229 γ/γ' 界面に堆積したらせん転位の分子動力学シミュレーションMolecular Dynamics Simulation of Screw Dislocation Piled at γ/γ' Interface

○正 屋代如月 (神戸大工) 学 田端康史 (神戸大) 正 富田佳宏 (神戸大工)

Kisaragi YASHIRO, Department of Mechanical Engineering, Kobe University, Kobe 657-8501

Yasushi TABATA, Undergraduate Student of Kobe University, Kobe 657-8501

Yoshihiro TOMITA, Graduate School of Science and Technology, Kobe University, Kobe 657-8501

Key Words: Screw Dislocation, γ/γ' Interface, Molecular Dynamics, Embedded Atom Method

1 はじめに

Ni 基単結晶超合金は、Ni を主成分とする γ マトリックス相に、 Ni_3Al を主成分とする γ' 相が格子状に微細析出した構造を有する。その変形特性の解明には、 γ/γ' 界面における微視的変形挙動、特に転位の挙動を明らかにする必要がある。一方、転位が主として運動する γ チャンネルの幅は $0.05\mu\text{m}$ 以下のものもあり、原子レベルの検討が必要なスケールとなっている。また、 γ' 相を貫通する超格子転位の形成など、 γ/γ' 界面に特有な転位の挙動を明らかにするためには、界面における原子構造を陽に考慮した検討が必須である。

著者らは、Ni 基単結晶超合金の γ/γ' 構造における転位のメカニズムを分子動力学シミュレーションにより直接解明することに取り組んでいる⁽¹⁾⁻⁽³⁾。これまで、 γ' 相に阻止される刃状転位に関して種々の検討を行ってきた。本報では、すべり面の自由度が高いらせん転位について、 γ/γ' 界面近傍における挙動を分子動力学シミュレーションにより検討した。

2 シミュレーション条件

(111) 面上を運動し、立方体 γ' 相の (001) 底面に接近するらせん転位をモデル化するため、図 1 に示すような薄板状のシミュレーションセルを用いて解析を行った。セルの大きさは $61.38\text{ nm} \times 60.76\text{ nm} \times 3.0\text{ nm}$ 、総原子数は 1,008,000 である。 γ' 相部分は、Ni 原子の一部を Al 原子に置換し、 L_{12} 構造の Ni_3Al とすることにより作成した。したがって、初期配置では γ と γ' およびその界面の格子長さには差を与えておらず、 γ/γ' 界面は整合界面である。初期配置作成時の格子定数には、Ni と Ni_3Al の格子定数を相加平均した値を用いた。

セルの z 方向に周期境界条件、 x, y 方向は表面原子の法線方向の運動を拘束する境界条件を適用し、5000 fs の初期緩和計算を行って γ, γ' 間の内部ひずみを再配分させた。その後、図 2 に模式的に示すように、 γ 相側表面から幅 4.34 nm の領域に変位を与えてバーガースベクトル $\mathbf{b} = [\bar{1}10]$ のらせん転位を導入した。このとき、バーガースベクトル分の変位 b を一度に与えるのではなく、 $b/5000$ の微小変位を毎ステップ増加させる分子動力学計算を 5000 fs 行い、転位芯部分の緩和計算を行いながら変位を与えている。なお、転位導入の際には、 γ 相側表面原子、および、転位を導入する中央すべり面の変位制御部分 ($x < 4.34\text{ nm}$) において原子の z 方向運動を拘束している。

上記手順により 1 本のらせん転位を導入した後、以下の 2 通りのシミュレーションを行った。

- (I) 上記転位導入手順を繰り返し、多数のらせん転位を次々に導入する。

Fig. 1 Simulation cell.

Fig. 2 Schematic of displacement control region at introduction of a screw dislocation.

- (II) 表面原子の z 方向運動も拘束する境界条件を用い、 $\dot{\gamma}_{yz} = 5.0 \times 10^{-6}/\text{fs}$ の割合でせん断ひずみ γ_{yz} を増加させ、外部せん断応力 τ_{yz} によってらせん転位を運動させる。

いずれのシミュレーションも温度は 300 K とし、速度スケーリングにより制御した。原子間相互作用の評価には原子埋め込み法 (EAM)⁽⁴⁾ を用い、Voter らによってフィッティングされたパラメータ⁽⁵⁾ を用いた。

3 シミュレーション結果および考察

5000 fs の転位導入計算後の原子配置の一部を拡大して図 3 に示す。ただし、セル厚さ方向の中央 4 原子層のみ取り出して表示している。また、Common Neighbor Analysis (CNA)⁽⁶⁾ により積層欠陥と判断された原子を濃く着色して示している。CNA の結果から、らせん転位の前縁 (leading partial) は変位制御領域から約 2.82 nm、後縁 (trailing partial) は約 0.87 nm 程度離れたところにあり、転位芯は幅約 1.95 nm (8b) に拡張している。前報⁽³⁾ で報告した刃状転位の転位芯の幅 (約 4.0 nm, 16b) と比較すると半分程度の値である。

Fig. 3 Snapshot of atoms at the screw dislocation introduced from surface.

Fig. 4 Motion of screw dislocations in the simulation (I).

シミュレーション (I) で得られた転位の運動の様子を図4に示す。図は転位が運動する中央すべり面近傍の原子配置について、 xy 断面をとって示したものであり、Al原子およびCNAにより積層欠陥と判断された原子を濃く着色して表示している。なお、最初の転位導入後の平衡状態を $t = 0$ fsとしている。 $t = 5000$ fsの図4(b)において、1本目の転位(以下では転位1と称する)は2本目の転位(転位2と称する)の力を受けて前方に移動している。また、 $t = 0$ fsにおいて単体で存在する転位と比べると、どちらの転位も拡張転位の幅が著しく狭くなっている。転位1と転位2の間隔は約8.90 nmである。

3本目の転位(転位3)が導入された $t = 10000$ fsの図4(c)では、転位1はさらに前方に運動し γ/γ' 界面に達している。転位1-2間隔は10.42 nm、転位2-3間隔は6.94 nmであり、転位1は転位2および3より前方へ向かう力を強く受け、転位2は転位1から反力を受けていることが示唆される。その後も端面変位を増加させていくと、 γ/γ' 界面に達した転位1は、運動の停滞や交差すべりにより界面を回避するような挙動を特に生じることなく γ' 相内に進入した(図4(d), (e))。図5は転位の運動を、横軸に時間、縦軸に転位前縁の位置をとって示したものである。この図からも転位1が界面の影響を受けずに γ' 相に進入していることが示される。なお、転位1の転位芯の幅は γ/γ' 界面から離れるにつれて拡大した(図4(e))。

Fig. 5 Change in the position of dislocations in the simulation (I).

Fig. 6 Stress strain curve and motion of leading and trailing partials in the simulation (II).

γ' 相が刃状転位の進入に対して抵抗を示したのに対し⁽³⁾、らせん転位に対してはほとんど抵抗を示さなかったのは、superpartial形成に際して、 γ/γ' 界面におけるステップ形成のエネルギーや弾性ひずみエネルギーが刃状転位に比べて小さいことが挙げられる。しかしながら、転位長さ方向の自由度に起因する転位張力の違いも大きく影響していると考えられるため、それらを考慮して今後定量的な検討を行う必要がある。

シミュレーション (II) により得られたせん断応力-ひずみ関係、および、各せん断ひずみ下での leading partialと trailing partialの位置を図6に示す。応力は文献(1)に従って評価したセル全体の値である。 τ_{yz} が5 GPaを超えた時点でも転位はほとんど運動しておらず、拡張転位の幅にも大きな変化はない。

講演会当日は、 γ/γ' 界面に接近したらせん転位周りの局所力学条件について、より詳細に検討した結果を報告する予定である。

最後に、本研究の一部は平成14年度科研費補助金基盤研究B2の援助を受けた。ここに記して謝意を表す。

文 献

- (1) 屋代・内藤・富田, 機論, A, **68**-668 (2002), 573-579.
- (2) Yashiro, K. et al., *Int. J. Mech. Sci.*, (in press).
- (3) 屋代・内藤・富田, 機論, A, 投稿中.
- (4) Daw, M. S. and Baskes, M. I., *Phys. Rev.*, B, **29**-12 (1984), 6443-6453.
- (5) Voter, A. F. and Chen, S. P., *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, **82** (1987), 175-180.
- (6) Honeycutt, J. D. and Andersen, H. C., *J. Phys. Chem.*, **91** (1987), 4950-4963.