

# マイクロピラー中の転位と析出物の相互作用の 転位動力学解析

Dislocation dynamics analysis of dislocation-precipitate interaction in micropillar

齋藤広樹<sup>1)</sup>, 平能敦雄<sup>2)</sup>, 高橋昭如<sup>3)</sup>

Hiroki Saito, Atsuo Hirano and Akiyuki Takahashi

1) 修士 東京理科大学 機械航空宇宙工学研究科 (〒278-8510 千葉県野田市山崎 2 6 4 1, E-mail:7524522@ed.tus.ac.jp)

2) 工博 東京理科大学 機械航空宇宙工学研究科 助教 (〒278-8510 千葉県野田市山崎 2 6 4 1, E-mail:  
hirono.atsu@rs.tus.ac.jp)

2) 工博 東京理科大学 機械航空宇宙工学研究科 教授 (〒278-8510 千葉県野田市山崎 2 6 4 1, E-mail:  
takahash@rs.tus.ac.jp)

In a small volume, flow stress increases with diameter decreasing. It is called size effect, which is caused by dislocation nucleation and dislocation-surface interaction. In alloy micropillar, there are dislocation-precipitate interactions in addition to them. Therefore, it is necessary to find out the mechanism of size effect in alloy micropillar. In this study, we analyze dislocation-surface and dislocation-precipitate interaction in alloy-micropillar to find out influence of precipitate size for size effect by using dislocation dynamics. We found that micropillar was yielded by dislocation nucleation, while alloy-micropillar was yielded by dislocation shearing precipitates.

**Key Words :** Micropillar, Alloy, Dislocation dynamics

## 1. 緒言

径が数 $\mu\text{m}$ 程度の微細構造では径が減少すると流れ応力が上昇する寸法効果と呼ばれる現象が観測されている。この現象は、転位の生成、表面との相互作用によって発生すると考えられていて、それらのメカニズムとしてSAS (Single Arm Source) やDislocation Starvationなどが挙げられる[1]。SASは転位の片端が固定されている転位源であり、Double-ended sourceと呼ばれる転位の両端が固定されている転位源が進展し、表面と相互作用することで形成される。材料の径が減少すると平均転位源長さも減少し、寸法効果の一因となる[2]。また、Dislocation Starvationは転位密度が低いときに発生する。転位密度が低い場合、塑性変形を起こすために新たな転位を生成する必要があるため、流れ応力が上昇する。バルク中では、転位は抜けず増殖するため、転位密度は維持または上昇する。一方で、径が小さい材料において、転位は増殖する前に表面から抜けるため、転位密度が減少し、Dislocation Starvationが発生する[2]。

寸法効果を調べる実験として、マイクロピラーの圧縮試験があげられる。この試験は、マイクロピラーと呼ばれる径が数 $\mu\text{m}$ の試験片を圧縮し、流れ応力を調べるものである。これまでに行われた試験では、1~40  $\mu\text{m}$ の径のマイクロピラーが使用され、径が小さくなるにつれて流れ応力が大きくなる寸法効果が観測された[3]。また、合金のマイクロピラーについても試験が行われた[4]。この試験では析出物の大きさによって寸法効果が現れる場合と現

れない場合があるため、析出物の大きさが寸法効果へ影響を与えることが分かった。これは、転位の動きが析出物に抑制され、表面から抜けにくくなったためであると考察されている。しかし、具体的な転位-析出物相互作用メカニズムは明らかになっていない。

材料中の転位の挙動を調べる手法として、転位動力学法があげられる。転位動力学を用いた研究として、マイクロピラー中の転位の解析を行ったものが挙げられる[5]。この研究では、マイクロピラーの径が変化したときの流れ応力を転位動力学法により算出しており、径が減少すると流れ応力の上昇が確認された。また、転位-析出物相互作用解析を行った研究が挙げられる[6]。この研究では異なるすべり面について転位-析出物相互作用解析を行っており、析出物が存在することで材料が強化されることや析出物中心からすべり面までの距離が変化することで析出物をせん断するために必要な応力も変化することが分かっている。

本研究では、合金のマイクロピラー中の転位の解析を行い、析出物が与える影響を調べた。以下の図-1に転位動力学解析によって求めた、合金のマイクロピラー中で進展する転位の様子を示した。転位の色は時系列順に青、緑、赤となっている。

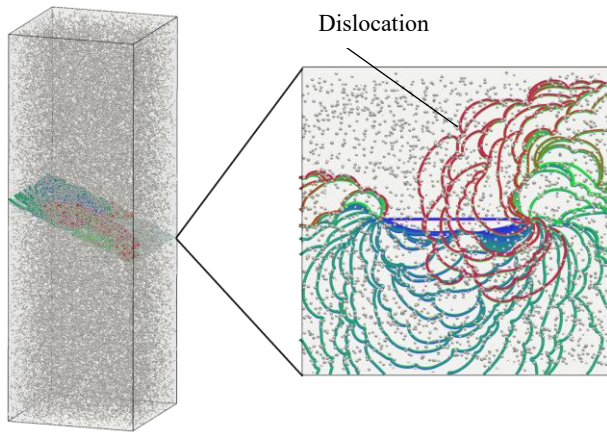


図-1 合金マイクロピラー中の転位の様子

## 2. 手法

### (1) 転位動力学法

転位動力学法では転位に作用する力を計算することで転位の挙動を解析する。転位に作用する力は転位周辺の応力 $\sigma_{ij}$ から以下のように求められる。

$$f_k(\sigma_{ij}) = \varepsilon_{kli} t_l \sigma_{ij} n_j \quad (1)$$

ここで、 $\varepsilon$ は交代記号、 $t$ は転位の接線ベクトル、 $n$ は法線ベクトルを表している。

また、合金のマイクロピラー中において転位に作用する応力は外部応力 $\sigma^{\text{app}}$ 、析出物が形成する応力 $\sigma^{\text{pre}}$ 、転位が形成する応力 $\sigma^{\text{dislo}}$ 、修正応力 $\sigma^{\text{C}}$ である。本解析では以上の応力を足し合わせ、式(1)を用いて転位に作用する力を算出している。

### (2) 析出物が形成する応力 $\sigma^{\text{pre}}$

$\sigma^{\text{pre}}$ は母相と析出物の格子定数の違い(整合ひずみ,  $\varepsilon^*$ )によって発生する[7]。析出物形状(円盤[8], 球[8], 直方体[9]形状)ごとに $\sigma^{\text{pre}}$ の理論式が存在する。以下に例とし球状析出物が形成する応力を求める理論解を示す。

$$\sigma_r^{\text{in}} = \sigma_t^{\text{in}} = -\frac{4(1-\nu)G\varepsilon^*}{3(1-\nu)} \quad (2)$$

$$\sigma_r^{\text{out}} = -\frac{4(1-\nu)G\varepsilon^*}{3(1-\nu)} \left(\frac{R}{r}\right)^3 \quad (3)$$

$$\sigma_t^{\text{out}} = \frac{2(1-\nu)G\varepsilon^*}{3(1-\nu)} \left(\frac{R}{r}\right)^3 \quad (4)$$

ここで、 $G$ は横弾性定数、 $\nu$ はポアソン比、 $\varepsilon^*$ は整合ひずみ、 $R_0$ は析出物半径、 $R$ は析出物中心からの距離、 $\sigma_r$ は半径方向の応力、 $\sigma_t$ は円周方向の応力、 $\sigma^{\text{in}}$ は析出物内部の

応力、 $\sigma^{\text{out}}$ は析出物外部の応力を表している。本解析では、応力は事前に計算、保存し、転位動力学解析内では保存された応力を呼び出すことで転位に作用する力を算出する。

### (3) 修正応力 $\sigma^{\text{C}}$

有限体では表面における転位や析出物の応力によって生じる面力が0でなければならない。そこで、この境界条件を満たすために修正応力 $\sigma^{\text{C}}$ を加える必要がある。これにより、表面を考慮した解析が可能となる。本解析では、まず、無限体中において応力 $\sigma^{\text{pre}} + \sigma^{\text{dislo}}$ が計算され、表面の位置に働く力を $T^{\text{pre}} + T^{\text{dislo}}$ として求める。ここで、 $T^{\text{pre}}$ は $\sigma^{\text{pre}}$ に起因する表面力、 $T^{\text{dislo}}$ は $\sigma^{\text{dislo}}$ に起因する表面力である。その後、有限体の表面に、 $-(T^{\text{pre}} + T^{\text{dislo}})$ を加え有限要素法により $\sigma^{\text{C}}$ を算出する。

### (4) 荷重境界条件の算出

本解析はひずみ制御により行う。荷重境界条件として与えられる荷重 $w$ は転位が移動したことにより発生した塑性ひずみ $\varepsilon^p$ や入力したひずみ $\varepsilon^{\text{total}}$ を用いて以下のように算出する。

$$w = C(\varepsilon^{\text{total}} - \varepsilon^p) \quad (5)$$

ここで、 $C$ は弾性定数を表す。

## 3. 合金のマイクロピラー中の転位-析出物相互作用解析

### (1) 解析モデル

析出物を内在する合金のマイクロピラー、単相のマイクロピラー内の転位の挙動を解析した。解析条件を以下の図-2, 3に示す。

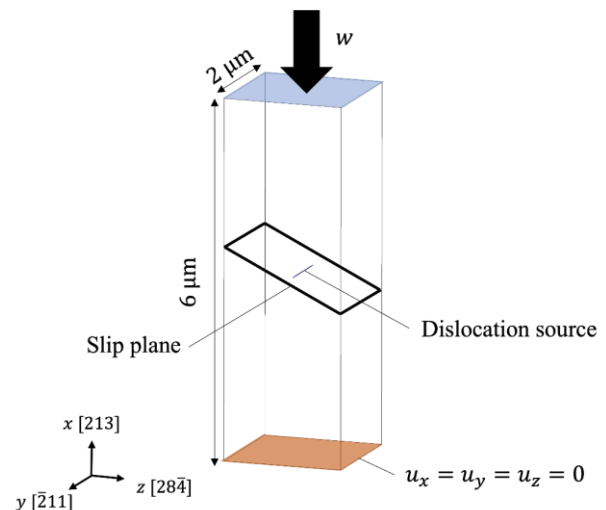


図-2 マイクロピラーモデル

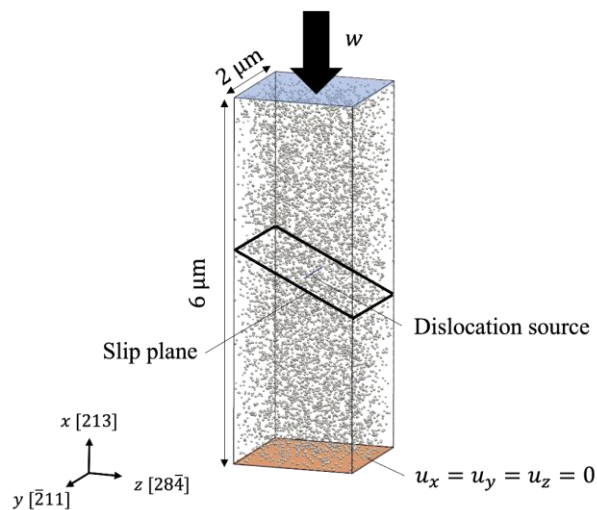


図-3 合金のマイクロピラーモデル

$x, y, z$ 方向の結晶方位はそれぞれ $[213]$ ,  $[\bar{2}11]$ ,  $[28\bar{4}]$ となっている.  $x, y, z$ 方向の大きさはそれぞれ $6, 2, 2\text{ }\mu\text{m}$ となっている. Double-ended source が $x = 3\text{ }\mu\text{m}$ に設置してあり, すべり系は $\{101\}, \{111\}$ である. また, 境界条件は,  $x = 0\text{ }\mu\text{m}$ 面で,  $x, y, z$ 方向の変位 $u_x, u_y, u_z$ が $0$ ,  $x = 6\text{ }\mu\text{m}$ 面に分布荷重 $w$  (圧縮) が印加されている. 次に, 表-1 に解析条件を示す.

表-1 解析条件

横弾性定数 (GPa)	79.2
ポアソン比 (-)	0.3
整合ひずみ (-)	0.01
析出物半径 (nm)	$10 \pm 1$
体積分率 (%)	0.1
バーガースベクトル ( $\text{\AA}$ )	2.5

平均析出物半径は $10\text{ nm}$ で標準偏差を $1\text{ nm}$ に設定した. また, 合金のマイクロピラーの体積分率は $1\%$ で単相のマイクロピラーの体積分率は $0\%$ としている.

(2) 結果

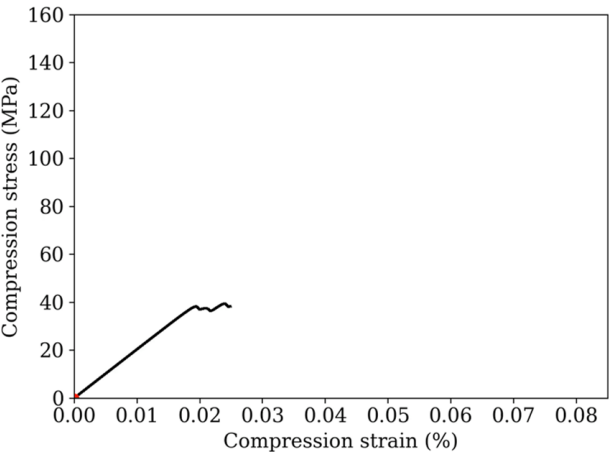


図-4 マイクロピラーの応力ひずみ線図

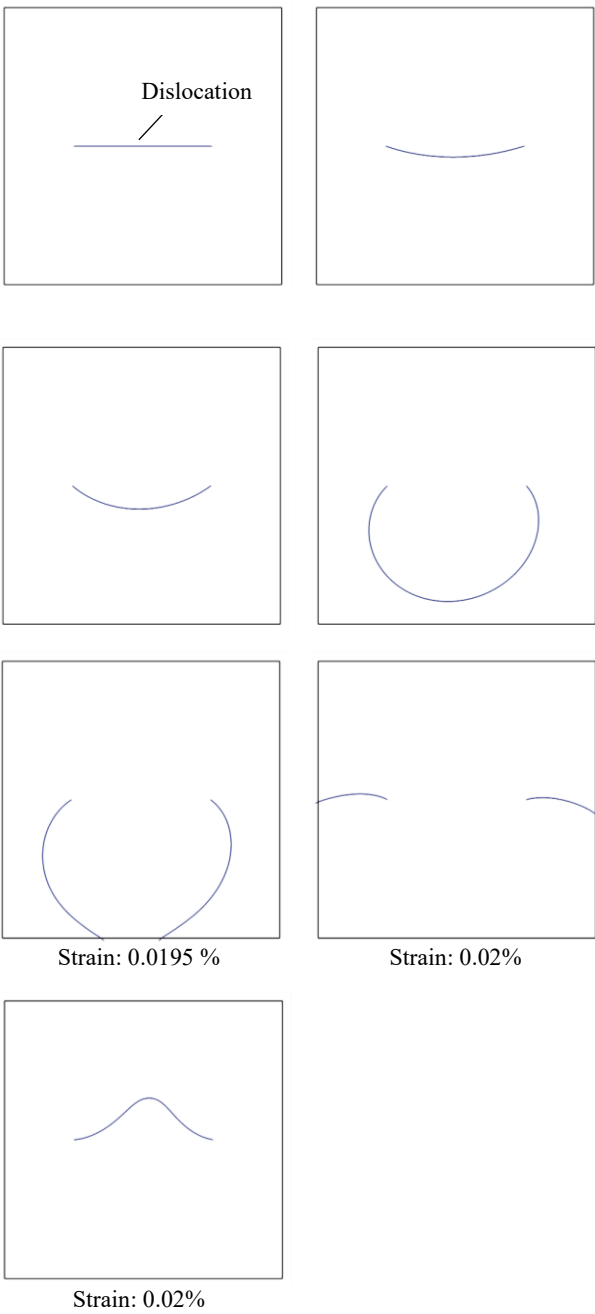


図-5 マイクロピラー中の転位のスナップショット

図-4にマイクロピラーの応力ひずみ線図を, 図-5に各ひずみにおける転位のスナップショットを示した. ひずみが $0.0\sim0.0193\%$ で転位源から転位が進展し, 降伏する. その後, ひずみが $0.0195\%$ で表面と転位が相互作用することで, Single-ended source を形成する. ひずみが $0.0195\sim0.02\%$ でSingle-ended source から転位が進展し, 元のDouble-ended source に戻る.

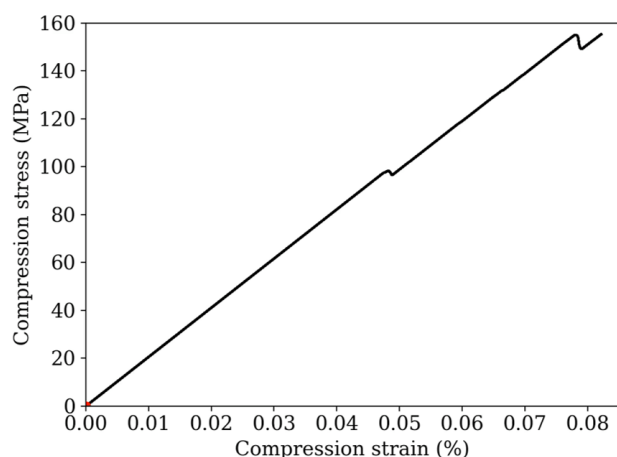


図-6 合金のマイクロピラー応力ひずみ線図

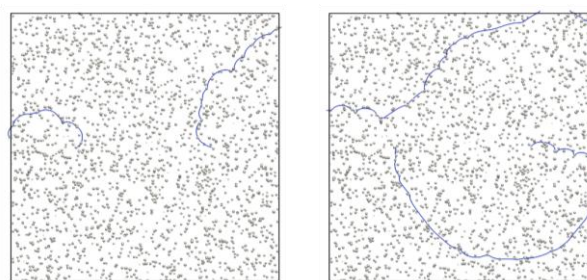
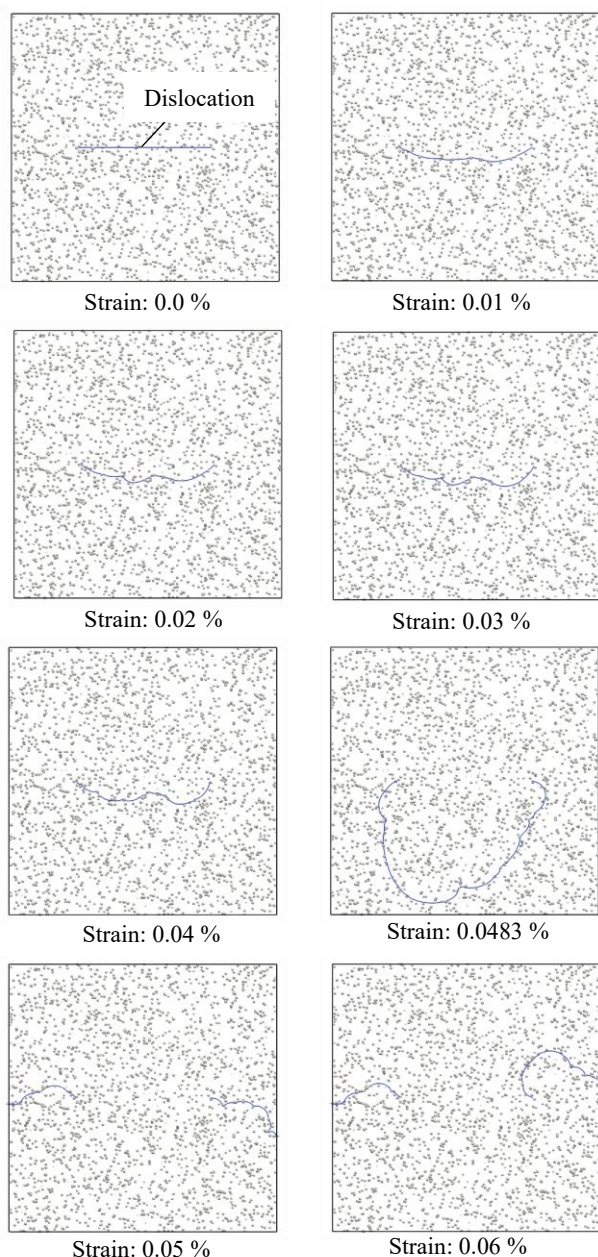
図-7 合金のマイクロピラー中の転位の  
スナップショット

図-6 にマイクロピラーの応力ひずみ線図を、図-7 に各ひずみにおける転位のスナップショットを示した。ひずみが0.0~0.04 %で転位が進展し、応力が単調に増加している。ひずみが0.0483 %で応力が低下する。この後、転位が表面と相互作用することで Single-ended source を形成している。ひずみが0.05~0.07で転位が進展し、析出物をせん断する過程で応力が上昇している。そして、合金のマイクロピラーは降伏し、転位源が Single-ended source から Double-ended source に戻っている。

図-4-7 から、マイクロピラーの流れ応力は転位源から転位が生成されるのに必要な応力レベルであることがわかる。一方、合金のマイクロピラーでは、析出物をせん断する際に必要な応力レベルであることがわかる。

#### 4. 結言

本研究では、単相のマイクロピラー内と析出物が内在するマイクロピラー中の転位の挙動を解析した。単相のマイクロピラーでは転位源が転位の生成に必要な応力レベルで降伏するのに対し、析出物を内在するマイクロピラーでは析出物をせん断するために必要な応力レベルで降伏することが分かった。

今後の展望として、析出物の大きさが寸法効果へ与える影響の調査があげられる。

#### 参考文献

- [1] Li, H. et. al., Experimental Mechanics, Vol.64 (2024), pp.1545—1555.
- [2] Zhou, C. et. al., Acta Materialia, Vol.59 (2011), pp.7673—7682.
- [3] Greer, J. R. and Nix, W. D., Appl. Phys. A, Vol.80(2005), pp.1625—1629.
- [4] Bellon, B., Haouala, S. and Llorca, J., Acta Materialia, Vol.194(2020), pp.207—223.
- [5] El-Awady, J. A. et. al., J. Mech. Phys. Solids, Vol.56(2008), pp.2019—2035.
- [6] El-Awady, J. A. et. al., J. Mech. Phys. Solids, Vol.56(2008), pp.2019—2035.
- [7] Lolesnikova, A. L., International Journal of Solids Structures, Vol.143(2018), pp.59—72.
- [8] Lolesnikova, A. L., International Journal of Solids Structures, Vol.143(2018), pp.59—72.
- [9] Chiu, Y. P., Journal of Applied Mechanics, Vol.4(1977), pp.587—590.