

歪み誘起構造変態と双晶形成に関する第一原理フォノン計算

First principles phonon calculation of strain induced structural transition for understanding deformation twinning

京大 ESISM¹, 京大工² ○東後 篤史¹, 田中 功^{1,2}

Kyoto Univ.^{1,2}, °Atsushi Togo¹, Isao Tanaka^{1,2}

E-mail: togo.atsushi@gmail.com

HCP 金属はすべり面が少ないため FCC 金属や BCC 金属に比べ双晶変形を起こしやすいことが知られている。本研究のねらいは、HCP 金属の変形双晶の動的変形機構を理解することである。

結晶内の原子は協調的に運動しており、その固有状態はフォノンとして理解できる。圧力誘起の二次的構造相変態は、圧力変化に対してフォノンがソフト化することで引き起こされると考えられている。これと同様の議論を、圧力ではなく歪みに対して適用し、原子変位分布の対応から歪み誘起構造相変態と変形双晶の形成を関連づけることを試みた。

剪断格子変形とともに引き起こされる原子の集団的変位が変形双晶における塑性変形の要因であると考えられており、この集団的原子変位はシャッフリングと呼ばれている。結晶全体で原子変位がフラストレーションなしに均一かつ同時に起こるならば、シャッフリングによる原子変位は拡張したユニットセルを単位とする周期境界条件を満たし、フォノンの凍結により駆動される現象として近似的に扱える。本研究では、変形双晶モードに対応する剪断歪みを HCP 金属に加えたときに現れる特徴的なフォノンモードを第一原理フォノン計算から系統的に探索し、変形双晶におけるシャッフリングとフォノンとの間に関連付けを行った。

第一原理計算には平面波基底 PAW 法 (VASP コード)、フォノン計算には phonopy コードを用いた。変形双晶モードに対応する剪断歪みを HCP 金属に加えた結晶モデルを作り、剪断歪み量を変えていながら、結晶のエネルギー変化とフォノン状態変化を計算した。図に示すように Ti の {10 $\bar{1}2$ } 変形双晶モードでは、歪み量を大きくするとエネルギーが増加する。一定の歪み量に到達するとフォノン振動が凍結し自発的な構造相変態が起こることがわかった。このときソフト化するフォノンモードの最小原子周期単位が 4 原子であることなどから、変形双晶のシャッフリングが特定のフォノンモードと強く関連していることが示された。また、塑性変形の前駆現象がフォノン振動数変化の形で観察可能であることが示唆された。発表では他の変形双晶モードに関する計算結果も紹介する。

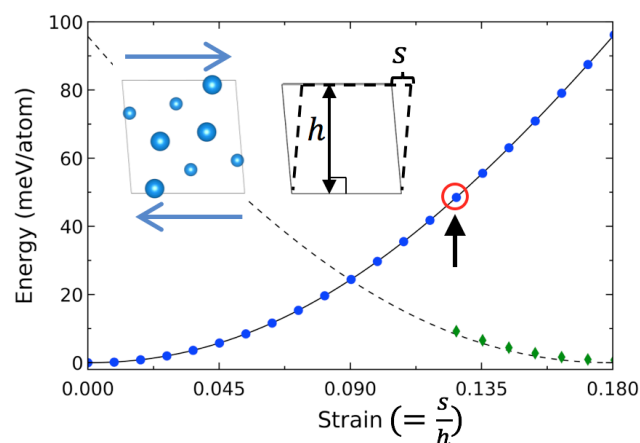


図 Ti{10 $\bar{1}2$ }双晶モードに対応する剪断歪みに対する内部エネルギー変化。歪み量がおおよそ 0.13 となると、結晶が動的的不安定性となり自発的な対称性の破れとともに構造変態が起こる。