

## 有限温度における $\alpha$ -Fe 中の刃状転移芯構造の 分子動力学法を用いた研究

小柳, 万博  
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  
九州大学応用力学研究所

大沢, 一人  
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

蔵元, 英一  
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

<https://doi.org/10.15017/17421>

---

出版情報 : 九州大学大学院総合理工学報告. 18 (4), pp.309-311, 1997-03-01. 九州大学大学院総合理工学研究科  
バージョン :  
権利関係 :



# 有限温度における $\alpha$ -Fe 中の刃状転位芯構造の 分子動力学法を用いた研究

小柳 万博\*・堤 哲男\*\*\*

大沢 一人\*\*・蔵 元英 一\*\*

(平成8年11月30日 受理)

## Molecular Dynamics Study of the Core Structure of an Edge Dislocation in $\alpha$ -Fe at Finite Temperatures

Mitsuhiro KOYANAGI\*, Tetsuo TSUTSUMI\*\*\*,  
Kazuhito OHSAWA\*\* and Eiichi KURAMOTO

Molecular dynamics study of the core structure of an edge dislocation in  $\alpha$ -Fe at finite temperatures has been performed in order to obtain the basic information on the temperature dependence of the lattice resistance of the dislocation or the interaction between a dislocation and point defects. The edge dislocation of the Burgers vector  $a/2\langle 111 \rangle$  on  $\{110\}$  atomic plane was inserted into the model iron lattice and was relaxed statically at 0 K first and then relaxed again at 300 K to obtain the stable core structure at this temperature. The Burgers vector distribution of the infinitesimal edge dislocations which constructs the inserted edge dislocation was obtained for 0 K and 300 K. The former shows a sharp distribution within about  $8b$ , but the latter shows a rather wide distribution with a lower peak which extends over more than  $10b$ , with a considerable atomic fluctuation. This suggests that the property of the edge dislocation at finite temperatures is significantly different from that at very low temperatures, especially in the mechanical behaviour or the interaction with point defects.

### 1. 緒 言

近年、コンピュータの処理能力の急速な向上により分子動力学法による計算が固体中の種々の欠陥の挙動の解明に応用されている。しかし、代表的線欠陥である転位に関するものは、その歪み場が長範囲に広がっているために、点欠陥のみの場合に比べて研究例が少ない現状である。転位に関する問題として、転位固有の格子抵抗のような機械的性質に関する問題と、照射下で重要な点欠陥との相互作用に関する問題に大別される。どちらにしても転位の原子レベルでの構造、およびその温度依存性を調べることは、それ以後の研究の基礎をなすと考えられる。ここでは、 $\alpha$ -Fe 中の刃状転位について、絶対零度と有限温度での転位芯構造を詳細に比較することにより、刃状転位が関係する現象、たとえば、結晶の塑性変形に対する強度、高温重照射下でのボイドスエーリングなど、種々の照射組織発達に対する基礎情報を得ることを目的とする。

### 2. 計算方法

\*高エネルギー物質科学専攻修士課程  
\*\*高エネルギー物質科学専攻  
\*\*\*応用力学研究所

#### 2.1 分子動力学法のプログラムの作成

モデル結晶のハミルトニアン  $H$  を eq. (1) に示す<sup>1)</sup>。この式より正準方程式が導かれ (eq. (2))、これをベルレの方法により数値計算することにより、モデル結晶内で NVE アンサンブルが実現される。しかし、この方法では、温度一定の NVT アンサンブルは実現されない。この NVT アンサンブルを実現する分子動力学法が Nose<sup>2)</sup> によって提唱された。この方法では、モデル結晶の周りに仮想的な熱浴を考へて、この熱浴とモデル結晶との熱の授受を行わせ、系の温度を一定に保っている。この拡張系のハミルトニアンを eq. (3) に示す。

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \phi(r_i) \quad (1)$$

$$\begin{cases} \frac{dr_i}{dt} = \frac{p_i}{m} \\ \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial \phi}{\partial r_i} \end{cases} \quad (2)$$

$$\tilde{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2ms^2} + \phi(r'_i) + \frac{Ps^2}{2Q} + gk_B T \log s \quad (3)$$

今回、有限温度での転位芯構造を決定するために、

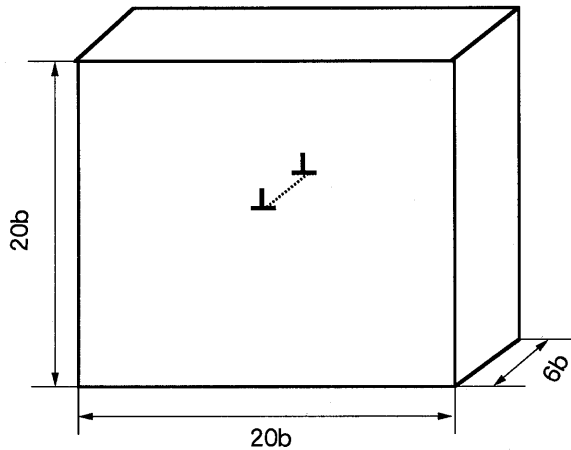


Fig. 1 Schematic drawing of  $\alpha$ -Fe model crystal.

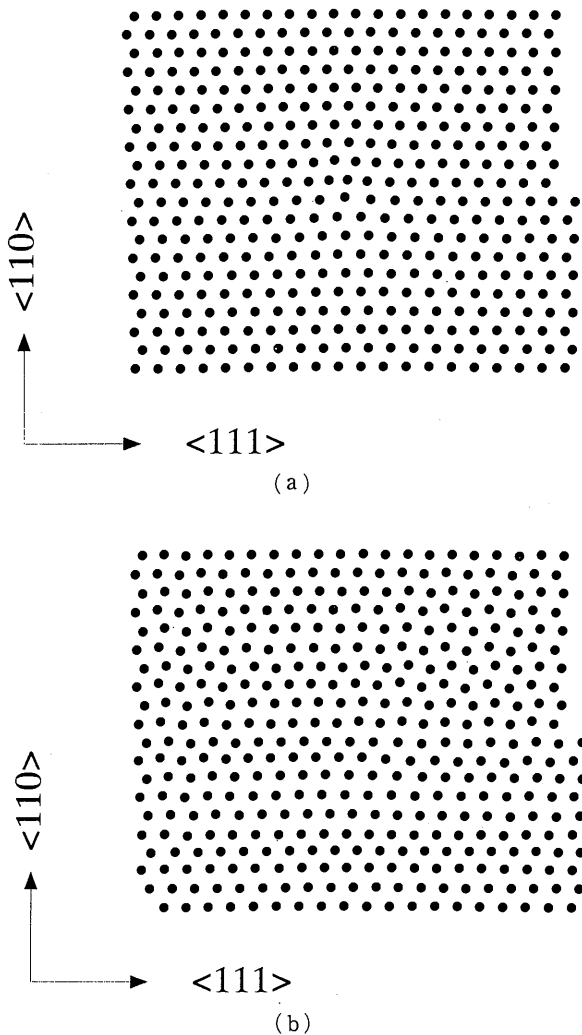


Fig. 2 Cross sectional view from  $\langle 112 \rangle$  direction of the model crystal with an edge dislocation, (a) 0 K, (b) 300 K.

これら2つのハミルトニアン (eq. (1), eq. (3)) を組み合わせて使用するプログラムを作成した。すなわち、計算の初期は eq. (1) で NVE アンサンブルでスタートし、その後、eq. (3) を用いて NVT アンサン

ブルを形成し目的の温度を実現した。

### 2.2 モデル結晶

刃状転位を導入した  $\alpha$ -Fe モデル結晶の模式図を Fig. 1 に示す。Burgers ベクトルは  $a/2\langle 111 \rangle$  で、すべり面は  $\{110\}$  である。結晶の大きさは  $20b \times 20b \times 6b$  で、全原子数は境界領域を除いて2400個である。刃状転位の初期値としては弾性論の解を用いた。境界条件は固定境界条件を採用した。原子間のポテンシャルとしては、経験的多体ポテンシャルである Finnis-Sinclair potential<sup>3)</sup>を用いた。このポテンシャルは、これまで2体ポテンシャルが持っていた2つの致命的な欠陥、すなわち、(1) Cauchy discrepancy (cubic な中心力結晶では Cauchy の関係  $c_{12} = c_{44}$  が成立しなければならないが、ポテンシャル形成時のパラメータフィッティングにおいて実験値に合わせている)、(2) 凝集エネルギーと原子空孔の形成エネルギーが等しくなってしまう (実際には前者の方が絶対値で2~3倍大きい)、を解消することに成功している。このポテンシャルによると  $\alpha$ -Fe 中の原子空孔の形成エネルギーは1.83 eV となり、実験値1.79 eV<sup>4)</sup>と良く一致している。

### 3. 計算結果と考察

Fig. 2 (a), (b) に  $\langle 112 \rangle$  方向から見た 0K および300K における刃状転位の周辺の原子配置を示す。すべり面 ( $\{110\}$  面) は水平方向にあり、転位は図のほぼ中央に紙面に垂直方向に存在する。0 K に比して 300K における転位芯はゆらぎが見られる。これをさらに明らかにするために、すべり面の上下の対応する原子間の変位を、転位線に垂直方向にプロットしたものを Fig. 3 に示す。さらにこの結果を微分したものを Fig. 4 に示す。これは一本の刃状転位を無限小転位に分解した際の微小 Burgers vector の分布と考えられ

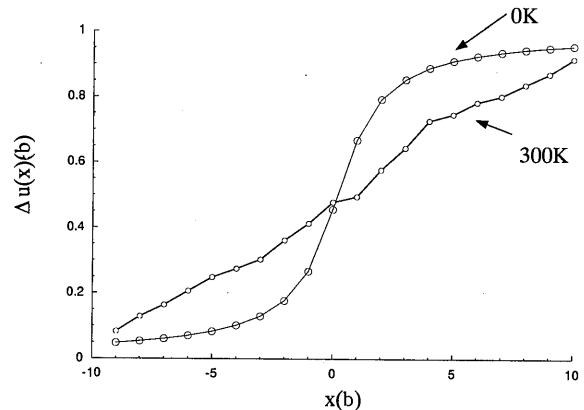


Fig. 3 Displacement between two atomic planes just above and below the slip plane of the model crystal with an edge dislocation

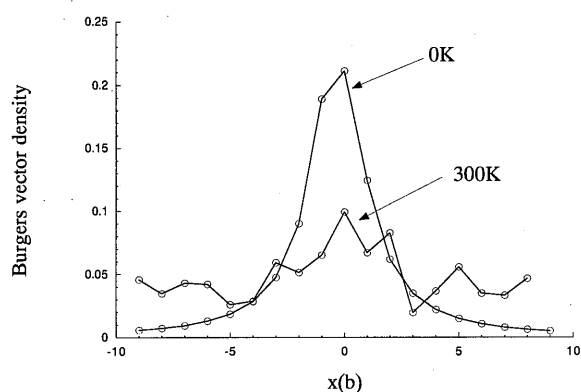


Fig. 4 Differential curve of Fig. 3 (distribution of the infinitesimal Burgers vector of an edge dislocation)

る。0Kにおいては約 $8b$ の範囲に分布しており比較的局在しているが、300Kにおいては分布が大幅に緩やかになっておりゆらぎも著しいことが分かる。このゆらぎは転位線に垂直 (Burgers vector 方向), 平行両方向に亘っているものと考えられるが, 有限温度における転位芯の構造の特徴を与えているものと思われる。

一般に転位芯が拡張している方が, 格子抵抗の大きさは低くなると考えられているので<sup>6)</sup>, この結果は結晶の強度の問題に重要な影響を与えることになる。また, 点欠陥との相互作用においてもこのゆらぎは, 転位芯への点欠陥, たとえば格子間原子が crowdion として吸収される際の重要な因子となっていると考えられる。今後, 応力の影響, 点欠陥との相互作用について詳細な研究を進めていく。

#### 参考文献

- 1) コンピュータシミュレーション (—マクロな系の中の原子運動—) 上田顕著, 朝倉書店, (1990) .
- 2) S. Nose, Mole. Phys., 52 (1984) 255.
- 3) M. W. Finnis and J. E. Sinclair, Phil. Mag. A, 50 (1984) 45. (erratum: Phil. Mag. A, 53 (1986) 161)
- 4) L. de Schepper, D. Segers, L. Dorikens-Vanpraet, M. Dorikens, G. Knuyt, L. M. Stals and P. Moser, Phys. Rev. B, 27 (1983) 5257.
- 5) K. Ohsawa, H. Koizumi, H. O. K. Kirchner and T. Suzuki, Phil. Mag. A, 69 (1994) 171.