

Finnis-Sinclair ポテンシャルを用いた鉄中の欠陥 の計算機シミュレーション

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応用力学研究所

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

青野, 泰久

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

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

<https://doi.org/10.15017/17742>

出版情報：九州大学大学院総合理工学報告．10（4），pp.371-376，1989-03-31．九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鉄中の 欠陥の計算機シミュレーション

蔵 元 英 一*・榎 井 浩 一**
青 野 泰 久*・堤 哲 男*

(昭和63年11月30日受理)

Computer Simulation of Defects in α -Iron Using Finnis-Sinclair Potential

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

Structures of self-interstitial atoms (SIA) and a screw dislocation in α -iron have been studied by computer simulation using Finnis-Sinclair potential. It was found that formation energies for $\langle 110 \rangle$ dumbbell and $\langle 111 \rangle$ crowdion are 3.88 eV and 3.95 eV, respectively. A screw dislocation has three types of core structure, namely, i) unpolarized type, ii) polarized type, and iii) split type core structure. The energy of ii) is slightly lower than the other two types. A SIA has a $\langle 111 \rangle$ crowdion structure in a screw dislocation core, and the interaction energy between a screw dislocation and a $\langle 111 \rangle$ crowdion is 2.4 eV.

1. 緒 言

鉄中の欠陥に関するシミュレーションは長い間 Johnson-Wilson ポテンシャル¹⁾を用いて行われてきたが、二体間ポテンシャルでは多体効果を取り入れることが出来ないで計算結果の精度が疑問視されてきたことは否定できない。最近、Finnis-Sinclair ポテンシャルが開発されてこの点が大幅に改善された²⁾。これより前に Masuda 等^{3), 4)}は tight-binding 近似により d-電子論に基づいたポテンシャル表示を提案しているが、Finnis と Sinclair はこの表示を簡略化して計算に便利な形におしたものである。簡略化したとは言え多体効果を十分取り入れており、二体ポテンシャルの宿命的欠陥、i) Cauchy 条件に対する矛盾、ii) 凝集エネルギーと原子空孔形成エネルギーの分離不可、の二点から解放されている。凝集エネルギーを実験に合わせ原子空孔エネルギーを計算で出しているが reasonable な値が得られている。

本研究においては鉄中の欠陥のうち自己格子間原子 (Self-Interstitial-Atom, 以下 SIA と略記) とらせん転位に着目してその原子構造およびエネルギー等に関

して Finnis-Sinclair ポテンシャルを用いてシミュレーションを行う。これは最近、実験から得られている純鉄の低温照射による軟化現象^{5), 6)}を理解するための基礎情報を得るためである。

2. 計 算 方 法

Fig. 1 にらせん転位を導入する際のモデル鉄結晶の形およびサイズを示す。らせん転位線方向が $\langle 111 \rangle$ 方向である。らせん転位と SIA を同時に導入する時もこの結晶であるが SIA のみを導入する時はサイズを小さくして $20b \times 20b \times 20b$ の大きさにした。境界条件は原則として固定境界条件 (fixed boundary condition) であるが、らせん転位線と交わる前後2枚の (111) 面上の原子を固定すると転位がもし移動する際には束縛することになるので、5原子内側の面上の対応する原子と同じ行動をさせることによって一応自由境界条件 (free boundary condition) としている。らせん転位の歪場の初期値としてはもちろん弾性論の解を用いるが非等方性 (anisotropy) を考慮した解を用いた。モデル結晶中の原子数は膨大な数であるので逐次近似 (iteration) の回数を出来るだけ減少させるために、転位線からの距離に応じて回数を変えてある。例えば領域 B は領域 A の $1/10$ の回数である。各原子の

*高エネルギー物質科学専攻応用力学研究所

**高エネルギー物質科学専攻博士後期過程

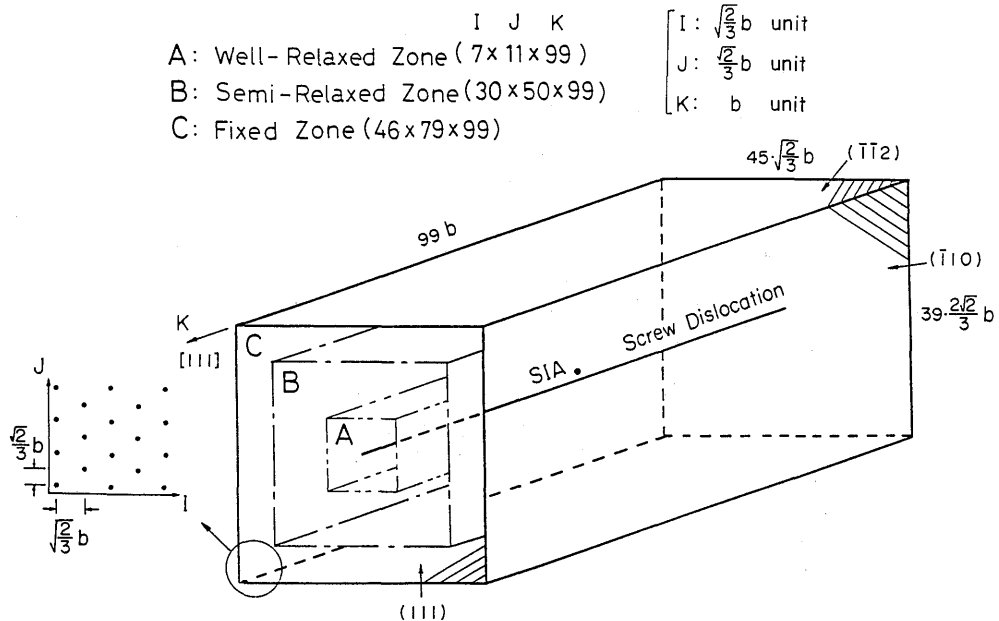


Fig. 1 Model lattice of α -iron and a configuration of a screw dislocation and a SIA.

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) 回繰り返して結晶全体の最安定構造を求める.

3. 計算結果および考察

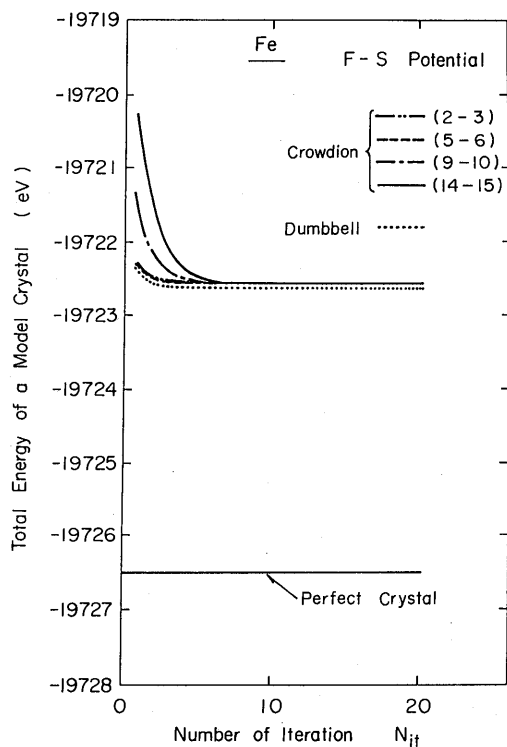
3.1 自己格子間原子 (SIA)

Fig. 2, 3, 4 に SIA に関するシミュレーションの結果を示す. SIA として $\langle 110 \rangle$ dumbbell (ダンベル) と $\langle 111 \rangle$ crowdion (クラウディオン) の2つ型を対象とした. Fig. 2 に緩和過程におけるエネルギーの減少の様子を逐次近似の回数に対して示す. Crowdion の場合が3通りあるのは初期値の取り方が異なるためである. (5-6) は $\langle 111 \rangle$ 原子列上の相隣る5ヶの原子を等間隔の6ヶの原子で置き換えて crowdion の初期値としたという意味である. 収れん回数20回までにはいずれの場合もよく収束しており安定な配置が得られた. 図中に示すように完全結晶とのエネルギー差から形成エネルギーは $\langle 110 \rangle$ dumbbell が 3.88eV, $\langle 111 \rangle$ crowdion が 3.95eV となり前者が安定

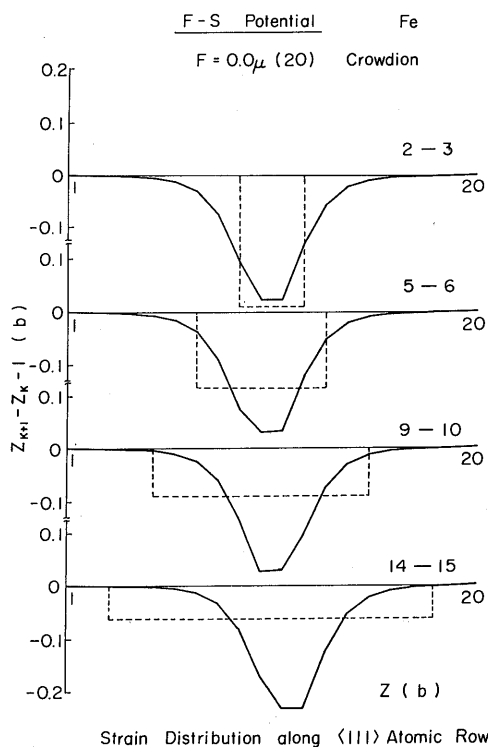
であることがわかる. Fig. 3 に $(\bar{1}\bar{1}2)$ 面上で見た $\langle 110 \rangle$ dumbbell (左) と $\langle 111 \rangle$ crowdion (右) の原子配置を示す. さらに Fig. 4 に $\langle 111 \rangle$ crowdion の歪分布を $\langle 111 \rangle$ 原子列上の隣接原子間距離の変化により示す. 値が負であるのは原子間距離が縮まっていることを示し当然のことである. Crowdion の初期値の取り方に依らず最終安定構造がほぼ同じであることは結果の信頼性が高いことを示している. 大きな歪の部分の広がり約5原子であることがわかる.

3.2 らせん転位

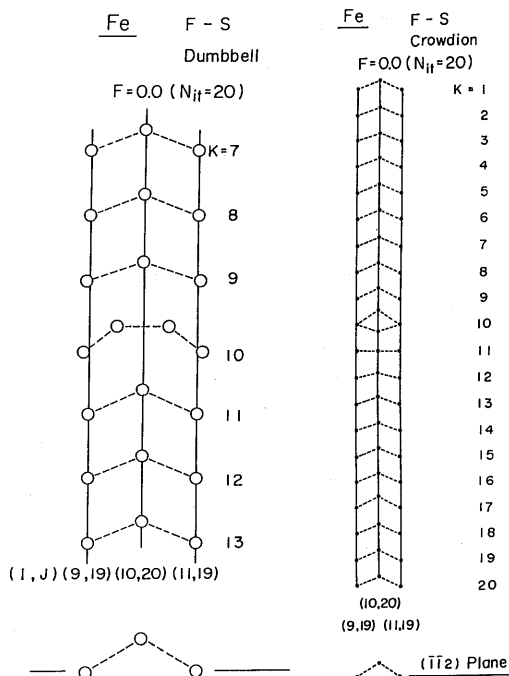
体心立方金属中のらせん転位は低温の変形機構に重要な役割を果たすのでこれまでに数多くの計算機シミュレーションがなされてきている^{4), 7), 8), 9), 10)}. らせん転位芯の構造としては3つの型がこれまでに提唱されている. すなわち a) unpolarized type (非分極型), b) polarized type (分極型), c) split 型 (分離型) の3つである. SIA の場合と同様に先にエネルギーの緩和の様子を Fig. 5 に示す. 点欠陥の場合に比べて転位の場合には線状であるので関与する原子数が多く収れん速度が遅くなっているのがわかる. それでも3つ



←
Fig. 2 Relaxation process of a model crystal containing a SIA observed from the total energy change.



↑
Fig. 4 Strain distributions of a $\langle 111 \rangle$ crowdion along $\langle 111 \rangle$ atomic row for various initial structures of a crowdion.



←
Fig. 3 Atomic structure of a $\langle 110 \rangle$ dumbbell and a $\langle 111 \rangle$ crowdion.

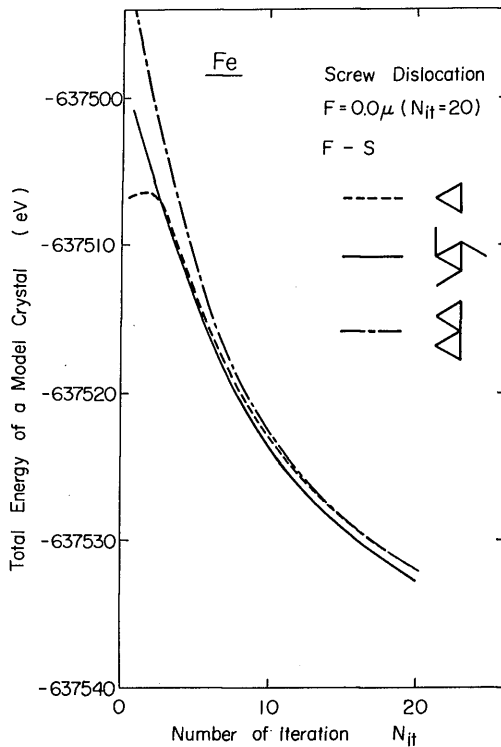
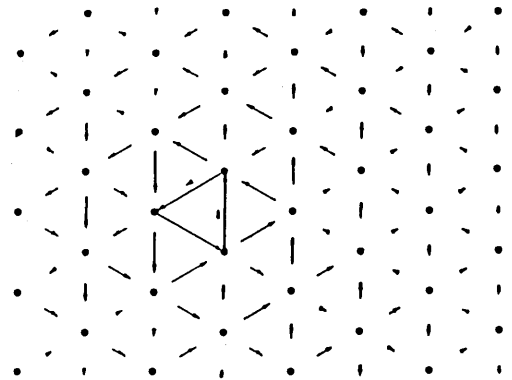
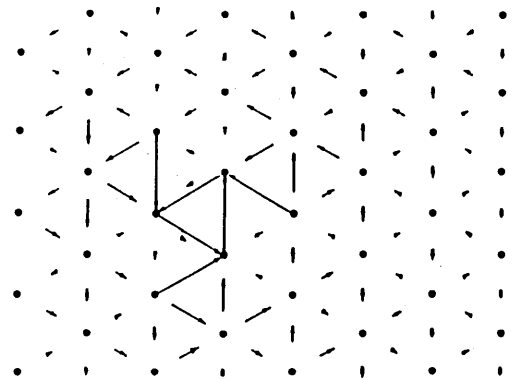


Fig. 5 Relaxation process of a model crystal containing a screw dislocation observed from the total energy change.

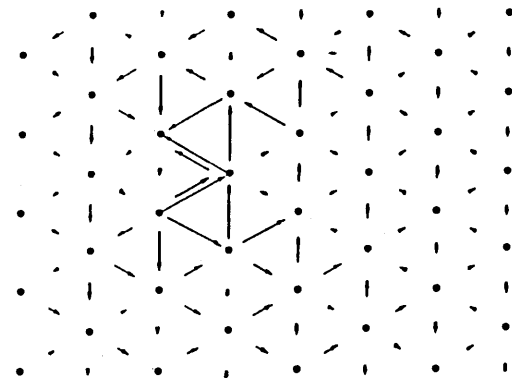
の型の芯構造のエネルギーの関係は判明していると考えられる。すなわち b) の型が他の2つより少し低くなっている。Fig. 6 に実際の芯構造を Vitek⁷⁾ の differential displacement representation により示す。これらの図で矢印は隣接する2本の $\langle 111 \rangle$ 原子列の相対変位を示す。らせん転位の回りを1周すれば定義から1原子長 b だけずれなければならないので隣接原子列を結ぶ矢印は $b/3$ の大きさを持っていることがわかる。Unpolarized type は弾性論の解を初期値にした時得られる芯構造で弾性論の解に近くほぼ等方的に見える。しかし、初期値も異方性弾性論の解を用いており(鉄の anisotropy factor = 2.32), 厳密には異方的であると考えられる。Polarized type は unpolarized type 芯構造の中心の3本の原子列に $b/6$ 程度の $\langle 111 \rangle$ 方向の変位を与えるか又は、外力を負荷して1原子距離移動させると得られる。風車の形に似ているところから windmill type とも言われる。図に示さ



(a) Unpolarized type



(b) Polarized type



(c) Split type

Fig. 6 Three kinds of core structures of a screw dislocation.

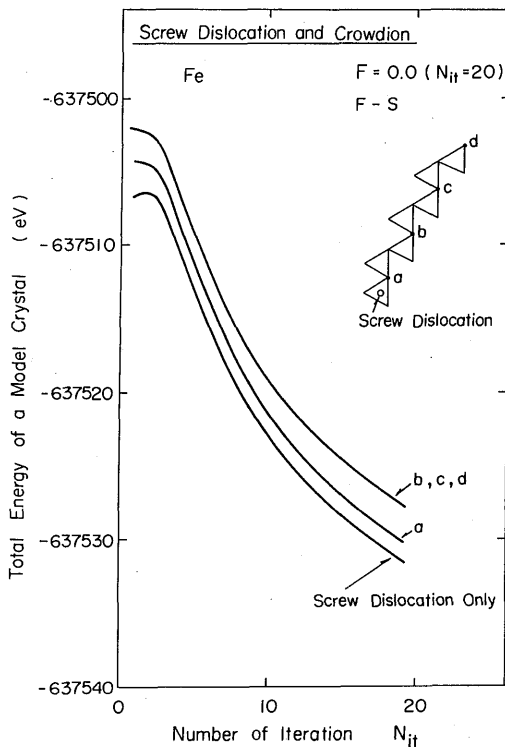


Fig. 7 Simulation for the model crystal which contains both a screw dislocation and a $\langle 111 \rangle$ crowdion.

れているものは右巻きの風車であるが、矢印の付ける位置を逆にした左巻きのものも存在し対称性から同じエネルギーを持っていることがわかる。従ってこの構造は二重縮退の構造である。Split type は隣り合う2つの安定位置の中間に転位芯を置いて緩和すると得られる。この構造は準安定でありパイエルス・ポテンシャルの山頂が凹形をしている (camel hump type, らくだのこぶ形) ことを示している。このことは低温塑性変形にとって重要な意味を持つことになる⁸⁾。

3.3 らせん転位と $\langle 111 \rangle$ crowdion

Fig. 7, 8, 9 にらせん転位と $\langle 111 \rangle$ crowdion が共存する場合のシミュレーションの結果を示す。Fig. 7 は緩和中のエネルギーの減少の様子を示す。 $\langle 111 \rangle$ crowdion の置く場所はらせん転位芯の中の a 位置の他 b, c, d と図中に示す4サイトについて行った。a 位置にある時のエネルギーが他に比べて低くらせん転位と $\langle 111 \rangle$ crowdion の結合エネルギーは約 2.4eV

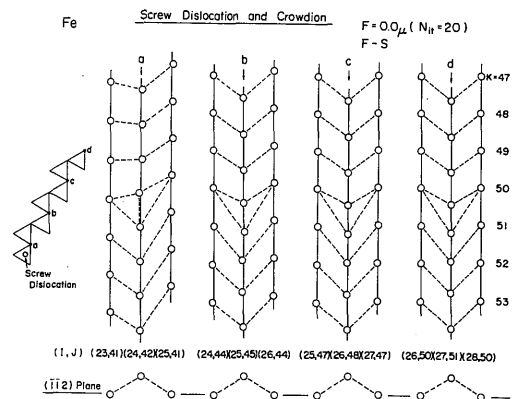


Fig. 8 Structures of a $\langle 111 \rangle$ crowdion viewed from a $\langle \bar{1}\bar{1}2 \rangle$ direction for various cases where a crowdion is located at different distances from a dislocation.

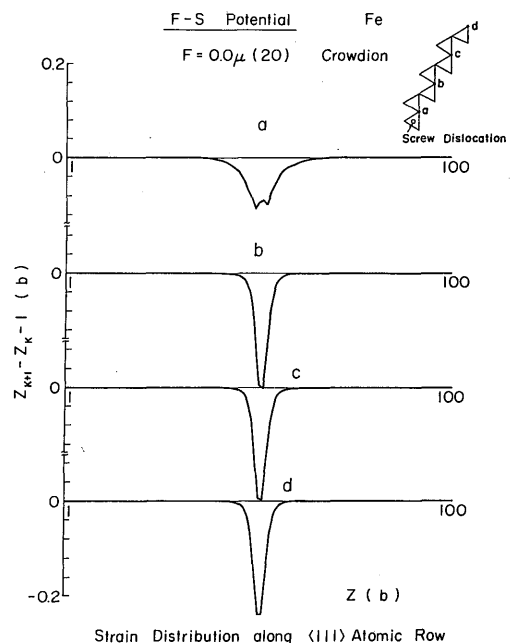


Fig. 9 Strain distributions of a $\langle 111 \rangle$ crowdion along $\langle 111 \rangle$ atomic row for various cases where a crowdion is located at different distances from a dislocation.

であることがわかる。Fig. 8 は $\langle \bar{1}\bar{1}2 \rangle$ 面上の原子配置であり a 位置のみが転位芯に存在しているために左右の原子列の非対称性がはっきりしているが、b, c,

d 位置ではすでに転位の歪の影響は小さくなっていることがわかる。この図では判定しにくい各位置での crowdion の歪分布 ($\langle 111 \rangle$ 方向の原子間距離の分布) を Fig. 9 に示すと、転位芯の a 位置のときは b, c, d 位置の場合に比べて歪分布がひろがっていることがわかる。これは転位線上に3つのキングが発生している構造になっているためであるがこれについては他の論文を参照されたい^{11), 12)}。このことは低温の照射軟化を説明する上に重要な役割を果たすことになる。b, c, d 位置における歪分布のひろがり matrix 中での $\langle 111 \rangle$ crowdion 本来の歪分布 (Fig. 4) に近いことから転位の歪場の影響は Burgers vector 方向の crowdion には転位芯を除いてあまり大きくないことがわかる。以上、鉄中の欠陥の基礎的性質についてのみ述べたが応力下での挙動に関し他にゆずる¹²⁾。

参 考 文 献

- 1) R. A. Johnson and W. D. Wilson; 'Interatomic Potentials and Simulation of Lattice Defects', ed. P. C. Gehlen, J. R. Beeler Jr. and R. I. Jaffee (1972) 301.
- 2) M. W. Finnis and J. E. Sinclair; Phil. Mag. A, Vol. 50 No. 1, (1984) 45. (Erratum; Phil. Mag. A, Vol. 53 No. 1, (1986) 161).
- 3) K. Masuda, K. Kobayashi, A. Sato and T. Mori; Phil. Mag. B, Vol. 43 No. 1, (1981) 19.
- 4) A. Sato and K. Masuda; Phil. Mag. B, Vol. 43 No. 1, (1981) 1.
- 5) Y. Aono, E. Kuramoto, H. Abe and K. Kitajima; Proc. Yamada Conf. IX on Dislocations in Solids, Tokyo (1984) 207.
- 6) Y. Aono, E. Kuramoto, D. Brunner and J. Diehl; Materials Science Forum, Vol. 15-18, (1987).
- 7) V. Vitek, R. C. Perrin and D. K. Bowen; Phil. Mag. 21, (1970) 1049.
- 8) E. Kuramoto, Y. Aono and T. Tsutsumi; Cryst. Res. Tech., Vol. 19, (1984) 331.
- 9) E. Kuramoto, Y. Aono, S. Yamamoto, K. Makii and T. Tsutsumi; Trans. ISIJ, Vol. 28, (1988) 883.
- 10) S. Takeuchi; Phil. Mag. A, Vol. 39 No. 5, (1979) 661.
- 11) K. Makii, T. Tsutsumi, Y. Aono and E. Kuramoto; Proc. 8th Int. Conf. on Strength of Metals and Alloys, Tampere, (1988) 179.
- 12) K. Makii, T. Tsutsumi, Y. Aono and E. Kuramoto; in presentation to Phil. Mag.