OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	Defect interaction between dislocations and grain boundaries in fcc metals
Author(s)	Li, Li
Citation	大阪大学, 2022, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/89490
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

Form 3

Abstract of Thesis

Name （李　力）	
Title	Defect interaction between dislocations and grain boundaries in fcc metals (面心立方格子材料の転位と粒界の相互作用に関する研究)

It is well established that the defect interaction between dislocations and grain boundaries (GBs) has a substantial impact on the mechanical properties of crystalline materials as the conventional Hall-Petch law. At sub-micron and nano scales, GBs and dislocations are the primary defects of the crystal. Therefore, the mechanical behavior of the nanostructure, such as strength and ductility, is determined by their interactions. Even for the polycrystalline materials, it is also dominant to affect the plastic deformation response. But it is almost impossible to directly observe the details of the defect interactions due to the complexity of the GB structure and the limitation of experimental conditions and resolutions. In light of this constraint, this thesis mainly focused on the interaction between dislocation and GB by molecular dynamics (MD) simulation and nudged elastic band method (NEB) based on the transition state theory (TST) as the following works.

(1) The GB energy maps for <110>/<111>/<100>/<112>-axis tilt symmetric GBs were obtained by MD simulations for typical face-centered cubic (FCC) metals. The generalized stacking fault energy maps were also obtained for the subsequent researches.

(2) The interactions between edge dislocations and <112>-axis tilt symmetric GBs were investigated by MD and NEB in Cu. Absorption, transmission, and pile-up were observed for different GBs. Different slip plane affects the interaction mechanisms and the critical interaction shear stress (CISS). Generally, the CISS decreases if the GB energy increases. The activation volumes and strain rate sensitivities (SRS) were estimated by TST and they agreed well with the real experimental data.

(3) Then, the interactions between screw dislocations and <110>-axis coherent twin boundaries (CTBs) were investigated in Al, Cu, Ni, Ag, Au, and Pd. The CISS has a strong linear relationship with the reciprocal of the difference between unstable stacking fault energy and stable stacking fault energy. Furthermore, the activation volumes and SRS were all consistent with the experiments.

(4) Finally, abnormal reversible plasticity was observed and reported. The reversible plasticity was caused by the reversible defect interactions between the negative edge dislocation and <110>-axis CTB/<110>-axis $\Sigma 11(\bar{1}13)$ GB and <112>-axis $\Sigma 11(\bar{1}3\bar{1})$ GB in Al, Cu, Ni, and Ag. The positive dislocation, on the other hand, did not support this reversibility. This new discovery was compared to other references and demonstrated the plausibility and rationality of its existence.

様式 7

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏　名　（　李　力　）		
	（職）	氏　名
論文審査担当者	主 査　教 授	澁谷 陽二
	副 査　教 授	中谷 彰宏
	副 査　教 授	近藤 勝義
	副 査　教 授	尾方 成信（基礎工学研究科）

論文審査の結果の要旨

トレードオフの関係にある多結晶延性材料の強度と塑性変形能（伸び）において、それらの特性を律している素過程の現象は欠陥間の相互作用に帰着される。とりわけ、塑性源である作用応力場で運動する線欠陥の転位と、転位の運動の障壁となる面欠陥の結晶粒界との相互作用は、両特性の割合を決定づける最重要な素過程に位置付けられる。粒界近傍の近接場では、粒界による転位の阻止、粒界での転位の吸収、粒界からの転位の射出、隣接結晶粒で生成した転位との合体といった複雑な転位-粒界相互作用による反応がすでに報告されている。この力学的及び結晶学的反応は多種多様であり、一般論を導き出すための基礎的研究として本研究の位置付けがなされている。

本研究は、分子動力学シミュレーション(MD)と最小エネルギー経路探索法(NEB)の原子論的方法論を用いて、面心立方格子材料(fcc)における刃状転位またはらせん転位と種々の結晶粒界との反応を、1 面の粒界のみを有する双結晶モデルを代表体積素とする力学モデルに対して調べている。そして、熱活性化過程を仮定した活性化エネルギー及び反応を限界条件づける双結晶の代表体積素に作用する臨界せん断応力を求め、粒界エネルギー、積層欠陥エネルギー等の材料特性値との相関について検討している。主な成果は以下の通りである。

(1) 銅(Cu)、アルミニウム(Al)そしてニッケル(Ni)の 3 種類の fcc における<110>、<111>、<100>、<112>を回転軸とする 4 種類の対応傾角粒界モデルを作成し、粒界エネルギーの変化をミスオリエンテーション角の関数として求めている。従来から知られているカスプ状の変化が得られ、転位と粒界の解析を進める上で対象とする粒界性格の理解と選択を行っている。特に、粒界エネルギーが極めて小さい双晶粒界を含めたいくつかの対応傾角粒界を対象としている。

(2) Cu の<112>回転軸とする対応傾角粒界と初期には直線形状の刃状転位の相互作用についての解析を行った結果、粒界性格そして異なるすべり面に応じて、転位の阻止、吸収、粒界からの隣接する結晶への転位の射出の現象が整理されている。粒界エネルギーが大きくなるほど、活性化エネルギー及び臨界せん断応力は低下することが示されている。得られた活性化エネルギーから状態遷移理論に基づき、反応の挙動が占める活性化体積そしてひずみ速度感受性指数を解析的に評価しており、これらは転位間相互作用が主とならない結晶粒径が 1μm 以下の fcc における実験結果と良好な一致を示している。

(3) Cu、Al、Ni、そして銀(Ag)、金(Au)、パラジウム(Pd)の 6 種類の fcc に対して、<110>回転軸の双晶粒界とらせん転位の欠陥間相互作用を調べた結果、未緩和構造の不安定積層欠陥エネルギーと構造安定化させた安定積層欠陥エネルギーの差の逆数と臨界せん断応力の関係が負の勾配を持つ線形関係にあることを求めている。また、この差の逆数と同一の応力下での活性化エネルギーとの関係についても同様の傾向を示し、これらの関係が fcc の材料の種類によらないことを示している。さらに Cu、Ni について、解析によって得られた活性化体積とひずみ速度感受性指数について従来から報告されている実験結果とよく整合することを示している。

(4)Cu、Al、Ni、そして Ag において、極めて粒界エネルギーの小さな<110>回転軸の双晶粒界、<110>回転軸のΣ11(-113)対応傾角粒界、<112>回転軸のΣ11(-13-1)対応傾角粒界と、バーガースベクトルが粒界に対して正と負の 2 種類の刃

状転位との相互作用をそれぞれ調査した結果、負のバーガースベクトルを持つ転位と粒界の反応が可逆的な挙動を示し、負荷のために与えたせん断変位を逆負荷により初期状態に戻すと、初期に配置した転位の位置まで回復するほぼ完全な可逆反応を得ている。この挙動は従来より一部の実験で報告されているが、計算モデルとして再現し、限られた範囲であるが可逆な塑性変形が発現する条件を明確にしている。

以上のように、本論文は種々の面心立方格子材料に対する転位と粒界の相互作用を原子論的に求め、その熱活性化過程の特性とともに、双結晶を代表体積素とする臨界せん断応力を整理することで欠陥間相互作用に関する基礎的な知見を得ている。

よって、本論文は博士論文として価値あるものと認める。