Microscopic Phase-Field モデルを用いた BCC 鉄の 刃状およびらせん転位芯構造とパイエルス応力の評価

森 英喜 君塚 肇 尾方成信

大阪大学大学院基礎工学研究科

J. Japan Inst. Metals, Vol. 75, No. 2 (2011), pp. 104-109
© 2011 The Japan Institute of Metals

Microscopic Phase-Field Modeling of Edge and Screw Dislocation Core Structures and Peierls Stresses of BCC Iron

Hideki Mori, Hajime Kimizuka and Shigenobu Ogata

Department of Mechanical Science and Bioengineering, Graduate School of Engineering Science, Osaka University, Osaka 560-8531

We investigate edge and screw dislocation core structures and Peierls stresses of BCC iron using microscopic phase-field (MPF) modeling. Parameters needed for the MPF modeling, such as the generalized-stacking-fault (GSF) energy, are determined based on first principles density functional theory (DFT) calculations. Screw dislocation core has six-fold symmetric structure and 0.05 nm width. The edge dislocation core is three times wider than the screw dislocation core. The Peierls stresses of edge and screw dislocations are estimated as 0.07 GPa and 2.8 GPa, respectively.

(Received June 15, 2010; Accepted October 28, 2010)

Keywords: BCC iron, dislocation structure, Peierls stress, microscopic phase field modeling, generalized stacking fault energy surface, Peierls-Nabarro model, density functional theory

1. 緒 言

転位芯構造およびパイエルス応力は転位の挙動を理解する上で不可欠な情報である。転位芯近傍の原子構造やパイエルス応力を解析するために、原子構造を直接獲得できる原子論的解析が実施されている。具体的には、密度汎関数理論 (DFT) に基づく第一原理分子動力学計算¹⁻⁵⁾ や経験的な原子間ポテンシャルを用いた分子動力学解析⁶⁻¹⁰⁾ が行われている。DFT 計算では、小規模モデルしか扱えないため、境界条件の影響が問題となる¹¹⁾。また、経験的な原子間ポテンシャルを用いた計算では、DFT 計算に比べて大規模モデルを扱える利点があるが、転位芯近傍の乱れた原子構造に対してエネルギーが正しく評価されている保証はない⁸⁾。

原子構造を直接取り扱うことなく転位構造を解析する手法として、転位による原子の変位分布を連続関数として表現する Peierls-Nabarro (PN) モデルがある^{12,13)}。このモデルは、長距離におよぶ原子間相互作用の評価には弾性論から導かれる解析的な応力場を用い、さらに原子構造の変化をすべり面内方向のみに固定することで、短距離の原子間相互作用をすべり面に隣接する平行な原子面間の相対的な変位 (ミスフィット) によって生じるエネルギー変化に近似して、転位構造を評価する解析的なモデルである。ミスフィットエネルギーの評価に DFT 計算によって求めた結果を直接用い、転位芯構造を解析することができる¹⁴⁻¹⁹⁾。しかしながら、PN モデルは一次元モデルであるため、三次元的に分布した多数の転

位間相互作用が存在する系の解析は難しい。

原子構造を直接取り扱うことなく転位の生成・発展を解析する手段として、離散転位動力学 (DD) モデルがあるが、転位芯構造の解析はできないためパイエルス応力や転位の易動度および転位間相互作用を記述するローカルルールなどをあらかじめ設定する必要がある²⁰⁾。

PN モデルと同様に転位による原子の変位分布を連続関数として表現する手法として、Microscopic Phase-Field (MPF) モデルがある²¹⁻²⁵⁾。MPF モデルにおいても転位のエネルギーは弾性エネルギーとミスフィットエネルギーの和として表現されており、一次元モデルに対しては、PN モデルに対応する。MPF モデルでは、応力場を三次元的に評価することに特徴を持つ²¹⁻²⁷⁾。ミスフィットエネルギーの評価に DFT 計算によって求めた結果を用いることにより転位芯構造やパイエルス応力の定量的な評価が可能である²³⁻²⁵⁾。なお、PN モデルと同様に MPF モデルも原子間の変位を連続関数で表現するため、本質的には原子構造の離散性に由来するエネルギー変化に起因するパイエルス応力を評価することはできない。しかしながら、PN モデルにおいて Bulatov ら^{14,15)} が定式化したように、エネルギーの評価を離散的に行い、原子の離散性をモデルに取り込むことによりパイエルス応力を評価することができる。

このように、MPF モデルは、高精度な DFT 計算の結果に基づいた転位芯構造を直接考慮し、かつ三次元的な転位相互作用を解析することが可能なモデルであり、数 nm から数十 nm のモデルサイズでの転位解析の有効な手段となる。

本論文では、まず、転位解析における MPF モデルの定式化を示す。そして、BCC 鉄の (01 $\bar{1}$) すべり面上の [111] すべり方向に対する刃状転位およびらせん転位の転位芯構造を解析し⁶⁻¹⁰⁾、さらにそれらのパイエルス応力を評価する。BCC 構造におけるらせん転位の場合、(01 $\bar{1}$) 面上のすべりを仮定しても、すべり方向 [111] を共有する他の二つの等価な (10 $\bar{1}$) 面と (1 $\bar{1}$ 0) 面上にも弾性場の影響によって原子変位分布を持ち、non-planar 構造となる⁷⁾。逆に planar 構造とは一つのすべり面 ((01 $\bar{1}$) 面) にのみ分布を持つ構造のことである。このようなすべり面以外に原子変位分布を持つ二次元構造には MPF モデルによる評価が有効であり、本論文では non-planar 構造がらせん転位のパイエルス応力に与える影響を考察する。

なお、これらの解析の精度はミスフィットエネルギーの精度に強く依存する。一般にこのミスフィットエネルギー変化は一般化積層欠陥エネルギー (γ -surface) に対応する。本論文では、DFT 計算によって求めた γ -surface を用いて解析を行う。

2. Microscopic Phase-Field モデリング

MPF モデルでは、転位は結晶構造の隣接すべり面間の相対的なすべり量を表わす連続関数 $\phi^{p,q}(\mathbf{r})$ を用いて表現される。ここで、 p, q は、それぞれすべり面およびすべり方向を表わす。 $\phi^{p,q}(\mathbf{r})$ が整数値をとるとき結晶構造にすべりが無い状態あるいはバーガースベクトルの整数倍すべった状態を表わし、 $\phi^{p,q}(\mathbf{r})$ が整数でない領域が転位芯に対応する。このとき関数 $\phi^{p,q}(\mathbf{r})$ の汎関数として、転位が存在する系における全自由エネルギー F は、

$$F = E^{\text{elast}}(\phi^{p,q}(\mathbf{r})) + E^{\text{misfit}}(\phi^{p,q}(\mathbf{r})) + E^{\text{work}} \quad (1)$$

となる。ここで、右辺第一項は弾性エネルギーを、第二項はミスフィットエネルギーを表わす。第三項は外部応力による仕事である。

弾性エネルギーは、転位によって生じる固有ひずみ場 $\epsilon_{ij}^T(\mathbf{r})$ を系に導入するための仕事エネルギーであり、系に生じる弾性応力場を $\sigma_{ij}(\mathbf{r})$ とすると、

$$E^{\text{elast}} = -\frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \sigma_{ij}(\mathbf{r}) \epsilon_{ij}^T(\mathbf{r}) \quad (2)$$

と表現できる。転位によって生じる固有ひずみ場は、

$$\epsilon_{ij}^T(\mathbf{r}) = \sum_{p,q} \epsilon_{ij}(p,q) \phi^{p,q}(\mathbf{r}) \quad (3)$$

と表現できる^{21,22)}。あるすべり系 (p, q) における固有ひずみ $\epsilon_{ij}(p, q)$ は、 $\mathbf{b}$ をバーガースベクトル、 $\mathbf{n}$ をすべり面に対する法線ベクトルとすると、

$$\epsilon_{ij}(p, q) = \frac{b_i(p, q) n_j(p) + b_j(p, q) n_i(p)}{2d(p)} \quad (4)$$

となる。ここで、 $d(p)$ は隣接するすべり面 p 間の面間距離である。

固有ひずみによって生じる弾性応力場 $\sigma_{ij}(\mathbf{r})$ は Green 関数法を用いて逆格子空間表示で^{26,27)}、

$$\tilde{\sigma}_{ij}(\mathbf{k}) = C_{ijkl} [C_{mnop} \Omega_{kn}(\mathbf{k}) \tilde{\epsilon}_{op}^T(\mathbf{k}) z_l z_m - \tilde{\epsilon}_{kl}(\mathbf{k})] \quad (5)$$

と表わすことができる。ここで、 $\tilde{\sigma}_{ij}(\mathbf{k})$ および $\tilde{\epsilon}_{ij}^T(\mathbf{k})$ はそれ

ぞれ $\sigma_{ij}(\mathbf{r})$ および $\epsilon_{ij}^T(\mathbf{r})$ のフーリエ変換を表わす。また、 C_{ijkl} は系の弾性定数、 $\mathbf{k}$ は逆格子ベクトルであり、 $\mathbf{z} = \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$ である。さらに $\Omega_{ij}(\mathbf{k})$ は Green 関数の逆格子空間表示であり、 $\Omega_{ij}^{-1}(\mathbf{k}) = C_{ijkl} z_k z_l$ である。これより、 $\sigma_{ij}(\mathbf{r})$ は、

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \tilde{\sigma}_{ij}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}) \quad (6)$$

と表わすことができる。ただし、 $\tilde{\sigma}_{ij}(\mathbf{0}) = 0$ である。

ミスフィットエネルギー E^{misfit} は結晶面の相対変位によって生じるエネルギーであり、DFT 計算から求めた γ -surface により評価することで、原子間相互作用を反映した転位解析が可能となる^{23,24)}。ミスフィットエネルギー E^{misfit} は、

$$E^{\text{misfit}} = \int d\mathbf{r} \sum_p \frac{\gamma^p(\phi^{p,1}(\mathbf{r}), \phi^{p,2}(\mathbf{r}), \dots)}{d(p)} \quad (7)$$

と表わすことができる。ここで、 γ^p は、すべり面 p 上での γ -surface を表わし、すべり面 p 上のすべての可能なすべり方向へのすべり量を表わす $\phi^{p,q}(\mathbf{r})$ の関数である。なお、解析には、DFT 計算によって得られた離散数値データをスプライン補間したものを用いる。

外部応力 $\sigma_{ij}^{\text{appl}}$ が印加されたときの仕事エネルギー E^{work} は、

$$E^{\text{work}} = - \int d\mathbf{r} \sigma_{ij}^{\text{appl}} \epsilon_{ij}^T(\mathbf{r}) \quad (8)$$

となる。

このとき、 $\phi^{p,q}(\mathbf{r})$ の時間発展の駆動力は F を $\phi^{p,q}(\mathbf{r})$ で汎関数微分することで得られ、

$$\frac{\delta F}{\delta \phi^{p,q}(\mathbf{r})} = -\sigma_{ij}(\mathbf{r}) \epsilon_{ij}(p, q) + \frac{1}{d(p)} \frac{\partial \gamma^p}{\partial \phi^{p,q}(\mathbf{r})} - \sigma_{ij}^{\text{appl}} \epsilon_{ij}(p, q) \quad (9)$$

となる。このとき、 $\phi^{p,q}(\mathbf{r})$ の時間発展方程式は、

$$\frac{\partial \phi^{p,q}(\mathbf{r})}{\partial t} = -L \frac{\delta F}{\delta \phi^{p,q}(\mathbf{r})} \quad (10)$$

となる。ここで L は易動度である。

PN モデルでは原子の変位はすべり面内のみに限定されている。このため、MPF モデルを PN モデルと対応付けるために、式 (4) および式 (7) をそれぞれ

$$\epsilon_{ij}(p, q) = \frac{b_i(p, q) n_j(p, q) + b_j(p, q) n_i(p, q)}{2} \delta(\mathbf{n}(p) \cdot \mathbf{r}) \quad (11)$$

$$E^{\text{misfit}} = \int d\mathbf{r} \sum_p \gamma_p(\phi^{p,1}(\mathbf{r}), \phi^{p,2}(\mathbf{r}), \dots) \delta(\mathbf{n}(p) \cdot \mathbf{r}) \quad (12)$$

と変形する。ここで、 δ は、ディラックのデルタ関数である。

MPF モデルで数値解析する場合、系を格子状に分割し $\phi^{p,q}(\mathbf{r})$ は格子点上に値を持つ離散化データとして扱う。その際に、格子サイズを原子列間隔に設定することができれば、容易に原子構造の離散性を取り込むことができ、パイエルス応力の評価が可能となる²⁵⁾。

3. 転位構造とパイエルス応力

3.1 (01 $\bar{1}$) 面における BCC 鉄の γ -surface

MPF モデルによる転位芯構造解析に必要な (01 $\bar{1}$) 面の BCC 鉄の γ -surface を DFT 計算を用いて解析する²⁸⁾。

セルのサイズは、[100] 方向に 0.283 nm、[011] 方向に 0.399 nm、[01 $\bar{1}$] 方向に 1.99 nm とする。セル内に含まれる原

Fig. 1 (a) γ -surface for displacement along a $(01\bar{1})$ plane in BCC iron for DFT calculations and (b) its contour map. An arrow shows the $[111]$ slip direction.

子層は5層、原子数は20個である。このモデルに対して、モデル上半分の原子に剛体変位を与える。このとき、 $[01\bar{1}]$ 方向にのみ原子構造およびセル寸法の構造緩和を行う。境界条件は周期境界条件とし、DFT計算にはVienna Ab-initio Simulation Package (VASP)²⁹⁾を適用する。平面波のカットオフエネルギーは32310 kJ/mol (334.9 eV)とする。 k 点サンプリングにはMonkhorst-Pack法を用い、サンプリング点は $7 \times 5 \times 1$ とする。また擬ポテンシャルにはProjector Augmented Wave (PAW)法を用い³⁰⁾、交換相関相互作用にはGeneralized Gradient Approximation (GGA)を用いる。またスピン分極による効果を考慮する。解析の結果得られた γ -surfaceをFig. 1に示す。DFT計算によって得られた γ -surfaceの形状および鞍点における値は、Ventelonら³⁾の結果と良く一致している。すべり方向である $[111]$ 方向でのポテンシャル障壁は 1.0 J/m^2 であり、他の方向へのポテンシャル障壁の 1.9 J/m^2 と比較して約半分であることから、 $[111]$ 方向へのすべりが優先的に起こることを示している。

3.2 計算モデル

MPFモデルを用いて、 $(01\bar{1})$ 面上のすべり方向 $[111]$ のBCC鉄における刃状およびらせん転位の構造を解析する。解析に用いた弾性定数はそれぞれ $C_{11} = 243 \text{ GPa}$, $C_{12} = 145 \text{ GPa}$, $C_{44} = 122 \text{ GPa}$ である³¹⁾。Fig. 2(a)に示すように直交座標系を設定したとき、計算領域を x 軸方向には1024, y 軸方向に512, z 軸方向に2の格子に分割し離散化を行う。格子のサイズは、刃状転位の場合すべり面上での原子列間隔である 0.082 nm に設定する。このとき系のサイズは $84 \text{ nm} \times 42 \text{ nm} \times 0.16 \text{ nm}$ となる。らせん転位の場合、格子のサイズは、 x 軸および z 軸方向にはすべり面上での原子列間隔である 0.117 nm , y 軸方向には 0.101 nm とする。このように設定することにより、すべり面上に格子点が存在するようになる。このとき系のサイズは $120 \text{ nm} \times 52 \text{ nm} \times 0.23 \text{ nm}$ となる。Fig. 2(a)に示すように正負一対の転位を、一方の転位線を z 軸に一致させるように、もう一方の転位線を同一すべり面(xz 面)に z 軸に平行となるように配置する。この時、二つの転位線の間隔 l は、格子512個分であり、刃状転位の場合 42 nm 、らせん転位の場合 60 nm となる。初期構造と

Fig. 2 (a) Cartesian set of coordinates showing the directions relevant for dislocations in BCC iron. (b) The definition of the maximum resolved shear stress plane (MRSSP), slip plane: 1 and slip plane: 2.

して、刃状およびらせん転位ともに、 $(01\bar{1})$ 面上のすべり方向 $[111]$ における $\phi^{p(01\bar{1}), q[111]}(\mathbf{r})$ の値を $y=0$ 面上にのみ $0 \leq x < l$ の領域で1, 他の領域および面外で0としたものを用いる。

全方位周期境界条件のもとで、計算モデルに対してエネルギー緩和計算を行い転位芯構造を決定する。エネルギー緩和には最急降下法を用いる。パイエルズ応力は、外部応力を増加させながらその都度エネルギー緩和計算を行い、転位が動

き始める応力値から求める．また，non-planar 構造の影響を調べるため，らせん転位芯構造を planar 構造に限定して転位芯構造とパイエルス応力を評価し，両者を比較する．らせん転位に与える外部せん断応力は σ_{yz} とする．このとき最大分解せん断応力(MRSS)面は $(01\bar{1})$ 面 (xz 面)であり，以下この面を MRSS 面と呼ぶ．また，他のすべり面， $(10\bar{1})$ 面と $(1\bar{1}0)$ 面をすべり面 1 およびすべり面 2 と呼ぶ(Fig. 2(b)参照)．non-planar 構造では，MRSS 面のみでなくすべり面 1 およびすべり面 2 にも原子変位の分布を持つため，すべり面 1 およびすべり面 2 上における原子変位も考慮する．ただし，planar 構造を持つらせん転位の解析では原子変位を MRSS 面内に限定する．なお，すべり面 1 およびすべり面 2 に対しては Fig. 2(b)に示すように x_1, x_2 軸を設定する．

3.3 転位芯構造

Fig. 3(a), (b)にすべり面上における刃状転位の原子の変位量を表わす disregistry ベクトル f の分布および転位密度の分布を，Fig. 4(a), (b)に non-planar 構造および planar 構造のらせん転位の MRSS 面上における f の分布および転位密度分布を示す．ここで， $(01\bar{1})$ 面上のすべり方向 $[111]$ における f は $\phi^{p,q}(\mathbf{r})$ を用いて

$$f = \sum_q \frac{\mathbf{b}(p(01\bar{1}), q) \cdot \mathbf{b}(p(01\bar{1}), q[111])}{b(p(01\bar{1}), q[111])} \phi^{p(01\bar{1}), q}(\mathbf{r}) \quad (13)$$

と表される．また，Table 1 にそれぞれの転位芯幅を示す．転位密度 $\rho(x)$ は

$$\rho(x) = \frac{\partial f}{\partial x} \quad (14)$$

と定義する．また，転位領域幅を $b/4 \leq f \leq 3b/4$ を満たす幅とし，転位芯幅 ζ を転位領域幅の半分で定義する．刃状転位の ζ は $0.62b$ と評価できる．non-planar 性を考慮した転位構造の ζ は $0.19b$ であり，planar の場合の $0.38b$ と比較して，約半分の領域に転位芯が局在化している．特に転位芯中心付近での相違が大きく， $x=0$ を境にした f の変化量は $0.6b$ 以上となり極端に大きくなっている．このことが，らせん転位の挙動に影響を与え，BCC 構造におけるらせん転位の高いパイエルス応力の要因の一つとなっている．Fig. 5(a)にらせん転位における MRSS 面，すべり面 1 およびすべり面 2 における f の分布を示す．なお，MRSS 面における分布範囲は，Fig. 4(a)に示すように $0 < f/b < 1$ であるが，以下，等価な $-1/2 < f/b < 1/2$ に折り返して表示する．MRSS 面のみならず，すべり面 1 およびすべり面 2 にも同様に f が分布している．これは Fig. 5(b)の模式図に示すように f の分布が六方向に均等に分布していることを示しており，DFT 計算などで予測された六回対称構造と対応している^{3,4,8)}．なお，原点付近において，すべり面 1 およびすべり面 2 の f の分布に，MRSS 面と比較してずれが生じている．これは，すべり面 1 およびすべり面 2 の f をサンプリングしている格子点の中にすべり面上に存在していない点が存在するためである．

3.4 パイエルス応力

Table 1 に刃状転位およびらせん転位のパイエルス応力を

Fig. 3 (a) Disregistry vectors and (b) dislocation densities of edge dislocations calculated by MPF modeling.

Fig. 4 (a) Disregistry vectors and (b) dislocation densities of planar and non-planar screw dislocations calculated by MPF modeling.

示す．刃状転位およびらせん転位のパイエルス応力 τ_p は，それぞれ 70 MPa と 2.8 GPa である．刃状転位のパイエルス応力の値は，同じ γ -surface を用いて PN モデルを用いて導出した 80 MPa と良く一致している²⁸⁾．また，BCC 鉄の

Fig. 5 (a) Disregistry vectors of non-planar screw dislocations of MRSSP, plane 1 and plane 2. Solid lines are fitting of calculation results. (b) Schematic illustration of six-fold symmetric configuration of the non-planar screw dislocation core.

Table 1 Core widths (ζ/b) and Peierls stresses of edge and screw dislocations, where NP is non-planar and PL is planar.

	Edge	Screw (NP)	Screw (PL)
Core width (ζ/b)	0.62	0.19	0.38
Peierls stress (GPa)	0.07	2.8	0.29

$\{110\}$ 面 $\langle 111 \rangle$ 方向へのせん断弾性定数 G は 76 GPa であり³¹⁾, らせん転位の場合 $\tau_p = 0.037G$ の関係が成り立つ. この関係は, 同じ BCC 構造を持つモリブデンでの tight-binding 計算や DFT 計算から得られたらせん転位のパイエルス応力とせん断弾性定数 $\tau_p = 0.026G$ および $\tau_p = 0.012G$ の関係と比較的良く一致している^{4,8)}. らせん転位のパイエルス応力は刃状転位のそれより二桁大きい. このため, BCC 鉄の塑性変形過程において, らせん転位と比較して刃状転位は生成とともに速やかに移動し消失する. このことは, らせん転位の動きが塑性変形を律速することを示している. また, non-planar 構造のらせん転位モデルの場合 τ_p が 2.8 GPa であるのに対して, planar 構造のらせん転位モデルでは τ_p が 290 MPa であり一桁小さく, non-planar な構造が BCC におけるらせん転位の高いパイエルス応力の主要因の一つとなっていることを示している.

Fig. 6 および Fig. 7 に 2.3~2.7 GPa の外部せん断応力 σ_{yz} の印加による, MRSS 面およびすべり面 1 の disregistry ベクトル f の分布の変化を示している. なお, すべり面 2 の変化の様子はすべり面 1 と同様である. Fig. 6(a)~(c) より σ_{yz} が増大するにつれて, MRSS 面上の f の値が増大し転位芯領域が原点からずれていることが確認できる. それに対して, すべり面 1 上の f は, σ_{yz} が 2.3 GPa の場合, MRSS 面上の f と比較してほとんど変化していない. これはすべり面 1 は MRSS 面に対して $\pm 60^\circ$ 傾いているため, すべり面 1 に実際に印加されるせん断応力 τ_R は, $\sigma_{yz} \cos(\pm 60^\circ) = 1.15$ GPa であり, 転位構造を変化させるほどの応力が得られていないためである. τ が 2.5 GPa および 2.7 GPa のとき, すべり面 1 での f は初期の分布と比較して最大で 30% 程度減少している. これは, MRSS 面上の f の分布が変化し, 転

位芯領域がずれたためである. すべり面 1 上で f の分布が生じるのは, MRSS 面上の転位が作り出す弾性応力場が原因である. σ_{yz} によって MRSS 面上の転位芯領域が原点からずれることで, 原点回りの弾性応力場が弱くなる. このため, すべり面 1 上での f は減少する.

4. 結 言

Microscopic Phase-Field モデルの定式化を行い, 定量的に BCC 鉄における刃状およびらせん転位芯構造およびパイエルス応力を評価する手法を示した. また, 解析に必要な γ -surface のデータには高精度な DFT 計算を用い刃状転位とらせん転位のパイエルス応力を評価した. 刃状転位およびらせん転位の転位芯幅は $0.62b$ および $0.19b$ であった. らせん転位のパイエルス応力は, 刃状転位のパイエルス応力の 70 MPa と比較して, 二桁程度大きい 2.8 GPa となることが分かった. らせん転位の転位芯構造は, 一つのバーガースベクトルを共有する三つのすべり面に均等に原子変位を持ち, 六回対称な non-planar 構造であることが分かった.

本研究は, ㈱日本学術振興会科学研究費補助金基盤研究 B (20360055) の補助を受けて実施した.

文 献

- 1) G. Schoeck: Philos. Mag. A **81**(2001) 1161-1176.
- 2) S. L. Frederiksen and K. W. Jacobsen: Philos. Mag. **83**(2003) 365-375.
- 3) L. Ventelon and F. Willaime: J. Comput. Aided Mater. Des. **14**(2007) 85-94.
- 4) F. Shimizu, S. Ogata, H. Kimizuka, T. Kano, J. Li and H. Kaburaki: J. Earth. Sim. **7**(2007) 17-21.
- 5) C. Woodward: Mater. Sci. Eng. A **400**(2005) 59-67.
- 6) J. Chang, W. Cai, V. V. Bulatov and S. Yip: Comput. Mater. Sci. **23**(2002) 111-115.
- 7) V. Vitek: Philos. Mag. **84**(2004) 415-428.
- 8) J. Li, C. Z. Wang, J. P. Chang, W. Cai, V. V. Bulatov, K. M. Ho and S. Yip: Phys. Rev. B **70**(2004) 104113.
- 9) C. Domain and G. Monnet: Phys. Rev. Lett. **95**(2005) 215506-1-4.
- 10) R. Gröger, V. Racherla, J. L. Bassani and V. Vitek: Acta Mater.

Fig. 6 Disregistry vectors distribution of non-planar screw dislocations on MRSSP under applied stress (a) 2.3 GPa, (b) 2.5 GPa and (c) 2.7 GPa. Solid lines are fitting of calculation results.

Fig. 7 Disregistry vectors distribution of non-planar screw dislocations on plane 1 under applied stress (a) 2.3 GPa, (b) 2.5 GPa and (c) 2.7 GPa. Solid lines are fitting of calculation results.

- 56(2008) 5412-5425.
- 11) W. Cai, V. V. Bulatov, J. Chang, J. Li and S. Yip: *Philos. Mag.* **83**(2003) 539-567.
- 12) R. Peierls: *Proc. Phys. Soc.* **52**(1940) 34-37.
- 13) F. R. N. Nabarro: *Proc. Phys. Soc.* **59**(1947) 256-272.
- 14) V. V. Bulatov and E. Kaxiras: *Phys. Rev. Lett.* **78**(1997) 4221-4224.
- 15) G. Lu, V. V. Bulatov and N. Kioussis: *Phys. Rev. B* **66**(2002) 144103-1-5.
- 16) G. Lu, V. V. Bulatov and N. Kioussis: *Philos. Mag.* **83**(2003) 3539-3548.
- 17) L. Lejček: *Czech. J. Phys* **22**(1972) 802-812.
- 18) B. Joós, Q. Ren and M. S. Duesbery: *Phys. Rev. B* **50**(1994) 5890-5898.
- 19) A. H. W. Ngan and H. F. Zhang: *J. Appl. Phys.* **86**(1999) 1236-1244.
- 20) V. V. Bulatov, L. L. Hsiung, M. Tang, A. Arsenlis, M. C. Bartelt, W. Cai, J. N. Florando, M. Hiratani, M. Rhee, G. Hommes, T. G. Pierce and T. D. de la Rubia: *Nature* **440**(2006) 1174-1178.
- 21) Y. U. Wang, Y. M. Jin, A. M. Cuitino and A. G. Khachaturyan: *Acta Mater.* **49**(2001) 1847-1857.
- 22) D. Rodney and A. Finel: *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **652**(2001) Y.4.9.1-Y.4.9.6.
- 23) C. Shen and Y. Wang: *Acta Mater.* **51**(2003) 2595-2610.
- 24) C. Shen and Y. Wang: *Acta Mater.* **52**(2004) 683-691.
- 25) Y. Wang and J. Li: *Acta Mater.* **58**(2010) 1212-1235.
- 26) A. G. Khachaturian: *Theory of Structural Transformations in Solids*, (John Wiley & Sons, New York, 1983).
- 27) T. Mura: *Micromechanics of Defects in Solids*, (Springer, 1987).
- 28) H. Mori, H. Kimizuka and S. Ogata: *J. Japan Inst. Metals* **73**(2009) 595-600.
- 29) G. Kresse and J. Furthmüller: *Phys. Rev. B* **54**(1996) 11169-11186.
- 30) P. E. Blöchl: *Phys. Rev. B* **50**(1994) 17953-17979.
- 31) S. Ogata, J. Li, N. Hiroaki, Y. Shibutani and S. Yip: *Phys. Rev. B* **70**(2004) 104104-1-7.