546 拡散—反応方程式を用いた塑性変形挙動の解析

Plastic deformation behavior analysis within Reaction-Diffusion equation

○庄司 哲也 (北大工院), 毛利 哲雄 (北大工)

Tetsuya SHOJI and Tetsuo MOHRI, Division of Material Science and Engineering,

Hokkaido University, Kita13 Nishi8, Kita-ku, Sapporo, Japan

In order to describe the dislocation cell structure formation process in the light of collective dislocation behavior, the reactions of dislocations such as multiplication, mobilization, immobilization and dynamic recovery are indispensable. In this study, we employ Reaction-Diffusion equation for time evolution equation of dislocation densities. This paper aims to reveal the cell formation process in terms of microscopic variable (dislocation density distribution) and macroscopic variable (effective stress). We also perform stability analysis on simultaneous Reaction-Diffusion equations and critical wave length which characterizes the dislocation cell structure is obtained as a function of effective stress.

Key-words : Reaction-Diffusion equation, plastic deformation, dislocation cell structure, stability analysis, collective dislocation behavior

Introduction

転位の集団運動に関する研究の多くは、試料が均一に変形すると仮定し、降伏点挙動を再現することを目的としている。しかし、実際の試料内部においては、動転位（不動転位）の不動転位化（動転位化）、転位の増殖、回復などの転位反応、さらには転位の分布の不均一化が起こっている。これらの現象を表現する方法として、拡散-反応方程式を用いる方法が考えられる。また、転位の運動及び反応はきわめて非平衡性の高いものであることから、非線形な微分方程式として記述することは妥当であると考えられる。

本研究では、拡散-反応方程式を用いることにより転位密度の発展方程式を不動転位（下付き文字の i で表示）と動転位（同 m で表示）について構築し、転位の集団運動に関する解析を行った。

以下に本研究で用いた転位密度の発展方程式を示す。

$$\frac{dN_i}{dt} = D_i \nabla^2 N_i + p \cdot N_m \cdot N_i^2 \cdot v_m - f(\tau_e) \cdot N_i + M \cdot b \cdot v_m \cdot N_m \cdot N_i - d \cdot v_i \cdot N_i^2 \cdots (1),$$

$$\frac{dN_m}{dt} = D_m \nabla^2 N_m - p \cdot N_m \cdot N_i^2 \cdot v_m + f(\tau_e) \cdot N_i \cdots (2)$$

構築した転位密度の発展方程式は、大きく分けて以下の項から構成されている。両発展方程式ともに

(1) 第1項が動転位、不動転位それぞれの拡散項を表して

おり、動転位に関しては転位の滑り運動による移動、不動転位に関しては塑性ひずみを生じない dipole の移動を random walk としてとらえた拡散過程を仮定している。

(2) 第2項は動転位の不動転位化の項で p は動転位が不動転位に出会い pinning される確率である。

(3) 第3項は不動転位の動転位化の項で $f(\tau_e)$ は不動化した転位が再び有効応力の影響により動き出す確率である。

また、不動転位の発展方程式に関しては、

(4) 第4項が動転位の滑り運動に伴った不動転位の増殖に関する項で M, b, v_m はそれぞれ増殖率、バーガースベクトルの大きさ、動転位の平均速度である。

(5) 第5項が異符号のバーガースベクトルを持つ転位の対消滅を仮定した回復の項である

Calculation method

単結晶試料を引っ張り方向に垂直に n 等分したものを仮定する。各試料素片に対して引っ張り応力が等しく負荷され、このとき、各試料素片に対して動転位、不動転位密度が発展方程式により決定される。本計算においては、試料内部において有効応力が一定かつ均一であると仮定した。

ここで、有効応力依存性があるパラメーターは $v_m, D_m, f(\tau_e)$ である。それぞれ、 $v_m = v_{m0} \tau_e$, $D_m = v_m / \rho \rho_{i,ini}^2$, $f(\tau_e) = f_0 \tau_e$ であり、 v_{m0}, f_0 はそれぞれの量が有効応力に比例すると仮定した

ときの比例定数である。動転位の拡散係数に関しては Walgraef ら[1]の導出方法と同様にして求めた。

以上の条件の下に前述した転位密度の発展方程式を連立方程式として数値的に解くことにより空間的な転位密度分布の時間発展を求めた。この時、転位密度の空間的に不均一な分布の形成を自己組織化現象としてとらえることができる。又、転位密度の発展方程式の解の安定性を、定常均一分布からの deviation をフーリエ変換し、発展方程式を線形化することにより予測することが出来る。安定性解析において、有効応力 τ_e を bifurcation parameter とみなすことにより、転位密度の不均一化が生じる際の臨界応力 τ_c を求めることが出来る。また、転位のセル構造において特徴的な量である臨界波長 λ_c （セル間隔と幅とに關係する量）も求めることが出来る。

Results and Discussion

転位密度の空間分布の発展挙動を fig.1 に示す。時間の経過に伴って転位密度の空間分布の不均一化が進行していることがわかる。また、安定性解析から求められた臨界応力は $\tau_c \sim 10^{-6}$ MPa である。臨界応力よりも大きい有効応力のとき転位の自己組織化が進行する。この時、転位のセル構造のセル間隔とセル幅は有効応力に伴って変化する。その変化の様子を fig.2(a)~(c)に示す。Fig.2(a)~(c)の順に有効応力が小さくなっている。有効応力の減少に伴って、セル間隔は広くなりセル幅はブロードになっていくようすがわかる。このことは、臨界波長の有効応力依存性が、有効応力の増大に伴って指数関数的に減少するということから説明

fig.1 Time evolution behavior of immobile dislocation density distribution.

できる。この場合の臨界波長とは、本計算では、定常均一状態からの deviation をフーリエ変換により波の重ね合わせで考えていることから、deviation が時間とともに減衰しない最小の波長に対応している。

fig.2 Dislocation cell structure with variety magnitude of effective stress, (a) $\tau_e=0.0005$ MPa, (b) $\tau_e=0.0001$ MPa and (c) $\tau_e=0.00001$ MPa, respectively.

Reference

[1] C.Schiller and D.Walgraef, Acta Metall. 36, 3, 563-574, 1988