非すべり応力がらせん転位のパイエルスエネルギーに与える影響*

木下 恵介^{*1}, 下川 智嗣^{*2}, 喜成 年泰^{*2}, 澤田 英明^{*3}, 川上 和人^{*3}, 潮田 浩作^{*3}

Influence of non-glide stresses on the peierls energy of screw dislocations

Keisuke KINOSHITA^{*1}, Tomotsugu SHIMOKAWA, Toshiyasu KINARI, Hideaki SAWADA,
Kazuto KAWAKAMI and Kohsaku USHIODA^{*1} Graduate School of Natural Science and Technology,
Kanazawa University, Kakuma-machi, Kanazawa, Ishikawa, 920-1192, Japan

Received 25 October 2013

Abstract

We investigate the influence of non-glide stresses on the Peierls energy of screw dislocation by using Nudged-Elastic-Band method. The influence of the applied non-glide stress fields on the Peierls energy of a screw dislocation is clearly observed. Moreover, we find that the stress field dependence of the Peierls energy is changed by the moving direction of the screw dislocation under a specific applied stress field. Geometrical parameters, which can measure the atomic elastic deformation around the screw dislocation core, are introduced to explain the stress field dependence of the Peierls energy. Finally, the cross slip of a screw dislocation around a precipitate with a misfit strain is discussed by combining the analytical solution of stress fields around the precipitate with the geometrical parameters obtained by our atomic simulations.

Key Words : Peierls energy, Screw dislocation, Atomic simulation, Precipitate, Cross slip

1. 緒 言

析出強化とは、母相中の析出物が転位運動の障害物となることで金属材料を強化する方法である。このとき転位は、析出物中をすべり運動するか、もしくは析出物の周りに転位ループを形成することでその析出物を通過できる。前者はカッティング機構、後者はOrowan機構として知られ(Ardell, 1985), どちらの機構が生じるかは析出物の抵抗力と密接に関係している。一方で、これらの機構が完了する前に、らせん成分を有する転位線領域から交差すべりが生じ、析出物を回避することも可能である。このときの臨界分解せん断応力(Critical resolved shear stress: CRSS)は、Orowan機構と比べて半分以下になることが報告されている(Arzt and Ashby, 1986)。つまり、析出物近傍が交差すべりを生じやすい雰囲気であれば、析出強化が有効に機能しないことを意味する。そのため、らせん転位の交差すべりに影響を与える因子を明らかにする必要がある。

近年、分子動力学シミュレーションを用いて、体心立方格子(body centered cubic: bcc)金属中に存在するらせん転位に対して、その転位に生じるPeach-Koehler(PK)力に寄与しない特定の応力(本研究では非すべり応力と呼ぶ)を外から負荷すると、そのらせん転位は分解せん断応力(Resolved shear stress: RSS)が最大のすべり面とは異なる幾何学的に等価なすべり面を運動することが報告されている(Ito and Vitek, 2000, Gröger, et al., 2008)。転位がすべり運動を行うためには、結晶周期構造に起因したパイエルスエネルギーを乗り越える必要がある。つまり、先ほどの分子動力学計算の結果は、幾何学的に等価なすべり系群の各パイエルスエネルギーが負荷した応力

* 論文 No.13-00775 [DOI: 10.1299/transjsme.2014cm0018]

^{*1} 学生員, 金沢大学自然科学研究科(〒920-1192 石川県金沢市角間町)^{*2} 正員, 金沢大学理工研究域^{*3} 新日鐵住金(株)(〒293-8511 千葉県富津市新富 20 番 1)

E-mail: simokawa@se.kanazawa-u.ac.jp

Fig. 1 Shear stress (τ_{yz}) field of analysis models expressed by Chamati potential with different periodic boundary conditions: (a) Square model and (b) Parallelogram model. (c) Atomic structure of (111) planes in α -Fe and squares represent the position of easy-screw dislocation core.

場により異なる影響を受けていることを示唆している。そのため、もし析出物の周りに応力場が生じており（例えば、ミスフィットひずみを生じる整合析出物）、その応力場が、起動しているすべり系のパイエルスエネルギーを上（下）げ、他のすべり系のパイエルスエネルギーを下（上）げるなら、析出物に近接するらせん転位の交差すべりは促進（抑制）される可能性がある。

そこで、本研究では原子シミュレーションを用いて、 α -Fe 中のらせん転位に非すべり応力を負荷し、その転位が幾何学的に等価な方向にすべり運動するためのパイエルスエネルギーがどのように変化するかを調査する。そして、得られる結果を用いて、理論的に評価できる整合析出物周りの応力場とらせん転位の交差すべりの関係について検討することを目的とする。原子シミュレーションは、オープンソースの LAMMPS (Plimpton, 1995) を使い、パイエルスエネルギーの応力場依存性は Nudged Elastic Band (NEB) 法 (Henkelman, et al., 2000) を使って求める。

本論文の構成を以下に示す。第 2 章では、解析モデルと原子間ポテンシャルエネルギーについて説明する。第 3 章では、らせん転位のパイエルスエネルギーに対する非すべり応力の影響を示し、得られる結果の妥当性について異なる境界条件や原子間ポテンシャルエネルギーを用いて調査する。第 4 章では、なぜパイエルスエネルギーが非すべり応力により変化するかについて、転位コア近傍の原子構造の変化に着目して検討する。さらに、整合析出物周りの応力場がらせん転位の交差すべりにどのような影響を与えるかを検討する。最後に第 5 章で本論文の結言を述べる。

2. 解析モデルと解析条件

2.1 解析モデル

本研究では解析対象を α -Fe とし、 x , y , z 方向の結晶方位をそれぞれ、 $[11\bar{2}]$, $[111]$, $[1\bar{1}0]$ とする。ここで、 α -Fe の格子定数を a_0 とし、三つのベクトルを $\mathbf{v}_{[11\bar{2}]} = a_0[11\bar{2}]/3$, $\mathbf{v}_{[111]} = a_0[111]/2$, $\mathbf{v}_{[1\bar{1}0]} = a_0[1\bar{1}0]$ と定義する。これらのベクトルを用いて、本研究で使用する二つの異なる周期境界条件を有する解析領域 $\mathbf{e}_i$ を以下のように表現する。一つ目のモデルの $\mathbf{e}_i^s$ は、

$$\mathbf{e}_1^s = 14\mathbf{v}_{[11\bar{2}]}, \quad \mathbf{e}_2^s = 16\mathbf{v}_{[111]}, \quad \mathbf{e}_3^s = 24\mathbf{v}_{[1\bar{1}0]} + \frac{1}{2}\mathbf{v}_{[111]} \quad (1)$$

であり、本研究ではこれを正方形 (Square) モデルと呼ぶ。二つ目のモデルの $\mathbf{e}_i^p$ は、

$$\mathbf{e}_1^p = 14\mathbf{v}_{[11\bar{2}]}, \quad \mathbf{e}_2^p = 16\mathbf{v}_{[111]}, \quad \mathbf{e}_3^p = 24\mathbf{v}_{[1\bar{1}0]} + 7\mathbf{v}_{[11\bar{2}]} + \frac{1}{2}\mathbf{v}_{[111]} \quad (2)$$

であり、これを平行四辺形 (Parallelogram) モデルと呼ぶ。図 1(a)(b) に各モデルの解析領域を示す。二つの解析モデルの違いは、 z 方向に対する周期境界条件であることが確認できる。これらのモデルに対して、 x 方向に 5 nm 離れたらせん転位対を中央に配置する。らせん転位対を含む各モデルの τ_{yz} 応力場を図 1(a)(b) にそれぞれ示す。本研究では、左側のらせん転位を S1、右側のらせん転位を S2 と呼ぶ。S1 のらせん転位は $\mathbf{b}_{S1} = 1/2[111]$ のバーガー

スペクトルを持つため、S2 のらせん転位は $\mathbf{b}_{S2} = -\mathbf{b}_{S1}$ のバーガースベクトルを持つことになる。後述するように、本研究では easy-core のらせん転位の運動に注目するため、周期境界条件を適用した本解析モデルにおいて、厳密には隣接するらせん転位間の x 方向の距離 (S1 と S2 の距離と S2 と S1' の距離) は等しくないことに注意が必要である (その距離の差は a_0 より小さい)。ここで各モデルは z 方向に異なる周期境界条件を適用しているため、図 1(a) に示すように正方形モデルでは、同じバーガースベクトルをもつ転位が z 方向に周期的に並んでいることに対して、図 1(b) に示すように平行四辺形モデルでは、 z 方向に異なるバーガースベクトルを持つらせん転位が周期的に並んでいることになる。そのため、隣接する転位間の相互作用が異なるので、解析領域内の応力場も異なることが図 1(a)(b) から確認できる。ここで、両モデルに対して、 $\mathbf{e}_3$ を y 方向に $1/2\mathbf{v}_{[111]}$ 傾けているが、これはらせん転位対を計算セルに導入することで生じる塑性ひずみに相当し、この $1/2\mathbf{v}_{[111]}$ を考慮することで系内部の平均応力 τ_{yz} をゼロにすることができる。上記の解析モデルを用いて、らせん転位のパイエルスエネルギーに対する非すべり応力の影響を検討し、さらに二つの解析モデルから得られる結果を比較することで、らせん転位の周期構造の違いによる影響を検討する。

なお、bcc 金属のらせん転位コアはその原子配置から、エネルギー的に安定な easy-core と不安定な hard-core が存在する。図 1(c) に bcc 構造の $\{111\}$ 面を示す。ここで、丸印は原子を表し、色の違いは $[111]$ 方向の奥行きの違いを表している。この図より、 $\{111\}$ 面は三層周期構造であることが確認できる。easy-core では bcc 構造にらせん転位の変位を重ね合わせても、転位コアを形成する各原子は完全結晶と同じ三層構造を維持する (図 1(c) の四角プロットで示す位置が easy-core に対応する)。しかしながら、hard-core では転位コアを構成する原子は同じ $\{111\}$ 面に存在する (つまり転位コアを構成する原子は、同じ色を有することになる)。そのため、hard-core では easy-core に比べて隣接する原子間距離が近くなるため、転位のエネルギーが高くなる (Suzuki, 1968)。本研究では、ある easy-core に存在するらせん転位が隣接する別の easy-core に移動する現象を検討する。

2.2 原子間ポテンシャル

原子間相互作用として二つの α -Fe を表現する原子間ポテンシャルを用いる。一つは、Chamati らの原子埋め込み法 (Embedded atomic method: EAM) (Chamati, et al., 2006) であり、もう一つは、Mendelev らの EAM ポテンシャル (Mendelev, et al., 2003) である。Mendelev らは 5 種類のポテンシャルを検討しているが、その中で α -Fe 中の欠陥構造をよく表現できる potential 2 を採用する。これらの二つの原子間ポテンシャルから得られるらせん転位のパイエルスエネルギーに対する非すべり応力の影響を比較することで、得られる結果の妥当性を検討する。なお、Chamati らの EAM ポテンシャルは表面拡散を評価するために作成され、Mendelev らの EAM ポテンシャルは系の温度変化による液相から固相への変化を表現するために作成されている。

2.3 NEB 法の概説と解析条件

NEB 法はある状態からある状態へ遷移するときに必要なエネルギー障壁を求める手法である。具体的には、まず、遷移前後の原子座標を何らかの方法で取得し、遷移の途中の原子座標 (これをイメージと呼ぶ) を遷移前後の座標を用いて線形内挿することで作成する。つぎに、それらの内挿されたイメージ間に線形バネを設置し、各イメージ間が近づきすぎないように制御しながら構造緩和することで、その遷移現象における最小エネルギー経路を求めることが可能になる (Henkelman, et al., 2000)。そのため、NEB 法を実行するためには、らせん転位がある easy-core から隣接する easy-core へ移動する前後の原子配置を求める必要がある。

bcc 金属のすべり系として、 $\{112\}$ 面と $\{110\}$ 面の二つのすべり面が考えられている (Hirth and Lothe, 1982a)。そこで、図 1(c) の “0” の位置にらせん転位が存在する場合を考える。 $\{112\}$ 面を移動する場合、転位コアは $[1\bar{1}0]$ 方向に “0” → “7” に移動することになる。しかしながら、この現象の最小エネルギー経路を NEB 法を用いて計算すると、“0” → “7” の移動は、“0” → “6” → “7” の移動で表現された。すなわち、 $\{112\}$ 面をらせん転位移動する現象は、異なる $\{110\}$ 面を二度すべる現象に置き換えられることを意味している。そのため本研究では $\{110\}$ 面、すなわち $\langle 112 \rangle$ 方向へのらせん転位の移動を対象とする。

本解析モデルには S1 と S2 のらせん転位対が存在しており、本研究では S2 を固定して S1 のみを移動させる。このとき、移動させる方向に応じて、S1 と S2 の転位間距離が変化し、得られる結果は、転位間の弾性相互作用の影響を受けることが推測できる。そこで、同一の $\{111\}$ 面上に存在する $\langle 112 \rangle$ は三方向であるが、本解析では正負の移動方向 (つまり、S1 と S2 の距離の変化) を考慮して六方向を検討する。

Fig. 2 Differential displacement vectors around a screw dislocation under no external loading expressed by (a) Chamati potential and (b) Mendelev potential, and under external loading of (c) $\sigma_x = -1.0$ GPa and (d) $\sigma_x = 1.0$ GPa expressed by Chamati potential. Open and closed circles represent atoms in the perfect bcc structure and in the screw dislocation core. Atomic colors represent the different depths of the stacking atomic layers along the [111] direction.

以上のことを考慮して、今回使用する初期座標と最終座標を以下のように作成する。まず、図 1(c) に示す“0”の位置にらせん転位コアが存在する場合を遷移前とし、残りの“1”から“6”の位置にらせん転位コアが存在する場合を遷移後とする。これらの遷移前と遷移後の解析モデルに対して、外部負荷が作用している場合の安定構造を、解析温度 0.1 K の分子動力学シミュレーションにより求め、得られる安定構造を NEB 法で用いる初期座標と最終座標とする。ここで外部負荷は、単軸応力 σ_x , σ_y , σ_z , および静水圧 $\sigma_{\text{hydro}} (= \sigma_x + \sigma_y + \sigma_z)$ について考える。 σ_{hydro} を負荷するとき、 $\sigma_x = \sigma_y = \sigma_z$ である。各外部負荷の大きさは、 -1.0 , -0.5 , 0 , 0.5 および 1.0 GPa である。これらの負荷応力は 0 MPa から所定の応力まで 50,000 ステップ (100 ps) かけて線形に負荷する。その後、同じ時間所定の応力で緩和を行う。これらの負荷応力はらせん転位が“0”→“1”~“6”のどの方向に移動する場合にも、移動するらせん転位の PK 力には影響を与えない非すべり応力であることに注意する。

得られた初期座標と最終座標を用いて内挿イメージを 19 個作成し、らせん転位の静的なパイエルスエネルギーに対する非すべり応力の影響を NEB 法を用いて調査する。本研究では、オープンソースである LAMMPS を用いて、通常の NEB を最初の 10,000 ステップ実行し、その後、climbing-image による NEB (Henkelman, et al., 2000) を系に作用する力の最大値が $0.001 \text{ eV/\AA}$ 以下になるまで実行する。

3. 解析結果

3.1 らせん転位コア構造

これまでに、bcc 金属において、らせん転位コア構造はコアが収縮している non-degenerate 型と、三方向に拡張している degenerate 型の二種類の構造が提案されているが (Vitek, et al., 1970), 近年の第一原理計算では、 α -Fe のらせん転位コアは三回対称の non-degenerate 型になることが報告されている (Itakura, et al., 2012, Frederiksen and Jacobsen, 2003). そこで、今回用いる二つの原子間ポテンシャルのらせん転位コア構造を比較するために、Differential displacement (DD) ベクトル (Vitek, et al., 1970) を利用する。DD ベクトルは転位コア構造の表示法である。らせん転位を表すためには、まず完全結晶とらせん転位を含むモデルを比較し、 y 方向の原子変位 u_y を求める。つぎにある原子 α に対して、 $\{111\}$ 面上の最隣接原子 β を探し、それらの変位差の大きさ $|u_y^\alpha - u_y^\beta|$ を求める。DD ベクトルの大きさは、上記の変位差の大きさを意味しており、DD ベクトルの方向は、 α 原子と β 原子をつなぐ方向であり、その向きは、小さい変位を持つ原子から大きい変位を持つ原子の方向を正とする。

図 2(a)(b) に、Chamati らの EAM ポテンシャルと Mendelev らの EAM ポテンシャルにより表現される緩和後の S1 らせん転位の DD ベクトルをそれぞれ示す。これらの転位コアはともに easy-core に存在している。中抜き丸印は bcc 構造内の原子を表し、色の違いは y 方向の座標の違いを表している。すなわち、同じ色の原子は同じ xz 面に存在している。中塗り丸印は Common Neighbor Analysis 法 (Honeycutt, et al., 1987) により欠陥と判定された原子であり、それらの原子が構成する三角形の内部にらせん転位コアの中心が存在していることを意味している。図 2(a)(b) より、今回使用するいずれの原子間ポテンシャルにおいても、らせん転位コア構造が三回対称の non-degenerate 型を有していることが確認できる。これは先述の通り、 α -Fe に対する第一原理計算の結果と等し

Fig. 3 Relationships between total energy E_{NEB} and image numbers of NEB analyses under external stress σ_x . The screw dislocation core moves from “0” to “1” or “2”. Gray scale of circle plots represents values of σ_x .

いことになる。

非すべり応力がある一定値を超えると、無負荷時に比べてらせん転位の DD ベクトルが変化することが報告されている (Ito and Vitek, 2001, Gröger, et al., 2008). 具体的に本解析モデルの座標系に対応させると、 $\sigma_x = -0.05c_{44}$ と $\sigma_z = 0.05c_{44}$ が同時に作用する場合は、“3”～“6”の方向に DD ベクトルが拡張し、一方で、 $\sigma_x = 0.05c_{44}$ と $\sigma_z = -0.05c_{44}$ が同時に作用する場合は、“1”と“2”方向に DD ベクトルが拡張する。これに対して、本解析条件では、二軸ではなく単軸応力を負荷しており、なおかつその絶対値も $0.015c_{44}$ 以下である。そのため、図 2(c)(d) に示すように、Chamati ポテンシャルのらせん転位モデルに対して、負荷応力 $\sigma_x = \pm 1.0$ GPa を作用させても、DD ベクトルはほとんど変化を示さず、図 2(a) と同じ non-degenerate 型の 3 回対称構造を示している。 σ_x 以外の非すべり応力でもこの傾向は同様であることを確認している。

3.2 パイエルスエネルギーの非すべり応力依存性

図 3(a)(b) に、Chamati らの EAM ポテンシャルと Mendelev らの EAM ポテンシャルを用いた正方形モデルに対して、負荷応力 σ_x を作用させ、らせん転位が“0”→“1”，もしくは“0”→“2”に移動するときの初期座標からの系全体のエネルギー変化 E_{NEB} をそれぞれ示す。横軸の値は、NEB 法で内挿したイメージの番号を意味しており、イメージ番号 0 では、らせん転位コアは図 1(c) の“0”の位置に存在し、イメージ番号 ± 18 では、“1”もしくは“2”の位置に移動している。プロットの色濃淡は σ_x の大きさを表している。

図 3(a) に示す Chamati らの EAM ポテンシャルの場合、 E_{NEB} は一つのピークを示しているが、図 3(b) に示す Mendelev らの EAM ポテンシャルの場合、Gordon らが報告しているように (Gordon, et al., 2010), E_{NEB} は二つのピークを示していることが確認できる。Itakura らによるらせん転位移動に対するエネルギー障壁の第一原理計算 (Itakura, et al., 2012) では、 E_{NEB} は一つのピークを示している。そのため、Chamati らの EAM ポテンシャルの方が Mendelev らの EAM ポテンシャルより第一原理計算の結果を再現できていることが確認できる。しかしながら、二つの原子間ポテンシャルは、ともに E_{NEB} の最大値 $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ は非すべり応力 σ_x に依存し、一方で、初期座標と最終座標のエネルギーの差 (ΔE) は非すべり応力 σ_x に依存しないという共通の傾向を示している。この傾向は、他の非すべり応力についても確認できる。0 → 1 にらせん転位が移動する場合 $\Delta E < 0$ であるが、0 → 2 に移動する場合、 $\Delta E > 0$ となる。これは 2.1 節で述べたように、隣接する転位間距離が等間隔でないことに起因しており、0 → 1 にらせん転位が移動する場合は 0 → 2 に移動する場合と比べて最小転位間距離が小さくなることが原因の一つであると考えられる。

また、今回の計算から得られる E_{NEB} は以下の三つのエネルギーの和であると考えられる。一つ目は、らせん転位の移動により生じる塑性ひずみに起因するエネルギー E_σ である。二つ目は、らせん転位対の距離が変化するこ

Fig. 4 Relationships between energy barrier $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ and various applied stresses of Chamati potential: Square model. Colors of both circles and lines correspond to the screw dislocation propagation direction.

Fig. 5 Relationships between energy barrier $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ and various applied stresses of Mendelev potential: Square model. Colors of both circles and lines correspond to the screw dislocation propagation direction.

Fig. 6 Relationships between energy barrier $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ and various applied stresses of Chamati potential: Parallelogram model. Colors of both circles and lines correspond to the screw dislocation propagation direction.

とによる弾性相互作用エネルギーの変化 E_{int} である (Hirth and Lothe, 1982b). 最後は、転位が隣接する easy-core に移動するために乗り越えるべきパイエルスエネルギー E_p である (Hull and Bacon, 2011). ここで、 E_σ と E_{int} の値が今回の非すべり応力により変化していれば、 ΔE は変化するはずである。しかしながら、図 3 に示すように ΔE はそれぞれのらせん転位移動方向に対して非すべり応力による変化は確認できない。これらの結果より、今回 NEB 法により算出される $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ の非すべり応力依存性は、 E_p の非すべり応力による変化がその大部分を占めていると考えることができる。つまり、らせん転位 S1 の移動方向により、S2 との相対的な位置関係は変化してしまうが、NEB 法により得られる $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ の非すべり応力依存性を求めることで、らせん転位のパイエルスエネルギーに対する非すべり応力の影響を評価できると考えられる。

図 4 に Chamati らの EAM ポテンシャルエネルギーを使用した正方形モデルの $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ の非すべり応力依存性をそれぞれ示す。図 4(a) に示すように、 σ_{hydro} を負荷すると、らせん転位の移動方向によらず、圧縮雰囲気では $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ が大きくなり、膨張雰囲気では逆に $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ が小さくなっている。これは、図 4(c) に示すように、転位線方向に σ_y を負荷した場合においても同様である。つまり、 σ_{hydro} や σ_y は、 $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ の非すべり応力の関係から、らせん転位の運動方向には影響を与えないことがわかる。次に、転位線に垂直方向に σ_x または σ_z を負荷した場合を考える。このとき、 $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ の非すべり応力依存性は、らせん転位の運動方向に影響を受けている。図 4(b) に示すように、 $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ の σ_x 依存性は、“1”、“2” 方向に移動するとき正の相関を示すが、“3”~“6” 方向に移動するとき負の相関を示すこと

が確認できる。一方で、図 4(d) に示すように、 $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ の σ_z 依存性は、 σ_x の場合に比べて反対の傾向を示している。

図 5, 6 に Mendelev らの EAM ポテンシャルを使用した正方形モデルと Chamati らの EAM ポテンシャルを使用した平行四辺形モデルに対する $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ の非すべり応力依存性をそれぞれ示す。図 4 と比較すると、 $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ の絶対値は異なるが、らせん転位の周期構造や使用する原子間ポテンシャルによらず、 $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ の非すべり応力依存性はすべて同じ傾向を示していることが確認できる。

以上の結果をまとめると、まず、らせん転位のパイエルスエネルギーは、その転位の PK 力に対して影響を与えない非すべり応力により変化することがわかった。次に、パイエルスエネルギーの非すべり応力依存性は、非すべり応力成分により変化し、さらに、転位が移動する方向にも影響を受けていることがわかった。最後に、パイエルスエネルギーの非すべり応力依存性の傾向は、らせん転位の周期構造や使用した原子間ポテンシャルに依存しないことが確認できた。ここで得られた結果は、分子動力学シミュレーションを用いて Gröger らが報告している、らせん転位のすべり系が遷移するための条件とよい対応関係を示している (Gröger, et al., 2008)。

4. 考 察

4.1 結晶構造変化とパイエルス障壁の関係

本研究の結果より、らせん転位のパイエルスエネルギーは、その転位の PK 力に対して影響を与えない非すべり応力により変化することが確認できた。さらに、そのパイエルスエネルギーの非すべり応力依存性は転位の移動方向に影響を受けることから、そのメカニズムを理解するためには、より詳細な検討が必要である。ここでは、非すべり応力による転位コア周辺の原子構造変化に着目して、なぜパイエルスエネルギーは非すべり応力依存性を示すのかについて考察する。そのために、以下に示す原子構造変化を表す二つのパラメーターを導入する。一つ目は転位線に垂直な面 ($\{111\}$ 面) の原子構造に着目し、その面を構成する三角形格子 (各辺の方向は、 $[11\bar{2}]$, $[\bar{1}2\bar{1}]$, $[2\bar{1}\bar{1}]$ である。図 1(c) 参照。), の形状変化を以下のように表現する。

$$P_A = \frac{A_S - A_{S0}}{A_{S0}}. \quad (3)$$

ここで、 A_S は、 $\{111\}$ 面を構成する三角形格子について、らせん転位移動方向を底辺にし、その長さで三角形の高さを除することで得られるアスペクト比であり、 A_{S0} は正三角形のアスペクト比 ($= \sqrt{3}/2$) を意味している。そのため、 P_A は非すべり応力による転位線に垂直な面を構成する三角形のゆがみを表すパラメーターであり、正であれば正三角形に比べて縦長の三角形に、逆に負であれば正三角形に比べて横長の三角形にそれぞれ変化していることを意味する。二つ目のパラメーターは転位線長さ方向の $\{111\}$ 面間距離 L に着目し、その面間距離の変化を以下のように表現する。

$$P_L = \frac{L - L_0}{L_0} \quad (4)$$

L_0 は無負荷状態の $\{111\}$ 面間距離を表している。すなわち、 P_L は非すべり応力による転位線の長さの変化を表すパラメーターであり、正であれば、らせん転位線方向に正のひずみが生じ、転位線が伸びていることを、逆に負であれば、らせん転位線方向に負のひずみが生じており、転位線が縮んでいることを意味する。

図 7 に P_A と P_L に対する $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ の変化を示す (Chamati の正方形モデル)。図 7(a) を見ると、 σ_x や σ_z による P_A の変化は σ_{hydro} や σ_y に比べて大きいことがわかる。一方で、図 7(b) を見ると、 σ_{hydro} や σ_y による P_L の変化は σ_x や σ_z に比べて大きいことがわかる。 P_A や P_L の変化が大きい場合、 $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ は負の相関を示している。しかしながら、 P_A もしくは P_L それぞれにおいて、変化が小さい非すべり応力成分が存在する。そのため、 P_A もしくは P_L のみでは全ての非すべり応力成分が $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ に及ぼす影響を統一的に整理することができないことが理解できる。

そこで、上記の二つのパラメーターの和を $P (= P_A + P_L)$ として、パイエルスエネルギーとの関係を検討する。図 8(a) は Chamati らの EAM ポテンシャルの正方形モデル、図 8(b) は Mendelev らの EAM ポテンシャルの正方形モデル、図 8(c) は Chamati らの EAM ポテンシャルの平行四辺形モデルの P による $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ の変化をそれぞれ表している。全てのモデルにおいて、 P に対して $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ は負の相関を示すことが確認でき、パイエルスエネルギーの非すべり応力依存性を P により理解することが可能である。つまり、作用させた非すべり応力により、らせん転位移動距離が転位線方向を共有する他の二つの方向に比べて短くなる、もしくは転位線が伸びると、らせん転位のパイエルスエネルギーは小さくなる。逆に移動距離が他の方向と比べて長くなる、もしくは転位線が短くなると、ら

Fig. 7 Relationships between the geometrical parameter P_A or P_L and energy barrier $E_{NEB}^{\max}$ of Chamati potential: Square model. Colors of both marks and lines correspond to the screw dislocation propagation direction. Closed triangles: Hydrostatic stress. Closed circles: σ_x . Open triangles: σ_y . Open circles: σ_z .

Fig. 8 Relationships between the geometrical parameter $P = P_A + P_L$ and energy barrier $E_{NEB}^{\max}$. Colors of both marks and lines correspond to the screw dislocation propagation direction. Closed triangles: Hydrostatic stress. Closed circles: σ_x . Open triangles: σ_y . Open circles: σ_z .

せん転位のパイエルスエネルギーは大きくなることになる。そして、 P_A と P_L の $E_{NEB}^{\max}$ への影響はおおよそ一対一の関係であることがわかる。ここで、 P により表現される結晶構造変化はらせん転位の運動に関する PK 力に影響を与えないことに注意すると、bcc 金属中のらせん転位運動は、Gordon らが示しているような PK 力に関するせん断応力だけでなく (Gordon, et al., 2010), その非すべり応力に起因した結晶構造の変形により、らせん転位のパイエルスエネルギーが変化することが明らかに理解できる。

なお、Mendelev らの EAM ポテンシャルを使用した場合、 P の取り得る範囲が他に比べて大きいことが確認できる。これは、Mendelev らの EAM ポテンシャルの c_{11} は他のポテンシャルに比べて 0.9 % 大きい、一方で c_{12} は 1.2 % 小さいため、非すべり応力による原子構造の変化が Mendelev らのポテンシャルエネルギーの方が大きくなるのが原因であると考えられる。

4.2 整合な球状析出物の応力場と交差すべりの関係

ここでは、これまでの結果を用いて整合な球状析出物とらせん転位の相互作用を考える。母材と析出物の間にミスフィットひずみ ε が存在していると、析出物周りには応力場が生じるため、その応力場がらせん転位の交差すべりに対してどのような影響を与えているかを導入した幾何学的パラメータ P を用いて考察する。

今回対象とする座標系と球状析出物の関係を図 9(a) に示す。ここでは析出物の位置を原点とする。また、転位線が y 方向に伸びているらせん転位が $z > 0$ の xy 面を x 方向に沿って負から正の方向に移動すると仮定し、転位

Fig. 9 (a) Schematic figure of interaction between a spherical precipitate and a screw dislocation. Atomic structural change around the spherical precipitate with (b) $\bar{\epsilon} > 0$ and (c) $\bar{\epsilon} < 0$.

線の一部が析出物に近接しているとする。今回は $y = 0$ の面で、析出物の応力場の影響を受けて最初の交差すべりが発生すると仮定する。

ミスフィットひずみ $\bar{\epsilon} \neq 0$ を有する整合に析出した球状析出物まわりの応力場は線形弾性論において、次式で表される (Eshelby, 1956).

$$\sigma_{ij} = \frac{2\mu_M \bar{\epsilon} R^3}{r^5} \begin{bmatrix} r^2 - 3x^2 & 3xy & 3xz \\ 3xy & r^2 - 3y^2 & 3yz \\ 3xz & 3yz & r^2 - 3z^2 \end{bmatrix} \quad (5)$$

ここで、 $\bar{\epsilon}$ はミスフィットひずみ、 R は球状析出物の半径、 r は原点からの距離 ($= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$) である。ここでは、着目しているらせん転位の PK 力に關与する応力成分 (τ_{xy} , τ_{yz}) は検討しない。また、本研究の結果から、 σ_y はらせん転位運動に対してどの方向にもほぼ一定の影響を与えるため (図 4(c) など)、今回は考えない。そのため、本研究では、上式から得られる応力成分 σ_x , σ_z , τ_{xz} から、(111) 面 (xz 平面) の原子構造変化を考えることで、 P を推定し、らせん転位の交差すべりの生じやすさについて検討する。すなわち、 P_A が表現する三角形のゆがみの変化に注目する。

まず、正のミスフィットひずみ $\bar{\epsilon} > 0$ の場合を考える。析出物に近づくらせん転位のすべり面を、析出物の中心を通る面から析出物の半径の $1/\sqrt{3}$ の範囲 ($0 < z < R/\sqrt{3}$) とすれば、 $y = 0$ の平面におけるこの領域は常に、 $\sigma_x < 0$, $\sigma_z > 0$, $\tau_{xz} > 0$ の応力雰囲気になる。これらの応力成分の符号を考慮すると、析出物近傍の原子構造は、図 9(b) に示すような形状に変化する。ここで、らせん転位の移動方向、“0”→“2”、“0”→“4”、“0”→“6”に対する P をそれぞれ考える。まず、図 9(b) より、らせん転位が“0”→“2”に移動する場合は、 $P > 0$ となり、パイエルスエネルギーは減少することが推測できる。一方で、“0”→“4”、もしくは“0”→“6”に移動する場合は、 $P < 0$ となり、パイエルスエネルギーは増加することが推測できる。つまり、 $\bar{\epsilon} > 0$ の場合、らせん転位は交差すべりを生じるよりも、同じすべり面上で析出物と相互作用する方が、パイエルスエネルギーは小さいことになり、結果的に、交差すべりが生じにくい可能性を示唆している。この結果に対して、負のミスフィットひずみ $\bar{\epsilon} < 0$ の場合、上記と同じ領域内では常に、 $\sigma_x > 0$, $\sigma_z < 0$, $\tau_{xz} < 0$ の応力雰囲気になり、図 9(c) のような原子構造に変化する。そのため、“0”→“6”にらせん転位が移動する場合、 $P > 0$ となり、交差すべりが生じやすい応力雰囲気であることが推測できる。

以上の考察より、析出物近傍の応力場は、らせん転位の各すべり系のパイエルスエネルギーに対して、それぞれ異なる影響を与えることが確認できる。また、このことは、析出物近傍におけるらせん転位の交差すべり現象に何らかの影響を与える可能性を示唆している。そのため、現状では転位の移動方向に対して垂直なある平面に限定した考察ではあるが、本論文で得られた結果は、材料強度設計に対して有益な指針となることが期待できる。

5. 結 言

本研究では、 α -Fe 中に存在するらせん転位のパイエルスエネルギーに対する転位運動に寄与しない非すべり応力の影響を、Nudged elastic band 法を用いて検討した。ここで検討する応力成分は、着目するらせん転位に作用する Peach-Koehler (PK) 力に対して影響を与えない。得られた結果を以下に示す。

- らせん転位のパイエルスエネルギーは、その転位運動に寄与しない非すべり応力により変化し、その傾向は非すべり応力成分に影響を受けることがわかった。

- パイエルスエネルギーの非すべり応力依存性の傾向は、らせん転位の周期構造や使用した原子間ポテンシャルに依存しないことが確認できた。
- パイエルスエネルギーの非すべり応力依存性は、らせん転位コア近傍の原子構造の変化により説明することができた。
- 得られた結果より、らせん転位と析出物の相互作用を検討し、析出物周りの応力場が交差すべり現象に影響を与える可能性があることを示した。

6. 謝 辞

本研究の一部は、(独) 科学技術振興機構 (JST) による産学共創基礎基盤研究「ヘテロ構造制御」の支援を受けて行われたものである。

References

- Ardell, A.J., Precipitation hardening, *Metallurgical and Materials Transactions A*, Vol.16, No.12 (1985), pp.2131-2165.
- Arzt, E. and Ashby, M.F., Threshold stresses in materials containing dispersed particles, *Scripta Metallurgica* Vol.16, No.11 (1982), pp. 1285-1290.
- Bacon, D. J., Kocks, U. F., and Scattergood, R. O., The effect of dislocation self-interaction on the orowan stress, *Philosophical Magazine*, Vol.28, No.6 (1973), pp.1241-1263.
- Chamati, H., Papanicolaou, N. I., Mishin, Y., and Papaconstantopoulos, D. A. Embedded-atom potential for Fe and its application to self-diffusion on Fe(100), *Surface Science*, Vol.600, (2006), pp.1793-1803.
- Eshelby, J. D., Seitz, F., and Turnbull, D., *Solid state physics*, New York: Academic Press, Vol.3 (1956).
- Frederiksen, S.L. and Jacobsen, K.W., Density functional theory studies of screw dislocation core structures in bcc metals, *Philosophical Magazine* Vol.83, No.3 (2003), pp. 365-375.
- Gordon, P.A., Neeraj, T., Li, Y., and Li, J., Screw dislocation mobility in BCC metals: the role of the compact core on double-kink nucleation, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol.18, No.8 (2010), p.085008.
- Gröger, R., Bailey, A.G., and Vitek, V., Multiscale modeling of plastic deformation of molybdenum and tungsten: I. Atomistic studies of the core structure and glide of $1/2\langle 111 \rangle$ screw dislocations at 0K, *Acta Materialia*, Vol.56, No.19 (2008), pp.5401-5411.
- Henkelman, G., Uberuaga, B.P., and Jónsson, H. A climbing image nudged elastic band method for finding saddle points and minimum energy paths, *The Journal of Chemical Physics*, Vol.113, No.22 (2000), pp.9901-9904.
- Hirth, J.P. and Lothe, J., *Theory of Dislocations*, John Wiley and Sons, (1982a), p.275.
- Hirth, J.P. and Lothe, J., *Theory of Dislocations*, John Wiley and Sons, (1982b), p.115
- Honeycutt, J.D. and Andersen, H.C. Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters, *Journal of Physical Chemistry*, Vol.91, No.19 (1987), pp.4950-4963.
- Hull, D. and Bacon, D.J., *Introduction to Dislocations*, Elsevier Science, 5th edition (2011), p.146.
- Itakura, M., Kaburaki, H., and Yamaguchi, M., First-principles study on the mobility of screw dislocations in bcc iron, *Acta Materialia*, Vol.60, No.9 (2012), pp.3698-3710.
- Ito, K., and Vitek, V., Atomistic study of non-Schmid effects in the plastic yielding of bcc metals, *Philosophical Magazine A*, Vol.81, No.5 (2001), pp.1387-1407.
- Mendelev, M.I., Han, S., Srolovitz, D.J., Ackland, G.J., Sun, D.Y., and Asta, M. Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron. *Philosophical Magazine*, Vol.83, No.35 (2003), pp.3977-3994.
- Plimpton, S., Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics, *Journal of Computational Physics*, Vol.117, (1995), pp.1-19.
- Suzuki, H., *Dislocation Dynamics*, edited by A. R. Rosenfield, G. T. Hahn, A. L. Bement and R. I. Jaffee, McGraw-Hill, New York, (1968), p.679.
- Vitek, V., Perrin, R.C., and Bowen, D.K. The core structure of $\langle 111 \rangle$ screw dislocations in b.c.c. crystals, *Philosophical Magazine*, Vol.21, No.173 (1970), pp.1049-1073.