

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	金属の塑性変形に伴う結晶方位変化についての回転行列の対数が与える特性角度による解析
Title(English)	
著者(和文)	林邦夫
Author(English)	Kunio Hayashi
出典(和文)	学位:博士(工学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第10832号, 授与年月日:2018年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:尾中 晋,梶原 正憲,木村 好里,寺田 芳弘,中田 伸生
Citation(English)	Degree:Doctor (Engineering), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第10832号, Conferred date:2018/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Type(English)	Doctoral Thesis

金属の塑性変形に伴う結晶方位変化についての
回転行列の対数を与える特性角度による解析

東京工業大学

総合理工学研究科 材料物理学専攻

林 邦夫
2018年3月

目次

第1章 序論	1
1.1 研究の背景	1
1.2 従来の研究概要	2
1.2.1 三次元での方向表記	3
1.2.2 塑性変形に伴う金属組織の変化	4
1.2.3 EBSDによる塑性変形後の結晶方位解析	5
1.3 本研究の目的	10
1.4 本論文の構成	10
参考文献	12
第2章 回転行列の対数が与える結晶方位に関する特性角度	13
2.1 緒言	13
2.2 回転行列の対数（対数角）による結晶方位解析	13
2.2.1 座標軸周りの回転の組み合わせ	13
2.2.2 回転行列の対数	16
2.2.3 対数 $\ln \mathbf{R}$ の成分についてのゴニオステージ模型による解釈	18
2.3 対数角とオイラー角の比較	24
2.4 結言	29
参考文献	30
Appendix（第2章）	31
A-2-1 スカラー λ の対数 $\ln \lambda$ の変化分	31
A-2-2 回転行列の対数を与える式	31

第3章 転位群により生じる結晶回転の対数角による解析.....	33
3. 1 緒言.....	33
3. 2 結晶方位変化.....	33
3. 2. 1 転位による結晶方位変化.....	33
3. 2. 2 結晶粒内の転位壁による結晶方位変化.....	34
3. 2. 3 微小回転における対数角.....	35
3. 2. 4 位置に依存した結晶方位の変化.....	36
3. 3 銅単結晶の冷間圧延による結晶方位変化.....	42
3. 3. 1 銅単結晶の冷間圧延および冷間圧延後の結晶方位.....	42
3. 3. 2 対数角の変化.....	43
3. 4 結論.....	49
参考文献.....	50
第4章 極低炭素鋼の塑性変形に伴う結晶回転の解析.....	51
4. 1 緒言.....	51
4. 2 実験方法.....	52
4. 3. 1 すべり線観察.....	55
4. 3. 2 結晶回転の解析.....	55
4. 3. 3 活動すべり系の解析.....	57
4. 3. 4 結晶回転軸の解析.....	58
4. 4 考察.....	67
4. 5 結言.....	73
参考文献.....	74
Appendix (第4章).....	75

A-4-1	回転行列と axis angle pair の関係.....	75
A-4-2	転位列に起因した結晶回転の回転軸.....	75
第5章	結論.....	79
5.1	本論文の総括.....	79
5.2	今後の展望.....	81
	本博士論文に関係した投稿論文.....	82
	謝辞.....	83

第1章 序論

1. 1 研究の背景

工業的な観点から、金属材料の高機能化が社会にもたらす利点が多い。例えば鉄鋼材料やアルミ材料が使用される自動車のボディー部品においては、近年、燃費と衝突安全性の向上が要求されており、重量比強度の高い材料が望まれている。一般に、金属材料を高強度化した場合、プレス成形性指標の一つである引張延性などの加工性や、繰り返し応力に対する疲労特性など、種々の機械的特性は劣化する傾向にあるため、これを最小限に抑制しながら高強度化を図る事が、材料の高機能化に重要な要素となる。これらの機械特性は、塑性変形に伴う金属材料内部での組織変化が密接に関係している。この関係を理解するため、これまでに様々な研究がなされてきた。中でも、塑性変形に伴う金属材料の結晶方位とその変化は、材料内部の転位下部組織の発達や、結晶粒径の微細化などの素過程を知る上で、非常に重要な指標となる¹⁻³⁾。塑性変形に伴う欠陥や転位の導入により、金属材料の内部では転位組織の発達、結晶粒の分裂などが起こり、機械的性質に大きな変化をもたらす。

従来、結晶方位の解析は、X線回折によりマクロ領域の平均的な情報を取得したり、透過型電子顕微鏡 (Transmission Electron Microscope: TEM) を用いて電子回折パターン解析により非常に局所的な結晶方位を解析したりする事が主要な方法であった。しかし近年では、電界放射型走査型電子顕微鏡 (Field Emission Scanning Electron Microscope: FE-SEM) を用いた後方散乱電子回折 (Electron Back Scatter Diffraction: EBSD) により、100 μm 以上の範囲であってもサブミクロンオーダーの分解能で結晶方位情報が得られるようになってきた。この EBSD によ

る結晶方位解析の進歩により，従来系統的な解析が容易では無かった塑性変形に伴う金属組織の変化を解析できるようになってきた。

以上のように，金属材料の塑性変形を理解することは，学術的な進歩だけでなく，工業的にもその重要性は増してきており，これまで以上に局所的な結晶方位の変化に対する機械的性質の変化や，塑性変形に伴う組織変化の需要度が増している。

本論文では，結晶方位の場所による変化を評価する新しい方法として，回転行列 \mathbf{R} の対数 $\ln \mathbf{R}$ により求まる三つの独立な特性角度を使った結晶方位解析方法を提案する．この対数角を，塑性変形後の金属材料における場所による結晶方位の変化に対し適用し，金属材料中に堆積した転位群と結晶方位の回転との関係を明らかにすることを目的とする。

1. 2 従来の研究概要

前節で述べたように，本研究では結晶方位の新しい解析手法として，回転行列 \mathbf{R} の対数 $\ln \mathbf{R}$ により与えられる三つの特性角度を導入し，塑性変形後の金属組織の結晶方位解析を行う．このため，以下の分類で従来研究をまとめる。

- ・ 三次元での方向表記

結晶方位の表記方法の代表的な例として，行列表記，オイラー角表記，**axis/angle pair** 表記について概要を述べる。

- ・ 塑性変形に伴う金属組織の変化

金属材料は，塑性変形により転位などの欠陥が導入され，その組織が変化する．塑性変形に伴う金属組織の変化について過去の研究概要を述べ

る.

・ EBSD による塑性変形後の結晶方位解析

塑性変形後の金属材料に対する結晶方位解析として, EBSD を用いた手法について過去の研究概要を述べる.

1. 2. 1 三次元での方向表記

結晶方位は, 三次元での方向表記により表される. この表記方法は複数存在し, 三次直交行列, オイラー角, axis/angle pair などがある.

三次直交行列による表記では¹⁾, 基準となる座標系を定義したのち, その基準座標系に対し, 行列式の値が 1 となる三次直交行列である回転行列 \mathbf{R} を用いて表される. 例えば, 圧延による結晶方位変化を考える場合には, 基準座標系を RD : 圧延方向, TD : 側面法線方向, ND : 圧延面法線方向と定義し, それぞれの座標軸が結晶座標系の座標軸と一致するために必要な結晶回転で表記される.

オイラー角²⁾による表記では, 基準座標軸である三つの直交する軸周りの回転により表され, 二つ以上の回転軸組み合わせにより, \mathbf{R} と等価な結晶回転を表記することが可能となる. 直交座標系の座標軸を, x 軸, y 軸, z 軸とすると, その組み合わせは 12 通り存在し, 作用させる回転軸およびその順番を指定する事により, 初めて回転行列 \mathbf{R} との対応が明確となる. 例えば, 圧延による集合組織の発達や再結晶組織の形成に関しては, z 軸, x 軸, z 軸の順で回転させる Bunge の表記方法²⁾が広く用いられる. その他にも Roe および Kocks の表記方法²⁾が知られており, 各々, 作用させる回転軸とその順番が異なる.

axis/angle pair による表記では³⁾, 基準座標系において回転の軸を表す単位ベ

クトル $\mathbf{V} = (h, k, l)$ と、その回転軸周りの回転角 Φ ($0 \leq \Phi \leq \pi$) で表現される。

第2章で詳細を述べるが、三次直交行列や axis/angle pair による三次元方向表記は、その行列の成分や回転角からは直感的に回転の方向や量を理解することが難しい。また、オイラー角表記では、回転軸の選択や回転の順序に任意性があり、一意に決まらないという課題がある。

1. 2. 2 塑性変形に伴う金属組織の変化

塑性変形による金属材料中の組織変化について、Hansen⁴⁾および Hughes⁵⁾が、2001年にそれまでの研究を review している。これらの報告では、圧延などの強加工によって形成される微細組織に関し、その結晶粒界の間隔や角度、そして変形前後の集合組織の変化に着目し、これら組織変化と機械的性質との関係をまとめている。当時の転位組織解析や結晶方位解析は、主に TEM や X 線回折により実施されていた。このため Fig. 1-1 に示すように⁴⁾、局所的な結晶方位解析の分解能は、TEM の制限視野回折パターン (Selected Area Diffraction Pattern: SADP) の分解能に制限されており、広範囲の結晶方位をサブミクロンサイズの高分解能で取得可能な EBSD の普及は十分ではなかった。このような転位組織の形成過程に関し、理論的な検討もなされており⁶⁾、近年では、例えば Galindo-Nava ら⁷⁾が塑性変形により金属材料内で生じるエントロピー変化から、転位セル組織のサイズや結晶方位差などの予測について報告している。

塑性変形によって生じる結晶粒微細化の素過程に関し、Bay ら⁸⁾および Hughes ら⁹⁾は、同一の結晶粒内であっても場所により異なるすべり系が活動し、異なる方位に結晶回転が起こることが原因であることに言及している。このように結

晶回転の方向が同一粒内で異なることに起因し、Geometrically Necessary Dislocations (GNDs)¹⁰がそれらの境界領域で導入され、結晶方位の不整合を緩和すると考えられている。

1. 2. 3 EBSD による塑性変形後の結晶方位解析

EBSD などで取得した結晶方位情報を用い、金属材料中の歪量や結晶方位変化について、様々な解析手法の確立が進められている。例えば、Dorner ら¹¹)は、Fe-2.5mass%Si の双結晶を圧縮試験後に、断面の EBSD による結晶方位解析を行い、結晶粒界付近での不均一変形による変形帯の形成について報告している。また、TSL 社製の OIM Analysis に実装されている結晶方位情報のデータ処理方法の代表例として、Kernel Average Misorientation (KAM)および Grain Reference Orientation Deviation (GROD)などがある。Fig. 1-2 に、Hexagonal grid で測定した場合の、KAM および GROD の定義を模式的に示す¹²)。これらは、以下のように定義される。

KAM は、各解析対象点における、周囲の測定点との方位差の平均を示す。結晶粒の内部では、隣接する測定点との方位差が規定の角度（例えば 10°）未満になる場合が多いため、隣接する全ての点との方位差の平均より計算される。一方、結晶粒界付近のように、隣接する測定点との方位差が規定の角度（例えば 10°）以上になり、結晶粒界を横切る場合には、それらの点は平均化の対象から除外する。これを位置 i における KAM_i として表すと、下記のようになる。

$$KAM_i = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \Delta\Phi_{ij}, (\Delta\Phi_{ij} < \Phi_c) \quad (1-1)$$

ここで $\Delta\Phi_{ij}$ は、解析対象点 i と隣接点 j との方位差、 Φ_c は同一の結晶粒内と判

定する結晶方位差の最大値， N は $\Delta\Phi_{ij} < \Phi_c$ を満たす隣接測定点の数である．解析対象点 i と隣接測定点 j との距離は，EBSDで測定したステップ間隔に依存する．このため，最近接点だけでなく，第二近接以上の測定点を選択する事も可能である．

GRODは，結晶粒内の基準方位と，同一の結晶粒内の解析対象点との方位差を示す値である．基準方位の取り方は，結晶粒内でKAMが最低となる方位を選択する場合や，結晶粒内の平均方位を選択する場合があります，位置 i における $GROD_i$ は下記のように定義される．

$$GROD_i = \Phi_{i-ref.} \quad (1-2)$$

ここで $\Phi_{i-ref.}$ は，解析対象点 i における方位と同一結晶粒内の基準点 $ref.$ における方位との差である．

例えば Kobayashi ら¹³⁾が，Ni基超合金におけるクリープ疲労試験後の組織解析において，EBSDにより測定した結晶方位情報をGRODにより解析し，局所的な結晶方位の角度変化と疲労試験サイクル数との関係を報告している．Fig.1-3に示すように，形状の異なる二種類の試験片のいずれにおいても，疲労試験のサイクル数の増加と共に，測定領域内のGRODの平均値は増加していることがわかる．このような解析により，塑性変形後の金属材料中における結晶方位の回転と，転位組織との発達とを結びつけた報告がなされている．

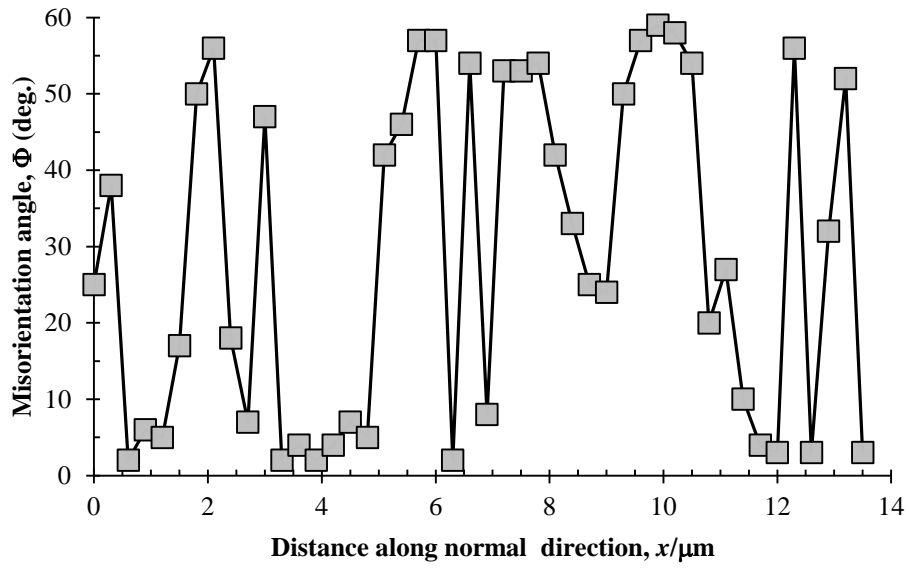
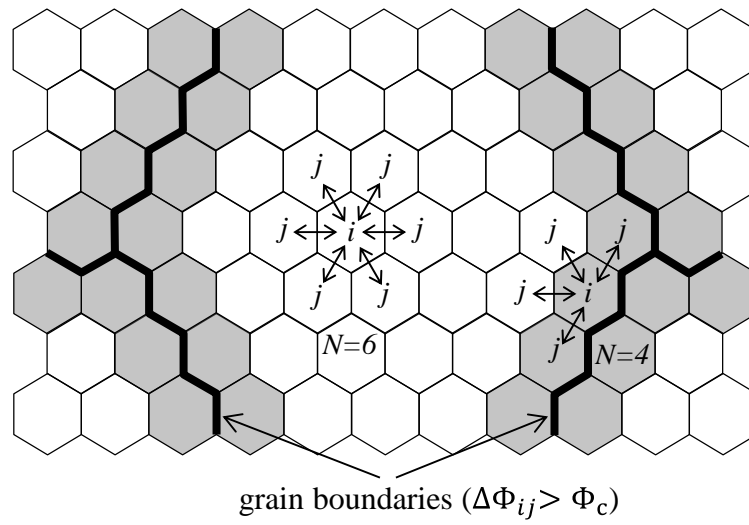


Fig. 1-1 The changes of misorientation angle across the lamellar boundaries measured along normal direction for cold rolled commercial purity aluminum⁴⁾.

a)



b)

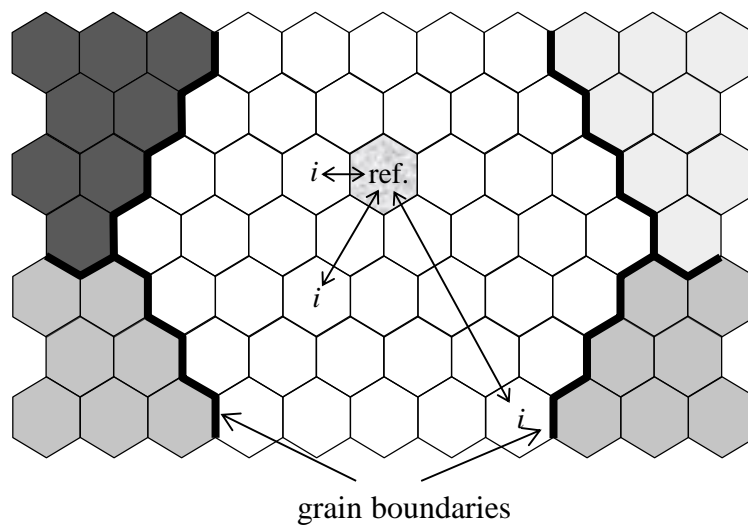


Fig. 1-2 Definition of a) Kernel Average Misorientation (KAM), b) Grain Reference Orientation Deviation (GROD)¹²⁾.

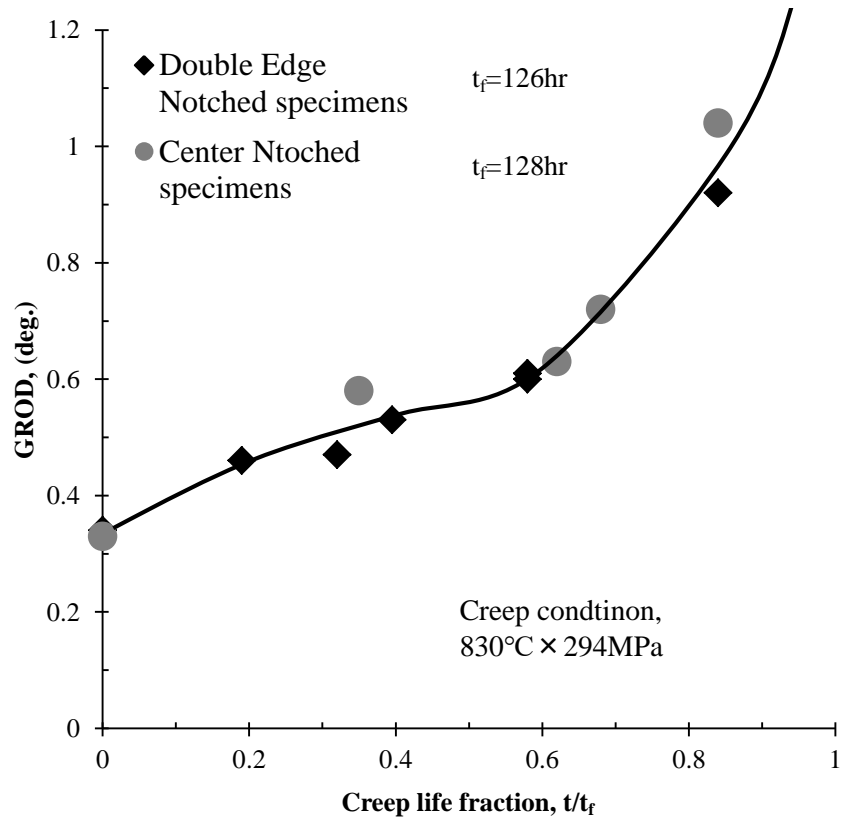


Fig. 1-3 Relationship between creep life fractions and GROD (analysis area average) in the case of using double edge notched specimens and center notched specimens. t and t_f are interrupted time and time to rupture, respectively¹³⁾.

1. 3 本研究の目的

前述の通り，従来の結晶方位の表現方法では，基準座標系の座標軸周りの回転量を直感的に理解することが難しい．さらにオイラー角による表記では，回転軸の選択および順序により，同一の回転行列 \mathbf{R} に対し回転軸の選択やその順序に任意性が存在し，一意に回転角が決まらない．

塑性変形後の金属材料の組織変化は，種々の機械的性質に影響を及ぼすことから，これまで多くの研究がなされてきている．近年の EBSD の普及に伴い，従来に比べ局所的な結晶方位の変化を議論できるようになってきている．ただし，結晶方位情報の解析手法は，主に局所的な結晶方位差である角度情報のみを扱うことが多く，その回転軸の変化や任意の基準座標軸周りの回転角に関する解析手法の確立は，未だ十分に発展していると言え難い．

そこで本研究では，回転行列 \mathbf{R} の対数 $\ln \mathbf{R}$ から得られる三つの特性角度を対数角と呼び，金属材料中に堆積した転位群とそれによりもたらされる結晶方位回転との関係を明らかにすることを目的とする．

1. 4 本論文の構成

本研究では，結晶方位を表記する新しい手法として対数角を定義し，その有用性を示すため，塑性変形後の金属材料の結晶方位の変化を，対数角を用いて解析した．第2章では，対数角の導出過程およびオイラー角表示との差を示した．第3章では，材料中に堆積した転位群による結晶方位の変化を，対数角を用いて解析した．第4章では，転位のバーガスベクトルと結晶回転軸の関係を，対数角を用いて解析した．以下に，具体的な各章の内容を示す．

第1章：「序論」

研究の背景と過去の研究についてまとめ、本研究の目的を示した。

第2章：「回転行列の対数が与える結晶方位に関する特性角度」

対数角の導出過程とそれを表すゴニオステージ模型を示し、オイラー角や **axis/angle pair** と対数角との差異を述べる。更に、オイラー角と対数角を具体的に比較する事で、対数角が直感的に回転の方向や角度を理解できるだけでなく、回転行列 **R** に対し一意に決まる特性角度である事を示す。

第3章：「転位群により生じる結晶回転の対数角による解析」

転位群によって生じる結晶回転に対し、対数角を用いた解析手法について示した後、冷間圧延により純銅単結晶中に堆積した転位群による結晶回転を、対数角を用いて解析する。

第4章：「極低炭素鋼の塑性変形に伴う結晶回転の解析」

10%の単純せん断変形を多結晶極低炭素鋼に付与し、試験片の表面のすべり線と結晶方位を解析する。活動したすべり系が異なる領域の間に生成する遷移領域について、それを横切るラインスキャン上の解析により、活動すべり系から推定したバーガスベクトルと結晶回転軸との関係を、対数角を用いて解析する。

第5章：「結論」

第2章から第4章までの研究について、総括する。

参考文献

- 1) D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev and V. K. Khersonskii: Quantum Theory of Angular Momentum, (World Scientific, Singapore, 1998).
- 2) U. F. Kocks, C. N. Tome and H.-R. Wenk: Texture and Anisotropy, (Cambridge University press, Cambridge, 2000) pp57-77.
- 3) H. Grimmer: Acta Cryst. A, **40** (1984) 108-112.
- 4) N. Hansen: Metall. Mater. Trans. A, **32** (2001) 2917-2935.
- 5) D. A. Hughes: Mater. Sci. Eng. A, **319-321** (2001) 46-54.
- 6) W. Pantleon: Acta Mater., **46** (1998) 451-456.
- 7) E. I. Galindo-Nava and P. E. J. Rivera-Diaz-del-Castillo: Acta Mater., **60** (2012) 4370-4378.
- 8) B. Bay, N. Hansen, D. A. Hughes and D. Kuhlmann-Wilsdorf: Acta Metall. Mater., **40** (1992) 205-219.
- 9) D. A. Hughes and N. Hansen: Acta Mater., **45** (1997) 3871-3886.
- 10) M. F. Ashby: Phil. Mag., **21** (1970) 399-424.
- 11) D. Dorner, Y. Adachi and K. Tsuzaki: ISIJ Int., **48** (2008) 1102-1106.
- 12) M. Takasuga, M. Wakita, E. Nakayama, M. Miyahara and T. Nishio: Trans. Jpn. Soc. Mech. Eng. A, **76** (2010) 716-722.
- 13) D. Kobayashi, M. Miyabe, Y. Kagiya, Y. Nagumo, R. Sugiura, T. Matsuzaki and A. T. Yokobori Jr: Mater. Sci. Tech., **30** (2014) 24-31.

第2章 回転行列の対数が与える結晶方位に関する特性角度

2. 1 緒言

結晶方位の表記は、一般に合計九つの互いに値が異なる成分を持つ回転行列 \mathbf{R} で表すことができる¹⁾が、塑性変形などによる結晶方位の変化を \mathbf{R} そのものの変化から直感的に理解する事は困難である。そこで、 \mathbf{R} の代わりに基準座標系の各座標軸周りの三つの回転角度の組であるオイラー角²⁾が使われることがある。オイラー角は12種類の組み合わせが存在し、作用させる回転軸とその順番の組み合わせにより、同一の \mathbf{R} に対する三つの回転角度の値は異なる。

ところで、数の指数関数や対数関数と同様に、級数和の形式で行列の指数関数や対数を定義することができる³⁻⁵⁾。回転行列 \mathbf{R} の対数 $\ln \mathbf{R}$ は、三つの独立な実数成分を持つ反対称テンソルであることが知られている³⁻⁵⁾。本研究では、 $\ln \mathbf{R}$ の三つの独立な成分が、 \mathbf{R} の作用によりもたらされる回転を直感的に理解するために有用な表記方法であることを示す。そして、本研究において対数角と呼ぶ $\ln \mathbf{R}$ の三つの成分が、種々の方法で定義されるオイラー角と異なり、 \mathbf{R} による回転を一意的表現できる有用な特性角であることを示す。

2. 2 回転行列の対数（対数角）による結晶方位解析

2. 2. 1 座標軸周りの回転の組み合わせ

直交座標系の座標軸、 x 軸、 y 軸、 z 軸周りの回転を示す行列をそれぞれ \mathbf{R}_x 、 \mathbf{R}_y 、 \mathbf{R}_z とし、各軸周りの回転角をそれぞれ θ, φ, ψ とすると、各軸周りの回転行列の成分は以下のように書ける。

$$\mathbf{R}_x(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (2-1-a)$$

$$\mathbf{R}_y(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & 0 & \sin \varphi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \varphi & 0 & \cos \varphi \end{pmatrix} \quad (2-1-b)$$

$$\mathbf{R}_z(\psi) = \begin{pmatrix} \cos \psi & -\sin \psi & 0 \\ \sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2-1-c)$$

これらの各座標軸回りの回転を、二つ以上の座標軸の適当な組み合わせにより、任意の三次元的な回転が達成できる。例えば、以下の式(2-2)の右辺の順番で \mathbf{R}_x , \mathbf{R}_y , \mathbf{R}_z の積として与えられる \mathbf{R} を、それらそれぞれの回転角を θ_1 , φ_1 , ψ_1 として考える。

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_x(\theta_1) \mathbf{R}_y(\varphi_1) \mathbf{R}_z(\psi_1) \quad (2-2)$$

式(2-2)の右辺のような三つの異なる軸周りの回転を組み合わせた状況を具体的にイメージするためには、Fig.2-1 に示すような三軸回転の機能を持つゴニオメーター・ステージ模型（ゴニオステージ模型）⁶⁾が有効である。この模型は、最上部の結晶の下に基準 x - y - z 座標系での三つの回転座標軸が置かれており、固定されたこの座標と縦並びの三つの部品の上部に乗った結晶の x' 軸, y' 軸, z' 軸の方向のあいだの関係を \mathbf{R} の作用として考えることになる。この \mathbf{R} の作用とは、結晶の x' 軸, y' 軸, z' 軸の方向の基準 x - y - z 座標系の座標軸方向からの回転であり、回転後の結晶の x' 軸, y' 軸, z' 軸の方向は、基準 x - y - z 座標系のもとで以下のように与えられる。

$$x' \text{ 軸} // \mathbf{R} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, y' \text{ 軸} // \mathbf{R} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, z' \text{ 軸} // \mathbf{R} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2-3)$$

式(2-2)の右辺は、 $\mathbf{R}_z(\psi_1)$, $\mathbf{R}_y(\varphi_1)$, $\mathbf{R}_x(\theta_1)$ なる連続した回転を、すべてを基準 x - y - z 座標系に対する回転として、この順番で行うことを意味している。Fig. 2-1

に示されている重ねられた三つの部品において、それらを単独で動作させた場合の動きは、一番下の部品が \mathbf{R}_x 、真ん中の部品が \mathbf{R}_y 、一番上の部品が \mathbf{R}_z に相当する。上の部品を回転させてもその下の部品の回転軸は変化しないので、以下の三つの操作、

1. 一番上の部品、 \mathbf{R}_z を ψ_1 だけ回転、
2. 真ん中の部品、 \mathbf{R}_y を φ_1 だけ回転、
3. 一番下の部品、 \mathbf{R}_x を θ_1 だけ回転

をこの順番で行えば、Fig. 2-1 の状況が式(2-2)の右辺と同じ状況であることがわかる。

以上のように、Fig. 2-1 のゴニオステージ模型は、式(2-2)で与えられる \mathbf{R} をこの場合のオイラー角 $(\theta_1, \varphi_1, \psi_1)$ と対応させるものである。教科書におけるオイラー角の説明においては、しばしば、ある軸周りの回転によって、その次の軸周りの回転の回転軸が変化すると述べられている^{2,7)}。この状況は、Fig. 2-1 のゴニオステージ模型で、前節の説明の際の上の部品から下の部品に向かっての操作ではなく、下の部品から上の部品に向かっての操作を続けた状況に相当している。つまり、Fig. 2-1 のゴニオステージ模型の部品を、上から下へ、あるいは下から上へのどちらの順番で操作するかによって回転の進行状況は異なるが、三つの部品のそれぞれ回転角が同一なら最終的な結晶の回転は無論、同一である。

集合組織の解析においてはしばしば、Bunge のオイラー角²⁾と呼ばれる三つの角度の組が使われるが、これに相当するゴニオステージ模型は、 x 軸周りの回転をもたらす部品が、上下の z 軸周りの回転をもたらす二つの部品ではさまれた構造になる。また、線型代数の教科書で説明されているオイラー角⁷⁾に対応するゴ

ニオステージ模型は、 y 軸周りの回転をもたらす部品が、上下の z 軸周りの回転をもたらす二つの部品ではさまれた構造である。二種類以上、合計で三つの部品を適当に組み合わせた様々なゴニオステージ模型について、それらのオイラー角が定義できることになる。このようにオイラー角には種々の定義があり得る²⁾が、いずれの定義のオイラー角でも、ある \mathbf{R} についての基準軸周りの回転角成分を厳密に表現することはできない。これは、Fig. 2-1 のようなゴニオステージ模型において、それを構成する部品の種類や順番が異なれば、ある方位を達成するための各部品の回転角が一般に異なるためである。同じことは、以下の様にも理解できる。つまり、行列の積において交換法則は一般には成立せず、回転角度が同じで回転行列の順番を変えると

$$\mathbf{R}_x(\theta_1)\mathbf{R}_y(\varphi_1)\mathbf{R}_z(\psi_1) \neq \mathbf{R}_y(\varphi_1)\mathbf{R}_z(\psi_1)\mathbf{R}_x(\theta_1) \quad (2-4)$$

のように行列の積の値は変化し、また、積の順番が異なる

$$\mathbf{R}_x(\theta_1)\mathbf{R}_y(\varphi_1)\mathbf{R}_z(\psi_1) = \mathbf{R}_y(\varphi_2)\mathbf{R}_z(\psi_2)\mathbf{R}_x(\theta_2) \quad (2-5)$$

のような場合ならば、等号成立のためには

$$\theta_1 \neq \theta_2, \varphi_1 \neq \varphi_2, \psi_1 \neq \psi_2 \quad (2-6)$$

となる。ただし、後に述べるように、回転角度が微小であり、一次の微小量までの \mathbf{R} の成分を扱う場合には交換法則は成立するとみなせる。

2. 2. 2 回転行列の対数

二次元における回転行列 \mathbf{R}_{2D} ,

$$\mathbf{R}_{2D} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (2-7)$$

の対数 $\ln \mathbf{R}_{2D}$ は、回転角 θ そのものを成分とする反対称テンソルであり、

$$\ln \mathbf{R}_{2D} = \begin{pmatrix} 0 & -\theta \\ \theta & 0 \end{pmatrix} \quad (2-8)$$

となる³⁻⁵⁾. 三次元における回転は, Fig. 2-2 に示す様に, axis/angle pair と呼ばれる回転軸を示す単位ベクトル $\mathbf{V} = (h, k, l)$ と, その軸周りの回転角 Φ ($0 \leq \Phi \leq \pi$) で表現されることもある. この $\mathbf{V} = (h, k, l)$ 周りの Φ の回転は行列表現で

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} (1-h^2)\cos\Phi + h^2 & hk(1-\cos\Phi) - l\sin\Phi & lh(1-\cos\Phi) + k\sin\Phi \\ hk(1-\cos\Phi) + l\sin\Phi & (1-k^2)\cos\Phi + k^2 & kl(1-\cos\Phi) - h\sin\Phi \\ lh(1-\cos\Phi) - k\sin\Phi & kl(1-\cos\Phi) + h\sin\Phi & (1-l^2)\cos\Phi + l^2 \end{pmatrix} \quad (2-9)$$

となる⁸⁾. この \mathbf{R} の対数 $\ln \mathbf{R}$ は, $\mathbf{V} = (h, k, l)$ と Φ によって以下の様な反対称テンソルになる⁷⁾.

$$\ln \mathbf{R} = \begin{pmatrix} 0 & -l\Phi & k\Phi \\ l\Phi & 0 & -h\Phi \\ -k\Phi & h\Phi & 0 \end{pmatrix} \quad (2-10)$$

対数 $\ln \mathbf{R}$ の三つの独立な成分, $h\Phi$, $k\Phi$, $l\Phi$ を, 本研究では対数角と呼ぶことにする.

行列の対数は, ストレッチテンソルから Hencky ひずみを求める際にも使われている⁹⁻¹²⁾. この場合の計算の手続きは,

1. 座標変換によるストレッチテンソル (正値対称行列) の対角化
2. 対角化したストレッチテンソル (主ストレッチテンソル) の対数計算
(正値対角行列の対数は, 対角成分の対数を成分とする行列)
3. 対数計算を行った行列のもとの座標系への座標変換

であった⁹⁾. 回転行列の対数を求めるための手続きも基本的はこの手続きと同じであるが, 途中の計算では複素数が必要になる^{4,5)}. また, 対数の意味より, 上記の手続きとは異なる方法で式(2-8)と(2-10)が導出できることを Appendix に示

した。

2. 2. 3 対数 $\ln \mathbf{R}$ の成分についてのゴニオステージ模型による解釈

回転行列 \mathbf{R} とその対数 $\ln \mathbf{R}$ のあいだの関係は、 \mathbf{E} を単位行列として

$$\mathbf{R} = \lim_{p \rightarrow \infty} \left(\mathbf{E} + \frac{\ln \mathbf{R}}{p} \right)^p \quad (2-11)$$

となる⁷⁾。この関係は、実数 λ の指数関数について、

$$e^\lambda = \lim_{p \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{\lambda}{p} \right)^p \quad (2-12)$$

が成立し、 $\eta = e^\lambda$ として η とその対数 $\ln \eta$ のあいだの関係が

$$\eta = \lim_{p \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{\ln \eta}{p} \right)^p \quad (2-13)$$

となることを行列に拡張したものである。

式(2-10)と(2-11)より、 N を十分に大きな正の整数とすれば、

$$\delta \mathbf{R} = \mathbf{E} + \frac{\ln \mathbf{R}}{N} = \begin{pmatrix} 1 & -l\Phi/N & k\Phi/N \\ l\Phi/N & 1 & -h\Phi/N \\ -k\Phi/N & h\Phi/N & 1 \end{pmatrix} \quad (2-14)$$

として、

$$\mathbf{R} \approx (\delta \mathbf{R})^N \quad (2-15)$$

を得る。この式は、 $\delta \mathbf{R}$ なる行列で与えられる回転を N 回連続で行うと、 \mathbf{R} なる

行列で与えられる回転と同じになることを意味する。また、式(2-14)の $\delta \mathbf{R}$ は、

式(2-9)の右辺の角度 Φ を Φ/N ($|\Phi/N| \ll 1$) で置き換えて、 $\sin(\Phi/N) \approx \Phi/N$ 、

$\cos(\Phi/N) \approx 1$ としたときの結果になっている。さらに

$$\delta\theta = h\Phi/N, \delta\varphi = k\Phi/N, \delta\psi = l\Phi/N \quad (2-16)$$

と考えると，式(2-1-a)から(2-1-c)より

$$\begin{aligned}
\delta\mathbf{R} &\approx \mathbf{R}_x(h\Phi/N)\mathbf{R}_y(k\Phi/N)\mathbf{R}_z(l\Phi/N) \\
&= \mathbf{R}_x(\delta\theta)\mathbf{R}_y(\delta\varphi)\mathbf{R}_z(\delta\psi) \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\delta\theta) & -\sin(\delta\theta) \\ 0 & \sin(\delta\theta) & \cos(\delta\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\delta\varphi) & 0 & \sin(\delta\varphi) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\delta\varphi) & 0 & \cos(\delta\varphi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\delta\psi) & -\sin(\delta\psi) & 0 \\ \sin(\delta\psi) & \cos(\delta\psi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
&\approx \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\delta\theta \\ 0 & \delta\theta & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \delta\varphi \\ 0 & 1 & 0 \\ \delta\varphi & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\delta\psi & 0 \\ \delta\psi & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
&\approx \begin{pmatrix} 1 & -\delta\psi & \delta\varphi \\ \delta\psi & 1 & -\delta\theta \\ -\delta\varphi & \delta\theta & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{2-17}$$

を得る．回転角が微小なので，この式の右辺の積 $\mathbf{R}_x\mathbf{R}_y\mathbf{R}_z$ の順番が変化してもこの関係は成立する．

Fig. 2-3 は，上記の状況をゴニオステージ模型で示したものである．ここでは， x 軸， y 軸， z 軸周りに，それぞれ，微小な角度 $h\Phi/N$ ， $k\Phi/N$ ， $l\Phi/N$ だけ回転させる部品が重なって一つのユニットを構成し，そのユニットがさらに N 個重なっている．三つの部品のみで構成される Fig. 2-1 の状況では，部品の並ぶ順番が異なると，同じ \mathbf{R} に対しても， x 軸， y 軸， z 軸，各軸周りの回転角は変化する．これに対し，微小な角度を回転させる数多くの部品で構成される Fig. 2-3 の状況では，ある \mathbf{R} に対する， x 軸， y 軸， z 軸，各軸周りの回転角の総和， $h\Phi$ ， $k\Phi$ ， $l\Phi$ は一意的に決まる．

Fig. 2-3 の状況より，各座標軸周りの回転角の分割と分割した回転の各座標軸での逐次実行という意味において，対数角 $h\Phi$ ， $k\Phi$ ， $l\Phi$ は回転角 Φ を各座標軸

へ分解した成分とみなせる。回転軸 \mathbf{V} がある座標軸と平行に近ければ、当然、その座標軸周りの回転角の成分は大きい。また、この回転角の分割、分割した回転の各座標軸での逐次実行は、各座標軸回りでの対数角だけの回転を一斉に行った結果であると解釈することもできる。

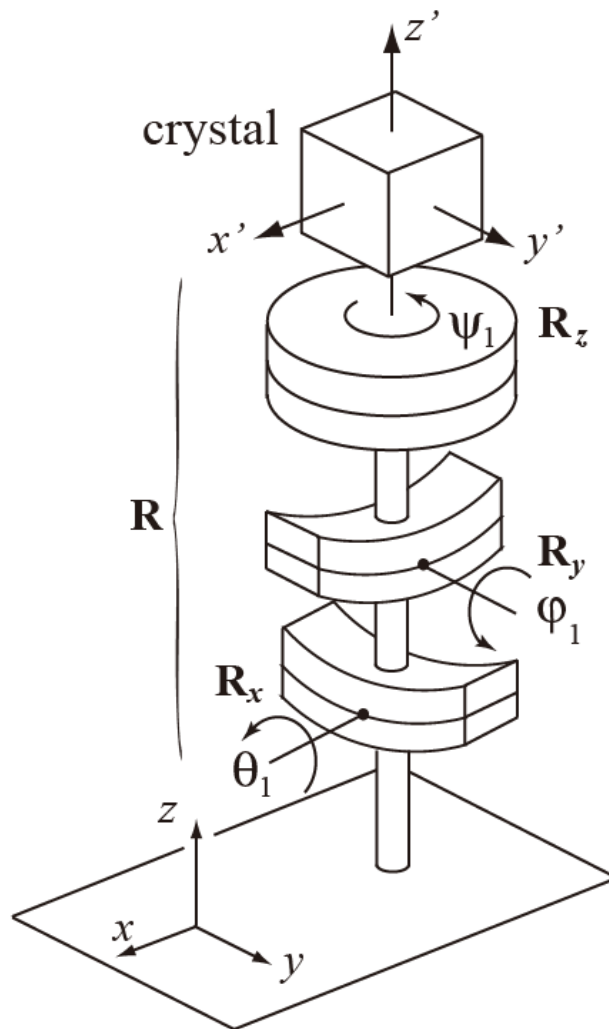


Fig. 2-1 A goniometer-stage model to represent the rotation given by equation (2-2) with the Euler angles θ_1 , φ_1 and ψ_1 .

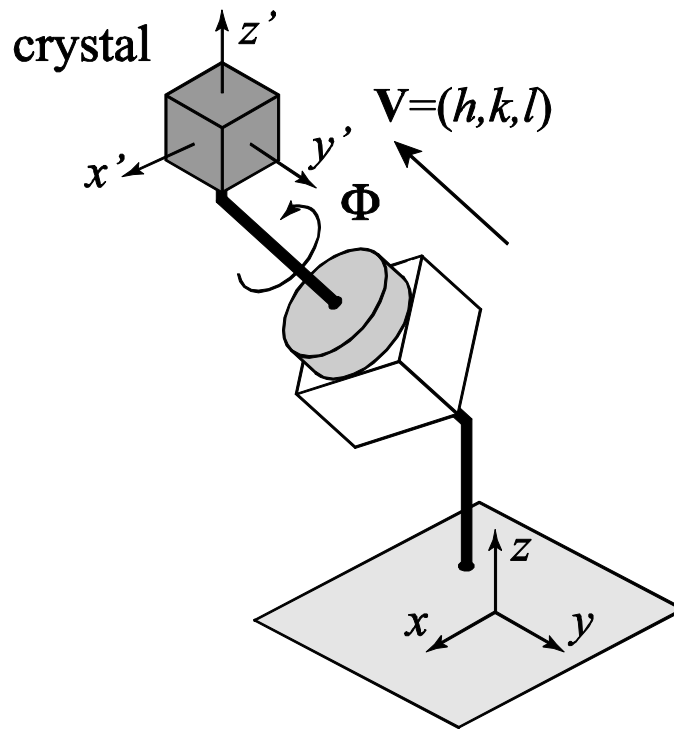


Fig. 2-2 A model showing the rotation of a crystal with respect to the x - y - z reference frame given by the axis/angle pair (\mathbf{V}, Φ) .

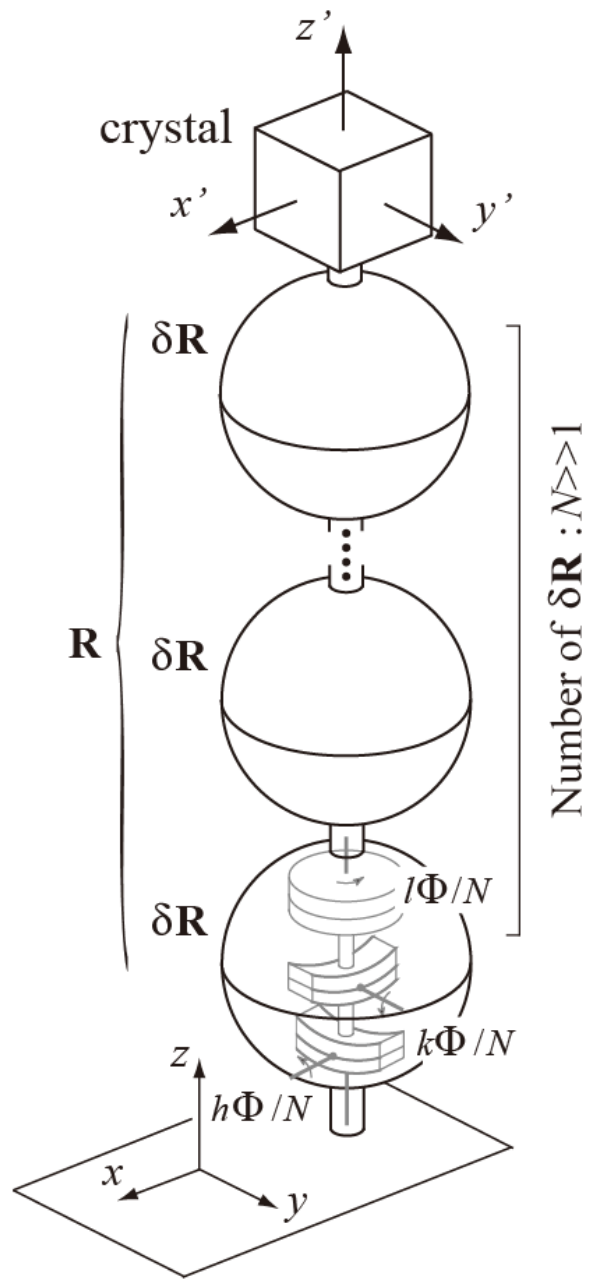


Fig. 2-3 A goniometer-stage model to represent the rotation given by equations (2-14) to (2-17) with the Euler angles θ_1 , φ_1 and ψ_1 .

2. 3 対数角とオイラー角の比較

対数角を具体的に求めるための例として、圧延による単結晶の方位変化を扱う。Yoshida ら^{13,14)}は、純度 99.99mass%の Cu 単結晶を圧延した場合の方位変化を報告している。Fig. 2-4 は、Yoshida らが報告している圧延に伴う結晶方位の回転を $x//ND$, $y//TD$, $z//RD$ を基準方向としたステレオ投影図で示したもの^{13,14)}で、(a)が圧延前の初期方位、(b)が 50%圧延後の平均方位¹⁴⁾である。

Fig. 2-4(a)にステレオ投影図で示されている x - y - z 基準座標系と Cu 単結晶初期方位の $\langle 100 \rangle$ が構成する x' - y' - z' 座標系のあいだの関係を与える回転行列 \mathbf{R}_i は、式(2-3)と同じ定義のもと、

$$\mathbf{R}_i = \begin{pmatrix} 0.598 & 0.252 & 0.761 \\ -0.372 & 0.928 & -0.016 \\ -0.710 & -0.273 & 0.649 \end{pmatrix} \quad (2-18)$$

となる。同様の定義のもと、Fig. 2-4(b)の圧延後の方位については、 x - y - z 基準座標系と x'' - y'' - z'' 結晶座標系のあいだの関係を与える回転行列 \mathbf{R}_f は

$$\mathbf{R}_f = \begin{pmatrix} 0.424 & 0.349 & 0.836 \\ -0.686 & 0.726 & 0.046 \\ -0.591 & -0.593 & 0.547 \end{pmatrix} \quad (2-19)$$

となる。この場合、Fig. 2-3(a)の x' - y' - z' と Fig. 2-3(b)の x'' - y'' - z'' のあいだの関係を与える回転行列 \mathbf{R}_{i-f} , つまり圧延に伴う結晶の回転を与える行列 \mathbf{R}_{i-f} は、 x - y - z 基準座標系のもとで、

$$\mathbf{R}_{i-f} = \mathbf{R}_f \mathbf{R}_i^{-1} = \begin{pmatrix} 0.977 & 0.153 & 0.146 \\ -0.193 & 0.928 & 0.318 \\ -0.087 & -0.339 & 0.937 \end{pmatrix} \quad (2-20)$$

となる。

行列の対数を求めるための数値計算は Mathematica 9 や Matleb のような最近の数式処理・演算用ソフトウェアにより容易に行うことができる。また、 \mathbf{R} の axis/angle pair, \mathbf{V}/Φ は容易に求められる⁷⁾ので、式(2-10)より $\ln \mathbf{R}$ を求めることもできる。このようにして式(2-20)の \mathbf{R}_{i-f} の対数 $\ln \mathbf{R}_{i-f}$ を計算すると、 \mathbf{R}_{i-f} の対数角は以下の様に求められる。

$$h\Phi = -0.337, k\Phi = 0.119, l\Phi = -0.177 \quad (2-21)$$

式(2-21)の \mathbf{R}_{i-f} の対数角の値をオイラー角の値と比較する。オイラー角の定義として、式(2-2)と Fig. 2-1 の状況に加え、これとは回転の順番を変化させた以下の式で表現される状況も扱う。

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_y(\varphi_2)\mathbf{R}_z(\psi_2)\mathbf{R}_x(\theta_2) \quad (2-22-a)$$

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_z(\psi_3)\mathbf{R}_x(\theta_3)\mathbf{R}_y(\varphi_3) \quad (2-22-b)$$

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_x(\theta_4)\mathbf{R}_z(\psi_4)\mathbf{R}_y(\varphi_4) \quad (2-22-c)$$

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_y(\varphi_5)\mathbf{R}_x(\theta_5)\mathbf{R}_z(\psi_5) \quad (2-22-d)$$

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_z(\psi_6)\mathbf{R}_y(\varphi_6)\mathbf{R}_x(\theta_6) \quad (2-22-e)$$

Fig. 2-5 は、式(2-21)の対数角 ($h\Phi, k\Phi, l\Phi$) の値を、式(2-2)による $(\theta_1, \varphi_1, \psi_1)$ 、式(2-22-a)から(2-22-e)による $(\theta_2, \varphi_2, \psi_2)$ から $(\theta_6, \varphi_6, \psi_6)$ の値と比較した図である。

この図の(a), (b), (c)は、それぞれ x 軸, y 軸, z 軸周りの回転角についての対数角と三種類のオイラー角の比較である。Fig. 2-5 からわかるように、どの軸周りの回転角でも対数角とオイラー角の値は互いに異なっているが、各軸周りの対数角の値はその軸周りの三種類のオイラー角の値の平均に近い。また、式(2-20)の \mathbf{R}_{i-f} の場合、対数角の絶対値の大きさは $|h\Phi| > |l\Phi| > |k\Phi|$ となるが、対数角の絶対値が小さいほど対数角とオイラー角の違いの割合は大きい。2.2.1で

述べたように Bunge のオイラー角では z 軸, x 軸, z 軸の順番での回転を考えるが, これらの回転角の値もそれらの軸周りの対数角の値とは異なる. ある回転の回転角を座標軸周りの回転に分解する場合, 一意的に決まる対数角が最も合理的な指標と言える.

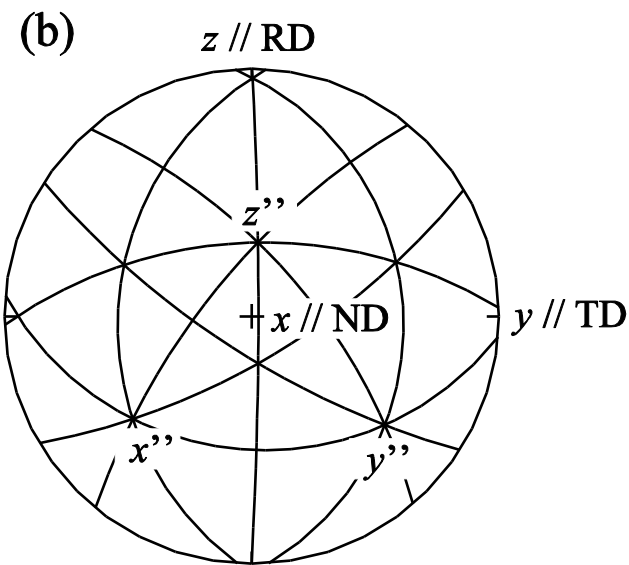
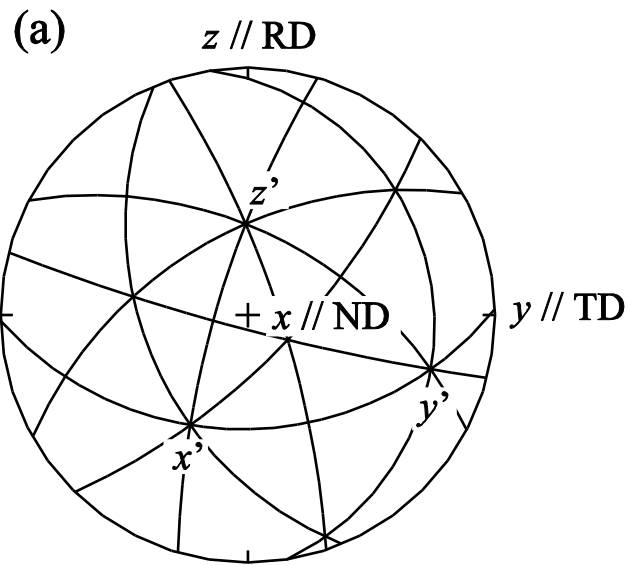


Fig. 2-4 Stereographic projections of the orientation of Cu single crystal (a) before and (b) after the 50% rolling.

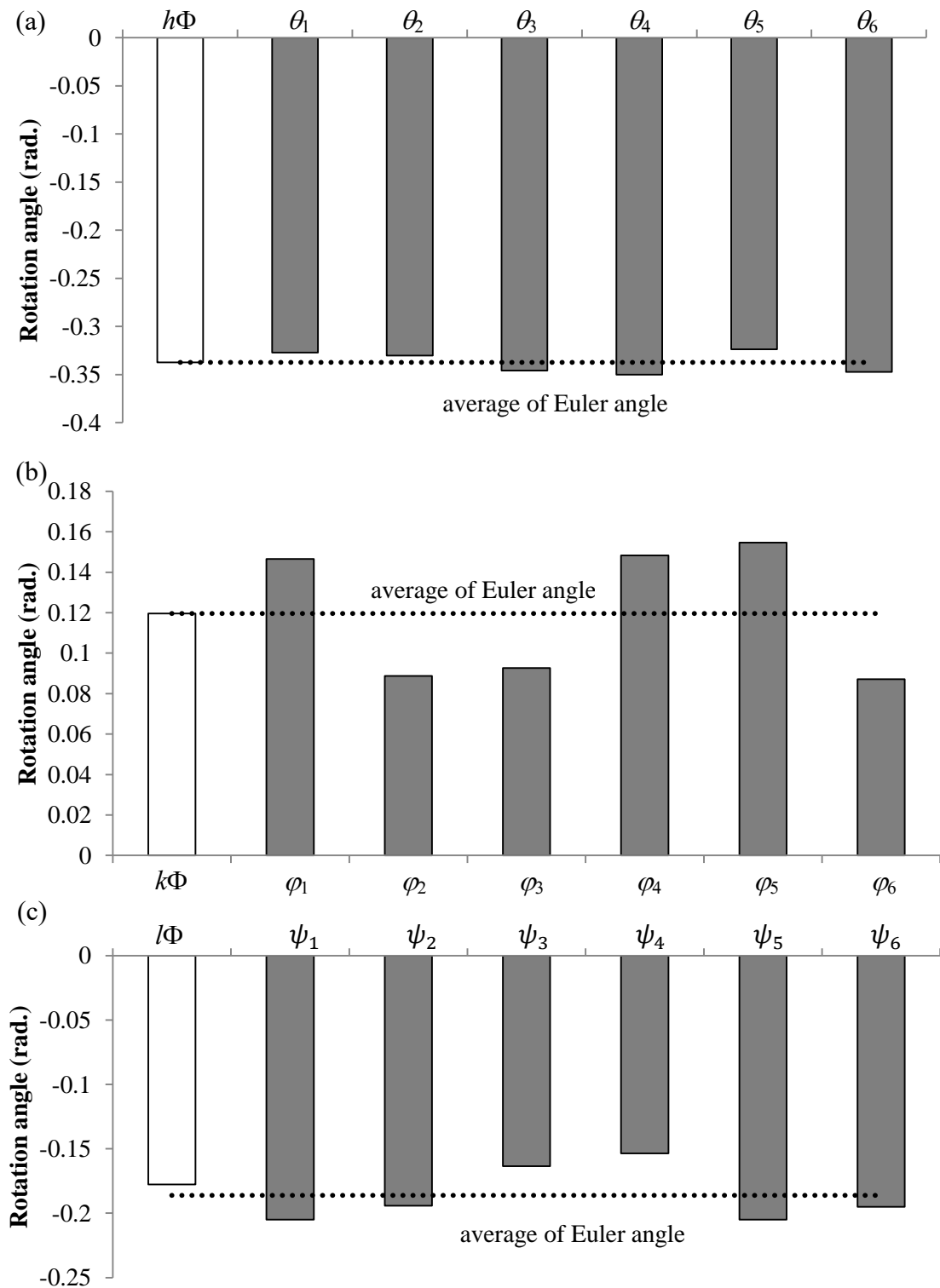


Fig. 2-5 Values of the log angles ($h\Phi, k\Phi, l\Phi$) and the six kinds of the Euler angles ($\theta_1, \varphi_1, \psi_1$), ($\theta_2, \varphi_2, \psi_2$), ($\theta_3, \varphi_3, \psi_3$), ($\theta_4, \varphi_4, \psi_4$), ($\theta_5, \varphi_5, \psi_5$) and ($\theta_6, \varphi_6, \psi_6$) for the rotation from Fig. 2-3(a) to 2-3(e) given by equation (2-20). The rotation angles around (a) the x-axis, (b) the y-axis and (c) z-axis are shown.

2. 4 結言

結晶方位とその変化は回転行列 \mathbf{R} によって表現されるものであるが、 \mathbf{R} の対数 $\ln \mathbf{R}$ は三つの独立な実数成分を持つ反対称テンソルとなる。これらの $\ln \mathbf{R}$ の三つの独立な成分は、 \mathbf{R} がもたらす回転を直感的に理解するために指標となる角度であることをゴニオステージ模型によって示した。これらの特性角度、対数角は、 \mathbf{R} による回転を直交座標系の座標軸周りの回転に分解したときの成分とみなせ、種々に定義されているオイラー角とは異なり、 \mathbf{R} に対して一意的に決まる角度の組になる。

参考文献

- 1) D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev and V. K. Khersonskii: Quantum Theory of Angular Momentum, (World Scientific, Singapore, 1998).
- 2) U. F. Kocks, C. N. Tome and H.-R. Wenk: Texture and Anisotropy, (Cambridge University press, Cambridge, 2000) pp57-77.
- 3) M. Saito: Senkeidaisuugaku nyumon (Introduction to linear algebra) (University of Tokyo Press, Tokyo, 1984) pp.203-223.
- 4) P. Lancaster and M. Tismenetsky: The Theory of Matrices, Second Edition with Applications, (Academic Press, San Diego, 1985).
- 5) R.A. Horn and C.R. Johnson: Topics in Matrix Analysis, (Cambridge University Press, Cambridge, 1994).
- 6) S. Onaka, T. Hirose, H. Kato and S. Hashimoto: J. Jpn I. Met., **61** (1997) 574-579.
- 7) M. Saito: Senkeidaisuugaku nyumon (Introduction to linear algebra) (University of Tokyo Press, Tokyo, 1984) pp.203-223.
- 8) H. Grimmer: Acta Cryst. A, **40** (1984) 108-112.
- 9) S. Onaka: J. Japan I. Metal., **74** (2010) 165-170.
- 10) S. Onaka: Phil. Mag. Lett., **90** (2010) 633-639.
- 11) S. Onaka: Phil. Mag., **92** (2012) 2264-2271.
- 12) S. Onaka: Mater. Trans., **53** (2012) 1547-1548.
- 13) A. Yoshida, Y. Miyajima, S. Onaka: J. Jpn I. Met., **77** (2013) 435-439.
- 14) A. Yoshida, Y. Miyajima, S. Onaka: J Mater. Sci., **49** (2014) 2013-2017.

Appendix (第2章)

A-2-1 スカラー λ の対数 $\ln \lambda$ の変化分

常に正の値となるあるスカラー λ が微小な時間 δt のあいだに $\delta \lambda$ だけ変化したとする。この場合、 λ の時間 t に対する変化が連続であるとして、その速度 v_λ は

$$v_\lambda = d\lambda / dt \quad (\text{A1})$$

となる。一方、時間 δt のあいだの変化分 $\delta \lambda$ そのものではなく、 λ の変化率 $\delta \lambda / \lambda$ に関心があるならば、 v_λ の代わりに変化率 $\delta \lambda / \lambda$ の速度である

$$v_n = (d\lambda / dt) / \lambda = v_\lambda / \lambda \quad (\text{A2})$$

を考えねばならない。この v_n は、以下の式で示されるように、 λ の対数 $\ln \lambda$ の時間変化であると見なせる。

$$\frac{d(\ln \lambda)}{dt} = \frac{d(\ln \lambda)}{d\lambda} \frac{d\lambda}{dt} = \lambda^{-1} \frac{d\lambda}{dt} = \frac{v_\lambda}{\lambda} = v_n \quad (\text{A3})$$

よって、あるスカラー λ についてその“変化率の変化分”を考えるためには、 λ の対数 $\ln \lambda$ の変化分に注目すればよいことになる。

A-2-2 回転行列の対数を与える式

二次元についての回転行列 \mathbf{R}_{2D} は、回転角を θ として以下の様に与えられる。

$$\mathbf{R}_{2D} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (\text{A4})$$

回転角 θ が時間 t に対して連続的に変化しているとすると、行列の微分は成分を微分した行列で与えられるので、 \mathbf{R}_{2D} の時間変化は以下の様に求められる。

$$\frac{d\mathbf{R}_{2D}}{dt} = \frac{d\theta}{dt} \begin{pmatrix} -\sin \theta & -\cos \theta \\ \cos \theta & -\sin \theta \end{pmatrix} \quad (\text{A5})$$

(A3)式にはスカラー λ の逆数 λ^{-1} が含まれているが、行列の場合は逆行列が数の逆数に相当する。よって、 \mathbf{R}_{2D} の逆行列 \mathbf{R}_{2D}^{-1} ,

$$\mathbf{R}_{2D}^{-1} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (\text{A6})$$

を使って、式(A3)の第三辺を \mathbf{R}_{2D} に適用できるようにすると、式(A5)から以下の関係を得る。

$$\mathbf{R}_{2D}^{-1} \frac{d\mathbf{R}_{2D}}{dt} = \frac{d\mathbf{R}_{2D}}{dt} \mathbf{R}_{2D}^{-1} = \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} 0 & -\theta \\ \theta & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A7})$$

この式に示されているように、二つの行列 \mathbf{R}_{2D}^{-1} と $d\mathbf{R}_{2D}/dt$ は可換であり、順番を変えても積は変化しない。式(A7)の第三辺は、確かに式(8)で与えられる \mathbf{R}_{2D} の対数 $\ln \mathbf{R}_{2D}$ の時間微分である。

さらに、三次元の回転行列 \mathbf{R} でも(A7)と同等の関係式が成り立つことは、式(9)の \mathbf{R} についての計算によって確認することができる。つまり、この \mathbf{R} の逆行列 \mathbf{R}^{-1} が

$$\mathbf{R}^{-1} = \begin{pmatrix} (1-h^2)\cos\Phi + h^2 & hk(1-\cos\Phi) + l\sin\Phi & lh(1-\cos\Phi) - k\sin\Phi \\ hk(1-\cos\Phi) - l\sin\Phi & (1-k^2)\cos\Phi + k^2 & kl(1-\cos\Phi) + h\sin\Phi \\ lh(1-\cos\Phi) + k\sin\Phi & kl(1-\cos\Phi) - h\sin\Phi & (1-l^2)\cos\Phi + l^2 \end{pmatrix} \quad (\text{A8})$$

であり、回転の軸 $\mathbf{V} = (h, k, l)$ が一定で Φ が時間 t の関数で変化する場合、

$$\frac{d\mathbf{R}}{dt} = \frac{d\Phi}{dt} \begin{pmatrix} -(1-h^2)\sin\Phi & hk\sin\Phi - l\cos\Phi & lh\sin\Phi + k\cos\Phi \\ hk\sin\Phi + l\cos\Phi & -(1-k^2)\sin\Phi & kl\sin\Phi - h\cos\Phi \\ lh\sin\Phi - k\cos\Phi & kl\sin\Phi + h\cos\Phi & -(1-l^2)\sin\Phi \end{pmatrix} \quad (\text{A9})$$

であることから、式(2-10)より以下の関係式が成立していることがわかる。

$$\frac{d\mathbf{R}}{dt} \mathbf{R}^{-1} = \mathbf{R}^{-1} \frac{d\mathbf{R}}{dt} = \frac{d\Phi}{dt} \begin{pmatrix} 0 & l & k \\ l & 0 & -h \\ -k & h & 0 \end{pmatrix} = \frac{d(\ln \mathbf{R})}{dt} \quad (\text{A10})$$

第3章 転位群により生じる結晶回転の対数角による解析

3. 1 緒言

塑性変形により導入される金属内部の転位群は、元は同一であった結晶粒内においても、場所による結晶方位の変化、すなわち結晶回転をもたらす。このような結晶回転は、主に変形負荷方向である圧延方向(Rolling Direction: RD), 圧延側面法線方向(Transverse Direction: TD), 圧延面法線方向(Normal Direction: ND)を基準座標系にとり、材料の結晶方位との関係を定義してから、変形に伴う基準座標軸周りの結晶回転を議論する機会が多い¹⁻⁵⁾。

本章では、第2章で導入した対数角を、転位群による結晶回転に適用するため、転位壁による結晶回転の取り扱いについて述べる。その後、この適用例として、冷間圧延後の銅単結晶に生じた結晶方位の分裂に対し、その領域を横切るラインスキャン上の結晶方位変化を、対数角を用いて解析した。

3. 2 結晶方位変化

3. 2. 1 転位による結晶方位変化

転位群が金属材料中に存在する場合、それを横切る領域の間で結晶方位が変化する。Fig. 3-1 は、材料中の転位列が結晶粒界を形成している様子を模式的に示している⁶⁾。Fig. 3-1(a)および(b)は、それぞれ転位列 DA1 および DA2 により結晶粒界が形成されている様子である。図中に示すように、DA1 および DA2 はそれぞれ、下側の結晶粒に対して x 軸周りに ω_1 の回転および y 軸周りに ω_2 の回転をもたらす。Fig.3-1(c)では、転位列 DA1 および DA2 が結晶粒内に分散している様子を示しており、この場合においても結晶粒の下側から上側への場所の

変化に対し，結晶方位の変化が生じる．ここで，下側から上側への位置の変化に対する結晶方位変化を回転行列 \mathbf{R} で表すとすると，回転角 ω_1 と ω_2 は \mathbf{R} の対数角と等価となる．材料中の欠陥による結晶方位変化を議論するためには，基準座標系の軸周りの回転として分割された回転角である対数角は非常に有用である．言い換えると，オイラー角や **axis/angle pair** のような，他の結晶回転を表現する方法に比べ，対数角は直感的に回転成分の方向や割合を理解できるだけでなく， \mathbf{R} に対し一意に決まる表現方法であるため，結晶回転を生じさせる材料中の欠陥を議論する際に便利である．

3. 2. 2 結晶粒内の転位壁による結晶方位変化

結晶粒内の転位壁は，この転位壁を横切る場所の変化に対し，結晶回転をもたらす．Fig. 3-2 は，二つの転位壁 DW1 および DW2 によって生じる，結晶方位変化 $\delta\mathbf{R}_1:(\mathbf{V}_1, \delta\Phi_1)$ および $\delta\mathbf{R}_2:(\mathbf{V}_2, \delta\Phi_2)$ を模式的に示している．回転角 $\delta\Phi_1$ と $\delta\Phi_2$ が十分に小さい場合， $\delta\mathbf{R}_1$ と $\delta\mathbf{R}_2$ の積は可換となり，

$$\delta\mathbf{R} \approx \delta\mathbf{R}_1\delta\mathbf{R}_2 \approx \delta\mathbf{R}_2\delta\mathbf{R}_1 \quad (3-1)$$

および

$$\ln \delta\mathbf{R} \approx \ln \delta\mathbf{R}_1 + \ln \delta\mathbf{R}_2 \quad (3-2)$$

となる．ここで，式(2-10)における対数角の定義の下，**axis/angle pair** における回転軸 $\mathbf{V}=(h,k,l)$ と回転角 Φ により構成されるベクトル \mathbf{w} を，以下のように表す．

$$\mathbf{w}=(h\Phi, k\Phi, l\Phi) \quad (3-3)$$

以下の三つの \mathbf{w} と，これを与える各結晶回転の対数角との関係は，

$$\begin{aligned}
\mathbf{w} &= \mathbf{V} \delta \Phi = \delta \Phi(h, k, l) \quad \text{for } \delta \mathbf{R} \\
\mathbf{w}_1 &= \mathbf{V}_1 \delta \Phi_1 = \delta \Phi_1(h_1, k_1, l_1) \quad \text{for } \delta \mathbf{R}_1 \\
\mathbf{w}_2 &= \mathbf{V}_2 \delta \Phi_2 = \delta \Phi_2(h_2, k_2, l_2) \quad \text{for } \delta \mathbf{R}_2
\end{aligned} \tag{3-4}$$

と表わされ、以下の関係が得られる。

$$\mathbf{w} = \mathbf{w}_1 + \mathbf{w}_2 \tag{3-5}$$

これらの式は、転位壁による結晶方位変化を解析する際に適用できる。例えば、結晶の方向 \mathbf{V}_1 および \mathbf{V}_2 が既知のとき、 \mathbf{w} による DW1 および DW2 への割合を評価することが可能となる。

3. 2. 3 微小回転における対数角

SEM/EBSD でのラインスキャンに対する対数角を用いた解析の例として、Fig. 3-3 に示すような結晶方位の変化を考える。原点 \mathbf{O} から位置 x_1 および x_2 への結晶方位の回転は、それぞれ $\mathbf{R}(x_1)$ および $\mathbf{R}(x_2)$ で与えられる。ここで、 $\Delta \mathbf{R}$ を基準座標系での位置 x_1 および x_2 の間の回転をもたらす回転行列と定義する。三つの回転行列の関係は、以下の様になる。

$$\mathbf{R}(x_2) = \Delta \mathbf{R} \mathbf{R}(x_1) \tag{3-6}$$

Fig. 3-4(a) と 3-4(b) は、それぞれ式(3-6)の右辺と左辺の状況を示している。 $\Delta \mathbf{R}$ は、基準座標系での $\mathbf{R}(x_1)$ から $\mathbf{R}(x_2)$ への回転を表す回転行列であるが、式(3-6)の右辺に対応する球体ユニットの積み重ねは、Fig. 3-4(a) に示す様になる。ここで、 $\Delta \mathbf{R}$ を基準座標系での回転後の x_1 からの回転と定義した場合、式(3-6)積の順序と Fig. 3-4(a) の積み重ねの様式は変わる。

$\Delta\mathbf{R}$ が微小回転であり，なおかつ の axis/angle pair の回転角 $\Delta\Phi$ は $|\Delta\Phi| \ll 1$ を満たすと仮定する．すると $\Delta\mathbf{R}$ は，式(2-11)，(2-14)，(2-15)から，

$$\Delta\mathbf{R} \approx \mathbf{E} + \ln \Delta\mathbf{R} \quad (3-7)$$

となる．また， $\Delta\mathbf{R}$ の対数角 $(\Delta w_1, \Delta w_2, \Delta w_3)$ は，

$$\ln \Delta\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 0 & -\Delta w_3 & \Delta w_2 \\ \Delta w_3 & 0 & -\Delta w_1 \\ -\Delta w_2 & \Delta w_1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3-8)$$

となる．ここで， $|\Delta\Phi| \ll 1$ であるため， $|\Delta w_1|, |\Delta w_2|, |\Delta w_3| \ll 1$ を満足する．この

関係を使うと，式(3-6)は

$$\begin{aligned} \mathbf{R}(x_2) &\approx \begin{pmatrix} 1 & -\Delta w_3 & \Delta w_2 \\ \Delta w_3 & 1 & -\Delta w_1 \\ -\Delta w_2 & \Delta w_1 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{R}(x_1) \\ &\approx \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\Delta w_1 \\ 0 & \Delta w_1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \Delta w_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\Delta w_2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\Delta w_3 & 0 \\ \Delta w_3 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{R}(x_1) \end{aligned} \quad (3-9)$$

と記述できる．式(3-9)は， $\Delta\mathbf{R}$ による無限小の対数角 $(\Delta w_1, \Delta w_2, \Delta w_3)$ は，位置 x_1 における $\mathbf{R}(x_1)$ と位置 x_2 における $\mathbf{R}(x_2)$ の結晶方位差を示す要素と理解できる．

3. 2. 4 位置に依存した結晶方位の変化

ここで， x_1 と x_2 の差である Δx が小さいと仮定する． $\mathbf{R}(x)$ が x について微分可能な時， x_1 における $\mathbf{R}(x_1)$ と x_2 における $\mathbf{R}(x_2)$ の差は，以下の様に記述できる．

$$[\mathbf{R}(x_2) - \mathbf{R}(x_1)] = [\mathbf{R}(x + \Delta x) - \mathbf{R}(x)] \approx \frac{d\mathbf{R}(x)}{dx} \Delta x \quad (3-10)$$

式(3-6)から(3-8)より，以下の関係を得る．

$$\begin{pmatrix} 0 & -\Delta w_3 / \Delta x & \Delta w_2 / \Delta x \\ \Delta w_3 / \Delta x & 0 & -\Delta w_1 / \Delta x \\ -\Delta w_2 / \Delta x & \Delta w_1 / \Delta x & 0 \end{pmatrix} \approx \left[\frac{d\mathbf{R}}{dx} \right] \mathbf{R}^{-1} \quad (3-11)$$

この関係式に示す様に, 回転行列 $\mathbf{R}(x)$ の位置による変化は, 対数角 Δw_1 , Δw_2 および Δw_3 によって記述できる.

いかなる位置 x においても回転行列 $\mathbf{R}(x)$ が小さな回転角である場合, $\mathbf{R}(x)$ に関する行列積は可換となり, 式(3-6)から $\ln \Delta \mathbf{R}$ は, 以下の様になる.

$$\ln \Delta \mathbf{R} = \ln \left[\mathbf{R}(x_1)^{-1} \mathbf{R}(x_2) \right] \approx \ln \mathbf{R}(x_2) - \ln \mathbf{R}(x_1) \quad (3-12)$$

ここで, 微小回転に対する微分は以下の式で与えられる.

$$\frac{d \ln \mathbf{R}}{dx} \approx \left[\frac{d\mathbf{R}}{dx} \right] \mathbf{R}^{-1} \approx \mathbf{R}^{-1} \left[\frac{d\mathbf{R}}{dx} \right] \quad (3-13)$$

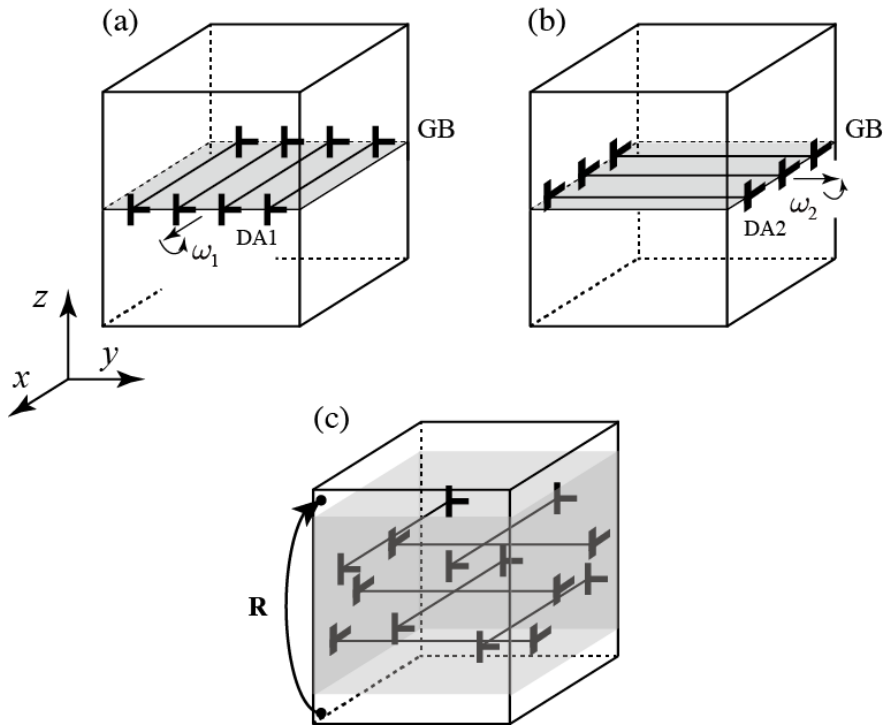


Fig. 3-1 Schematic illustration showing materials containing dislocations. Materials containing grain boundaries composed of (a) the array of dislocations DA1 and (b) the array of dislocations DA2 that cause the rotations of the upper grain with respect to the lower grain as much as ω_1 around the x -axis and ω_2 around the y -axis, respectively. (c) A grain containing both of the dislocations of DA1 and DA2 dispersed in a local region. The rotation angles ω_1 and ω_2 are the log angles of the rotation matrix \mathbf{R} giving the orientation change above and below the region shown in (c).

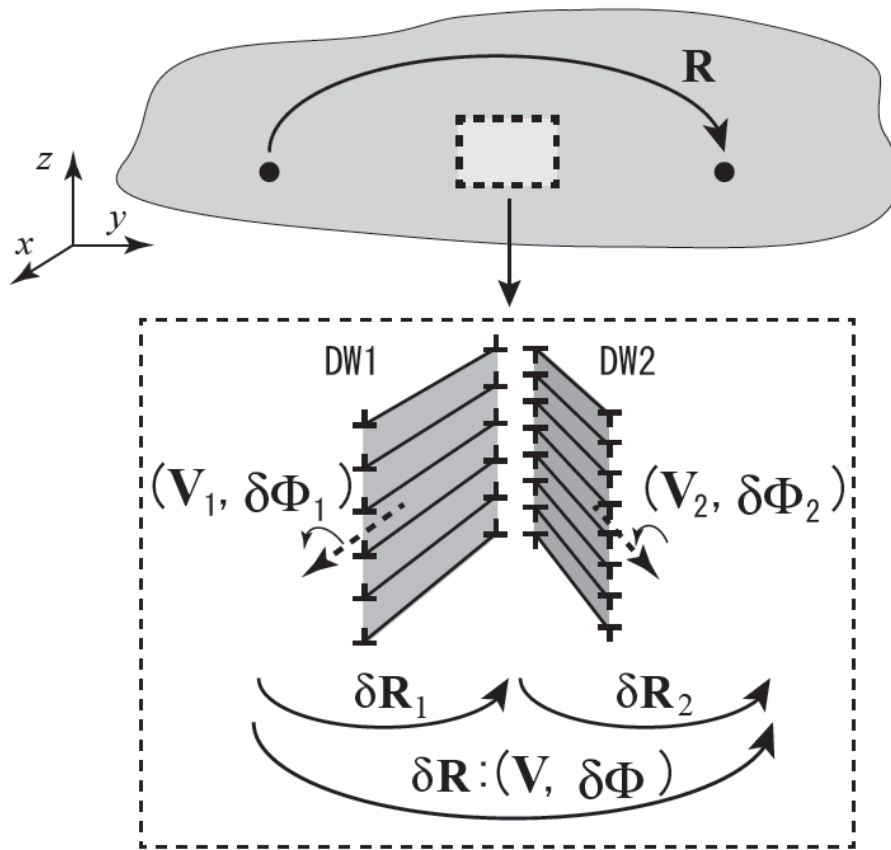


Fig. 3-2 Schematic illustration showing the changes of crystal orientations caused by dislocation walls DW1 and DW2.

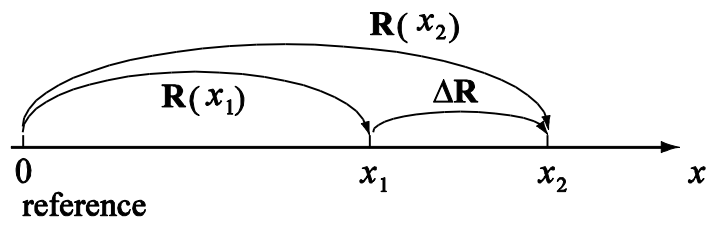


Fig. 3-3 A model showing changes in crystal orientations for line scan of SEM/EBSD measurements.

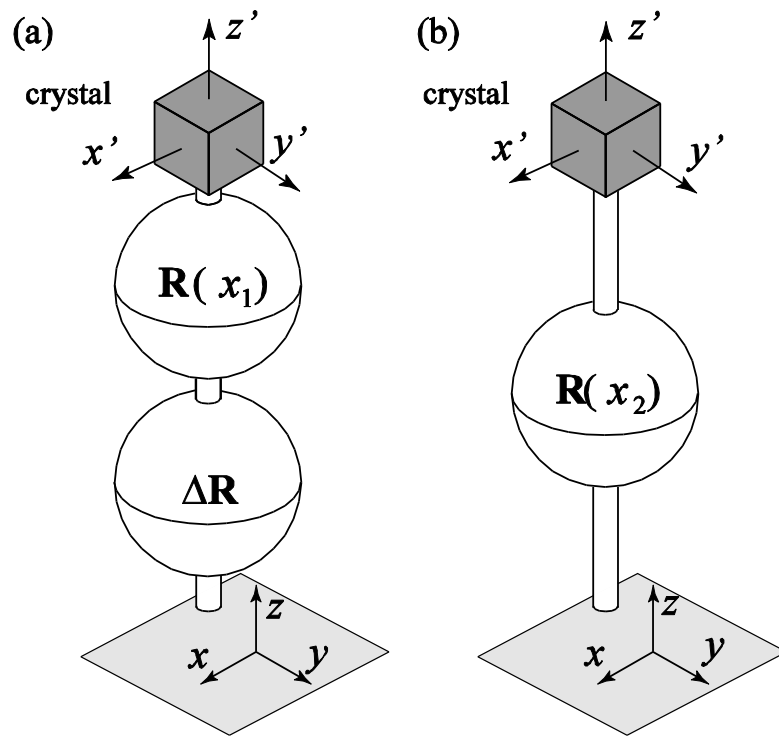


Fig. 3-4 Graphical representations corresponding to the (a) right- and (b) left-hand sides of (3-6), where the difference $\Delta \mathbf{R}$ in the crystal orientations between those at x_1 and x_2 is expressed by using the reference frame at the origin.

3. 3 銅単結晶の冷間圧延による結晶方位変化

3. 3. 1 銅単結晶の冷間圧延および冷間圧延後の結晶方位

対数角による転位群の解析手法の適用例として，塑性変形に伴う銅単結晶の結晶方位の変化を調査した．板厚 2mm，幅 20mm の板形状の純度 99.9% の銅単結晶に，冷間圧延を行った．Fig. 3-5(a) は，冷間圧延前の銅単結晶の結晶方位を表している．図中の TD, RD および ND 方向は，それぞれ単結晶の横方向，圧延方向，法線方向を示している．TD, RD および ND は直交座標系であり，それぞれの結晶方位も Fig. 3-5(a) に記載している．

15%冷間圧延後の組織変化を，SEM/EBSD にて測定した．測定は，JSM-7001F (JEOL) 内で，TSL の OIM-analysis ver.7.01 を用い，加速電圧 15kV においてステップサイズ 1.0 μm とした．Fig. 3-5(a) の長方形部分に表わすように，TD 面上の領域を測定対象とした．Fig. 3-5(b) に，冷延後の TD 面の ND 方向の逆極点図 (Inverse Pole Figure: IPF) を示した．IPF のカラーコードは，標準三角形に示しており，TD 面上の RD 方向，ND 方向も示している．

Fig. 3-5(b) に示すように，圧延後の試験片から青色および緑色の平行なバンド組織が観察された．このバンドの傾きは，RD に対して $0.56\sim 0.65$ rad ($32\sim 37^\circ$) であった．この逆極点図上に示した原点 O から A へのラインスキャン上の結晶方位変化について，2.4 μm 間隔で測定した結果を用い解析する．Fig. 3-5(c) に示すステレオ投影図は，原点 O での結晶方位を表している．線分 OA 上の結晶方位変化を， $\{111\}$ 極点を黒点で Fig. 3-5(c) に示す．図中の黒点の広がりから，圧延による結晶回転は，主に TD を回転軸として起こった事を示している．

3. 3. 2 対数角の変化

Fig. 3-6 は、ラインスキャン OA 上において、原点 O からの距離に対する TD 軸, RD 軸, ND 軸周りの回転角である対数角 (w_{TD} , w_{RD} , w_{ND}) の変化を示している。これらの結果から三つの対数角の中で w_{TD} の変化が最も大きく, ± 0.14 rad 程度の範囲で変化していることがわかる。周期的な w_{TD} の変化は, Fig. 3-5(b) の青と緑のバンドの界面が, TD 軸周りに時計回りおよび反時計回りの小傾角粒界であることを示している。Fig. 3-5(b) において, この界面に平行な方向は, 概ね Fig. 3-5(c) の中心から 111 方向への赤点線と平行となっている。小傾角粒界が, Fig. 3-5(b) の中心右側に模式的に示した転位のような, $(\bar{1}1\bar{1})$ すべり面上の刃状転位列で構成されている事を意味している。Fig. 3-5(a) に示す銅単結晶の初期方位を考えると, この $(\bar{1}1\bar{1})$ は冷間圧延中に活動したすべり系であると考えられる⁸⁾。

Fig. 3-7(a) から (c) に示す Δw_{TD} , Δw_{RD} および Δw_{ND} は, Fig. 3-5(b) に示す線分 OA 上において, $2.4 \mu\text{m}$ 間隔の隣り合う 2 点間での対数角の変化を示している。Fig. 3-7(a) と (b) は, $\Delta w_{TD} - \Delta w_{RD}$ と $\Delta w_{TD} - \Delta w_{ND}$ の関係を示しており, データ点は対称的かつランダムに分散している。一方, Fig. 3-7(c) では, 図中の点線の傾きに沿って対称的にデータが分散していた。この点線の傾きについては, 後ほど述べる。

Fig. 3-8(a) は, TD 面で観察された小傾角粒界を模式的に示したものである。 $(\bar{1}1\bar{1})$ 面上で可能性のあるすべり方向として $[0\bar{1}\bar{1}]$ と $[10\bar{1}]$ も図中に記載した。冷間圧延が, ND-RD 面上の平面ひずみ状態での塑性変形であるとする, $[1\bar{1}2]$ が巨視的な $(\bar{1}1\bar{1})$ 面上のせん断方向となる。このような変形は, $(\bar{1}1\bar{1})$ 面上での

$[0\bar{1}\bar{1}]$ および $[10\bar{1}]$ の二重すべりによって得られる．ここで， $(\bar{1}1\bar{1})$ 面上での $[1\bar{1}2]$ 方向のせん断変形が起こった場合，Fig. 3-8(b)に示す様に，結晶回転は $[110]$ のTD軸周りの回転となる．しかし，Fig. 3-8(c)に示す様に，この回転は， $(\bar{1}1\bar{1})$ $[0\bar{1}\bar{1}]$ と $(\bar{1}1\bar{1})[10\bar{1}]$ の2つのすべり系の活動により起こる $[21\bar{1}]$ と $[121]$ の回転の合成としてと考えられる．

回転軸 (h, k, l) は，式(2-10)に示したように，対数角の要素と関連する．小傾角粒界を横切る回転が $[21\bar{1}]$ と $[121]$ を含む面で起こる場合， $\Delta w_{ND} - \Delta w_{RD}$ の関係は，Fig. 3-5(c)の点線で示す傾きで与えられる．この傾きは，Fig. 3-8(c)の傾きと等しくなる．この様に，銅単結晶の冷間圧延による対数角の変化は，結晶方位の変化として捉えられ，Fig. 3-7(c)に記載の $\Delta w_{ND} - \Delta w_{RD}$ における対称的なデータの分散は，Fig. 3-8(c)に示す転位構造によって説明できる．

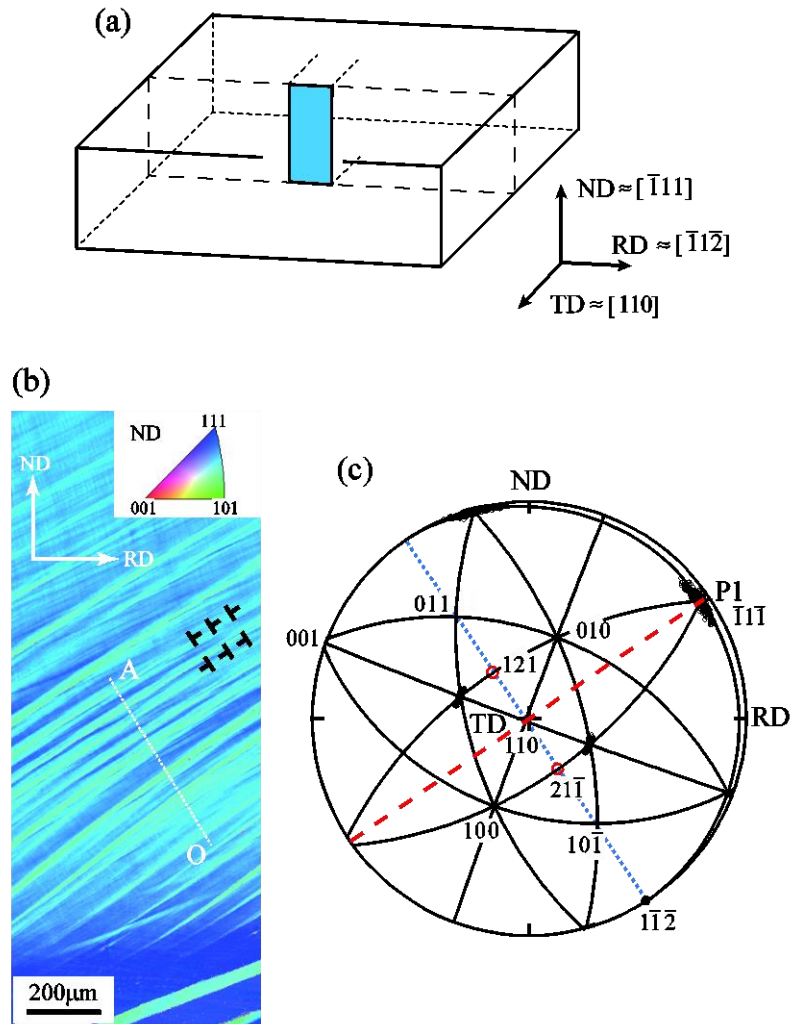


Fig. 3-5 Cold rolling of Cu single crystal. (a): Schematic illustration showing a shape, and crystallographic orientations before cold rolling. The region analyzed by SEM/EBSD technique after rolling is also shown in (a). (b): The inverse pole figure (IPF) map showing the crystallographic orientation of ND on the TD plane after rolling to 15% reduction in thickness. (c): The stereographic projection showing the orientation at the origin O after the rolling. Changes of crystal orientations along the line OA are also shown by $\{111\}$ pole figures in (c).

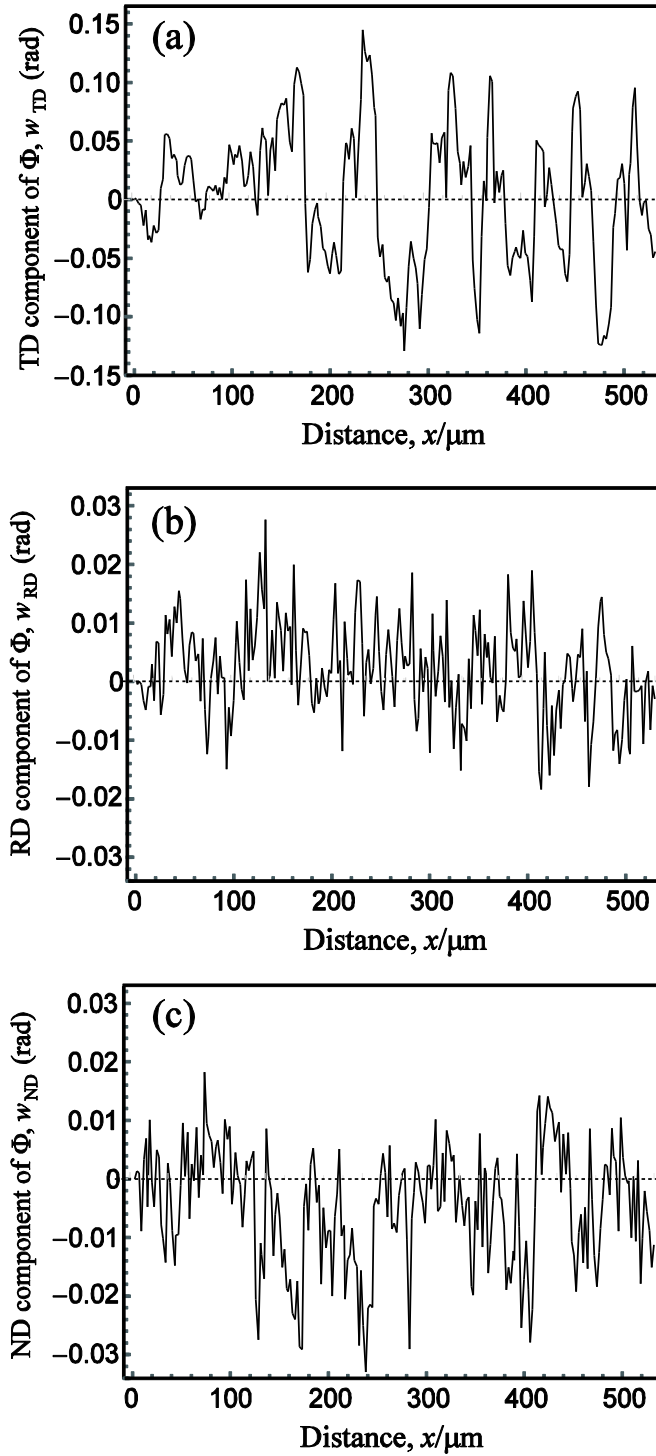


Fig. 3-6 The variations of the log angles (w_{TD}, w_{RD}, w_{ND}) along the line OA in Fig. 3-5(b) as a function of the distance from the origin O. The log angles show the orientation changes from the orientation at the origin O. (a), (b) and (c) are for the components of w_{TD} , w_{RD} and w_{ND} , respectively.

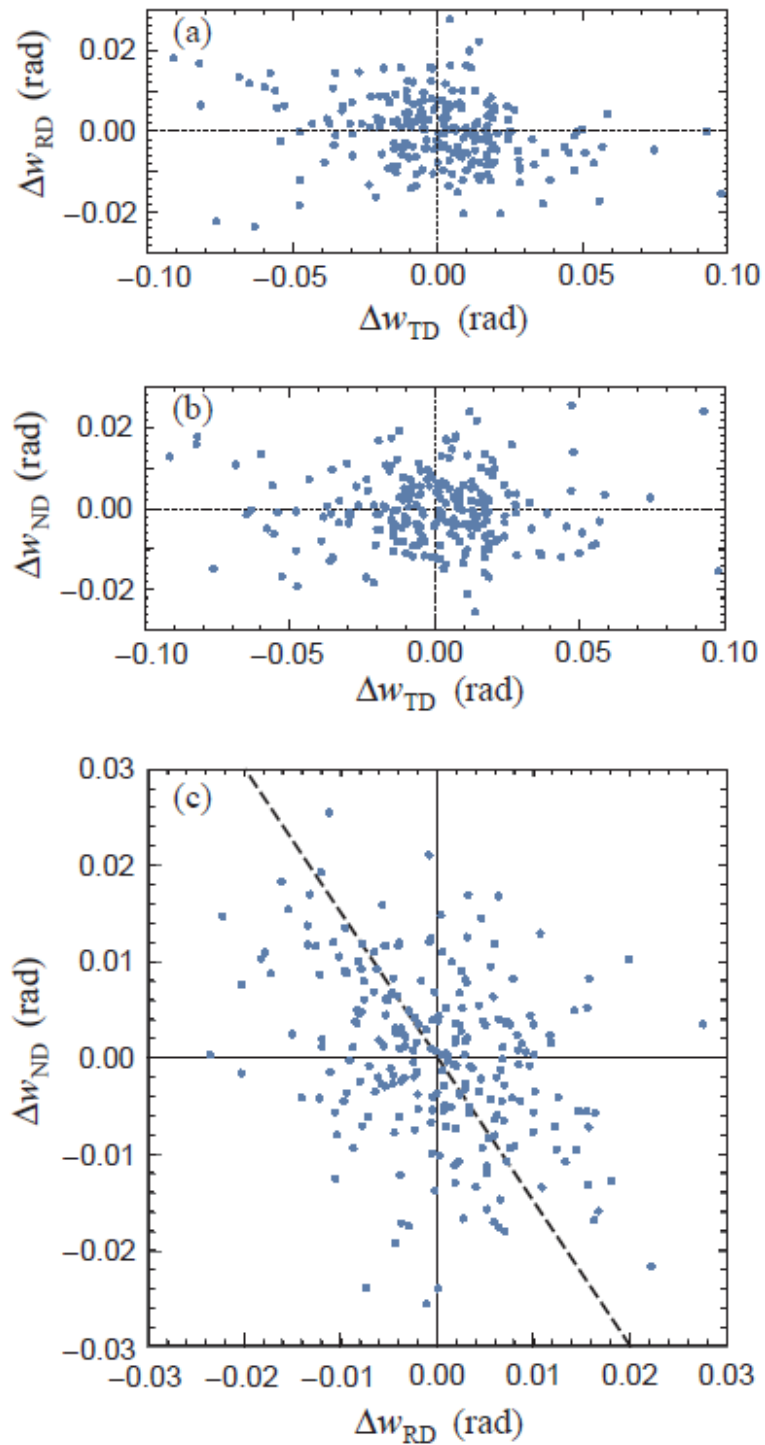


Fig. 3-7 The relations among Δw_{TD} , Δw_{RD} and Δw_{ND} at the same locations on the line OA in Fig. 3-5(b), where Δw_{TD} , Δw_{RD} and Δw_{ND} are the changes in the log angles between neighboring two measuring points. See text for an inclined broken line in (c).

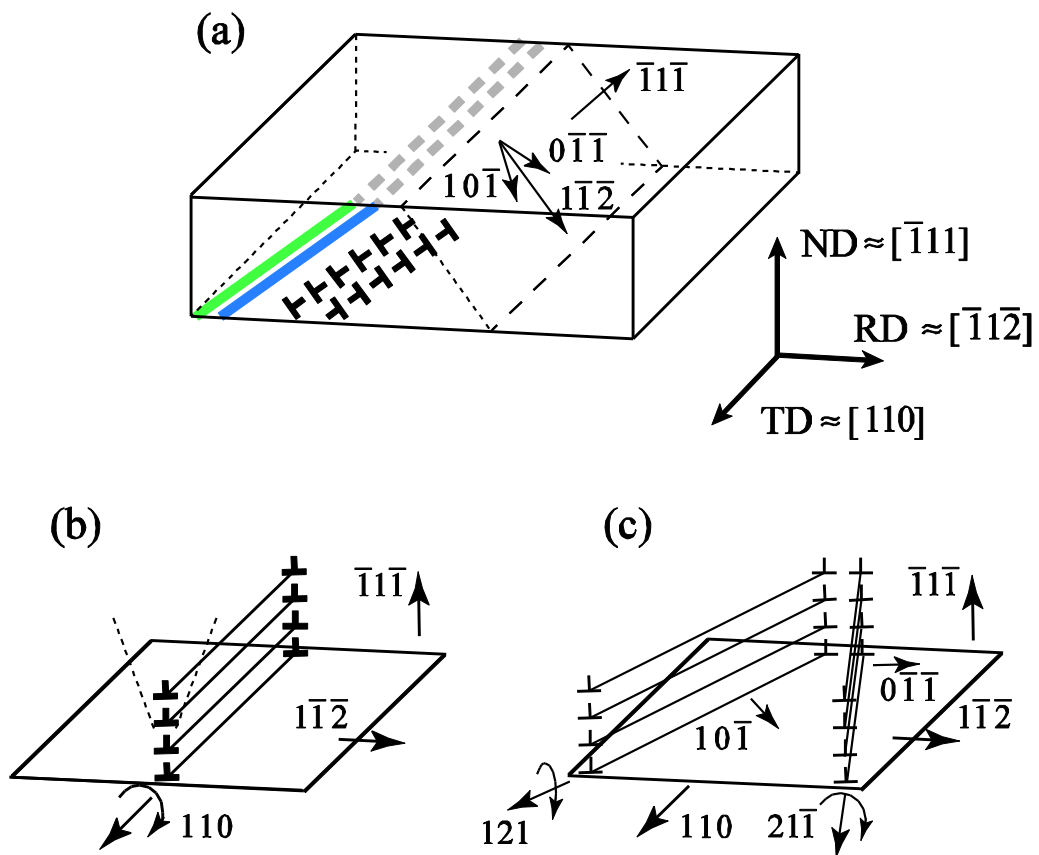


Fig. 3-8 Schematic illustrations showing dislocation structures in the rolled single crystal. See text for the details.

3. 4 結論

対数角の概念を，転位群がもたらす結晶回転に適用した．金属材料中に存在する転位群や転位壁によって，これらを横切る二点間で生じる結晶回転に対し，微小回転の合計である対数角の概念が適用できることを示した．すなわち，場所による結晶方位の変化は，対数角の変化として与えられる．

転位壁に対する解析例として，冷間圧延後の銅単結晶に生じた結晶方位の分裂について，対数角を用いて解析した．この結果，TD 軸である $[110]$ 周りの回転が，面心立方格子の $(\bar{1}1\bar{1})[0\bar{1}\bar{1}]$ と $(\bar{1}1\bar{1})[10\bar{1}]$ の二つのすべり系での刃状転位列によって生じる $[21\bar{1}]$ および $[121]$ 周りの回転の重ね合わせであることを解析した．

参考文献

- 1) Q. Liu, C. Maurice, J. Driver and N. Hansen: *Metall. Mater. Trans. A*, **29** (1998) 2333–2344.
- 2) J.A. Wert: *Acta Mater.*, **50** (2002) 3125–3139.
- 3) Q. Liu, J. Wert and N. Hansen: *Acta Mater.*, **48** (2000) 4267–4279.
- 4) A. Yoshida, Y. Miyajima and S. Onaka: *J. Jpn. Inst. Met.*, **77** (2013) 435-439.
- 5) A. Yoshida, Y. Miyajima and S. Onaka: *J. Mater. Sci.*, **49** (2014) 2013-2017.
- 6) J. P. Hirth and J. Lothe: *Theory of Dislocations*, 2nd edn. (Wiley, New York, 1982), pp. 703-713.
- 7) D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev and V. K. Khersonskii: *Quantum Theory of Angular Momentum* (World Scientific, Singapore, 1988), pp. 21-35
- 8) Y. Ajisaka, Y. Miyajima and S. Onaka: *J. Jpn. Inst. Met.* **80** (2016) 553-561.

第4章 極低炭素鋼の塑性変形に伴う結晶回転の解析

4.1 緒言

塑性変形に伴う結晶回転の解析に対し、第2章で示した対数角を用いることで、三次元の回転を各基準座標軸周りの回転に分解し、転位群による結晶回転を解析できることを第3章で示した。本章では、EBSDによる結晶方位測定だけでなく、塑性変形後に試験片表面に生じるすべり線の観察を追加する事で、活動すべり系と結晶回転軸との関係を調査する事を目的とした。

Bay¹⁾らおよび Hughes²⁾は、塑性変形による結晶粒微細化の原因として、塑性変形によって同一の結晶粒内であっても場所により異なるすべり系が活動し、異なる方位への結晶回転が起こることを挙げている。領域により結晶回転の方向が異なると、その間の領域には Geometrically Necessary Dislocations (GNDs)³⁾が導入され、互いに方位の異なる領域の不整合を緩和する。すなわち、塑性変形によって生じる結晶回転は、この GNDs の存在そのものが起因している。Nye⁴⁾は、体積中の格子湾曲と GNDs の分布の関係を与える連続分布転位理論 (continuum dislocation theory)を構築した。Sun⁵⁾は、初めてこの関係を EBSDによる結晶方位解析に適用し、塑性変形後の Al 双結晶における GNDs の分布を検討した。更に近年では、Konijneberg⁶⁾が三次元 EBSDによる結晶方位解析により、Nyeの転位密度テンソルの全ての要素を決定する事も行われている。

本章では、単純せん断変形後の多結晶極低炭素鋼板のすべり線と結晶方位解析により、結晶粒内で場所により異なる活動すべり系を推定し、異なるすべり系の活動領域を横切る線分で生じる結晶回転とその回転軸との関係を調査した。

4. 2 実験方法

Table 4-1 に、本章の実験に用いた極低炭素鋼の化学組成を示す。真空溶解にて当該成分のインゴットを溶製し、熱間圧延を行った。その後、酸洗および 60% の圧下率で冷間圧延を施した。本研究では、転位密度が低く比較的粗大な等軸粒を有する多結晶極低炭素冷延鋼板を得るため、冷間圧延後の試験片を 973K で 100 秒間保持し、直ちに焼き入れた。通常、薄鋼板を水焼き入れすると鋼板の形状が悪くなるため、ダイクエンチにて焼き入れる事で形状の悪化を防いだ。この様にして、約 150 μm の結晶粒径を有するフェライト単相の極低炭素薄鋼板を製造した。

Table 4-1 Chemical composition of the test material, low carbon steel.

Compositions (mass%)				
C	Si	Mn	P	S
0.0016	<0.01	<0.01	0.0003	0.0002

得られた冷延鋼板に塑性変形を加えるため、単純せん断試験⁷⁾を実施した。Fig. 4-1 に、単純せん断試験に用いた試験片形状と試験片の基準方位を示した。ここでせん断試験の基準方位を、観察方向 (OD// x_1 軸)、せん断方向 (SD// x_2 軸)、せん断断面法線方向 (SN// x_3 軸)とする。せん断試験片の基準方位において、単純せん断変形による変形勾配テンソルは、以下の様に表せる。

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \gamma \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4-1)$$

ここで、 γ は $\gamma = \delta/h$ で計算されるせん断変形量であり、 δ と h はそれぞれ、単純せん断量およびゲージ長（本研究では 3mm）である。10%のせん断変形後、

鋼板表面において観察方向から、すべり線方向の観察および結晶方位の測定を、Field Emission - Scanning Electron Microscope (FE-SEM : JSM6510)および Electron Back Scatter Diffraction Patterns (EBSD : TSL)で実施した。この観察のため、鋼板表面は鏡面研磨後に電解研磨を実施し、鋼板表層のひずみ層を除去した。EBSDの測定は、0.2 μ m ステップとした。

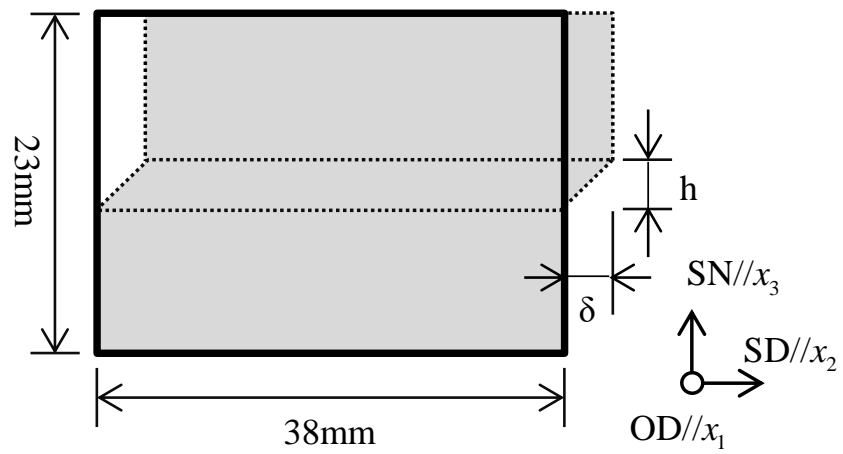


Fig. 4-1 Schematic representation of a simple shear test specimen. The coordinate frame of the simple shear test is also indicated.

4. 3 実験結果と解析

4. 3. 1 すべり線観察

Fig. 4-2(a)と(b)に、10%単純せん断後の試験片に対する、FE-SEMによるすべり線観察結果、および同一視野で測定したEBSD結果から作成したinverse pole figure (IPF) マップを示す。単純せん断変形前の結晶粒界を、Fig. 4-2(b)のIPFマップから決定し、Fig. 4-2(a)に白の点線で示した。Fig. 4-2(a)に示す様に、試験片表明にはすべり線が明瞭に観察され、中央の結晶粒内では平行に並んだすべり線で区切られた領域が複数確認された。Fig. 4-3に、Fig. 4-2の白い線で囲んだ領域の拡大写真を示す。点(i)から(ii)、および(iii)から(iv)の二本の矢印での中央付近には、平行なすべり線の領域同士が交わる遷移領域が観察された。

4. 3. 2 結晶回転の解析

本研究では、元々同一であった結晶粒内において、塑性変形によって生じる結晶粒微細化の初期段階を解析対象とした。後に結果を示すが、10%の単純せん断変形によって生じる結晶方位変化は、概ね 10° 程度までの範囲であった。

一般的に使用されるEBSDのデータ処理ソフトを用いた場合、結晶方位をオイラー角として得る事が出来る。しかし、得られるオイラー角は、結晶方位がほぼ変わらない近接した二点であっても、大きな方位差を持つ場合がある。例えば、隣接した二点において 10° 以下の方位差しかない $\langle 100 \rangle$ に近い方位であっても、同一の $[100]$ を示さない場合がある。そこで本研究では、結晶方位の変化を議論するにあたり、ほぼ同一の結晶方位とみなせる領域に対し、オイラー角データを立方晶の結晶対称性を考慮して補正し、オイラー角を回転行列 \mathbf{R} に変

換した.

観察領域の各点の結晶方位を表す回転行列の定義を, Fig. 4-4 に示す. ここで, 観察領域内の各点の結晶方位は, Fig. 4-1 に示す単純せん断試験の座標系を基準としている. この基準座標系は, Fig. 4-2 に示す EBSD の測定座標系と同一である. この場合, この基準座標系を用いると, 位置 \mathbf{a}_1 から \mathbf{a}_2 への回転を表す回転行列 $\Delta\mathbf{R}$ は以下のようになる.

$$\Delta\mathbf{R} = \mathbf{R}(\mathbf{a}_2)\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{a}_1) \quad (4-2)$$

ここで, $\mathbf{R}(\mathbf{a}_1)$ と $\mathbf{R}(\mathbf{a}_2)$ は, 位置 \mathbf{a}_1 および \mathbf{a}_2 の基準座標に対する結晶方位をもたらす回転行列である. 更に, $\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{a}_1)$ は, $\mathbf{R}(\mathbf{a}_1)$ の逆行列である.

回転行列 $\Delta\mathbf{R}$ は, aixs/angle pair と呼ばれる, 回転角 Φ および回転軸を表す単位ベクトル $\mathbf{V} = (h, k, l)$ ⁸⁾ を用いて表すこともでき, この導出を Appendix に示す.

回転行列 $\Delta\mathbf{R}$ の対数 $\ln \Delta\mathbf{R}$ は,

$$\ln \Delta\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 0 & -\omega_3 & \omega_2 \\ \omega_3 & 0 & -\omega_1 \\ -\omega_2 & \omega_1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -l\Phi & k\Phi \\ l\Phi & 0 & -h\Phi \\ -k\Phi & h\Phi & 0 \end{pmatrix} \quad (4-3)$$

と表せ, $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ は, 分割された各軸周りの回転角の合計とみなせる. この回転行列の対数 $\ln \Delta\mathbf{R}$ を用いる事で, 三次元の回転を基準座標系における各軸周りの回転として分割する事が可能となる.

Fig. 4-3 の(i)から(ii)および(iii)から(iv)の二本の矢印に対する結晶方位の変化を, それぞれ Fig. 4-5(a)および(b)に示す. このラインスキャンにおいて, 式(4-2)の右辺における原点位置 \mathbf{a}_1 を, それぞれ(i)および(iii), また, 解析対象の点である \mathbf{a}_2 をラインスキャン上の解析点とした. Fig. 4-5 に示す様に, Fig. 4-3 で観察されたすべり線と結晶方位の変化を比較する事により, このラインスキャン

した領域を分割した。すなわち，単一方向に平行なすべり線が観察される領域である[A]，[C]，[D]，[F]と，それらの領域が交わる遷移領域[B]，[E]に分割する事ができる。図中には，領域内の代表的な結晶方位を示す位置を，白抜き矢印で示している。この代表的な方位は，第二章と同様に，ある点から対象となる全ての点への回転角の総和が最小となる点の方位と定義した⁹⁾。ラインスキャン上で結晶方位の変化は，主にこの遷移領域である Fig. 4-5(a)の[B]および Fig. 4-5(b)の[E]で生じていた。

4. 3. 3 活動すべり系の解析

体心立方格子の鉄において，すべり方向は最密方向である $\langle 111 \rangle$ であり，そのバーガースベクトルは，格子定数を a とした時に $a/2\langle 111 \rangle$ となる事が知られている。一方，すべり面は三つ提唱されており， $\{110\}$ ， $\{112\}$ ， $\{123\}$ の三つの何れかまたは複数が活動する可能性がある。各領域におけるすべり系を推定するため，EBSDの結果を用いて三つのすべり面のトレースの方向と，Fig. 4-3に示したFE-SEMによるすべり線の方向を比較した。Fig. 4-6に，単一方向に平行なすべり線の観察された領域[A]，[C]，[D]，[F]の代表的な方位のステレオ投影図を示す。更にこのステレオ投影図上に，FE-SEMにより観察されたすべり面トレースの方向を，矢印付きの黒線で示した。これら四つ全ての領域において，すべり面は $\{110\}$ に良く一致した。この $\{110\}$ 上では，二つの $\langle 111 \rangle$ すべり方向が存在する。単純せん断による応力負荷方向を考慮した結果，領域[A]と[F]では $(0\bar{1}1)[\bar{1}11]$ ，領域[C]と[D]では $(\bar{1}01)[1\bar{1}1]$ が活動すべり系であると推定した。

今回の試験では、殆どの領域において $\{110\}\langle 111\rangle$ が活動すべり系であると推定されたため、以降の結晶回転軸の解析は、 $\{110\}\langle 111\rangle$ すべり系のみ実施した。

4. 3. 4 結晶回転軸の解析

Fig. 4-5(a)および(b)に示した結晶回転における回転軸に関し、各領域において解析した。ラインスキャンに沿った各領域での結晶回転軸の変化について、式(4-2)および(4-3)を用いた。ここで、領域内の任意の点における $\Delta\mathbf{R}$ は、式(4-2)の右辺において各領域の代表的な方位を与える位置 \mathbf{a}_i として計算した。Fig. 4-7に、 $\Delta\mathbf{R}$ の回転軸である $\mathbf{V}=(h,k,l)$ を、各領域[A], [B], [C]の代表的な方位を示すステレオ投影図上に黒点で示した。図中は、領域[A]および[C]の活動すべり面を、それぞれ灰色の点線および黒色の点線で示している。加えて、すべり線法線方向 (slip plane normal, SPN), バーガスベクトル (Burgers vector, BV), SPN および BV の両方に垂直な方向を、それぞれ○, □, △で示した。回転軸の精度は、回転角 Φ が小さくなるほど低下する。そこで、Fig. 4-7には $\Phi > 0.5^\circ$ の結果のみ示した。この結果、領域[A]における結晶回転軸は $[211]$ に近い方位に集積し、領域[C]における結晶回転軸は $[121]$ に近い方位に集積していた。これらの領域の中間に位置する遷移領域[B]では、結晶回転軸は領域[A]および[C]の結晶回転軸である $[211]$ と $[121]$ の中間に集まっていた。図中にプロットする領域[B]の結晶回転角を $\Phi > 5^\circ$ に制限する事で、更に $[211]$ と $[121]$ の中間に集積していることが明瞭となる。もう一つのラインスキャンである(iii)から(iv)の解析においても、同様の手法を用いた。遷移領域[E]における結晶回転軸の分布を、結晶回転角 $\Phi > 1.5^\circ$ としてFig. 4-8に示した。領域[B]における解析と同様に、遷移領域

[E]における結晶回転軸は、領域[D]および[F]の SPN と BV の両方に直交する方向の中間に集積していた。

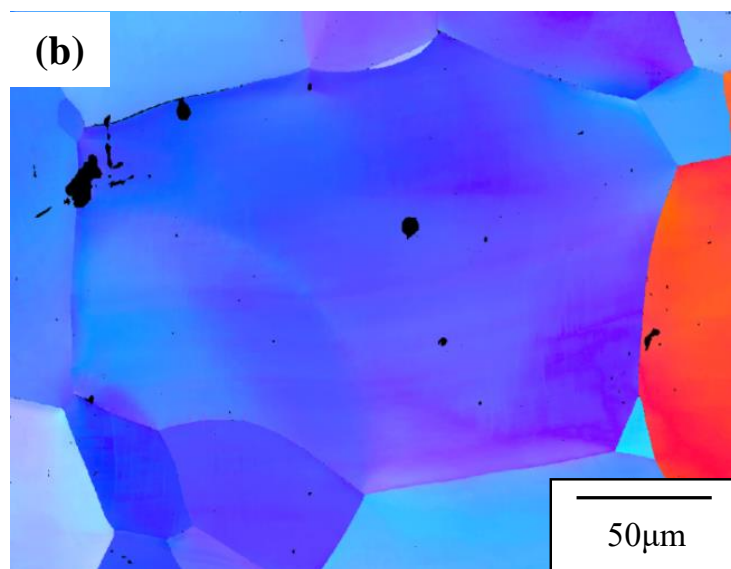
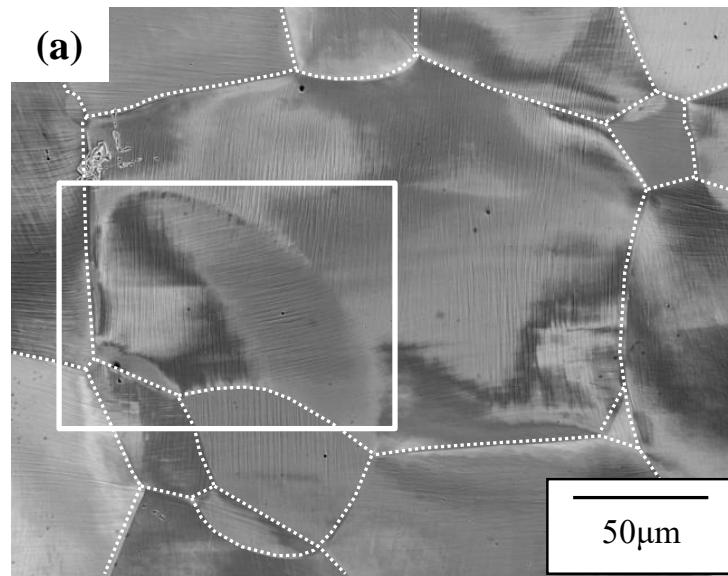


Fig. 4-2 Microstructural observation of a low carbon steel after 10% simple shear deformation. (a) FE-SEM image showing original high-angle grain-boundaries before deformation denoted by dashed white lines. A white solid square in this figure indicates magnified area shown in Fig. 4-3. (b) Inverse pole figure (IPF) map showing the crystallographic orientation of OD on the OD plane.

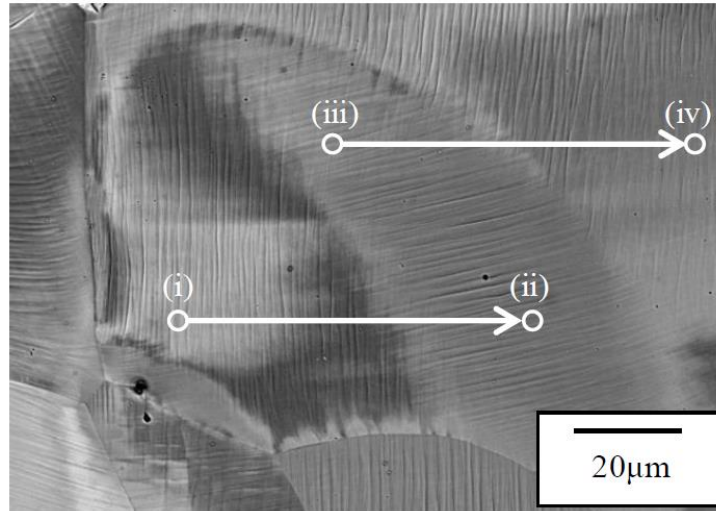


Fig. 4-3 Magnified FE-SEM image of the selected area in Fig. 4-2. The arrows heading from the points (i) to (ii) and from the points (iii) to (iv) indicate the lines that the EBSD line-scan profiles have been analyzed.

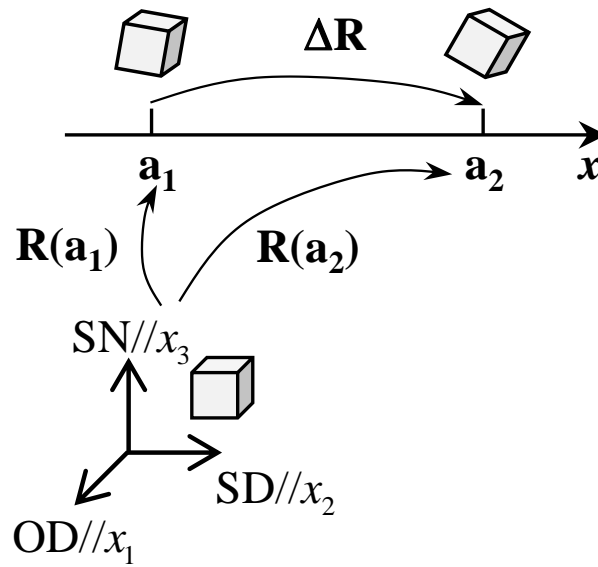


Fig. 4-4 Definition of rotation matrices \mathbf{R} and $\Delta\mathbf{R}$ showing crystal orientations obtained from the EBSD measurements. \mathbf{a}_1 and \mathbf{a}_2 show the locations where the EBSD measurements are made. The reference frame is the simple-shear-test coordinate frame shown in Fig. 4-1.

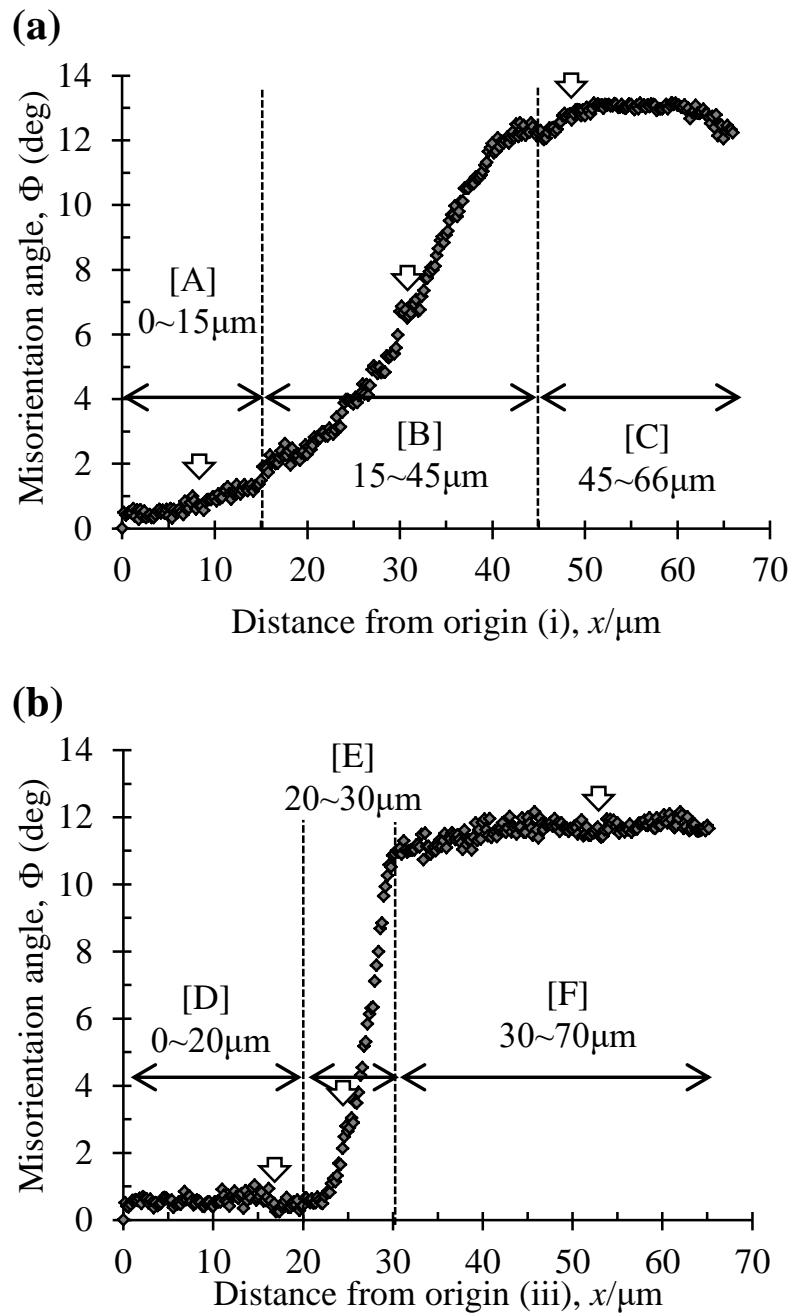


Fig. 4-5 The variations of the point-to-origin misorientation angles along the arrows in Fig. 4-3. (a) From the origin (i) to (ii) and (b) from the origin (iii) to (iv). Open arrows indicate locations of representative orientations in each region from [A] to [F].

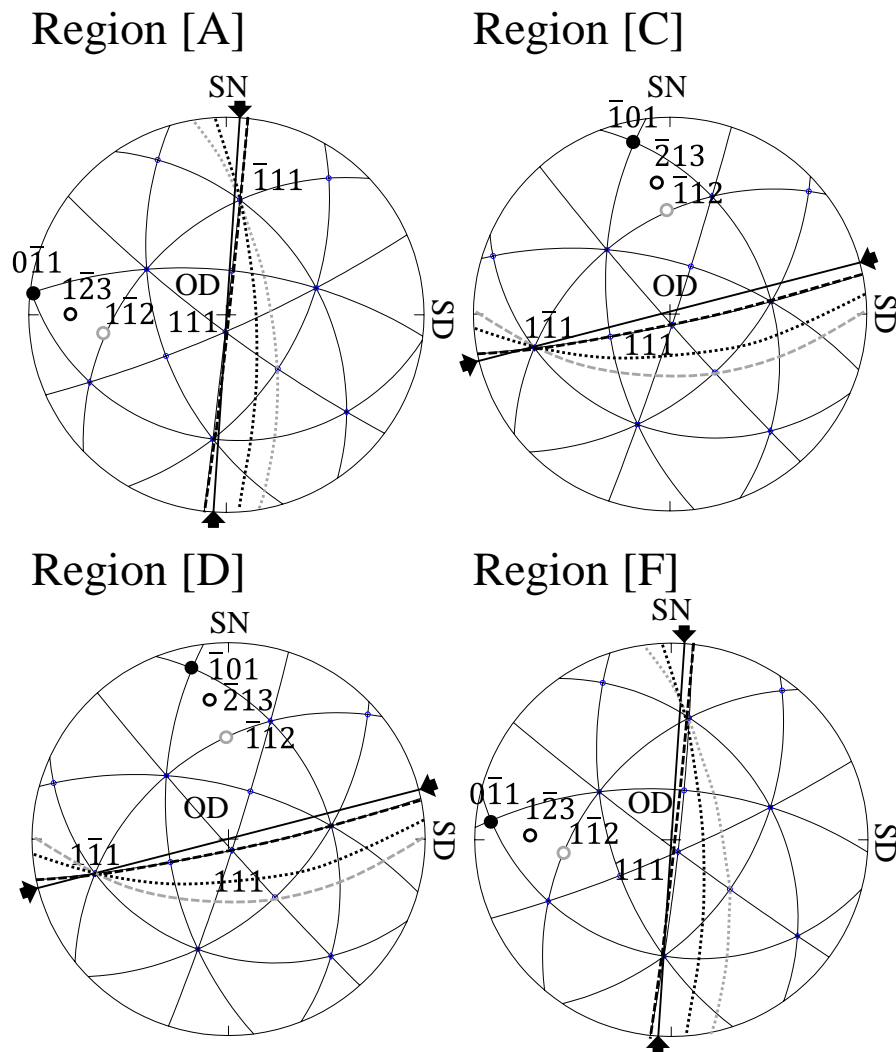


Fig. 4-6 Stereographic projections of the representative orientations in region [A], [C], [D] and [F] in Fig. 4-5. Directions of slip lines observed in Fig. 4-3 are indicated by black solid lines with solid arrows. Possible slip planes are also indicated as black broken line for $\{110\}$, gray dotted line for $\{112\}$ and black dotted line for $\{123\}$.

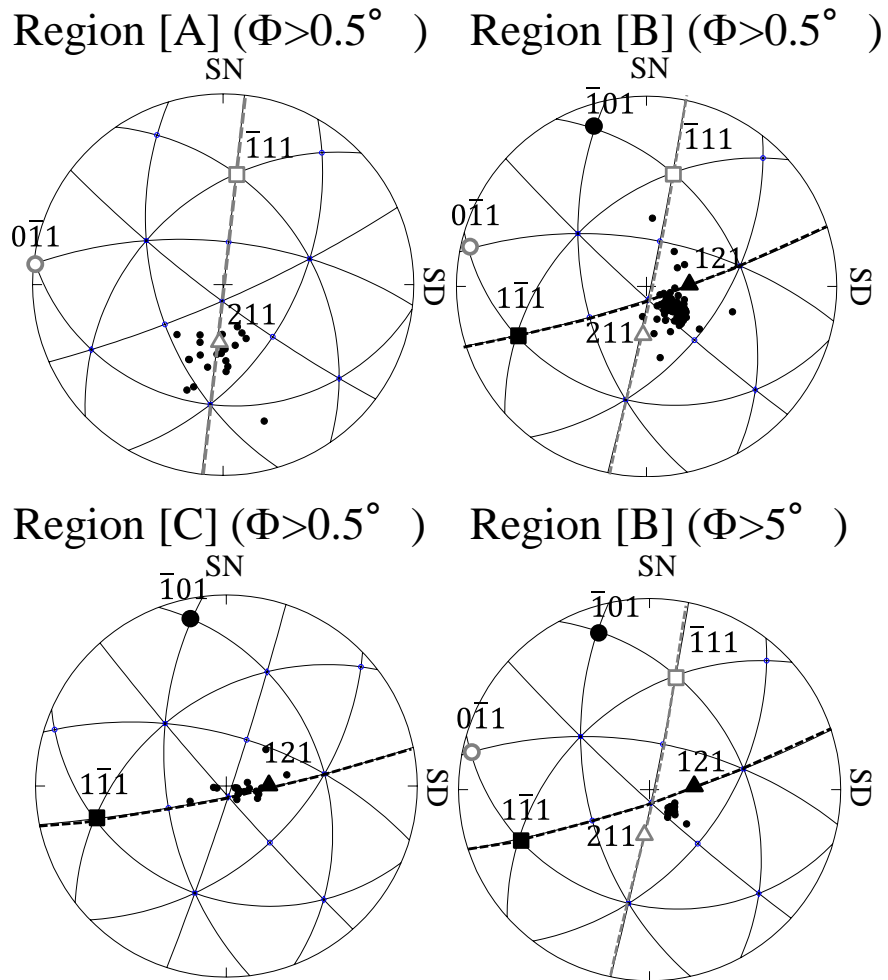


Fig. 4-7 Rotation axes whose rotation angle is more than 0.5° are plotted as black dots in the stereographic projections of the representative orientations for regions [A], [B] and [C]. Rotation axes with rotation angle of more than 5° are also plotted for region [B]. \circ , \square and \triangle indicate the slip plane normal (SPN), Burgers vector (BV) and orthogonal to SPN and BV, respectively. Open gray symbol and solid black symbol correspond to region [A] and [C]. Broken lines indicate slip planes.

Region [E] ($\Phi > 1.5^\circ$)

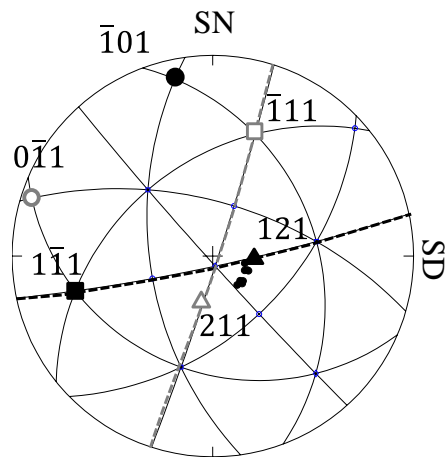


Fig. 4-8 Stereographic projection of the representative orientation in region [E] in Fig.4-5 (b). The rotation axes, indicated by black dots, are plotted for the cases in which the misorientation angle is more than 1.5° . Black and gray broken lines indicate the slip planes in region [D] and [F] respectively.

4. 4 考察

塑性変形による結晶粒微細化の初期段階において、同一の結晶粒内で異なるすべり系が活動する事により遷移領域が生成される。この結果として、これら分割された領域が互いに異なる方向に回転し、遷移領域周辺でこの異なる領域における方位差を解消する必要が生じ、すべり面上の転位が GNDs となる。この遷移領域近傍での GNDs の堆積する状況を、模式的に Fig. 4-9 に示した。各領域での結晶回転軸の解析により、遷移領域における結晶回転軸は、その両側の単一すべり方向を有する領域の SPN と BV に直交する方向の中間に堆積している事が判明した。また、各領域が異なる方向に回転した結果、それらの不整合を解消するため GNDs が必要となり、言い換えれば、この GNDs により結晶格子の回転がもたらされているとも言える。Fig. 4-7 および 4-8 より、遷移領域の生成は、微細化された各領域からの GNDs の堆積によるものであると説明する事ができる。

Fig. 4-7 および 4-8 における結晶回転軸の解析は、Fig. 4-4 における \mathbf{a}_1 を、各領域の代表的な方位を示す位置として行った。したがって、Fig. 4-7 および 4-8 のステレオ投影図は、Fig. 4-5 の各領域の代表的な方位を、単純せん断試験の座標系を基準座標として表している。しかし、すべり系の方向は、ラインスキャン上の結晶回転により連続的に変化している。結晶回転軸の変化とすべり系との結晶学的な関係を議論するためには、各解析点での結晶座標系を用いる必要がある。そこで、ラインスキャン上の任意の位置 \mathbf{a}_1 における結晶座標系を用い、位置 \mathbf{a}_1 での結晶方位 $\mathbf{R}(\mathbf{a}_1)$ から、位置 \mathbf{a}_2 への結晶方位 $\mathbf{R}(\mathbf{a}_2)$ への回転をもたらす回転行列 $\Delta\mathbf{R}_C$ として、以下の関係を示す。

$$\Delta\mathbf{R}_C = \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{a}_1)\mathbf{R}(\mathbf{a}_2) \quad (4-4)$$

種々の位置 \mathbf{a}_1 における結晶座標系 $x'_1-x'_2-x'_3$ を基準とした結晶方位での、 $\Delta\mathbf{R}_C$ の定義を Fig. 4-10 に模式的に示す. 以下の解析では、 $x'_1-x'_2-x'_3$ 座標系の各軸を、BV と SPN に直交する方向 ORD ($//x'_1$ 軸) , BV ($//x'_2$ 軸) , SPN ($//x'_3$ 軸) とした.

式(4-4)を用い、ラインスキャン上の 10 μm 間隔での $\Delta\mathbf{R}_C$ を計算し、結晶回転軸の変化を得た. この $\Delta\mathbf{R}_C$ を用いる事により、結晶回転軸を同一のステレオ投影図上に示すことができる. Fig. 4-11(a)に、位置(i)から(ii)のラインスキャンにおける、位置(i)からの距離に対する結晶回転軸の変化を示す. Fig. 4-11(a)において、ORD, BV, SPN の添え字である[A]および[C]は、これらの軸を決定するために参照した分割領域を意味しており、これらの結晶学的な方位も図中に示している. Fig. 4-11(a)のステレオ投影図の基準座標は、領域[C]の活動すべり系を基準とした. ラインスキャンにおいて、領域[A]における結晶回転軸は、 $\text{BV}_{[A]}$ と直交する面に近く、その後領域[C]に近づくにつれて、 $\text{BV}_{[C]}$ を直交する面に近づいた.

$\Delta\mathbf{R}_C$ の対数である $\ln \Delta\mathbf{R}_C$ を用いる事で、この三次元の回転を結晶座標系における各軸の回転へと分解する事が可能となる. すなわち、この $\ln \Delta\mathbf{R}_C$ の成分である回転角($\omega_{\text{ORD}}, \omega_{\text{BV}}, \omega_{\text{SPN}}$)は、回転角 Φ を領域[C]の結晶座標系である $\text{ORD}_{[C]}$ 軸, $\text{BV}_{[C]}$ 軸, $\text{SPN}_{[C]}$ 軸周りの回転に分解したものに相当する. Fig. 4-11(b)は、 Φ に対する($\omega_{\text{ORD}}, \omega_{\text{BV}}, \omega_{\text{SPN}}$)の割合を、原点位置(i)からの距離の関数として示している. この図において、領域[A]においては $\omega_{\text{SPN}} / \Phi$ が大きな割合を占めており、その

後領域[B]および[C]では $\omega_{\text{ORD}} / \Phi$ が支配的となる。

転位密度テンソルと格子湾曲テンソルとの関係から⁴⁾、結晶回転軸は GNDs のバーガースベクトルと転位線の方向、転位の配列により決まる。結晶回転軸の大部分は、バーガースベクトルと直交する方向になることを Appendix に示した。これらより、Fig. 4-11 に示した結晶回転軸の変化は、配列した GNDs に起因した結晶回転であると理解する事が出来る。

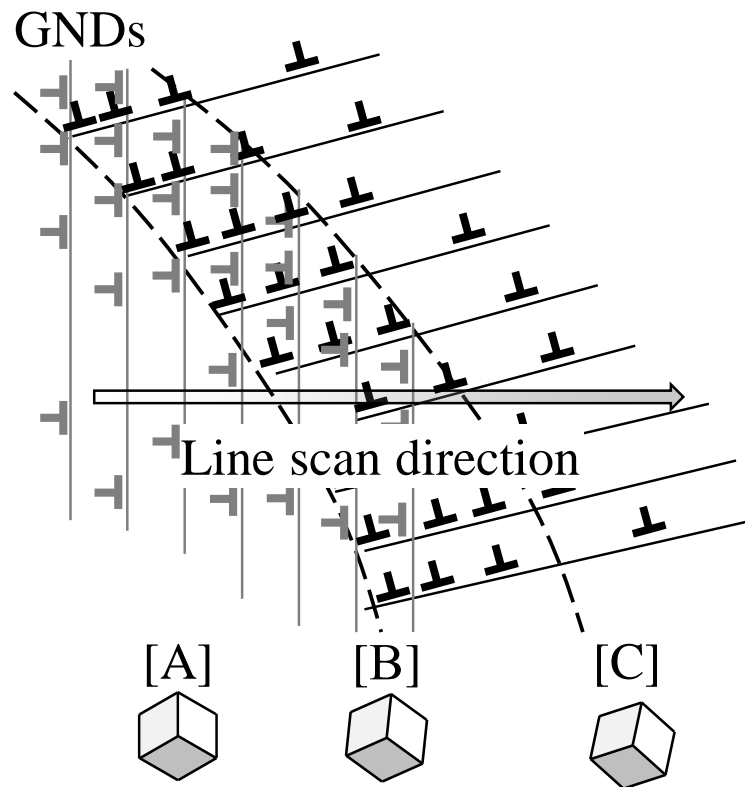


Fig. 4-9 Schematic of a wall of GNDs caused by the motion of dislocations of various slip systems. Cubes labelled [A], [B] and [C] show the variation of crystal orientation along the arrow.

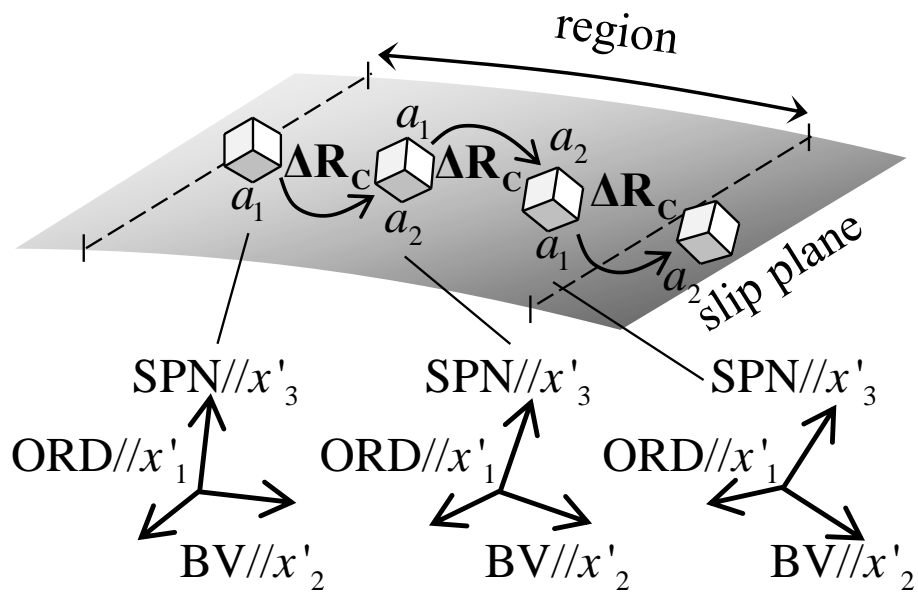


Fig. 4-10 Schematic of the calculation of rotation matrices in the region, ΔR_c of equation (4-4) with respect to the crystal coordinate frame. The crystal coordinate frames at each \mathbf{a}_1 are also indicated.

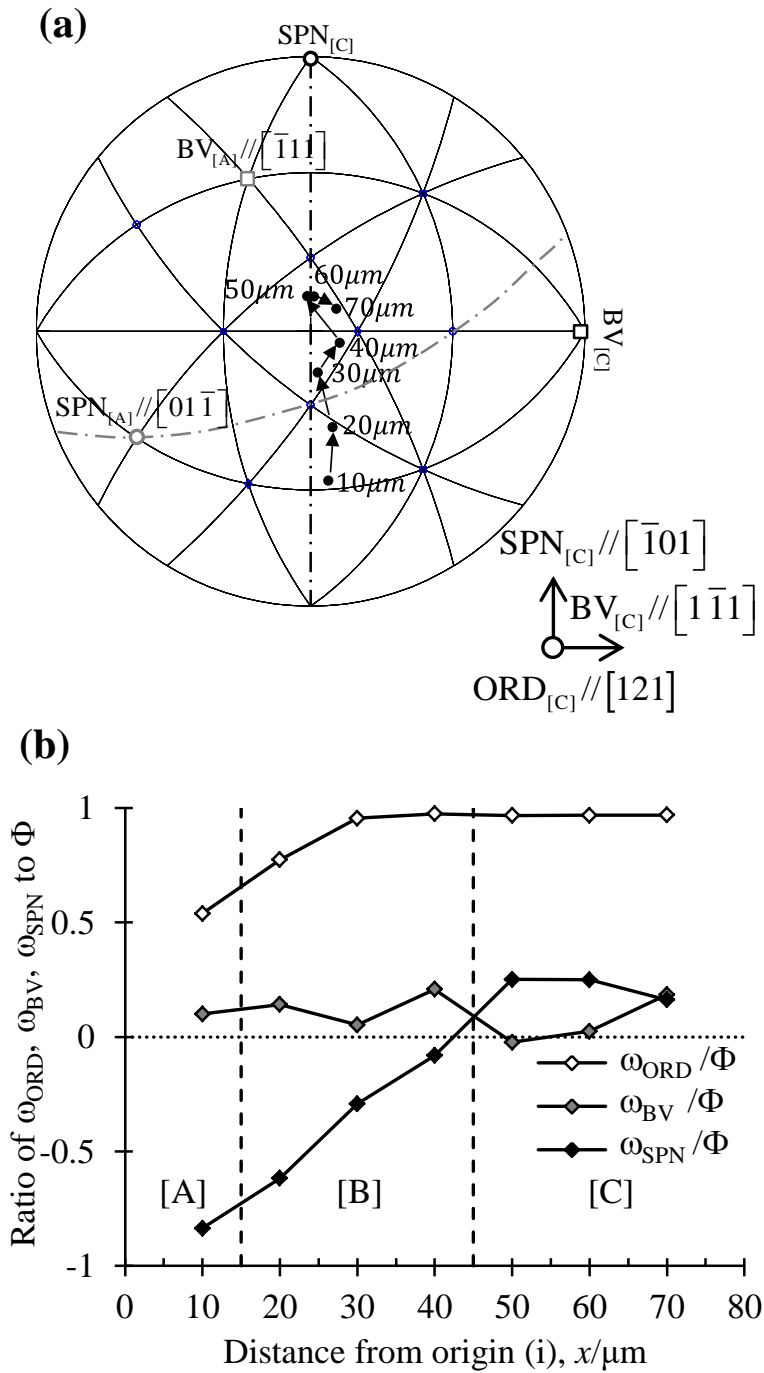


Fig. 4-11 Analysis of crystal rotation at 10 μm intervals along the line scan from (i) to (ii) in Fig. 4-3. (a) Changes of crystal rotation axes shown in the stereographic projection. Gray and black chain lines indicate the planes orthogonal to the Burgers vector for region [A] and [C]. The crystal coordinate frame is also indicated. (b) Changes of ratio of ω_{ORD} , ω_{BV} and ω_{SPN} to Φ as a function of distance from (i).

4. 5 結言

結晶粒微細化の初期段階を調査するため、10%単純せん断変形後の多結晶極低炭素鋼板の結晶方位の変化を、第二章で導入した対数角を用いて解析した。本章では、試験片表面のすべり線観察も行うことで、単純せん断変形によって活動したすべり系とバーガースベクトルを推定し、すべり系と結晶回転軸との関係を調査した。

10%の単純せん断変形により、活動すべり系が異なる二つの領域の間では約 10° 程度の方位差が生じており、その結晶回転の大半は、二つの領域の間に存在する遷移領域で起こっていた。本試験では、 $\{110\} \langle 111 \rangle$ が主な活動すべり系となっており、その結晶回転軸は各領域のすべり系から推定されるバーガースベクトルに直交する方向となっていた。

これらの関係を詳細に調査するため、バーガースベクトルに平行な方向、すべり面法線方向、そしてこれら二つの方向に直交する方向を基準座標軸とし、ラインスキャン上における位置による結晶回転軸の変化を、対数角を用いて解析した。その結果、結晶回転軸は解析対象点におけるバーガースベクトルにほぼ直交していることが示された。これは、転位密度テンソルと格子湾曲テンソルの関係から、刃状転位およびらせん転位において想定される結果と一致する。

参考文献

- 1) B. Bay, N. Hansen, D. A. Hughes and D. Kuhlmann-Wilsdorf: *Acta Metall. Mater.*, **40** (1992) 205-219.
- 2) D. A. Hughes and N. Hansen: *Acta Mater.*, **45** (1997) 3871-3886.
- 3) M. F. Ashby: *Phil. Mag.*, **21** (1970) 399-424.
- 4) J.F Nye: *Acta Metall.*, **1** (1953) 153-162
- 5) S. Sun, B. L. Adams and W. E. King: *Phil. Mag. A*, **80**(1) (2000) 9-25.
- 6) P. J. Konijnenberg, S. Zaeferrer and D. Raabe: *Acta Mater.*, **99** (2015) 402-414.
- 7) S. Bouvier, H. Haddadi, P. Levee and C. Teodosiu: *Journal of Materials Processing Tech.*, **172** (2006) 96-103.
- 8) H. Grimmer: *Acta Crystallogr. A*, **40** (1984) 108-112.
- 9) A. Yoshida, Y. Miyajima and S. Onaka: *J Mater. Sci.*, **49** (2014) 2013-2017.
- 10) E. Pina: *Eur. J. Phys.*, **32** (2011) 1171-1178.

Appendix (第4章)

A-4-1 回転行列と axis angle pair の関係

回転行列 $\Delta\mathbf{R}$ の九つの要素は, Rodrigues' の式により次の様に表せる¹⁰⁾.

$$\begin{aligned} \Delta\mathbf{R} &= \begin{pmatrix} \Delta R_{11} & \Delta R_{12} & \Delta R_{13} \\ \Delta R_{21} & \Delta R_{22} & \Delta R_{23} \\ \Delta R_{31} & \Delta R_{32} & \Delta R_{33} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (1-h^2)\cos\Phi+h^2 & hk(1-\cos\Phi)-l\sin\Phi & lh(1-\cos\Phi)+k\sin\Phi \\ hk(1-\cos\Phi)+l\sin\Phi & (1-k^2)\cos\Phi+k^2 & kl(1-\cos\Phi)-h\sin\Phi \\ lh(1-\cos\Phi)-k\sin\Phi & kl(1-\cos\Phi)+h\sin\Phi & (1-l^2)\cos\Phi+l^2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A11})$$

これらの関係から, Φ と $\mathbf{V}=(h,k,l)$ は, 以下の様に計算される.

$$\Phi = \cos^{-1}\left(\frac{\Delta R_{11} + \Delta R_{22} + \Delta R_{33} - 1}{2}\right) \quad (\text{A12})$$

$$(h, k, l) = \left(\frac{\Delta R_{32} - \Delta R_{23}}{2\sin\Phi}, \frac{\Delta R_{13} - \Delta R_{31}}{2\sin\Phi}, \frac{\Delta R_{21} - \Delta R_{12}}{2\sin\Phi}\right) \quad (\text{A13})$$

A-4-2 転位列に起因した結晶回転の回転軸

転位密度テンソル α_{ij} と格子湾曲テンソル κ_{ij} との関係は⁴⁾,

$$\alpha_{ij} = \kappa_{ji} - \delta_{ij}\kappa_{kk} \quad (i, j, k = 1, 2, 3) \quad (\text{A14})$$

となる. ここで, δ_{ij} はクロネッカーデルタであり, $i=j$ では $\delta_{ij}=1$, $i \neq j$ では $\delta_{ij}=0$ となる関数である. α_{ij} の異なる表現として, バーガスベクトル \mathbf{b}_i と,

転位線に平行な単位ベクトル \mathbf{r}_i , 転位線に垂直な面の単位面積あたりの転位の本数 n との関係から, 以下の様に表せる.

$$\alpha_{ij} = n\mathbf{b}_i\mathbf{r}_j \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (\text{A15})$$

更に κ_{ij} は, x_i 軸周りの格子回転 ϕ_i から,

$$\kappa_{ij} = \partial\phi_i / \partial x_j \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (\text{A16})$$

と表せる. 式 (A14) から (A16) より, バーガスベクトルと結晶回転軸との関係は,

$$\begin{aligned}
\mathbf{a}_{ij} &= \begin{pmatrix} nb_1r_1 & nb_1r_2 & nb_1r_3 \\ nb_2r_1 & nb_2r_2 & nb_2r_3 \\ nb_3r_1 & nb_3r_2 & nb_3r_3 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} -\left(\frac{d\phi_2}{dx_2} + \frac{d\phi_3}{dx_3}\right) & \frac{d\phi_2}{dx_1} & \frac{d\phi_3}{dx_1} \\ \frac{d\phi_1}{dx_2} & -\left(\frac{d\phi_3}{dx_3} + \frac{d\phi_1}{dx_1}\right) & \frac{d\phi_3}{dx_2} \\ \frac{d\phi_1}{dx_3} & \frac{d\phi_2}{dx_3} & -\left(\frac{d\phi_1}{dx_1} + \frac{d\phi_2}{dx_2}\right) \end{pmatrix} \quad (\text{A17})
\end{aligned}$$

となる．刃状転位の成分である $i \neq j$ を見ると， \mathbf{b}_i と ϕ_j は直交している．しかし，らせん転位の成分では，以下の関係となる．

$$\begin{aligned}
\kappa_{ij} &= \alpha_{ji} - \frac{1}{2} \delta_{ij} \alpha_{kk} = \begin{pmatrix} \kappa_{11} & \kappa_{12} & \kappa_{13} \\ \kappa_{21} & \kappa_{22} & \kappa_{23} \\ \kappa_{31} & \kappa_{32} & \kappa_{33} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\alpha_{11} - \alpha_{22} - \alpha_{33}) & \alpha_{21} & \alpha_{31} \\ \alpha_{12} & \frac{1}{2}(\alpha_{22} - \alpha_{33} - \alpha_{11}) & \alpha_{32} \\ \alpha_{13} & \alpha_{23} & \frac{1}{2}(\alpha_{33} - \alpha_{11} - \alpha_{22}) \end{pmatrix} \quad (\text{A18})
\end{aligned}$$

例として， $\alpha_{11} = \alpha$ かつその他の成分が $\alpha_{ij} = 0$ と仮定し，微小体積 $(\delta x_1, \delta x_2, \delta x_3)$ の中で列状に並んだ平行ならせん転位の状況を，模式的に Fig. A-1 に示す．この過程の下では，格子湾曲テンソルは，

$$\begin{pmatrix} \kappa_{11} & \kappa_{12} & \kappa_{13} \\ \kappa_{21} & \kappa_{22} & \kappa_{23} \\ \kappa_{31} & \kappa_{32} & \kappa_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\alpha}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\alpha}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \quad (\text{A19})$$

となる．この場合，解析を行うラインスキャンの方向が， x_1 軸に平行な場合，結晶 x_1 軸周りに回転する．一方，ラインスキャンの方向が， x_2 軸または x_3 軸に

平行な場合も、 x_2 軸または x_3 軸が結晶回転軸となる。すなわち、 $\alpha_{11} = \alpha$ かつその他の成分が $\alpha_{ij} = 0$ の場合、 x_1 軸と平行な方向にバーガースベクトルが向いているため、らせん転位群をそのバーガースベクトルと平行な方向にラインスキャンした時のみ、結晶回転軸がバーガースベクトルと直交ではなくなる。

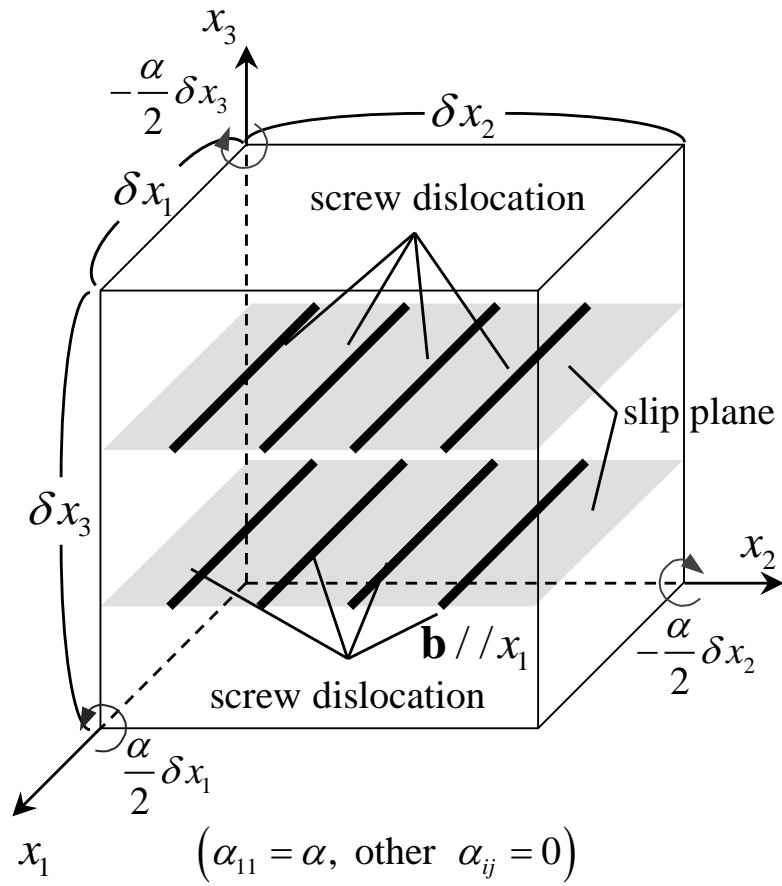


Fig. A-1 Schematic of the arrays of screw dislocations in volume when $\alpha_{11} = \alpha$, and other $\alpha_{ij} = 0$.

第5章 結論

5. 1 本論文の総括

金属材料の塑性変形に伴う組織変化を解析する上で, EBSD による局所的な結晶方位の測定は, 非常に有用な測定手法である. 先行研究において, 得られた結晶方位情報を基に, KAM や GROD などの解析手法を用いた場所による結晶方位の変化と, 金属材料中の組織変化とを関係付けたものはあるが, その結晶方位の回転量を任意の基準座標系へ分割し解析した例は少ない. 本研究では, 回転行列 \mathbf{R} の対数 $\ln \mathbf{R}$ から得られる三つの特性角度を対数角と呼び, 対数角により金属材料中に堆積した転位群と結晶方位の回転との関係について解析する事を目的とした. そして, 結晶方位の代表的な表記方法であるオイラー角と異なり, 対数角は同一の \mathbf{R} に対し一意に決まる特性角である事を示した. また, 対数角を用いた解析により, 結晶回転を任意の基準座標軸周りの回転に分割し, 転位群により生じる結晶回転の回転軸が, 活動すべり系のバーガースベクトルとほぼ直交することを示した. 以下に各章の結論を総括する.

第2章「回転行列の対数が与える結晶方位に関する特性角度」では, 結晶方位とその変化は回転行列 \mathbf{R} によって表現されるものであるが, 反対称テンソルである \mathbf{R} の対数 $\ln \mathbf{R}$ の三つの独立な実数成分を対数角と呼ぶ事とした. この対数角は, \mathbf{R} がもたらす回転を直感的に理解するために指標となる角度であることをゴニオステージ模型によって示した. 三つの角度の組である対数角は, \mathbf{R} による回転を直交座標系の基準座標軸周りの回転に分解したときの成分とみなせ, 種々に定義されているオイラー角とは異なり, \mathbf{R} に対して一意的に決まる角度の組となる事を示した.

第3章「転位群により生じる結晶回転の対数角による解析」では、対数角の概念を、転位群がもたらす結晶回転に適用した。材料中に存在する転位群や転位壁によって、これらを横切る二点間で生じる結晶回転に対し、微小回転の合計である対数角の概念が適用できることを示した。すなわち、場所による結晶方位の変化は、対数角の変化として与えられる。転位壁に対する解析例として、冷間圧延後の銅単結晶に生じた結晶方位の分裂について、対数角を用いて解析した。この結果、TD軸である $[110]$ 周りの回転が、面心立方格子の $(\bar{1}1\bar{1})[0\bar{1}\bar{1}]$ と $(\bar{1}1\bar{1})[10\bar{1}]$ の2つのすべり系での刃状転位列によって生じる、 $[21\bar{1}]$ および $[121]$ 周りの回転の重ね合わせであることを解析した。

第4章「極低炭素鋼の塑性変形に伴う結晶回転の解析」では、結晶粒微細化の初期段階を調査するため、10%単純せん断変形後の多結晶極低炭素鋼板の結晶方位の変化を、対数角を用いて解析した。10%の単純せん断変形により、活動すべり系が異なる二つの領域の間では約 10° 程度の方位差が生じており、その結晶回転の大半は、二つの領域の間に存在する遷移領域で起こっていた。本試験では、 $\{110\}\langle 111\rangle$ が主な活動すべり系となっており、その結晶回転軸は各領域のすべり系から推定されるバーガースベクトルに直交する方向となっていた。これらの関係を詳細に調査するため、バーガースベクトルに平行な方向、すべり面法線方向、そしてこれら二つの方向に直交する方向を基準座標軸とし、ラインスキャン上における位置による結晶回転軸の変化を、対数角を用いて解析した。その結果、結晶回転軸は解析対象点におけるバーガースベクトルにほぼ直交していることが示された。これは、転位密度テンソルと格子湾曲テンソル

の関係から、刃状転位およびらせん転位において想定される結果と一致する。

5. 2 今後の展望

以上のように、塑性変形に伴う結晶方位変化を、その回転角のみならず回転軸や任意の基準座標に対する回転角を考えるうえで、対数角が非常に有用な解析手段になる事を示した。現状では、実験結果に対する解析事例は多くなく、今後さらなる適用の拡大により、種々の転位組織との関係を明らかとできる事が期待される。この適用範囲は、今回研究対象とした塑性変形に伴う金属材料中への転位群の堆積以外にも、マルテンサイト変態により導入される変態転位などへの適用も期待される。このような適用拡大に際し、多結晶組織に対する角度情報の処理が簡便に実行できるようになる必要性もあり、研究対象の広がりに応じたプログラムコードの開発も重要となると考えられる。

本博士論文に関係した投稿論文

(第2章)

“Log Angles: Characteristic Angles of Crystal Orientation Given by the Logarithm of Rotation Matrix”

K. Hayashi, M. Osada, Y. Kurosu, Y. Miyajima and S. Onaka:
Materials Transactions, **57** (2016), 507-512.

林 邦夫、長田 礎、黒須悠基、宮嶋陽司、尾中 晋
“対数角：回転行列の対数が与える結晶方位に関する特性角度”
日本金属学会誌, **79** (2015), 9-15. (上記研究の和文による報告)

(第3章)

“Interpretation of Elements of the Logarithm of a Rotation Matrix as Rotation Components around Coordinate Axes of a Reference Frame”

S. Onaka and K. Hayashi:
Journal of Mathematical Chemistry, **54** (2016) 1686-1695.

“Description of Changes in Crystal Orientations by the Elements of Logarithm of a Rotation Matrix”

S. Onaka and K. Hayashi:
Scanning, (2017) Article ID 4893956, doi.org/10.1155/2017/4893956, 7 pages.

(第4章)

“Analysis of Inhomogeneous Crystal Rotation in a Grain after Plastic Deformation of a Polycrystalline Low Carbon Steel”

K. Hayashi and S. Onaka:
Materials Transactions, (2018) Article ID M2017337,
doi.org/10.2320/matertrans.M2017337, in press.

謝辞

本博士論文の執筆に際し、非常に丁寧にご指導を頂きました東京工業大学総合理工学研究科材料物理科学専攻（現、物質理工学院）・尾中晋教授には、心より感謝いたします。また、新日鐵住金（株）・加藤雅治顧問および東京工業大学総合理工学研究科・中田伸生准教授には、副査を務めていただき、研究内容に関するご指導およびご意見を賜り感謝いたします。さらに、本博士論文をまとめるにあたり、東京工業大学総合理工学研究科・梶原正憲教授、同総合理工学研究科・木村好里准教授、同総合理工学研究科・寺田芳弘准教授には、貴重なご意見を頂き深く感謝致します。

本論文では、金属材料中に存在する転位によりもたらされる結晶回転に関して知見をまとめたものでありますが、転位に関する研究テーマを始められたのも、2011年から2013年の2年間 University of Cambridge の Department of Materials Science and Metallurgy での研究業務が大きく影響しております。この間のご指導いただきました Prof. Pedro Rivera-Diaz-del-Castillo（現 Lancaster University）、そしてこの機会を与えてくださりました、新日鐵住金（株）鉄鋼研究所・高橋学所長および名古屋製鉄所・藤田展弘副所長に、深く感謝いたします。また、2014年から社会人博士課程を開始するに際し、快く承認いただきました吉永直樹フェロー（当時薄板研究部部長）および上西郎弘部長（当時薄板研究部 Gr 総括）にお礼を申し上げます。本博士論文のまとめる時期であった2017年7月に技術開発本部君津技術研究部に異動後、論文執筆のための時間を確保いただいた中田匡浩総括に深く感謝いたします。

本論文の第2章に用いていた銅単結晶の結晶方位変化の実験は、尾中研究室

に所属しておりました長田礎様，黒須悠基様，宮嶋陽司助教の採取されたデータであり，このような貴重なデータを提供いただきました事に感謝いたします。

最後になりますが，本博士論文をまとめられるに至った私の知識の形成には，諸先生方のご指導の賜物であることはもちろんの事，種々のディスカッションをさせて頂きました社内外の方々と過ごした時間があったからこそだと感じております。この場をお借りして心よりお礼申し上げます。