

# FCC 金属における交差すべりを考慮した 転位動力学シミュレーション

大阪市立大学[院] ○広田真一 大阪市立大学 兼子佳久

大阪市立大学 橋本 敏

## 1 緒 言

金属結晶の塑性変形は、転位と呼ばれる線状の格子欠陥がすべり面上を運動することで発生する。転位周囲の結晶は歪んでいるので応力場を発生する一方、その転位自身も他の転位による応力場により運動する。また転位は運動によって増殖するので、その相互作用は複雑になり解析的に結晶の塑性変形を扱うことは難しい。そこで近年、転位動力学法を用いたシミュレーションが注目されている<sup>(1,2)</sup>。本研究では、離散化転位動力学法(Discrete Dislocation Dynamics: DDD)を用いて、銅における転位運動をシミュレートした。FCC 金属において、らせん転位の交差すべりは、塑性変形、特にステージIIIにおける動的回復において重要な役割を果たすので、らせん転位の交差すべりに着目した。

## 2 シミュレーション法

らせん成分と刃状成分の2種類の微小セグメントを用いて転位線を近似した。各セグメントから生じる応力場は De Wit の式にしたがって計算した。Peach-Koehler の式を用いることにより、その内部応力および外部応力から転位に作用する力を求めた。さらに線張力や交差すべりに必要な応力も考慮し、転位の運動方向や速度を計算した。このような過程を微小時間ごとに繰り返すことにより、転位運動をシミュレートした。

らせん転位は2つのすべり面に属しているため、交差すべり運動が可能である。しかし交差すべりするためには拡張している転位線がいったん収縮する必要がある。そのためには余分なエネルギーを必要とする。Duesbery によるの原子レベルでのシミュレーション<sup>(3)</sup>の結果、拡張転位の交差すべりにおいて、収縮応力と交差応力が重要であることが示されている。すべり面に平行でらせん転位の方に垂直なせん断応力、すなわち収縮応力の作用により、らせん転位の拡張幅がある程度収縮する。そのような収縮した転位は交差すべり面上の応力が大きくなれば交差すべりする。交差すべりを起こす臨界応力(交差すべり応力)は転位の拡張幅に依存して変化する。Duesbery によれば、例えば  $0.035\mu$  の収縮応力が加わると、らせん転位の拡張幅は  $1.55b$  にまで小さくなる。その  $1.55b$  の拡張幅を持つらせん転位が交差すべりを起こすには、 $0.023\mu$  以上の交差応力を必要とする。このように収縮応力に応じて、交差すべりに必要な交差応力を決定する。

## 3 実験結果と考察

### (1) Frank-Read 機構による増殖の臨界せん断応力

シミュレーションの妥当性を検討するため、Frank-Read 機構における臨界せん断応力を調査した。(111)面上に両端を固定した刃状転位を配置し、それに一定のせん断応力を加えた。Figure2 に臨界応力と FR 源の幅  $l$  との関係を示す。図中の理論

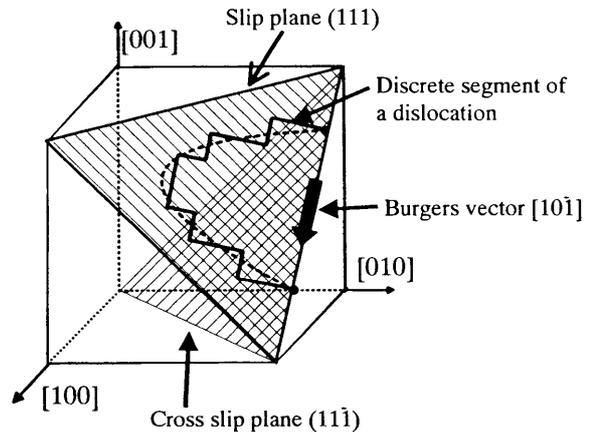


Fig.1 Schematic representation of a planar dislocation (dotted line) and discretized approximation of edge and screw dislocation segments(thick solid lines).

値は  $\mu b/l$  から計算した。 $l$  は FR 源となる転位の長さである。理論値と同様、転位セグメント長と臨界せん断応力との間に反比例の関係が見られた。FR 源の長さが短いでは理論値との差が大きいが、長くなるにつれその差は小さくなった。これによって、2つの方向成分に離散化された転位線によって実際の湾曲する転位線を近似した場合でも、転位線が長ければ、精度の良い近似になることがわかる。

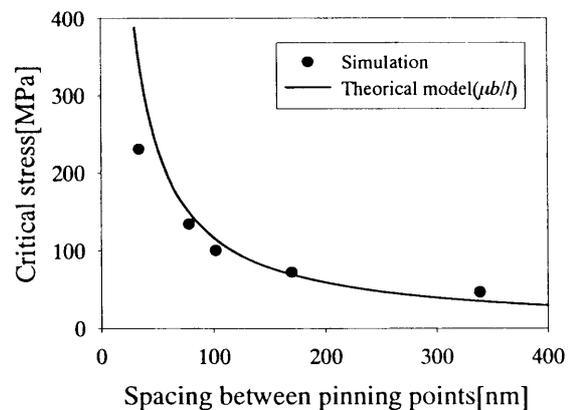


Fig.2 Dependence of the critical resolved stress on a width of Frank-Read source.

(2) 交差すべりによる転位双極子の消滅

平行な2つの(111)面上に、反対方向のバーガースベクトルをもつ[101]方向のらせん転位を距離272nmだけ離して配置した。それぞれの転位線の長さは314nmで、その両端を固定した。[101]方向を $x_1$ 、[12 $\bar{1}$ ]方向を $x_2$ とした座標系において、一定外部応力を加えた。負荷条件は、(i) $\tau_{13}$ (=-100MPa)のみの場合と、(ii)さらに $\tau_{12}$ (=-800MPa)の一定荷重応力を加えた場合の2つの条件においておこなった。初期において、双方の転位線は $\tau_{13}$ の外部応力によりすべり面上を運動し、互いに接近する。(i)の条件では、互いの転位がすべり面間隔程度に接近する位置において、らせん転位双極子が形成され、安定構造となった。一方(ii)の条件では、外部応力と転位間の引力によって交差すべりすることにより、転位双極子は消滅しジヨグが形成された。

(3) 応力-ひずみ関係における交差すべりの影響

計算の対象として、6つの(100)面に囲まれた一辺277nmの立方体の結晶粒を設定した。(111)面上にFrank-Read源のらせん転位を、その近くに球状の障害物を配置した。この結晶粒に対し、[100]方向から $5.0 \times 10^{18}$ Pa/sの定速度で引張応力を加えた。Figure4に外部応力の変化にともなう転位配列の変化を示す。900MPaでは交差すべりは発生せず、粒子周りにオロワングループが形成され、粒界付近で転位の堆積が見られる。さらに応力を増加させると、FR源から新たに活動する転位が粒子周りで交差すべりした。これは、オロワングループを形成する転位から反発力を受けるため、主すべり面上の分解せん断応力が減少するが、交差すべり面上の応力はそのまま増加し続けたことが原因である。

Figure5に応力-ひずみ線図を示す。ここで見られるステップ状のひずみ硬化は、オロワングループの形成や粒界付近での転位の堆積により生じるものである。また、応力が1.1GPa付近でひずみ硬化率の減少が顕著になる。このような動的回復は交差すべりの発生と対応している。

4 結言

1. 離散化転位動力学法を用いた転位運動のシミュレーションにおいて、Frank-Read機構、オロワングループの形成、転位双極子の形成および交差すべりによるその消滅を再現した。
2. Frank-Read源の転位増殖に対する臨界応力はFrank-Read源の幅が増加するにつれて減少した。この結果は線張力にもとづく解析値と定性的にも一致した。
3. 転位運動に対する障害物の存在により加工硬化が生じること、その後交差すべりが発生することによって動的回復が起こることが応力-ひずみ線図で確認できた。

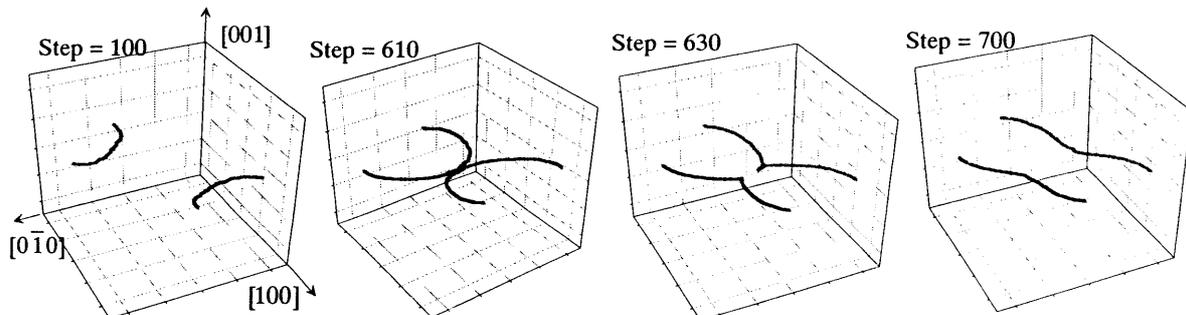


Fig.3 Annihilation of a screw dipole by cross-slip: two dislocations of opposite sign glide in neighboring parallel slip planes and annihilate each other by changing their slip planes.  $\tau_{13} = -100$ MPa,  $\tau_{12} = -800$ MPa

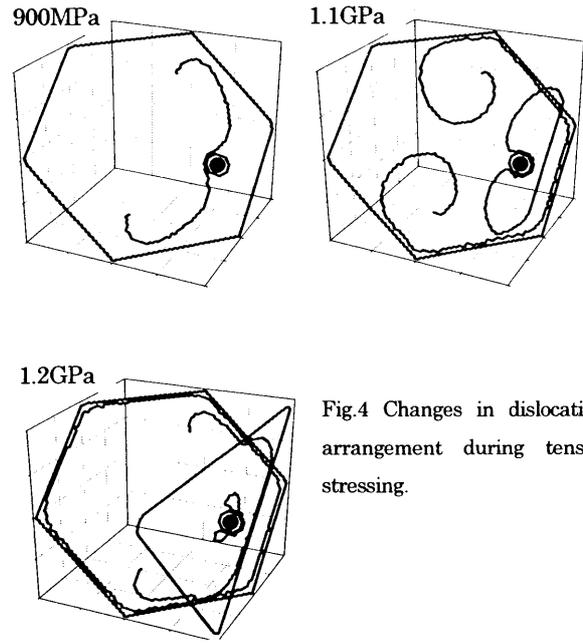


Fig.4 Changes in dislocation arrangement during tensile stressing.

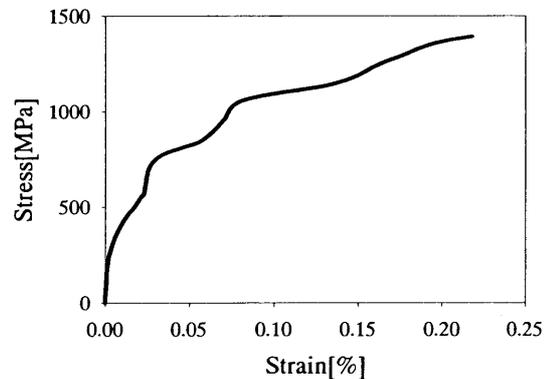


Fig.5 Stress-strain curve obtained by the DDD simulation shown in Fig.4.

参考文献

- 1) P.Kubin, G.Canova, M.Condat, B.Devincere, V.Pontikis and Y.Brechet, Solid State Phenomena, **23&24**, 445 (1992)
- 2) B.Devincere and M.Condat, Acta.Metall.Mater, **40-10**, 2629 (1992)
- 3) M.S.Duesbery, Modelling.Simul.Mater.Sci.Eng, **6**, 35 (1998)