

Simulation of grain boundary migration on the surface
of the weld metal by molecular dynamics
by Shin-ichi SHIBATA

1. 緒言

溶接金属表面で観察される粒界移動は粒界面と表面のなす角度に影響される。すなわち、粒界面は表面に対して垂直になるように移動する。一方、表面における粒界移動については結晶方位関係の影響やその機構については未知の点が存在する。このような原子レベルの現象の解明については分子動力学が有力な手段である。そこで、本研究では表面近傍の傾斜粒界の移動と粒界移動に及ぼす結晶方位関係の影響について分子動力学シミュレーションによる解析を試みた。

2. 計算方法

本研究では古典分子動力学法を採用した。すなわち、Newtonの運動方程式を数値的に解いて原子の位相空間中の運動軌跡を得た。ポテンシャルはモースの二体間ポテンシャルを採用した。

$$\phi(r) = \varepsilon[\exp(-2a(r - \sigma)) - 2\exp(-a(r - \sigma))] \quad (1)$$

a は係数。各係数はアルミニウムのポテンシャルとされている、 $\varepsilon = 0.06228aJ$ 、 $a = 11.65nm^{-1}$ 、 $\sigma = 0.3253nm$ とした。 r は原子間距離である。

解析には2種類の粒界を用いた。一つは[111]まわりに38.21°回転した $\Sigma 7$ 対応格子粒界と、もう一つは[111]まわりに32.00°回転した粒界(以下、ランダム粒界)である。計算セルは最初に、300K、0.1 fs×5000 ステップの緩和計算を行った。その後、各温度において、拡散係数計算、950Kにて粒界移動計算を行った。なお、表面以外の外枠層(約200pmの厚さ)は固定原子層とした。セルの圧力および温度は一定に保持して計算を行った。

3. 計算結果

3.1 結晶方位関係と拡散係数について

図1に $\Sigma 7$ 粒界とランダム粒界における、温度と拡散係数の関係を示す。両者の拡散係数は温度に上昇に従い、対数的に増加している。しかしながら、ランダム粒界は $\Sigma 7$ と比較して、拡散係数が大きく、同じ温度では拡散しやすくなっている。図2は、850Kにおける、 $\Sigma 7$ 粒界とランダム粒界のトラジェクトリーの比較である。各原子の位置は100ステップにわたって、直線で結ばれている。粒界に着目すると、 $\Sigma 7$ 粒界では規則構造が解析中も保持されており、粒界近傍の原子の移動範囲が狭くなっている。一方、ランダム粒界の粒界は粒界近傍の原子運動範囲も広く、計算中に粒界近傍に存在していた原子がバルク内へと拡散していることがわかる。これからも、同温度での粒界近傍での原子の運動範囲が両者で異なることがわかる。

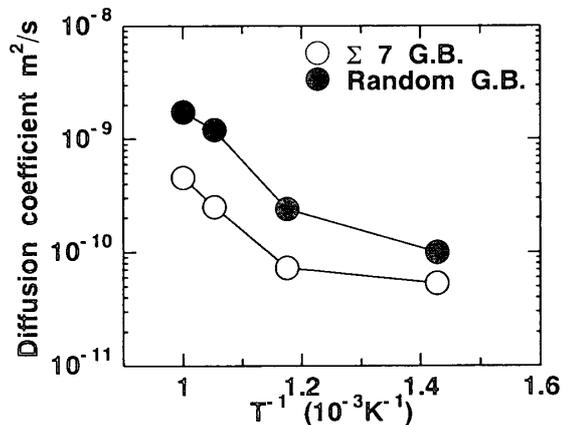


Fig. 1 Relationship between diffusion coefficient and temperature.

3.2 結晶方位関係と表面傾斜粒界の移動

図3(a)と(c)はステップ0における $\Sigma 7$ 粒界とランダム粒界の位置であり、(b)と(d)は50000から75000ステップまでの、それらのトラジェクトリーである。温度は950Kであり、各矢印は粒界を示している。ランダム粒界は $\Sigma 7$ 粒界と比較して粒界移動量が大きいことがわかる。図4は

粒界移動量(表面における初期位置からの移動量)と解析時間との関係である。ランダム粒界は $\Sigma 7$ 粒界よりも速く移動することがわかる。図5は系全体の内部エネルギーと解析時間の関係である。計算中に $\Sigma 7$ 粒界はランダム粒界に較べ内部エネルギーが低くなる。図6は $\Sigma 7$ 粒界とランダム粒界の粒界移動中の粒界近傍のトラジェクトリーである。粒界近傍では原子が環状および連鎖的に移動している。また、ランダム粒界の場合は $\Sigma 7$ 粒界に較べて原子の移動経路の範囲が小さい傾向にある。

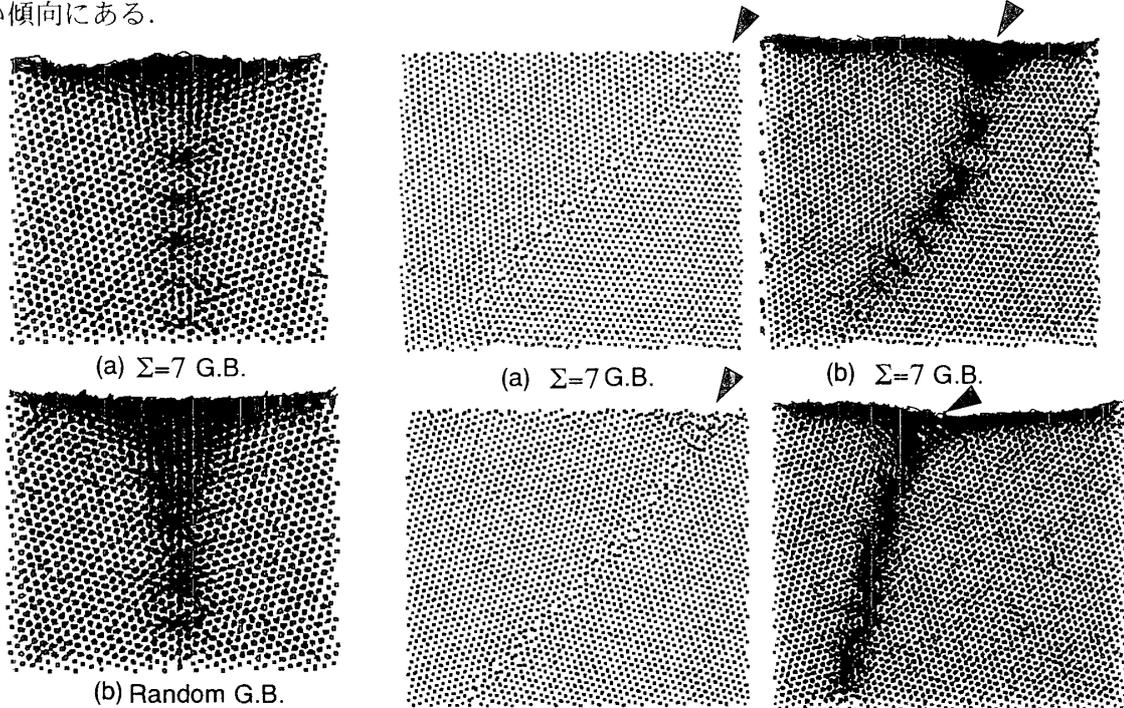


Fig.2 Trajectories of atoms at 850K.

Fig. 3 (a) and (c) for the initial cells of M.D. calculation and (c) and (d) trajectories of atoms after the calculation.

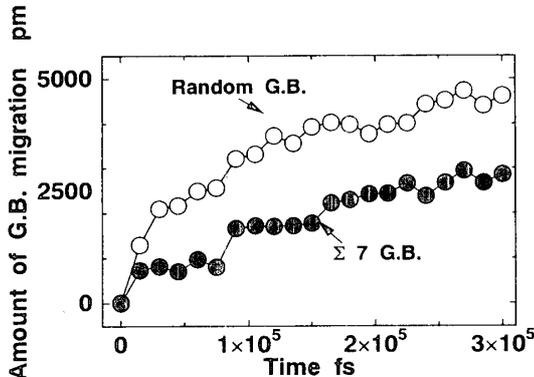


Fig.4 Relationship between the amount of grain boundary migration and time.

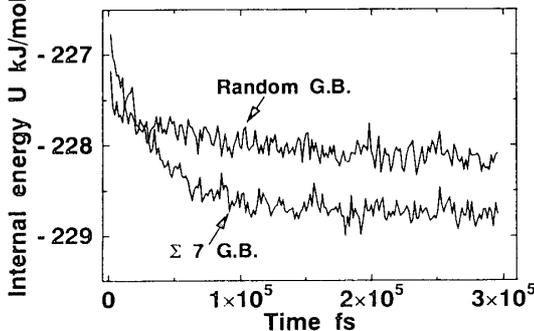


Fig.5 Relationship between internal energy and time.

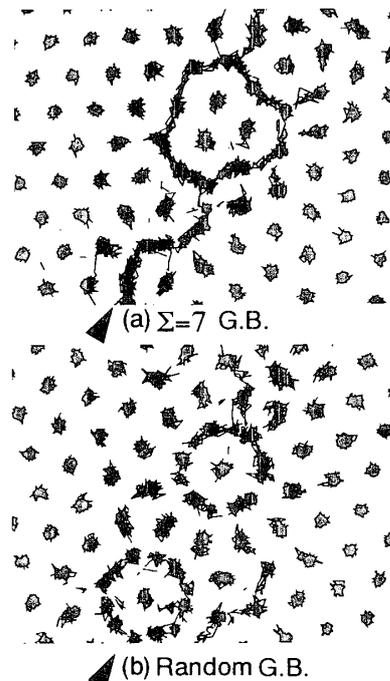


Fig.6 Trajectories in the vicinity of grain boundaries.