

鉄中の転位ループの挙動の計算機シミュレーション

蔵元, 英一

九州大学応用力学研究所 : 教授

堤, 哲男

九州大学応用力学研究所 : 文部技官

<https://doi.org/10.15017/4743997>

出版情報 : 應用力學研究所所報. 78, pp.99-108, 1995-10. 九州大学応用力学研究所
バージョン :
権利関係 :



鉄中の転位ループの挙動の計算機シミュレーション

蔵元英一* 堤哲男**

概 要

鉄中の転位ループについて計算機シミュレーションを行い、構造、エネルギーなどを求めた。用いた原子間ポテンシャルは Finnis-Sinclair potential で、ループの種類は4種類であり、 $a/2 \langle 111 \rangle \{101\}$, $a/2 \langle 111 \rangle \{111\}$, $a \langle 100 \rangle \{001\}$, $a \langle 100 \rangle \{101\}$ の順にエネルギーが高くなった。したがって格子間原子一個あたりの結合エネルギーはこの順に 2.01 eV, 1.87 eV, 1.52 eV, 1.41 eV と低下した。また、照射下でその運動特性が問題にされているので種々の応力下での挙動についても調べられた。通常の応力ではループの運動は見られなかったが、ループの中心に対して軸対称な剪断応力を負荷した場合にはループの運動が見られた。

Key words: iron, dislocation loop, computer simulation, Finnis-Sinclair potential, motion of dislocation loop

1. はじめに

高温重照射下における材料の挙動の研究において、ボイドスエリングのみならず転位、転位ループの原子構造および動的性質を明らかにすることは、照射組織発達の全体像を理解する上で必要不可欠である。特に転位ループの動的挙動は、最近 production bias の視点からも注目を浴びている。このような状況にあって、ここでは鉄中の転位ループの静的、動的挙動を計算機シミュレーションにより明らかにすることを目的として研究を進める。鉄中の転位ループに関しては以前から $\langle 110 \rangle$ dumbbell の集合体が $\{110\}$ 面上に形成された後、 $\langle 111 \rangle$ 方向、または $\langle 100 \rangle$ 方向に緩和して2種類の転位ループが形成される可能性が Bullough らにより指摘されている¹⁾。実験においてもこの2種類は観察されており、またその動的挙動、直線状の運動も観察されている。一方、計算機シミュレーションも、最近原子間ポテンシャルの進歩、計算速度、メモリーの増大などその性能を急速に伸ばしている。特に原子間ポテンシャルに関しては、いわゆる EAM タイプ (Embedded Atom Method) のものが、比較的簡単に計算時間も短くよく用いられている。ここでは Finnis-Sinclair potential²⁾ を用いて静的な計算を行うことに

*九州大学教授、応用力学研究所

**文部技官、九州大学応用力学研究所

する。

2. 計算方法

図1に示すようなモデル鉄格子(約 $60 \times 60 \times 60$ 格子の大きさを持つ)を計算機中に作成し、ほぼ中央部に図に示すような種々の大きさの転位ループ(格子間原子19個まで)を導入し十分緩和する。この場合ループの乗っている面は $\{110\}$ であり、転位ループは面に垂直な $\langle 110 \rangle$ dumbbellの集合体として形成されている。実際には $\langle 111 \rangle$ crowdionの集合体と $\langle 100 \rangle$ dumbbellの集合体の2通りに分かれる。緩和の方法はいわゆるNewton-Raphson法であり、静的な緩和方法である。また、用いたポテンシャルはいわゆるN-Body potentialであるFinnis-Sinclair potential²⁾である。ループの配位としてはこの他にも $\{100\}$ 面に垂直な $\langle 100 \rangle$ dumbbellの集合体、 $\{111\}$ 面に垂直な $\langle 111 \rangle$ crowdionの集合体の計4通りを考慮した。なお、境界条件としては固定境界条件を採用した。(転位についてのシミュレーションに関しては前論文を参照のこと³⁾)

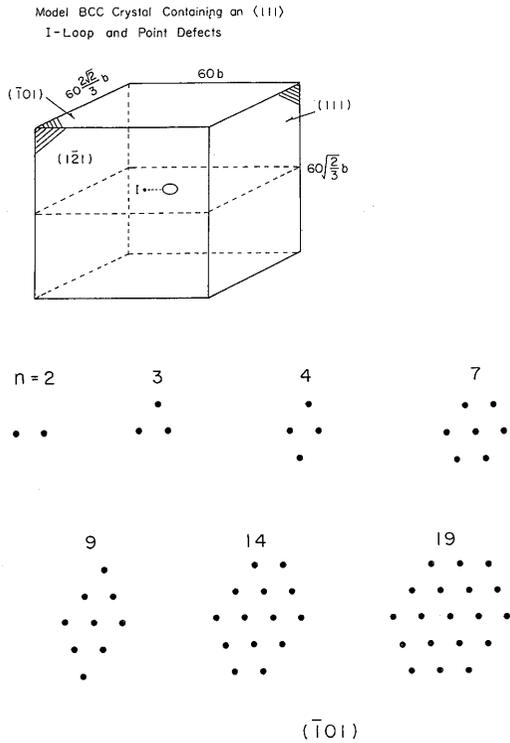


図1 鉄中の $\{110\}$ 面上の $a/2 \langle 111 \rangle$ -I-loopのシミュレーション

3. 計算結果および考察

図2に $\{110\}$ 面に垂直な $\langle 110 \rangle$ dumbbell の集合体を緩和して得られた $\langle 111 \rangle$ crowdion の集合体、すなわち $a/2 \langle 111 \rangle$ I-loop (格子間原子型転位ループ) の原子の配列を示す。この図はループの乗っている面を垂直方向から見たものである。同様に $\{110\}$ 面に乗っている $\langle 100 \rangle$ dumbbell の集合体、すなわち $a \langle 100 \rangle$ I-loop の構造も示す。これは $\langle 110 \rangle$ dumbbell の集合体の緩和からは得られなかった。

図3に $a/2 \langle 111 \rangle$ I-loop を $\{110\}$ 面に平行な方向から見た構造を示す。刃状転位の構造をしていることが分かるが、ループの位置をわずかに構成している crowdion の方向に下向きに $b/10$ ほどずらすことにより図の下にあるような構造になることも判明した。むしろこの方が通常、刃状転位の安定構造と考えられている。両者のエネルギーにはほとんど差が見られなかった。 $\langle 111 \rangle$ crowdion の集合体はすなわち $a/2 \langle 111 \rangle$ I-loop と考えられるが、点欠陥としての性質から転位としての性質への移り変わりについてはこれまでにあまり詳しく考えられていない。そこで集合体の大きさが増すにつれてループの中心部に位置する $\langle 111 \rangle$ crowdion 上の原子間隔が変化しているかどうかを調べてみた。その結果を図4に示している。この図で曲線が下に下がっているところは原子間の距離が縮まっていることを示しているが、その縮まり方がループの大きさと共に変わっていること、すなわち single crowdion の時に比べて転

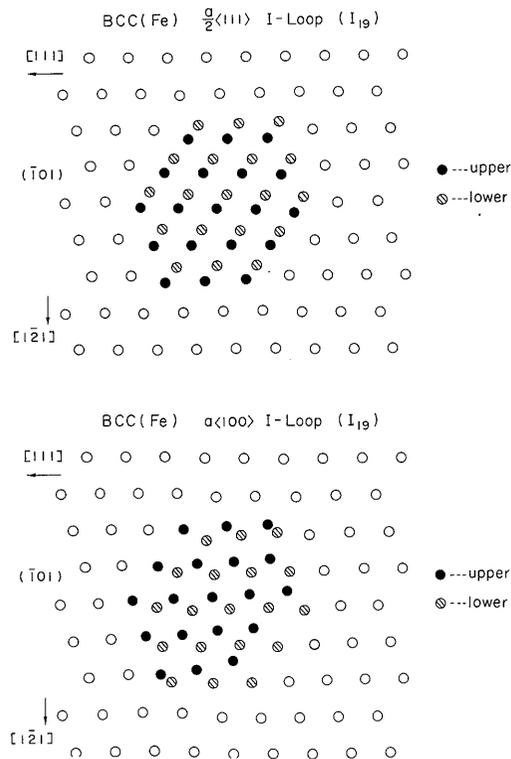


図2 鉄中の $\{110\}$ 面上の $a/2 \langle 111 \rangle$ I-loop および $\{110\}$ 面上の $a \langle 100 \rangle$ I-loop の原子配列

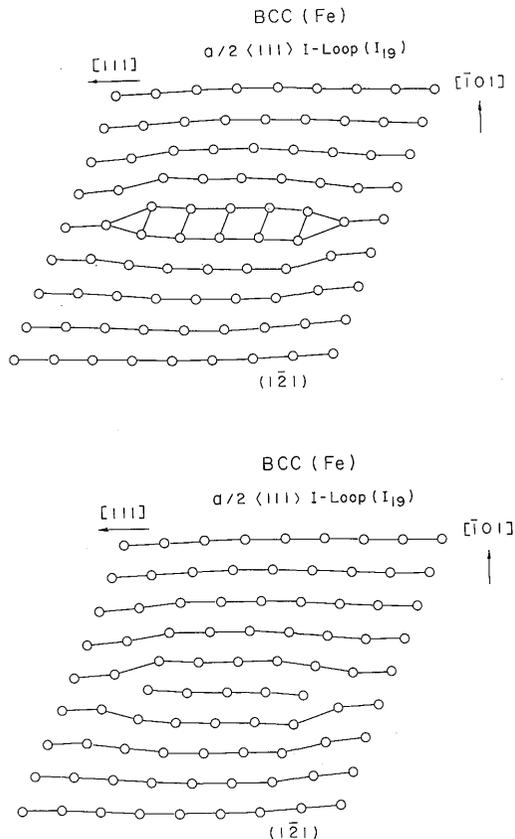


図3 鉄中の $\{110\}$ 面上の $a/2\langle 111 \rangle$ I-loopの原子構造を $\{110\}$ 面に平行な方向から見た図(下の図は転位ループの位置を下向きに $b/10$ ほどずらして入れたもの)

位ループの性格を帯びてくるにしたがって局在性が弱まっていることが分かる。

図5には $\{110\}$ 面に乗っている $\langle 100 \rangle$ dumbbellの集合体、すなわち $a\langle 100 \rangle$ I-loopの計算のモデル格子および集合体の形を示す。緩和して得られた原子構造の一例を図6に示す。乗っている面に垂直および平行に見た構造である。

また、図7にはループの大きさに対して、格子間原子一個当りの結合エネルギーが増加していく様子を、3つのループの場合に対して示す。すなわち、上から $\{110\}$ 面上の $a/2\langle 111 \rangle$ I-loop、 $\{111\}$ 面上の $a/2\langle 111 \rangle$ I-loop、 $\{100\}$ 面上の $a\langle 100 \rangle$ I-loopである。3つのうちでは $\{110\}$ 面上の $a/2\langle 111 \rangle$ I-loopが最も結合エネルギーが大きく安定であることが分かる。しかし現実のFe、Fe-Cr合金では $\{110\}$ 面上の $a/2\langle 111 \rangle$ I-loop、 $\{100\}$ 面上の $a\langle 100 \rangle$ I-loopの両者が観測されている⁴⁾。

表1に形成エネルギーと結合エネルギーを4つのループの場合についてまとめて示す。つぎに転位ル

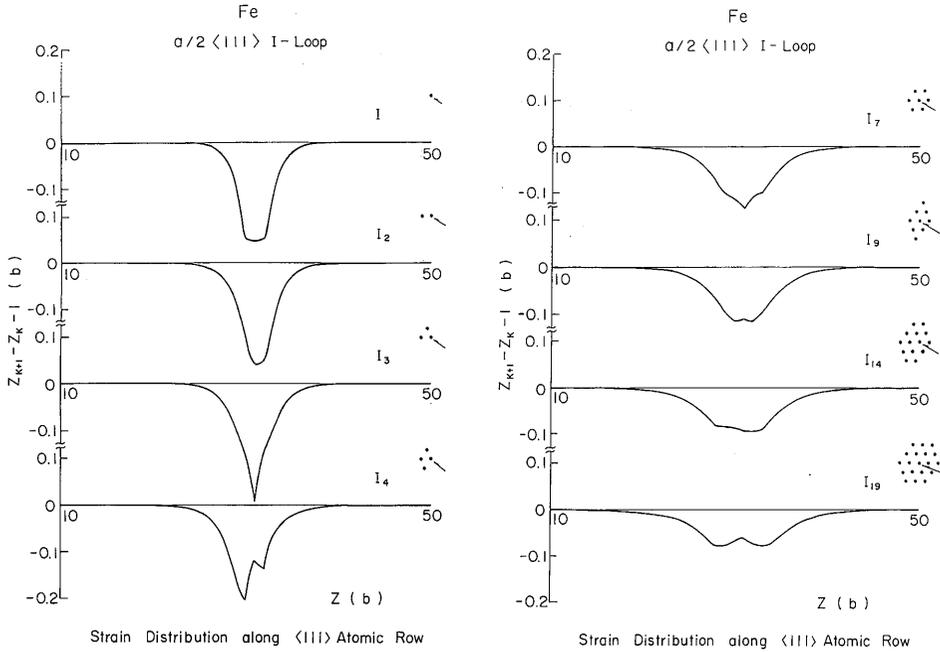


図4 鉄中の $\{110\}$ 面上の $a/2\langle 111 \rangle$ -I-loop の中心の $\langle 111 \rangle$ 原子列上の原子間隔の変化

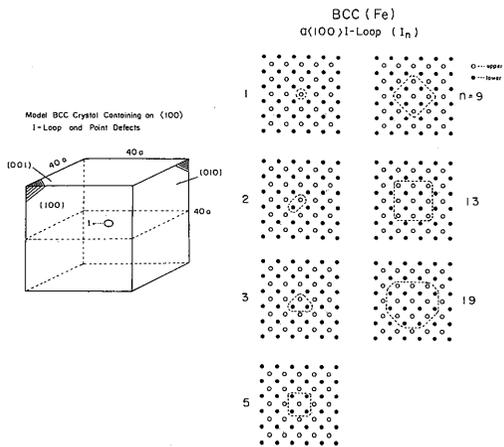


図5 鉄中の $\{100\}$ 面上の $a\langle 100 \rangle$ -I-loop のシミュレーション

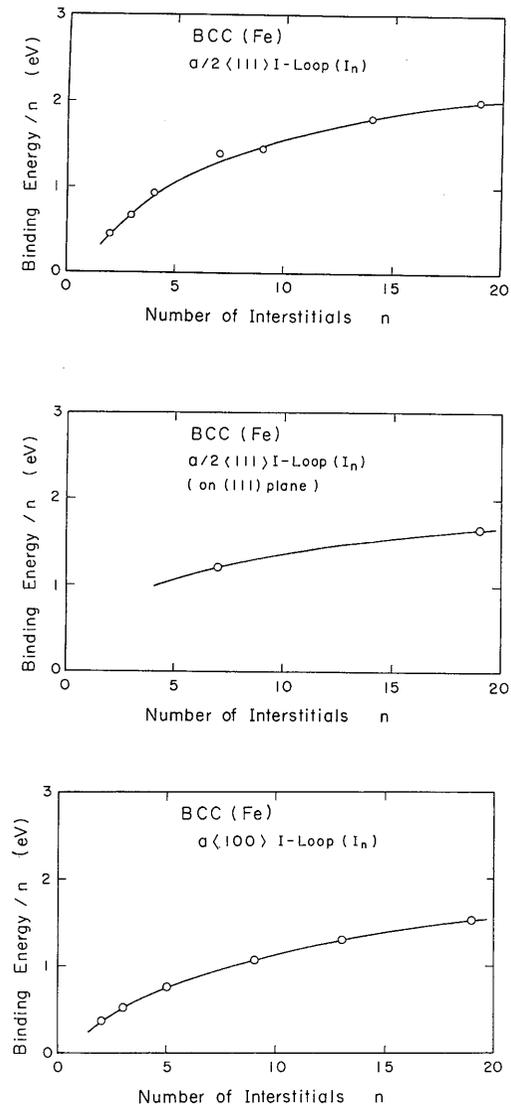


図7 原子一個あたりの結合エネルギーの転位ループを構成する原子数の増加による変化

表1 鉄中の転位ループの原子一個当りの結合エネルギーのループの種類に対する依存性

Energy of Dislocation Loops in Iron, I₁₉

		E _b / n
a/2<111>	($\bar{1}01$)	36.7 eV 2.01 eV
a/2<111>	(111)	39.4 eV 1.87 eV
a<100>	(00 $\bar{1}$)	45.0 eV 1.52 eV
a<100>	($\bar{1}01$)	47.0 eV 1.41 eV

Behaviour of I-Loop under Stress

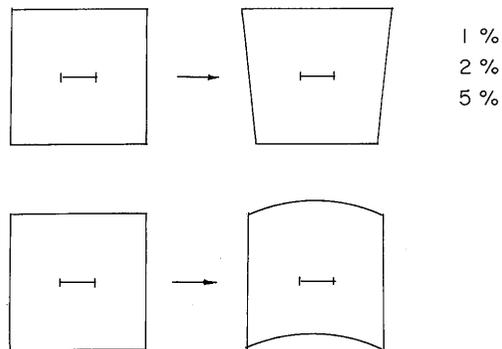


図8 鉄中の{110}面上の a/2<111>I-loop に一様な応力を負荷した時の反応

Interaction between Dislocation Loop in Fe

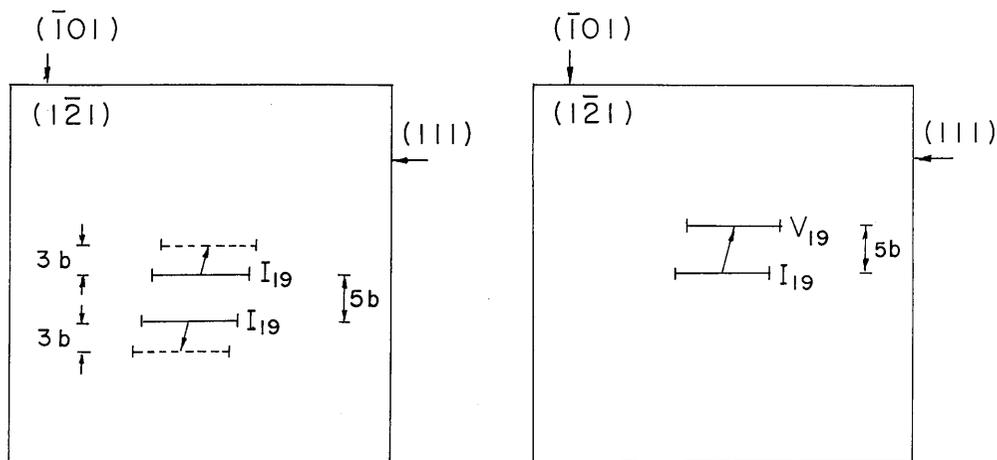


図9 鉄中の $\{110\}$ 面上の $a/2\langle 111 \rangle$ -loop の近傍に他の転位ループ (格子間原子型、原子空孔型) を近くにおいた場合の反応

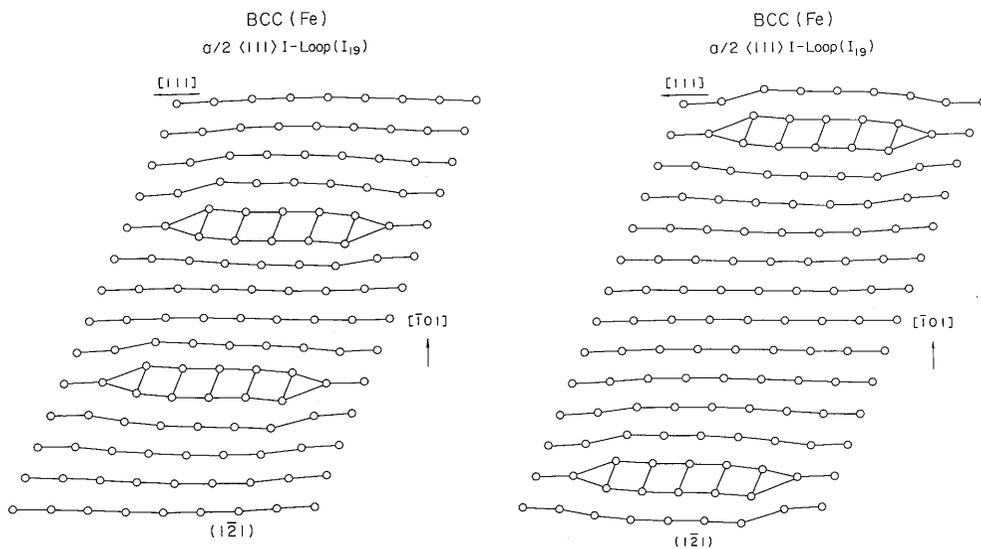


図10 鉄中の $\{110\}$ 面上の $a/2\langle 111 \rangle$ -loop の近傍に他の転位ループ (格子間原子型) を近くにおいた場合の転位ループの運動の原子構造

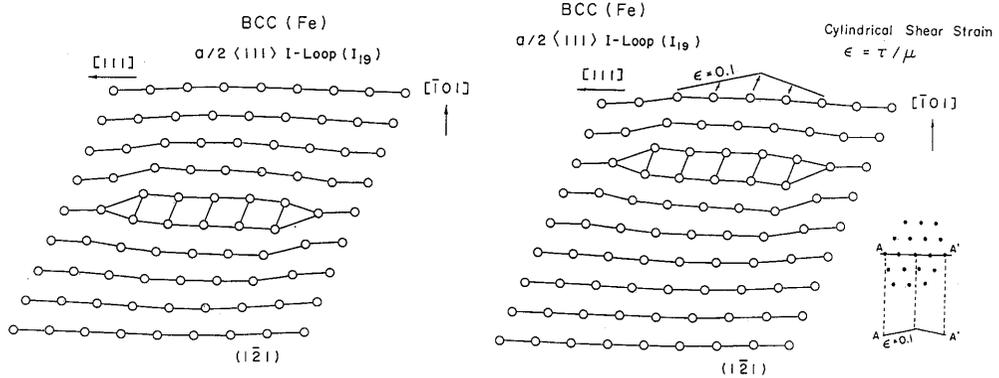


図11 鉄中の $\{110\}$ 面上の $a/2 \langle 111 \rangle$ I-loop に cylindrical shear をかけた場合の転位ループの運動の原子構造図

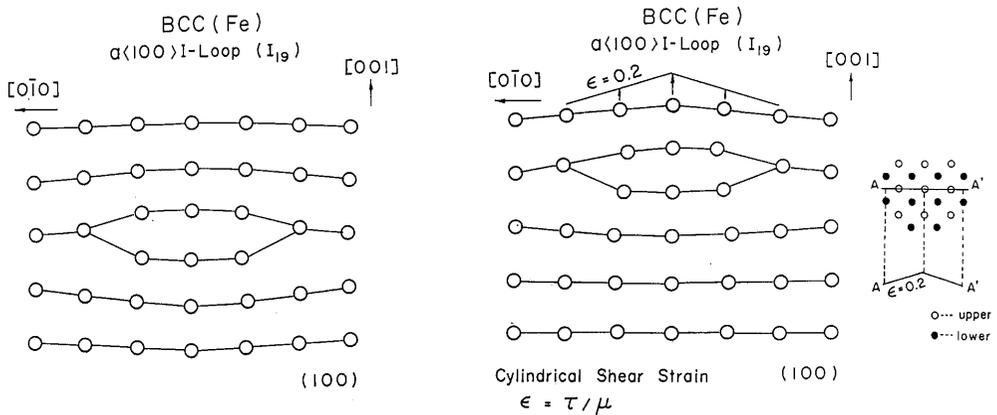


図12 鉄中の $\{100\}$ 面上の $a \langle 100 \rangle$ I-loop に cylindrical shear をかけた場合の転位ループの運動の原子構造図

参考文献

- 1) B. L. Eyre and R. Bullough: Phil. Mag., 12 (1965) 39.
- 2) M. W. Finnis and J. E. Sinclair: Phil. Mag. A, 50 (1984) 45 and Phil. Mag. A, 53 (1986) 161 (erratum).
- 3) E. Kuramoto and T. Tsutsumi: J. Nucl. Mat., 212-215 (1995) 175.
- 4) C. H. Woo and B. N. Singh: Phil. Mag. A, 65 (1992) 889.
- 5) M. Kiritani: private communication.