

演 題	VRML を用いた双晶形態の可視化 その2	
発 表 者 ( 所 属 )	奥 清高, 藤井 秀彦, 内堀 可奈子, 野口 文雄, 小林 秀彦 ( 埼玉大学工学部 )	
連 絡 先	〒338-8570 埼玉県さいたま市下大久保 255 埼玉大学工学部応用化学科 TEL/FAX 048-858-3536 e-mail : <a href="mailto:noguchi@apc.saitama-u.ac.jp">noguchi@apc.saitama-u.ac.jp</a>	
キ ー ワ ー ド	Twin, Twin band , Twinning deformation	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど	FCC 金属結晶における双晶変形を VRML のアニメーションを利用して表示するソフトウェアの開発	
環 境	適 応 機 種 名	DOS/V
	O S 名	Windows2000/XP/NT
	ソ ー ス 言 語	C/C++(コンパイラ: Borland 社 Borland C++ Builder6)
	周 辺 機 器	特になし
流 通 形 態 ( 右 の い ず れ か に を つ け て く だ さ い )	<ul style="list-style-type: none"> <li>・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする</li> <li>・独自に頒布する</li> <li>・ソフトハウス、出版社等から市販</li> <li>・ソフトの頒布は行なわない</li> <li>・その他 未定</li> </ul>	具 体 的 方 法

## 1 はじめに

双晶とは単結晶が2つ以上互いに特定の対称関係に従って結合した1個体である。前回<sup>1)</sup>, 一般的な双晶形態を可視化するソフトウェアの開発を行った。しかし, 原子球のパッキング描画時に双晶界面で原子球が重なる現象が多いという問題があった。今回これを解決し, FCC 金属結晶における双晶変形を VRML のアニメーションを利用して表示するソフトウェアの開発を行った。

## 2 FCC の焼鈍双晶

FCC 金属およびその合金は, 冷間加工され, その後再結晶を起こす温度に焼きなましされた場合, 焼鈍双晶が見られる。FCC 金属の焼鈍双晶は, 双晶軸に垂直である(111)面(双晶面)に対して鏡映の関係にある。再結晶後の粒成長により, 粒境界が双晶面(111)に平行であり, (111)面の層が<112>方向(双晶方向)へ均一なずり動きをすることにより双晶が生成すると考えることができる<sup>2)</sup>。

FCC 金属結晶の最密充填面である(111)面は3層(以下ABCとする)を1つの単位とする周期構造を持つ。よってFCC 金属結晶はABCABCABC...のようにして最密充填面の積層を表現でき

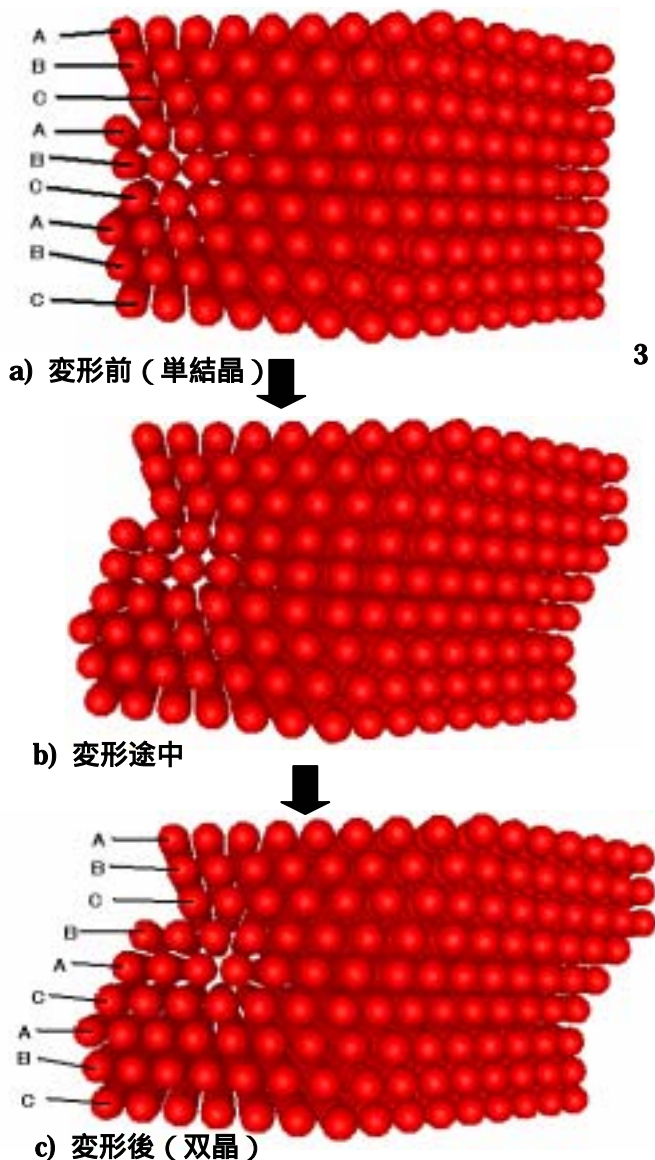


Fig.1 Mnの変形双晶生成過程

#### 4 出力例

FCC 金属である Mn がずり動きによって双晶へと変形していく様子を Fig. 1 に示した。双晶面 (111), 双晶方向  $\langle 112 \rangle$ , 透視面 (110) とした。Fig. 1 a) c) にいくに従い, 単結晶が双晶へと変化していることがわかる。

#### 5 問題点と今後の展望

今回作成したアニメーションは完全結晶のまま動いて双晶が生成したという仮定のもと, 作成したものである為<sup>3)</sup>, 実際の変形過程とは異なるという問題点がある。双晶が生成する直感的理解には有用であるが, 実際の動きは分子動力学などで解決していきたい。

#### [参考文献]

- 1) 奥 清高, 伊藤 正文, 野口 文雄, 小林 秀彦, 化学ソフトウェア学会 2001 研究討論会講演要旨集, 314, p108
- 2) 松村 源太郎, 「カリティ X 線回折要論」, アグネ (1993)
- 3) 木村 宏, 「改訂 材料強度の考え方」, アグネ技術センター (1998)

る。ここで C 層を双晶面と考えた場合, C 層 - C 層間の双晶帯境界で起こる積み重なりの変化として A 層が B 層の位置, B 層が A 層の位置へとずり動き, その結果 ABCABCABC... は ABCBACABC... のように C 層を双晶面とする双晶が生成すると考えられる。

#### 3 ソフトウェアの作成

ずり動きによって結晶面の配列を崩さず, A 層が B 層へとずり動くベクトルの大きさを算出した。双晶変形では原子面のずれの大きさはその面と双晶面からの距離に比例することから<sup>2)</sup>, 残りの層のずり動きの大きさも合わせて算出した。

前回<sup>1)</sup>のソフトウェアの原子球のパッキング表示を繰り返し描き, ずり動き方向 (双晶方向) とその大きさから双晶を描画した。変形前後の座標データから個々の層のずり動きのベクトルと大きさを VRML の PositionInterpolator ノードに送り込み, TimeSensor ノードを用いてアニメーションを作成した。また, この機能を用いて結晶多面体から貫入双晶・平行連晶が成長しながら生成するアニメーションも合わせて作成した。