

Finnis-Sinclair ポテンシャルを用いたBCC結晶中のらせん転位の運動の計算機シミュレーション

槇井, 浩一

九州大学大学院総合理工学研究科高エネルギー物質科学専攻

堤, 哲男

九州大学大学院総合理工学研究科高エネルギー物質科学専攻 : 応用力学研究所

青野, 泰久

日立製作所日立研究所

蔵本, 英一

Department of Energy and Material Sciences, Interdisciplinary Graduate School of Engineering Sciences, Kyushu University : Research Institution for Applied Mechanics

<https://doi.org/10.15017/17176>

出版情報 : 九州大学大学院総合理工学報告. 12 (1), pp.17-21, 1990-06-01. 九州大学大学院総合理工学研究科

バージョン :

権利関係 :



Finnis-Sinclair ポテンシャルを用いた BCC 結晶中の らせん転位の運動の計算機シミュレーション

横井 浩一*・堤 哲男**

青野 泰久***・蔵元 英一**

(平成2年2月28日 受理)

Computer Simulation of Motion of a Screw Dislocation in BCC Crystals Using Finnis-Sinclair Potential

Koichi MAKII*, Tetsuo TSUTSUMI**,
Yasuhisa AONO*** and Eiichi KURAMOTO**

Motion of a screw dislocation in a bcc lattice has been investigated by computer simulation technique using Finnis-Sinclair potential (Ta). Motion under pure shear stress was compared with that under both shear and normal stress, i. e., conventional tensile condition. It was made clear that existence of normal stress reduced critical shear stress, i. e., Peierls stress for a screw dislocation. The total energy change was calculated during the screw dislocation motion overcoming Peierls potential, and showed double peaks of the total energy exist within one atomic distance motion. This showed that Peierls potential has a camel-hump shape (double peak shape), which is desirable to explain the characteristic temperature dependence of the yield stress observed in bcc metals.

1. 緒 言

BCC (体心立方) 結晶中のらせん転位の運動は塑性変形を理解する上に中心的役割を果たしていることはこれまでの多くの研究から明らかになった。モデル BCC 結晶中のらせん転位の芯構造および運動についての計算機シミュレーションも数多く行われて来たが用いられたポテンシャルが問題である。最近種々の計算に広く用いられるようになった多体ポテンシャルに Finnis-Sinclair ポテンシャル¹⁾²⁾があるが、これは d-電子論から得られた表式に簡略化を施したもので従来の2体ポテンシャルに比べると格段の進歩である。本稿ではこのポテンシャルを用いてらせん転位の芯構造および運動特性を調べパイエルスポテンシャルについての情報を得ることを目的とする。特に二つの点について明らかにすることを試みる。第1に通常のシミュレーションではせん断応力下での転位の運動のみを取

り扱ってきたが、実際の引張試験ではすべり面に垂直な成分も存在しているのでシミュレーションにこの垂直成分も加えてその影響を見ることである。第2にパイエルスポテンシャルの形を転位の運動中の結晶全体のエネルギー変化から調べることである。単結晶を用いた降伏強度の温度依存性のデータからはパイエルスポテンシャルは単純な正弦型ではなく $b/2$ (b : パーガスベクトル) の位置が準安定であることが推察されている³⁾⁴⁾。この点を明らかにすることは重要な課題である。

2. 計 算 方 法

モデル体心立方結晶の形状は以前報告したものと同一である³⁾⁴⁾。転位の運動をシミュレートする場合には境界があることによって生じる image force (鏡像力) が無視できるような結晶の大きさが必要である。このために約 $40b \times 40b \times 100b$ (b : パーガスベクトルの大きさ) の大きさを採用している。Finnis-Sinclair ポテンシャルは種々の体心立方遷移金属に対して得られているがここではタンタルに対して与えら

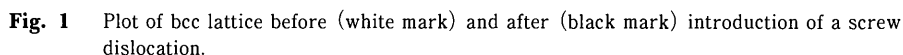
*高エネルギー物質科学専攻博士後期課程

**応用力学研究所, 高エネルギー物質科学専攻

*** (現) 日立製作所日立研究所

の安定位置は主として第1, 第2近接位置の計14ヶの原子との関係で決まり, 計算では Newton-Raphson 法により求めた。この操作を結晶全体について行い, 更にそれを N_{it} (iteration number) 回繰返し結晶全体の最安定構造を求める。

Fig. 1 に BCC 結晶らせん転位を 1 本導入した時の原子変位を示す。すなわち導入前の完全結晶格子の格子点（白印）がらせん転位の導入によって $\langle 111 \rangle$ 方向に変位して黒印の位置にずれていることがわかる。らせん転位のわまりの歪場を表示するのにこのずれをベクトルとして表示するのが好都合であるが $\langle 111 \rangle$ 方向の投影図上では点となってしまうので、隣り合う



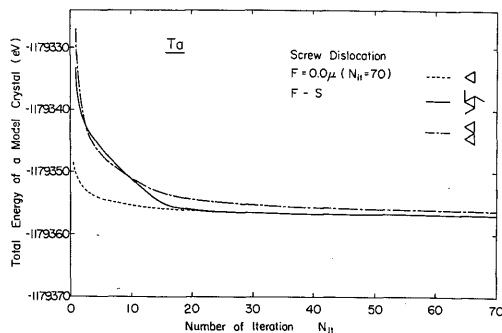


Fig. 2 Relaxation process of a model Ta crystal containing a screw dislocation.

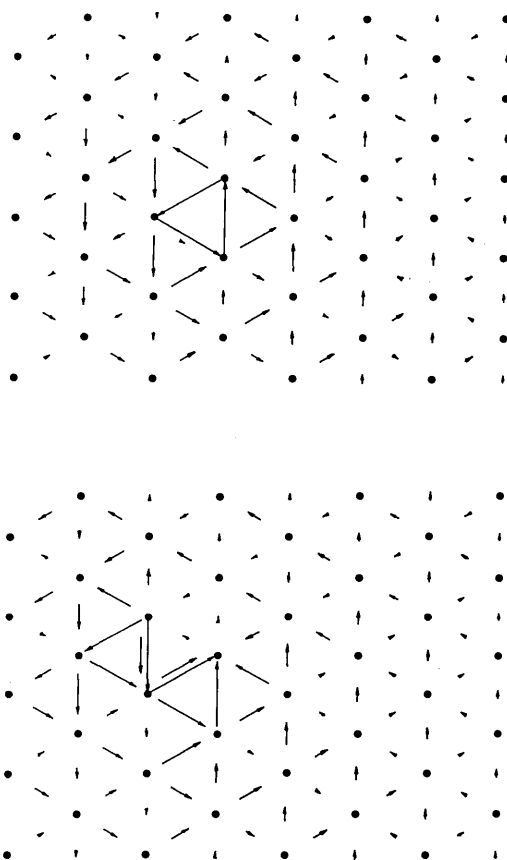


Fig. 3 Two types of core structure in model Ta crystal (up: unpolarized type, down: split type).

ベクトルの大きさの差を $\{111\}$ 面内に図示するのが良い。これが Fig. 3 に示す Vitek⁵⁾ の differential displacement representation である。Fig. 2 はモデル Ta 結晶中にらせん転位を導入して結晶全体を上記の方法により緩和する途中のエネルギー変化を示したものである。三つのタイプ、すなわち非分極型 (unpolarized type)、分極型 (polarized type)、分離型 (split type) 芯構造の場合について示してある。結果は非分極型、分離型の二つの芯構造が安定ということである。Fig. 3 に上記の Vitek の表示法にて示した芯構造をこの二つの場合について示す。相隣る $\langle 111 \rangle$ 原子列を結ぶ矢印の大きさを $b/3$ にとってある。転位芯のまわりを任意に 1 まわりすると b だけ転位線方向にずれることがわかる。非分極型は等方的で弾性論の解に近い構造であり、分離型は二つの相隣る安定位置の中間に位置する場合の解である。

次に外力を負荷して転位を運動させる場合について述べる。通常このようなシミュレーションではせん断応力のみを負荷して行っているが、実際の引張試験では垂直応力 (normal stress) もかかっている。そこで両応力を負荷した場合と従来法を比較してみた。Fig. 4

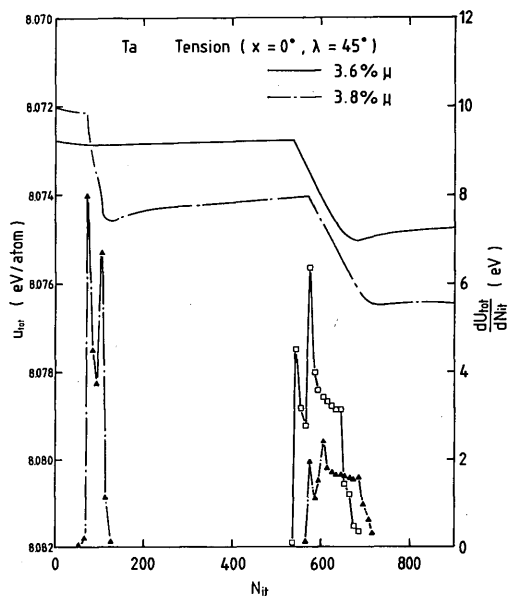


Fig. 4 Relaxation process of a Ta crystal containing a screw dislocation under applied stress (solid line: tensile condition, broken line: pure shear condition).

にその結果を結晶全体のエネルギーの緩和過程として示す。実線は両応力のかかった tensile condition, 破線はせん断応力のみ pure shear condition である。エネルギーの緩和が顕著に見られるところで転位が1原子距離前進している。注目すべき点が2つ見られる。第1は引張条件（ここではすべり面に対して 45° , すなわち $\lambda = 45^\circ$ ）の方が純粋のせん断条件よりも低い応力で移動していることである ($3.6\% \mu$ と $3.8\% \mu$, μ : 剛性率)。これは垂直応力が働いて原子面間隔を僅かながら広げることに寄与するとパイエルスポテンシャルが低くなると考えられる。第2は1つのエネルギー緩和過程の中を良くみると2つのピークになっていることである。これはパイエルスポテンシャルを越えて1原子距離進む間にもう1つ準安定位置があると考えなければならない。このことは Fig. 3 で分離型 (split type) が相隣る安定位置の中間に存在していることに対応する。パイエルスポテンシャルを直接求め

ることは以前から試みられているが成功しない。その理由は1原子距離進む途中の位置に転位を止めることが出来ないからである。本計算で外力下でのエネルギー緩和過程の中に転位が乗り越えているパイエルスポテンシャルの形に関する情報が現われたと考えられる。Fig. 5 にキंकについてのシミュレーションの結果を示す。外力は零である。図の下に示すのは相隣る安定位置にらせん転位がまたがっている様子であり移るところにキंकが形成されていることを示す。図より分かることはキंकは 'abrupt' ではなく 'gradual' であることである。1原子毎のセクションのエネルギーを上図に示すが中央部が低くなっている。このことも $b/2$ の位置に準安定状態が存在することを示している。両端のピークエネルギーには転位線が折れ曲っているための歪エネルギーの上昇分も含まれていると考えられる。以上パイエルスポテンシャルが $b/2$ の位置で凹み、すなわち準安定位置を持つことに関す

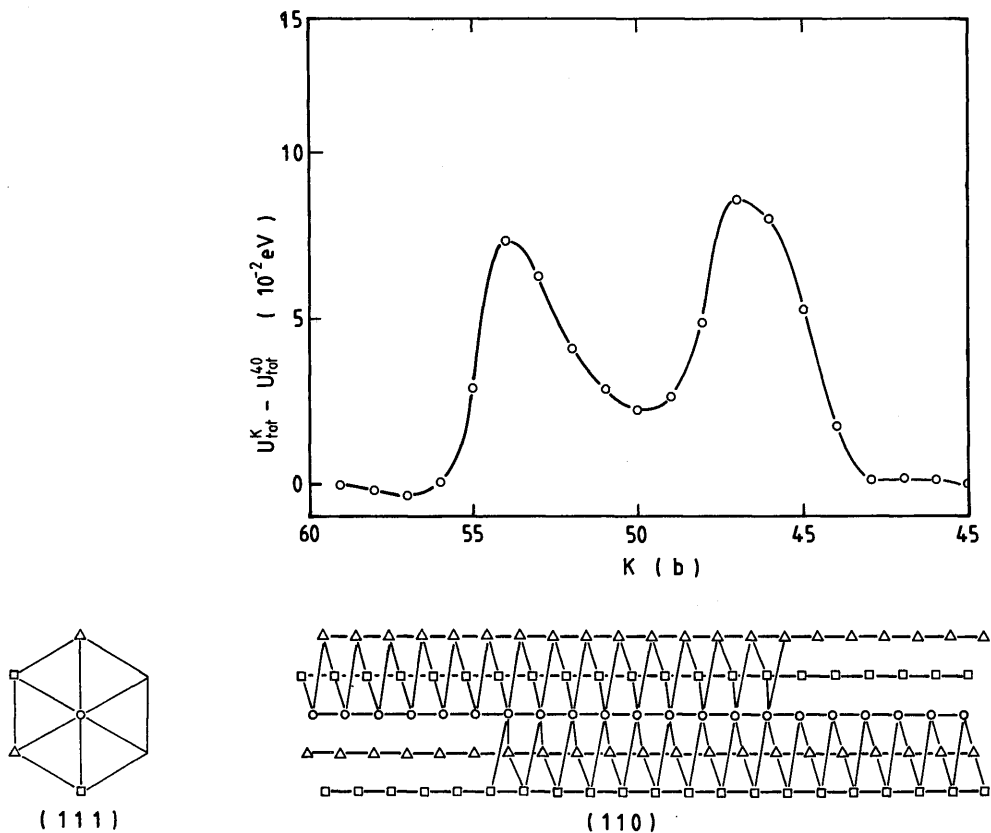


Fig. 5 Kink structure and energy variation along $\langle 111 \rangle$ direction.

る事実を列挙した。これを camel-hump type のパイエルスポテンシャルと呼ぶが、これは実験から得られている降伏強度の温度依存性を説明するには好都合である³⁾。今後この点をさらにシミュレーションから明らかにするためにここで得られたパイエルスポテンシャルを乗り越えるらせん転位上のキンク対形成について調べる。

参 考 文 献

- 1) M. W. Finnis and J. E. Sinclair, *Phil. Mag. A*, **50**, 45 (1984).
- 2) G. J. Ackland and R. Thetford, *Phil. Mag. A*, **56**, 15 (1987).
- 3) Y. Aono, E. Kuramoto and K. Kitajima, "Strength of Metals and Alloys", ed by R. C. Gifkins, Pergamon Press p. 9 (1982).
- 4) 蔵元英一, 青野泰久, 北島一徳, *日本金属学会会報*, **19**, 348 (1980).
- 5) V. Vitek, R. C. Perrin and D. K. Bowen, *Phil. Mag.*, **21**, 1049 (1970).