bcc-Fe 中のらせん／刃状転位に関する NEB 解析および AES 解析

NEB and AES Analyses on Screw/Edge Dislocation in bcc-Fe

○ 永田祥一朗・神戸大院

Shoichiro EITA,
Graduate School of Engineering,
Kobe University

屋代 如月・神戸大

Kisaragi YASHIRO,
Graduate School of Engineering,
Kobe University**Key Words** :Nudged Elastic Band, Atomic Elastic Stiffness, Dislocation, bcc-Fe

1 緒言

弾性剛性係数は非線形弾性体の応力-ひずみ勾配を表す物理量で、それが負値をとる場合は変形抵抗の喪失を意味する。^[1] 著者らのグループでは、各原子位置における局所的な弾性剛性係数(原子弾性剛性係数, AES と称している)を評価し、その正值性で原子レベルの変形メカニズムを統一的に議論することに取り組んでいる。^[2] 前報^[3]では Johnson ポテンシャルを用いて bcc-Fe 中のらせん転位の AES 解析を行った。本研究では FS ポテンシャルにより、bcc 鉄中のらせん転位、刃状転位の AES 解析、NEB 解析を行う。

2 解析手法

NEB(Nudged Elastic Band) 解析は、初期状態と最終状態の 2 つの状態を結ぶ反応経路の中で、エネルギーが最も低くなる経路を探索する解析手法である。初期状態および最終状態の 2 点を複数の位相点で補間し経路を作成する。各位相点同士を仮想的なばねでつなぎ、位相点にかかる力に基づいて最も低いエネルギー経路を探索する。各位相点に作用する力は、経路に垂直なポテンシャルエネルギーの勾配と経路に平行なバネ力の和として $\vec{F}_i^0$ で表されるが、ばねの力のみが支配的になる事を防ぐため、隣接する角度によって変化する関数 $f(\phi_i)$ を導入し、 $\vec{F}_i^{NEB}$ で各位相点に働く力を表現する。

$$\vec{F}_i^0 = -\vec{\nabla}V(\vec{R}_i)|_{\perp} + (\vec{F}_i^s \cdot \hat{\gamma}_{\parallel})\hat{\gamma}_{\parallel} \quad (1)$$

$$\vec{F}_i^{NEB} = \vec{F}_i^0 + f(\phi_i)(\vec{F}_i^s - (\vec{F}_i^s \cdot \hat{\gamma}_{\parallel})\hat{\gamma}_{\parallel}) \quad (2)$$

$$f(\phi_i) = \frac{1}{2}(1 + \cos(\pi(\cos \phi_i))) \quad (3)$$

$\vec{R}_i$ は位置ベクトル、 $\vec{F}_i^s$ はバネ力、 $\hat{\gamma}_{\parallel}$ は経路の接線ベクトルを表す。ここで、 V はポテンシャルエネルギー、 $\vec{R}_i$ は i 番目の位相点の位置ベクトル、 $\vec{F}_i^s$ は i 番目の位相点に作用するバネ力、 $\hat{\gamma}_{\parallel}$ は経路の接線方向単位ベクトルである。

3 解析条件

鉄原子の相互作用は FS ポテンシャルにより評価した。図 1 に示すように、 x, y, z 方向をそれぞれ bcc の $[111]$, $[\bar{1}\bar{1}0]$, $[\bar{1}\bar{1}2]$ とする座標系で、一部を x 方向に互いにずらすことによりらせん転位を導入する。転位線方向(x 方向)には周期境界を適用し、進行方向(y 方向)、すべり面法線方向(z 方向)は端面の 3 原子層を固定している。刃状転位は x, y, z 方向をそれぞれ bcc の $[\bar{1}\bar{1}2]$, $[111]$, $[\bar{1}\bar{1}0]$ とする座標系で、1 原子面多く挿入して作成している。境界条件はらせん転位のそれと同様である。温度 0.1K で 100000fs 初期緩和を行った後、らせん転位の系では xz 方向に、刃状転位の系では yz 方向にせん断ひずみ増分 10^{-7} を毎ステップ与える分子動力学シミュレーションを行い、AES

を評価するとともに、転位が動き出す前後の原子配置を基に NEB 解析を行い、各位相点における AES を評価した。

Fig. 1 Simulation cell for screw and edge dislocation.

4 らせん転位の解析結果

図 2 に central symmetry paramter で可視化した各ひずみ下での転位の位置を、図 3 に対応するひずみでの負の AES 原子を示している。両者を見比べると、転位芯の位置に負の AES 原子が存在している。図 4 の横軸にひずみ、縦軸に転位芯の x 座標をとって転位芯の移動を定量的に示す。転位芯の位置は負の AES 原子の重心より求めている。これよりひずみ 0.00165 付近から転位が移動し始めていることが分かる。図 5 に転位が動き出す直前、直後の負の AES 原子数の変化 (a) と、(a) に示した (i)-(iv) の各状態での転位芯の様子を (b) central symmetry paramter と (c) 負の AES 原子で示した。転位芯の様子は図 1 の転位線方向 (y 方向) から見たもので、拡大して示している。(i) の状態は central symmetry paramter, 負の AES 原子共に三回対称構造となっている。この時、負の AES 原子は 6 列存在しており、転位線方向には 5 原子で周期境界としているので $6 \times 5 = 30$ 個の負の AES 原子が存在する。(ii)(iii) は転位移動の直前および直後の様子である。central symmetry paramter では違いは見られないが、負の AES 原子では移動前後で違いがある。転位が動き出した直後、負の AES 原子数は、三回対称構造をとる時より大きな値をとっている。この転位移動前後について (i) の状態を始状態、(iv) の状態を終状態とし NEB 解析を行った。図 6 の実線は得られたエネルギーバリア、破線は各位相点での負の AES 原子数である。分子動力学計算では、負の AES 原子数が動き出す直前に 30 個より減少し、動き出した直後にパルス状に 30 より上の値を示したが、NEB による MEP ではそのような傾向は見られない。しかし、移動途中に一時的に負の AES 原子数が減少する傾向は同じである。パイエルズポテンシャルは phase10 で 0.17[eV/nm] となった。

Fig. 2 Change in dislocation core of screw dislocation(central symmetry parameter).

Fig. 3 Change in negative AES atoms of screw dislocation.

Fig. 4 Change in position of screw dislocation.

Fig. 5 Change in number of negative AES atoms and morphology of screw dislocation core visualized by (b) central symmetry parameter and (c) negative AES.

Fig. 6 Phase-energy and number of negative AES atoms of screw dislocation.

5 刃状転位の解析結果

図 7 に central symmetry parameter で可視化した各ひずみ下での刃状転位の位置を、図 8 に対応するひずみでの負の AES 原子を示す。らせん転位と同様、転位芯の位置に負の AES 原子が存在する。図 9 に転位芯の位置の変化を示す。刃状転位ではひずみ 0.0021 付近で転位が移動し始める。図 10 に転位が動き出す前後の負の AES 原子数の変化 (a) と、(i)-(iv) の各状態での転位芯の様子を (b) central symmetry parameter と (c) 負の AES 原子で示した。図中 (ii)(iii) で示した点で転位が移動し始めるが、らせん転位の場合と異なり、負の AES 原子が移動時に規則的に減少、増加を繰り返している。この転位移動前後について (i) の状態を始状態、(iii) の状態を終状態とし NEB 解析を行った。図 11 の実線は得られたエネルギーバリア、破線は各位相点での負の AES 原子数である。やはり分子動力学と同様、MEP でも一時的に負の AES 原子数が減少する。パイエルズポテンシャルは phase10 で 0.21[eV/nm] となった。

Fig. 7 Change in dislocation core of edge dislocation(central symmetry parameter).

Fig. 8 Change in negative AES atoms of edge dislocation.

Fig. 9 Change in position of edge dislocation.

Fig. 10 Change in number of negative AES atoms and morphology of edge dislocation core visualized by (b) central symmetry parameter and (c) negative AES.

Fig. 11 Phase-energy and number of negative AES atoms of edge dislocation.

文 献

- [1] 屋代・富田, 機論, 67A(656), pp.678-684, (2001)
- [2] 屋代・藤原, 材料, 60(11), pp.968-975, (2011)
- [3] 永田・屋代, 第 17 回分子動力学シンポジウム (2012)