

小傾角粒界の粒子シミュレーション

関西学院大理工 八幡裕也, 西谷滋人, 原田智史
Particle simulation of tilt boundary

Kwansei Gakuin University, Y.Yahata, S.R.Nishitani, S.Harada

【目的】小傾角tilt粒界エネルギー(E)は、粒界を刃状転位が周期的に並んだ構造と見なすRead-Shockleyの式(1)で求まるとされてきた。

$$\left. \begin{aligned} E &= E_0 \theta (A - \log \theta) \\ E_0 &= \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)} \end{aligned} \right\} (1)$$

ここで、 A は高次の弾性エネルギーや芯のエネルギーに関するエネルギー項、 μ と ν は剛性率とポアソン比、 b はバーガースベクトルの大きさ、 θ は結晶粒の傾角を示す。

HassonらによるMorseポテンシャルを用いたシミュレーションではAl[100]対称傾角粒界のエネルギーの角度依存性は図1となった[1]。ここで、 0° 及び 90° 付近それぞれの小傾角で立ち上がりの傾きが異なることが分かる。これは、 0° 付近では式(1)に含まれるバーガースベクトルが $a[001]$ であるのに対して、 90° 付近では $a/2[011]$ であるためと考えられる。ところが、Alの双結晶を用いて、界面三重点における界面張力の釣り合いによる方法で測定した大槻の実験データでは、図2のように角度 0° 及び 90° での立ち上がりの傾きは全く同じという相違が生じた[2]。本研究ではこの相違の起源を粒子シミュレーションによって説明することを目的としている。

本研究では、原子間ポテンシャルとしてLennard-Jones型とEAM型の2種類の関数形を用いた。静的な緩和を行い粒界エネルギーの角度依存性を調べた。講演ではポテンシャル関数のパラメータによるシミュレーション結果への影響と、実験結果の再現性を報告する。

[1]G. C. Hasson, J. B. Guillot and B. Barou, Phys. Stat. Sol. (a), 2(1970), 551.

[2]A. Otsuki, J. Material Science, 40(2005), 3219.

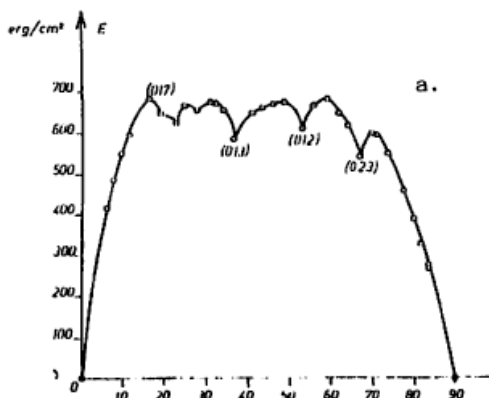


図1. Hassonらによる粒界エネルギーの角度依存性。

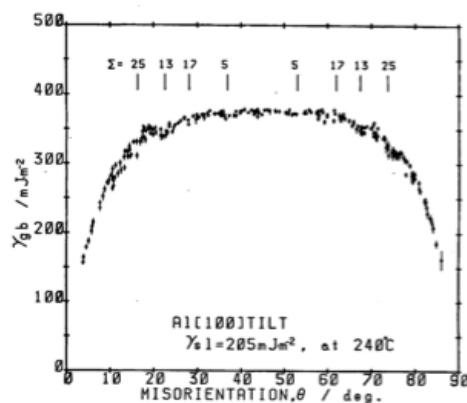


図2. 大槻の実験による粒界エネルギーの角度依存性。