

分子動力学法を用いた対応粒界を持つ双晶内の転位の挙動に関する分析

筑波大学 正会員 ○亀田 敏弘

1. はじめに

微細粒組織からなる金属材料は高強度・高靱性かつ安定性が高いという特徴を持つ。これらの特徴を有効に活用することにより、様々な分野への適用が考えられる。計算機能力の向上によりナノレベルの現象の数値シミュレーションを行うことが可能となっているが、現状ではナノレベルの解析手法のみで我々が利用しているスケールの材料全体を解析することは困難であり、ナノレベルの材料挙動予測結果をよりマクロな解析である有限要素法などに橋渡しすることが重要となっている。これらを踏まえ、本研究では異なる結晶粒界を含む銅のナノ双晶に対して分子動力学シミュレーションを行い、結晶粒界近傍の金属原子の挙動を把握することを試みる。

2. 分子動力学法とポストプロセッシング

本研究では、埋め込み原子法 (Embedded atom method) ポテンシャルを用いた分子動力学法を用いた。計算の実行には、筑波大学学術情報メディアセンター所有の Linux クラスタを使用し、MPI による 48 ノードの並列計算を行った。転位が発生している部分を検出するために、centrosymmetry parameter 法を用いた。この方法は、FCC 完全結晶の場合には、原子に対して 12 個の隣接原子が存在し、それらの各々が観測対象となる原子に対して点対称の位置にペアを持つことを利用することにより、結晶の乱れを検出するものである。すなわち、各原子に対して、centrosymmetry parameter は以下の式で定義できる。

$$P_i = \sum_{j=1,6} |R_{ij} + R_{ij+6}|^2$$

ここで、 P は centrosymmetry parameter, R は観測対象の原子から見た隣接原子の位置ベクトルである。添え字 i は観測対象の原子を表す番号、 j は隣接原子を表す番号である。この方法により、 P が閾値を超えた場合に転位が発生しているとする。

3. 解析対象

解析対象として、粒界配置の異なる銅の双晶を設定する。図-1 に示すように、各結晶粒を $20 \times 20 \times 20$ (nm) の立方体とし、対応粒界を持つ双晶に粒界面に鉛直方向に引っ張りを加える。具体的には、端部の原子群に強制的に引っ張り方向の速度を与えている。粒界にはエネルギー的に比較的安定であり、結晶粒内で複数のすべり面が同時に活性化するため転位の活動が活発と予想される $\Sigma 3$ とこれまでの有限要素解析において、粒界への転位の蓄積により粒界破壊が発生しやすいと予想された $\Sigma 17b$ の 2 種類の対応粒界を設定して比較を行う。全体の原子数はそれぞれの場合で、1317888, 1523200 である。引っ張り速度は上下端でそれぞれ 10^{-3} m/s である。ひずみ速度に換算すると 5×10^4 1/s となる。温度は 300 K である。周期境界条件は設定していない。

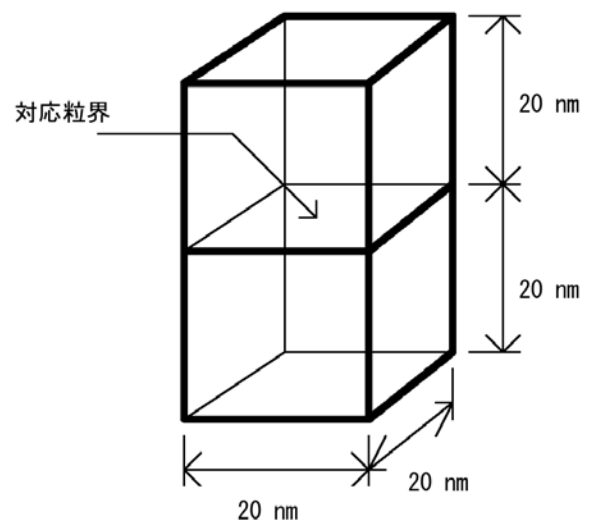


図-1 分子動力学法で解析した双晶モデル

キーワード 転位, 結晶粒界, 分子動力学, マルチスケールモデリング

連絡先 〒305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1 筑波大学大学院システム情報工学研究科構造エネルギー工学専攻

4．解析結果

例として、 $\Sigma 3$ 対応粒界を持つ双晶それぞれについて、引っ張り方向（z 方向）に対して平行な断面(xz 平面)における変形の様子ならびに転位の分布状況を図-2 に示す．図において、初期状態から 1 %ごとのスナップショットを示した．FCC 完全結晶状態を赤，転位状態を水色で示している．伸びひずみが 5 %を超えるあたりから多くの転位が観測される．

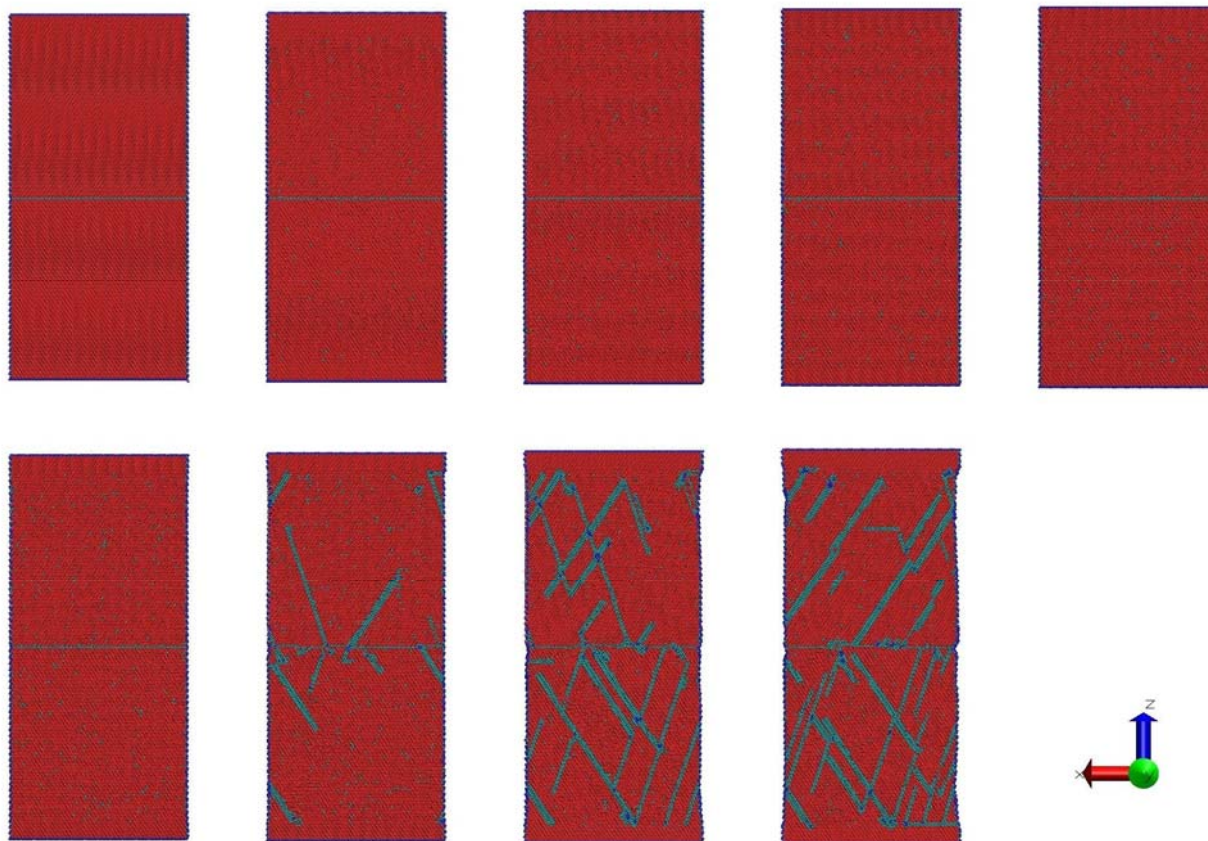


図-2 $\Sigma 3$ 対応粒界を持つ双晶の挙動（xz 断面）

また、検出された転位の量を粒界からの距離が異なる領域ごとにプロットしたものを図 3 に示す。

5．おわりに

ナノスケールでの原子運動のシミュレーションを行うことにより、結晶すべりは材料内で一様に発生しているのではなく、時間・空間的に局所的な現象であることが観察された．また、粒界近傍の原子の挙動は粒界からの距離によって相違が見られることが観察された．

参考文献

・ T. Kameda, M. A. Zikry, A. M. Rajendran : Modeling of Grain-Boundary Effects and Intergranular and Trans- granular Failure in Polycrystalline Intermetallics, Materials Transactions A, Vol. 37A, July (2006), pp. 2107-2115

・ 斉木 功, 菅家茂理, 中島章典, 寺田賢二郎：原子モデルによる塑性のマルチスケールモデリングに関する一考察，土木学会応用力学論文集，Vol.6 (2003), pp.123-130, 2003

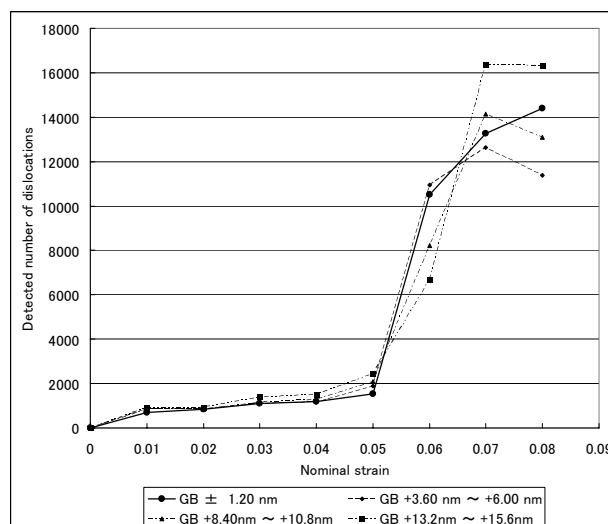


図-3 $\Sigma 3$ 対応粒界を含む双晶内の転位数の変化