

転位ループの動的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 : 助教授

大沢, 一人
九州大学応用力学研究所 : 助手

堤, 哲男
九州大学応用力学研究所 : 文部技官

小柳, 万博

<https://doi.org/10.15017/4744040>

出版情報 : 應用力學研究所所報. 82, pp.213-219, 1997-11. 九州大学応用力学研究所
バージョン :
権利関係 :



転位ループの動的挙動の計算機シミュレーション

蔵 元 英 一* 大 沢 一 人**
堤 哲 男*** 小 柳 万 博****

概 要

鉄モデル結晶中に格子間原子型転位ループを〈111〉クラウディオンの構成し、軸対称の剪断応力の下での運動を観察した。転位ループの持つバーガースベクトルの分布は基本的には直線状刃状転位のバーガースベクトル分布と差がないが、ループサイズが小さくなるとなめらかさを失う。転位ループのすべり運動に必要な応力、すなわちループのパイエルス応力はループサイズの増大とともに減少し、直線状刃状転位のパイエルス応力に近づく。

Key words: iron, dislocation loop, Peierls stress, Burgers vector, computer simulation, Finnis-Sinclair potential

1. は じ め に

核融合、核分裂炉のように高温重照射環境下で使用する材料中では発生した照射欠陥の移動、集合、再結合などにより材料特性の変化が生じ、寸法変化(ボイドスエリング)、照射劣化などの重要な問題に発展することはよく知られている。発生した照射欠陥のすべてが再結合するわけではないので、原子空孔、格子間原子がそれぞれ別行動をとることになり、種々の集合体が形成されることになる。すなわち、この別行動をとらせる原因であるバイアス効果が非常に重要な役割を果たしている。通常このバイアス効果を引き起こす原因として、転位による点欠陥吸収効率が格子間原子と、原子空孔に対して非対称である、すなわち、前者の方が大きいことによる転位バイアスが考えられている。さらに最近では、カスケード形成時に格子間原子集合体が放出されて、一次元運動を行いシンクへ吸収されることによる、いわゆる、production bias も提案されている。シンクが転位である場合には一種の転位バイアスであるとも考えられる。微小転位ループの一次元運動は面心立方、体心立方両金属において電子顕微鏡観察でし

*九州大学教授、応用力学研究所

**九州大学助手、応用力学研究所

***文部技官、九州大学応用力学研究所

****九大総理工博士課程(現、西テレ情報サイエンス)

ばしば観察されている¹⁾。これは production bias において重要な現象であるのみならず、格子間原子という点欠陥が集合して転位へと移行する過程において、一次元運動に対する格子抵抗がどのように発生してくるかという大変基本的に重要な問題を含んでいる。一般に点欠陥と転位は別な格子欠陥として扱われ、これまでもその学問としての発展過程も独立したものであったが、点欠陥集合体の運動という現象を前にして、統一的理解が要求されるという事態が発生している。この問題は連続体の中では発生しないものであり、格子中ではじめて現れるものである。転位ループのサイズを小さいところから大きいところまで連続的に変えて調べる必要があるのでかなり大きなモデル結晶が要求される。そのためには計算機の性能向上が不可欠であり、今日の急速な計算機技術の進歩があつてはじめて可能になる研究である。

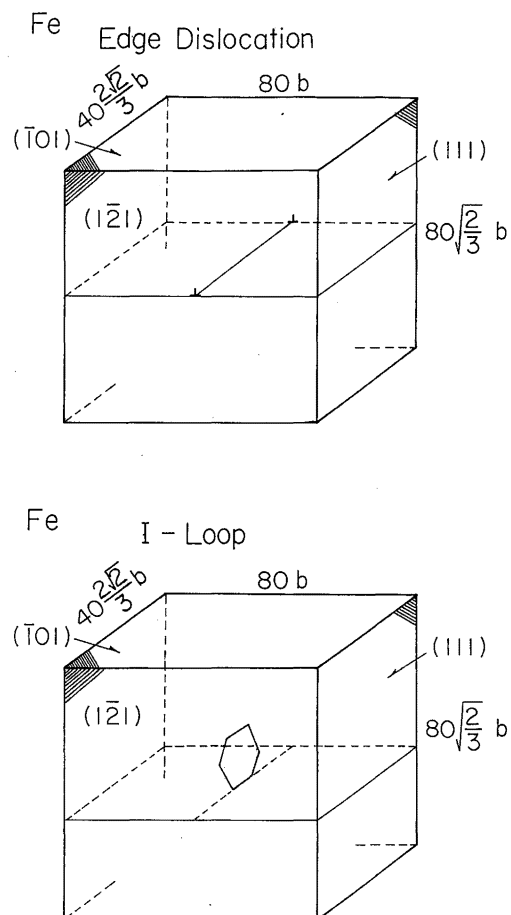


図1 転位ループおよび直線状刃状転位を含む鉄モデル格子

2. 計 算 方 法

これまでに直線状の転位についてのパイエルス応力の計算は数多く行われてきており、その長い歴史は固体の強度の基礎学問の重要な一頁を形成している。最も多く行われてきたのが、体心立方金属中のらせん転位のパイエルス応力の計算である。その理由は、現実結晶の強度がパイエルス応力で支配されている最も良い例が体心立方金属であるからである²⁾。初期の頃は、転位の中心位置を変えて位置エネルギーを計算し、転位に対するパイエルスポテンシャルを求め、その最大傾斜からパイエルス応力を決定するという手続きを行った。しかし、この方法には転位の中心位置を固定しなければならないという問題があり、その後はこの方法は用いられなくなり、転位を含んだモデル結晶に直接外部から剪断応力を負荷して、転位の運動を観察しパイエルス応力を決定するという方法が主流になった³⁾。本論文でもこの方法を踏襲して転位ループのパイエルス応力の決定を試みる。

鉄中の格子間原子型転位ループについて計算を行う。モデル格子と転位ループおよび直線状刃状転位の配置を図1に示す。転位ループのサイズ依存性を調べなければならないのでモデル格子は十分大きくとる必要がある。原子間のポテンシャルとしてはEAM (embedded atom method) タイプのポテンシャルを採用し、この場合はFeに対するFinnis-Sinclair potential⁴⁾を用いた。転位ループは $\langle 111 \rangle$ クラウディオンの集合体として図1に示すように六角形を採用した。この場合6本のセグメントはいずれも $\{110\}$ 面上に乗っている。直線状刃状転位のすべり面は $\{110\}$ 面であるので、転位ループの場合にも $\{110\}$ 面上をすべると考えるのが妥当である。応力を負荷する前にBurgers vectorの分布を調べて直線状刃状転位と比較してみる必要がある。軸対称の剪断応力の負荷の仕方は図2に示すように6本の各セグメントに均しい剪断応力が負荷されるようにする。

3. 計算結果と考察

転位ループの6本のセグメントの内、図1に示す $\{110\}$ 面上に乗っているもののBurgers vector分布を調べた結果を I_{19} , I_{61} , I_{127} , I_{217} について図3から図6に示す。それぞれの図の中、上の図は変位を

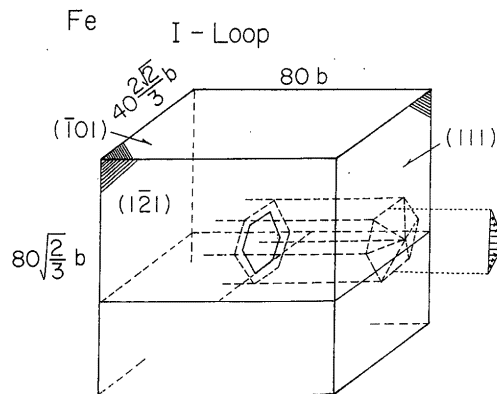


図2 転位ループと軸対称剪断応力の負荷

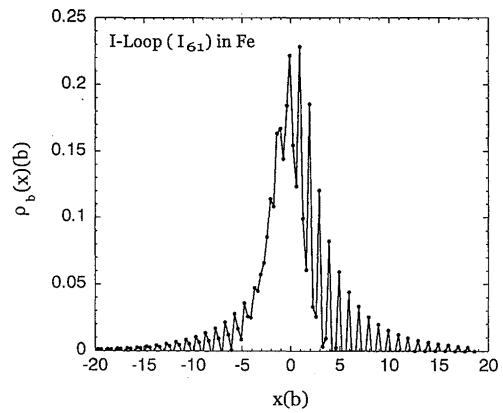
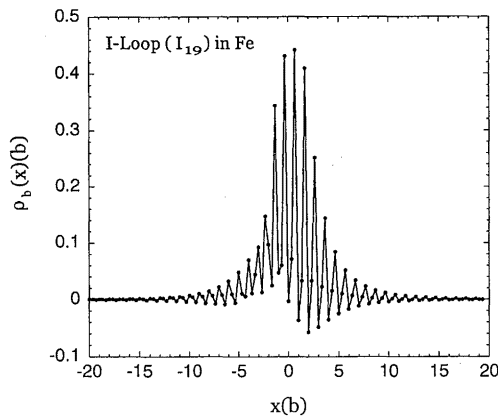
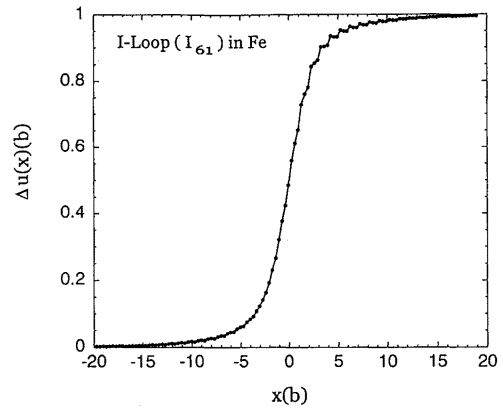
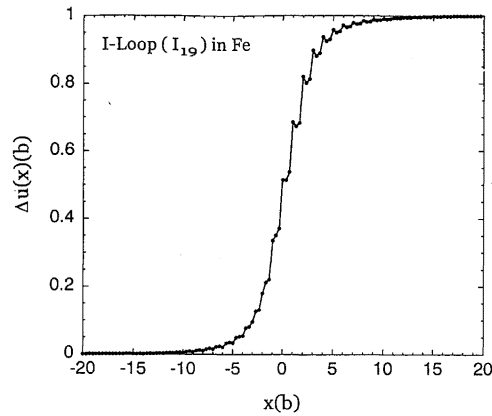


図3 鉄中の転位ループ I_{19} の Burgers vector の分布 図4 鉄中の転位ループ I_{61} の Burgers vector の分布

表し、下の図はその微分曲線である。また、図7に直線状刃状転位の同様の結果を示す。ループサイズが大きくなるにつれて微分曲線がなめらかになり、直線状刃状転位の分布に近づくことがわかる。ループサイズが小さい時になめらかさを失う理由はあまり簡単ではないが、本来、刃状転位線方向である $\langle 112 \rangle$ 方向の原子の並びは、図8に示すように3-1-3-1のジグザグ模様を繰り返している。 $\langle 111 \rangle$ クラウディオンをこのパターンで配置することにより転位ループを構成しているわけであるが、ループサイズが小さく、すなわちセグメントの長さが短いときには、個々のクラウディオンがその歪み分布を保持したまま、中心位置がまだジグザグパターンの上に乗っているために微分曲線が不規則になると考えられる。これに対して直線状刃状転位の場合には、 $\langle 111 \rangle$ クラウディオンの半無限の集合ではあるが、十分に緩和された結果、個々のクラウディオンの中心位置および歪み分布が $\langle 112 \rangle$ 方向に一樣になる傾向が現れた結果、なめらかな微分曲線が得られているものと考えられる。

軸対称な剪断応力を負荷した場合、転位ループの移動が観察された。移動距離は転位ループの中心の

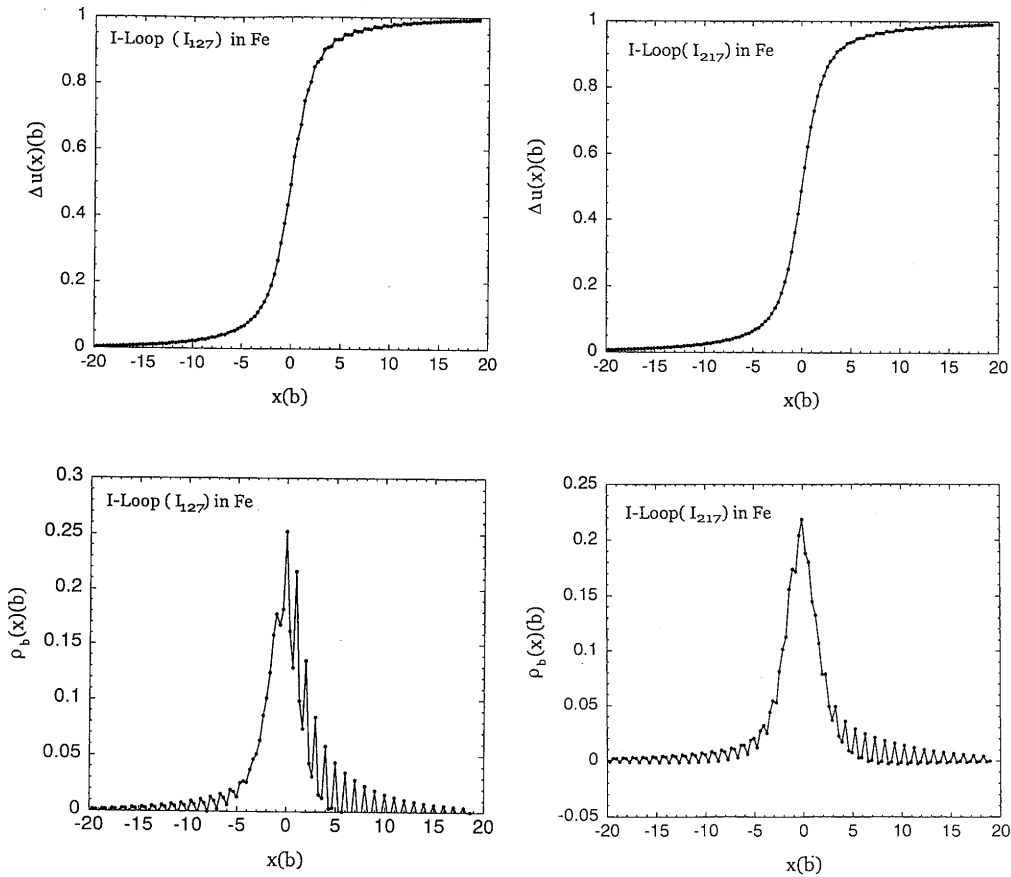


図5 鉄中の転位ループ 1_{127} の Burgers vector の分布 図6 鉄中の転位ループ 1_{217} の Burgers vector の分布

位置が移動した距離から求めた。中心位置は変位が $0.5b$ のところ、すなわち、微分曲線のピーク位置で表されている。図9に 1_{127} の場合の種々の応力下での運動の様子を示す。図10に負荷応力と移動距離の関係を種々のサイズの転位ループおよび直線状刃状転位の場合について示す。これらの計算において、収れん回数はすべて300回である。負荷応力を増加させると、ある応力以上で移動距離が急速に伸びることが、特にループサイズが小さい時に見られる。図11に拡大図を示すが、移動距離が $b/4$ 以上になると移動距離の伸びる速度が上昇しているのが分かる。この折れ曲がりに対応する応力がパイエルス応力と考えられる。しかし、ループサイズが大きい場合および直線状刃状転位ではこの折れ曲がりの傾向がはっきりしない。体心立方金属中の直線状刃状転位のパイエルス応力が、らせん転位に比べてかなり低いことはこれまでも知られている。非常に低いためにさらに収れん回数を増やした計算を行わなければ見えてこないということも考えられる。図12に移動距離 $b/4$ に対応する応力、すなわち、パイエルス応力をループサイズに対してプロットしたものを示す。ループサイズとともに顕著に減少していくのが

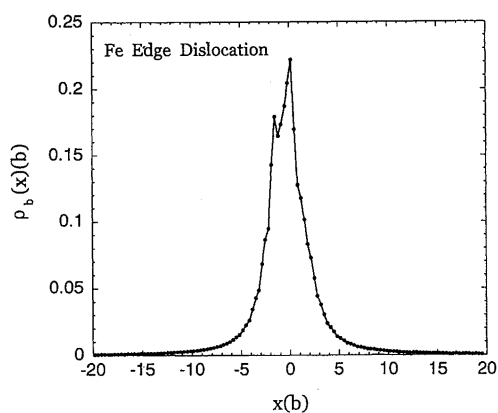
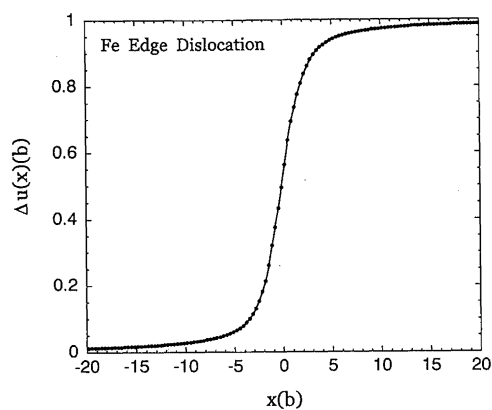


図7 鉄中の直線状刃状転位の Burgers vector の分布

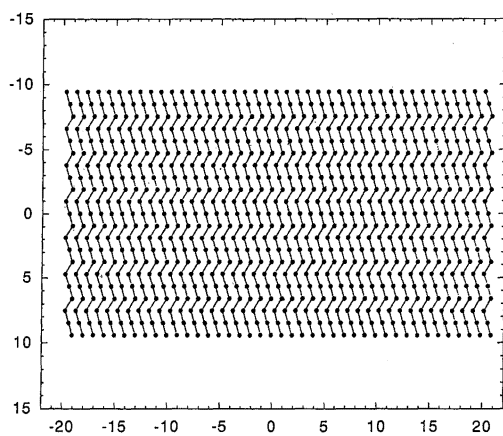


図8 鉄の $\{110\}$ 面上の原子配列

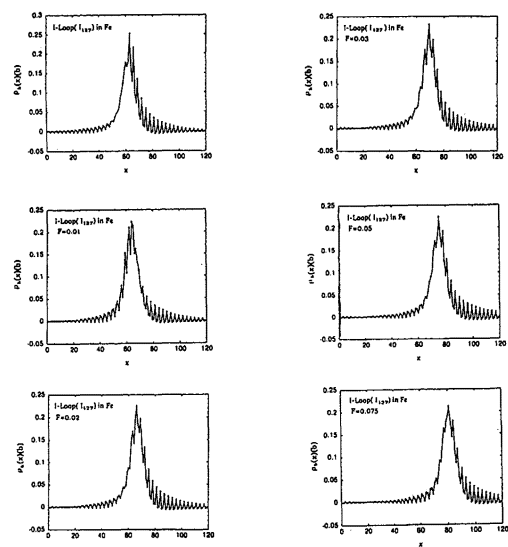


図9 鉄中の転位ループ 1_{127} の種々の応力下での運動

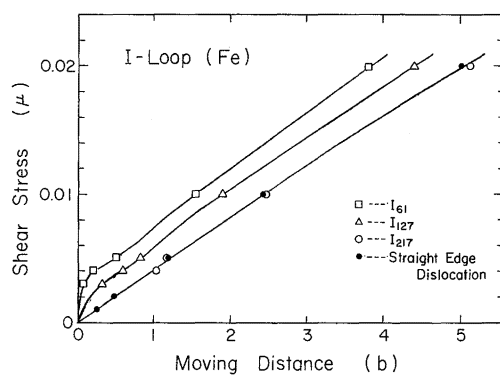


図10 鉄中の転位ループの応力下での移動距離と負荷応力との関係

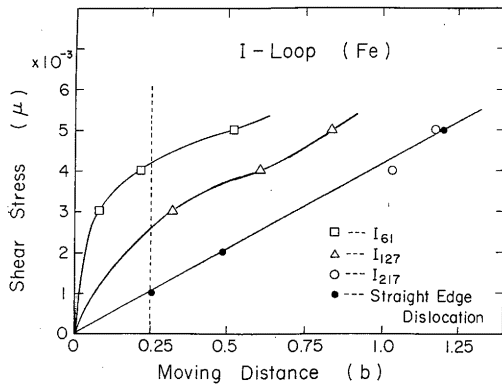
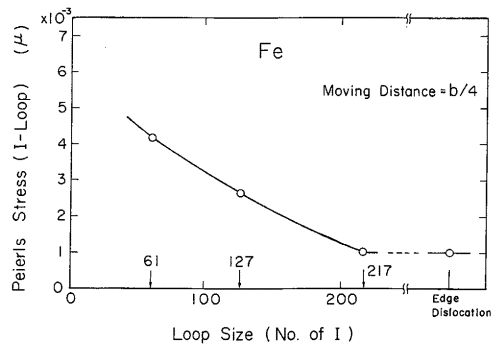


図11 図9の原点付近の拡大図


 図12 移動距離 $b/4$ における応力とループサイズの関係

分かる。この減少の理由を明らかにすることが最も重要なことであるが、転位ループの場合、直線状刃状転位の場合と違って、一つのセグメントから見てループの反対側には、符号の異なるセグメントが存在して、相互作用をしていることを考えなければならない。

参 考 文 献

- 1) 桐谷道雄, 日本物理学会第 51 回年会講演概要集第 2 分冊, p. 28.
- 2) 蔵元英一, 青野泰久, 北島一徳, 金属学会会報, 第 19 巻, 第 5 号 (1980) 348.
- 3) F. Minami, E. Kuramoto and S. Takeuchi, phys. stat. sol. (a) 12 (1972) 581.
- 4) M. W. Finnis and J. E. Sinclair, Phil. Mag. A, 50 (1984) 45 and Phil. Mag. A, 53 (1986) 161 (erratum).

(平成 9 年 7 月 10 日 受理)