224 転位セル構造・亜結晶粒の自己組織化モデルと空間パターンニング

A Self-Organization Model and Spatial Patterning of Dislocation Cell Structure and Subgrain

○藤本 敦 (慶大[院]), 松下 将明 (慶大[院]), 正 志澤 一之(慶大)

Atsushi FUJIMOTO, Graduate School of Keio University

Masaaki MATSUSHITA, Graduate School of Keio University

Kazuyuki SHIZAWA, Keio University, 3-14-1 Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama 223-8522

Key Words: Dislocation Cell Structure, Subgrain, Self-Organization, SS-Dislocation Density Tensor, Spatial Patterning

1. 緒 言

金属結晶に負荷をかけると、主すべり系に存在する膨大な数の転位ループと2次すべり系の林立転位の相互作用によりセル構造とよばれる空間パターンが自己組織化される(図1(a))。これまでに著者ら⁽¹⁾が検討してきたPSBs構造はFCC単結晶に繰り返し負荷を加えた際にのみ形成されるのに対し、セル構造はFCC構造、BCC構造、単結晶、多結晶を問わず、またあらゆる負荷形態において形成されることが知られている。よって、PSBsと比較して応用範囲も広く、セル構造の自己組織化モデルが構築されれば、種々の金属材料の加工硬化に 응용が可能である。しかし、従来の転位自己組織化モデルの多くはPSBs形成モデルであり、セル構造の空間パターンニングについての検討は極めて少ないのが現状である⁽²⁾⁽³⁾。

著者らは前報⁽⁴⁾において、単結晶の線形硬化段階を表現する反応-拡散方程式を導出し、セル構造の空間パターンニングを数値解析的に再現した。しかしながら、さらに加工硬化が進んだ動的回復段階においてセル構造が亜結晶粒へ遷移する過程(図1(a), (b))を表現するには至っていない。そこで本報では、上述の反応-拡散方程式に動的回復を表現する項を新たに導入し、線形安定性解析を介して、亜結晶粒の2次元空間パターンニングをシミュレートすることを試みる。

2. 転位密度テンソル・保存則および構成式

2・1 転位密度テンソル 転位密度には、前報⁽⁵⁾で定義した次のような粒子描像転位密度テンソルを用いる。

$$\alpha^m = s \otimes \{ \alpha_s^m (s \times m) + \alpha_s^i s \} \quad (1)$$

$$\alpha^i = s \otimes \{ \alpha_s^i (s \times m) + \alpha_s^m s \} \quad (2)$$

ここで、 α_s^m, α_s^i は可動および不動転位の刃状成分、 α_s^m, α_s^i はらせん成分であり、これらをまとめて

$$\alpha^m, \alpha^i \rightarrow \alpha^{(n)} (n = m, i) \quad (3)$$

のように記すことにする。また s および m は結晶基底である。

2・2 保存則と構成式 転位密度の保存則に対する局所形として次式のような転位密度の釣合い方程式が得られる。

$$\partial \alpha^{(n)} / \partial t = -\text{div } M^{(n)} + G^{(n)} \quad (4)$$

ここで、 $M^{(n)}$ は転位密度流束、また $G^{(n)}$ は湧き出し項であり、

(a) Cell

(b) Subgrain

Fig.1 Schematic dislocation cell structure and subgrain

転位の発生項 $G_p^{(n)}$ および反応項 $G_r^{(n)}$ に分離される。すなわち、

$$G^{(n)} = G_p^{(n)} + G_r^{(n)}, \quad \sum_n G_r^{(n)} = 0 \quad (5)$$

である。一方、 $M^{(n)}$ や $G_r^{(n)}$ の構成式は前報⁽⁵⁾と同様に、転位拡散のエントロピー流束を導入したエントロピー不等式からClausius-Duhemの不等式を導き、最大散逸速度の原理を適用することによって導出される。

3. 反応-拡散方程式

諸構成式を転位密度の釣合い式(4)に代入し、さらにセル構造が主すべり面上で等方性を有し、転位密度の刃状成分およびらせん成分の大きさがともに等しいと仮定すると、両成分を合成した連立反応-拡散方程式が次のように得られる。

$$\begin{aligned} \alpha_{,t}^m = & D^m \nabla^2 \alpha^m + K_1 \alpha^i - K_2 \alpha^m \alpha^i \\ & - K_3 \alpha^m \alpha^{i^2} - K_4 \alpha^m \alpha^{i^3} - L_1 \alpha^m \alpha^i \quad (6) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \alpha_{,t}^i = & D^i \nabla^2 \alpha^i + B_0 - B_1 \alpha^i - B_2 \alpha^{i^2} - K_1 \alpha^i + K_2 \alpha^m \alpha^i \\ & + K_3 \alpha^m \alpha^{i^2} + K_4 \alpha^m \alpha^{i^3} - L_1 \alpha^m \alpha^i \quad (7) \end{aligned}$$

ここで、 D^m および D^i はそれぞれ可動転位と不動転位の拡散係数である。式(6)および式(7)において可動転位と不動転位の反応・生成・消滅・回復は、図2に示すモデルに従うものとする。図2(a)は可動転位と不動転位の反応を表している。 K_1 はしきい値を超える負荷応力の作用により、林立転位等の障害物に捕われていた不動転位が可動化する過程を表している。 $K_2 \sim K_4$ はあらかじめトラップされている不動転位に次々と可動転位が堆積していく過程を表している。ここで5次以上の堆積項は、数値解析結果への影響が小さいため、本報では4次項までを採用している。図2(b), (c)は転位の生成および消滅を表している。 B_0 は不動転位の線形生成率、 B_1 は熱拡散による点欠陥の移動に伴う刃状転位の上昇運動およびらせん転位の交差すべりを表している。 B_2 は熱拡散によるダイボールの対消滅を表している。図2(d)の L_1 は本報で新たに導入した動的回復を表す項であり、トラップされた不動転位と異符号の可動転位が反応して対消滅することを表している。これは、線形硬化段階でセル壁に転位が高密度に堆積することにより、可動転位と出会う確率が増すことに起因している。

4. 数値シミュレーション結果および検討

4・1 線形安定性解析 式(6)および式(7)に線形安定性解析を施せば、応力影響係数 K_1 と拡散係数比 $d^* \equiv D^i/D^m$ の関係が図3のような不安定線図として表現される。これを見ると、Turing不安定が起こる領域IIの面積が前報⁽⁴⁾($L_1 = 0$)の面積と比較して減少しており、低い応力値ではTuring分岐が

起こりにくい傾向を示している。これは、動的回復段階の応力値が線形硬化段階より大きいことにも符号する。

4・2 拡散係数比依存性 反応-拡散方程式(6), (7)を差分近似し, 不動転位密度の初期値に基準値 α_0^i の約 10% のゆらぎを与え, 周期境界条件を適用して, 1 辺 $10\mu\text{m}$ の正方形領域を対象として数値解析を行う。動的回復が起こり始めるのはセル構造が形成された後であるから, まずセルパターンのみを形成させる。式(6), (7)で $L_1=0$ とおいて回復項を除き, 前報⁽⁴⁾で検討した材料定数: $K_1=280/\text{s}$, $K_2=0.09\mu\text{m}^2/\text{s}$, $K_3=1.3\mu\text{m}^4/\text{ks}$, $K_4=0.45\mu\text{m}^6/\text{Ms}$, $B_0=70\mu\text{m}^2/\text{s}$, $B_1=4.0/\text{Gs}$, $B_2=700\text{pm}^2/\text{s}$, $D^m=7.0\mu\text{m}^2/\text{s}$, $D^i=0.68\mu\text{m}^2/\text{s}$, $\alpha_0^m=150/\mu\text{m}^2$, $\alpha_0^i=1000/\mu\text{m}^2$ を用いて数値解析を行う。本条件下で時間ステップ $N=1.0\times 10^5$ まで計算した結果を図 4(a)~(e)に示す。これらは前報の結果とほぼ同様である。

さらに, セル形成が完了した図 4(e)の状態から回復項の係数を $L_1=0.20\mu\text{m}^2/\text{s}$ に変更して式(6), (7)に導入し, $N=1.5\times 10^5$ まで計算を進める。その際, 図 3 の領域 II で拡散係数比を変化させると, 図 3(a)~(d)のようなパターンが現れる。いずれの場合もセル内部の転位密度 α_c は比較的低く $\alpha_c=20/\mu\text{m}^2$ である。平衡から遠い非平衡状態である図 3(a)では, セル壁内転位密度 $\alpha_w=200/\mu\text{m}^2$, 解析領域内平均転位密度 $\bar{\alpha}=100/\mu\text{m}^2$, すなわち $\alpha_w/\bar{\alpha}\approx 2$ となり, セル壁内と全体平均の転位密度差は比較的小さく, セル壁内に小さい空孔が多数見られる。また, セル形状は回復項 L_1 を考慮しない場合と同様に丸みをおび, セル壁は厚いままである。図 3(b)では $\alpha_w=2600/\mu\text{m}^2$,

Fig.2 Reaction, production, annihilation and recovery models of dislocations

Fig.3 Instability diagram

Fig.4 Dislocation patterns for time step

$\bar{\alpha}=1000/\mu\text{m}^2$, $\alpha_w/\bar{\alpha}\approx 3$ となるとともに, セル壁の厚さが薄くなる。また, セル形状は円状から四角状になり, セル壁内の空孔数は減少する。次に, 図 3(c)のように Turing 曲線から横軸負の方向へ約 5%ほど離れた状態まで非平衡度を下げると, α_w および $\bar{\alpha}$ の値は図 3(b)の場合とほぼ同一で, セル形状は再び丸みをおびるようになり, セル壁の薄さが保持されたままセル寸法は大きくなる。ただし, セル壁内に見られた空孔は消滅する。これらの傾向から, 図 3(c)はセルが亜結晶粒へ遷移したものであるとみなせる。さらに, 拡散係数比を増加させた図 3(d)では空間均一状態に極めて近くなる。

4・3 亜結晶粒の形成過程 前節の検討より, 拡散係数比 d^* はセル形成前後で同一とするのが望ましいといえる。そこで, 図 3(c)を採用して初期から定常状態までの過程を時系列に並べれば図 4(a)~(f)のようになる。以上より, 係数 L_1 をもつ回復項は, セル壁の厚さを薄くし, セル同士を合体させてセルサイズを増加させ, セル形状の丸みを減少させて亜結晶粒に遷移させる働きをもつことがわかる。なお, 計算の初期から予め動的回復項を導入して数値解析を行うと, 細かい点状および線状パターンとなり, セルも亜結晶粒も形成されないという結果を得ている。

5. 結 言

- (1) 不安定線図における Turing 曲線から横軸負の方向へ約 5%ほど離れた拡散係数比を採用すると, セル壁内と領域全体の平均転位密度差ならびにセルサイズは増大し, セル形状の丸みが減少して亜結晶粒パターンが得られる。
- (2) セル壁にトラップされた不動転位に異符号の可動転位が反応して対消滅することをモデル化した回復項は, セル形状を亜結晶粒形状へ遷移させる働きをもつ。

文 献

- (1) 菊池・森田・志澤, 第 51 回理論応力講義, (2002), 449.
- (2) 庄司・毛利, 機構論, No.01-16, (2001), 573.
- (3) 長谷部, 機構論, No.01-10, (2001), 85.
- (4) 松下・藤本・志澤, 機構論(M&M 2002), 講演番号 109.
- (5) 森田・菊池・志澤, 機構論, No.01-16, (2001), 569.