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

# Influence of Non-glide Stresses on the Peierls Energy of Screw Dislocations

木 下 惠 介\* 下 川 智 嗣 喜 成 年 泰 Keisuke KINOSHITA Tomotsugu SHIMOKAWA Toshiyasu KINARI 澤 田 英 明 川 上 和 人 潮 田 浩 作 Hideaki SAWADA Kazuto KAWAKAMI Kohsaku USHIODA

# 抄 録

Nudged Elastic Band 法を用いて、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 について検討を行い、両者の関係について示した。この結果より、非すべり応力によるパイエルスエネル ギーの変化から、らせん転位の動く方向が非すべり応力により変化することを示した。この関係を表現で きる幾何学パラメーターを導入する。最後に整合析出物周りの応力場より幾何学パラメーターを求め、析 出物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検討した。

### 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.

# 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<sup>1)</sup>、 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<sup>2)</sup>。つまり、析 出物近傍が交差すべりを生じやすい雰囲気にあれば、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 centerd 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) を外部から負荷すると,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<sup>3,4</sup>。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<sup>5</sup>を用い、パイエルスエネルギーの応力場依 存性は Nudged Elastic Band (NEB) 法のを使って求める。

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 a-Fe として, x, y, z 方向の結晶 方位をそれぞれ, [112], [111], [110] とする。ここで, a-Fe の格子定数を  $a_0$  として, 三つのベクトルを  $\mathbf{v}_{[112]} = a_0[112]/3$ ,  $\mathbf{v}_{[111]} = a_0[111]/2$ ,  $\mathbf{v}_{[110]} = a_0[110]$  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  $\mathbf{e}^i$  は,

 $\mathbf{e}_{1}^{s} = 14 \mathbf{v}_{[112]}, \mathbf{e}_{2}^{s} = 16 \mathbf{v}_{[111]}, \mathbf{e}_{3}^{s} = 24 \mathbf{v}_{[1\overline{1}0]} + \frac{1}{2} \mathbf{v}_{[111]}$  (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  $\mathbf{e}_{1}^{p}$ は、

 $\mathbf{e}_{1}^{p} = 14 \mathbf{v}_{[11\bar{2}]}, \ \mathbf{e}_{2}^{p} = 16 \mathbf{v}_{[111]}, \ \mathbf{e}_{3}^{p} = 24 \mathbf{v}_{[1\bar{1}0]} + 7 \mathbf{v}_{[11\bar{2}]} + \frac{1}{2} \mathbf{v}_{[111]}$ (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 $\tau_{yz}$ 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]のバーガースベクト 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  $\mathbf{v}_{1111}$ 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 v<sub>1111</sub>を考慮することで系内部の平均応 力τ\_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



図1 Chamati のポテンシャルエネルギーによる異なる境界条件を持つ解析モデルのせん断応力 (τ<sub>y2</sub>)場 (a) Square model, (b) Parallelogram model, (c) *α*-Fe の (111) 面の原子構造とらせん転位コア (easy-core) の位置 Shear stress (τ<sub>y2</sub>) field of analysis models expressed by Chamati potential with different periodic boundary conditions (a) Square model, (b) Parallelogram model and (c) Atomic structure of (111) planes in *α*-Fe and squares represent the position of easy-screw dislocation core.

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<sup>7</sup>。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(Embeded atomic method: EAM)<sup>®</sup>であり、EAM ポテ ンシャル<sup>®</sup>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 bcc 鉄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。次に、それらの内挿 されたイメージ間に線形ばねを設置し、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。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<sup>10)</sup>。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 [110] 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 ん転位が移動する現象は,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 〈112〉 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 <112> 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。

以上のことを考慮して,本研究で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 0.1K 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  $E \sigma_{hvdro} (= \sigma_x + \sigma_v + \sigma_z)$ について考える。 $\sigma_{hvdro}$ を負荷するとき, σ<sub>x</sub>=σ<sub>y</sub>=σ<sub>z</sub>である。各外部負荷の大きさは, −1.0, −0.5, 0, 0.5 および 1.0GPa である。これらの負荷応力は 0MPa から所 定の応力まで 50000 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 法を最初の 10000 ステップ実行し、その後、 climing-image による NEB 法のを系に作用する力の最大値 が 0.001 eV/Å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<sup>11)</sup>,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<sup>12,13)</sup>。そこで、本研究で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、を求める。次にある原子 a に対して、 $\{111\}$ 面上の最隣接原子 $\beta$ 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、 $\alpha$  原子と $\beta$  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。中塗りの丸印は Common Neighbor Analysis 法<sup>14)</sup> 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、本研究で使用 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<sup>3,4)</sup>。具体的に本解析モデルの座標系に対応させると、  $\sigma_x = -0.05 c_{44} \ge \sigma_z = 0.05 c_{44}$ 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、 $\sigma_x = 0.05 c_{44} \ge \sigma_z$ =  $-0.05 c_{44}$ 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  $0.015 c_{44}$ 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。 $\sigma_x$ 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  $\sigma_x$ 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  $E_{\text{NEB}}$ 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。プロットの色の濃淡は  $\sigma_x$ 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,  $E_{\text{NEB}}$ 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<sup>15</sup>, $E_{\text{NEB}}$ 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<sup>12)</sup>では, $E_{\text{NEB}}$ 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  $E_{\text{NEB}}$ の最大値  $E_{\text{NEB}}$ は非すべり応力 $\sigma_x$ に依存し、一方で、 初期座標と最終座標のエネルギーの差 ( $\Delta E$ ) は非すべり応 力 $\sigma_x$ 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。



図2 無負荷時のらせん転位周りの Differential displacement ベクトル (DD ベクトル) 図

(a) Chamati ポテンシャル, (b) Mendelev ポテンシャル,外部応力負荷時の DD ベクトル図 (Chamati ポテンシャルを使用), (c) σ,=-1.0 GPa, (d) σ,=1.0 GPa

各色は [111] 方向に沿った原子位置の違いを表す、白丸は bcc 構造を、中塗り丸はらせん転位コアに対応する

Differential displacement vectors around a screw dislocation under no external loading expressed (a) Chamati potential, (b) Mendelev potential and under external loading, (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. また、本研究の計算から得られる  $E_{\text{NEB}}$  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  $E_{\sigma}$ である。二つ目は、らせん転位対の距離が変化することに よる弾性相互作用エネルギーの変化  $E_{\text{int}}$  である<sup>10)</sup>。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<sup>10)</sup>。ここで、 $E_{\sigma}$ と  $E_{\text{int}}$ の 値が非すべり応力により変化していれば、 $\Delta E$  は変化する はずである。しかしながら、図3に示すように  $\Delta E$  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, NEB 法により算出される *E*<sub>NEB</sub>の非 すべり応力依存性は, *E*<sub>p</sub>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*<sub>NEB</sub>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、 $\sigma_{\text{hydro}}$ 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 $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ 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 $\sigma_y$ を負荷した 場合においても同様である。つまり、 $\sigma_{\text{hydro}}$ や $\sigma_y$ 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 $\sigma_x$ または $\sigma_z$ 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 $\sigma_x$ 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は負の相関 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 $\sigma_z$ 依存性は、 $\sigma_x$ 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<sup>max</sup><sub>NEB</sub>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<sup>max</sup>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<sup>max</sup><sub>NEB</sub>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。



図3 らせん転位コアは "0" から "1" または "2" に移動した場合の全エネルギー *Ε*<sub>№</sub>と NEB 解析のイメージ番号の関係 グレースケールの丸印は負荷する σ<sub>2</sub>の値に対応する

Relationships between total energy  $E_{\text{NEB}}$  and image numbers of NEB analyses under external stress  $\sigma_x$ , screw dislocation core moves from "0" to "1" or "2"

Gray scale of circle plots represents values of  $\sigma_{x}$ .





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

以上の結果をまとめると、まず、らせん転位のパイエル



図5 エネルギー障壁 E<sup>max</sup> と負荷応力の関係 (Mendelev ポテンシャルおよび Square モデル) 線と丸印の色はらせん転位の移動方向を示している

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





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

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<sup>4</sup>。

# 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, [112], [121], [211]である。 図1(c)参照。),の形状変化を以下のように表現する。

$$P_{\rm A} = \frac{A_{\rm S} - A_{\rm S0}}{A_{\rm S0}}.$$
 (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、 $A_{so}$ 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 べて横長な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。

$$P_{\rm L} = \frac{L - L_0}{L_0}.$$
 (4)

L<sub>0</sub>は無負荷状態の {111} 面間距離を表している。すなわち, P<sub>L</sub>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、 $\sigma_x$ や $\sigma_z$ による $P_A$ の変

- 65 -



図7 P<sub>A</sub> または P<sub>L</sub> とエネルギー障壁 E<sup>max</sup> の関係(Chamati ポテンシャルおよび Square モデル) 中塗り三角印は静水圧応力,中塗り丸印は σ<sub>x</sub>,中抜き三角印は σ<sub>y</sub>,中抜き丸印は σ<sub>z</sub> を負荷した場合の結果を示す Relationships between the geometrical parameter P<sub>A</sub> or P<sub>L</sub> and energy barrier E<sup>max</sup> of Chamati potential and Square model Colors of both marks and lines correspond to the screw dislocation propagation direction, Closed triangles: hydrostatic stress,



図8 幾何学的なパラメーター  $P=P_A+P_L$ とエネルギー障壁  $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ の関係 (Chamati ポテンシャルおよび Square モデル) 中塗り三角印は静水圧応力,中塗り丸印は  $\sigma_x$ ,中抜き三角印は  $\sigma_y$ ,中抜き丸印は  $\sigma_z$  を負荷した場合の結果を示す Relationships between the geometrical parameter  $P=P_A+P_L$  and energy barrier  $E_{\text{NEB}}^{\text{max}}$ 

Colors of both marks and lines correspond to the screw dislocation propagation direction, Closed triangles: hydrostatic stress, Closed circles:  $\sigma_x$ , Open triangles:  $\sigma_y$ , Open circles:  $\sigma_z$ .

化は $\sigma_{hydro}$ や $\sigma_{y}$ に比べて大きいことがわかる。一方で,図 7 (b)を見ると、 $\sigma_{hydro}$ や $\sigma_{y}$ による $P_{L}$ の変化は $\sigma_{x}$ や $\sigma_{z}$ 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、  $E_{NEB}^{max}$ 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 $E_{NEB}^{max}$ 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。

Closed circles:  $\sigma_{x}$ , Open triangles:  $\sigma_{y}$ , Open circles:  $\sigma_{z}$ .

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、 $P_A \ge P_L$ 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係する 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 力に関係するせん断応力 だけでなく<sup>15</sup>、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<sub>11</sub> は他のポ テンシャルに比べて 0.9%大きいが、一方で c<sub>12</sub> 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 Menlelev らのポテンシャルエネルギーの方が大きくなることが原因 であると考えられる。



図9 (a) 球形析出物とらせん転位の相互作用に関する概要図 ミスフィットひずみ  $\varepsilon$  による原子構造の変化 (b) $\bar{\varepsilon}$ >0, および (c)  $\bar{\epsilon}$ <0

(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

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 *ɛ* 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 パラメーター *P* を用いて考察する。

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、転位線の一部が析 出物に近接しているとする。本研究では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 **ε**≠0 を有する整合に析出した球状析 出物周りの応力場は線形弾性論において,次式で表され る<sup>17</sup>。

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

ここで、 $\epsilon$ 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 力に関与する応力成分 ( $\tau_{xy}$ ,  $\tau_{xz}$ ) は検討しない。また、本研究の結果から、 $\sigma_y$  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)、本研究では考えない。そのため、上式 から得られる応力成分  $\sigma_{x}$ ,  $\sigma_{z}$ ,  $\tau_{xz}$  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 $\bar{s}>0$ 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、  $P < 0 \ge x \circ b$ 、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、 $P > 0 \ge x \circ b$ 、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、a-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-Koeheler (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。

## 謝 辞

本論文は日本機械学会論文集<sup>18)</sup>からの転載である。転載の許可をいただいた日本機械学会に謝意を表する。

# 参照文献

- Ardell, A.J.: Metallurgical and Materials Transactions A. 16 (12), 2131-2165 (1985)
- Arzt, E., Ashby, M.F.: Scripta Metallurgica. 16 (11), 1285-1290 (1982)
- Ito, K., Vitek, V.: Philosophical Magazine A. 81 (5), 1387-1407 (2001)
- 4) Gröger, R. et al.: Acta Materialia. 56 (19), 5401-5411 (2008)
- 5) Plimpton, S.: Journal of Computational Physics. 117, 1-19 (1995)
- Henkelman, G. et al.: The Journal of Chemical Physics. 113 (22), 9901-9904 (2000)

- Suzuki, H.: Dislocation Dynamics. New York, McGraw-Hill, 1968, p.679
- 8) Chamati, H. et al.: Surface Science. 600 (9), 1793-1803 (2006)
- Mendelev, M.I. et al.: Philosophical Magazine. 83 (35), 3977-3994 (2003)
- Hirth, J.P., Lothe, J.: Theory of Dislocations. John Wiley and Sons, 1982
- Vitek, V., Perrin, R.C., Bowen, D.K.: Philosophical Magazine. 21 (173), 1049-1073 (1970)
- 12) Itakura, M. et al.: Acta Materialia. 60 (9), 3698-3710 (2012)
- Frederiksen, S.L., Jacobsen, K.W.: Philosophical Magazine. 83 (3), 365-375 (2003)
- 14) Honeycutt, J.D., Andersen, H.C.: Journal of Physical Chemistry. 91 (19), 4950-4963 (1987)
- Gordon, P.A. et al.: Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 18 (8), 085008 (2010)
- Hull, D., Bacon, D.J.: Introduction to Dislocations. 5th Edition. Elsevier Science, 2011, p.146
- Eshelby, J.D. et al.: Solid State Physics. Vol.3. New York, Academic Press, 1956
- 18) 木下恵介 ほか:日本機械学会論文集.80 (809), CM0018 (2014)



木下恵介 Keisuke KINOSHITA 先端技術研究所 基盤メタラジー研究部 工博 兵庫県尼崎市扶桑町1-8 〒660-0891



下川智嗣 Tomotsugu SHIMOKAWA 金沢大学 理工研究域 教授 工博



喜成年泰 Toshiyasu KINARI 金沢大学 理工研究域 教授 工博



澤田英明 Hideaki SAWADA 先端技術研究所 数理科学研究部 主幹研究員 工博



川上和人 Kazuto KAWAKAMI 先端技術研究所 数理科学研究部 主幹研究員 工博



潮田浩作 Kohsaku USHIODA 技術開発本部 顧問 工博