

412 分子動力学法を用いた[001]小傾角粒界の構造

金沢大学[院] 学○小南 金洋 金沢大学 正 兼子 佳久
 金沢大学 正 門前 亮一 金沢大学 正 北川 和夫

1. 目的

粒界の特性は粒界を構成する原子構造に左右される。高分解能の電子顕微鏡による粒界構造の観察が行われているが、明瞭な原子構造を得ることは非常に困難である。これを解く一つの手段として、原子レベルでの動的な解析が可能な分子動力学法(以下、MD法と称す)がある。一般的に、実際の材料では、小傾角粒界が多く含まれているが、これまでMD法を用いた粒界に関する研究の多くは低 Σ 値の大傾角粒界である。

本研究では、比較的粒界構造の明らかな[001]小傾角粒界に注目し、MD法を用いて、その構造を明らかにすると共に、方位差に対するその変化を調査した。

2. 計算方法

2.1 解析モデル

本研究では、小傾角粒界の方位差を有する初期の原子配置をMD法を用いて緩和することによりその粒界構造を得る。解析対象は銅(f.c.c.)結晶の[001]小傾角粒界とし、構成結晶の[100]間の方位差 $2.4^\circ \sim 10.4^\circ$ および $67.4^\circ \sim 86.1^\circ$ において各7種類、合計14種類の小傾角粒界を用いた。初期の原子は、Fig.1に示すように三次元的に配列し、種々の方位差を有する対応粒界を作成した。緩和後の粒界構造が実際に観察されているような直線的な転位の配列になるように、粒界面に平行(x軸方向)に上下の結晶粒を相対的に並進させた。

解析には、x、y、z軸方向に周期境界条件を課したので、解析モデルの中央および上端と下端に粒界が存在する。粒界相互の影響を小さくするためモデルのy軸方向の寸法を大きく取った。モデルの総原子数は方位差によって異なり20000~40000個である。

2.2 緩和方法

原子間力は埋め込み原子(EAM)法に基づくFinnis-

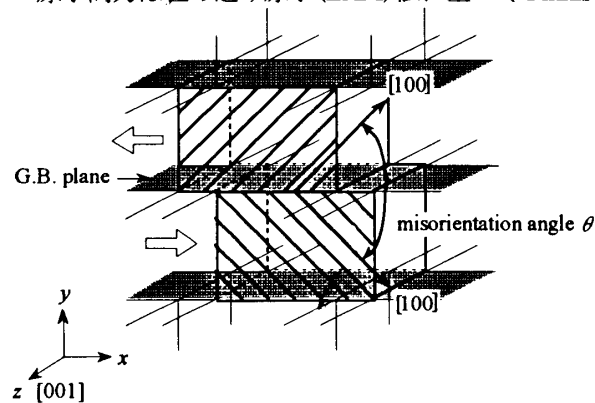


Fig.1 Periodic analytical model for grain boundary

Sinclair (F-S) ポテンシャルを用い、Newton の運動方程式を time step $10fs (= 10^{-14} s)$ で数値積分した。原子の初速度は、100K の Maxwell 分布に従うように与えた。系の温度は速度スケール法を用い一定値に制御し、圧力はモデル寸法を変化させることによって制御した。

3. 解析結果および考察

Figure 2~6 に解析により得られた粒界の原子配置を示す。全ての図は傾角軸(z軸方向)から投影したもので、粒界は図中央の左右方向に位置している。モデルは傾角軸に沿った異なる二層(Layer A, Layer B)の積層で構成されているため、Layer A を黒丸、Layer B を白丸で示す。解析した全てのモデルにおいて、粒界に沿った比較的等間隔に配列している刃状転位列が確認された。

得られた転位の配列は、方位差に依存して三つのタイプ(Type 1~3)に分類することができた。方位差 $2.94^\circ \sim 8.80^\circ$ (Fig.2,3)のモデル(Type 1)では、二種類の格子転位($a/2[\bar{1}\bar{1}0]$, $a/2[\bar{1}10]$)が粒界面に対して約 $\pm 45^\circ$ の角度をなして交互に配列していた。方位差 10.39° (Fig.4)のモデル(Type 2)においては、粒界面に対して垂直な Burgers ベクトルをもつ刃状転位($a/2[\bar{1}00]$)が粒界に沿って配列していた。また、方位差 $67.38^\circ \sim 86.05^\circ$ (Fig.5,6)のモデル(Type 3)では、一種類の格子転位($a/2[110]$)が粒界に沿って並んでいた。

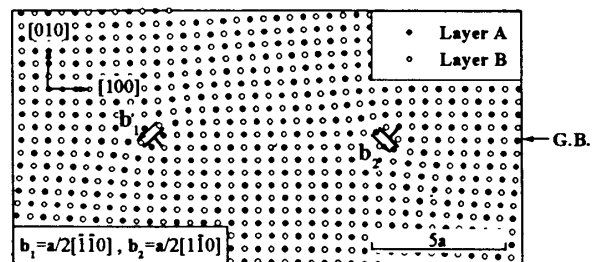


Fig.2 Relaxed atomic configuration (Type 1 ; misorientation angle: 3.47°)

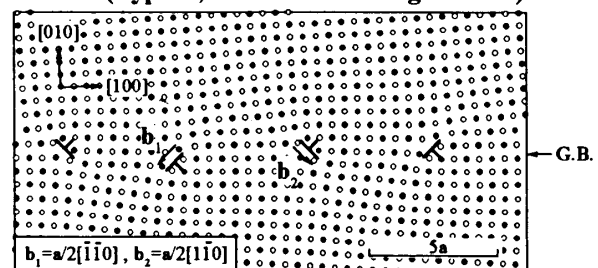


Fig.3 Relaxed atomic configuration (Type 1 ; misorientation angle: 6.03°)

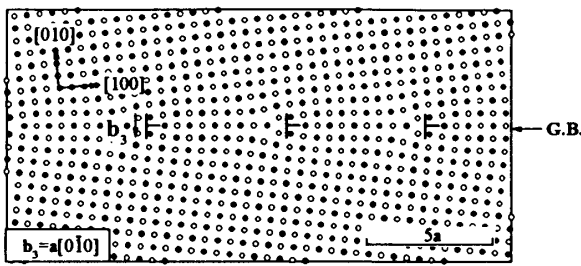


Fig.4 Relaxed atomic configuration (Type 2; misorientation angle: 10.39°)

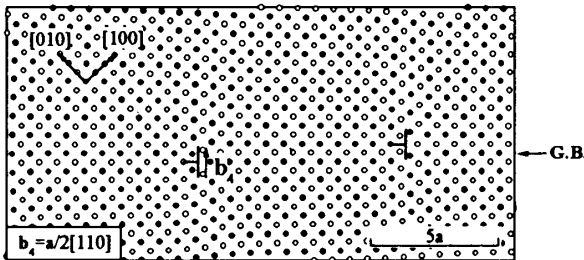


Fig.5 Relaxed atomic configuration (Type 3; misorientation angle: 85.02°)

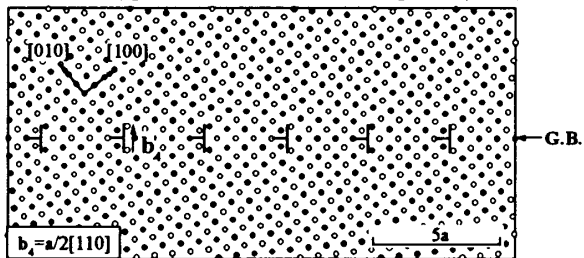


Fig.6 Relaxed atomic configuration (Type 3; misorientation angle: 77.32°)

解析により得られた平均の転位間隔は、単結晶からのずれ角の増加に伴って減少していた。解析により得られた粒界構造と理論上の粒界構造を定量的に比較するため、(1)式で示される Frank 公式から転位間隔を計算した。

$$\theta = \tan^{-1} \frac{|b|}{h} \approx \frac{|b|}{h} \quad (1)$$

ここで、 θ は方位差であり、 h は転位間隔である。Frank のモデルは、粒界面に垂直な Burgers ベクトルをもつ刃状転位のみで粒界が形成されていると仮定しているため、Type 1 の粒界構造には適用できない。そこで、それらの転位の Burgers ベクトルを Fig.7 に示すように粒界面に平行な成分と垂直な成分に分解した。粒界面に平行な Burgers ベクトル成分 ($a/2[\bar{1}00]$, $a/2[100]$) は異符号で交互に配列しているため、方位差に寄与しない。一方、粒界面に垂直な Burgers ベクトル成分 ($a/2[0\bar{1}0]$) は同符号であるため方位差に寄与し、理論上の粒界を構成する転位と一致する。

Figure 8 に方位差と平均の転位間隔との関係を示す。Frank 公式による転位の間隔と MD 法によるそれは単結晶からのずれ角が 10° 以下でよく一致していた。方位差 10.39° における転位間隔の Frank 公式との不一致は、Fig.2~4 に見られるように Type 1 から Type 2 に粒界構造が変化したためである。

一般に、小角粒界のエネルギーは方位差 θ の関数とし

て Read-Shockley の粒界転位モデル¹⁾に基づいて(2)式で与えられる。

$$E = E_0 \theta (A - \ln \theta) \quad (2)$$

Figure 9 に Type 1 と 2 の方位差に伴う粒界エネルギーの変化を示す。図より Type 1 の粒界エネルギーは Type 2 のそれと比較して常に低く、Type 1 の粒界構造が優先的に選択され Type 2 の粒界構造への変化は生じない。しかし、このような粒界構造の変化が生じるのは、転位間隔の減少に伴って、転位が連続体として仮定されている(2)式が有効でなくなるためであると考えられる。

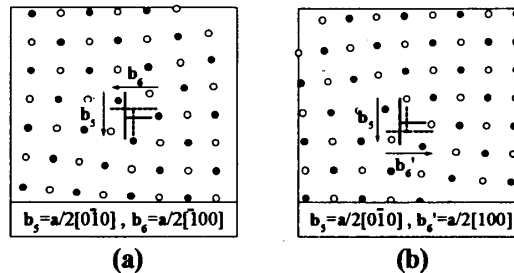


Fig.7 Decomposition of Burgers vector into normal and parallel component to the G.B. plane (a) $b_1 \rightarrow b_2 + b_3$, (b) $b_2 \rightarrow b_3 + b_4$

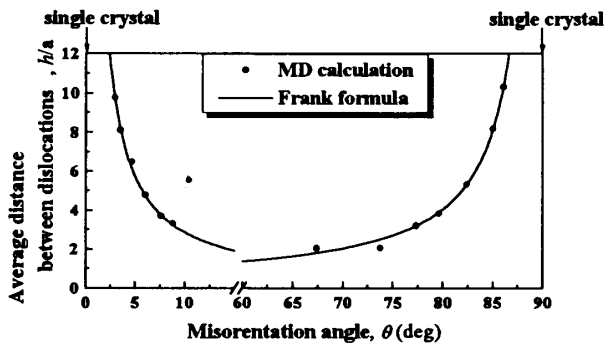


Fig.8 Comparison between MD calculation and Frank formula

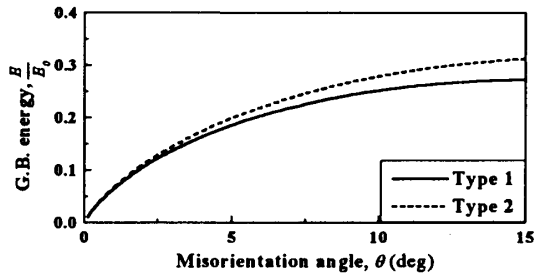


Fig.9 G.B. energy based on Read-Shockley model

4. 結言

- (1) 小傾角粒界は、粒界面に垂直な Burgers ベクトルを持つ刃状転位の配列によって構成されていることが MD 計算によっても確認された。
- (2) 粒界面上の刃状転位の配列は、単結晶からのずれ角の増加に伴って減少し、ずれ角が 10° 以下で Frank 公式とよく一致していた。

参考文献

- 1) W.T.Read and W.Shockley: Phys. Rev., 78, 275, (1950).