Mg の変形双晶および双晶転位に関するエネルギー論的解析

松中 大介^{*1}, 大西 恭彰^{*2}, 渋谷 陽二^{*3}

Energetic Analysis of Deformation Twins and Twinning Dislocations in Mg

Daisuke MATSUNAKA,^{*4} Yasuaki OHNISHI and Yoji SHIBUTANI^{*4} Department of Mechanical Engineering, Osaka University,
2-1 Yamadaoka, Suita, Osaka, 565-0871 Japan

Deformation twinning is one of the primary mechanisms in the deformation of hexagonal close-packed crystals. In this study, using first-principles calculations and empirical interatomic potential, we carry out energetic analysis of the twin boundaries and the twinning dislocations in Mg, and investigate effects of impurities such as yttrium. The dislocation energy and the Peierls potential barrier of the twinning dislocation of $\{10\bar{1}2\}$ twin are significantly small, compared to $\{10\bar{1}1\}$ twin. The impurity energy of a substituted yttrium atom is correlated with the averaged interatomic distance and the impurity atoms are more stable at a sparse site of the inhomogeneous atomic configuration of the twin boundaries, compared with at a homogeneous matrix site.

Key Words : Deformation twin, Twinning dislocation, Mg, First-principles calculation, Empirical interatomic potential

1. 結 言

構造用金属材料の中で最も軽く、高比強度と高比剛性を持つ Mg は、小型電子機器の筐体や、自動車や航空機などの輸送機器に適用されている。しかし、室温で成形性が低いことが実用上の大きな課題となっている。室温域では底面すべりのみが活動するためすべり系が少なく、変形双晶が発生する。このため Mg の塑性挙動を理解するためには変形双晶の特性を解明することが重要である。一方、延性を改善するために、結晶粒径・集合組織・合金成分などの組織制御による研究が精力的に行われている。Y を数%程度添加した Mg 合金は著しく改善された延性を持つことが報告されている。

本研究では、c 軸方向に引張あるいは圧縮の荷重を加えた際にそれぞれ駆動する $\{10\bar{1}2\}$ 双晶と $\{10\bar{1}1\}$ 双晶に対して第一原理計算および経験的原子間ポテンシャルを用いたエネルギー論的解析を行う。また Mg 中の Y 原子の不純物エネルギーを評価し、添加元素の効果について議論する。

2. 計算方法

本研究では、第一原理計算コード VASP(Vienna Ab-initio Simulation Package)を用いて密度汎関数理論に基づく第一原理計算を行う。計算には Projector Augmented Wave 法を用い、交換相関エネルギーには一般化密度勾配近似 (GGA) を適用する。平面波基底のカットオフエネルギーは 212eV とした。k 点サンプリングは Monkhorst-Pack のグリッドを用い、それぞれの計算のモデルサイズに対して格子定数 a あたり 25 点に相当する数を適用する。得られた格子定数の計算値は $a=3.194\text{ \AA}$, c/a 比は 1.622 である。また Mg 原子間の経験的原子間ポテンシャルには Zhou らによる GEAM ポテンシャルを適用した。この GEAM ポテンシャルによる格子定数の計算値は $a=3.20\text{ \AA}$, c/a 比は 1.63 である。

3. 変形双晶と双晶転位

それぞれの双晶に対して、3 次元周期境界条件を課したセル内に 2 個の双晶境界を含むモデルを用いて計算する。計算モデルにおける隣り合う双晶境界間の層数は同じである。原子配列の緩和はそれぞれの原子に働く力が $0.02\text{ eV/\AA}$ 以下になるまで行う。得られた双晶構造に対して、次式で与えられる双晶境界エネルギーを評価する。

^{*1} 正員, 大阪大学大学院工学研究科 (〒565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1)

^{*2} 学生員, 大阪大学大学院工学研究科。

^{*3} 正員, 大阪大学大学院工学研究科 (〒565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1)

E-mail: matsunaka@mech.eng.osaka-u.ac.jp

Fig. 1 Peierls potential barrier for the twinning dislocations

$$\gamma_{TB} = \frac{(E^{\text{TOT}} - \mu_{\text{Mg}}N)}{2A} \quad (1)$$

ここで E^{TOT} は全エネルギー、 μ_{Mg} は Mg の完全結晶での 1 原子あたりのエネルギー、 N はセル内に含まれる原子数、 A は双晶境界の面積である。第一原理計算から得られた $\{10\bar{1}2\}$ 双晶と $\{10\bar{1}1\}$ 双晶の双晶境界エネルギーの結果はそれぞれ 126mJ/m^2 と 87mJ/m^2 であり、臨界分解せん断応力が低いとされる $\{10\bar{1}2\}$ 引張双晶の方が双晶境界エネルギーは高い。これらの結果は他の第一原理計算⁽¹⁾ともよく一致している。また GEAM ポテンシャルによる結果は 119mJ/m^2 と 72mJ/m^2 であり、第一原理計算の結果よりやや低い値であるが同様の傾向を示している。

次に、変形双晶の成長に重要な働きをする双晶転位について転位エネルギーおよびパイエルズ障壁を評価する。 $\{10\bar{1}2\}$ 双晶と $\{10\bar{1}1\}$ 双晶の双晶転位として $b_{2/2}$ と b_4 をそれぞれ考える。パイエルズ障壁は NEB 法を用いて算出する。転位エネルギーおよびパイエルズ障壁は非常に小さな値となることから、ここでは GEAM を用いた計算を行う。結果を Fig. 1 に示す。 $\{10\bar{1}2\}$ 双晶の $b_{2/2}$ 双晶転位の転位エネルギーは $63\text{meV}/\text{\AA}$ であり、パイエルズ障壁は $4 \times 10^3\text{meV}/\text{\AA}$ である。一方、 $\{10\bar{1}1\}$ 双晶の b_4 双晶転位の転位エネルギーは $95\text{meV}/\text{\AA}$ であり、パイエルズ障壁は $10\text{meV}/\text{\AA}$ である。Fig. 1(b) で見られる準安定な中間状態では b_4 双晶転位が 2 個の b_2 転位の拡張転位になっている。

Fig. 2 Impurity energy and averaged interatomic distance

る⁽²⁾。得られた転位エネルギーおよびパイエルズ障壁は、 $\{10\bar{1}2\}$ 双晶の $b_{2/2}$ 双晶転位の方が非常に小さい。これは $\{10\bar{1}2\}$ 双晶境界上で双晶転位が導入されやすく移動が容易であることを示している。

4. 添加 Y 原子の第一原理計算

Y などの添加元素が変形双晶に与える影響を調べるために、次式のような不純物エネルギーを評価する。

$$E_{\text{imp}} = E_{\text{Mg-Y}}^{\text{TOT}} - E_{\text{Mg}}^{\text{TOT}} + \mu_{\text{Mg}} - \mu_{\text{Y}} \quad (2)$$

それぞれの原子位置に Y 原子を置換して得られて不純物エネルギーを Fig. 2 に示す。 $\{10\bar{1}2\}$ 双晶と $\{10\bar{1}1\}$ 双晶のいずれに対しても、置換 Y 原子の不純物エネルギーは第一近接原子との原子間距離とよく相関しており、双晶境界において内部に比べて安定なサイトが存在する。したがって Y 原子が双晶境界を安定化するため、双晶境界の移動すなわち双晶の成長に対して Y 原子は障壁となりうると思われる。

参考文献

- (1) Wang, Y., Chen, L.-Q., Liu, Z.-K., Mathaudhu, S.N., First-principles calculations of twin-boundary and stacking-fault energies in magnesium, *Scripta Mater.*, Vol. 62 (2010), pp. 646-649.
- (2) Wang, J., Beyerlein, I.J., Hirth, J.P., Tomé, C.N., Twinning dislocations on $\{10\bar{1}1\}$ and $\{10\bar{1}3\}$ planes in hexagonal close-packed crystals, *Acta Mater.*, Vol. 59 (2011), 3990-4001.