = \dfrac{1}{2}\gamma'_{zx}\boldsymbol{i}' + \dfrac{1}{2}\gamma'_{zy}\boldsymbol{j}' + \varepsilon'_z \boldsymbol{k}'. \end{cases} \tag{C9}$$

変換後のひずみテンソルは次式のように書ける.

$$\boldsymbol{E}' = \begin{bmatrix} \varepsilon'_x & \dfrac{1}{2}\gamma'_{xy} & \dfrac{1}{2}\gamma'_{xz} \\ \dfrac{1}{2}\gamma'_{yx} & \varepsilon'_x & \dfrac{1}{2}\gamma'_{yz} \\ \dfrac{1}{2}\gamma'_{zx} & \dfrac{1}{2}\gamma'_{zy} & \varepsilon'_x \end{bmatrix} = \boldsymbol{e}'_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{i}' + \boldsymbol{e}'_{y}\boldsymbol{j}' + \boldsymbol{e}'_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{k}'. \tag{C10}$$

元座標のひずみベクトル $\boldsymbol{e_x}, \boldsymbol{e_y}, \boldsymbol{e_z}$ は，元座標の単位ベクトル $\boldsymbol{i}, \boldsymbol{j}, \boldsymbol{k}$ と変換後のひずみテンソル $\boldsymbol{E}'$の内積なので（C11）～（C13）式のように書ける.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{x}} &= \boldsymbol{i}\boldsymbol{E}', \\ &= \left(\alpha_1 \boldsymbol{i}' + \alpha_2 \boldsymbol{j}' + \alpha_3 \boldsymbol{k}'\right)\left(\boldsymbol{e}'_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{i}' + \boldsymbol{e}'_{y}\boldsymbol{j}' + \boldsymbol{e}'_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{k}'\right), \\ &= \alpha_1 \boldsymbol{e}'_{\boldsymbol{x}} + \alpha_2 \boldsymbol{e}'_{y} + \alpha_3 \boldsymbol{e}'_{\boldsymbol{x}}, \\ &= \left(\alpha_1 \varepsilon'_x + \frac{1}{2}\alpha_2 \gamma'_{yx} + \frac{1}{2}\alpha_3 \gamma'_{zx}\right)\boldsymbol{i}' + \left(\frac{1}{2}\alpha_1 \gamma'_{xy} + \alpha_2 \varepsilon'_y + \frac{1}{2}\alpha_3 \gamma'_{zy}\right)\boldsymbol{j}' \\ &\qquad + \left(\frac{1}{2}\alpha_1 \gamma'_{xz} + \frac{1}{2}\alpha_2 \gamma'_{yz} + \alpha_3 \varepsilon'_z\right)\boldsymbol{k}'. \end{aligned} \tag{C11}$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{e}_{y} &= \boldsymbol{j}\boldsymbol{E}', \\ &= \left(\beta_1 \boldsymbol{i}' + \beta_2 \boldsymbol{j}' + \beta_3 \boldsymbol{k}'\right)\left(\boldsymbol{e}'_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{i}' + \boldsymbol{e}'_{y}\boldsymbol{j}' + \boldsymbol{e}'_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{k}'\right), \\ &= \beta_1 \boldsymbol{e}'_{\boldsymbol{x}} + \beta_2 \boldsymbol{e}'_{y} + \beta_3 \boldsymbol{e}'_{\boldsymbol{x}}, \\ &= \left(\beta_1 \varepsilon'_x + \frac{1}{2}\beta_2 \gamma'_{yx} + \frac{1}{2}\beta_3 \gamma'_{zx}\right)\boldsymbol{i}' + \left(\frac{1}{2}\beta_1 \gamma'_{xy} + \beta_2 \varepsilon'_y + \frac{1}{2}\beta_3 \gamma'_{zy}\right)\boldsymbol{j}' \\ &\qquad + \left(\frac{1}{2}\beta_1 \gamma'_{xz} + \frac{1}{2}\beta_2 \gamma'_{yz} + \beta_3 \varepsilon'_z\right)\boldsymbol{k}'. \end{aligned} \tag{C12}$$

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{e}_z &= \boldsymbol{k}\boldsymbol{E}' , \\
&= \left(\delta_1 \boldsymbol{i}' + \delta_2 \boldsymbol{j}' + \delta_3 \boldsymbol{k}'\right)\left(\boldsymbol{e}_x' \boldsymbol{i}' + \boldsymbol{e}_y' \boldsymbol{j}' + \boldsymbol{e}_x' \boldsymbol{k}'\right), \\
&= \delta_1 \boldsymbol{e}_x' + \delta_2 \boldsymbol{e}_y' + \delta_3 \boldsymbol{e}_x' , \\
&= \left(\delta_1 \varepsilon_x' + \frac{1}{2}\delta_2 \gamma_{yx}' + \frac{1}{2}\delta_3 \gamma_{zx}' \right)\boldsymbol{i}' + \left(\frac{1}{2}\delta_1 \gamma_{xy}' + \delta_2 \varepsilon_y' + \frac{1}{2}\delta_3 \gamma_{zy}' \right)\boldsymbol{j}' \\
&\qquad + \left(\frac{1}{2}\delta_1 \gamma_{xz}' + \frac{1}{2}\delta_2 \gamma_{yz}' + \delta_3 \varepsilon_z' \right)\boldsymbol{k}' .
\end{aligned}
\tag{C13}
$$

元座標のひずみは，元座標のひずみベクトル $\boldsymbol{e_x}, \boldsymbol{e_y}, \boldsymbol{e_z}$ と，元座標の単位ベクトル $\boldsymbol{i}, \boldsymbol{j}, \boldsymbol{k}$ の内積で表されるので（C14）～（C19）式のように書ける．

$$
\begin{aligned}
\varepsilon_x &= \boldsymbol{e}_x \boldsymbol{i} , \\
&= \alpha_1^2 \varepsilon_x' + \alpha_2^2 \varepsilon_y' + \alpha_3^2 \varepsilon_z' + \alpha_2 \alpha_3 \gamma_{yz}' + \alpha_3 \alpha_1 \gamma_{zx}' + \alpha_1 \alpha_2 \gamma_{xy}' .
\end{aligned}
\tag{C14}
$$

$$
\begin{aligned}
\varepsilon_y &= \boldsymbol{e}_y \boldsymbol{j} , \\
&= \beta_1^2 \varepsilon_x' + \beta_2^2 \varepsilon_y' + \beta_3^2 \varepsilon_z' + \beta_2 \beta_3 \gamma_{yz}' + \beta_3 \beta_1 \gamma_{zx}' + \beta_1 \beta_2 \gamma_{xy}' .
\end{aligned}
\tag{C15}
$$

$$
\begin{aligned}
\varepsilon_z &= \boldsymbol{e}_z \boldsymbol{k} , \\
&= \delta_1^2 \varepsilon_x' + \delta_2^2 \varepsilon_y' + \delta_3^2 \varepsilon_z' + \delta_2 \delta_3 \gamma_{yz}' + \delta_3 \delta_1 \gamma_{zx}' + \delta_1 \delta_2 \gamma_{xy}' .
\end{aligned}
\tag{C16}
$$

$$
\begin{aligned}
\gamma_{yz} &= 2\boldsymbol{e}_y \boldsymbol{k} , \\
&= 2\beta_1 \delta_1 \varepsilon_x' + 2\beta_2 \delta_2 \varepsilon_y' + 2\beta_3 \delta_3 \varepsilon_z' \\
&\qquad + \left(\beta_2 \delta_3 + \beta_3 \delta_2\right)\gamma_{yz}' + \left(\beta_1 \delta_3 + \beta_3 \delta_1\right)\gamma_{zx}' + \left(\beta_1 \delta_2 + \beta_2 \delta_1\right)\gamma_{xy}' .
\end{aligned}
\tag{C17}
$$

$$
\begin{aligned}
\gamma_{zx} &= 2\boldsymbol{e}_z \boldsymbol{i} , \\
&= 2\delta_1 \alpha_1 \varepsilon_x' + 2\delta_2 \alpha_2 \varepsilon_y' + 2\delta_3 \alpha_3 \varepsilon_z' \\
&\qquad + \left(\delta_2 \alpha_3 + \delta_3 \alpha_2\right)\gamma_{yz}' + \left(\delta_1 \alpha_3 + \delta_3 \alpha_1\right)\gamma_{zx}' + \left(\delta_1 \alpha_2 + \delta_2 \alpha_1\right)\gamma_{xy}' .
\end{aligned}
\tag{C18}
$$

$$
\begin{aligned}
\gamma_{xy} &= 2\boldsymbol{e}_x \boldsymbol{j} , \\
&= 2\alpha_1 \beta_1 \varepsilon_x' + 2\alpha_2 \beta_2 \varepsilon_y' + 2\alpha_3 \beta_3 \varepsilon_z' \\
&\qquad + \left(\alpha_2 \beta_3 + \alpha_3 \beta_2\right)\gamma_{yz}' + \left(\alpha_1 \beta_3 + \alpha_3 \beta_1\right)\gamma_{zx}' + \left(\alpha_1 \beta_2 + \alpha_2 \beta_1\right)\gamma_{xy}' .
\end{aligned}
\tag{C19}
$$

以上の結果より，$\{\boldsymbol{\varepsilon}\}=[\boldsymbol{q}]\{\boldsymbol{\varepsilon}'\}$とおくと$[\boldsymbol{q}]$は次式のように書ける．

$$[\boldsymbol{q}]=\begin{bmatrix} \alpha_1^2 & \alpha_2^2 & \alpha_3^2 & \alpha_2\alpha_3 & \alpha_3\alpha_1 & \alpha_1\alpha_2 \\ \beta_1^2 & \beta_2^2 & \beta_3^2 & \beta_2\beta_3 & \beta_3\beta_1 & \beta_1\beta_2 \\ \delta_1^2 & \delta_2^2 & \delta_3^2 & \delta_2\delta_3 & \delta_3\delta_1 & \delta_1\delta_2 \\ 2\beta_1\delta_1 & 2\beta_2\delta_2 & 2\beta_3\delta_3 & \beta_2\delta_3+\beta_3\delta_2 & \beta_1\delta_3+\beta_3\delta_1 & \beta_1\delta_2+\beta_2\delta_1 \\ 2\delta_1\alpha_1 & 2\delta_2\alpha_2 & 2\delta_3\alpha_3 & \delta_2\alpha_3+\delta_3\alpha_2 & \delta_1\alpha_3+\delta_3\alpha_1 & \delta_1\alpha_2+\delta_2\alpha_1 \\ 2\alpha_1\beta_1 & 2\alpha_2\beta_2 & 2\alpha_3\beta_3 & \alpha_2\beta_3+\alpha_3\beta_2 & \alpha_1\beta_3+\alpha_3\beta_1 & \alpha_1\beta_2+\alpha_2\beta_1 \end{bmatrix}. \quad \text{(C20)}$$

弾性ひずみエネルギーUは，次式のように書ける．

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{2}\{\boldsymbol{\sigma}\}^T\{\boldsymbol{\varepsilon}\}, \\ &= \frac{1}{2}\{[\boldsymbol{D}]\{\boldsymbol{\varepsilon}\}\}^T\{\boldsymbol{\varepsilon}\}, \\ &= \frac{1}{2}\{\boldsymbol{\varepsilon}\}^T[\boldsymbol{D}]^T\{\boldsymbol{\varepsilon}\}, \\ &= \frac{1}{2}\{\boldsymbol{\varepsilon}\}^T[\boldsymbol{D}]\{\boldsymbol{\varepsilon}\}. \end{aligned} \quad \text{(C21)}$$

座標変換後の弾性ひずみエネルギーU'は，次式のように書ける．

$$U' = \frac{1}{2}\{\boldsymbol{\varepsilon}'\}^T[\boldsymbol{D}']\{\boldsymbol{\varepsilon}'\}. \quad \text{(C22)}$$

$\{\boldsymbol{\varepsilon}\}=[\boldsymbol{q}]\{\boldsymbol{\varepsilon}'\}$であるので，$U$は，

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{2}\{[\boldsymbol{q}]\{\boldsymbol{\varepsilon}'\}\}^T[\boldsymbol{D}][\boldsymbol{q}]\{\boldsymbol{\varepsilon}'\}\}, \\ &= \frac{1}{2}\{\boldsymbol{\varepsilon}'\}^T[\boldsymbol{q}]^T[\boldsymbol{D}][\boldsymbol{q}]\{\boldsymbol{\varepsilon}'\}, \end{aligned} \quad \text{(C23)}$$

となる．座標変換しても弾性ひずみエネルギーは変わらない（$U=U'$）ので，座標変換後の弾性定数$[\boldsymbol{D}']$は次式のように書ける．

$$[\boldsymbol{D}'] = [\boldsymbol{q}]^T[\boldsymbol{D}][\boldsymbol{q}]. \quad \text{(C24)}$$

式（C24）を用いて，弾性マトリクスの座標変換を行う．

例として，結晶格子を[100]軸周りに$\pi/4$回転させた，[011]傾角粒界の場合の座標変換を示す．このとき，α, β, δは，

$$\begin{bmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 \\ \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 \\ \delta_1 & \delta_2 & \delta_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\pi/4 & \cos\pi/4 \\ 0 & \cos 3\pi/4 & \cos\pi/4 \end{bmatrix}, \tag{C25}$$

となる．式（C25）を（C20）に代入すると，

$$[q] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos^2\pi/4 & \cos^2\pi/4 & \cos^2\pi/4 & 0 & 0 \\ 0 & \cos^2 3\pi/4 & \cos^2\pi/4 & \cos^2\pi/4 & 0 & 0 \\ 0 & 2\cos\pi/4\cdot\cos 3\pi/4 & 2\cos^2\pi/4 & \cos\pi/4\cdot\cos 3\pi/4+\cos^2\pi/4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cos\pi/4 & \cos\pi/4 & \cos 3\pi/4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cos\pi/4 & \cos\pi/4 \end{bmatrix}, \tag{C26}$$

が得られる．式（C26）を式（C24）に代入することで座標変換された弾性マトリクス[$\boldsymbol{D'}$]が得られる．

謝辞

本論文は，北海道大学大学院工学院機械宇宙工学専攻博士後期課程における研究をまとめたものである．

研究の機会と懇切丁寧な御指導を賜った佐々木一彰教授に，この場を借りて深く感謝の意を表し，心より御礼申し上げます．

また，多くの御指導，御教示を賜った加藤博之准教授に，謹んで感謝の意を表し，厚く御礼申し上げます．

本論文の審査において，中村孝教授ならびに北見工業大学大橋鉄也教授には有益な御意見と御助言を賜りました．心から謝意を表します．

研究活動にあたり，小田憲司元助教ならびに材料力学研究室の諸兄，友人には，数々の御助力を賜りました．深く感謝いたします．

最後に，博士後期課程への進学に理解を示し，多くの支援と協力をして頂いた両親に深く感謝致します．

