529 転位生成・消滅・反応を考慮した集団転位の 自己組織化モデルの一般化

A Generalization of Self-Organization Model for Collective Dislocations Based on Generation, Annihilation and Reaction of Dislocations

正 志澤 一之(慶大), ○森田 洋平(慶大[学]), 菊池 完人(慶大[院])

Kazuyuki SHIZAWA, Department of Mechanical Engineering, Keio University

3-14-1 Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama 223-8522

Yohei MORITA, Department of Mechanical Engineering, Keio University

Kanto KIKUCHI, Graduate School of Keio University

Key Words: Plasticity, PSBs, Self-Organization, GN Dislocation Density, Incompatibility, Bifurcation, Thermomechanics

1. 緒 言

FCC 金属材料に繰り返し負荷をかけると、内部に存在する膨大な集団転位の挙動により金属表面近傍に固執すべり帯 (PSBs) と呼ばれる空間パターンが自己組織化される [Fig.1]。これは転位および転位ダイポールの相互作用によるものであり、系がある特別な基底状態に落ち込んで形成される一つの散逸構造である。前報⁽¹⁾では、このような結晶欠陥場をその幾何学的諸量 (GN 転位密度, 不適合度)⁽²⁾に基づいて表現するとともに、複雑系の熱力学による検討を介して集団転位の挙動を支配する反応-拡散方程式を導出した。しかしながら、その結果はあくまでも材料が繰返し負荷のみ受けることを前提としたものであり、一様負荷を受ける材料内の転位組織形成には触れていない。

そこで本報では、転位-ダイポールの相互作用を記述する反応-拡散方程式において、転位の発生、消滅、反応を表現する項をさらに厳密化し、繰返し負荷時のみならず一様負荷時における転位組織形成をも表現できるように理論体系を一般化することを試みる。また、得られた反応-拡散方程式に線形安定性解析および分岐解析を施し、新たに付加された項の影響が PSBs の波長、不安定性および分岐経路に与える影響について調べる。

2. 運動学・釣合い方程式

2・1 運動学 GN 転位密度 α および不適合度 η は、それぞれ結晶欠陥場における小域的欠陥 (空間のねじれ) および大域的欠陥 (空間の曲率) を表しており、各々を可動転位および不動ダイポールに対応させる。これらを 2 種類の転位密度とみなして同じ次元で扱えるよう、可動転位密度および不動転位密度を

$$\alpha^{[a]} = \alpha, \quad \alpha^{[n]} = h\eta \rightarrow \alpha^{[n]} (n = \alpha, \eta) \dots (1)(2)$$

のように定義する。ただし、 h は平均ダイポール高さである。

2・2 釣合い方程式 前報で示したように、2 種類の転

Fig.1 Schematic Persistent Slip Bands

位密度に対する保存則に基づいて、転位密度の釣合い方程式が次式のように得られる。

$$\text{div } \mathbf{M}^{[n]} + \rho(\mathbf{G}^{[n]} - \dot{\alpha}^{[n]}) = 0 \dots (3)$$

ここで、 $\mathbf{M}^{[n]}$ は転位密度流束、また $\mathbf{G}^{[n]}$ は転位生成項であり、 $\mathbf{G}^{[n]}$ は転位とダイポールの発生項 $\mathbf{G}_p^{[n]}$ および反応項 $\mathbf{G}_r^{[n]}$ に分離される。すなわち、

$$\mathbf{G}^{[n]} = \mathbf{G}_p^{[n]} + \mathbf{G}_r^{[n]}, \quad \sum_n \mathbf{G}_r^{[n]} = 0 \dots (4)$$

である。一方、秩序形成に寄与する転位拡散の影響を拡散のエントロピー流束として熱力学の第 2 法則に導入すれば、エントロピー不等式が次式のように得られる⁽¹⁾。

$$\rho\theta\dot{\eta} - \sum_n \text{div } \mathbf{M}^{[n]} \cdot \mathbf{\Pi}^{[n]} - \sum_n \mathbf{M}^{[n]} \cdot \mathbf{P}^{[n]} - \rho r \geq 0 \dots (5)$$

ここで、 $\dot{\eta}$ はエントロピー密度、 $\rho r / \theta$ は体積供給エントロピー、 $\mathbf{\Pi}^{[n]}$ は化学ポテンシャルの役割をなす量であり、 $\mathbf{P}^{[n]}$ は $\mathbf{P}^{[n]} = \text{curl } \mathbf{\Pi}^{[n]}$ である。

3. 構 成 式

3・1 構成式の導出 前報と同様に Clausius-Duhem の不等式ならびに最大エントロピー生成速度の原理に基づいて、諸構成式の可逆部分ならびに非可逆部分を導出すると、 $\mathbf{\Pi}^{[n]}$ 、 $\mathbf{M}^{[n]}$ および $\mathbf{G}^{[n]}$ の構成式が以下のように得られる。

$$\mathbf{\Pi}^{[n]} = \mathbf{b}^{(2)[n]} : \alpha^{[n]} \mathbf{I}^T + \mathbf{b}^{(3)[n]} : \alpha^{[n]} \dots (6)$$

$$\mathbf{M}^{[a]} = \mathbf{C}^{(2)} : \mathbf{P}^{[a]} + \mathbf{C}^{(4)} : \mathbf{P}^{[a]} \mathbf{I}^T \dots (7)$$

$$\mathbf{M}^{[n]} = \mathbf{C}^{(10)} : \mathbf{P}^{[n]} + \mathbf{C}^{(12)} : \mathbf{P}^{[n]} \mathbf{I}^T \dots (8)$$

$$\mathbf{G}^{[a]} = \mathbf{C}_0 - \mathbf{C}_2 : \alpha^{[a]2} + \mathbf{A}_1 : \alpha^{[n]} - \mathbf{A}_2 : (\alpha^{[a]} \alpha^{[n]2}) - \mathbf{A}_3 : \alpha^{[a]} + \mathbf{A}_4 : \alpha^{[n]} - \mathbf{A}_5 : \alpha^{[a]} \dots (9)$$

$$\mathbf{G}^{[n]} = \mathbf{B}_0 - \mathbf{B}_1 : \alpha^{[n]} - \mathbf{B}_2 : \alpha^{[n]2} - \mathbf{B}_3 : \alpha^{[n]3} - \mathbf{A}_1 : \alpha^{[n]} + \mathbf{A}_2 : (\alpha^{[a]} \alpha^{[n]2}) + \mathbf{A}_3 : \alpha^{[a]} - \mathbf{A}_4 : \alpha^{[n]} + \mathbf{A}_5 : \alpha^{[a]} \dots (10)$$

3・2 転位生成・消滅・反応のモデル化 式(9)および式(10)において、転位とダイポールの反応・生成・消滅は Fig.2 に示すモデルに基づいて導入されている。係数 $\mathbf{A}_1 \sim \mathbf{A}_5$ をもつ項 [Fig.2-(a)] は転位とダイポールの反応項であり、 $\mathbf{A}_1$ の項はしきい値を超える負荷応力の作用によって安定なダイポールが可動転位へと自由化する過程を、また $\mathbf{A}_2$ の項は可動転位が

ダイポールにとらわれ不動化する過程を、さらに A_3 の項は2つの可動転位がダイポール化する過程を表現している。次に、係数 A_4 , A_5 をもつ項[Fig.2-(b)] は障害物(林立転位や不純物)が転位に与える効果を表す項であり、 A_4 の項は障害物によって不動化していた転位が外力の作用により自由化する過程を、 A_5 の項は可動転位が障害物に捕らえられて不動化する過程を示している。一方、係数 B , C をもつ項は、転位の生成・消滅項であり、 B_0 はダイポールの線形生成率を、 C_0 は転位源から放出される転位の線形湧き出し率を表している。また、 $B_1 \sim B_3$ の項[Fig.2-(c)]は点欠陥の拡散にともなう転位の昇降運動に起因するダイポールの消滅を、また C_2 の項[Fig.2-(d)]は同一すべり面上で異符号の可動転位が出会うことによる転位の消滅を表している。なお、本報で新たに導入された項は $A_3 \sim A_5$, C_0 および C_2 をもつ項である。上述の考え方は RA モデル⁽³⁾に類似した部分もあるが、5章に示す解析結果が物理現象に矛盾しないよう、反応速度式における非線形項の次数を RA モデルとは異なるように選んでいる。

4. 反応-拡散方程式

得られた構成式は $\boldsymbol{\Pi}^{[n]}$ を媒介としているため、式(6)を式(7), (8)に代入し、さらに式(7)~(10)を転位密度の釣合い方程式に代入すれば、次のような連立反応-拡散方程式が得られる。

$$\left. \begin{aligned} \dot{\boldsymbol{\alpha}} &= \text{curl}[D_1^{[a]} : (\text{curl} \boldsymbol{\alpha})] + \text{curl}[D_2^{[a]} : (\text{curl} \boldsymbol{\alpha}^T)^T] \\ &\quad + \text{curl}[D_3^{[a]} : (\text{curl} \boldsymbol{\alpha}^T)] \\ &\quad + \text{curl}[D_4^{[a]} : (\text{curl} \boldsymbol{\alpha})^T] + \mathbf{G}^{[a]} \\ h\dot{\boldsymbol{\eta}} &= h\text{curl}[D_1^{[\eta]} : (\text{curl} \boldsymbol{\eta})] \\ &\quad + h\text{curl}[D_2^{[\eta]} : (\text{curl} \boldsymbol{\eta})^T] + \mathbf{G}^{[\eta]} \end{aligned} \right\} \dots (11)$$

5. 線形安定性解析・分岐解析

本章では PSBs の自己組織化のみに着目した議論を行うた

Fig.2 Reaction model

め、直接的寄与が少ない A_4 , A_5 の項は無視するものとする。

反応-拡散方程式(11)を2次元問題へ適用し、成分表示した後に線形安定性解析を行えば、PSB ラダー構造の波長 λ が

$$\lambda = 2\pi \left\{ D^{[a]} D^{[\eta]} / \left(h^2 A_2 B_1 \eta_0^2 + A_3 B_1 \right) \right\}^{1/4} \dots (12)$$

のように得られる。ここでは簡単のために、転位の生成・消滅には B_0 および B_1 のみが考慮されている。これを見ると、PSBs の波長は前報と異なり、可動転位のダイポール化速度 A_3 にも依存することがわかる。また、無次元化された応力振幅 A_1^* と拡散係数比 $d^* = D^{[\eta]} / D^{[a]}$ の関係は Fig.3 のようになり、Turing 分岐が起こる領域も A_3 の大きさによって変化する。すなわち、ダイポール化速度が大きい材料では、ある特定の応力振幅の時にのみ PSBs が形成されるのに対し、小さい材料では PSBs を形成させ得る応力範囲が広がる。

一方、分岐図は Fig.4 のように得られ、 A_3 の値には依存せず、前報と同様に Vein 構造から Ladder 構造へと進展して PSBs が形成される様子を表している。

6. 結 言

転位の生成・消滅・反応を詳細に記述し得るよう反応-拡散方程式を一般化した結果、自発的特性長である PSBs の波長ならびに Turing 分岐を起こす応力振幅の範囲は、可動転位のダイポール化速度に依存するが、PSBs の分岐経路はそれによらないことが明らかとなった。

文 献

- (1) 菊池・志澤, 機構論, No.00-1, I (2000), 39.
- (2) Shizawa, K. and Zbib, H. M., *Int. J. Plasticity.*, **15**, (1999), 899.
- (3) Aifantis, E. C., *ASME J. Eng. Mater. Tech.*, **121**-2, (1999), 189.

Fig.3 Instability diagram

Fig.4 Bifurcation diagram