

修士論文

析出強化超合金中における 界面転位網の形態変化および形成過程の 離散転位動力学シミュレーション

指導教員：屋代 如月

小西 正彰

2009 年 2 月

神戸大学大学院 工学研究科 博士課程前期課程 機械工学専攻

**Discrete Dislocation Dynamics Simulation
on Morphology Change and Formation Process
of Interfacial Dislocation Network
in Precipitation-Hardened Superalloys**

February 2009

**Department of Mechanical Engineering,
Graduate School of Engineering,
Kobe University, Kobe, Japan**

Masaaki Konishi

要約

Ni 基単結晶超合金の界面転位網の形態変化，および，その形成過程を解明しモデル化することを目指して，種々の離散転位動力学シミュレーションを行った．まず，転位線方向とバーガスベクトルの異なる種々の転位網について，無負荷状態における安定性を検討した．TEM により観察される組み合わせでは，すべり面を (111) 面とすると，界面から離れ安定に存在し得ないこと，すべり面を (001) 面とすると，ジャンクション形成により界面と平行なバーガスベクトルを持った転位となり，分子動力学シミュレーションで観察されているように $\langle 110 \rangle$ 方向に配向すること，などを示した．次に，安定な $\langle 110 \rangle$ 方向の転位網にプリズマティック転位ループを衝突させるシミュレーションを行い，転位網の交点部分がループによって置換されることを示した．これも分子動力学による観察結果と一致している．次に，界面転位網の形成過程を検討するために， γ' 相表面に到達した転位に関して様々なローカルルールを設定したシミュレーションを行った．まず，界面に平行なバーガスベクトルなら転位が界面をすべり面とするローカルルールを導入したが，界面上での転位の形態変化は観察されなかった．そこで，界面での転位芯レベルの変化を想定し，界面でバーガスベクトルを変更するローカルルールを導入したシミュレーションを行った． γ' 相表面と γ チャンネル内のすべり面の違いから， γ' 相表面を運動する転位が γ' 相のエッジ部でピンニングされ湾曲すること，その後， γ' 相の端まで到達して， γ' 相に沿った形態となること，などが観察された．さらに，ジャンクション形成を生じやすい条件として，互いに交差する複数の Frank-Read 源から転位を発展させるシミュレーションを行い，バーガスベクトルが $[0\bar{1}1]$ と $[101]$ の転位の合成により， γ' 相表面上に，六角形状の転位網組織が形成されることを示した．

Summary

In order to investigate the morphology change and formation process of interfacial dislocation networks in Ni-based superalloys, we have performed many discrete dislocation dynamics simulations. First, we have discussed about the stability of interfacial dislocations networks without external loading. If we set the dislocation line and Burgers vectors to the experimental result, and its slip plane the (111), the network lines glide away from the interface and can't maintain the initial shape of the network. If the slip plane is changed to the (001) interface, dislocations are oriented in the $\langle 110 \rangle$ directions by junction formation. The resulting line and Burgers vectors coincide with the results of molecular dynamics (MD) simulations. Then we have bumped a prismatic dislocation loop into the stable $\langle 110 \rangle$ dislocation network, and confirmed a mesh knot of dislocation network is replaced by the prismatic loop as observed in the other MD simulation. Next, so as to investigate formation process of interfacial dislocation networks, we have set several local rules for dislocation at the γ' surface. There is no remarkable motion on the γ' surface if we change only the slip plane, since the Burgers vector is not parallel to the interface. Therefore we have add a new rule that dislocations also change the Burgers vector on the interface as the core interaction at the interface. Due to the difference of slip plane between γ' surface and γ channel, the dislocation line gliding on the γ' interface are bowed out by the pinning at the edge of γ' cube. When the dislocation reaches the edge of the γ' cube, it shows a morphology surrounding the γ' cube. Finally, we have set many Frank-Read sources crossing each other in order to observe junction formation process. We have found a hexagonal dislocation network is formed temporally on γ' phase by junction formation.

目次

第1章 緒論	1
第2章 解析手法	5
2.1 離散転位動力学法	5
2.1.1 転位による応力場	5
2.1.2 直線転位セグメントによる応力場	6
2.1.3 転位に働く力 (Peach-Koehler 力と自己相互作用)	7
2.1.4 転位の運動方程式	8
2.1.5 交差すべり	9
2.1.6 短距離相互作用	10
2.2 バックフォースモデル	12
第3章 界面転位網の形態変化シミュレーション	14
3.1 転位網の安定性	14
3.1.1 シミュレーション条件	14
3.1.2 シミュレーション結果および考察	17
3.2 プリズマティック転位との相互作用	24
3.2.1 シミュレーション条件	24
3.2.2 シミュレーション結果および考察	27
3.3 結言	34
第4章 界面転位網の形成過程シミュレーション	36
4.1 γ/γ' 界面上でのすべり運動のモデル化 1	36
4.1.1 シミュレーション条件	37
4.1.2 シミュレーション結果および考察	38

4.2	γ/γ' 界面でのすべり運動のモデル化 2	44
4.2.1	シミュレーション条件	44
4.2.2	シミュレーション結果および考察	44
4.3	γ/γ' 界面でのすべり運動のモデル化 3	48
4.3.1	シミュレーション条件	48
4.3.2	シミュレーション結果および考察	49
4.4	結言	52
	第5章 結論	53
	参考文献	56
	関連発表論文・講演論文	60
	謝辞	75

第1章

緒論

高温強度に優れる γ' 相析出強化 Ni 基単結晶超合金は、発電用のガスタービンや航空機のジェットエンジンなどのタービン動翼などに広く使われている。近年、エネルギー起源の CO₂ 削減・地球温暖化防止の観点から、各種熱機関の熱効率の向上が急務の課題となっている。熱機関は、燃焼温度を上昇させることで最も効果的に効率を向上させることができるため、より高い耐用温度を有する耐熱合金の開発が求められている^[1]。通常、実機に使用される Ni 基超合金は遮蔽コーティングが施され、内部から空冷あるいは蒸気冷却することで、融点以上の高温ガス中でも使用可能となっている。しかしながら、冷却はそれ自体熱効率の低下の原因となるので、合金自体の耐用温度を向上することが望まれている。

Ni 基超合金は鍛造合金から普通鑄造合金、一方向凝固合金を経て単結晶合金へと進化してきた。破壊の起点となる結晶粒界を全てなくし単結晶として鑄造される第 4 世代の Ni 単結晶超合金の内部組織は、図 1.1 に示すような特徴的な析出構造を有してい

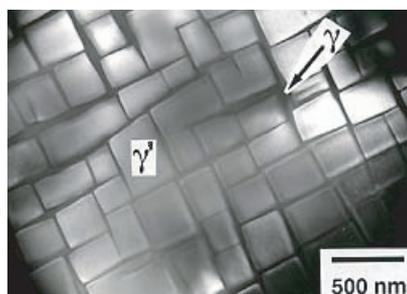
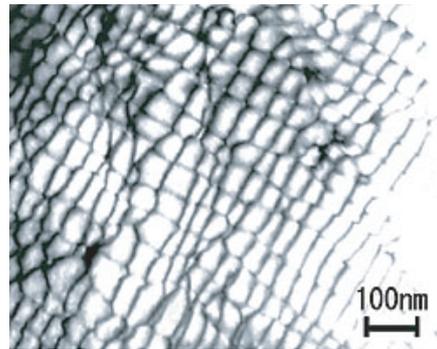


Fig.1.1 Typical microstructure of nickel-base superalloys^[2].

Fig.1.2 Dislocation network^[8] .

る．図で $0.5\mu\text{m}$ 程度の立方体状のものが Ni_3Al を主成分とする L1_2 構造の γ' 相であり， Ni 固溶体である fcc 構造の γ 母相中に約 62.5 ~ 75% の高体積分率で格子状に析出している．この γ/γ' 構造の Ni 基超合金の変形特性に与える影響については， γ' 相の大きさや形状の違いによる降伏応力の変化^[3] や，強度に及ぼす格子ミスフィットや熱膨張係数の差の影響など^{[4],[5]} が報告されている．クリープ変形条件下では， γ' 相は γ/γ' 相の格子ミスフィットに依存して負荷方向に平行もしくは垂直に粗大化した板状のラフト構造となる^[6]．ラフト化した γ' 相は転位運動の障害となりクリープ強度を上昇させることが報告されている^[7]．さらに，ラフト化した γ' 相表面には図 1.2 に示すような界面転位網が観察されており，その間隔がクリープ強度と密接に関係していることが示されている^[9]．界面転位網に関する実験的研究では，クリープ試験前後の TEM による観察から転位線の方向やバーガースベクトルを判別し，その形成過程や組織の最適化のメカニズムなどが提案されている^{[10],[11]}．また工業的には， Ru や Ir などの貴金属を添加することで組織の安定化を図り，その効果によって可能となる Mo の追加添加を行い，界面転位網を微細化することで耐用温度 $1,100$ の第 5 世代単結晶超合金を実現している^[12]．

顕微鏡技術の飛躍的な進歩によって， γ' 相をカッティングする超転位形成の動的過程などが観察可能となっている．しかしながら，観察条件の制限や観察した事象への理論的な裏づけのために，解析的アプローチへの期待も大きい．

界面や相変態予測等の問題で盛んに用いられている Phase-field 法を Ni 基超合金ラ

フト化挙動に適用した研究もある．原田らは Phase-field 法と熱力学状態線図予測の CALPHAD 法をカップリングすることで実用多元系 Ni 基超合金の γ 相と γ' 相の組織形態予測シミュレーションを行っている^[13]．また，転位網と γ' 相との相互作用をモデル化したラフティングシミュレーション^[14] などの検討もある．

γ/γ' 界面における転位挙動を明らかにするためには，転位芯すなわち原子配置まで考慮する必要がある．そのため，原子レベルでの変形・破壊現象を動的・連続的に観察可能な分子動力学法 (Molecular Dynamics ; MD) による研究も多くなされている．ミスフィット転位芯の構造^[16]，圧子下で生じるプリズマティック転位ループとの相互作用^[17] や刃状およびらせん転位との相互作用^[18] などの検討例があり，従来の転位論にはない新たな知見を与えている．しかしながら，空間的および特に時間的スケールの隔たりから，多数の転位の集団的挙動や交差すべり，上昇運動などの熱活性化過程による挙動などは扱うことができない．

原子構造を直接扱わず多数の転位の挙動を解析する一階層上位スケールの解析手法として離散転位動力学法 (Discrete Dislocation Dynamics ; DDD) がある．離散転位動力学法は，任意の曲線形状を有する転位線を多数の直線セグメントに離散化し，各セグメントと他の転位との相互作用を考えることにより，転位の運動を逐次追跡する手法である．DDD では，厳密には原子構造を考慮しなければならない転位芯レベルの相互作用 (対消滅，交差すべり，ジョグ・ジャンクション形成など) を臨界距離や臨界力などのローカルルールを導入することで再現可能にし，計算負荷を軽減している．また有限要素解析と連成解析することで，介在物および異種材料界面における転位挙動について検討した例^[19] や，境界要素法との連成解析で，ナノインデンテーションで観察されるナノスケールの塑性現象についての検討をした例^[20] もある．

Ni 基超合金に関する検討として，屋代らは転位が $L1_2$ 構造の γ' 相をカッティングする際に生じる逆位相境界 (Anti Phase Boundary; APB) を考慮したバックフォースモデルを提案し， μm スケールの γ/γ' 構造中の転位挙動の DDD シミュレーションを行っている^[21]．さらに，界面に配置した転位網や γ' 相の析出形態が材料の塑性変形抵抗に及ぼす影響についても評価している^[22]．

本研究では，界面転位網の形態変化とその形成過程について検討することを目的と

して、上述のバックフォースモデルを導入したDDDシミュレーションにより、界面転位網の構造安定性ならびにプリズマティック転位ループとの相互作用による形態変化、ならびに γ/γ' 界面上での転位挙動について、様々なローカルルールを設定して複雑な γ/γ' 構造中での転位網の形成過程を検討した。以下に各章の概略を示す。

第2章では解析手法の基礎として、離散化した転位が形成する応力場や転位に働く力、転位の運動方程式などの離散転位動力学シミュレーションに必要な手法について述べ、本シミュレーションに導入しているAPBを考慮した γ' 相カッティング条件について説明する。第3章では、界面転位網およびプリズマティック転位のモデル化を行い、界面転位網の安定性ならびにプリズマティック転位ループとの相互作用について検討する。第4章では、 γ/γ' 界面もすべり面とする離散転位動力学シミュレーションを行い、複雑な γ/γ' 構造中における転位挙動について検討する。最後に、第5章で本研究の総括を述べる。

第2章

解析手法

離散転位動力学法 (Discrete Dislocation Dynamics ; DDD) は , 任意の曲線形状を有する転位線を複数の直線セグメントの集合に離散化し , 各セグメントに働く力に基づき転位の運動を逐次追跡する方法である . 本章では , 離散化した転位に生じる応力や転位間の短距離相互作用などの離散転位動力学シミュレーションに必要な手法について概説する . また , 本シミュレーションに導入している APB を考慮したバックフォースモデルについて説明する .

2.1 離散転位動力学法

2.1.1 転位による応力場

図 2.1 に模式的に示すように , 任意の曲線形状を有する転位が形成する応力場により , 点 P における応力は線積分を用いて次式で表わされる^[23] .

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}(P) = & -\frac{\mu}{8\pi} \oint_C b_m \epsilon_{im\alpha} \frac{\partial}{\partial x'_i} \nabla'^2 R dx'_\beta - \frac{\mu}{8\pi} \oint_C b_m \epsilon_{im\beta} \frac{\partial}{\partial x'_i} \nabla'^2 R dx'_\alpha \\ & - \frac{\mu}{4\pi(1-\nu)} \oint_C b_m \epsilon_{imk} \left(\frac{\partial^3 R}{\partial x'_i \partial x'_\alpha \partial x'_\beta} - \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial x'_i} \nabla'^2 R \right) dx'_k \end{aligned} \quad (2.1)$$

ここで b_i はバーガースベクトル , μ はせん断弾性係数 , ν はポアソン比 , R は点 P と転位の距離 , ϵ_{ijk} は置換記号 (permutation symbol) で , 添え字 (i, j, k) が偶置換なら 1 , 奇置換なら -1 , いずれかの添え字が同じなら 0 になる .

転位曲線を転位セグメントに離散化した場合 , 転位による応力場は次式で評価される .

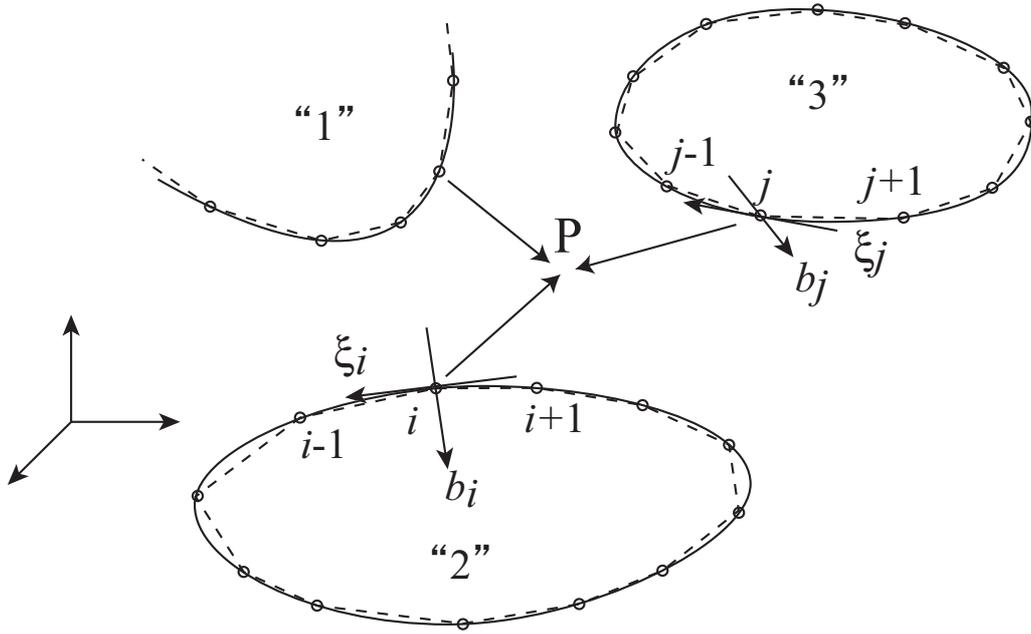


Fig.2.1 Nodes and segments on dislocation loops and curves.

$$\sigma_{\alpha\beta}(P) = \sum_{all\ Loops} \sum_{j=1}^{n-1} \left\{ -\frac{\mu}{8\pi} \int_j^{j+1} b_m \epsilon_{im\alpha} \frac{\partial}{\partial x'_i} \nabla'^2 R_j dx'_\beta - \frac{\mu}{8\pi} \int_j^{j+1} b_m \epsilon_{im\beta} \frac{\partial}{\partial x'_i} \nabla'^2 R_j dx'_\alpha - \frac{\mu}{4\pi(1-\nu)} \int_j^{j+1} b_m \epsilon_{imk} \left(\frac{\partial^3 R_j}{\partial x'_i \partial x'_\alpha \partial x'_\beta} - \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial x'_i} \nabla'^2 R_j \right) dx'_k \right\} \quad (2.2)$$

ここで R_j は、点 P と転位ノード j との距離で、 n は1つの転位曲線もしくは転位ループにおける総ノード数である。

2.1.2 直線転位セグメントによる応力場^[23]

Hirthらによると、転位セグメントを直線とした場合、(2.2)式は次式で評価される。

$$\sigma(P) = \sum_{j=1}^N \sigma_{j,j+1}^D \quad (2.3)$$

ここで、 $\sigma_{j,j+1}^D = \sigma_{j+1}^D - \sigma_j^D$ は図2.2に模式的に示したように転位ノード j と $j+1$ で定まる直線セグメントが形成する応力場であり、図のような局所座標系において $\sigma_j^D, \sigma_{j+1}^D$ の成分は以下で評価される。

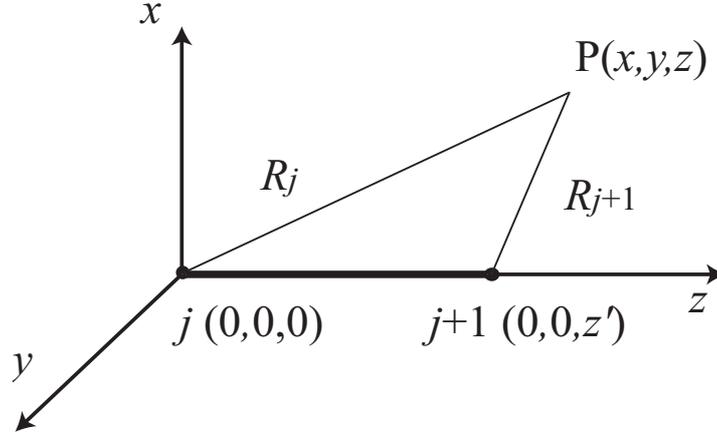


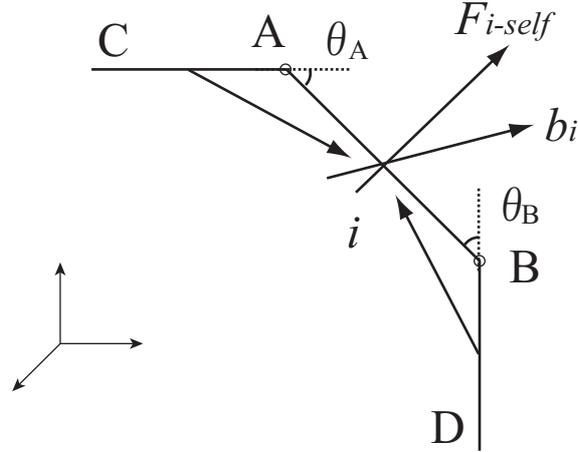
Fig.2.2 Stress field around a finite segment.

$$\begin{aligned}
 \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_0} &= b_x \frac{y}{R(R+\lambda)} \left(1 + \frac{x^2}{R^2} + \frac{x^2}{R(R+\lambda)} \right) + b_y \frac{x}{R(R+\lambda)} \left(1 - \frac{x^2}{R^2} - \frac{x^2}{R(R+\lambda)} \right) \\
 \frac{\sigma_{yy}}{\sigma_0} &= -b_x \frac{y}{R(R+\lambda)} \left(1 - \frac{y^2}{R^2} - \frac{y^2}{R(R+\lambda)} \right) - b_y \frac{x}{R(R+\lambda)} \left(1 + \frac{y^2}{R^2} + \frac{y^2}{R(R+\lambda)} \right) \\
 \frac{\sigma_{zz}}{\sigma_0} &= b_x \left(\frac{2\nu y}{R(R+\lambda)} + \frac{y\lambda}{R^3} \right) + b_y \left(-\frac{2\nu x}{R(R+\lambda)} - \frac{x\lambda}{R^3} \right) \\
 \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_0} &= -b_x \frac{x}{R(R+\lambda)} \left(1 - \frac{y^2}{R^2} - \frac{y^2}{R(R+\lambda)} \right) + b_y \frac{y}{R(R+\lambda)} \left(1 + \frac{x^2}{R^2} + \frac{x^2}{R(R+\lambda)} \right) \\
 \frac{\sigma_{zx}}{\sigma_0} &= -b_x \frac{xy}{R^3} + b_y \left(-\frac{\nu}{R} + \frac{x^2}{R^3} \right) + b_z \frac{y(1-\nu)}{R(R+\lambda)} \\
 \frac{\sigma_{yz}}{\sigma_0} &= b_x \left(\frac{\nu}{R} - \frac{y^2}{R^3} \right) + b_y \frac{xy}{R^3} - b_z \frac{x(1-\nu)}{R(R+\lambda)}
 \end{aligned} \tag{2.4}$$

ここで $\sigma_0 = \frac{\mu}{4\pi(1-\nu)}$, $\lambda = z' - z$, $R^2 = x^2 + y^2 + (z - z')^2$, b_x, b_y, b_z は転位セグメントのバーガスベクトルの各成分である。

2.1.3 転位に働く力 (Peach-Koehler 力と自己相互力)

任意の転位曲線を動力的に取り扱うためには、転位曲線の各転位ノードにおける局所応力場を求める必要がある。例えば、図 2.1 に示す転位ループ“ 2 ”のノード i における応力は、ノード i の隣接ノード $i-1, i+1$ を除く転位ループ“ 2 ”と他の全転位ループとの総転位ノードにより、(2.3) 式を用いて求めることができる。ノード i が隣接ノード $i-1, i+1$ から受ける力は、 $R_j \rightarrow 0$ となるため (2.2) 式で表すことはできず、特殊な扱いをしなければならない。隣接ノード $i-1, i+1$ によって形成される曲線から解


 Fig.2.3 Self-force F_{i-self} at dislocation segment i .

析的近似としてノード i における自己相互力 F_{i-self} を求めることができ、次式で表される。

$$F_{i-self} = \frac{\mu}{4\pi L} [f_{CA}(\theta_A, b) + f_{DB}(\theta_B, b)] \ln \left(\frac{L}{\rho} \right) \quad (2.5)$$

ここで、 θ_A, θ_B はそれぞれ図 2.3 に模式的に示すように力の作用するセグメントと隣接セグメントのなす角であり、 ρ はカットオフパラメータ^[23]、 L はセグメントの長さである。また f_{CA}, f_{DB} は角度 θ_A, θ_B とバーガースベクトル b によって表される、セグメント CA、セグメント DB から受ける力であり、Hirth らの著書^[23] に詳細に記述されている。したがって任意の転位ノード i に作用する力は、(2.3) 式の Peach-Koehler 力と自己相互力の和として次式で表すことができる。

$$F_i = \sum_{j=1}^{N-1} (\sigma_{j,j+1}^D(p) + \sigma^a(p)) \cdot b_i \times \xi_i + F_{i-self} \quad (2.6)$$

ここで、 $\sigma_{j,j+1}^D$ は他の転位セグメント $j, j+1$ による応力、 σ^a は外部負荷応力 (系内で一様)、 ξ_i は転位線ベクトルである。

2.1.4 転位の運動方程式

転位の時間発展は次式の運動方程式に基づき行われる。

$$m\dot{v}_i + \frac{1}{M(T, p)} v_i = [F_i]_{glide-component} \quad (2.7)$$

m は転位の質量, M は刃状転位, らせん転位の可動性の差を考慮するための転位の可動性を表すパラメータである. また v_i はすべり速度, T は絶対温度, p は圧力である. (2.7) 式に基づいて転位曲線の時間発展を追跡していくが, Frank-Read 源のように転位ループが成長する際, 転位セグメント数が一定では転位曲線が正しく表現できなくなる. また逆に転位ループが収縮する場合は効率が悪くなる. シミュレーションでは, 最大と最小の転位セグメント長を設定しておき, 規定の範囲を超えるような場合に新しいノードの生成またはノードの消去を行なう.

2.1.5 交差すべり

交差すべりは bcc や fcc 金属の動的回復に重要なメカニズムである. らせん転位は内部応力を緩和するため, あるいは, 内部障害物を迂回するために交差すべりを生じる. その結果, 二重交差すべりによる Frank-Read 源形成をもたらす. 転位セグメントを直線とする場合, 2 次すべり系に交差すべりを生じるためには, 図 2.4 に示すような配置 (ダブルキック) を形成しなければならない. このような交差すべりが生じるためには, 大きな弾性活性化エネルギーを要する. 交差すべりは熱活性化過程であるので, 転位セグメントが 2 次すべり系にジャンプし移る確率を, Monte-Carlo シミュレーションと同様に次式の確率変数 P で決められる.

$$P = A_0 \exp\left(-\frac{\Delta W^* - \tau A}{\kappa T}\right) = A_0 \exp\left(-\frac{(\tau^* - \tau)A}{\kappa T}\right) \quad (2.8)$$

ここで A_0 は標準化因子, κ はボルツマン定数, T は絶対温度, L は転位セグメントの長さである. また τ はすべり面の有効せん断応力, A は転位がすべり面を換えて動いた面積, ΔW^* は図 2.4 に示した, ダブルキックに基づく活性化エネルギー^[23], τ^* は臨界形状を形成するための臨界応力である. ここで臨界形状 ($a = L/2$) とは, 転位がピンニングされ湾曲し半円状になるための近似的形状である.

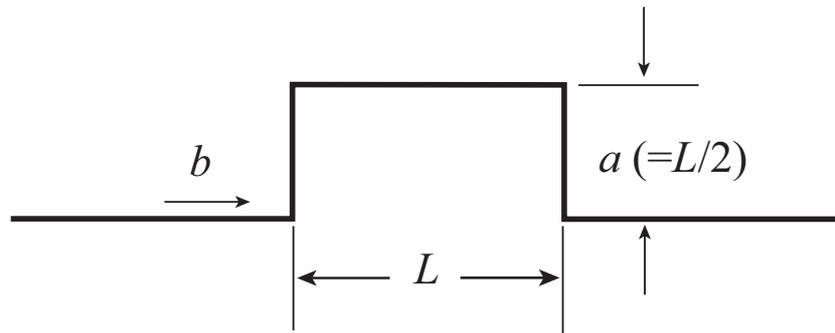


Fig.2.4 Bow-out "double-kink" model for cross slip.

2.1.6 短距離相互作用

転位同士が接近したときには、転位芯レベルの相互作用として対消滅やジョグ、ジャンクションの形成といった現象が起こる。こういった短距離相互作用を離散転位動力学シミュレーションで直接取り扱うためには、時間、空間スケールを微小にしなければならない。多数の転位挙動を対象とする場合、これらの現象を直接扱うのは計算コストの観点から望ましくない。そこで本研究では転位間短距離相互作用を臨界距離や臨界力といったローカルルールを用いて取り扱うこととする。具体的には Rhee らによって提案された以下のルール^[24]を用いる。

- Rule1. 短距離作用するかどうか決定する臨界力基準 “ $F \geq F^c$ ”
- Rule2. 対消滅に関する臨界力基準
- Rule3. ジャンクション形成に関する臨界角度基準 “ $\theta_{AB} \leq \theta_{jn}^c$ ”
- Rule4. ジョグ形成に関する臨界角度基準 “ $\theta_{AB} \geq \theta_{jg}^c$ ”
- Rule5. ジョグの強度に関する臨界角度基準 “ $\theta_{AB} \leq \theta_{jgs}^c$ ”

これらのルールにおいて、 θ_{AB} は2つの転位セグメント間の角度、 θ_{jg} はジョグにおける湾曲角度、 θ_{jn}^c 、 θ_{jg}^c 、 θ_{jgs}^c はそれぞれジャンクション形成、ジョグ形成、ジョグ強度に関する臨界値である。短距離相互作用の流れを図2.5に示す。

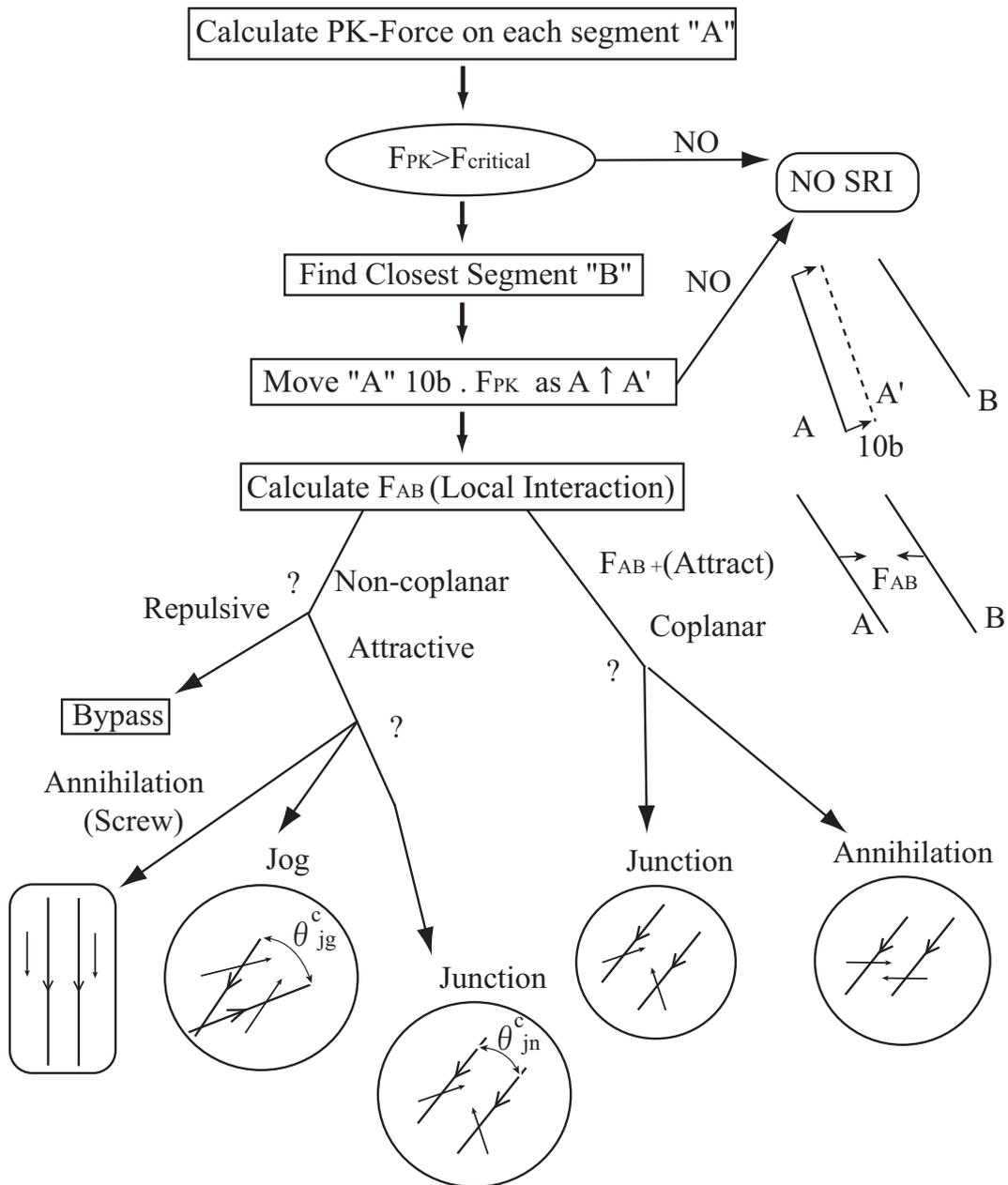


Fig.2.5 Flow chart for short range interaction.

2.2 バックフォースモデル

Ni 基超合金は γ 相と γ' 相の二相により構成される．図 2.6(a) に示すように γ 相は Ni 原子のみで構成されるため，転位の通過によって原子が $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ 方向にずれると元の状態に等しくなる．一方， γ' 相は図 2.6(b) に示すように $L1_2$ 構造を有しており，fcc の完全転位が通過すると Al 原子が Ni 原子の位置にずれるため，すべり面をはさんで原子配置が $1/2$ 周期ずれた逆位相境界 (APB) が形成される．

APB は面積に比例した自己エネルギーを有する面欠陥であるため， γ 相から γ' 相に侵入する転位は APB 形成に伴い反力を受ける．今，長さ L の転位が γ' 相へ Δn だけ侵入したとすると，APB 形成によるエネルギー上昇 ΔE_{APB} は次式で表される．

$$\Delta E_{APB} = \chi_{APB} L \Delta n \quad (2.9)$$

ここで， χ_{APB} は単位面積あたりの APB エネルギーである．一方，APB 形成において，転位に作用する単位長さ当たりの反力を単純化して場所・方向によらず一定であると考えると，転位の行う仕事 ΔW は次式で表される．

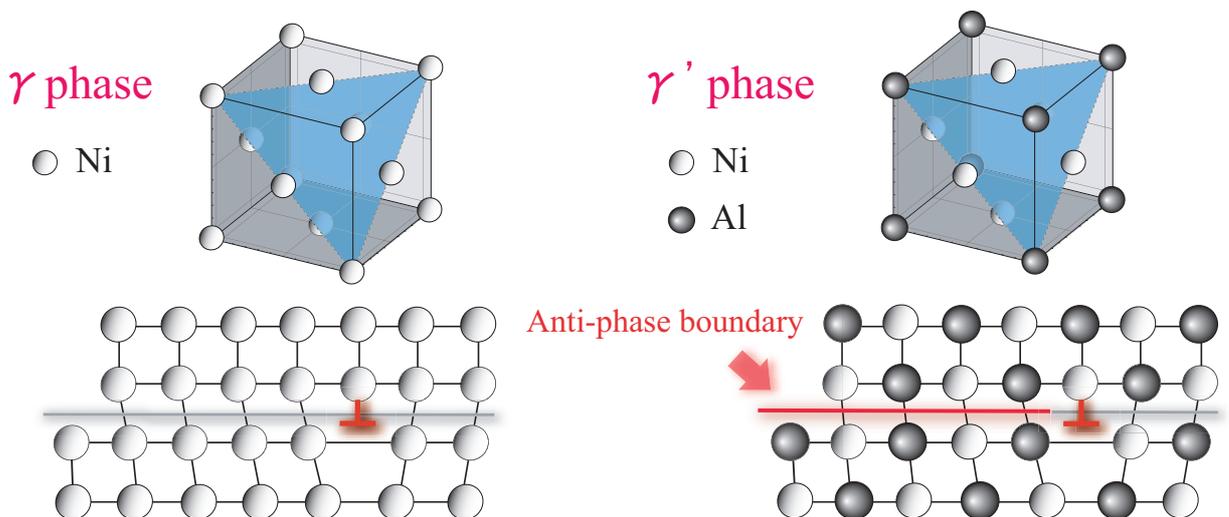


Fig.2.6 Schematic of anti-phase boundary in $L1_2$ structure.

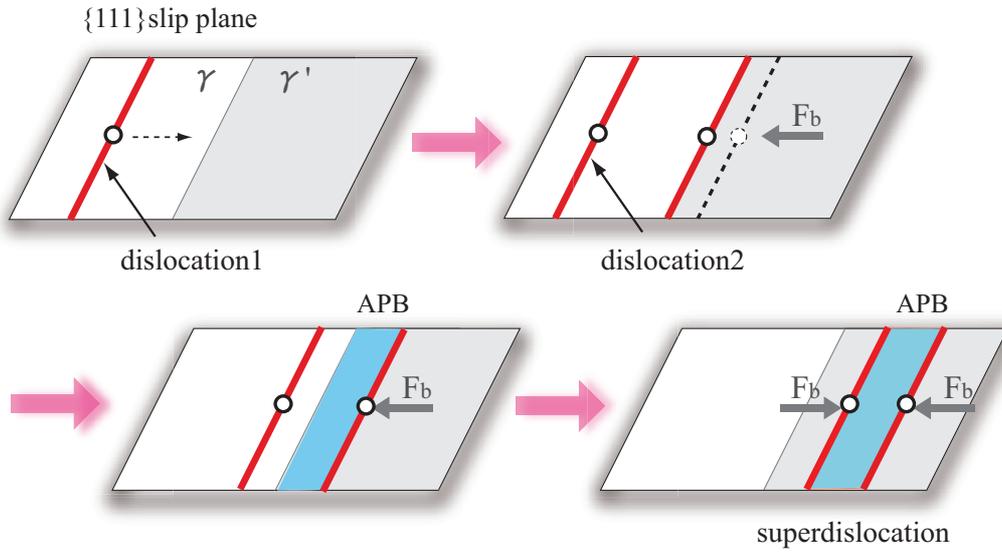


Fig.2.7 Schematic of back force acting on the leading and trailing superpartials.

$$\Delta W = F_b L \Delta n \quad (2.10)$$

ここで F_b は単位長さ当りの反力である．APB 形成によるエネルギー上昇が全て転位の仕事によるものと仮定すると，(2.9) 式と (2.10) より次式が導かれる．

$$F_b = \chi_{APB} \quad (2.11)$$

一方，後続の転位（trailing superpartial dislocation）は γ' 相に侵入すると，最初の転位（leading superpartial dislocation）によって形成された APB を解消する．このエネルギー減少 $-\Delta E_{APB}$ が転位によってなされた仕事に等しいとすると，転位には

$$F_b = -\chi_{APB} \quad (2.12)$$

の引力が作用することがわかる．通常，転位の γ' 相へのカッティングは，APB 形成による反力が大きいため単独では生じず，後続からの転位接近により反力を受けて生じる． γ' 相に侵入した2本の転位はその間に APB を有し，超転位（superdislocation）として運動を続ける．本バックフォースモデルを図 2.7 に模式的に示す．

第3章

界面転位網の形態変化 シミュレーション

Ni 基超合金中の γ' 相はクリープ変形下において板状に粗大化し，ラフト組織と呼ばれる構造となる．その表面には界面転位網が観察されており，その形態が材料のクリープ強度と密接に関係しているとの報告もある^[9]．屋代らは分子動力学シミュレーションにおいて，押し込み圧子から射出されたプリズマティック転位ループが界面転位網を引き寄せその形態を変化させる現象を報告している^[17]．また，実験観察ではプリズマティック転位ループが転位網形成に重要な役割を果たすというメカニズムも提案されている^[8]．

本章では，転位論に基づく離散転位動力学法の観点から界面転位網とプリズマティック転位ループとの相互作用を検討するために，界面転位網およびプリズマティック転位ループのモデル化を行い，種々の離散転位動力学シミュレーションを行った．

3.1 転位網の安定性

3.1.1 シミュレーション条件

図3.1(a)，(b)に示すように， γ 相と γ' 相が(001)面で接合された $0.38\mu\text{m} \times 0.38\mu\text{m} \times 0.38\mu\text{m}$ の立方体シミュレーションセルを解析領域とする． γ 相と γ' 相のせん断弾性係数はそれぞれ80GPaおよび85GPaであり，ポアソン比はともに0.3とした．解析領域の

x, y 方向には周期境界条件を適用し, z 方向は自由境界とした. また, γ' 相へのカッティング抵抗である APB エネルギーは第一原理計算により得られた値 $126\text{mJ}/\text{m}^2$ を用いた^[25]. このセルの γ/γ' 界面に配置する転位網は, 図 3.1(c) ~ (e) に示すような 3 パターンの転位線方向およびバーガスベクトルを考慮した. Network 1 および Network 2 は転位線方向が $[100]$, $[010]$ 方向であり, Network 3 は $[110]$, $[\bar{1}10]$ 方向としている. Network 1 は TEM による観察結果^[10] に従ったもので, そのバーガスベクトルは $[011]$ および $[01\bar{1}]$ で刃状転位ではあるが界面から 45° の方向となっている (図 3.1(c)). Network 2 はバーガスベクトルを $\{111\}$ 面に沿ったものとせず, 界面に平行で転位線と直交する方向としたものである (図 3.1(d)). Network 3 は MD シミュレーションにより観察されている組み合わせ^{[16][26]} としたものである (図 3.1(e)). fcc 結晶のすべり面は $\{111\}$ 面であるが, これらの界面転位網は異相界面上を運動するものとして (001) 面をすべり面とした. ただし, Network 1 については $\{111\}$ 面をすべり面とした場合のシミュレーションも行った. 転位網間隔は Network 1 については $0.063\mu\text{m}$, Network 2 では $0.063\mu\text{m}$ と $0.046\mu\text{m}$ の 2 通り, Network 3 では $0.066\mu\text{m}$ と $0.044\mu\text{m}$ の 2 通りについて検討した. これらのモデルについて無負荷条件下で $t=0 \sim 200\Delta t$ の離散転位動力学シミュレーションを行った.

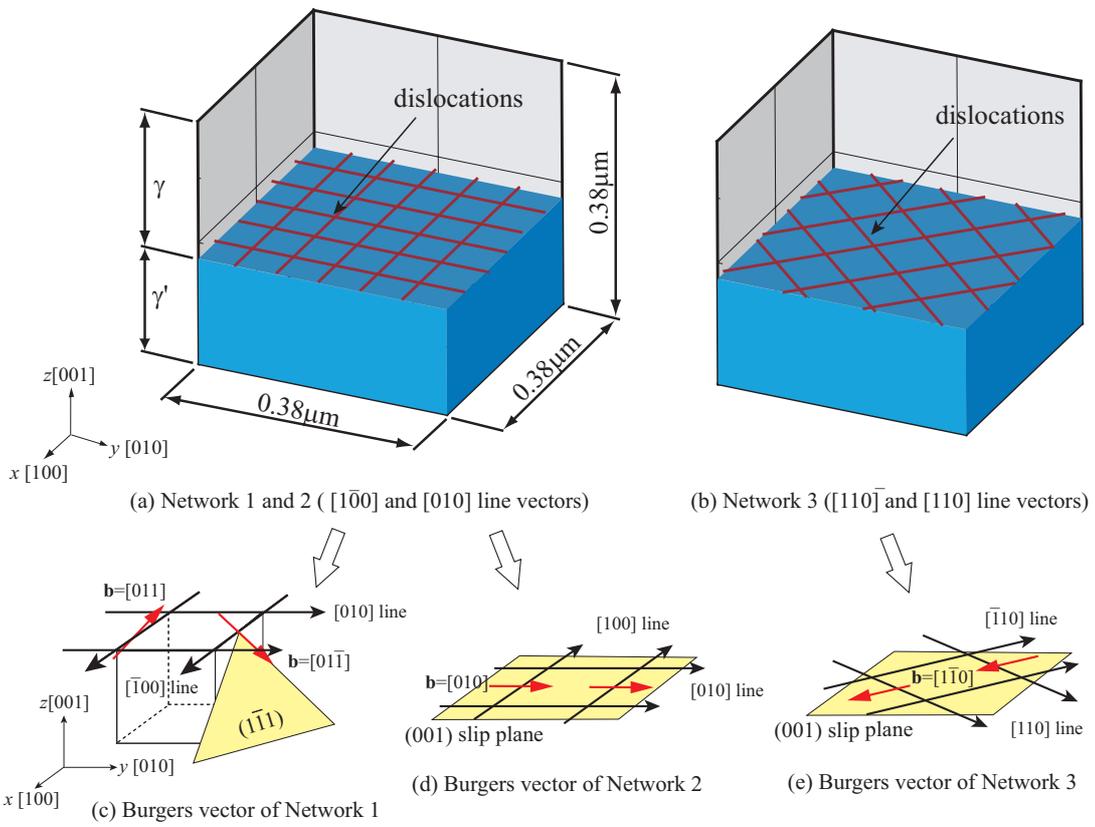


Fig.3.1 Simulation cell and dislocation networks.

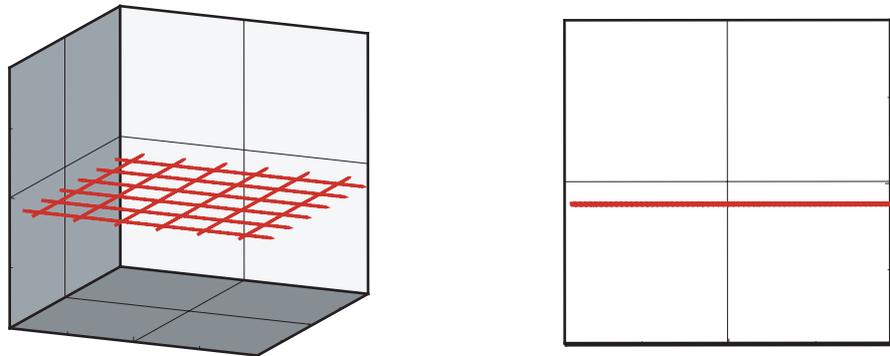
3.1.2 シミュレーション結果および考察

Network 1 においてすべり面を通常の fcc 結晶の (111) 面とした場合の転位挙動を図 3.2 に示す。平面上の運動でないため、3次元に見たものと、側面から見た図を示している。無負荷にもかかわらず、転位が界面から離れ初期の網目構造を保っていない。 γ 相へ移動している転位線が滑らかでなく、いびつな形状になっているのは、[100] 方向の転位線が (111) すべり面を運動するために、多数の (111) 面上を貫く転位としてそれぞれのすべり面で運動しているためである。一方、APB による反力のため γ' 相に侵入することはない。

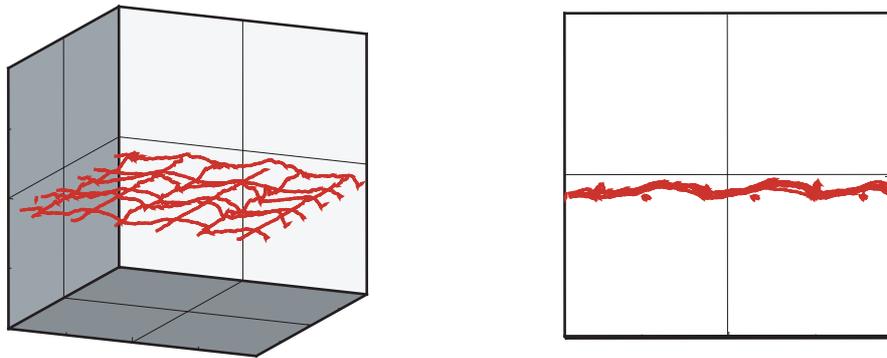
Network 1 において、界面をすべり面とした場合の転位の運動を図 3.3 に示す。計算を開始してすぐに、転位線の交差部分においてジャンクションが形成された (図 3.3(b))。その後、ジャンクション部分が成長し、MD で観察されているものと等しい [110], $[\bar{1}10]$ 方向に配向した構造となった。このときに形成されるジャンクションとバーガースベクトルの関係を図 3.4 に模式的に示す。図中では転位線方向を矢印で、バーガースベクトルをミラー指数で表している。図 3.4(a) においてバーガースベクトルは縦の転位線方向を上向き、横の転位線方向を左向きにとった場合であるが、転位線を互い違いの方向にすると図 3.4(b) に示すような反時計まわりの回路と時計まわりの回路の組み合わせとなり、バーガースベクトルの符号も図のようになる。これらの回路の交点は、バーガースベクトルの和がすべて $\langle 110 \rangle$ になるために図 3.3(b) のようにジャンクションが形成されたものと考えることができる。その後、時計まわりおよび反時計まわりの回路の部分が拡大するようにジャンクション部分が広がり (図 3.3(c),(d))、 $t=100\Delta t$ の図 3.3(f) では転位網はほぼ $\langle 110 \rangle$ 方向に配向したジャンクションのみとなっている。これらのジャンクションのバーガースベクトルはすべて (001) 界面に平行となっている。このことから、界面転位網が界面上で安定に存在するために界面に平行なバーガースベクトルを持つことが示唆される。

Network 2 ならびに Network 3 において、転位線間隔の異なる 2 通りのパターンでシミュレーションを行った際の転位の挙動を図 3.5 ~ 図 3.8 に示した。いずれも、直線状の転位がわずかに波状になっているものの、初期の構造を保っており安定であった。

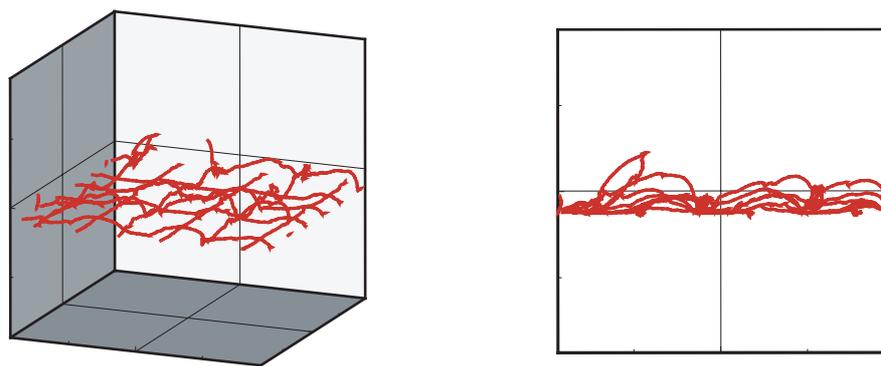
これは、本論文のDDDシミュレーションでは格子ミスフィットや結晶の異方位性を考慮できないことにより、すべり面が(001)面で、かつバーガースベクトルが界面に沿った刃状転位であることが満たされれば転位網は安定に存在するためであると考えられる。MDシミュレーションで観察されているNetwork 3の解析結果はすべり面を(001)面としたNetwork 1の解析結果と一致しており、通常 γ 相中の転位が[101]のバーガースベクトルを持つことから、図3.4で考察したジャンクション形成によって再配置することが γ' 相上の転位網にとって自然な現象であると示唆される。



(a) $t = 0$



(b) $t = 30\Delta t$



(c) $t = 100\Delta t$

Fig.3.2 Motion of dislocation networks (Network 1, (111)slip plane).

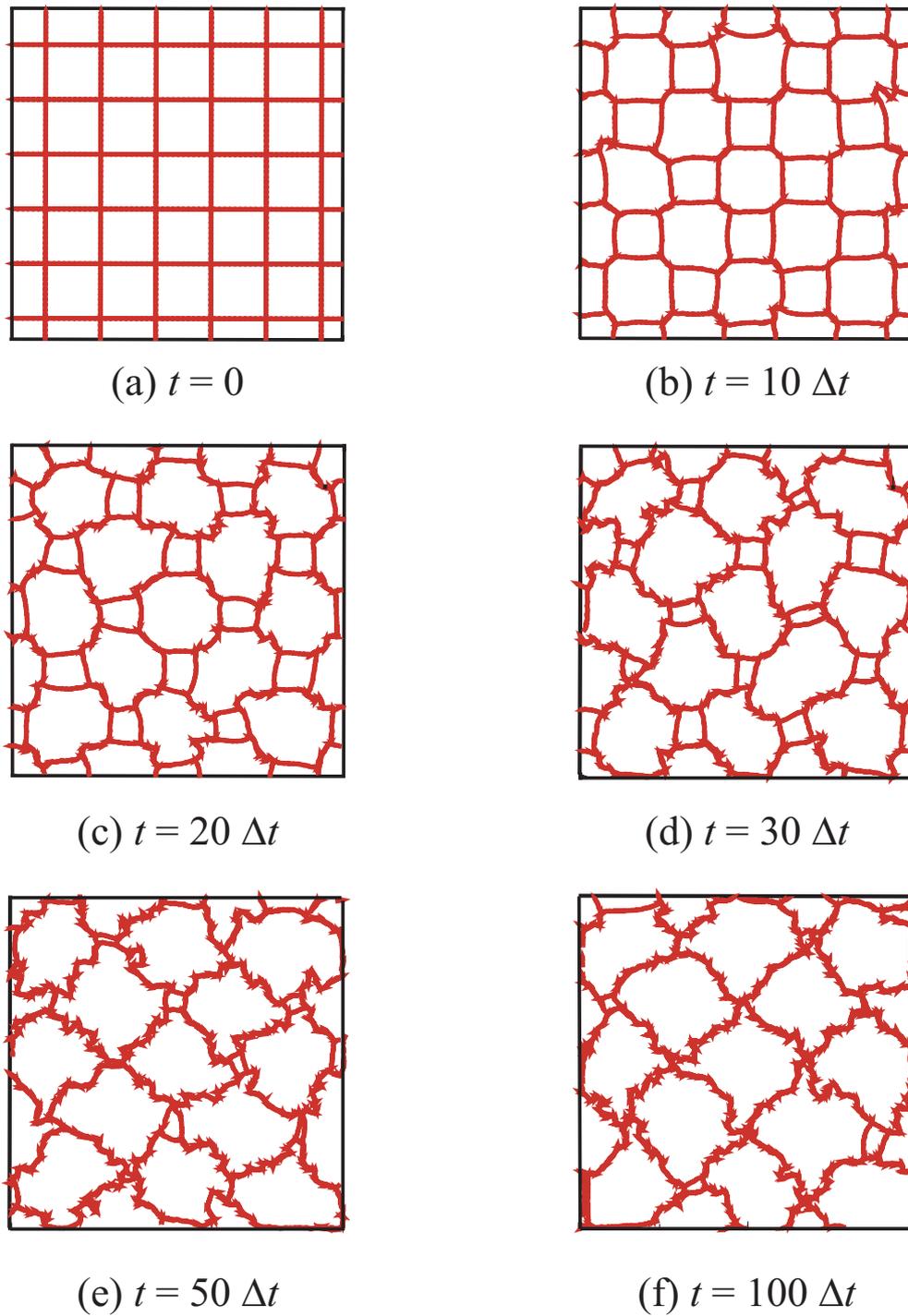


Fig.3.3 Motion of dislocation networks (Network 1, (001)slip plane).

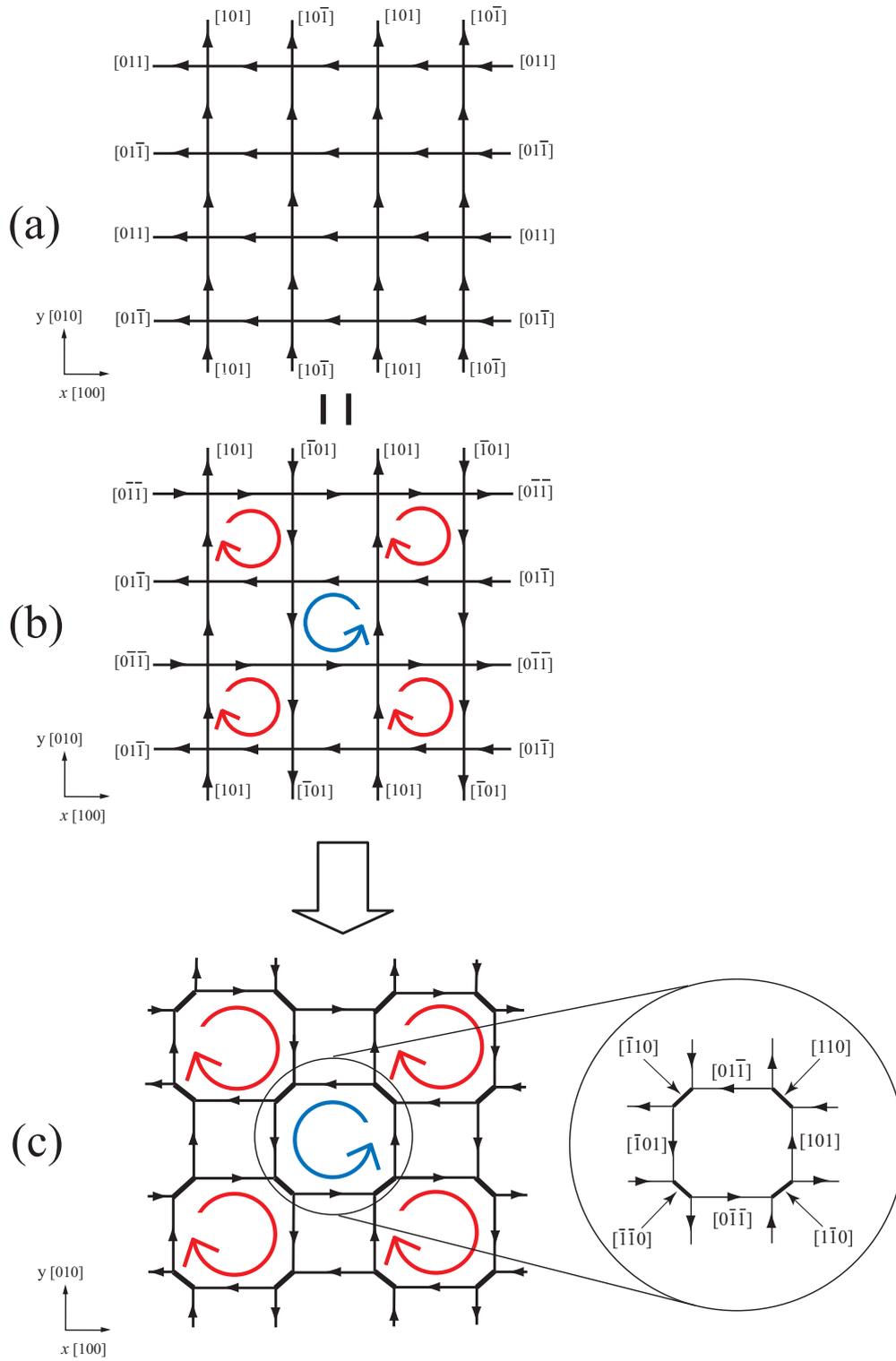


Fig.3.4 Junction nodes and Burgers vector.

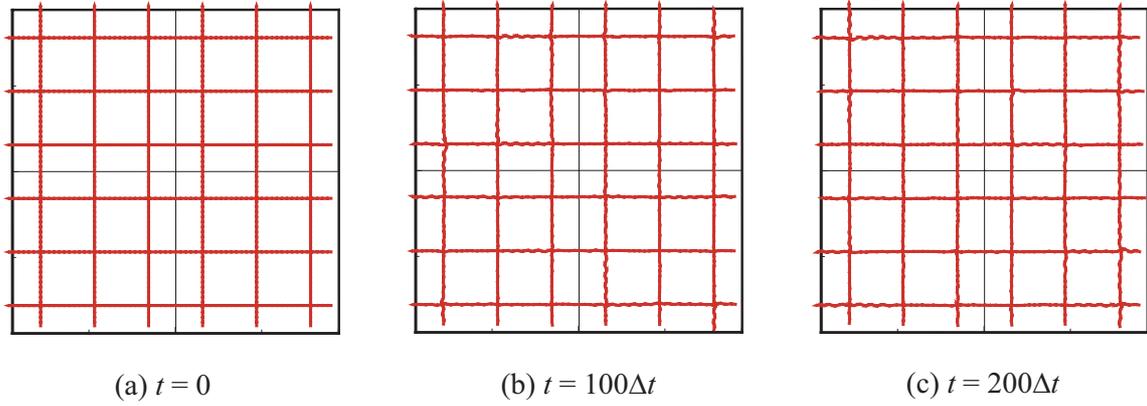


Fig.3.5 Motion of dislocation networks (Network 2, $d=0.063\mu\text{m}$).

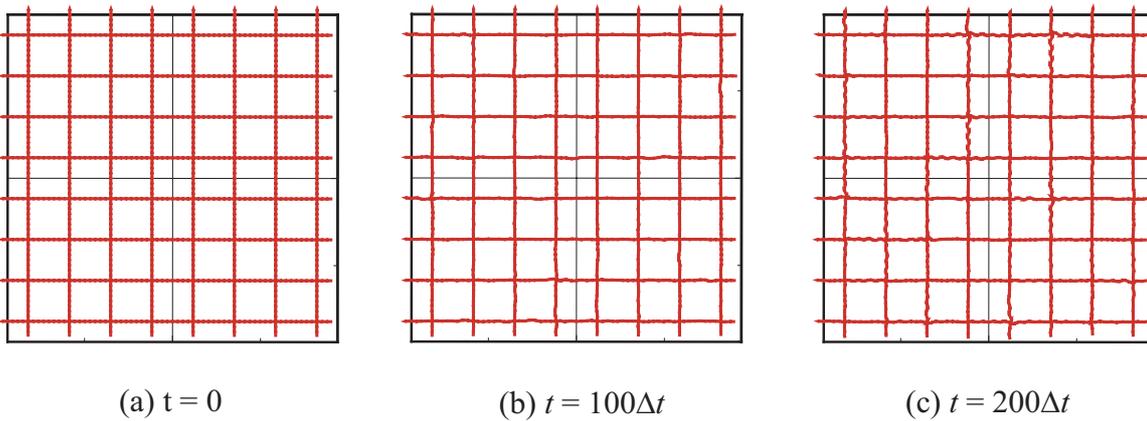


Fig.3.6 Motion of dislocation networks (Network 2, $d=0.046\mu\text{m}$).

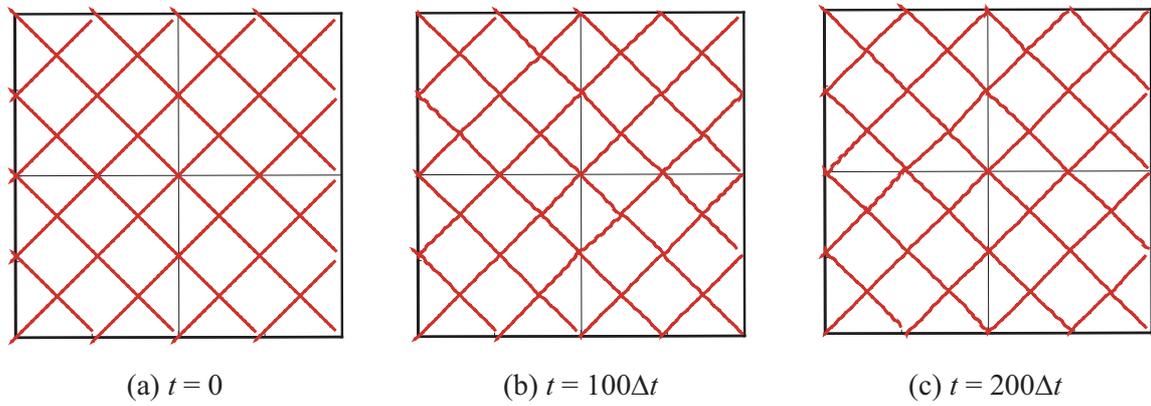


Fig.3.7 Motion of dislocation networks (Network 3, $d=0.066\mu\text{m}$).

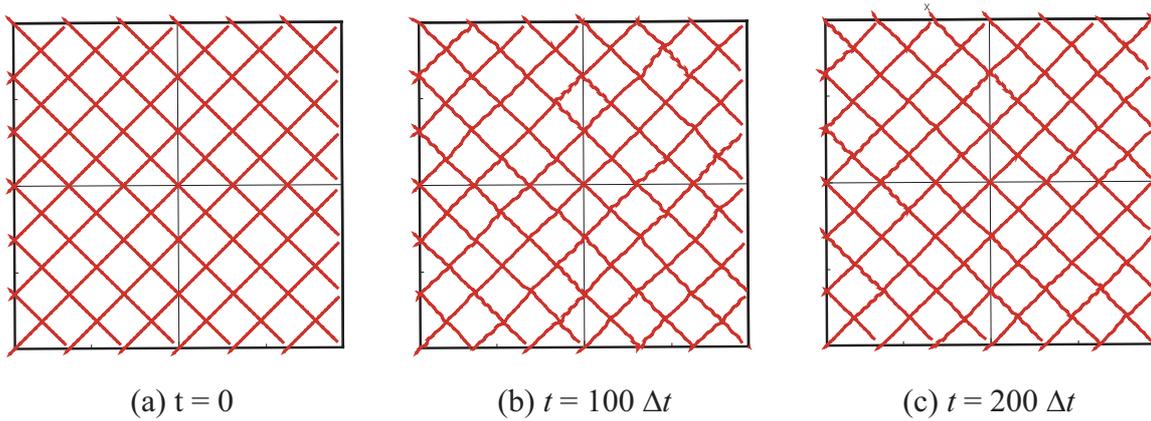


Fig.3.8 Motion of dislocation networks (Network 3, $d=0.044\mu\text{m}$).

3.2 プリズマティック転位との相互作用

3.2.1 シミュレーション条件

プリズマティック転位ループは転位線方向とバーガースベクトルが垂直である純粋な刃状転位のループである。ループを形成する刃状転位のすべり面は同一平面でないために、プリズマティック転位ループはループに垂直な柱状のすべり面に沿って二通りの運動をする(図3.9)。図3.9の(a)は結晶にせん断応力が働いた場合、(b)はすべり面内部を押し込むような力が作用した場合の運動を模式的に表したものである。

以上のような特徴を考慮して、本論文では $[0\bar{1}\bar{1}]$ 方向のバーガースベクトルを持つ4本の刃状転位を図3.10の破線部分のように配置することでプリズマティック転位ループをモデル化した。破線上の矢印は転位線方向を表している。図中の直方体は、トムソンの四面体を有した立方体を二つ連ねたものである。手前側の四面体は紙面に対して凸であり、奥の四面体は原点の方向に凸である。また、2つの四面体はab部で接合されている。図中のループを構成する平行な2本の転位線AとCはすべり面として $(1\bar{1}1)$ 面に平行な別々の面をとっている。同様に、転位線BとDは $(11\bar{1})$ 面に平行な別々の面上にある。この配置により、転位線はfcc結晶のすべり面である $\{111\}$ 面上に存在し、それらのバーガースベクトルは転位線に垂直となり刃状転位ループとなる。

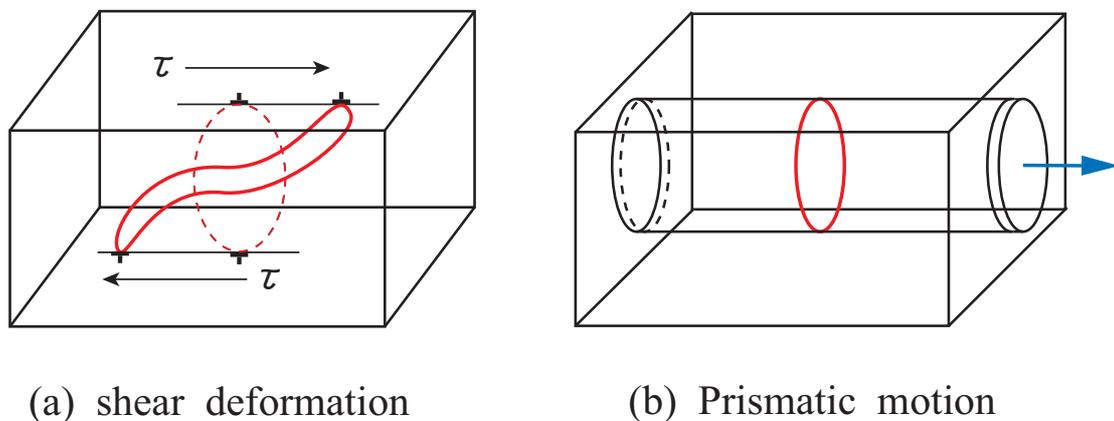


Fig.3.9 Glide motion of prismatic dislocation loop.

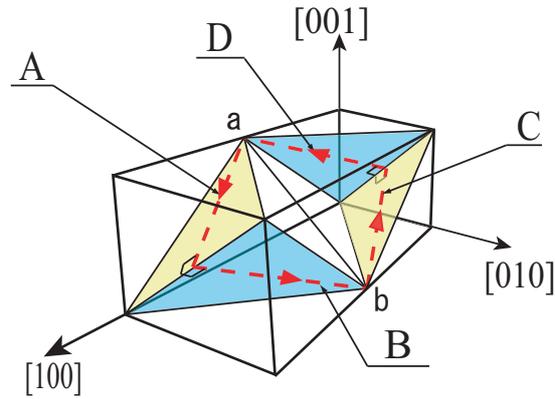


Fig.3.10 Schematic of slip plane and prismatic dislocation loop.

前節において安定であった Network 2 および Network 3 の界面転位網にプリズマティック転位ループを接近させるシミュレーションを行った。図 3.11 および図 3.12 に示すように、転位網間隔 $0.063\mu\text{m}$ の Network 2 (図 3.5)、間隔 $0.066\mu\text{m}$ の Network 3 (図 3.7) の界面近くに一辺 $0.053\mu\text{m}$ のプリズマティック転位ループを導入し、ループ面の法線方向に常に 150MPa の力を与えることで界面転位網に接近させた。両モデルともプリズマティック転位ループは界面転位網の転位線の交点付近に向かって接近するように配置した。

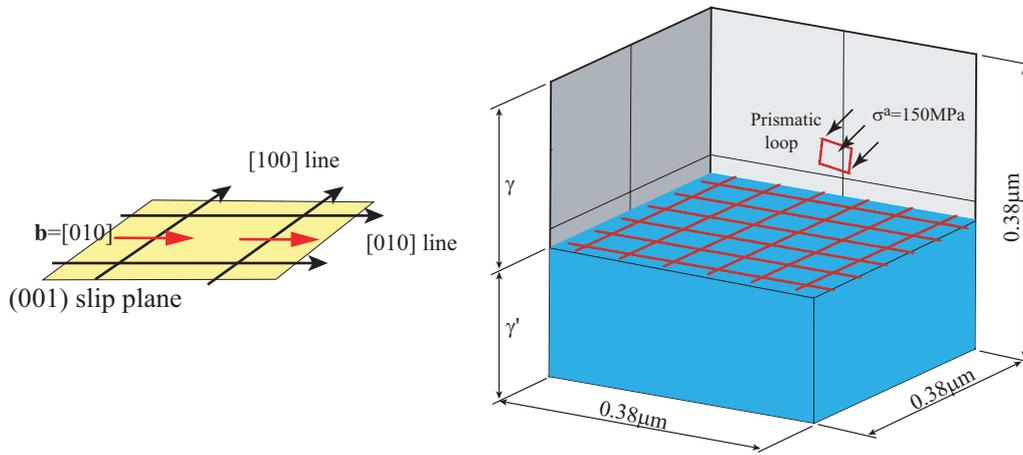


Fig.3.11 Simulation cell with Network 2.

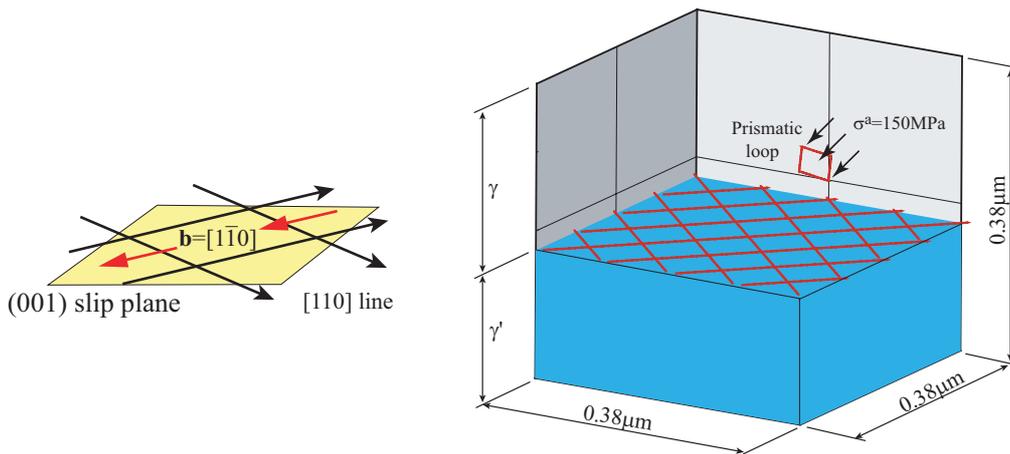


Fig.3.12 Simulation cell with Network 3.

3.2.2 シミュレーション結果および考察

Network 2 にプリズマティック転位ループを接近させたときの転位の挙動を図 3.13 および図 3.14 に示す．図 3.13 は 3 次元的に見たもの，図 3.14 は解析領域を上方から見たものである．なお，両図の (a),(b) には破線矢印でプリズマティック転位ループのすべり面を表している．界面転位網のない状態で行った別のシミュレーションでは，プリズマティック転位ループはループの法線方向に力を与えると初期配置の形状を保持しながらすべり面を運動したが，本シミュレーションでは，計算開始直後から図 (a) に示したループの転位網に近いセグメント B,C が界面に引き寄せられるように変形している (図 (b))． $t=25\Delta t$ で界面に到達し界面に沿うように形状が変化すると，[100] 方向の転位網が引き寄せられジャンクションを形成した (図 (c) ~ (e))．ループのセグメント B,C のバーガスベクトルは $[0\bar{1}\bar{1}]$ であり，引き寄せられた転位網のそれは $[010]$ であるので，ジャンクションのバーガスベクトルは転位線に垂直な $[00\bar{1}]$ である．一方，プリズマティック転位ループの転位網から遠い側のセグメント A,D は，転位線からの反発力を受け，ゆっくりとすべり面上を運動し $t=97\Delta t$ で界面に到達しそのまま堆積した (図 (f))．この後， $t=200\Delta t$ まで計算は続けたが，転位網に大きな変化はなかった．

Network 3 にプリズマティック転位ループを接近させたときの変化を図 3.15 ならびに図 3.16 に示す．Network 2 と同様にプリズマティック転位ループの転位網に近いセグメント B,C が界面に引き寄せられる (図 (b)) が，界面に到達すると転位網の交点部分を引き寄せるとともに，接触した転位同士がジャンクションを形成しはじめた (図 (c) ~ (e))． $t=26 \sim 30\Delta t$ 間のジャンクション形成過程の詳細を図 3.17 ならびに図 3.18 に示す．図中の B, C はプリズマティック転位ループのセグメントを，a はその交点を表している．また，図 3.18 ではプリズマティック転位ループの界面に到達した部分だけを表示している．まず，図 3.17(a), (b) において，転位網を構成する [110] 方向および $[\bar{1}10]$ 方向の転位線がそれぞれプリズマティック転位ループのセグメント B, C と接触し， $[\bar{1}10]+[0\bar{1}\bar{1}]=[\bar{1}0\bar{1}]$ および $[110]+[0\bar{1}\bar{1}]=[10\bar{1}]$ となるバーガスベクトルの合成によってジャンクションを形成する (図 3.18)．図 3.18(a) 矢印で示したように，ジャンクションが a の方向に成長するために転位網の交点が引き寄せられる．交点がジャ

ンクジョン部分に接近すると転位網はそれらとさらに $[\bar{1}0\bar{1}] + [110] = [01\bar{1}]$ または $[10\bar{1}] + [\bar{1}10] = [01\bar{1}]$ となる転位の合成を生じ、3本の転位線によって界面に平行でないバーガースベクトルを持つジャンクジョンを形成した(図3.18(b))。その後、プリズマティック転位ループのA, Dのセグメントが界面に達し、転位網の交点がループに置換されるような形態変化を生じた。置換された部分のバーガースベクトルは初期のプリズマティック転位ループの $[0\bar{1}\bar{1}]$ とジャンクジョン形成による $[01\bar{1}]$ に変化した。

この形態変化はMDシミュレーションで観察された転位網の形態変化^[17]と一致している。この形態変化は、MDシミュレーションでは多数のプリズマティック転位による複雑な現象でありバーガースベクトルの判別は困難であったが、本シミュレーションによって転位論に基づいて説明できる現象であることが示された。

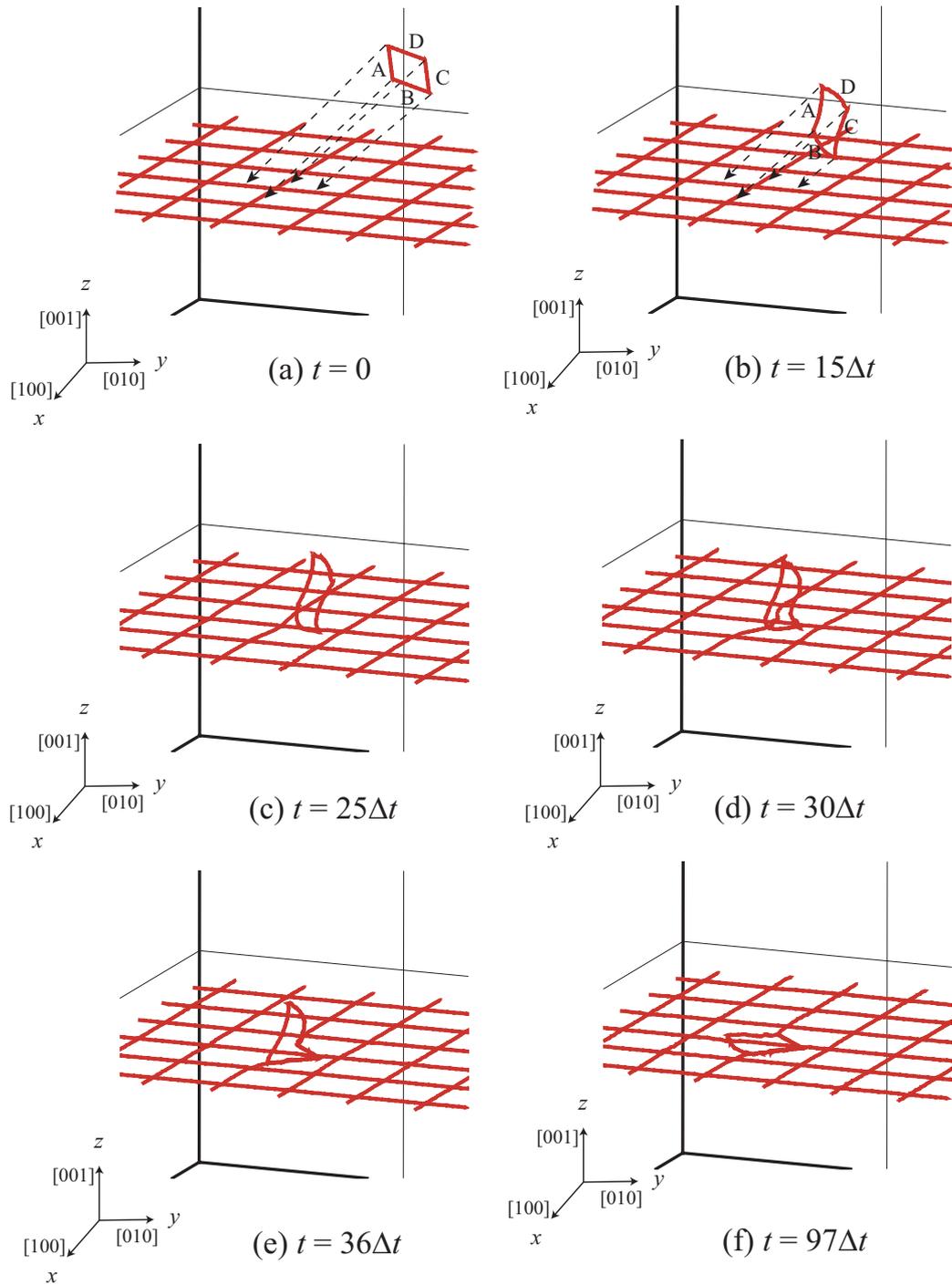


Fig.3.13 Morphology change in dislocations (Network 2, 3D view).

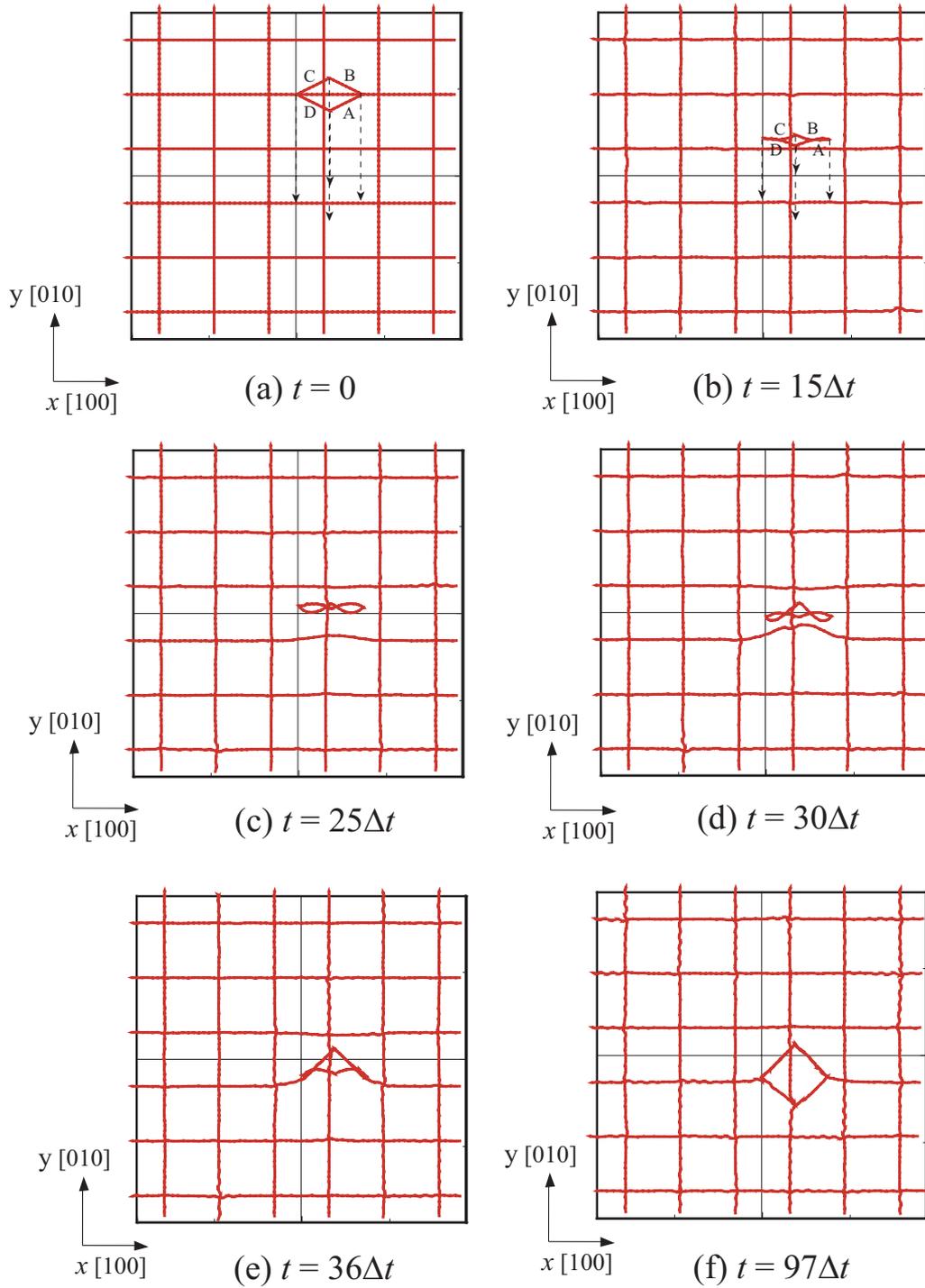


Fig.3.14 Morphology change in dislocations (Network 2, top view).

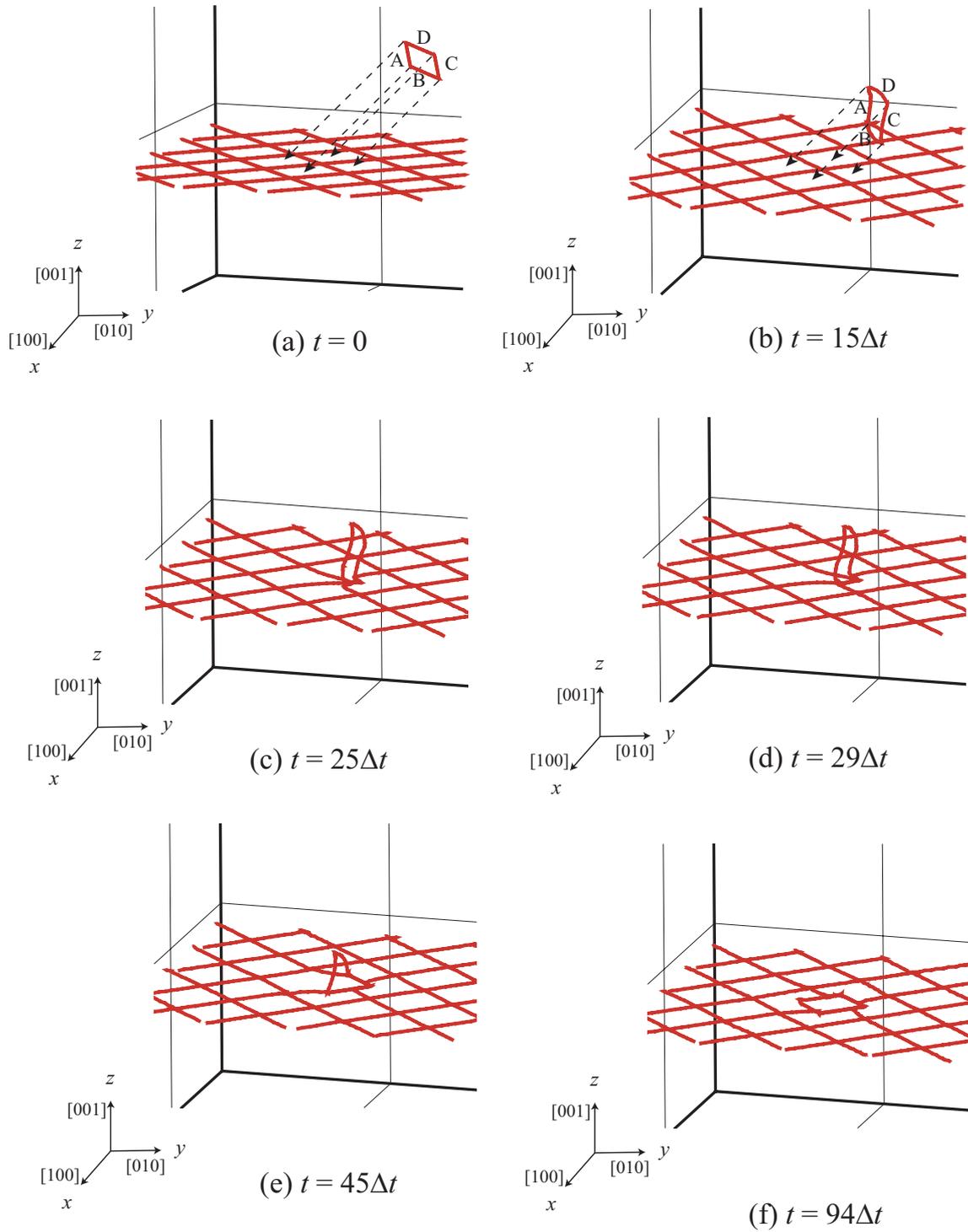


Fig.3.15 Morphology change in dislocations (Network 3, 3D view).

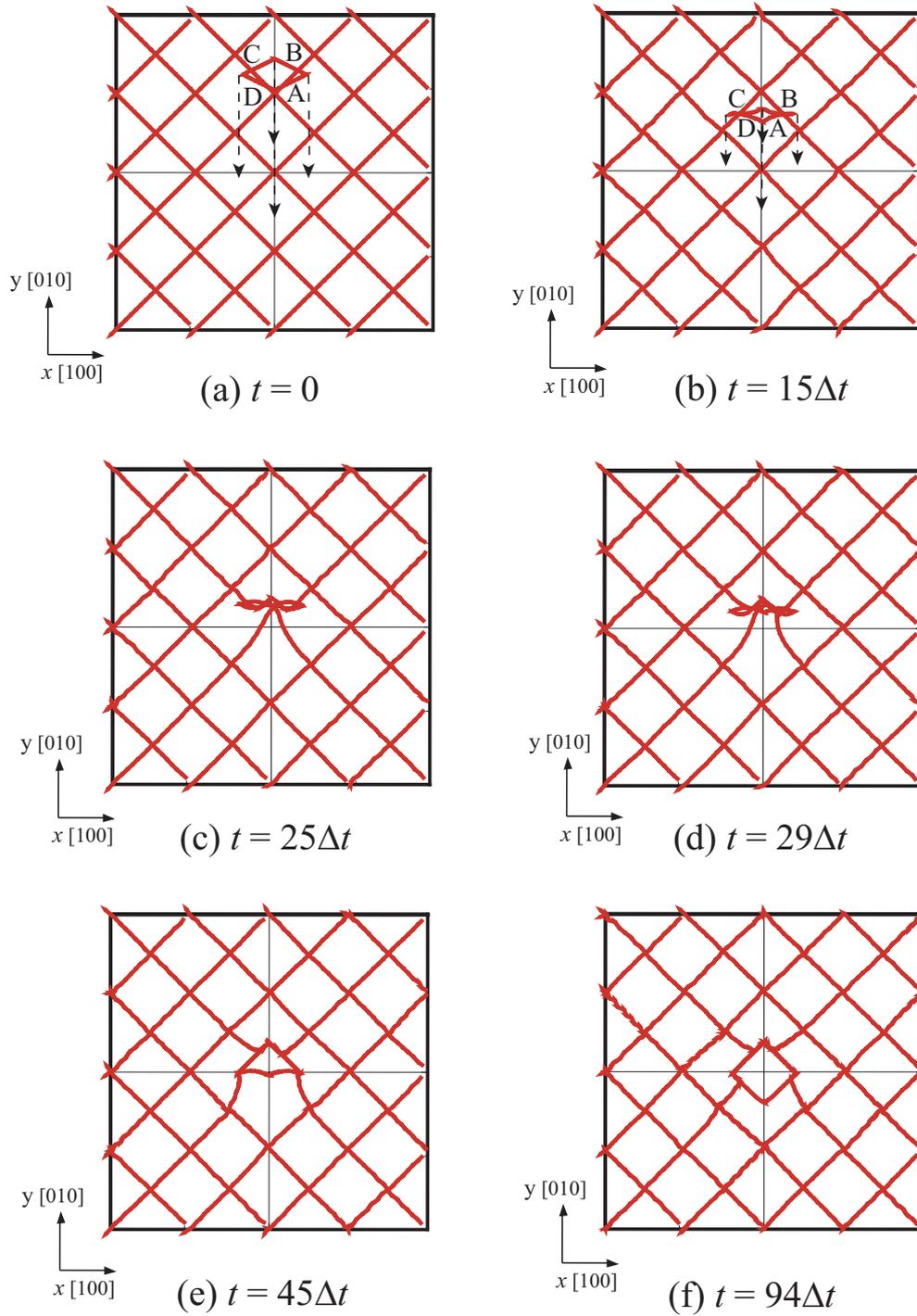


Fig.3.16 Morphology change in dislocations (Network 3, top view).

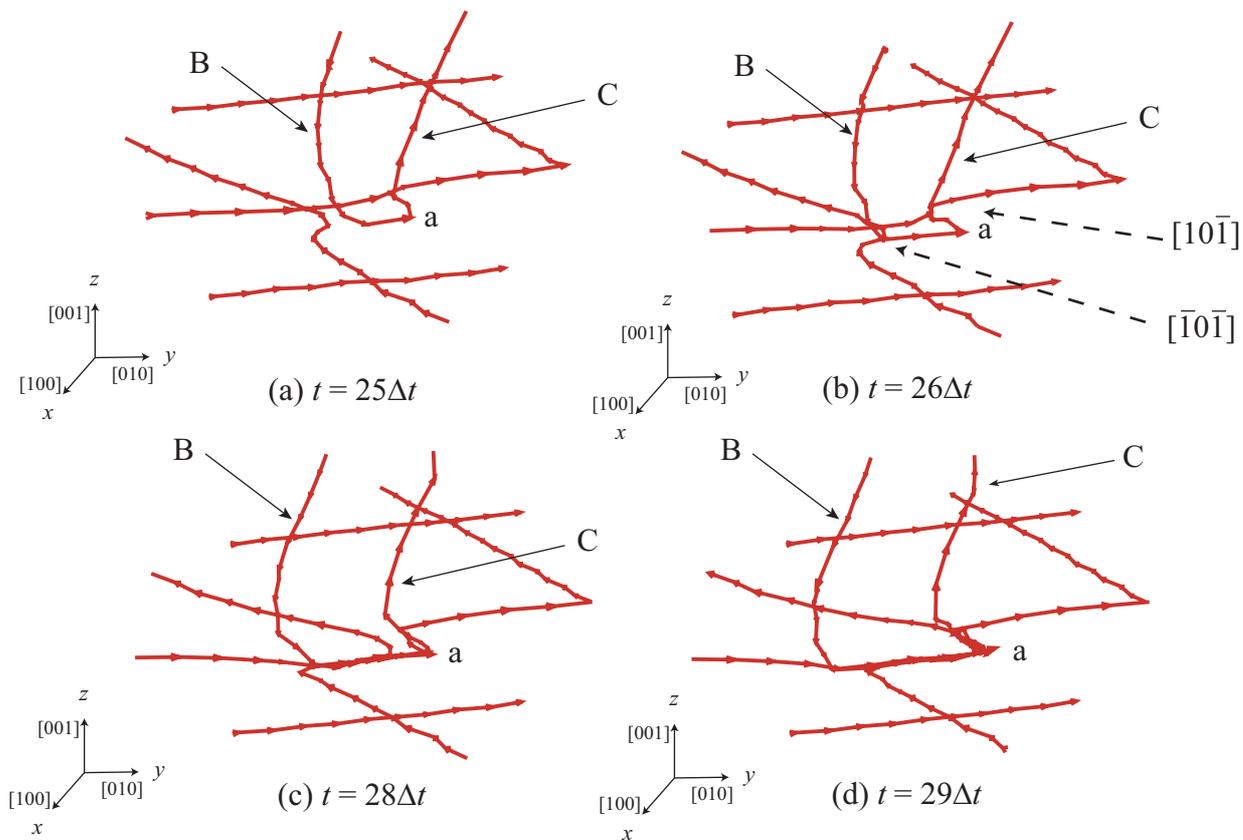


Fig.3.17 Morphology change in dislocations (Network 3, close-up 3D view).

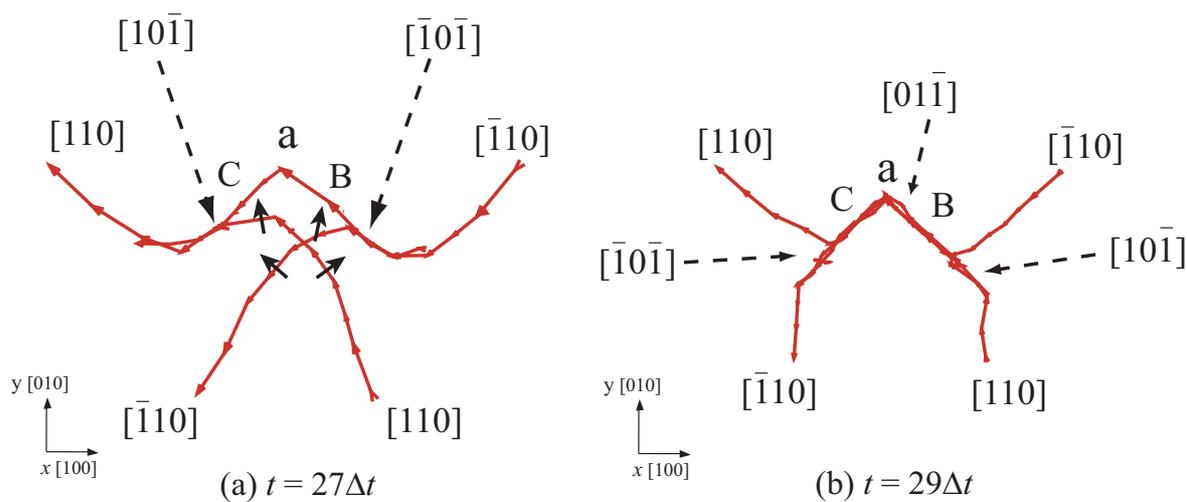


Fig.3.18 Morphology change in dislocations (Network 3, close-up top view).

3.3 結言

本章では, Ni 単結晶超合金の界面転位網の形態変化を離散転位動力学 (DDD) シミュレーションにより検討することを目的として, 界面転位網およびプリズマティック転位ループのモデル化を行った.

まず, 種々の転位線とバーガスベクトルの組み合わせ, ならびに間隔を変えた転位網を γ/γ' 界面に配置し, APB によるバックフォースを考慮した離散転位動力学シミュレーションを行って無負荷平衡状態での安定性を調べた. その結果を以下に示す.

- (1) TEM により観察されている, 転位線が $\langle 100 \rangle$ で, バーガスベクトルが $\langle 011 \rangle$ の組み合わせで, かつ (111) 面をすべり面とした場合, 転位が界面から離れて, 初期の網目構造を保てなかった.
- (2) (1) と同じ転位網について, 界面をすべり面とした場合, 転位線の交点部分がジャンクションとなり, それが拡大して $\langle 110 \rangle$ 方向に転位線が配向し, バーガスベクトルが界面に平行な $\langle 110 \rangle$ となった.
- (3) 転位線が $\langle 100 \rangle$ でバーガスベクトルが $\langle 010 \rangle$, ならびに MD で観察されている転位線が $\langle 110 \rangle$ でバーガスベクトルが $\langle 110 \rangle$ の界面転位網では, 界面をすべり面とした場合, 転位間隔を変えても初期構造を保ったままであった.

次に, プリズマティック転位ループのモデル化を行い, 安定に存在していた上記 (3) の転位網に接近させるシミュレーションを行った. その結果を以下に示す.

- (4) 転位線が $\langle 100 \rangle$ でバーガスベクトル $\langle 010 \rangle$ の転位網では, プリズマティック転位ループの下部の 2 辺が界面に到達すると, 転位線の横系に相当する $[100]$ 方向の転位線を引き寄せ, $[00\bar{1}]$ のバーガスベクトルを持つジャンクションを形成した. その後, ループの上部 2 辺も界面に到達するが, 転位網の縦系は残り, 交点部の横系が菱形で置換されたような形状となった.
- (5) 転位線が $\langle 110 \rangle$ でバーガスベクトルが $\langle 110 \rangle$ の転位網では, プリズマティック転位ループの下部 2 辺が界面に到達すると, 転位網の横系, 縦系部分それぞれと

ジャンクションを形成した。さらに，ジャンクション部分の成長にともない交点がひきよせられると，転位網の他の部分がジャンクションと合体し，3本の転位からなるバーガースベクトルが $[01\bar{1}]$ のジャンクションとなった。その後，ループの上部2辺が界面に到達し，最終的に転位網の交点がプリズマティック転位ループで置換されたような形状となった。

第4章

界面転位網の形成過程 シミュレーション

前章では，界面転位網の安定性およびプリズマティック転位ループとの相互作用について検討した．一方，界面転位網の形成については，クリープ試験後の TEM 観察から， γ' 析出相の縁まで移動したミスフィット転位による形成過程^[10] や γ/γ' 界面でのジャンクションの形成による形成過程^[11] などが提案されている．しかしながら，離散転位動力学法では転位はあらかじめ規定したすべり面を運動するため， γ 相 ($\{111\}$ 面) を進行してきた転位の γ/γ' 界面 ($\{001\}$ 面) での運動を考慮することはできない．本章では，界面転位網の形成過程について検討するために， γ/γ' 界面もすべり面とする離散転位動力学シミュレーションを行い，複雑な γ/γ' 構造中における多数の転位のふるまいについて検討する．

4.1 γ/γ' 界面上でのすべり運動のモデル化 1

fcc 結晶のすべり面は $\{111\}$ 面であるが，分子動力学シミュレーションでは， γ/γ' 析出構造での特徴的な現象として，刃状転位が γ/γ' 界面上に端点をもち，運動することが観察されている^[15]．それを踏まえ，以下のローカルルールを設定した．

- (1) γ 相を進行する転位の前方 $5b$ 以内に γ' 相が存在し，かつ界面に沿う方向のバーガスベクトルを有する刃状転位である場合，その γ' 相の表面をすべり面とする．

- (2) γ/γ' 界面をすべり運動した転位が界面の縁まで到達した場合， $\{111\}$ 面をすべり面として再度 γ 相を運動する．

4.1.1 シミュレーション条件

図 4.1 に示すように，1 辺 $1.66\mu\text{m}$ の立方体領域を解析対象とする．model1 は第四世代超合金の処女材における立方体析出構造を想定し， γ' 相の大きさを $0.50\mu\text{m} \times 0.50\mu\text{m} \times 0.50\mu\text{m}$ ， γ チャンネルの幅を $0.05\mu\text{m}$ とした．model2 はクリープ変形下においてラフト化が進行した γ' 相を想定し， $0.79\mu\text{m} \times 0.79\mu\text{m} \times 0.45\mu\text{m}$ とした．両モデルの γ' 相の体積分率はほぼ同じで約 74% である．これらの解析領域に $[001]$ 方向の均一引張応力 200MPa を与え，転位を成長させるシミュレーションを行った．ここで，転位発生源として特定の Frank-Read 源を用いた場合，転位が障害によって阻止されるとそれ以上の転位の発展は望めなくなる．本解析では，有限セル内の限られた転位源からの増殖ではなく，バルク材の中の解析領域に転位が流入してくる挙動を模擬するものとして，周期境界条件を満足する転位線を γ 相中に時間経過に応じてランダムに導入した． γ 相と γ' 相のせん断弾性係数はそれぞれ 80GPa と 85GPa とし，ポアソン比はいずれも 0.3 とした． γ' 相へのカッティング抵抗である APB エネルギーは前章と同じく第一原理解析による値 $126\text{mJ}/\text{m}^2$ を用いた^[25]．

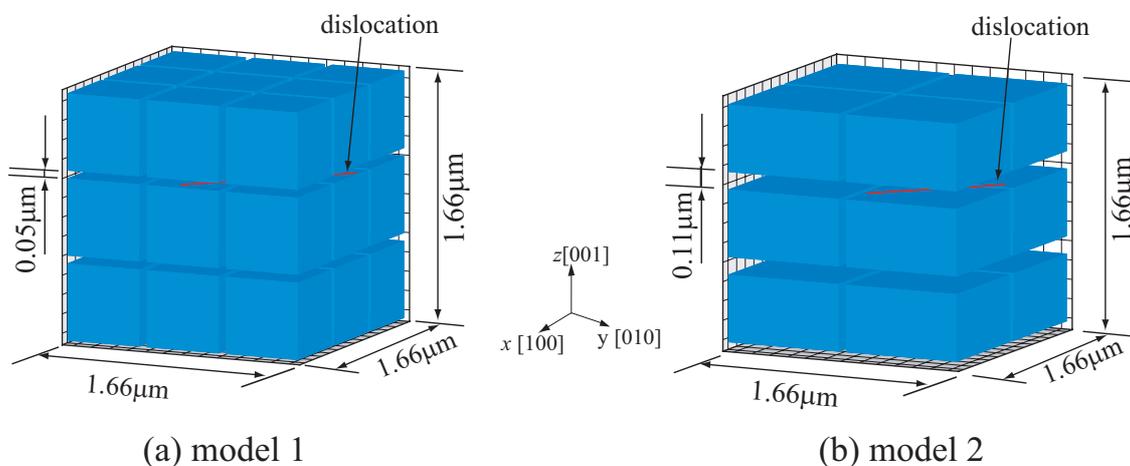


Fig.4.1 Simulation models.

4.1.2 シミュレーション結果および考察

model1 における転位の時間発展の様子を図 4.2 に示す．図中に転位線と γ' 相を同時に表示すると見づらくなるため γ' 相は省略し転位線のみを表示している．ランダムに γ チャンネルに導入された転位は引張応力を受けて γ 相中を運動するが，すぐに γ 相によって阻止される．進行方向に γ' 相のない γ チャンネルでは転位は湾曲し張り出している (図 4.2(a), 矢印) が，200MPa の一定応力下では γ' 相に侵入することはない．時間経過とともに転位が多数 γ チャンネル内に堆積すると，図 4.3 で示したように， γ チャンネル内での転位の切り合いによる転位線の変化が観察された．しかしながら，設定したローカルルールでは γ' 相表面上でのすべり運動が生じず，ランダムに導入された転位線から大きく構造が変わることはなかった (図 4.2(i))．これは， γ 相内で $\{111\}$ すべり面上を進行する転位のバーガスベクトルが $\langle 101 \rangle$ であるため，界面に堆積した転位のバーガスベクトルが界面と平行になる確率が低いためと考えられる．また，解析領域内にランダムに転位を導入しても， γ 相に堆積している転位と同一のすべり面となる確率が低く， γ' 相へのカッティングを生じない．

model2 における転位の時間発展の様子を図 4.4 に示す．model1 に比べて積層方向の γ チャンネルの幅が広いので，乱数で側面の γ チャンネルに導入された転位の張り出しが大きくなっている (図 4.4(e) 矢印の例など) 以外は，model1 と顕著な違いは認められない．

各モデルにおける塑性ひずみの時間変化を図 4.5，4.6 に示す．横軸は時間ステップ，縦軸は塑性ひずみである．前述の通り，転位が γ' 相に堆積すると以降成長しなくなり，塑性ひずみは増加しない．にもかかわらず塑性ひずみ-時間曲線が階段状に増加しているのは γ チャンネル内に乱数で導入した転位による増加である．model1 よりも model2 の方が γ チャンネルが大きいので，転位の移動距離が長くなり，ラフト構造を想定した model2 の方が塑性変形抵抗が小さくなるという矛盾した結果となった．

設定したローカルルールでは，バーガスベクトルが界面に平行でないため， γ/γ' 界面上での転位の形態変化を模擬はできなかった．一方，前章の界面転位網の安定性の検討では，安定に存在するためには γ/γ' 界面上の転位はバーガスベクトルが界面

に平行な刃状転位となる」ことを示している．次節では，界面に到達した転位に対し，界面に平行なバーガスベクトルを持たせる条件を導入した解析を行う．

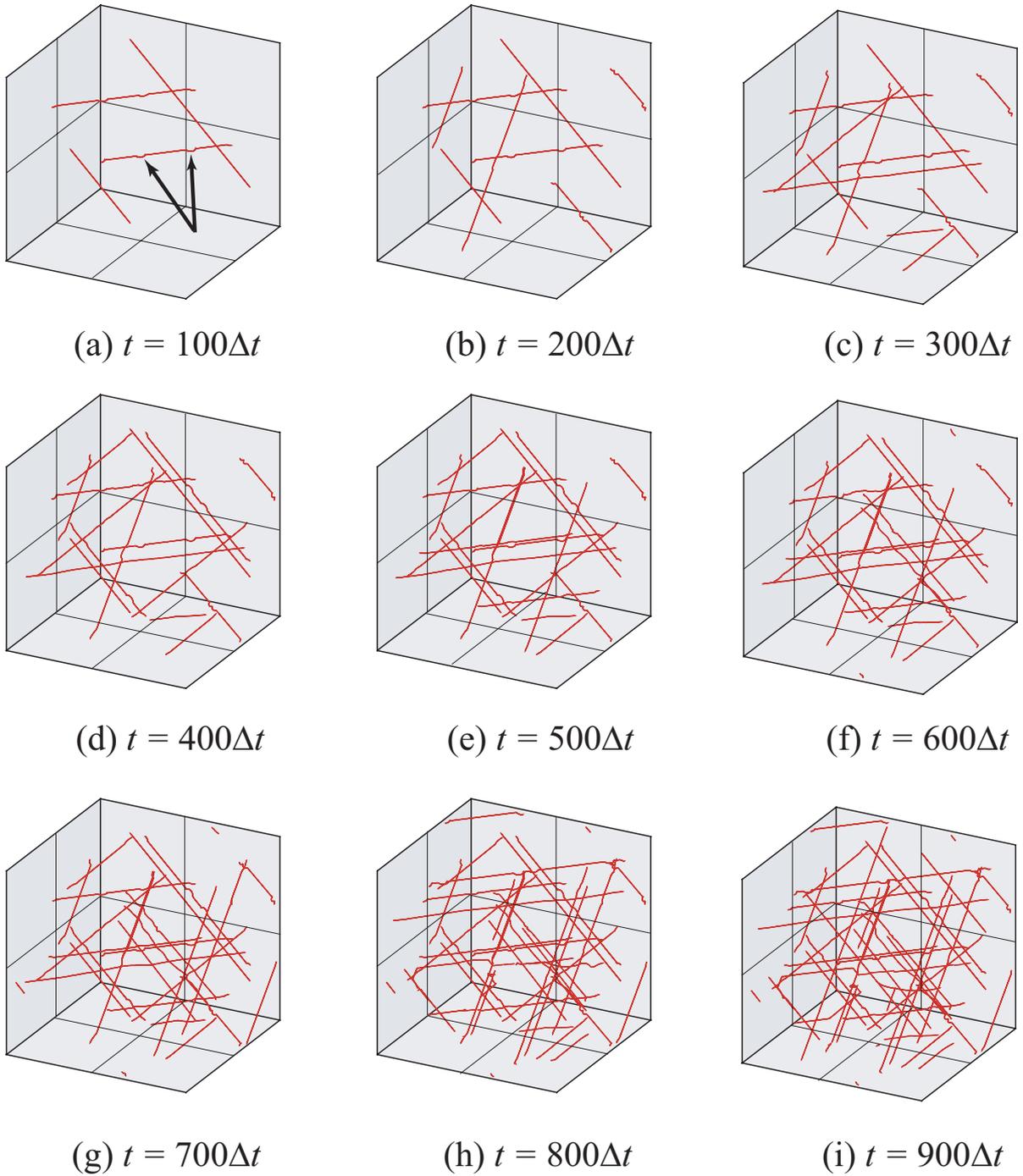


Fig.4.2 Motion of dislocations in Model 1.

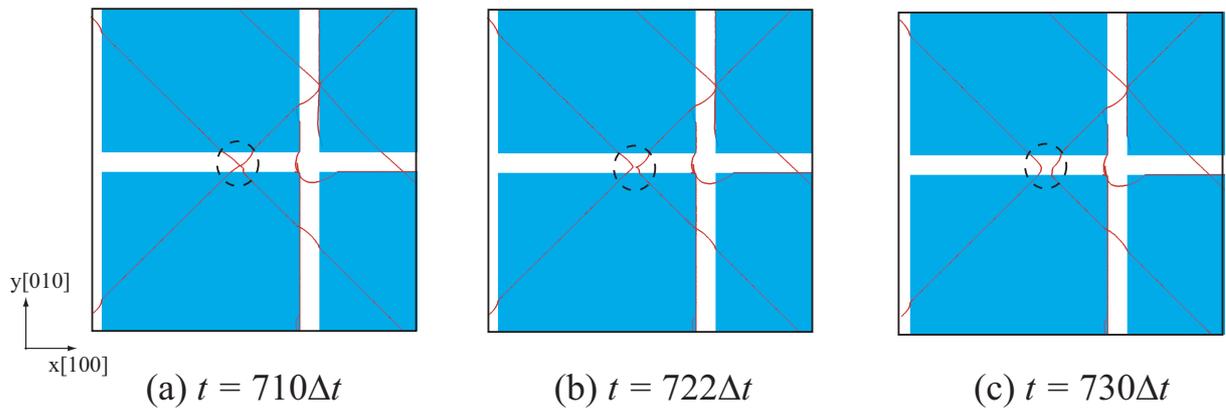


Fig.4.3 Change of dislocation line.

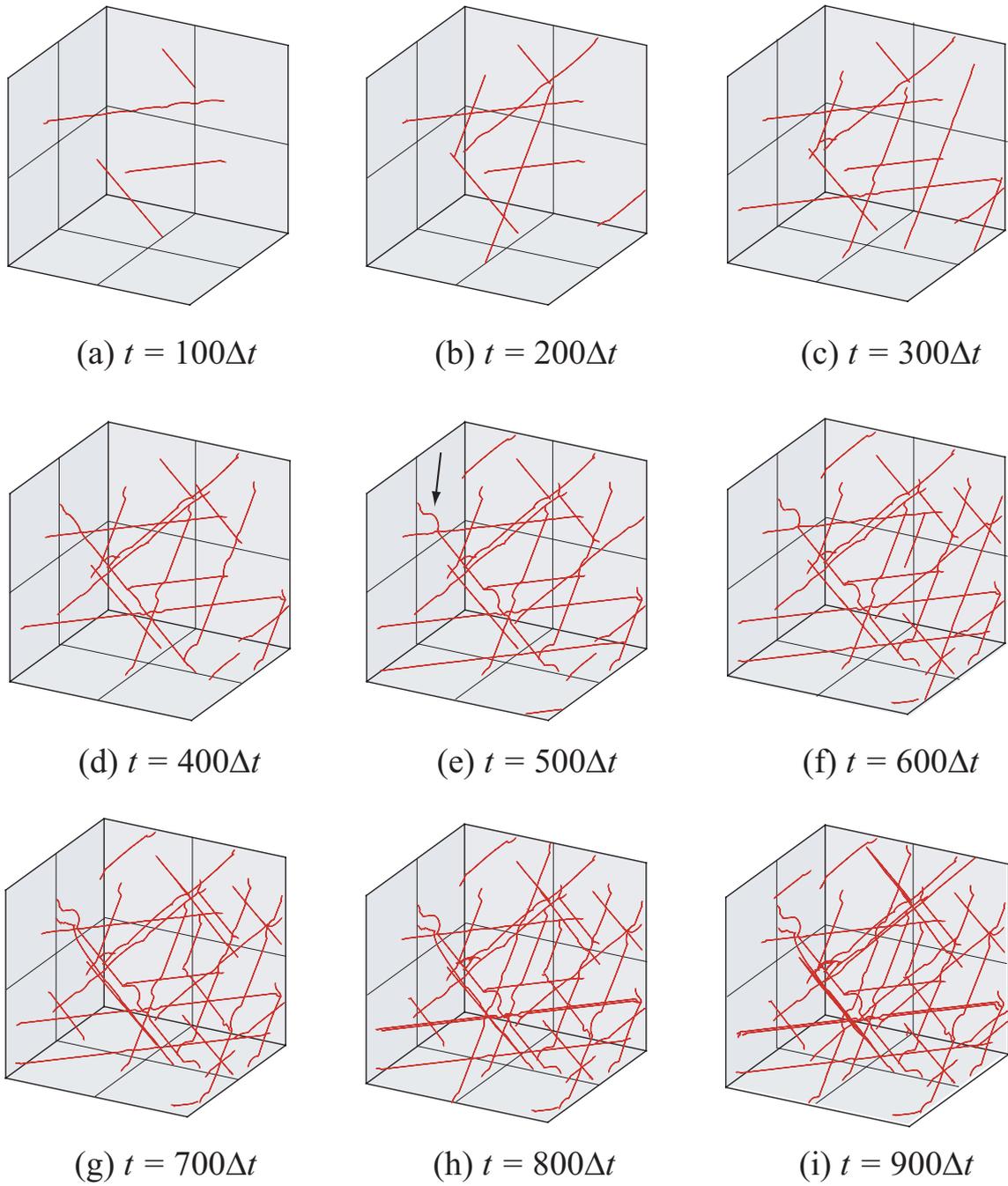


Fig.4.4 Motion of dislocations in model2.

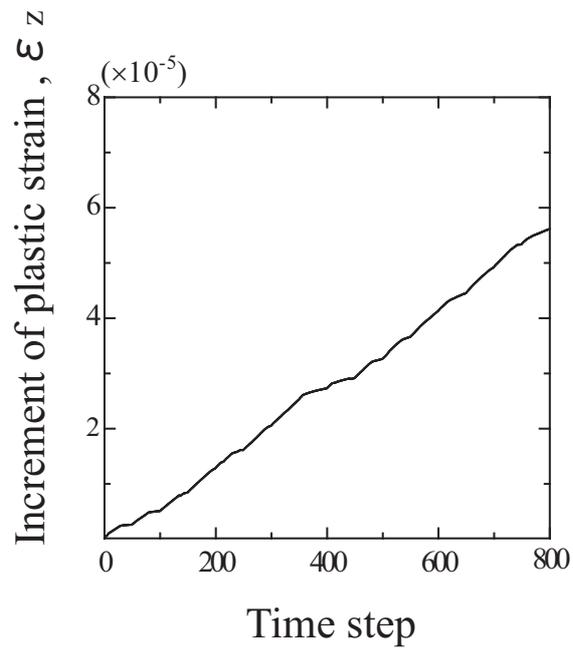


Fig.4.5 Change in plastic strain in model 1.

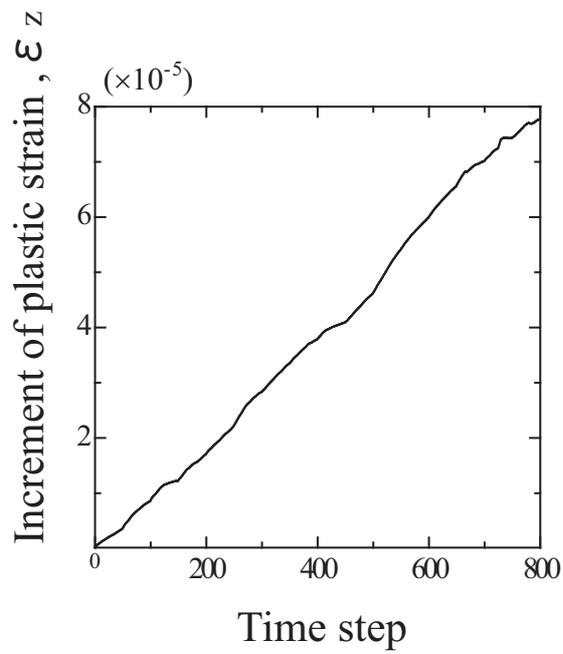


Fig.4.6 Change in plastic strain in model 2.

4.2 γ/γ' 界面でのすべり運動のモデル化 2

4.2.1 シミュレーション条件

前節で設定したローカルルールでは、 γ/γ' 界面上での転位のすべり運動は生じなかった。そこで、 γ/γ' 界面に到達した転位に対して、

- (1) γ 相を進行する転位の前方 $5b$ 以内に γ' 相が存在する場合、バーガスベクトルをその界面に平行なものとし、 γ' 相の表面をすべり面とする。
- (2) γ/γ' 界面をすべり運動した転位が界面の縁まで到達した場合、そのバーガスベクトルをもとに戻し $\{111\}$ 面をすべり面として再度 γ 相を運動する。

とするローカルルールを導入し、前節の model1(立方体析出構造)と同様のシミュレーション条件のもとで解析を行った。

4.2.2 シミュレーション結果および考察

転位の時間発展の様子を図 4.7 に示す。前節と異なり、転位が界面に到達すると、界面上ですべり運動をしている。図中の矢印 (1) で指した転位について、その変化を図 4.8 に拡大して示した。図は転位 (1) を含む横方向の γ チャンネル内を解析領域の真上から見たもので、その γ チャンネル内に含まれる転位のみを表示している。 γ チャンネル内の $(11\bar{1})$ 面上を運動してきた転位は、 $t=35\Delta t$ で (001) 界面の位置に到達する (図 4.8(a))。界面に到達した転位は界面に平行なバーガスベクトルを持ち、すべり面を界面に変えすべり運動し始める (図 4.8(a),(b))。一方、 γ チャンネル内 (図の白い部分) にあり、進行方向に界面がない転位のすべり面は $(11\bar{1})$ であるため、すべり面の違いから、図 4.8(b) 中に矢印で示すように、転位は界面の縁でピンニングされる。界面上を運動する転位はその両端がピンニングされることにより湾曲する (図 4.8(c))。図 4.8(c) の矢印で示す部分ではピンニングから近く、界面上を運動する転位はすぐに γ' 相の縁に達するため、転位は γ' 相の縁に沿った形態をとる。この γ' 相の縁まで到達した転位はバーガスベクトルをもとの $[\bar{1}0\bar{1}]$ とし、 γ チャンネル内へ進行するがすぐに停滞す

る．これは，転位線が同一の $\{111\}$ 面上ではなく複数の面を貫く方向となるためと考えられる．時間経過とともに同じ γ チャンネル内に導入された転位 (2) が同じ γ' 相表面に到達すると，その反力により転位 (1) の張り出しが抑えられ直線状に戻っている (図 4.8(d)) ．

実験では， γ' 相の縁から剥がれた転位が界面に張りつき転位網が形成されるという提案がなされている^[10]．本解析で γ' 相の端に見られた転位の転位線方向，バーガースベクトルは実験で提案されるものと同様であり，界面上での運動によって形成されることが確認された．一方，図 4.7(e) の矢印 (3) が指す領域では，界面上で $[\bar{1}10]$ と $[110]$ のバーガースベクトルの $[110]$ 方向と $[\bar{1}10]$ 方向の転位線が接触しているが，時間が経過してもこの交点部分において転位反応は生じなかった．

本節では， γ/γ' 界面上のすべり運動は観察されたが，ジャンクション形成は見られなかった．次節では，ジャンクション形成を想定して γ 相中でのバーガースベクトルを持つ転位の γ/γ' 界面上での運動も許可するローカルルールを設定した解析を行う．

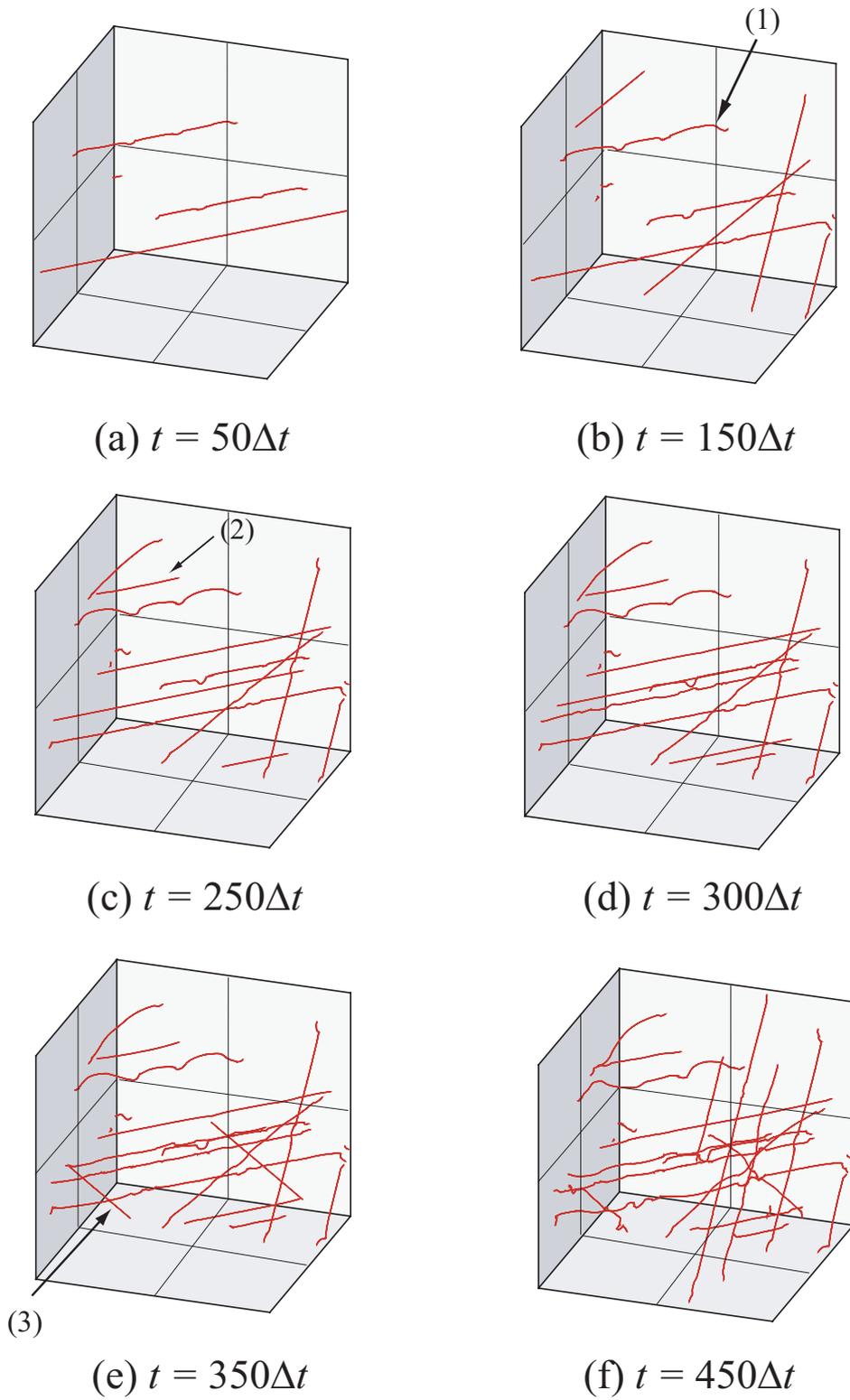


Fig.4.7 Motion of dislocations.

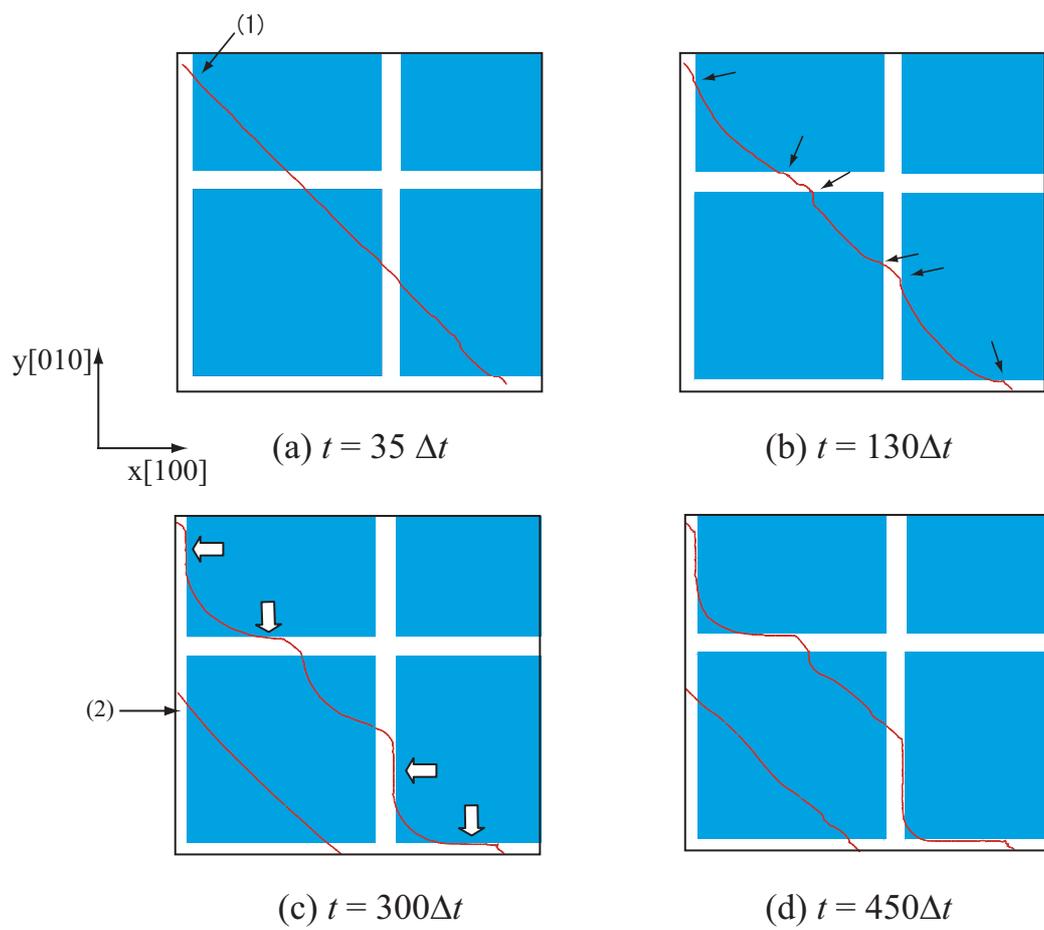


Fig.4.8 Motion of dislocations on (001)interface.

4.3 γ/γ' 界面でのすべり運動のモデル化 3

界面転位網の形成および組織の最適化には、 γ/γ' 界面上において転位の運動によるジャンクション形成が重要となる^[11]。本節では、 γ/γ' 界面上におけるジャンクション形成を検討するために以下のようなローカルルールを設定した。

- (1) γ 相を進行する転位の前方 $5b$ 以内に γ' 相が存在する場合、その γ' 相の表面をすべり面として運動できるものとする。
- (2) γ/γ' 界面を運動した転位が界面の縁まで到達した場合、 $\{111\}$ 面をすべり面として再度 γ 相を運動する。

4.3.1 シミュレーション条件

図 4.9 に示すように、一辺 $1.66\mu\text{m}$ の立方体解析領域内に、一辺 $0.5\mu\text{m}$ の立方体 γ' 相を $0.05\mu\text{m}$ 間隔で配置した。本解析では、界面上でのジャンクション形成を効率的に検討するため、乱数による転位導入ではなく、 γ' 相のすぐ上に互いに交差する Frank-Read 源を複数配置した。Frank-Read 源のバーガスベクトルは界面に近い側を $[\bar{1}0\bar{1}]$ 、遠い側を $[0\bar{1}\bar{1}]$ としている。解析領域の周囲は全方向自由境界条件とし、その他の解析条件は前節と同様にした。

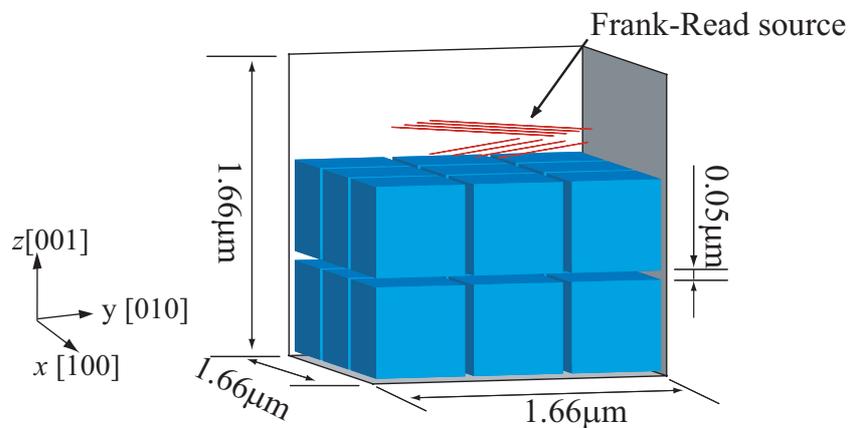


Fig.4.9 Simulation model.

4.3.2 シミュレーション結果および考察

転位の時間発展の様子を図4.10, 4.11に示す。図4.10は3次元的に見たものであり、図4.11は解析領域を真上から見たものである。界面に近い側に設置したFrank-Read源から成長した転位は $t=95\Delta t$ で界面に到達すると(図4.10(a))、すべり面を $(11\bar{1})$ 面から (001) 界面に変え運動する。また、 γ チャンネルに達した転位は張り出すが、時間が経過しても張り出しが大きくなることはなかった。 $t=125\Delta t$ でバーガスベクトルの異なる後続の転位が界面に到達すると、それぞれの転位の接触した部分(図4.11(b)丸印部)がジャンクションとなり六角形状の転位網組織が形成された。その後は、ジャンクションが形成されたことにより界面上での転位の運動は遅くなるが、時間経過とともに γ' 相のエッジ部に到達する。前節と同様に γ' 相の辺に平行となった転位が γ チャンネルに進入する際は、転位線が $\{111\}$ すべり面上にないので、複数の $\{111\}$ 面上でのすべりにより転位線が乱れる。

ここで形成されたジャンクションとバーガスベクトルの関係を図4.12に模式的に示す。転位線の交点部分において $[0\bar{1}\bar{1}] + [101] = [1\bar{1}0]$ となるバーガスベクトルの合成が生じる。この転位は界面に平行なバーガスベクトルを持つが、転位線方向は $[010]$ (γ' 相の辺に平行)であり、互いに直交していない。転位線の交点部分において、このジャンクションが形成されたために六角形状の転位網組織が観察された。実験観察においても、転位網の形成の初期段階において同様のバーガスベクトルを有するジャンクションの形成により六角形状の転位網組織が観察されている。しかしながら、そのジャンクションの転位線方向は $[110]$ で純粋な刃状転位として形成され、本解析で見られたものとは転位網組織とは異なっている。この相違は、本解析では格子ミスフィットによるひずみ場が転位に与える影響を考慮できないことによるものであると考えられ、今後、今回の γ/γ' 界面での運動のローカルルールに加えて、その影響を取り入れたモデル化が必要である。

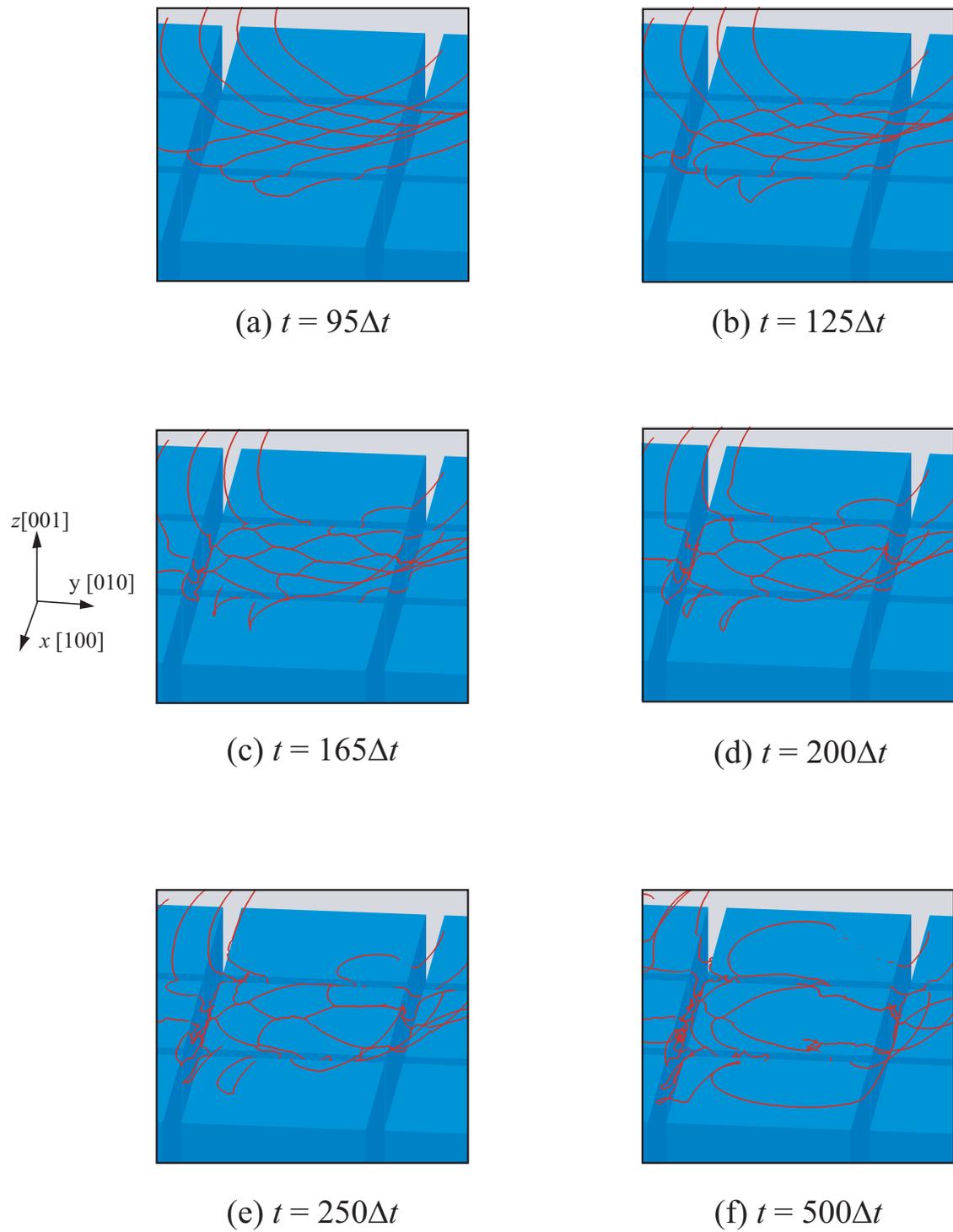


Fig.4.10 Motion of dislocations(3D view).

4.4 結言

界面転位網の形成過程について検討するために、 γ/γ' 界面に到達した転位に関して様々なローカルルールを設定したシミュレーションを行った。得られた結果を要約して以下に示す。

- (1) γ/γ' 界面に平行なバーガスベクトルを持つ刃状転位が γ' 相の表面に到達した場合、その界面をすべり面とするローカルルールを導入し、立方体析出構造およびラフト化した構造の γ チャンネル内に次々に転位を導入するシミュレーションを行った。しかしながら、200MPa の一定応力下では γ' 相表面上で転位が活発にすべることではなく、顕著な転位構造変化は観察されなかった。
- (2) 次に、界面での転位芯レベルの変化として、界面に到達した転位のバーガスベクトルが界面に平行なものになり、 γ' 相表面をすべるローカルルールを導入した。界面に到達した部分と γ チャンネル内に残った部分のすべり面の違いから、 γ' 相表面を運動する転位は γ' 相のエッジ部でピンニングされ湾曲すること、その後、 γ' 相の端まで到達すると γ' 相に沿った形態となること、などが観察された。一方、 γ/γ' 界面での転位同士によるジャンクション形成は、 γ チャンネル内にランダムに転位を導入する条件では生じなかった。
- (3) ジャンクション形成を生じやすい条件として、 γ' 相のすぐ上に互いに交差する複数の Frank-Read 源を配置し、そこから転位を発展させるシミュレーションを行った。 γ/γ' 界面上でバーガスベクトルが $[0\bar{1}\bar{1}]$ と $[101]$ の転位の合成により、バーガスベクトルが $[1\bar{1}0]$ で転位線方向が $[010]$ のジャンクションが γ/γ' 界面に形成され、六角形状の転位網組織が見られた。

第5章

結 論

本研究では，界面転位網の形態変化および形成過程を検討することを目的として，種々の離散転位動力学 (DDD) シミュレーションを行った．以下に，得られた結果を総括する．

第2章では，本研究で用いた解析手法の基礎について概説した．離散転位動力学シミュレーションで必要となる離散化した転位が形成する応力場，転位セグメントに働く力，転位の運動方程式，交差すべり，短距離相互作用について説明し，本シミュレーションに用いている APB を考慮したバックフォースモデルについて述べた．

第3章では，界面転位網の安定性およびプリズマティック転位ループによる形態変化について転位論の立場から検討するため，まず，種々の転位線とバーガスベクトルの組み合わせ，ならびに間隔を変えた転位網を γ/γ' 界面に配置し，無負荷でのシミュレーションを行った．TEM により観察されている転位線が $\langle 100 \rangle$ でバーガスベクトルが $\langle 011 \rangle$ の組み合わせで，かつ (111) 面をすべり面とした場合，転位が界面から離れて，初期の網目構造を保てなかった．界面をすべり面とした場合，転位線の交点部分でジャンクションが形成されることで，界面に平行な $\langle 110 \rangle$ のバーガスベクトルを持った転位となり，分子動力学シミュレーションで観察されているように $\langle 110 \rangle$ 方向に転位線が配向することを示した．転位線が $\langle 100 \rangle$ でバーガスベクトルが $\langle 010 \rangle$ ，ならびに分子動力学シミュレーションで観察されている転位線が $\langle 110 \rangle$ でバーガスベクトルが $\langle 110 \rangle$ の界面転位網で界面をすべり面とした場合，転位間隔を変えても初期構造を保ったままであった．これらの結果から，転位網が界面上で安定に存在するため

には界面に平行なバーガスベクトルを持つことが示唆された。次に、安定であった転位線が $\langle 110 \rangle$ でバーガスベクトルが $\langle 110 \rangle$ の転位網に、プリズマティック転位ループを衝突させるシミュレーションを行った。プリズマティック転位ループの下部2辺が界面に到達すると、転位網の横系、縦系部分それぞれとジャンクションを形成し、ジャンクション部分の成長にともない交点がひきよせられ、3本の転位線からなるバーガスベクトルが $[01\bar{1}]$ のジャンクションとなった。最終的には、転位網の交点がプリズマティック転位ループで置換されたような形状となった。この形態変化も分子動力学シミュレーションで観察された転位網の形態変化と一致しており、転位論に基づいて説明できる現象であることを示した。

第4章では、界面転位網の形成過程について検討するため、 γ/γ' 相表面もすべり面とする様々なローカルルールを設定して複雑な γ/γ' 析出構造中におけるDDDシミュレーションを行った。まず、界面に平行なバーガスベクトルを持つ刃状転位が γ' 相の表面に到達した場合、その界面をすべり面とするローカルルールを導入し、立方体析出構造およびラフト構造の γ チャンネル内に次々に転位を導入したが、 γ' 相表面上で転位がすべることなく転位の構造に変化は見られなかった。そこで、界面での転位芯レベルの変化を想定し、界面でバーガスベクトルを変更するローカルルールを導入したシミュレーションでは、 γ' 相表面と γ チャンネル内のすべり面の違いから、 γ' 相表面を運動する転位が γ' 相のエッジ部でピンニングされ湾曲すること、その後、 γ' 相の端まで到達して、 γ' 相に沿った形態となること、などが観察された。しかしながら、 γ チャンネル内にランダムに転位を導入する条件では、 γ/γ' 界面での転位同士によるジャンクション形成は生じなかった。最後に、界面上でのジャンクション形成を想定したローカルルールを導入し、互いに交差する複数の Frank-Read 源から転位を発展させるシミュレーションでは、バーガスベクトルが $[0\bar{1}\bar{1}]$ と $[101]$ の転位の合成により、バーガスベクトルが $[1\bar{1}0]$ で転位線方向が $[010]$ のジャンクションが γ' 相表面上に形成され、六角形状の転位網組織が形成されることを示した。

以上のように、本研究では界面転位網の形態変化およびその形成過程について検討した。プリズマティック転位ループによる転位網の形態変化が従来の転位論に基づいて説明できることを示し、界面上もすべり面とする条件を設定したシミュレーションに

よって、複雑な γ/γ' 構造中の転位挙動を再現することを試みたが、本研究では格子ミスフィットの影響は考慮していない。今後、 γ/γ' 界面での運動に関するローカルルールに加えて、その影響も取り入れたモデル化がなされることが望まれる。

参 考 文 献

- [1] 原田広史, Ni 基超合金開発の現状と新材料の可能性, 日本ガスタービン学会誌, **28**-4 (2000), 278–284.
- [2] Yokokawa, T., Osawa, M., Nishida, K., Kobayashi, T., Koizumi, Y. and Harada, H., Partitioning behavior of Platinum group metals on the γ and γ' phases of Ni-based superalloys at high temperatures, *Scr. Mater.* , **49** (2003) , 1041–1046 .
- [3] Tien, J. K. and Copley, S. M., The effect of orientation and sense of applied uniaxial stress on the morphology of coherent gamma prime precipitates in stress annealed nickel–base superalloy crystals, *Phys. Stat. Sol., A, Metall. Trans.*, **2**-2 (1971), 543–553.
- [4] Grose, D. A. and Ansell, G. S., The influence of coherency strain on the elevated temperature tensile behavior of Ni–15Cr–Al–Ti–Mo alloys, *Metall. Trans.*, **A12** (1981), 1631–1645.
- [5] Li, J. and Wahi, R. P., Investigaton of γ/γ' lattice misfit in the polycrystalline nickel–base superalloy IN738LC: influence of heat treatment and creep deformation, *Acta Metall. Mater.*, **43** (1995), 507–517.
- [6] 石橋浩一, 近藤義宏, 行方二郎, 大井成人, 服部博, Ni 基単結晶超合金 CMSX-2 における γ' 相のラフト化の引張方位依存性, 耐熱金属材料第 123 委員会研究報告, **34**-2 (1993), 165–172.
- [7] Koizumi, Y., Kobayashi, T., Yokokawa, T., Osawa, M., Harada, H., Hino, T. and Yoshioka, Y., Creep strength of a Ni-base single crystal superalloy TMS-82+ and its tie-line alloys, *J. Jpn. Inst. Met.* , **67**-4 (2003) , 205–208 .

- [8] 原田広史, 超耐熱材料の実用化戦略とエネルギー産業分野への波及効果 ~ ジェット機からパワーエンジニアリングまで ~ , (2003), 39.
- [9] Koizumi, Y., Zhang, J. X., Kobayashi, T., Yokokawa, T., Harada, H., Aoki, Y. and Arai, M., Development of next generation Ni-base single crystal superalloys containing ruthenium, *J. Jpn. Inst. Met.* , **67**-9 (2003) , 468-471 .
- [10] Zhang, J. K., Murakumo, T., Koizumi, Y., Kobayashi, T., Harada, H. and Masaki, Jr., S., Interfacial Dislocation Networks Strengthening a Fourth-Generation Single-Crystal TMS-138 Superalloy , *Metall.Mater.Trans A*, **33** (2002), 3741-3746.
- [11] Link, T., Epishin, A., Klaus, M., Brückner, U., Reznicek, A., $\langle 100 \rangle$ Dislocations in nickel-base superalloys: Formation and role in creep deformation , *Mater. Sci. Eng. A* , **405** (2005) , 254-265 .
- [12] Zang, J. X., Koizumi, Y., Kobayashi, T., Murakami, T. and Harada, H., Mechanical Behavior-Communication : Strengthening by γ/γ' Interfacial Dislocation Networks in TMS-162 - Toward a Fifth-Generation Single-Crystal Superalloy, *Metallurgical and Materials Transactions - Series A*, **35**-6 (2004), 1911-1914.
- [13] Wang, J. C., Osawa, M., Yokokawa, T., Harada, H. and Enomoto, M., Modeling the microstructural evolution of Ni-base superalloys by phase field method combined with CALPHAD and CVM, *Computational Materials Science*, **39**-4 (2007), 871-879.
- [14] 小林豊, 高橋昭如, 菊池正紀, ニッケル基超合金における転位網を考慮したラフティングの計算機シミュレーション, 日本機械学会第20回計算力学講演会講演論文集 07-36 (2007), 249-250.
- [15] 屋代如月, 内藤正登, 富田佳宏, Ni基超合金格子状析出相に堆積する刃状転位の分子動力学シミュレーション, 日本機械学会論文集, A編, **60**-677 (2003), 210-217.

- [16] Yashiro, K., Pangestu, J. R., Tomita, Y., Structure and Motion of Misfit Dislocation at Ni/Ni₃Al Interface : Molecular Dynamics Study, *Journal of The Society of Materials Science*, Japan (2006), submitted.
- [17] Yashiro, K., Pangestu, J. R., Tomita, Y., Molecular Dynamics Study of Interfacial Dislocation Network at Gamma/Gamma-Prime Interface in Ni-Based Superalloys, *Third International Conference on Multiscale Materials Modeling MMM2006 Freiburg*, (2006), 582–584.
- [18] 鈴木雄風, 屋代如月, 富田佳宏, 刃状およびらせん転位とミスフィット転位の転位芯相互作用 : 分子動力学による解析, *日本機械学会論文集, A 編*, **73**–735 (2007), 1217–1224.
- [19] Zbib, H. M. and Rubia, T. D., A multiscale model of plasticity, *Int. J. Mech. Sci.*, **18** (2002), 1133–1163.
- [20] 都留智仁, 渋谷陽二, 三次元離散転位力学法と境界要素法のマルチスケール解析とインデントレーション問題への応用 *日本機械学会論文集, A 編*, **74**–743 (2008), 933–938.
- [21] Yashiro, K., Kurose, F., Nakashima, Y., Kubo, K., Tomita, Y. and Zbib, H. M., Discrete Dislocation Dynamics Simulation of Cutting of γ' Precipitate and Interfacial Dislocation Network in Ni-Based Superalloys, *International Journal of Plasticity*, **22**–4, (2006), 713–723.
- [22] Yashiro, K., Nakashima, Y., and Tomita, Y., A Discrete Dislocation Dynamics Study on Cutting Resistance of Interfacial Dislocation Network in Ni-Base Superalloys, *The Proceedings of International Workshop on Development and Advancement of Computational Mechanics*, (2005), 40–49.
- [23] Hirth, J. P. and Lothe, J., *Theory of Dislocations*, second Ed. (1982), John Wiley & Sons.

- [24] Rhee, M., Zbib, H. M., Hirth, J. P., Huang, H. and Rubia, T. D. d. L., Model for long-/short-range interactions and cross slip in 3D dislocation simulation of BCC single crystals, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, **6** (1998), 467–492.
- [25] Yashiro, K., Kurose, F., Nakashima, Y., Kubo, K., Tomita, Y. and Zbib, H. M., Discrete dislocation dynamics simulation on cutting of γ' precipitate and interfacial dislocation network in Ni-based superalloys, *Int. J. Mech. Sci.*, (2005), (submitted).
- [26] Tao, Zhu. and Chang-yu, Wang., Misfit dislocation networks in the γ/γ' phase interface of a Ni-based single-crystal superalloy : Molecular dynamics simulations, *Phys. Rev. B.*, **72**, 014111, (2005).

関連発表論文・講演論文

関連発表論文

- ▷ Kisaragi YASHIRO・Masaaki KONISHI・Yoshihiro TOMITA, Discrete Dislocation Dynamics Study on Interaction between Prismatic Dislocation Loop and Interfacial Network Dislocations, Computational Materials Science, **43**-2 (2008) , 481-488

講演論文

- ▷ 小西 正彰・屋代如月・富田佳宏, プリズマティック転位ループによる界面転位網の形態変化: 離散転位動力学シミュレーション, 日本機械学会 M&M2007 材料力学カンファレンス, (2007)
- ▷ Kisaragi YASHIRO・Masaaki KONISHI・Yoshihiro TOMITA, Morphology Change in Interfacial Dislocation Network by Prismatic Dislocation Loop: Discrete Dislocation Dynamics Study , The 2008 IUTAM International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM2008), (2008)
- ▷ 小西 正彰・屋代如月・富田佳宏, 界面転位網形成過程の離散転位動力学シミュレーション, 日本機械学会 M&M2008 材料力学カンファレンス, (2008)

論文貼り付け用ページ

謝 辞

本研究を遂行するにあたり，終始，懇切丁寧なご教授，ご指導を賜り，また，すばらしい研究環境を提供して頂いた富田佳宏教授に心より感謝いたします．

研究全般にわたり，直接のご指導と貴重なご助言を賜りました，屋代如月准教授に心より感謝の意を表します．また，研究会などにおいて有益な議論を賜りました長谷部忠司准教授，高木知弘准教授（現京都工芸繊維大学大学院）に深く感謝いたします．また，研究活動が円滑に行えるよう数々の便宜をはかって頂きました古宇田由夫技術職員に心より御礼申し上げます．

同じ研究テーマに取り組み，有益な討論と適切なお指摘を頂いた，中島祐介氏（現川崎重工業株式会社）に心から感謝いたします．

日々の研究活動において，同輩として互いに切磋琢磨し励ましあった近堂将規氏，鈴木雄風氏，竹内耕助氏，久國陽介氏，廣内智之氏，山田将臣氏，山本雄太氏，横川望氏に心より深く感謝いたします．また，固体力学研究室諸氏には今日に至るまで数々のご支援とご協力をいただきましたので，ここに記して感謝の意を表します．

最後に，6年間の長きに渡る学生生活を経済的かつ精神的に支えてくれた家族に，最大限の感謝の意を表します．ありがとうございました．

平成 21 年 2 月 小西 正彰