

粒界転位源能力の静水圧依存性に関する 原子シミュレーション

金沢大学 ○下川智嗣 金沢大学[院] 堀川一樹 東北大学 青柳吉輝

Hydrostatic Pressure Dependence of Dislocation Emission Phenomena from Grain Boundaries using Molecular Dynamics Simulations

Tomotsugu SHIMOKAWA, Kazuki Horikawa and Yoshiteru Aoyagi

1 緒 言

バルクナノメタルの力学特性を理解するために、粒界の役割を理解することは重要である。特に、粒界は転位源、つまり塑性変形の起点となることが考えられているため、近年粒界における転位生成メカニズムやその構造依存性が盛んに研究されている。また、粒界が転位源として機能すると考えられる結晶粒径が $1\mu\text{m}$ 以下の Al において、引張降伏応力と圧縮降伏応力に異方性が確認されている¹⁾。このことは、粒界から転位が放出する現象に何らかの静水圧依存性があることが予測される。そこで本研究では、粒界を含む原子モデルを作成し、その解析モデルに様々な外部負荷を加え、転位発生現象に対する外部負荷依存性を検討することを目的とする。特に、粒界から転位が放出するときのすべり系に対して、分解せん断応力とすべり面に働く垂直応力の関係について詳細に検討する。

2 解析モデルと解析条件

2.1 解析モデル 図1に解析モデルを示す。ここでは、アルミニウムの双晶モデルを使用し、含まれる粒界は $\Sigma 15$ とする。この $\Sigma 15$ 粒界は、図1中に示すカイト状の構造ユニットで構成され、粒界面に垂直方向に引張負荷が加えられると白色の C 構造ユニットから転位を放出しやすいという特徴がある²⁾。

2.2 解析条件 解析モデルは全方向に周期境界条件を適用する。変形解析条件として、y 軸方向の応力は常にゼロになるように制御し、平面応力状態を模擬する。x もしくは z 方向に引張や圧縮変形をひずみ速度 $\pm 1 \times 10^9$ 1/s とし、変形負荷を加えていない残りの一方向は一定応力（外部負荷応力）を加える。このとき、外部負荷応力の値は、 $-5 \sim 5\text{GPa}$ までの範囲とし、およそ 100M Pa ごとに値を変化させていく。解析温度は 10K とする。

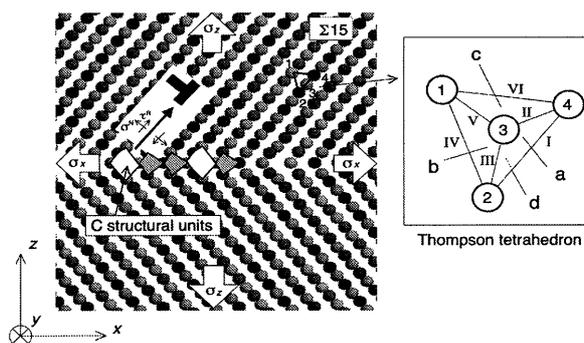


Fig.1 Schematic figure of the analysis model.

3 解析結果

3.1 転位放出応力における降伏曲面 本研究では、図1に示すように σ_x と σ_z を制御し、 τ_{xz} はほとんどゼロなので、 σ_x と σ_z を主応力と見なすことができる。そこで、図2に粒界から転位放出時の σ_x を横軸、 σ_z を縦軸として降伏曲面を示す。ここでプロットの形状は変形負荷方向を示し、黒色プロットは図1に示す a-I のすべり系で転位が起動したことを示し（図3(a)参照）、白色プロットは c 面のすべり系で転位が起動したことを示す（図3(b)参照）。z 方向の単軸引張、圧縮変形解析 ($\sigma_x = 0$) において、引張変形するときの方が圧縮変形に比べて容易に転位を放出していることが理解でき（同様に x 方向の単軸引張、圧縮解析でも同じ傾向）、転位源能力の異方性が確認できる。ここで、簡単な比較のために、ミーゼスのせん断ひずみエネルギー説（等方弾性体）の降伏曲面を併せて記す。これより、原子シミュレーションにより得られた結果は、ミーゼスの等方材料の楕円と一部重なる部分があるが、多くは等方材料の楕円形の応力よりも高い応力が必要であることがわかる。つぎに、a-I のすべり系に作用する分解せん断応力を、図2に直線で併せて示す。

$$\tau_{cr}^R = \frac{\sigma_z - \sigma_x}{2} \sin 2\theta \quad (1)$$

ここで、 τ_{cr}^R は z 方向単軸引張・圧縮変形解析 ($\sigma_x = 0$) のときに転位が起動したときの臨界分解せん断応力である。つまり、様々な外部負荷において、粒界から転位を放出するときに必要な分解せん断応力の値が同じであれば、黒色プロットはこの直線上に乗ることになる。しかしながら、様々な外部負荷における原子シミュレーションの結果は必ずしも式(1)の直線上に乗っていないことが確認できる。つまり、同じすべり系が起動しているにもかかわらず τ_{cr}^R が異なることになる。

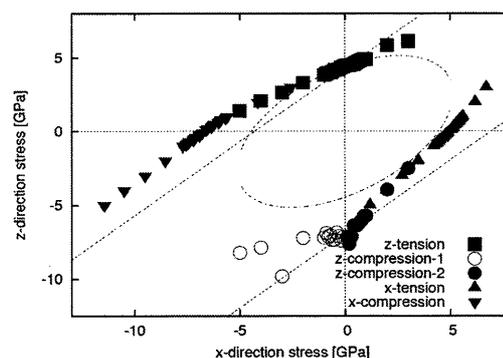
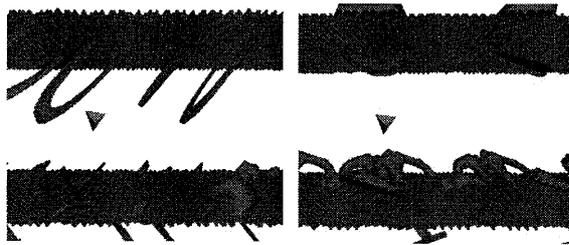


Fig.2 Yield surface of $\Sigma 15$ grain boundary.



(a) a-I ($\sigma_z = -5.7, \sigma_x = 1$ GPa) (b) c-plane ($\sigma_z = -6.9, \sigma_x = -0.9$ GPa)
Fig.3 Activated slip systems.

3.2 起動したすべり系の分解せん断応力と静水圧の関係 つぎに、図4に、起動したすべり系において、転位が放出されたとき分解せん断応力 τ^R と静水圧の関係を示す。ここで、図4中の白丸はc面のすべり系が起動しているが、ここではa-Iのすべり系にはたらく分解せん断応力 τ^R を示していることに注意が必要である。一般的には金属の塑性現象に静水圧は関係しないと理解されているが、a-Iのすべり系が起動した黒色プロットから、粒界から転位を放出する現象には静水圧依存性が確認できる。もし超微細粒材の塑性変形が粒界から転位が放出する現象に支配されていると考えることができれば、超微細粒材の示す引張/圧縮降伏応力の違いを図4の結果は説明することができる。

3.3 起動したすべり系の垂直応力と分解せん断応力の関係 図5に、起動したすべり系において、転位が放出されたときの垂直応力 σ^N と分解せん断応力 τ^R の関係を示す。ここでも図4と同様に、白丸はc面のすべり系が起動しているが、ここではa-Iのすべり系にはたらく分解せん断応力 τ^R を示していることに注意が必要である。図中の点線はz方向単軸引張・圧縮変形解析($\alpha_x = 0$)のときに必要な分解せん断応力の値である。これより、起動したすべり面にはたらく垂直応力 σ^N が大きくなるほど、転位放出に必要な分解せん断応力は小さくなることを確認できる。これは、垂直応力 σ^N の増加により、すべり面間の距離が広がり、かつ粒界の自由体積が増加することが原因であると考えられる。しかし、 σ^N が強い圧縮による降伏の場合には、 σ^N の増加と τ^R の大きさには関係性が見られないことが確認でき、このことは粒界の自由

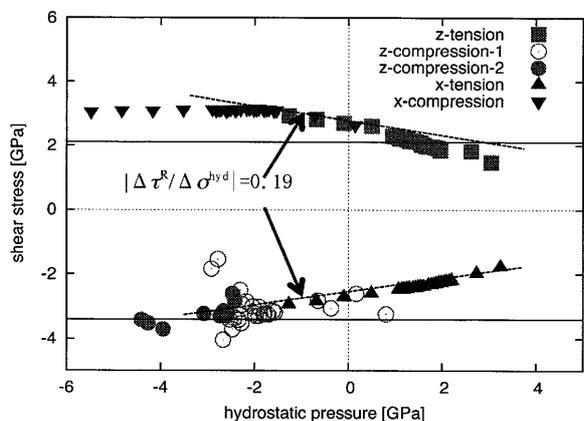


Fig.4 Critical resolved shear stress vs. hydrostatic pressure.

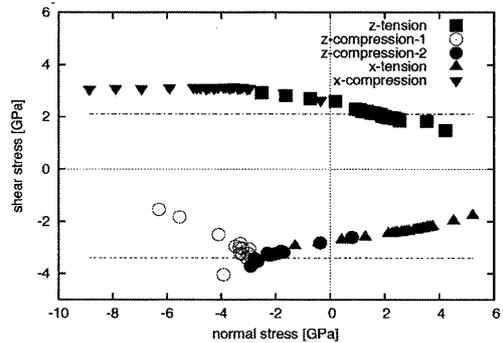


Fig. 5 Resolved shear stress vs. normal stress acting on the activated slip plane.

体積がほとんど変化せず、結果として τ^R は σ^N に対して鈍感になっていると考えられる。つまり、粒界から転位を放出する現象には、すべり面に垂直な応力成分が強く影響を与えることが確認できる。

3.3 実験結果との比較 ここでは、Chengらの論文で報告されているAl-10Ti-2Cuの引張/圧縮降伏応力(比例限)の関係¹⁾と本研究で得られた結果を比較してみる。論文¹⁾の図2から降伏応力を読み取ると、粒径が200 nmから450 nmになるにつれて、引張変形では311 MPaから250 MPaになり、圧縮変形では-344 MPaから-283 MPaになっている。ここで降伏応力の差は、粒径が200 nm, 450 nmともにおよそ33 MPaである。それぞれ単軸変形とすれば、静水圧は負荷応力の1/3となる。ここで、粒径が450 nmの結果について整理すると、引張変形と圧縮変形において降伏時の静水圧の差は、177 MPaとなる。図4は分子動力学計算により得られたΣ15粒界から転位が発生するときの、臨界分解せん断応力 τ^R の静水圧 σ^{hyd} 依存性を示しており、実験と同程度の静水圧の領域に対して、点線で τ^R と σ^{hyd} の関係を示す。これより、 $|\Delta \tau^R / \Delta \sigma^{hyd}| = 0.19$ 程度であることが確認できる。ここで、実験により得られた静水圧の差は177 MPaなので、これより引張変形と圧縮変形下において粒界から転位を放出するために必要な分解せん断応力の差は、約33 MPa程度となる。この差を負荷方向の応力に、例えばテイラー因子を用いて換算すると、引張/圧縮降伏応力の差は約100 MPaとなることが確認できる。今回はΣ15粒界のみの結果を用いたことや、 $|\Delta \tau^R / \Delta \sigma^{hyd}|$ の関係が解析条件(ひずみ速度や解析温度)に依存しないという仮定のもと比較を行ったことに注意をしなければならないが、実験値は33 MPaであることを考えれば、ほぼ同程度の降伏応力の差が、粒界から転位が放出するときの静水圧依存性から説明できることが確認できる。

参考文献

- 1) Cheng, S., Spencer, J. A. and Milligan, W. W., Acta Mater., **51**, 4505(2003).
- 2) Shimokawa, T, Phys. Rev. B, **82**, 174122(2010).