Investigation of Dislocation Behavior by Phase-Field-Crystal Method

正 高木 知弘 (京工繊大)

Tomohiro TAKAKI, Kyoto Institute of Technology, Matsugasaki, Sakyo, Kyoto

1 緒 言

Phase-field-crystal (PFC) 法は、金属材料内の原子構造の規則正しい配列を、周期的に分布する秩序変数 (phase field 変数) によって表現する新しいモデルである⁽¹⁾。PFC 法は、分子動力学 (MD) 法と同程度の空間スケールを対象とするが、非常に大きな時間増分をとることが可能であり、新しいマルチスケール手法として期待されている。

本研究では、PFC 法を用いて転位を 1 つもしくは 2 つ有する簡単な原子構造を作成し、せん断変形を与えることで、転位の移動、上昇運動、2 つの転位の対消滅など、転位の基本的な挙動を評価する。そして、PFC 法による転位挙動の表現に関して考察を加える。

2 PFC モデル

次式で示される Swift-Hohenberg 型の自由エネルギー汎関数を用いる。

$$F = \int \left[\frac{\alpha}{2} \phi^2 + \frac{1}{4} \phi^4 + \frac{\phi}{2} (1 + \nabla^2)^2 \phi \right] dV \quad (1)$$

ここで、 α は温度に比例する係数である。式(2)より、 ϕ の平均値 ϕ_0 と α の関係として、図 1 のような相図を描くことができる。グレーの領域は各相の共存領域である。Phase field 変数 ϕ は保存量であるので、Chan-Hilliard 方程式より次式の発展方程式を得ることができる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta \phi} = \nabla^2 \left[\alpha \phi + \phi^3 + (1 + \nabla^2)^2 \phi \right] \quad (2)$$

Fig. 1 Phase diagram

3 PFC シミュレーション

図 2 に示す手順で領域中央に 1 つの転位を有するシミュレーションモデルを作成する。

図 3 は、図 2 の結果得られた原子構造である。中央に転位が形成されていることが確認できる。上下端には液相領域を設け、上下端から 10 格子点の phase field 変数を固定し、その固定領域を矢印の方向に一定速度で移動させることにより、領域全体にせん断ひずみを作用させる。このシミュレーションにより、PFC 法による単一転位の挙動を評価する。結果は講演当日発表する。

Fig. 2 Preparing simulation for single dislocation model

Fig. 3 Single dislocation model

参考文献

- 1) K. R. Elder, M. Katakowski, M. Haataja, M. Grant, Phys. Rev. Lett. 88 (2002) 245701.