

分子動力学シミュレーションによる銅希薄合金の応力 - ひずみ特性の評価

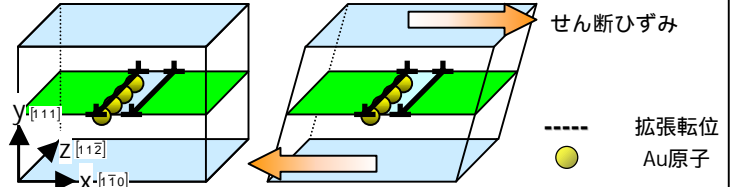
名古屋工業大学大学院 清水克成 井手直樹 西野洋一

目的

固溶硬化は、転位の運動が固溶原子に阻害されることによって生じる。最近、結晶組織はサブミクロン以下のオーダーで制御されるようになり、塑性変形を担う転位の微視的な運動を把握することが重要となる。本研究では、分子動力学シミュレーションを用いて、転位と固溶原子の相互作用が、希薄固溶合金の力学特性に及ぼす影響を原子レベルの観点から明らかにする。

分子動力学シミュレーション

シミュレーション条件	
対象物質 Cu及びCu-Au合金単結晶	基本セルサイズ x: 26 nm (周期境界を適用) y: 26 nm z: 0.44 nm (周期境界を適用)
使用ポテンシャル関数 EAMポテンシャル ^[1]	原子数 Cu: 26701 個 Au: 1 個
格子定数 0.3603 nm (FCC構造)	
温度 -0 K	

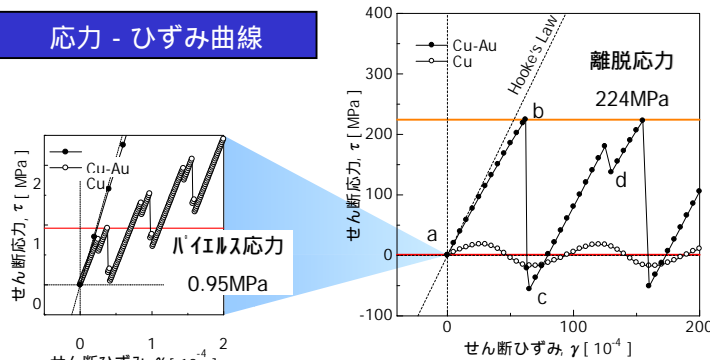


転位密度
 $1/xy = 1.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$
固溶原子濃度
 $1/26702 = 3.7 \times 10^{-3} \text{ at\%}$

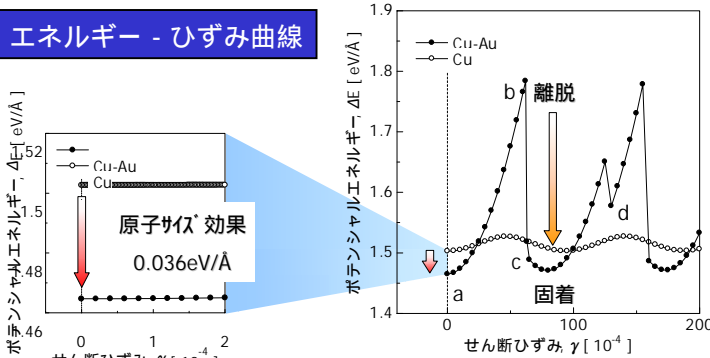
銅希薄固溶合金における
応力 - ひずみ特性を解析

シミュレーション結果

応力 - ひずみ曲線



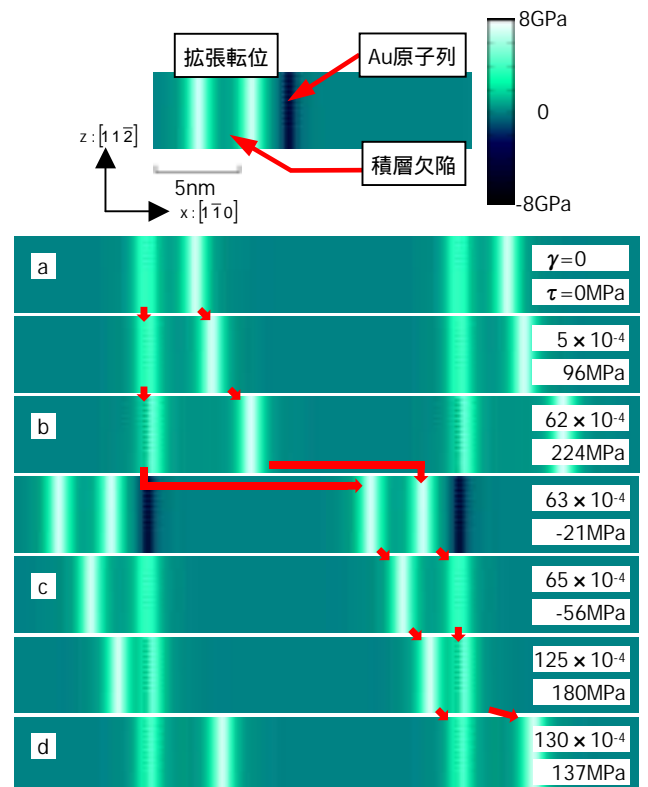
エネルギー - ひずみ曲線



原子サイズ Cu < Au であるため、転位の引張応力場に
固溶原子を導入すると転位が安定化する

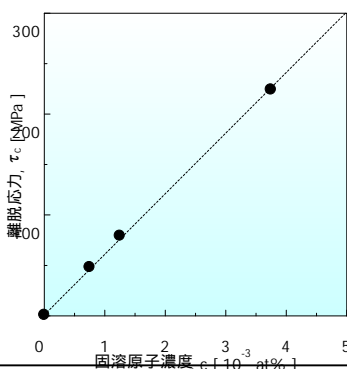
応力分布

すべり面直下の原子面(転位の引張応力側)の応力分布



固溶原子濃度依存性

転位線方向の固溶原子間隔を変化させることで固溶原子濃度を变化させる



$$\tau_c = \tau_p + \alpha C$$

τ_c : 離脱応力
 τ_p : パイエルス応力
 C : 固溶原子濃度

τ_c は固溶原子濃度に対して1次関数的に増加

- 振幅依存性内部摩擦による実験結果^[2]と一致
- 引張試験による実験結果との不一致

Friedel モデル ($\tau_c \propto c^{1/2}$)
Labusch モデル ($\tau_c \propto c^{2/3}$)

結論

1. Cu-Au希薄固溶合金における応力 - ひずみ特性を、分子動力学シミュレーションにより評価した。
2. 固溶原子が転位線に偏析した条件では、固着された転位が移動を始めるためには、パイエルス応力の100倍以上の応力を要した。
3. 離脱応力は固溶原子濃度に対して1次関数的に増加する。この傾向は、希薄固溶合金に対する一部の実験結果と一致する。

[1] M. Doyama and Y. Kogure : Comput. Mater. Sci. 14(1999) 80-83

[2] M. Morita and S. Asano : J. Japan Inst. Metals 57(1993) 1006-1011