マグネシウム単結晶中での転位ループ生成の解析 —原子シミュレーションによるアプローチ—[†]

浦長瀬 正 幸* 神 垣 沙 奈* 松 本 龍 介**

Analysis on Nucleation of a Dislocation Loop in a Magnesium Single Crystal — Approach from Atomistic Simulations —

by

Masayuki URANAGASE^{*}, Sana KAMIGAKI^{*} and Ryosuke MATSUMOTO^{**}

We performed atomistic simulations to demonstrate the nucleation of a dislocation loop for the basal and prismatic slips of a magnesium single crystal. The dislocation loop was successfully simulated by employing the constrained molecular dynamics method, which involves constraining the atomic motion above and below the activation site, keeping the distance between the domain centers constant in the slip direction. Then, the activation free energy for nucleation of a dislocation loop was evaluated using the thermodynamic integration method and the dependence of this nucleation on the ambient temperature and applied shear stress was studied. Moreover, we compared the activation free energy of nucleation from a free surface to that of homogeneous nucleation in order to investigate the effect of inhomogeneity on the activation free energy.

Key words : Magnesium, Constrained molecular dynamics, Dislocation nucleation, Thermodynamic integration, Activation free energy

1 緒 言

マグネシウム (Mg) は実用金属中で最も軽量であり、地球上にも多く残存していることから幅広い利用が期待されているが、現状では限られた用途においてしか利用されていない。その要因の一つは Mg の加工性の低さであり、これは Mg が六方最密 (HCP ; Hexagonal Close-Packed) 構造を有することに由来している。この構造のため Mg 単結晶は異方性が強く、面心立方 (FCC ; Face-Centered Cubic) 結晶等とは異なる特性を示す。

Mg 単結晶に圧縮や引張変形を加えると、変形を加えた方向に応じて様々な変形モードが現れる。^{1)~3)} 代表的なものとして底面すべり、柱面すべり、二次錐面すべりなどのすべりに加え、c 軸引張双晶や c 軸圧縮双晶のような双晶変形がある。実験的立場からの研究は半世紀以上前から取り組まれているが、^{1)~3)} 変形モードの詳細な解析には多面的なアプローチが必要であり、計算機シミュレーションもその一翼を担っている。特に巨視的な現象の素過程となる微視的な現象の解明には個々の原子の運動を取り扱う原子シミュレーションが有効な手段となり、Mg に対しても種々のシミュレーションが行われている。^{4)~10)} 代表的な原子シミュレーションとして分子動力学 (MD ; Molecular Dynamics) シミュレーションがあるが、この手法をそのまま用いると適用可能な時間スケールは非常に短くなり、現実とは乖離したひずみ速度 (約 10^8) を

与えなければならないなどの問題が生じるため、現実の実験と対応づけるには洗練された方法を用いる必要がある。

本研究では a 軸方向のすべりである底面・柱面すべりに着目し、Mg 単結晶中においてそれらのすべりが生じる際の転位生成を拘束系の MD シミュレーションと熱力学的積分法を用いて解析する。我々の過去の研究¹⁰⁾では刃状転位対が Mg 単結晶中で生成する過程の原子シミュレーションを行った。しかし、実際に完全結晶中のある場所から転位が生成するときには転位ループが生成し、結晶中を広がると考えられることから、本研究では転位ループの生成を再現する。また、実験で観察される転位の生成は一樣な結晶中からではなく、結晶中の不均一な領域を核として生成することがほとんどである。従って、ここではその一例として自由表面からの転位の生成に着目し、結晶内部からの転位ループの生成との比較検討を行う。

本論文の構成は次の通りである。第 2 章では我々が本研究で用いるモデル、手法について述べる。第 3 章ではシミュレーションにより得られたデータを解析した結果を示す。特に転位の生成に必要な活性化自由エネルギーに着目し、温度やせん断応力に対する依存性、そしてすべり系や転位生成箇所の違いによる変化について述べる。最後に第 4 章で本研究で得られた結果について要約する。

[†] 原稿受理 平成 25 年 6 月 10 日 Received June 10, 2013 ©2014 The Society of Materials Science, Japan

* 京都大学大学院工学研究科 〒615-8540 京都市西京区京都大学桂, Graduate School of Eng., Kyoto Univ., Nishikyo-ku, Kyoto, 615-8540

** 正 会 員 京都大学大学院工学研究科 〒615-8540 京都市西京区京都大学桂, Graduate School of Eng., Kyoto Univ., Nishikyo-ku, Kyoto, 615-8540

2 シミュレーション手法

2.1 モデル

本研究では、Mg 単結晶中での底面すべりと柱面すべりに着目する。これらのすべり方向の一つである $[12\bar{1}0]$ 方向を x 軸として選び、 x 軸と垂直な方向で xz 平面がすべり面となるよう z 軸を、そして座標系が右手系をなすように y 軸を選ぶ。具体的には、底面すべりに着目する際は $[0001]$ 方向を y 軸、 $[10\bar{1}0]$ 方向を z 軸とし、柱面すべりに着目する際は $[\bar{1}010]$ 方向を y 軸、 $[0001]$ 方向を z 軸として選ぶ。単結晶の j 方向の長さを L_j と表し、結晶のサイズは、底面すべりを発生させるときには $L_x = 25.54\text{nm}$, $L_y = 10.4\text{nm}$, $L_z = 7.72\text{nm}$, 柱面すべりを発生させるときには $L_x = 25.54\text{nm}$, $L_y = 11.0\text{nm}$, $L_z = 7.26\text{nm}$ とする。これは、原子数 86000 個に対応する。

最初に、温度 T が一定かつ応力テンソルの各成分が 0 になる条件のもとで平衡状態に緩和させ、その後 xz 平面の x 方向に外部からせん断応力 σ をかけた状況でシミュレーションを行う。温度制御には速度スケージング法を用いる。また、結晶の y 軸方向の両端の三原子層中の原子に変位を与えることによりせん断応力の制御を行う。

Sun ら¹¹⁾により提案された原子埋め込み法¹²⁾に基づくポテンシャルにより Mg 原子間の相互作用を取り扱う。このポテンシャルは、第一原理計算から得られる転位の性質をある程度再現可能であることが知られている。¹³⁾ x 方向には周期境界条件を適用し、 z 方向については結晶内部から転位を生成させるときには周期境界条件を適用し、自由表面から転位を生成させるときには xy 平面に平行に自由表面を配置するために、 z 方向には自由境界条件を適用する。

2.2 転位の生成方法と活性化自由エネルギーの評価

MD シミュレーションで取り扱うことが可能な時間は一般に数 ns 程度であるため、変形のシミュレーションを行う際には実験と比較すると非常に高速な変形を与えなければならない。変形の起点となる場所では非常に大きな応力が発生することが考えられる。また熱活性化過程を考えると、低い自由エネルギー障壁を隔てた状態間の活性化現象しか考慮することができず、実験で起こるような熱活性化現象に対して考察することは困難である。これらの状況を避けるために、種々の活性化（自由）エネルギーを計算する方法^{14), 15)}や MD シミュレーションを加速させる方法^{16)–20)}が提案されており、これらの手法を用いて高い活性化（自由）エネルギーを有する現象についての解析を行うことができる。本研究ではその手法の一つである熱力学的積分法を用いて、Mg 単結晶中での転位ループ生成の活性化自由エネルギーを評価する。

系の状態がある変数 s により表されるとし、自由エネルギー $G(s)$ が s の関数として与えられるとする。二つの安定な状態が $s = s_A, s_B$ で表され、 $G'(s_C) = 0$ を満たす $s_C \in (s_A, s_B)$ がただ一つ存在するとき、二つの状態間の活性化自由エネルギー G_{ac} は

$$G_{ac} = G(s_C) - G(s_A) \quad (1)$$

で定義される。熱力学的積分法では、 $s = s_1, s_2$ で定められる二つの状態の自由エネルギーの差が次の式で計算できる事を利用する。

$$G(s_2) - G(s_1) = \int_{s_1}^{s_2} ds' \left\langle \frac{\partial U}{\partial s} \right\rangle_{s=s'} \quad (2)$$

ここで、 U は系のポテンシャルエネルギー、 $\langle \rangle_{s=s'}$ は $s = s'$ での平均値を表す。 s が原子の位置座標のみの関数で定義される場合には、被積分関数の値は s を拘束するために必要な力 f_s の平均に -1 を乗じることにより得られ、これは拘束 MD 法を用いて s を固定した状況でのシミュレーションを行うことにより評価することができる。 s_1, s_2 をそれぞれ s_A, s_C とおくと、式 (2)を用いて式 (1)で定義される活性化自由エネルギーが評価できる。

結晶中での転位ループ生成の活性化自由エネルギーを評価するために、我々は以下のようにして s を選んだ：まず、すべり面上の一点 O を選ぶ。ここで O は転位ループ生成の起点となる場所であり、自由表面からの転位生成では自由表面近傍で選ぶ必要がある。すべり面直上（直下）の原子面で Fig. 1 に示すような O 近傍の領域 D_u (D_l) を選ぶ。これらの領域は、結晶内部および自由表面からの転位生成でそれぞれ円形、半円形になるように選ぶ。そして、初期状態で領域 D_u (D_l) に存在する原子の重心位置の x 成分 X_u^{com} (X_l^{com}) を用いて

$$s = \frac{(X_u^{\text{com}} - X_{u,0}^{\text{com}}) - (X_l^{\text{com}} - X_{l,0}^{\text{com}})}{a} \quad (3)$$

により s を定義する。ここで、 a は最近接原子間距離を表し、Mg の場合はおよそ 0.32nm になる。また、 $X_{u,0}^{\text{com}}$ ($X_{l,0}^{\text{com}}$) は温度 T 、せん断応力 σ の下で s を拘束せずに平衡状態に緩和した段階での X_u^{com} (X_l^{com}) の値である。式 (3)は D_u と D_l に存在する原子の重心位置のすべり方向の変位の差を原子間距離で規格化したものである。すべりの発生前と後ではすべり面の上下で 1 原子分のずれが生じるため、式 (3)により定義される s に対し、 $s_A = 0$

Fig. 1 Regions where the motion of atoms was constrained for slip from inside the crystal. O represents the nucleation site. Circles and squares are lattice points in the A- and B-layers, respectively. Symbols colored in gray and black represent atoms contained in D_u and D_l , respectively.

と $s_B = 1$ はそれぞれすべりの発生前と後での安定な状態を表す。

式 (2) により自由エネルギーを評価する際に必要となる拘束力 f_s を求めるために Rattle 法²¹⁾を用いて s を拘束した MD シミュレーションを行う。シミュレーション開始時は $s = 0$ とし、10 000 ステップごとに s の値を 0.015 ずつ増加させ、 s の値が 1 に到達するまでシミュレーションを行う。 s の値を増加させることにより D_u 、 D_l に存在する原子に強制的に変位を生じさせ、O を起点とするすべりを発生させる。各 s において、10 000 ステップのうち最初の 5 000 ステップで s を拘束した下での平衡状態に緩和させ、残りの 5 000 ステップで f_s の統計平均を求める。

この方法により転位ループを生成させるためには拘束を行う領域 D_u 、 D_l を注意深く選ぶ必要がある。領域の大きさを選ぶ基準として活性化体積が考えられるが、活性化体積を得るためには活性化自由エネルギーを求めなければならないため、本研究では試行錯誤により領域の選定を行った。 D_u 、 D_l の体積を小さくしすぎると局所的な変形が起こってしまい転位ループの生成・移動によるすべりは発生しなくなる。逆に D_u 、 D_l の体積を大きくしすぎると領域内に存在する全ての原子に一度に変位を与えるために必要以上の力を与えることになり活性化自由エネルギーを実際よりも高く評価することになる。従って、転位ループが発生し、かつ活性化自由エネルギーが高く評価されない範囲で D_u 、 D_l を選ぶ必要がある。各シミュレーションにおいてこの条件を満たすように選んだ D_u 、 D_l に含まれる原子数 N_u 、 N_l を Table 1 ~ Table 4

Table 1 Number of particles in regions where the motion of atoms is constrained owing to basal slip from inside the crystal.

Shear Stress (GPa)	100 K		300 K		500 K	
	N_u	N_l	N_u	N_l	N_u	N_l
0.4	221	224	221	224	158	157
0.5	158	157	158	157	88	92
0.6	88	92	88	92	43	43
0.7	43	43	43	43	43	43
0.8	21	24	21	24	21	24
0.9	21	24	21	24	21	24

Table 2 Number of particles in regions where the motion of atoms is constrained owing to prismatic slip from inside the crystal.

Shear Stress (GPa)	100 K		300 K		500 K	
	N_u	N_l	N_u	N_l	N_u	N_l
0.4	308	305	240	236	166	170
0.5	166	170	166	170	166	170
0.6	166	170	166	170	45	46
0.7	166	170	96	99		
0.75	96	99	96	99		
0.8	96	99				

Table 3 Number of particles in regions where the motion of atoms is constrained owing to basal slip from the free surface of the crystal.

Shear Stress (GPa)	100 K		300 K		500 K	
	N_u	N_l	N_u	N_l	N_u	N_l
0.4	157	150	157	150	157	150
0.5	69	63	69	63	69	63
0.6	69	63	69	63	69	63
0.7	69	63				

Table 4 Number of particles in regions where the motion of atoms is constrained owing to prismatic slip from the free surface of the crystal.

Shear Stress (GPa)	100 K		300 K		500 K	
	N_u	N_l	N_u	N_l	N_u	N_l
0.4	294	292	294	292	163	161
0.5	163	161	163	161	78	78
0.6	78	78	78	78	36	38
0.7	78	78	36	38		
0.8	78	78				

に示す。温度・せん断応力の上昇とともに運動が拘束される原子数が減少しているのは、活性化体積が減少していることに対応している。

3 結果と解析

Fig. 2 に s を変化させたときの自由エネルギーの計算結果の一例を示す。ここで自由エネルギーは $s = 0$ での値との差として表している。 s の値を 0 から増加させるに従い自由エネルギーも増加するが、 $s \approx 0.74$ をピークにして以降 $s = 1$ まで自由エネルギーは減少する。自由エネルギーがピークとなる点で結晶中に転位ループが生成し、すべりが生じる。活性化自由エネルギーはピークでの自由エネルギーと $s = 0$ での自由エネルギーとの差で評価できる。なお、本手法で評価した値は転位ループ生

Fig. 2 Free energy as a function of s in the case of nucleation of a basal dislocation loop from the free surface at $T = 100\text{K}$ and $\sigma = 0.5\text{GPa}$.

成に必要な活性化自由エネルギーの上限値であり、適切な変数を選択することでより正確な活性化自由エネルギーが評価できる可能性は残されている。

Fig. 3 に底面すべりの際に結晶内部および自由表面から生じる転位ループの生成過程におけるすべり面直上の原子面のスナップショットを示す。各原子は Common Neighbor Analysis 法²²⁾を用いて評価された局所構造により分類され、HCP 構造、FCC 構造、およびその他の構造に応じてそれぞれ白色、濃い灰色、薄い灰色に色付けされている。 s を増加させるとまず円形（自由表面からの転位生成の場合は半円形）の部分転位のループが生成し、ループに囲まれた領域は積層欠陥を形成する。この転位の Burgers ベクトルは $[\bar{1}100]/3$ である。生成した転位ループのサイズは少しずつ大きくなっていくが、転位ループがある程度大きくなると積層欠陥によるエネルギーの増加を抑制するように積層欠陥内部から $[01\bar{1}0]/3$ の Burgers ベクトルを持つ転位ループが生成し、そのループの内部では HCP 構造を回復する。従って、底面すべりを生じる際には $[\bar{1}2\bar{1}0]/3$ の Burgers ベクトルを持つ拡張転位ループが生成する。生成した拡張転位ループは周期境界を通して自身と衝突し消滅する。Fig. 2 には 100K、0.5GPa（結晶内部）ならびに 300K、0.5GPa（自由表面）の場合の底面転位生成について示しているが、その他の温度、せん断応力においても同様の過程を観察できる。また、Fig. 3 には示していないが、柱面すべりでは積層欠陥を含む拡張転位は生成せず、 $[\bar{1}2\bar{1}0]/3$ の Burgers ベクトルを持つ完全転位が生成する。

Fig. 4 には、結晶内部から転位ループを生成させるために必要な活性化自由エネルギー $G(\sigma, T)$ の温度 T とせん断応力 σ に対する依存性を示している。底面、柱面いずれの場合も温度の上昇もしくはせん断応力の増大により活性化自由エネルギーは減少する。これは温度が上昇することにより活性化の際のエントロピーの寄与が増大

Fig. 3 Snapshots of atoms just above the slip plane in the nucleation process of a basal dislocation loop. (a) Nucleation from inside the crystal at $T = 100\text{K}$ and $\sigma = 0.5\text{GPa}$. (b) Nucleation from the free surface at $T = 300\text{K}$ and $\sigma = 0.5\text{GPa}$.

Fig. 4 Activation free energy of dislocation nucleation from inside the crystal as a function of the applied shear stress.

すること、またせん断応力が増大することにより活性化に必要なエンタルピーが減少することが原因である。底面すべりでは 0.9GPa のせん断応力で活性化自由エネルギーはおおよそ 1eV まで減少しており、現実の実験で観測可能な値に近づいている。同温度、同せん断応力の下では一般に底面転位の生成の方が活性化自由エネルギーが低くなる。これは Mg では底面すべりが発生しやすいことを示しており、実験結果と定性的な対応付けができる。^{1)~3)}しかし $T = 100\text{K}$ のときはすべり系の差は顕著に現れるが、 $T = 500\text{K}$ では、すべり系による差はかなり小さくなる。図中の曲線はシミュレーションで得られた活性化自由エネルギーを $G(\sigma, T) = A(1 - \sigma/\sigma_{\text{ath}})^\alpha$ という式によりフィッティングすることにより求めている。フィッティングパラメータは A , σ_{ath} , α の 3 個で、これらのパラメータは温度に対する依存性のみを有するものとする。この式は広範な外部応力や温度で固体中での熱活性化過程に対する活性化自由エネルギーを記述できるものとして用いられている。^{23), 24)}この曲線によりデータの補間・補外を行うと、 $T = 500\text{K}$ のときにせん断応力が 0.65GPa を超えると、柱面転位の生成に必要な活性化自由エネルギーが底面転位よりも低くなるという結果が得られる。Mg 単結晶の変形の実験でも非底面すべり系では臨界分解せん断応力 (CRSS; Critical Resolved Shear Stress) の温度依存性が大きく、高温では底面すべり系との差が小さくなる事が観察されており、^{1)~3)}ここで得られた結果と同様の傾向を示しているといえる。

以上より、本シミュレーション結果は Mg 単結晶の変形の実験結果と定性的には対応しているという事ができる。しかし、実験で観測することが可能な熱活性化現象の活性化自由エネルギーは典型的には 1eV 以下であり、本結果から活性化自由エネルギーが 1eV になるせん断応力を概算するとおおよそ 1GPa になる。この値は、Mg の理想せん断強度に近く、実験で得られる CRSS（室温下の底面すべりで約 3MPa、柱面すべりで約 20MPa）と比較すると非常に大きな値である。その原因の一つは、実際の結晶中では Frank-Read 源に代表されるようにあらかじめ存在する欠陥など系の不均一性が転位を生成させ

るための核となり、²⁵⁾活性化自由エネルギーを大幅に減少させることにある。

この様な不均一性が活性化自由エネルギーに与える影響が現れる一例として、ここでは自由表面から転位が生成する過程について調べた。単結晶のサイズが十分に小さいときには、結晶内部に存在する転位生成の核となるような欠陥が少なくなるため、自由表面による寄与が無視できなくなると考えられる。その影響は、Mg ナノピラーの単軸圧縮実験においてナノピラーの半径が小さくなるに従い CRSS が大きくなるという実験結果に現れている。²⁶⁾ 上と同様の手法を用いて得られた活性化自由エネルギーを Fig. 5 に示す。Fig. 5 には比較のために結晶内部から転位ループが生成する際の活性化自由エネルギーも示している。結晶内部からの転位生成と同様にせん断応力の増加に伴い単調に減少している。底面すべりでは Fig. 5 (a) で 100K, 300K, および 500K の点がほぼ重なっており、温度に対する依存性が相当低くなっているといえる。せん断応力が 0.5GPa の場合に低温のときの方が活性化自由エネルギーがわずかに低くなっているが、これは統計誤差の影響とみなせる。柱面すべりの場合には活性化自由エネルギーは温度に対して単調に減少している。

すべり系・温度・せん断応力がすべて同じであるとき表面からの転位生成に必要な活性化自由エネルギーは結晶内部から生成する場合に比べて半分程度となっている。このことは、転位線の長さ、転位線に囲まれる領域がい

ずれも結晶内部から転位ループが生成する場合に比べて半分になるため自明なことだと推測されるかもしれない。なぜなら転位ループが生成することによるエネルギーの増加量は転位ループの自己エネルギーの寄与 U_{self} とループに囲まれた領域に存在する原子が応力によりされる仕事や積層欠陥エネルギーによる寄与 U_{area} に分けられ、いずれもが自由表面の存在により結晶中の転位ループと比較して半分になることが期待されるからである。しかし、自由表面が存在するときの U_{self} を評価する際には、境界条件を満たすための鏡像転位の寄与も考慮しなければならない。この寄与も含めると U_{self} は結晶中の転位ループのときと比較して半分よりも小さくなる。²⁷⁾ これに伴い活性化自由エネルギーも半分以下になると考えられが、本結果は鏡像転位による寄与は限定的であることを示している。

せん断応力が 0.7GPa になると、底面すべりに必要な活性化自由エネルギーは 1eV 以下になり現実の実験において観測することが可能な熱活性化現象とみなせる。ナノピラーの圧縮実験²⁶⁾においてピラーの直径が約 300nm のときに測定された底面すべりの CRSS は約 0.27GPa とシミュレーションにより予測される転位生成に必要なせん断応力に近づくことから、本結果が定量的な観点からもナノピラーの実験結果と結びつけられる可能性を示唆している。

4 結 言

Mg 単結晶中での底面・柱面すべりの際の転位ループ生成を MD シミュレーションを用いて再現し、熱力学的積分法により活性化自由エネルギーの評価を行った。結晶内部からの転位ループ生成について、それぞれのすべり系での活性化自由エネルギーの温度・せん断応力依存性を調べ、少なくとも定性的には過去に行われた実験結果と対応づけることが可能であることを見いだした。また、系の不均一性が転位生成に与える影響を調べるために自由表面からの転位生成について解析を行い、結晶内部からの生成と比較して活性化自由エネルギーが減少することがわかった。本研究で用いた手法を錐面すべりや双晶変形など他の変形モード、さらに結晶中に含まれる空孔や転位などのように、より複雑な不均一性が存在する状況に適用することは今後の課題である。

本研究は、文部科学省科学研究費補助金新学術領域研究「シンクロ型 LPSO 構造の材料科学 一次世代軽量構造材料への革新的展開」(領域番号 2308) の助成を受けて行われました。

参 考 文 献

- 1) H. Yoshinaga and R. Horiuchi, "Deformation mechanisms in magnesium single crystals compressed in the direction parallel to hexagonal axis", Transactions of the Japan Institute of Metals, Vol.4, No.1, pp.1-8 (1963).
- 2) H. Yoshinaga and R. Horiuchi, "On the nonbasal slip in magnesium crystals", Transactions of the Japan Institute of Metals, Vol.5, No.1, pp.14-21 (1964).
- 3) A. Chapuis and H. Driver, "Temperature dependency of

Fig. 5 Activation free energy of (a) basal and (b) prismatic dislocation nucleation from the free surface as a function of the applied shear stress.

- slip and twinning in plane strain compressed magnesium single crystals”, *Acta Materialia*, Vol.59, Issue 5, pp.1986-1994 (2011).
- 4) S. Ando, T. Gotoh and H. Tonda, “Molecular dynamics simulation of $\langle c+a \rangle$ dislocation core structure in hexagonal close-packed metals”, *Metallurgical and Materials Transactions A*, Vol.33, Issue 3, pp.823-829 (2002).
  - 5) B. Li and E. Ma, “Atomic shuffling dominated mechanisms for deformation twinning in magnesium”, *Physical Review Letters*, Vol.103, Issue 3, pp.035503-1-035503-4 (2009).
  - 6) J. Wang, I. J. Beyerlein, J. P. Hirth and C. N. Tomé, “Twinning dislocation on $\{\bar{1}011\}$ and $\{\bar{1}013\}$ planes in hexagonal close-packed crystals”, *Acta Materialia*, Vol.59, Issue 10, pp.3990-4001 (2011).
  - 7) C. D. Barrett, H. E. Kadiri and M. A. Tschopp, “Breakdown of the Schmid law in homogeneous and heterogeneous nucleation events of slip and twinning in magnesium”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol.60, Issue 12, pp.2084-2099 (2012).
  - 8) A. Luque, M. Ghazisaeidi and W. A. Curtin, “Deformation modes in magnesium (0001) and (01 $\bar{1}$ 1) single crystals : simulations versus experiments”, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol.21, Issue 4, pp.045010-1-045010-15 (2013).
  - 9) R. Matsumoto, M. Uranagase and N. Miyazaki, “Molecular dynamics analysis of deformation behavior of long-period-stacking-ordered structure”, *Materials Transactions*, Vol.54, No.5, pp.686-692 (2013).
  - 10) M. Uranagase, S. Kamigaki, R. Matsumoto and N. Miyazaki, “Activation free energy of nucleation of a dislocation pair in magnesium”, *Materials Transactions*, Vol.54, No.5, pp.680-685 (2013).
  - 11) D. Y. Sun, M. I. Mendelev, C. A. Becker, K. Kudin, T. Haxhimali, M. Asta, J. J. Hoyt, A. Karma and D. J. Srolovitz, “Crystal-melt interfacial free energies in hcp metals : a molecular dynamics study of Mg”, *Physical Review B*, Vol.73, Issue 2, pp.024116-1-024116-12 (2007).
  - 12) M. S. Daw and M. I. Baskes, “Embedded-atom method: derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals”, *Physical Review B*, Vol.29, No.12, pp.6443-6453 (1984).
  - 13) J. A. Yasi, T. Nogaret, D. R. Trinkle, Y. Qi, L. G. Hector Jr and W. A. Curtin, “Basal and prism dislocation cores in magnesium : comparison of first-principles and embedded-atom-potential methods predictions”, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol.17, No.5, pp.055012-1-055012-13 (2009).
  - 14) D. Frenkel and B. Smit, “Understanding molecular simulation : from algorithms to applications”, 2nd ed. (2001) Academic Press.
  - 15) C. Chipot and A. Pohorille Eds., “Free energy calculations” (2007) Springer-Verlag Berlin.
  - 16) A. F. Voter, F. Montalenti and T. C. Germann, “Extending the time scale in atomistic simulation of materials”, *Annual Review of Materials Research*, Vol.32, pp.321-346 (2002).
  - 17) A. Laio and F. L. Gervasio, “Metadynamics : a method to simulate rare events and reconstruct the free energy in biophysics, chemistry and material science”, *Report on Progress in Physics*, Vol.71, No.12, pp.126601-1-126601-22 (2008).
  - 18) A. Kushima, J. Eapen, J. Li, S. Yip and T. Zhu, “Time scale bridging in atomistic simulation of slow dynamics : viscous relaxation and defect activation”, *The European Physical Journal B*, Vol.82, Issue 3-4, pp.271-293 (2011).
  - 19) S. Hara and J. Li, “Adaptive strain-boost hyperdynamics simulations of stress-driven atomic processes”, *Physical Review B*, Vol.82, Issue 18, pp.184114-1-184114-7 (2010).
  - 20) A. Ishii, S. Ogata, H. Kimizuka and J. Li, “Adaptive-boost molecular dynamics simulation of carbon diffusion in iron”, *Physical Review B*, Vol.85, Issue 6, pp.064303-1-064303-7 (2012).
  - 21) H. C. Andersen, “Rattle : a “velocity” version of the shake algorithm for molecular dynamics calculations”, *Journal of Computational Physics*, Vol.52, pp.24-34 (1983).
  - 22) J. D. Honeycutt and H. C. Andersen, “Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters”, *Journal of Physical Chemistry*, Vol.91, Issue 19, pp.4950-4963 (1987).
  - 23) U. F. Kocks, A. S. Argon and M. F. Ashby, “Thermodynamics and kinetics of slip”, *Progress in Materials Science*, Vol.19, pp.1-291 (1975).
  - 24) J. Li, “The mechanics and physics of defect nucleation”, *MRS Bulletin*, Vol.32, Issue 2, pp.151-159 (2007).
  - 25) J. P. Hirth and J. Lothe, “Theory of dislocations”, 2nd ed. (1992) Krieger Publishing Company.
  - 26) J. Ye, R. K. Mishra, A. K. Sachdev and A. M. Minor, “In situ TEM compression testing of Mg and Mg-0.2 wt.% Ce single crystals”, *Scripta Materialia*, Vol.64, Issue 3, pp.292-295 (2011).
  - 27) G. E. Beltz and L. B. Freund, “On the nucleation of dislocations at a crystal surface”, *physica status solidi (b)*, Vol.180, Issue 2, pp.303-313 (1993).