原子シミュレーションによる強ひずみ加工による結晶粒微細化メカニズムの検討

Atomic Simulation on the Grain Subdivision Mechanisms due to the Severe Plastic Deformations

○ 赤川 裕明 (金大院)   正 下川 智嗣 (金大工)
正 喜成年泰 (金大工)   正 新宅 救徳 (金大工)

Hiroaki AKAGAWA, Graduate School of Natural Science & Technology, Kanazawa University
Kakumamachi Kanazawa, Ishikawa 920-1192
Tomotsugu SHIMOKAWA, Department of Mechanical Systems Engineering, Kanazawa University
Toshiyasu KINARI, Department of Mechanical Systems Engineering, Kanazawa University
Sukenori SHINTAKU, Department of Mechanical Systems Engineering, Kanazawa University

Key Words : Molecular dynamics, Grain subdivision, Grain boundary, Dislocation

1. はじめに

金属材料の強度を上げる方法の1つとして、結晶粒の微細化による方法が挙げられる。結晶粒の微細化の主な方法としては、従来では再結晶による微細化が行なわれていたが、これにより得られる結晶粒径にはある限界があると考えられるため、さらに微細化するために強ひずみ加工による結晶粒超微細化が開発されている。強ひずみ加工法には ECAP, ARB, HPT 等があり、通常の塑性加工法では得られないような大きなひずみを金属材料に与えることができる。

現在考えられている強ひずみ加工による結晶粒微細化メカニズム (Grain Subdivision) について以下で説明する⁽¹⁾。金属材料に強ひずみ加工による塑性変形を与えると、粒内に大量の転位が発生する。発生したそれぞれの転位が自由エネルギーを最小にするように配置を変えていく際に、多くの場合 (転位) 境界を形成していく。ここで、形成される境界は GNB (Geometrically Necessary Boundary) と IDB (Incidental Dislocation Boundary) の2つに分類することができると考えられている。GNB は、隣接する異なる結晶方位を緩和させるために形成される境界である。この転位境界は幾何学的に必要な転位 (Geometrically Necessary Dislocation: GN 転位) と呼ばれるものより構成されると考えられる。もう1つの転位境界である IDB は、ある領域で単すべり系による転位対で確率論的に形成されると考えられ、大きな方位差は生じない。この IDB を形成する転位は、統計的に蓄積される転位 (Statistically Stored Dislocation: SS 転位) と呼ばれている。このことから、結晶粒微細化に対して重要なのは隣接粒間の方位差を形成すると考えられる GNB の効率的な導入であると考えられる。しかし、実験においては、強ひずみ加工中のプロセスを連続的に観察することができないため、現時点では、微細化の過程についてははっきりと解明されていない。

本研究では、GN 転位と変形こう配は密接に関連していることから、結晶粒微細化プロセスにおいて変形こう配は重要な因子であると考え、その影響について検討を行なう。解析手法として、分子動力学法を用いた計算機シミュレーションを採用する。これは分子動力学法が個々の原子を追跡する手法であるため、転位・境界等を原子レベルで表現することができ、結晶粒微細化プロセスの追跡に有効であると考えられるためである。

2. 解析モデルと条件

図1に本研究で用いる結晶構造と解析モデルの概略図を示す。本解析では大きな解析領域が必要なため、擬2次元モデルを採用する。モデルの構造には hcp 構造を用い、{0001} 面を y 軸方向に2層配置し、周期境界条件を適用することで、図1(a)に示す等価な3つの柱面すべり系を表現する。微細化プロセスと変形こう配の関係を調べるため、3種類の変形シミュレーションを行なう。それぞれで用いる解析モデルを図1に示し、model-1, model-2, model-3 とする。用いる原子間ポテンシャルは Mishin らの Cu を表現する EAM⁽²⁾を用いる。hcp と欠陥構造は第一隣接原子の幾何学的な情報を用いて CNA アルゴリズム⁽³⁾で分類する。

2.1 単軸変形シミュレーション 均一変形下における内部構造の変化を調べるために、図1(b)に示す model-1 を用いて単軸引張・圧縮変形シミュレーションを行なう。モデルの大きさを

Fig. 1 Analysis structure and models

を $L_x = 40 \text{ nm}$, $L_z = 40 \text{ nm}$ として作成し、周期境界条件を適用し、ひずみ速度 $8 \times 10^8 \text{ 1/s}$ とする。ひずみが 0.16 になったところで変形を止め、構造緩和を行なう。解析温度は 100 K とする。

2.2 回転シミュレーション 変形こう配を導入するため、図1(c)の model-2 を考える。モデルの大きさは、 $r = 5 \text{ nm}$, $R = 30 \text{ nm}$ として作成し、外側の円周を固定し、内側の円周を回転速度 $v_2 = 10 \text{ m/s}$ で回転させる。解析温度は 100 K とする。

2.3 局所せん断変形シミュレーション 更に変形こう配を加えるために、図1(d)の model-3 を用いた局所せん断変形を考える。モデルの外側の領域を制御層とし、その枠を動かすことで内部へひずみを導入する。モデルの大きさは、 $D_x = 40 \text{ nm}$, $D_z = 100 \text{ nm}$ とする。変形条件は、 $s = 20 \text{ nm}$, $t = 20 \text{ nm}$, $v_3 = 500 \text{ m/s}$ とし、下端から上端に向かいせん断変形を伝ばさせる。つまり局所的にせん断ひずみ 1 を加えることになる。このプロセスを 3 回繰り返す。解析温度は 300 K とする。

3. 結果と解析

3.1 単軸変形シミュレーション 図2(a)に引張・圧縮における変形時間とモデル内の欠陥構造の割合の関係を、図2(b)(c)(d)に圧縮変形中の内部構造を示す。ここで原子の色は初期配置からの格子の回転角度の絶対値を示している。また、欠陥構造と識別されている原子は黒色とする。図2(a)より、ひずみ 0.08 を越えると引張・圧縮ともに降伏し、欠陥の割合が急激に増加していることがわかる。これは図2(b)より、3つの柱面すべり系の転位であることが確認でき、局所的に方位差が生じていることがわかる。しかし、ひずみ 0.16 以降で緩和を行なうと、欠陥数の変化は平衡状態となり、運動していた転位は、図2(c)に示すように点状の欠陥 (空孔列) を形成する。図2(d)に示す欠陥構造 α , β のバーガース回路より、 α はバーガースベクトル b を有する不動転位であることがわかり、 β は複数の運動転位のバーガースベクトルが打ち消しあうことで生じた空孔であることが理解できる。このことから、マクロ的に変形こう配を生じない本単軸変形シミュレーションにおいて、方位差を有する境界は生じないことがわかる。

Fig. 4 Atomic configurations of the localized shear deformation. (a) under 1st process at 124.5 ps (b) under relaxation at 249.5 ps (c)(d) Geometrical necessary boundary, 32.0 ps and 44.5 ps. (e) asymmetrical tilt grain boundary, 249.5 ps.

Fig. 2 (a) Proportion of defects vs. simulation times. (b) $\varepsilon_c = 0.11$ under compression loading ($t \approx 0.14$ ns). (c) $\varepsilon_c = 0.16$ under relaxation ($t = 0.3$ ns). (d) Burgers circuits of lattice defects in (c).

3.2 回転シミュレーション 図3に、model-2を用いた回転シミュレーションの内部構造を示す。原子の色は図2と同じである。内側の固定層を回転をさせていくと、固定層近傍より、図3(b)のように3種類のすべり系から、異符号のバーガースベクトルを持つ転位対が発生する。図3(c)より、発生した転位対は隣の転位と相互作用し、合バーガースベクトルを有する転位となることがわかる。このとき転位境界を介して、固定層との方位差が顕著となっていることが観察でき、変形こう配を導入することで、方位差を形成する転位境界が生じていることが確認できる。

3.3 局所せん断変形シミュレーション 図4(a)(b)に局所せん断変形シミュレーションの1回目の結果を示す。原子の色は、図2と同じである。図4(a)の四角で囲んだ領域から、変形している領域としていない領域において、大きく方位差が生じていることが分かる。図4(c)(d)にその領域の詳細な転位構造の時間変化を示す。図4(c)に示すように変形初期に発生した転位集団が、図4(d)に示すように同じバーガースベクトルを有する転位による境界を形成し、大きな方位差 ($\theta \approx 20^\circ$) が生じていることがわかる。このような境界は GNB と考えることができ

Fig. 3 In-plane torsion simulation. (a) $\gamma = 0.029$. (b) $\gamma = 0.074$. (c) $\gamma = 0.079$.

Fig. 5 Proportion of defects vs. simulation times under localized shear deformations. A: localized shear deformation. B: relaxation.

る。1回目の変形終了後、図4(b)に示すように、モデル中に方位差の異なる領域が生じていることが観察できる。図4(e)に図4(b)の四角で囲んだ境界の詳細な構造を示す。これより、形成された転位境界は、点線を対称面とした時、2種類の粒界転位より構成される非対称傾角粒界であることがわかり、このことより、複数のすべり系による転位から形成された境界であると理解できる。また図5に、図4(a), (b)の点線間の領域における欠陥構造の割合とシミュレーション時間との関係を示す。

各プロセスにおいて、変形中は欠陥数が増加しており、緩和中に欠陥構造の急激な減少は生じていないことがわかる。また、プロセス数の増加に伴い、変形後の欠陥数が増加していることが確認できる。また、図2(a)に示す単軸変形時と比べてモデル内の欠陥構造の残留量が多いことが分かり、モデル内に方位差を有する境界が生じていることから変形こう配が GNB 形成には重要であることが理解できる。

4. 終わりに

本研究では、結晶粒微細化プロセスと変形こう配の関係について、分子動力学法による3種類の変形シミュレーションを用いて検討した。結果として、変形こう配の導入により生じる転位境界は、大きな方位差を形成することを確認した。本研究の一部は、文部科学省科学研究費補助金特定領域研究「巨大ひずみ」と若手研究(B)課題番号16760063、また財団法人池谷科学技術振興財団平成18年度研究助成の補助を受けて実施したことを付記し謝意を表します。

5. 文献

- (1) N. Hansen, *Metall. Mater. Trans. A*, **32A**(2001), 2917–2935.
- (2) Y. Mishin, D. Farkas, M. J. Mehl and D. A. Papaconstantopoulos, *Phys. Rev. B*, **59-5**(1999), 3393–3407.
- (3) J. Dana Honeycutt and H. C. Andersen, *J. Phys. Chem.*, **91**(1987), 4950–4963.