

ナノインデンテーション中のpop-in現象に関する 空孔と結晶粒界の影響

東京大学 大学院工学系研究科 機械工学専攻 佐藤 悠治

目的 ナノインデンテーション中の圧子の変位バースト現象（pop-in現象）は転位の生成・増殖に起因し、微視スケールでの材料の塑性変形の開始に深く関わる。本研究ではpop-in現象に対する空孔と結晶粒界の影響の調査を目的とし、ナノインデンテーション分子動力学（MD）解析を実施した。

内容 体心立方（BCC）構造を有する純鉄を対象とし、球状圧子の中心軸上の深さ1.0 nmの箇所空孔1個を含むモデル（空孔モデル）と、中心面に $\{120\}\Sigma 5$ 粒界を含むモデル（粒界モデル）に対して解析を実施し、最初のpop-in現象（第一pop-in）発生時における転位核生成の描像を観察した。

結果 第一pop-in直後の描像を図に示す。空孔モデルでは押し込み深さ3.0 nmで第一pop-inが生じ、多数の転位が同時に生成される様子が確認された。空孔以外の箇所で均質転位核生成が生じたと見られるため、本解析での空孔配置ではpop-in現象に対する空孔の寄与は小さいと考える。粒界モデルでは押し込み深さ1.2 nmで表面付近の粒界から少数の転位ループが生成された。この際の第一pop-inの発生規模は空孔モデルの場合と比較すると約60分の1程度であったことから、粒界を媒介とした不均質転位核生成が生じ、それに伴って第一pop-inの発生規模も著しく小さくなったと考える。

利用した計算機 SQUID GPUノード群
ノード時間 240 時間
並列化 2 ノード 16 GPU
解析コード LAMMPS

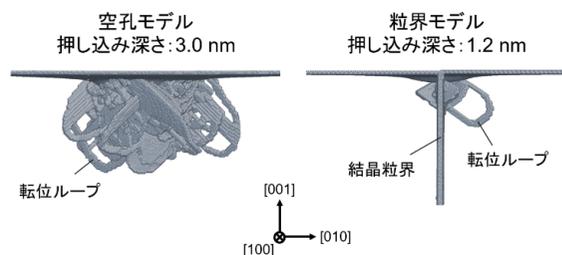


図 第一pop-in直後の描像
(表面・欠陥部のみ表示)