hcp 金属における α 転位芯構造の 分子動力学シミュレーション^{*1}

後藤 卓史^{*2} 安藤 新二 頓田 英機

熊本大学工学部知能生産システム工学科

J. Japan Inst. Metals, Vol. 64, No. 5 (2000), pp. 391-394
Papers from JIM Fall Meeting (1999)
© 2000 The Japan Institute of Metals

Computer Simulation for α -Type Dislocation Core Structures in hcp Metals Using the Molecular Dynamics Method

Takushi Goto^{*2}, Shinji Ando and Hideki Tonda

Department of Mechanical Engineering and Materials Science, Faculty of Engineering,
Kumamoto University, Kumamoto 860-8555, Japan

Core structures of α -screw dislocation in hcp metals have been investigated using molecular dynamics simulation. Lennard-Jones (LJ) type and Finnis-Sinclair (FS) type potentials were employed to obtain dislocation core structures. In the case of the LJ potential, α -screw dislocation has expanded core on the basal plane at 0 K. At higher temperature, the core width becomes narrow and expanded to the prismatic plane. Core structures of titanium, magnesium and beryllium were investigated at 300 K with FS potential. The core structures of titanium and magnesium were expanded on the prismatic and basal planes, respectively. These results correspond to the slip of the real metals behavior. The core structure of beryllium was expanded on the prism plane. This result was different from real metal slip behavior. The α -screw dislocation in titanium began to move at 0.009 strain in $[2\bar{1}10]$ tensile, and at 0.006 strain in $[0\bar{1}10]$ tensile.

(Received December 16, 1999; In Final Form March 30, 2000)

Keywords: molecular dynamics simulation, core structure, screw dislocation, hexagonal closepacked lattice, hcp

1. 緒 言

結晶性材料の塑性変形は、主としてすべり変形によって生じる。hcp 金属における主すべり系の転位は α 転位によるものであるが、そのすべり面は亜鉛 ($c/a=1.856$)、マグネシウム ($c/a=1.623$)、ベリリウム ($c/a=1.568$) などでは (0001) 底面であるのに対し、チタン ($c/a=1.587$) やジルコニウム ($c/a=1.593$) では $(10\bar{1}0)$ 柱面であり、金属によって異なっている。原子密度の高い面が優先すべり系となると考えると、hcp 金属における主すべり系は $c/a=1.633$ 以上では底面すべりが、それ以下では柱面すべりが主すべり系となる。しかしながら、実際の金属の中にはマグネシウムやベリリウムのように c/a 比が 1.633 以下であっても底面すべりをするものがあり、その機構に関する一般的な理論は確立されていない。このように hcp 金属の変形挙動は複雑であり、それらのすべり系における変形機構については現時点でも十分には解明されているとは言えない。さらに、チタン単結晶を用いた実験において、 $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ および $\langle 10\bar{1}0 \rangle$ 引張ではシュミット因子が同じにもかかわらず、柱面すべりの挙動が大きく異なる

観察¹⁾が報告されている。そこで hcp 金属における α 転位の運動機構を考えるために、転位芯構造の計算機によるシミュレーションを行うことにした。 α らせん転位は底面すべりおよび柱面すべりに共通した転位であり、その芯構造については、Bacon²⁾、Liang³⁾、Vitek and Igarashi⁴⁾らの報告に見ることができる。しかし、いずれも静的緩和法を用いており、転位の運動に大きな影響をおよぼす温度を考慮したものではない。そこで本研究においては、hcp 金属における α らせん転位芯構造を、分子動力学法による計算機解析により、金属の種類および温度による転位芯構造の違いを調査する。

2. 計 算 方 法

本研究では 2 種類の原子間相互作用ポテンシャルを用いた。一つは次式で示される Lennard-Jones (LJ) 型 2 体間ポテンシャルである。

$$\phi = \epsilon \left\{ \left(\frac{d}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{d}{r} \right)^6 \right\} \quad (1)$$

ここで ϕ は 2 原子間ポテンシャルエネルギー、 r は 2 原子間距離である。 ϵ, d は定数であるが、ここでは Minonishi⁵⁾らが報告した値を用いた。

もう一方は、次式で表される Finnis-Sinclair (FS) 型多体

^{*1} 1999年11月20日日本金属学会秋期大会において発表

^{*2} 熊本大学大学院生 (Graduate Student, Kumamoto University)

間ポテンシャルである。

$$E = 1/2 \sum_{ij} V(r_{ij}) - \sum_i f(\rho_i) \quad (2)$$

ここで E は系全体のエネルギーで、 $V(r_{ij})$ および $f(\rho_i)$ については Igarashi⁶⁾ らにより報告されたマグネシウムおよびチタンにおける値を用いた。

計算に用いたモデル結晶を Fig. 1 に示す。モデルは X 軸を $[0001]$ 、Y 軸を $[1\bar{1}00]$ 、Z 軸を $[11\bar{2}0]$ に設定し、原子数 $46 \times 22 \times 2 (= 2024$ 個) とした。このモデルの Z 軸方向に、弾性論にもとづき α らせん転位を導入した。ここで、Z 軸方向には周期境界条件を適用し、X 軸方向の 4 層および Y 軸方向の 2 層の境界原子には固定境界条件を用いた。これらのモデルに対して、分子動力学法にしたがって結晶を緩和させ、0 K および 300 K での安定な芯構造を求めた。

また、引張歪による芯構造の変化を調査するため、得られた芯構造に対して Fig. 1 に示すように X、および Y 境界原子に対し $[2\bar{1}10]$ 、および $[0\bar{1}10]$ 引張に相当する変位を与え、緩和を繰り返した。負荷した垂直歪の歪速度は $1 \times 10^{-4} / 10000 \text{ Step}$ である。

3. 結果および考察

3.1 α らせん転位の芯構造

LJ 型ポテンシャルにおける、0 K、および 300 K での芯構造を Fig. 2 に示す。Fig. 2 は Vitek⁷⁾ らによる相対変位図法を用いており、図中の矢印は矢印の軸線上の隣接する 2 原子間のバーガースベクトル b 方向 (Z 軸方向) における相対変位の長さを表したものである。図右下に示す線分長さを表示上の $1/2b$ とした相対変位量である。また、矢印の向きは 2 原子間の相対変位を算出するもととなる方の原子から、相手側原子に向けて矢印を書くが、相対変位量が $1/2b$ を超えた場合は、その超えた量のみを逆向きに表示している。

Fig. 2 から 0 K における転位芯構造は底面に拡張した構造であり、約 $11b$ の幅であることがわかる。しかし 300 K においては、転位芯の幅は約 $6b$ と約半分に縮小し、さらに柱面へ数 b 程度拡張する傾向を示していた。

次にチタンにおける FS 型ポテンシャルを適用し、0 K および 300 K で得られた芯構造をそれぞれ Fig. 3(a), (b) に示す。この場合、いずれの温度においても柱面上に約 $5b$ の幅

に拡張した芯構造となっており、LJ 型ポテンシャルの場合に見られた芯構造の温度依存性は見られなかった。また、FS 型ポテンシャルを用いて 300 K におけるベリリウムとマグネシウムの芯構造を求めた結果を、それぞれ Fig. 4(a), (b) に示す。この場合、Vitek ら⁴⁾ の結果は本研究における 0 K と等価であるが、それに比較して、ベリリウムは 300 K では若干柱面方向へ拡張し、マグネシウムは底面方向へさらに拡張し、また一部柱面にも拡張しており、温度依存性が見られると言える。ベリリウムでは柱面へ拡張した構造となるが、マグネシウムでは底面へ約 $13b$ の幅に拡張した構造となっており FS 型ポテンシャルではマグネシウムのみ異なるものとなった。これらの結果は、初期転位として完全らせん転位を導入した場合のものであるが、この初期転位の導入法により、芯構造が準安定位置に留まっていることも考えられる。そこで、マグネシウムにおいて初期転位として柱面上に

Fig. 2 Core configurations of α -screw dislocation (a) 0 K, and (b) 300 K in LJ potential.

Fig. 3 Core configurations of α -screw dislocation of titanium (a) 0 K, and (b) 300 K in FS potential.

Fig. 1 Crystallographic orientation of a model crystal.

Fig. 4 Core configurations of a -screw dislocation of (a) beryllium and (b) magnesium in FS potential at 300 K.

約 $10b$ の幅で拡張した転位を擬似的に作成し、その後 300 K において結晶の緩和計算を行った。しかし、その結果得られた芯構造は Fig. 4(b) と全く同じであった。Vitek ら⁴⁾ による静的緩和計算では、これらの 3 つの金属では底面および柱面にそれぞれ拡張した芯構造が得られるとしているが、それぞれの構造の安定性については詳しく述べられていない。しかし、上記の結果より本研究での温度を考慮した動的緩和計算において、マグネシウムの a らせん転位は、FS 解析で柱面に一部拡張した構造も見られるが、基本的には底面に拡張した芯構造が安定であると言える。

今回用いた LJ 型ポテンシャルでは、 c/a 比は約 1.63 で、これはマグネシウムに近い値である。Fig. 2(a) に示した構造は底面に拡張した構造であり、これはマグネシウムの低温での主すべり系が底面すべりであることと一致している。これは前述のように Vitek らによる FS 型ポテンシャルの計算⁴⁾ においても同様なことが言えた。ここでマグネシウムの柱面すべりの降伏応力は底面すべりに比べると極めて高く、室温付近での柱面すべりは起こりにくい。その降伏応力は強い温度依存性をもつため高温では急激に低下する⁸⁾。Fig. 2(b) では、温度上昇により芯構造が変化し、転位芯が柱面へ拡張する傾向を示したが、これは、マグネシウムでは高温で柱面すべりが容易になることと関連するものと思われる。

またチタンおよびベリリウムにおいては、 a らせん転位は柱面に拡張した構造になっている。チタンについては実際の主すべり系と一致しているといえるが、ベリリウムの主すべりは底面すべりであり、転位芯が拡張した面が容易すべり面であると見るならば、これは異なった結果となっている。この差異の理由は不明であるが、例えばマグネシウムの柱面すべりの降伏応力は底面すべりに比べ、室温では 100 倍以上高

Fig. 5 Core configuration of a -screw dislocation of titanium in FS potential at 300 K after applying tensile strain about $[2110]$ direction.

Fig. 6 Core configuration of a -screw dislocation of titanium in FS potential at 300 K after applying tensile strain about $[0110]$ direction.

いが⁸⁾、ベリリウムでは 5 倍程度⁹⁾ であることや、ベリリウムの電顕観察において底面と柱面の間で頻繁に交差すべりを起こすこと¹⁰⁾ を考慮すると、柱面に広がった芯構造を持っているもののその拡張幅は狭いので、応力方向により底面すべりあるいは柱面すべりが生じると考えられる。

3.2 歪付加による a らせん転位の挙動

0 K および 300 K において得られたチタンの a らせん転位に、 $[2110]$ および $[0110]$ 引張に相当する歪を付加し、その挙動を調査した結果をそれぞれ Fig. 5 および Fig. 6 に示す。 $[2110]$ 引張 (Fig. 5) では垂直歪 $\varepsilon=0.009$ で転位は運動を開始した。また運動中の転位芯の幅は若干広くなっている。これに対し $[0110]$ 引張 (Fig. 6) では転位の動き始める歪は $\varepsilon=0.006$ であり、引張方位により転位の運動開始歪に約 1.5 倍の差が生じている。以前に本研究室では、純チタン単結晶の引張試験において、柱面すべりの降伏応力は、

[2110]引張の方が[0110]引張の場合に比べ若干高くなることを報告している¹⁾。この場合、降伏は単一の柱面すべりにおいて生じており、この柱面すべりに対し抵抗を生じるような2次すべり系の活動は観察されていない。またいずれの引張方位においても、柱面すべりやその他の α 転位が活動するすべり系のシュミットファクターは同じである。そこで、この降伏応力の差が生じる原因が柱面すべり転位の易動度に強く関係すると考えた。本計算において、Fig. 5, 6に示したような α 転位の運動性の違いが生じており、定性的ではあるが、この結果は上述の実験結果と一致している。この計算では、転位芯に対しすべり面に対するせん断歪だけではなく、すべり面に垂直方向の歪も付加しており、引張方位の違いにより、それらの大きさが異なることで各芯構造に何らかの変化を生じ、運動性に差が生じたものと考えられる。したがって、単結晶における降伏応力の差は、このような芯構造の影響が深く関与していると考えられるため、さらに詳細な検討が必要である。

4. 結 言

hcp 金属における α らせん転位芯構造を、2種類の原子間ポテンシャルを用いた分子動力学シミュレーションにより解析した結果、以下の事が明らかになった。

(1) Lennard-Jones 型ポテンシャルを用いた場合、 α らせん転位は0 Kでは底面に拡張した芯構造となった。しかし、

温度上昇とともに転位芯の幅が縮小し、柱面へ拡張する傾向がみられた。

(2) Finnis-Sinclair 型ポテンシャルを用いた場合、チタンにおいては0 K および 300 K において柱面に拡張した芯構造が得られた。また、300 K においてベリリウムでは柱面に、マグネシウムでは底面に拡張した芯構造が得られた。

(3) チタンの α らせん転位の運動開始歪は[0110]引張に比べ[2110]引張の場合が1.5倍高くなった。これは純チタン単結晶における実験結果と定性的に一致している。

文 献

- 1) Y. Toyomasu, S. Ando, Takashima and H. Tonda: Collected Abstract of the 1997 Autumn Meeting of the Japan Inst. Metals, 437.
- 2) D. J. Bacon and J. W. Martin: Philos. Mag. A, **43**(1981), 883-900.
- 3) M. H. Liang and D. J. Bacon: Philos. Mag. A, **53**(1986), 181-204.
- 4) V. Vitek and M. Igarashi: Philos. Mag. A, **63**(1991), 1059-1075.
- 5) Y. Minonishi, S. Ishioka, M. Koiwa and S. Morozumi: Philos. Mag. A, **43**(1981), 1017-1026.
- 6) M. Igarashi, M. Khantha and V. Vitek: Philos. Mag. B, **63**(1991), 603-627.
- 7) V. Vitek, R. C. Perrin and D. K. Bowen: Philos. Mag., **21**(1970), 1049-1073.
- 8) P. G. Partridge: Metal. Rev., **12**(1967), 169-194.
- 9) P. Regnier and J. M. Dupouy: Phys. Stat. Sol., **23**(1967), K109-K111.
- 10) J. Beuers, S. Jönsson and G. Petzow: Acta Metall., **35**(1987), 2277-2287.