

1. はじめに

結晶の塑性変形は、微視的には転位の生成と伝搬からなる。したがって、転位挙動に及ぼす応力や温度の効果を知ることは金属結晶の変形や破壊を制御する上で重要である。LiF中の転位速度が、分解せん断応力の関数として、Johnstonらにより、実験的に計測されている¹⁾。近年、分子動力学法がメソスコピックの変形や破壊の現象について適用されている²⁾。Schitzら³⁾は、fcc Cuの引張変形下における転位速度についての分子動力学計算結果を発表している³⁾。彼らは、高速せん断変形条件下で、刃状転位の速度が横波の音速と同程度となることを報告しているが、温度条件については明らかにしてはいない。

本研究では、単結晶Niについて一軸引張条件下での高速変形の分子動力学シミュレーションを行い、刃状転位挙動の温度依存性を明らかにする。

2. シミュレーション方法

系は、fccユニットセル $10 \times 10 \times 10$ からなり、総原子数は4000である。温度条件は、77–1200 Kの範囲に設定した。系のy方向は周期境界条件、系のxならびにz方向は自由表面とした。一軸引張変形は、系のy方向のセル長を、 $0.1\%/0.5\text{ps}$ で強制スケーリングすることによって行った。転位速度は、 $\{111\}$ 面上の $\langle 112 \rangle$ 方向において定義し、およそ1 ps間の転位の位置をプロットし、その傾きから計算した。見かけのヤング率は、スケーリングひずみが $0.4 \sim 2.4\%$ までの弾性範囲において、応力ひずみ線図から求めた。みかけのひずみ ε 、密度 ρ 、ならびに、ヤング率 E については、熱膨張の効果を補正している。その他の計算手法の詳細は、相原らによる既報^{4,6)}に準ずる。

3. 結果および考察

温度1000 K以下においては、弾性変形後、Ni単結晶の自由表面の角近傍に点欠陥が発生し、ここを起点として、1本の部分刃状転位が自由表面の角から発生する（降伏点）。この第1の部分転位は、その長さを変えながら $\{111\}$ 面上を伝搬していく。最初の転位が結晶中を伝搬する間、同じ $\{111\}$ 面に2番目の転位は発生しないため、積層欠陥の領域が拡大していく。

各温度における、降伏点におけるみかけのひずみ（熱膨張の影響は補正済）についての温度依存性は小さく、その平均は、 $8.04 \pm 0.53\%$ である。これは結晶表面における転位の核発生が、原子の最

隣接距離の瞬間的な最小値、すなわち、原子の熱振動の振幅の変化と格子の熱膨張に、影響を受けることが原因と考えられる。シミュレーションで求められた降伏応力の温度依存性を図1に示す。温度の上昇とともに、転位はより低い応力で伝搬するようになる。図2は298 Kでの値で規格化したヤング率の温度依存性を示す。シミュレーション結果は実験結果と良く一致している。

横波の音速 v_s^T を、次式より計算した。

$$v_s^T = \{E/[2\rho(1+\nu)]\}^{0.5}$$

ここで、はポアソン比 ν には実験値の0.312を用いた⁵⁾。各温度における、横波の音速により規格化した転位速度を図3に示す。600 K以下では転位速度は横波の音速の70%のオーダーである。規格化した転位速度は600 K以上においては、温度の上昇と共に直線的に減少する。

一方、1200 Kにおいては、上記とは異なる変形挙動を示した。図4は1200 KにおけるNi単結晶のスナップショットである。 $[001]$ 方向は引張り方向に対して垂直であり、 $[010]$ 方向は引張り方向に対して平行である。43.5 psが1200 Kにおける降伏点に達した時間である。弾性変形域である25.5 psでは、自由表面の原子は乱れた構造をとっている。結晶内には多くの空孔が生成し、原子配列の規則性に乱れが生じている。 $[010]$ 方向においては20の (010) 面が存在する。応力ひずみ線図において塑性変形領域である53.0 psでは、 $[010]$ 方向におけるfcc構造の長期の周期性はほとんど消失しているが、 $[001]$ 方向においては長期の周期性を示す原子もいくらか見受けられる。53.0 psから73.0 psの間で同素変態が起こり、応力の緩和は転位の発生を伴わず原子の協調運動によってなされる。73.0 psにおける構造は (010) 面における2次元液体になっていると考えられる。引張り方向である $[010]$ 方向においては、21枚の (010) 面が存在しており、新たな面が発生していることがわかる。

4. まとめ

転位挙動の温度依存性は3つに分類できる。

(1) 低温においては、刃状転位は横波の音速のオーダーで伝搬する。(2) 中間温度域では温度の上昇と共に転位速度は減少する。この減少には2つの原因が考えられる。第一は、温度の上昇によりNiが軟化し降伏応力が減少したこと（転位速度は応力のべき乗で変化するため）。第二は、転位とフォノン（熱振動）との散乱ないしは粘性相互作用である。(3) 高温域では、高ひずみ下においても転位はすぐには動けなくなる。

マクロな視点から、本高速引張変形挙動をみると、第一の低温域は金属結晶の脆性破壊の挙動、第二の中温域は、金属結晶の塑性変形的延性挙動、第三の高温域は、金属結晶の粘弾性挙動であると言える。

参考文献

- 1) W. G. Johnston and J. J. Gilman: J. Appl. Phys., **31** (1959) 129-140.
- 2) H. Kitagawa, T. Aihara, Jr., and Y. Kawazoe: *Mesoscopic Dynamics of Fracture*, (Springer-Verlag, Berlin, 1998), pp. 1-248.
- 3) J. Schiotz, K. W. Jacobsen and O. H. Nielsen: Philos. Mag. Let. **72** (1995) 245-250.
- 4) T. Aihara and T. Sho: Mater. Trans. JIM **40** (1999) 1281-1287.
- 5) 日本機械学会：技術資料金属の弾性係数 (1980) pp. 151-155.
- 6) T. Aihara, R. Kaneko, M. H. F. Sluiter and Y. Kawazoe: Mater. Trans. JIM **42** (2001) 425-428.

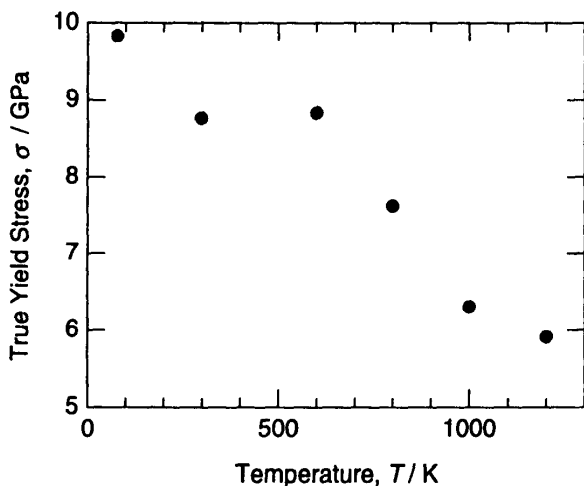


Fig. 1. Temperature dependence of the true yield stress of fcc Ni single crystal.

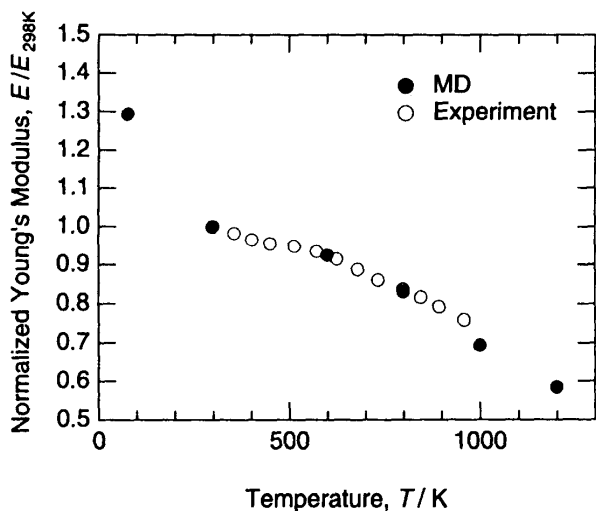


Fig. 2. Temperature dependence of the normalized Young's moduli by that at 298 K for MD and experiment⁵⁾.

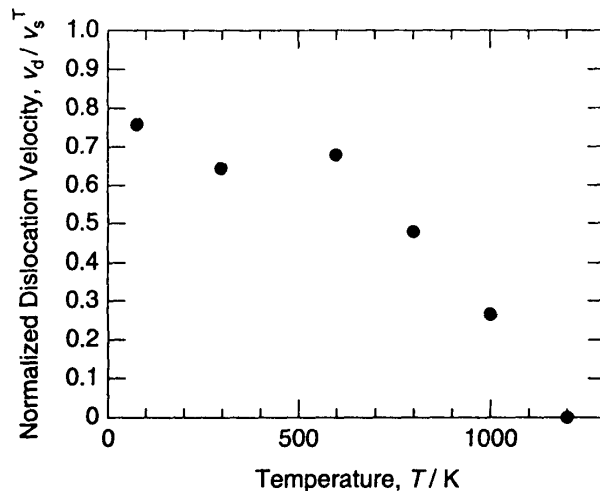


Fig. 3. Temperature dependence of the normalized edge dislocation velocity by the transverse sound velocity in the <112> direction on the {111} plane at each temperature. Both velocities are results of MD simulation.

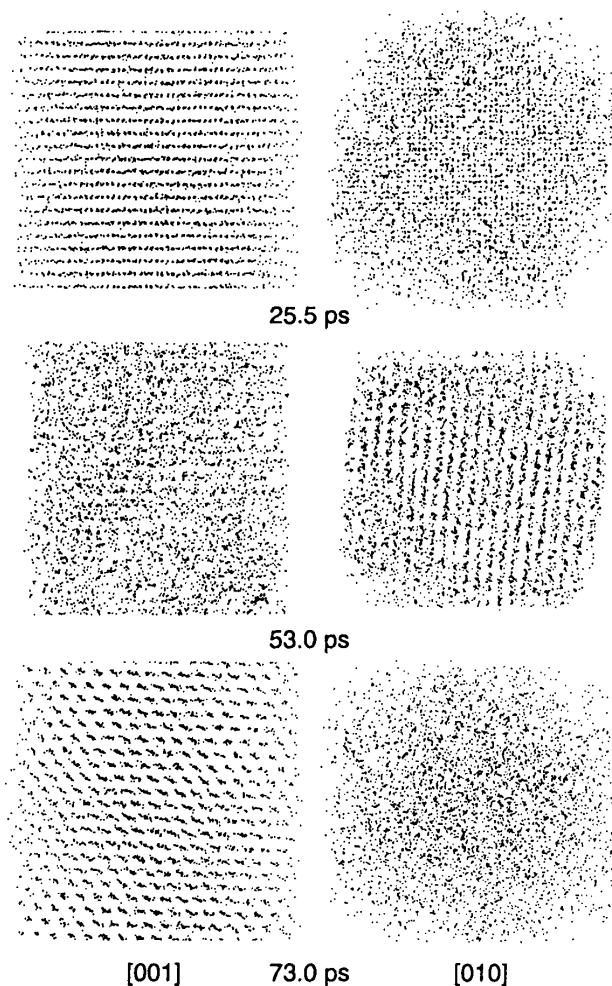


Fig. 4. Snapshots of the Ni single crystal at 1200 K from [001] and [010] directions. The tensile direction is paralleled to [010] direction and perpendicular to [001] direction. Time 43.5 ps corresponds to yield point at 1200 K.